**КОМПЬЮТЕРНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ
И МОДЕЛИРОВАНИЕ 2015 Т. 7 № 3 С. 429−437**

Ки&М

**ПЛЕНАРНЫЕ ДОКЛАДЫ**

УДК: 004.023

# Высокопроизводительные вычисления на гибридных системах: будут ли решены «задачи большого вызова»?

**А. В. Богданов[а], А. Б. Дегтярев[б], В. Н. Храмушин[в]**

Санкт-Петербургский государственный университет (СПбГУ),
Россия, 198504, г. Санкт-Петербург, Петергоф, Университетский просп., 35

E-mail: [а]bogdanov@csa.ru, [б]deg@csa.ru, [в]v.khram@gmail.com

*Получено 2 февраля 2015 г.*

На примере расчета течений проводится анализ возможностей современных гибридных распределенных вычислительных систем для расчета «задач большого вызова». Приводятся соображения, что только многоуровневый комплексный подход к такой проблеме позволит эффективно масштабировать подобные задачи. Подход подразумевает использование новых математических моделей процессов переноса, разделение на динамическом уровне явлений переноса и внутренних процессов и использование новых парадигм программирования, учитывающих особенности современных гибридных систем.

Ключевые слова: гибридная система, «задачи большого вызова», тензорная математика, аэрогидродинамика, вычислительный эксперимент

# High performance computations on hybrid systems: will "grand challenges" be solved?

**A. V. Bogdanov, A. B. Degtyarev, V. N. Khramushin**

*St. Petersburg State University, 35 Universitetskii prospekt, Petergof, Saint-Petersburg, 198504, Russia*

Based on CFD computations we provide the analysis of the possibilities for using modern hybrid distributed computational environments for large complex system simulation. We argue that only multilevel approach supported by new mathematical models of transport properties, dynamical representation of the problem with transport and internal processes separated, and modern paradigm of programming, taking into account specific properties of heterogeneous system, will make it possible to scale the problem effectively.

Keywords: hybrid system, “grand challenges”, tensor mathematics, aerohydrodynamics, computational experiment

Исследования выполняются при поддержке грантов РФФИ (№ 13-07-00747), СПбГУ (№ 9.38.674.2013, № 0.37.155.2014) и Комплексной программы ДВО РАН «Дальний Восток» (№ 15.3312-III-CO-08-023), вычислительные эксперименты осуществлялись на базе оборудования Ресурсного центра «Вычислительный центр СПбГУ».

Citation: *Computer Research and Modeling*, 2015, vol. 7, no. 3, pp. 429−437 (Russian).

## Введение

Так называемые «задачи большого вызова» — «Grand challenges» — термин политики США, использованный в конце 1980-х годов в целях обозначения необходимости финансирования исследований в области высокопроизводительных вычислений и коммуникаций. Само понятие «Grand challenges» в научной литературе было введено нобелевским лауреатом Kenneth G. Wilson [Wilson, 1987; Wilson, 1989]. В это время был выделен круг фундаментальных и прикладных проблем, жизненно важных для развития человечества, эффективное решение которых возможно только с использованием сверхмощных вычислительных ресурсов.

С тех пор конкретный список задач много раз видоизменялся и конкретизировался, а сам термин «Grand challenges» стал нарицательным. В список входят комплексные задачи физики, нанотехнологий, аэронавтики, биологии, национальной безопасности, науки о Земле, энергетики, окружающей среды и т. д.

Если постараться понять, какие вычислительные средства необходимы для решения «задач большого вызова», то очень обобщенно можно заключить, что имеем дело с тремя принципиальными конфигурациями, которые направлены на решение:

1. задач обработки больших и сверхбольших объемов данных;
2. большого количества слабосвязных задач;
3. одной сильносвязной задачи, требующей большого объема памяти и производительности вычислительных мощностей.

