

## آشنایی با مرکز پردازش سریع پژوهشگاه

### ۱.۱. برگزاری کارگاه‌های تخصصی آموزشی

مرکز پردازش سریع، برگزاری دوره‌های تخصصی و کارگاه‌های علمی-آموزشی در زمینه محاسبات با کارایی زیاد را جزئی از وظایف ویژه خود می‌داند و در جهت اجرای این وظیفه، تاکنون چندین کارگاه آموزشی برگزار کرده است.

الف) اولین کارگاه آموزشی پردازنده سل: در روز دوم اردیبهشت ماه ۱۳۸۹، کارگاه آموزشی آشنایی با معماری و برنامه‌نویسی پردازنده Cell/BE توسط این مرکز برگزار شد. این کارگاه آموزشی یک روزه در پنج جلسه و با هدف آشنا کردن محققان پژوهشگاه‌های مختلف پژوهشگاه دانش‌های بنیادی با امکانات و فواید استفاده از پردازنده Cell/BE و نحوه برنامه‌نویسی موازی روی آن برگزار شد. این پردازنده، که یکی از موفق‌ترین و مشهورترین نمونه‌های پردازنده‌های چند هسته‌ای کنونی است، با همکاری شرکت‌های آی‌بی‌ام، سونی، و توشیبا با هدف خاص پردازش سریع تولید شده است. در سال‌های ۲۰۰۶ تا ۲۰۰۹، این پردازنده نقش بسزایی در حرکت جامعه علمی و دانشگاهی به سوی استفاده از بسترهای چند هسته‌ای داشته است. خصوصاً در شاخه‌هایی از علوم مکانیک، دینامیک مولکولی، مهندسی شیمی، فیزیک هسته‌ای و ... که محاسبات سریع در آنها کاربرد فراوان دارد استفاده زیادی از این پردازنده می‌شود.

جلسات مختلف این کارگاه به نحوی برنامه‌ریزی شده بود که امکان استفاده از پردازنده Cell/BE برای محققانی که دانش مقدماتی در زمینه مفاهیمی چون پردازش موازی، برنامه‌نویسی، و استفاده از کامپیوتر در محاسبات علمی دارند، فراهم شود. بر این اساس، کارگاه شامل دو بخش کلی بود. در بخش اول که دو جلسه صبح کارگاه به آن اختصاص داشت، مفاهیم اولیه برای آشنایی با پردازنده Cell/BE مطرح شد. همچنین نحوه راه‌اندازی سیستم دارای پردازنده Cell/BE و نصب نرم‌افزارها و ابزارهای مناسب برنامه‌نویسی شرح داده شد. موضوع جلسات عصر هم برنامه‌نویسی موازی روی این پردازنده بود. سعی مدرسان بر این بود که شرکت‌کنندگان کارگاه طی این سه جلسه دیدگاهی جامع، هرچند اجمالی، از موضوع به دست آورند و با مفاهیم اصلی و مهم در برنامه‌نویسی موازی در این

مرکز پردازش سریع پژوهشگاه دانش‌های بنیادی در سال ۱۳۸۷ با هدف ارتقا و ترویج دانش پردازش موازی و محاسبات سریع در پژوهشگاه علوم کامپیوتر تأسیس شد. این مرکز با به‌کارگیری نیروهای مجرب و مستعد از دانشگاه‌های اصلی مستقر در تهران و برخی مراکز پژوهشی توانسته است مجموعه‌ای منسجم و فعال از متخصصان حوزه‌های پردازش موازی و سیستم‌های پردازش سریع را گرد آورد، و می‌کوشد با بهره‌گیری از نیروی انسانی نخبه و با انگیزه، برخورداری از ساختار انعطاف‌پذیر، و ارتباط با مراکز علمی و تحقیقاتی، یکی از پیش‌تازان عرصه پردازش سریع چه در زمینه تحقیقات علمی و چه در زمینه ارائه خدمات در کشور باشد. محورهای اصلی فعالیت این مرکز عبارت‌اند از:

۱. کسب و اشاعه دانش پردازش سریع،

۲. تولید و خدمات،

۳. تحقیق.

در ادامه شرح مختصری در مورد هر یک می‌آید.

### ۱. کسب و اشاعه دانش پردازش سریع

مرکز پردازش سریع همواره سعی کرده است جدیدترین دانسته‌ها و تجربیات علمی در حوزه پردازش موازی و سریع را کسب کرده و همگام با پیشرفت‌های این حوزه، آنها را در اختیار پژوهشگران داخل کشور قرار دهد. در اینجا به برخی از اقدامات مرکز در این زمینه اشاره می‌کنیم.

روی جلد: نقاشی دیواری برگرفته از ارتباطات داخلی شبکه ایرانت و همسایگی‌های خارجی در پاییز ۱۳۸۹، در راهرو طبقه اول ساختمان اختیاریه.

طرح فوق بر اساس شماره‌های (Autonomous System Numbers) AS همجوار وقت توسط سمیرا شاکری اجرا شده است.

به محدودیت امکانات و برای بهتر برگزار شدن کارگاه، ۶۰ نفر از بین آنها انتخاب شدند.

**ج) دومین کارگاه آموزشی GPU:** این کارگاه در روزهای ۲۰ و ۲۱ تیرماه ۹۰ با عنوان «کارگاه دو روزه تفکر برنامه‌نویسی در قالب کارت‌های گرافیکی» با هدف آشنایی دانشجویان مقطع کارشناسی ارشد و دکتری با برنامه‌نویسی و کاربرد کارت‌های گرافیکی در محاسبات علمی برگزار می‌شود. در این کارگاه سعی خواهد شد علاوه بر مطالب پایه‌ای، مفاهیم پیچیده‌تر نیز برای شرکت‌کنندگان تشریح شود، و برنامه این کارگاه هم شامل دو بخش سخنرانی و برنامه‌نویسی عملی خواهد بود.

### ۲.۱. سخنرانی‌های علمی

به منظور گسترش دانش لازم و انتقال تجربیات علمی در بین اعضای مرکز، چند سخنرانی علمی برگزار شده است. با بررسی نیاز اعضای مجموعه به آشنایی با زمینه‌های جدید پردازش سریع، برخی از افراد مرکز مشغول مطالعه و تحقیق در این حوزه‌ها شده و سپس نتیجه مطالعات خود را به صورت سخنرانی‌های یک روزه داخلی در اختیار سایر افراد مرکز قرار داده‌اند که در اینجا به دو مورد از آنها اشاره می‌کنیم.

**الف) پیاده‌سازی سریع کد در CUDA:** در این سخنرانی مباحثی در زمینه راهکارهای پیاده‌سازی سریع برنامه به زبان CUDA مطرح شد. کتابخانه Thrust یکی از جدیدترین و معتبرترین کتابخانه‌های CUDA است که برای نوشتن الگوریتم‌های موازی به کار می‌رود و دارای واسطی شبیه به ++C است. به علت سطح تجرید بالای این کتابخانه، به کمک آن می‌توان به سادگی و به سرعت برنامه‌هایی برای اجرا بر روی GPU تولید کرد.

**ب) آشنایی با زبان اکتاو: Octave** یک زبان سطح بالاست که به طور خاص برای اجرای محاسبات عددی نوشته شده است. این زبان دارای توانمندی‌هایی در زمینه حل مسائل خطی و غیرخطی است. Octave بسیار شبیه به زبان MATLAB است و به همین دلیل کدهای آنها قابل استفاده در یکدیگر هستند. یکی از مزایای اصلی این زبان، کدباز بودن آن است.