Понимание того, что одним локальным аппаратным решением невозможно обеспечить решение большинства задач «Grand challenges», привело к разработке идей распределенных вычислений, появлению кластерных технологий и GRID. Появление многоядерных процессоров в какой-то мере также попытка эффективного объединения и создания локального высокопроизводительного вычислительного ресурса. Развитие сетевых технологий, улучшение канальной инфраструктуры, появление новых решений интеграции разнородных вычислительных ресурсов — все это сыграло положительную роль в решении задач «Grand challenges», однако не обеспечило желаемого уровня, особенно при решении задач третьего типа. Основная проблема в ресурсном обеспечении решения задач третьего типа заключается в неэффективности объединения большого количества вычислительных элементов при наличии временны́х затрат на подготовку данных (синхронизация, обмен данными и пр.). В то же время повышение сложности задачи ведет к вовлечению в расчетный процесс все большего количества вычислительных ядер, что становится с определенного момента фактором, снижающим ускорение. К настоящему моменту практически любые решения распределенных или кластерных вычислений для задач третьего типа оказываются неэффективными. Единственное возможное решение в сложившихся условиях компьютерного рынка, с нашей точки зрения, должно быть основано на гибридной архитектуре. Объединение традиционных многоядерных процессоров с GP GPU (General-Purpose Graphics Processing Units) дает возможность локального объединения на порядки большего количества вычислительных ядер, чем в кластерной и распределенной архитектуре. Однако в этом случае при отображении комплексной задачи на такую архитектуру возникает большое количество не решенных до сих пор задач (аппаратного, программного и даже математического плана). Так могут ли высокопроизводительные вычисления для решения задач «Grand challenges» быть решены на гибридной архитектуре? Рассмотрению этой проблемы посвящена данная статья.

## Методологические основы решения задачи

Решение любой комплексной проблемы с использованием вычислительной техники можно с философской точки зрения представить в трехмерном логическом пространстве (рис. 1), в котором координатные оси образуют главные направления исследований.

«Проект» — согласование исходной задачи и ожидаемых результатов в избранной языковой среде. «Явление» — детальное описание физических законов. «Развитие» — этапы трансформации моделируемых процессов при построении вычислительного эксперимента.

На базисных направлениях формируются ортогональные предметные плоскости в качестве независимых областей научных знаний, определяющих искомую цель.

Плоскость ③ — «Язык компьютерных вычислений» — формирует стадии вычислительного эксперимента. (1) подготовка исходных данных («начало»), (2) алгоритм решения задачи («процесс»), (3) всесторонний анализ трансформации физических полей («результат»).

Плоскость ② — «Математические принципы» — образуется осями «Развитие» и «Явление». Таким образом, она представляет ход реализации и задействованные процессы в едином комплексе этапов вычислительного эксперимента. При этом алгоритмы и функциональная среда вычислительных объектов и операций относятся строго к моделированию конкретного физического «Явления». Элементы этой плоскости, подобно подлежащему и сказуемому в естественном языке, объединяют элементы программирования в математические и геометрические правила, методы вовлечения числовых объектов — в подготовку, исполнение и последующее представление результатов численного моделирования.

В плоскости ① — «Законы и правила механики» — обособляются аналитические зависимости и законы. Их формализация может осуществляться методами функционального программирования либо оформляться в виде привычных алгоритмических построений и статичных пакетов программ.