### ۳.۱. اتصال به تورین پژوهشگاه (IPM Grid)

پروژه تورین مرکز پردازش سریع با هدف کلی اتصال به تورین پژوهشگاه تعریف شده است. در مرحله اول، اتصال به عنوان کاربر و ارسال درخواست محاسباتی بر روی تورین پژوهشگاه انجام شد. مرحله بعدی، سرویس‌دهی به تورین مرکز است. مراحل لازم برای سرویس‌دهی به تورین به طور خلاصه عبارت‌اند از: تعریف یک دامنه برای سایت، درخواست و تحویل گواهی از مرکز گواهی تورین پژوهشگاه، نصب خدمات جامع (universal services) بر روی تمام گره‌های سایت، نصب WN بر روی تمام گره‌های سرویس‌دهنده، نصب CE بر روی یک سیستم به عنوان مدیر WNها و رابط (بهتر است

پردازنده‌ها آشنا شوند. یک تیم فنی امکان برنامه‌نویسی را در طول جلسات برنامه‌نویسی برای شرکت‌کنندگان فراهم کرد. بدین ترتیب، شرکت‌کنندگان می‌توانستند طی این جلسات با اتصال به سیستم‌های تعیین‌شده، خود به تولید برنامه‌های جدید یا آزمون برنامه‌های آموزشی موجود بپردازند.

با توجه به محدودیت امکانات و برای بهتر برگزار شدن کارگاه، از میان بیش از ۸۰ نفر ثبت‌نام‌کننده، ۶۰ نفر بر اساس الویت برای شرکت در کارگاه انتخاب شده بودند.

**ب) اولین کارگاه آموزشی محاسبات علمی با پردازنده گرافیکی (GPU):** با معرفی معماری CUDA توسط شرکت NVIDIA به عنوان مدل یکپارچه برنامه‌نویسی کارت‌های گرافیکی، تحولی شگرف در فناوری و دانش پردازش سریع ایجاد شد. وجود تعداد زیادی پردازنده موازی با حجم مناسبی از حافظه مشترک، پردازنده‌های گرافیکی را به صورت بستری ایده‌آل برای موازی کردن و افزایش سرعت محاسبات علمی در آورده است. مرکز پردازش سریع از سال ۲۰۰۸ همگام با دیگر مراکز علمی و تحقیقاتی جهان فعالیت خود را در زمینه‌های مرتبط با پردازنده‌های گرافیکی گسترش داد. مرکز با همکاری نیروهای جوان و مستعد دانشگاه‌های خوب کشور و با به‌کارگیری آخرین فناوری‌های موجود، یکی از مجرب‌ترین تیم‌های تحقیقاتی کشور را در زمینه پردازنده‌های گرافیکی ایجاد کرده است.

به دلیل نیاز فراوان شاخه‌های مختلف علوم پایه، مهندسی و بخش صنعت به امکانات پردازش سریع، محققان مرکز بر آن شدند تا دانش و تجربه کسب‌شده در زمینه پردازنده‌های گرافیکی را در اختیار محققان و مهندسان کشور بگذارند. بدین منظور، به عنوان اولین گام در ترویج مفاهیم مربوط به پردازنده‌های گرافیکی، کارگاه یک‌روزه برنامه‌نویسی پردازنده‌های گرافیکی در روز ششم خرداد ماه ۱۳۸۹ برگزار شد. بخش‌های مختلف این کارگاه متناسب با سطح عمومی دانش پردازش موازی و تکنیک‌های برنامه‌نویسی تدوین شدند. همچنین، سعی مدرسان کارگاه بر این بود که محتوای جلسات به گونه‌ای تنظیم شوند که شامل بخش اعظمی از موضوعات مطرح در به‌کارگیری پردازنده‌های گرافیکی و تولید برنامه برای آنها باشد.

کارگاه شامل چهار جلسه در دو نوبت صبح و عصر بود. دو جلسه صبح به نصب و راه‌اندازی یک بستر نرم‌افزاری برای تولید کد و همچنین گام‌های اولیه برنامه‌نویسی پردازنده‌های گرافیکی اختصاص داشت. موضوع جلسات عصر هم توصیف ساختار سخت‌افزاری و مفاهیم پیچیده‌تر برنامه‌نویسی بود. همچنین در این جلسات در مورد نحوه استفاده از ابزار MATLAB که یکی از پرکاربردترین نرم‌افزارهای مهندسی است، روی پردازنده‌های گرافیکی توضیح داده شد.

در طول کارگاه، تیم فنی مرکز امکان اتصال به سیستم‌های دارای پردازنده گرافیکی قوی را فراهم کرد تا شرکت‌کنندگان بتوانند از نزدیک آموزه‌های خود را به‌کار ببرند و عملاً فرایند تولید کد و استفاده از پردازنده‌های گرافیکی آشنا شوند. بیش از ۱۰۰ نفر برای شرکت در کارگاه ثبت‌نام کرده بودند که با توجه

الف) حل مسئله: تخصص و تسلط اعضای مرکز پردازش سریع بر زبان‌های برنامه‌نویسی، چارچوب‌های برنامه‌نویسی موازی و معماری‌های جدید موازی، و همچنین برخورداری آنها از خلاقیت و قدرت در حل مسئله، به این مرکز امکان می‌دهد مسائل علمی را به طور کامل و یا به طور نسبی مطابق درخواست محققان متقاضی حل کند. از جمله توانایی‌های منحصر به فرد این مرکز می‌توان به موارد زیر اشاره کرد:

- برنامه‌نویسی MPI: این یکی از مهم‌ترین و رایج‌ترین ابزارهای موازی‌سازی برنامه‌هاست که کاربرد گسترده‌ای در نرم‌افزارهای موازی دارد. در حقیقت MPI یک کتابخانه برای تبادل پیام بین بخش‌های مختلف یک کد موازی است. این کتابخانه قابل استفاده در زبان‌های برنامه‌نویسی C و Fortran است. در مرکز پردازش سریع، توانایی و دانش استفاده از این ابزار در تولید برنامه‌های مختلف وجود دارد.
- برنامه‌نویسی GPU: از زبان CUDA برای نوشتن برنامه روی کارت‌های گرافیکی استفاده می‌شود. آشنایی با معماری GPU و ساختار حافظه آن برای تولید برنامه‌های صحیح به زبان CUDA ضروری است. اعضای مرکز پردازش سریع در طول مدت فعالیت خود چندین هزار خط برنامه به زبان CUDA بر روی پردازنده‌های گرافیکی نوشته‌اند. بسیاری از این برنامه‌ها مربوط به حل مسائل جدید علمی و یا در جهت سرعت بخشیدن به اجرای برنامه‌های موجود بوده‌اند.
- برنامه‌نویسی سل: مرکز پردازش سریع اولین مرکزی در ایران است که در زمینه Cell آغاز به فعالیت کرده است. با توجه به معماری سخت‌افزاری متفاوت Cell نسبت به بقیه پردازشگرهای چند هسته‌ای، برنامه‌نویسی برای این سیستم‌ها نیاز به دانش عمیق در مورد این معماری دارد.
- برنامه‌نویسی FPGA: این یکی از گزینه‌های سخت‌افزاری مطرح در زمینه پردازش موازی سریع است. این گزینه می‌تواند امکان استفاده از موازی‌سازی سخت‌افزاری را در مقیاس بالایی فراهم کند. مرکز پردازش سریع دارای تیمی از متخصصان مسلط به اغلب محصولات سازندگان مشهور مانند Xilinx و Altera است که توانایی پیاده‌سازی الگوریتم‌های پیچیده محاسباتی بر روی سخت‌افزار را دارند.
- زبان کامپیوتری باز (OpenCL): زبان کامپیوتری باز جدیدترین چارچوب برنامه‌نویسی موجود برای الگوریتم‌های محاسباتی موازی است که قادر است مستقل از بستر هدف، الگوریتم‌های محاسبات موازی را پیاده‌سازی کند. از ویژگی‌های منحصر به فرد OpenCL توانایی اجرای یک برنامه واحد روی CPU، GPU، و FPGA است. این برنامه واحد در OpenCL توسط یک زبان برنامه‌نویسی مجرد سطح بالا نوشته می‌شود.

CE خود WN نباشد). ویژگی متمایز سایت مرکز پردازش سریع، ارائه خدمات پردازش بر روی GPU به تورین پژوهشگاه است.