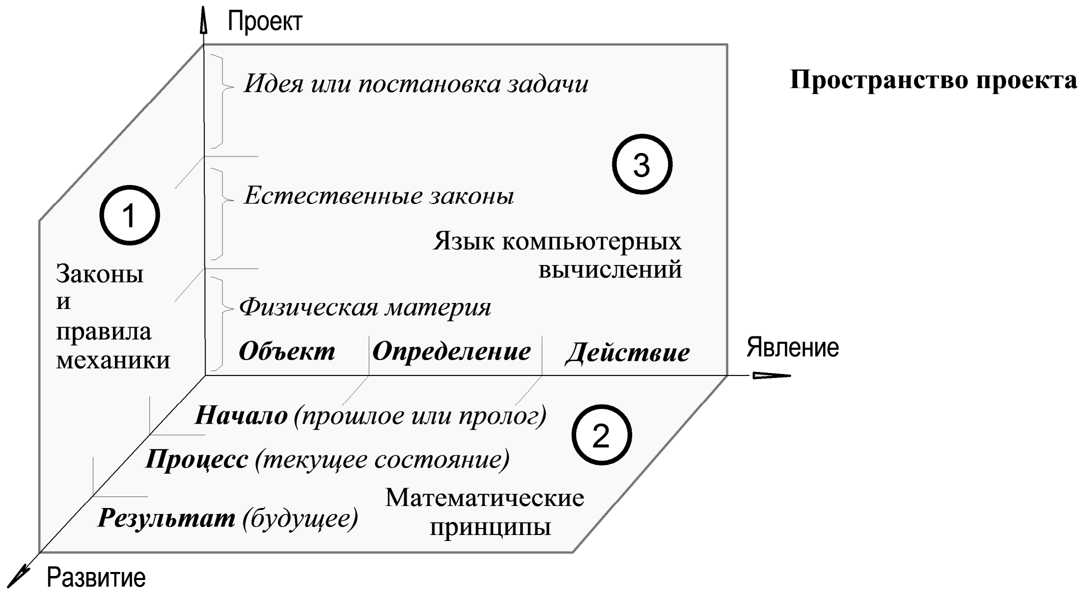


Рис. 1. Логическое пространство проектной задачи о построении вычислительного эксперимента

Предметные плоскости, по сути, являются особыми областями для научных изысканий, в которых формируются триады из формально независимых объектов программирования, физических законов и конкретных действий по реализации прямых вычислительных экспериментов.

Каждая комплексная задача, и в первую очередь те задачи, которые входят в список «Grand challenges», должна решаться в этих трех плоскостях. Рассмотрим один из наиважнейших аспектов в этом направлении — моделирование и расчет различных течений. В этой области находится большое количество задач: от гидрометеорологии до расчета горения в современных двигателях. Традиционно расчет течений связывают с решением уравнения Навье–Стокса. Проблемы, возникающие в этом направлении, мы можем, согласно высказанной концепции, разделить на три большие группы.

1. Некорректность уравнения Навье–Стокса, лежащего в основе моделирования, поскольку является некоторой идеализацией реальных процессов.

2. Идеализацией также является геометрия рассматриваемых течений. Это касается возникновения в расчетах острых кромок, углов и т. д., которые были обусловлены методами ап-

проксимации с помощью крупных сеток. Это вносит очень большие проблемы в решение задач, поскольку в реальности чаще всего эти особенности отсутствуют. В настоящий момент размер сеток может быть существенно уменьшен, что говорит о том, что и методы борьбы с возникающими проблемами должны быть другими.

3. Каждый раз при переносе задач течения на новые архитектуры возникает проблема портинга этих приложений. Поскольку довольно давно стало понятно, что появление новых архитектур связано с появлением новых библиотек программирования, то для течений также необходимо создание новых библиотек. Таким образом, мы должны по новому подходить к проблеме программирования задач гидроаэродинамики.

Рассмотрим подробнее эти три группы вопросов.

## Математические принципы организации вычислений задач течения

Для того чтобы обратиться к первой группе вопросов, необходимо сначала выяснить, почему в ряде случаев уравнение Навье–Стокса — это хорошо, а в ряде случаев не считается.

Вопрос этот становится понятен на основе таких простых рассуждений. Представим наше уравнение в виде

$$u_t + uu_x - \mu u_{xx} = H(u,x)\,, \tag{1}$$

где $H$ является некоторым функционалом параметров потока. Блестящий анализ О. А. Ладыженской [Ладыженская, 1972] показывает, что основные проблемы этого уравнения связаны с нелинейным вторым членом в левой части. Если $H$ может быть представлен в виде градиента некоторого функционала, проблема решается путем представления $u$ в виде градиента некоторой функции $V$ и интегрирования уравнения один раз. В действительности именно таким образом вводится представление Коула–Хопфа.

$$u = -2\mu \frac{1}{v}\frac{dv}{dx}\,, \tag{2}$$

которое линеаризует наше уравнение для случая, когда $H$ является градиентом некоторого функционала.