#### ۴.۱. شرکت در مسابقه بین‌المللی Memocode سال ۲۰۱۰

کنفرانس بین‌المللی Memocode

(Formal Methods and Models for Codesign)

که با همکاری انجمن IEEE و ACM (به ترتیب، از معتبرترین انجمن‌های برق و کامپیوتر) پشتیبانی می‌شود، از سال ۲۰۰۷ میلادی اقدام به برگزاری یک مسابقه «طراحی سخت‌افزار/نرم‌افزار هم‌زمان» کرده است. شرکت‌کنندگان در این مسابقه حدود یک ماه فرصت دارند تا مسئله اعلام شده را حل کرده و کدهای نرم‌افزاری یا سخت‌افزاری مورد نیاز آن را آماده کنند. تیمی برنده مسابقه می‌شود که بتواند جواب درست را در مدت زمان کوتاه‌تری به دست آورد. به عبارت دیگر، هدف مهم در این مسابقه، سرعت در یافتن پاسخ صحیح است. شرکت‌کنندگان این مسابقه می‌توانند کدهای خود را بر روی ادوات دلخواه (CPU، GPU، FPGA و ...) اجرا کنند. در سال ۲۰۱۰ مرکز پردازش سریع پژوهشگاه برای اولین بار در این مسابقه شرکت کرد و بستر کارت گرافیکی GPU را برای خود برگزید. این تیم موفق شد رتبه ششم را در بین مؤسسات شرکت‌کننده، که مراکز و دانشگاه‌های معتبری مانند کارنگی ملون و پنسیلوانیا در میان آنها بودند، کسب کند.

#### ۵.۱. شرکت در مسابقه بین‌المللی Memocode سال ۲۰۱۱

پنجمین دوره مسابقه «طراحی سخت‌افزار و نرم‌افزار هم‌زمان» در اول ماه مارس سال ۲۰۱۱ آغاز شد. تیم GPU مرکز پردازش سریع پژوهشگاه توانست با حل مسئله، مقام اول مسابقه را در قسمت کارایی بر هزینه و مقام دوم مسابقه را در قسمت کارایی به دست بیاورد. مقام اول قسمت کارایی را دانشگاه کارنگی ملون به خود اختصاص داد.

## ۲. تولید و خدمات

مرکز پردازش سریع یکی از مراکز پیش‌تاز کشور در زمینه ارائه محصولات و خدمات مرتبط با محاسبات سریع و پردازش موازی به متقاضیان است. طی مدت کوتاهی که از شروع فعالیت این مرکز می‌گذرد، افراد و مؤسسات زیادی از خدمات پردازشی آن استفاده کرده‌اند که از میان آنها می‌توان به برخی اعضای انستیتو پاستور ایران، پژوهشگاه نفت، و دانشکده شیمی دانشگاه امیرکبیر اشاره کرد.

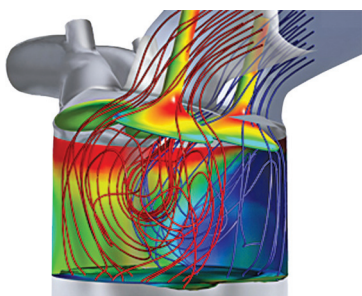
#### ۱.۲. ارائه خدمات مشاوره‌ای

با توجه به تجربیات مرکز پردازش سریع در زمینه ساخت و نصب سیستم‌های پردازش موازی و همچنین برنامه‌نویسی موازی و حل مسائل پیچیده علمی، این مرکز توانایی ارائه خدمات مشاوره‌ای علمی را در دو حوزه اصلی حل مسئله و ساخت سیستم داراست.

شده است. قابلیت پیکربندی و نصب بر روی یک سیستم توزیع شده را دارد و به کمک کتابخانه MPI قابلیت اجرای موازی پیدا می‌کند.

- **NAMD**: این ابزار یکی دیگر از بسته‌های نرم‌افزاری در مبحث دینامیک مولکولی است که با همکاری آزمایشگاه برنامه‌نویسی موازی دانشگاه (UIUC) نوشته شده است. این ابزار با استفاده از مدل‌های برنامه‌نویسی موازی تولید شده است و برای شبیه‌سازی سیستم‌های بسیار بزرگ (چند میلیون اتم) با کارایی زیاد از آن استفاده می‌شود. این نرم‌افزار از قابلیت اجرای موازی به کمک Charm و MPI برخوردار است [۱].

- **LAmmps**: این نرم‌افزار یک شبیه‌ساز پردازش موازی برای اتم‌ها و مولکول‌های بزرگ در حوزه دینامیک مولکولی است. این نرم‌افزار توانایی شبیه‌سازی بیومولکول‌ها، پلیمرها، فلزات، نیمه‌هادی‌ها و سیستم‌های درشت‌دانه، و مدل‌سازی اتم‌ها و مولکول‌ها به صورت موازی با استفاده از تکنیک MPI را دارد. کد آن در دسترس است و به راحتی می‌توان ویژگی‌های موردنظر را به آن افزود. این نرم‌افزار در آزمایشگاه ملی سنندیا (مؤسسه آمریکایی وابسته به آزمایشگاه انرژی) عرضه شده است [۲].



- **Fluent**: این نرم‌افزار توانایی مدل‌سازی گسترده سیستم‌های فیزیکی، مانند مدل‌سازی جریان، سیستم‌های آشوب، انتقال گرما، واکنش‌های انجام‌شده در کاربردهای صنعتی مانند جریان هوا در بال هواپیما و گیاهان برطرف‌کننده فاضلاب، را داراست. همچنین در فاز طراحی و بهینه‌سازی و توسعه سیستم‌ها کاربرد دارد و به راحتی امکان تعریف توابع و مدل براساس ساختار سیستم موردنظر را فراهم می‌کند [۳].

- **Gromacs**: این بسته نرم‌افزاری توانایی مدل‌سازی دینامیک مولکولی، مانند معادلات حرکت نیوتن، را برای سیستم‌های با میلیون‌ها عنصر داراست. این نرم‌افزار ابتدا برای مولکول‌های بیوشیمی مانند پروتئین، لیپید و اسید نوکلئوتید با تعداد قابل توجهی اتصالات ارائه شد ولی به دلیل توانایی سریع محاسباتی برای سیستم‌های غیربیولوژیک هم مورد استفاده قرار گرفت. کارایی محاسباتی زیاد، امکان استفاده راحت برای کاربران، قابلیت پردازش موازی با MPI و توانایی پیاده‌سازی الگوریتم‌های بسیاری با کارایی محاسباتی بیشتر را می‌توان از جمله ویژگی‌های این نرم‌افزار دانست [۴].

ب) **ساخت سیستم**: مراکز تحقیقاتی و دانشگاه‌ها از مهم‌ترین مراکز هستند که در حل مسائل علمی خود نیاز به پردازش سریع دارند. در صورتی که این مراکز قصد راه‌اندازی و ساخت سیستم‌های پردازش سریع و موازی را به صورت خوشه CPU و GPU داشته باشند، مرکز پردازش سریع آماده ارائه خدمات مشاوره‌ای در زمینه انتخاب سخت‌افزار، سیستم عامل، ابزارهای مدیریت خوشه، و نرم‌افزارهای علمی و همچنین نحوه نصب و راه‌اندازی آنهاست.

## ۲.۲. عرضه خدمات پردازش سریع

امروزه مسائل علمی نیاز روزافزونی به قدرت پردازش زیاد دارند تا بتوان آنها را در مدت زمان مناسب حل کرد. بسیاری از این مسائل قابل حل هستند ولی با امکانات پردازشی عادی ممکن است حل آنها طی سال‌ها و حتی قرن‌ها به نتیجه نرسد. محققان معماری کامپیوتر توانسته‌اند با ارائه بسترها و چارچوب‌های موازی‌سازی، زمان حل این مسائل را فوق‌العاده کاهش دهند. از جمله راه‌حل‌های مطرح، موازی‌سازی برنامه روی کارت‌های گرافیکی و یا روی شبکه‌ای از کامپیوترها (خوشه) است. مرکز پردازش سریع مجموعه متنوعی از این راه‌حل‌ها را در اختیار دارد.