Тогда эффективность численной реализации уравнения Навье–Стокса будет заключаться в удачной аппроксимации потенциальной части уравнения. В случае отсутствия подходящей аппроксимации потенциальной части использование этого уравнения просто нежелательно и необходимо переходить к другим методам решения, включая прямое имитационное моделирование явлений переноса.

Более сложные подходы связаны с использованием формального представления

$$K \equiv \frac{d}{dx}\left(\frac{d}{dx}\right)^{-1} K \tag{3}$$

и попыткой придания определенного смысла обратному оператору к $d/dx$. Такой подход весьма успешен в квантовой теории поля, но для его эффективности процедуре должен быть придан определенный физический смысл [Боголюбов, Ширков, 1984]. В нашем случае имеет смысл вернуться к выводу уравнений Навье–Стокса и пересмотреть соответствующие процедуры. Выясняется, что основные проблемы появляются уже в исходном уравнении Больцмана, которое столь же математически неудовлетворительно, как и уравнение Навье–Стокса. Для выхода из этой проблемы удобно рассмотреть обобщения уравнения Больцмана. Имея в виду намеченную выше процедуру, удобно исходить из нелокального варианта уравнения [Богданов, 1976]. Применяя к такому обобщению уравнения Больцмана стандартную процедуру, мы получим уравнение Навье–Стокса, но с нелокальными операторами переноса [Власов, 1978]. При разложении сингулярных ядер соответствующих операторов получаются поправки, которые и регуляризуют обратный оператор в нашей процедуре. Интересно, что при этом получается теория переноса, совершенно аналогичная теории линейной реакции на внешнее возмущение [Каданов, Бейм, 1964]. Нам представляется, что именно такая теория и должна быть положена в основу построения эффективных алгоритмов расчета течений.

## Геометрическая идеализация

Проблема геометрической идеализации течений в первую очередь связана с постановкой граничных и начальных условий задачи. Традиционный подход формализации границ течений проистекает из теоретической постановки проблемы и вводит в рассмотрение острые кромки, углы и иные элементы, легко учитываемые в аналитическом подходе к рассмотрению задачи, однако крайне негативно влияющие на численное решение. Сходимость численных методов в таких областях оказывается крайне низкой, тем более, что в реальности мы всегда имеем дело с гладкими поверхностями.

Необходимо отметить, что эксперименты показывают: в гидродинамике зависимость от определения точной границы достаточно слабая [Богданов и др., 1983]. Отсюда в классическом численном подходе для разрешения упомянутой проблемы зачастую заменяют реальную границу некоторой «эффективной» границей, модифицируют на ней граничные условия для удовлетворения законов сохранения и получают более эффективную вычислительную процедуру. Этот подход успешно реализуется при переходе к методу крупных частиц, а взаимодействие с поверхностью заменяется взаимодействием с единичной крупной частицей, которая может быть деформирована исходя из характера граничных условий. В том или ином подходе эффективным решение оказывается в случае возможности изолированного решения двух возникающих задач — ранее описанной проблемы математических принципов организации вычислений и геометрического представления течений. Поэтому принципиальным положением можно считать отделение динамики течений от геометрии. При этом, конечно, все численные решения должны быть строжайше связаны с конкретными геометрическими базисами, масштабами и физическими размерностями.

Самый эффективный способ решения подобных проблем достигается разделением и дальнейшим описанием каждой из них в сопряженных пространствах. На одном из них развивается динамика, а в другом описывается базовый объект. В этом случае задача становится самосогласованной.