پژوهشگرانی که برای انجام پروژه‌های علمی خود نیاز به بستر پردازش سریع و سیستم‌های موازی دارند می‌توانند از خدمات پردازش سریع این مرکز بهره ببرند. هم‌اکنون تعدادی از محققان مؤسسه‌های علمی معتبر در حال اجرای برنامه‌های خود روی سیستم‌های پردازشی مرکز هستند. خدمات پردازشی این مرکز بر روی یک خوشه CPU و GPU ارائه می‌شود که شرح آن در ادامه می‌آید.

**خوشه محاسباتی (Cluster)**: خوشه محاسباتی نوع متداولی از ابررایانه است که از اتصال تعداد زیادی کامپیوتر به یکدیگر ساخته می‌شود که در نهایت به صورت یک سیستم واحد عمل می‌کنند. مدیریت خوشه نیاز به برخی برنامه‌ها و نرم‌افزارها دارد. ابزارها و نرم‌افزارهای علمی موجود روی خوشه در زیر فهرست شده‌اند.

- **Matlab**: این ابزار در اصل نرم‌افزاری برای محاسبات ریاضی است که می‌تواند به صورت توزیع‌شده روی چندین سیستم پردازشی اجرا شود و دارای جعبه‌ابزارهای مخصوص برای محاسبات موازی است. علاوه بر این، Matlab قابلیت پشتیبانی و به‌کارگیری امکانات پردازشی کارت گرافیکی را نیز دارد. کتابخانه CUDA که مخصوص انجام محاسبات حجیم موازی بر روی کارت‌های گرافیکی است، در این نرم‌افزار قابل استفاده است. برای مثال، Jacket، یکی از بسترهای محاسبات عددی است که از CUDA برای اجرای کد Matlab استفاده می‌کند و شامل ضرب ماتریس، رسم داده و تابع، پیاده‌سازی الگوریتم و ... است.

- **Charmm**: این ابزار یکی از ابزارهای رایج در مبحث دینامیک مولکولی است که توسط تیمی از متخصصان دانشگاه هاروارد تولید



#### ۴.۳. شبیه‌سازی رفتار کهکشان‌ها روی خوشه‌ی پردازنده‌های گرافیکی

یکی از مسائل علمی که مستلزم حجم عظیمی از محاسبات و موازی‌سازی با پردازنده‌های بسیار است، شبیه‌سازی رفتار اجرام آسمانی در حضور نیروی جاذبه می‌باشد. هدف از انجام این پروژه، پیاده‌سازی این شبیه‌سازی بر روی خوشه‌ی پردازنده‌های گرافیکی است.

#### ۵.۳. پیاده‌سازی سریع کد CUDA

هدف از این پروژه مطالعه‌ی ابزارها و کتابخانه‌های موجود برای پیاده‌سازی کد CUDA است. این ابزارها و کتابخانه‌ها توابع مفیدی برای پیاده‌سازی فراهم می‌کنند. استفاده از این توابع سرعت پیاده‌سازی و عیب‌یابی کد را افزایش می‌دهد.

#### ۶.۳. محاسبه‌ی مقدار ویژه و بردار ویژه ماتریس کوواریانس

مقدار ویژه و بردار ویژه یک ماتریس کوواریانس اطلاعات مفیدی در مورد خواص آن ماتریس می‌دهد. این خواص برای پیاده‌سازی روش‌هایی نظیر تحلیل مؤلفه‌ی اصلی (P.C.A.) برای کاهش ابعاد مفید است. هدف از انجام این پروژه پیاده‌سازی روش توانی بر روی خوشه پردازنده‌های گرافیکی می‌باشد.

#### ۴. آمادگی برای همکاری

مرکز پردازش سریع پژوهشگاه دانش‌های بنیادی قصد دارد با به روز نگه داشتن توان سخت‌افزاری و نرم‌افزاری خود و تکیه بر نیروی انسانی نخبه و سرمایه‌گذاری در این زمینه، به عنوان مرکز پردازش موازی پیشرو و در کشور ایفای نقش کند و به ارائه‌ی خدمات در جهت رفع نیازهای داخلی کشور در زمینه‌ی پردازش سریع بپردازد. لذا محققان و مهندسان این مرکز آماده‌اند برای ارائه‌ی هرگونه خدمات پردازش سریع با مراکز دیگر همکاری کرده و تجربیات خود را در اسرع وقت در اختیار ایشان قرار دهند.

#### مراجع

1. <http://www.ks.uiuc.edu/Research/namd/>
2. <http://lammps.sandia.gov/>
3. <http://www.ansys.com/Products/Simulation+Technology/Fluid+Dynamics/ANSYS+FLUENT>
4. [http://www.gromacs.org/About\\_Gromacs](http://www.gromacs.org/About_Gromacs)
5. <http://www.cse.scitech.ac.uk/ccg/software/DL-POLY/>

• DIPoly: یک نرم‌افزار شبیه‌ساز دینامیک مولکولی است که در آزمایشگاه Daresbury در انگلستان ارائه شد و کاربرد گسترده‌ای دارد. طراحی این نرم‌افزار به گونه‌ای است که هم امکان اجرا بر روی یک سیستم تک‌پردازنده با کارایی مقیاس‌پذیر را دارد و هم امکان اجرای موازی با کارایی بالا. در نسخه‌های جدیدتر آن، ارتباطات I/O به صورت موازی پیاده‌سازی شده و توانایی اجرا بر روی پردازنده‌های گرافیکی هم به آنها افزوده شده است [۵].

شایان ذکر است که نرم‌افزارهای مذکور مطابق نیاز مشتریان و همکاران علمی این مرکز تهیه و نصب شده است و در صورتی که همکاران جدید نیاز به ابزار و یا نرم‌افزار خاصی داشته باشند، امکان نصب و راه‌اندازی آن وجود دارد.

#### ۳. تحقیق

در این مرکز، پروژه‌های تحقیقاتی در زمینه‌های مختلف مانند اطلاعات زیستی (بیوانفورماتیک)، محاسبات زیستی، شیمی، ریاضیات، علوم کامپیوتر، پردازش سیگنال و ... اجرا شده و یا در حال اجراست. در زیر، فهرست برخی از آنها همراه با شرحی مختصر آمده است.

#### ۱.۳. محاسبه‌ی پیش‌روی پردازنده‌ی گرافیکی

عمل پیش‌روی (convolution) یک عمل پایه‌ای در پردازش سیگنال است. این عمل معادل محاسبه‌ی ضرب دو چند جمله‌ای می‌باشد. هدف از انجام این پروژه، محاسبه‌ی بهینه‌ی پیش‌روی است. پیاده‌سازی سریع پیش‌روی برای دو سیگنال بزرگ، و برای تعداد زیادی سیگنال به طور موازی انجام شده است. بستر محاسباتی این پروژه، پردازنده‌های گرافیکی با معماری Fermi است.

#### ۲.۳. نظریه‌ی رمزی و حدس آیت

هدف از انجام این پروژه پیاده‌سازی و پیدا کردن یک بستر مناسب برای حل مسئله حدس آیت است. هدف این مسئله، یافتن یک گراف دوری  $n$  رأسی است که فاقد  $K_5$  و مجموعه‌ی مستقل  $t$  رأسی باشد. دکتر آیت از محققان مرکز بنا به مطالعات خود انتظار دارد که گرافی با درجه‌ی رأسی خاص با این خصوصیت یافت شود.

#### ۳.۳. محاسبات دقیق با اعداد بزرگ (دارای ارقام بسیار)

در پاره‌ای از مسائل محاسباتی لازم می‌آید که عملیات پایه بر روی اعدادی با دقت و مرتبه بالاتر از انواع داده‌ای قابل استفاده در زبان‌های برنامه‌نویسی انجام شود. هدف از انجام این پروژه پیاده‌سازی چهار عمل اصلی حساب برای اعداد بزرگ با دقت زیاد و به شکل بهینه است. بستر پیاده‌سازی برای این پروژه، پردازنده‌های گرافیکی با معماری Fermi است.