Пример такого разделения представлен в [Дегтярев, Храмушин, 2014]. Здесь показаны техника разделения численного решения по независимым физическим процессам, и в то же время инструментальные средства тензорной математики для непосредственного рассмотрения физических процессов в конкретной ячейке-частице вычислительного эксперимента. Это позволяют обобщить задачу до уровня полного моделирования нестационарных процессов в аэрогидромеханике. В простейшем случае, для такого обобщения скалярная плотность крупных частиц жидкости заменяется тензорным вычислительным оператором, обеспечивающим линейную аппроксимацию параметров состояния жидкости внутри сеточной ячейки, с одновременной формализацией предыстории зависимого движения и деформации несвободных, но энергонезависимых частиц жидкости с помощью тензорной (*инерционной*) массы. Тензорные формализации в гидромеханике элементарных частиц сплошной среды привносят необходимые и достаточные инструменты для прямого моделирования конвективных составляющих течения в неподвижных сеточных ячейках, так же как и для прогноза зависимого смещения и деформации потока смежных частиц жидкости, в том числе вблизи граничных поверхностей или свободных разрывов в тяжелой жидкости.

Таким образом, доопределяются фундаментальные свойства физической теории поля в канонической записи исходных уравнений движения в ближайшем окружении смежных числовых ячеек-частиц, а тензорные формализации лишь подчеркивают достоинства явных численных схем для достижения сквозного контроля состояния крупных частиц жидкости в условиях всеобъемлющего распараллеливания вычислительных процессов.

Трехмерная тензорная математика не противоречит традиционным математическим моделям аэрогидромеханики и служит основой для объединенной формализации алгоритмических и функциональных подходов в программировании, включающих операции тензорной арифметики [Программа построения числовых объектов...] для моделирования реологических свойств и обобщенной механики частиц жидкости в больших массивах числовых структур, связываемых в сеточные аппроксимации с помощью координатных пространств тензорной геометрии[1].

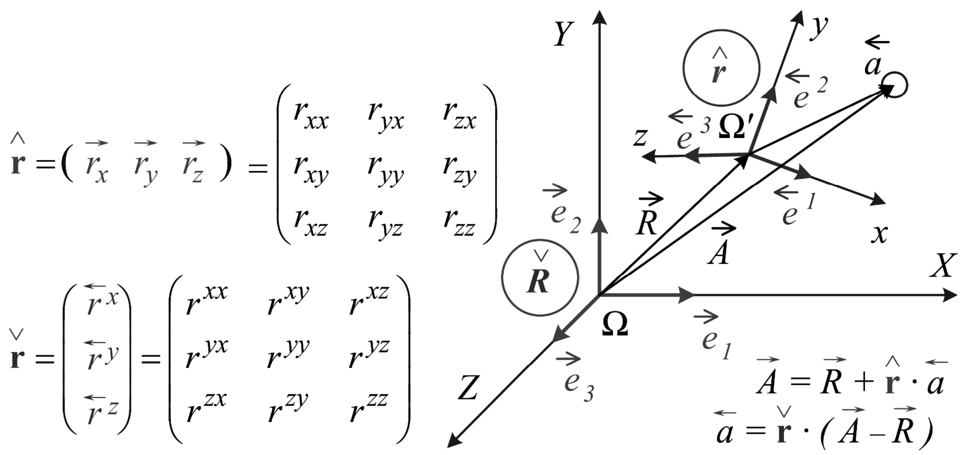


Рис. 2. Разметка ортов, векторное и матричное представление локального базиса крупной частицы жидкости. Ω отмечает центр глобальной системы отсчета, Ω' — пространственная привязка локального базиса. Прописные символы относятся к глобальным отсчетам в единой абсолютной системе координат; строчные — к аппроксимациям в связанных базисах крупных частиц жидкости, что в точности соответствует определениям конечных разностей или дифференциалов, исчисляемых по методу хорд Ньютона

Запись тензорных величин: ${}^{T}_{\Omega}\vec{\boldsymbol{R}}$ — координаты исходной узловой точки, Ω — индексы местоположения узла в сеточной области; верхний индекс: $T$ — время от начала проведения вычислительного эксперимента. ${}^{t}_{+}\vec{\boldsymbol{R}}$ — смежный узел со сдвигом в сторону «+» от исходного центра масс и со смещением во времени на величину $t$; $\hat{r} = \vec{r}_k = r_{ik}$ [м³] — тензор формы крупной частицы жидкости; $\overset{<}{M} = M^i{}_j = \check{\rho}\cdot\hat{r}$ [кг] — смешанный тензор, соотносящий внутреннее состояние частицы $\check{\rho}$ на абсолютную систему отсчета в локальном базисе $\hat{r}$.

В принятых обозначениях кинематика отдельно взятой частицы жидкости и связанных с ней внутренних потоков (живых сил) представляется простым многочленом с линейными тензорными элементами и вторым порядком по приращениям скалярного времени:

$$^{+}\vec{A} = \vec{R} + \vec{V}\cdot t + \vec{F}\cdot \overset{<}{m}\cdot t^2/2 + (\hat{r} + \hat{v}\cdot t + \hat{f}\cdot \overset{<}{m}\cdot t^2/2)\cdot \overleftarrow{a},$$

где — $\vec{F}$ [Н] — массовые; $\hat{f}$ [Н·м²] — поверхностные силы.

[1] Операции тензорной геометрии исполняются на аппаратном уровне, что поддерживается в функциональной среде однородных координат в машинной графике OpenGL.

## Программная реализация

Теперь, когда мы достигли разделения сопряженных пространств, и программирование необходимо проводить в этих же терминах. Иными словами, саму компьютерную архитектуру необходимо разбить таким же образом и выбрать для каждого из пространств оптимальное описание. Это оказывается выгодным как с точки зрения отображения задачи, так и с точки зрения оптимального выбора архитектуры.

Учитывая, что разделяемые сопряженные пространства в рассматриваемой задаче и описываемые в них процессы являются разными, для эффективного решения мы должны построить адекватную вычислительную инфраструктуру. На сегодняшний день такой структурой может быть только виртуальный гетерогенный вычислительный комплекс, построенный на базе традиционных многоядерных процессоров с многопоточными графическими ускорителями (CPU + GPGPU).

В этом случае действительно, когда описывается динамика течений, отделенная от геометрии, можно всегда уменьшить размерность и просчитать ее на узле мощных многоядерных процессоров. Но когда работа производится со сложной геометрией, то размерность пространства уменьшить не удается. Единственный выход повышения эффективности кода в этом случае — программирование при помощи векторной арифметики. Однако работа в гибридной архитектуре при попытке программировать в векторной парадигме на GPGPU не привела до сих пор к успеху, сравнимому с работой на векторных процессорах. Это связано в первую очередь с невозможностью передачи данных в векторном формате и планирование векторных операций на несколько шагов вперед, что является важной характеристикой любого векторного компьютера.

В современной вычислительной практике сложно представить себе возможность разработки специализированных алгоритмов гидромеханики для встраивания в микропроцессорные схемы новейших суперкомпьютеров. И в то же время ориентация на повсеместное согласование алгоритмов и собственно архитектурных особенностей вычислительных систем является необходимым условием реализации наиболее эффективных информационно-вычислительных систем. Показательным примером эффективного согласования аппаратных и программных возможностей является контекстная графическая среда OpenGL, в составе которой имеется полный набор операций для трехмерной визуализации с использованием математического аппарата «однородных координат» — своеобразной тензорной геометрии с векторами местоположения графических объектов внутри обрамленных матриц [4x4].

В трехмерной тензорной математике со всеми вычислительными объектами должны связываться логические предикаты для установки типа числовых структур и их принадлежности к абсолютному или локальному базису. Они используются для автоматических преобразований в соответствии с исходными установками в уравнениях аэрогидромеханики. Как минимум для такого предиката необходимо три двоичных бита:

“000” — $T$ — *скалярная величина в абсолютном базисе или безразмерный инвариант;*

“001” — $\vec{A}$ — *вектор в глобальной системе координат (СК);*

“010” — $\overset{\leftarrow}{a}$ — *вектор в локальном базисе крупной частицы;*

“011” — $t$ — *размерная скалярная величина в локальной системе отсчета;*

“100” — $\overset{\wedge}{r}$ — *тензор формы крупной частицы жидкости в глобальной СК;*

“101” — $\overset{>}{v}$ — *смешанный базис проекций векторов на локальную СК;*

“110” — $\overset{<}{m}$ – *базис локальных векторов в проекциях глобальной СК;*

“111” — $\overset{\vee}{\rho}$ – *определение тензорной величины в локальном базисе.*

Непрерывный контроль битовых масок-признаков особенно важен в случае распараллеливания вычислительных операций на сложных гибридных системах. В них моделирование разделяется на большие пространственные блоки, между которыми должна осуществляться автоматическая конвертация числовых структур для согласования решений на смежных границах или в областях с перехлестом нерегулярных сеточных аппроксимаций, где возможны непредсказуемые перестроения структуры физических полей аэрогидромеханики.

## Программная среда инженерного вычислительного эксперимента

Изложенный подход разделения и дальнейшего описания проблемы в сопряженных пространствах при организации вычислительного эксперимента требует адаптивного его управления со сквозным контролем текущего состояния всех числовых объектов. При этом устанавливаются функциональные или контекстные требования к языковой среде программирования для проектирования, построения и реализации прямых вычислительных экспериментов. Эти требования заключаются в следующем:

1) элементарные пространственно-временные объекты и базовые физические явления должны представляться в виде вычислительных структур и числовых величин в размерном виде, что в первую очередь требуется для визуального контроля и автоматического применения гибридных схем;

2) свойства вычислительных операций и элементарных числовых объектов инвариантно определяются в проекциях глобальной системы координат и однозначно соответствуют расчетным аппроксимациям в локальных базисах.

Инженерная реализация вычислительных экспериментов в аэрогидромеханике, безусловно, потребует адекватного математического сопровождения. В нем должны сочетаться алгоритмические и функциональные средства прикладного программирования с предельно эффективным отображением моделируемых физических явлений на архитектуру высокопроизводительных вычислительных систем. Трехмерная тензорная математика может стать элементом пространства (рис. 1) для унифицированного согласования базовых законов механики (1) и компьютерных языков программирования (3) с образованием необходимых и достаточных математических принципов (2) для изысканий в проектировании и реализации прикладных вычислительных экспериментов в гидромеханике.

В заключение можно сформулировать особенности специализированной среды программирования, в которой с числовыми объектами связываются алгоритмические операции.

1. Операции логические или эмпирические связаны с конструированием законов гидромеханики, которые задают способы формирования и методы анализа крупных частиц жидкости для выбора вычислительных моделей или трансформации числовых объектов.

2. Операции сложения применяются к любым числовым объектам после приведения к единому геометрическому базису и физическим размерностям в соответствии с предопределенными законами гидромеханики (пп. 1).

3. Операция «произведение» может исполняться только с сопряженными векторами и тензорами для интерполяционного проецирования физических полей в дуальных координатных базисах. Запрещается любое изменение ранга тензора в операциях произведения, если это не покрывается логическим синтезом (пп. 1) или анализом числовых объектов (пп. 2).

Алгоритмические последовательности будут управляться числовыми объектами:

1) скалярные или инвариантные величины, например время $t$, участвуют в операциях произведения или представляются производными для любых числовых объектов;

2) векторные величины участвуют в операциях сложения с сопоставимыми векторами и в операциях произведения с тензорами для изменения координатных базисов;

3) тензорные величины синтезируют или характеризуют свойства крупных частиц жидкости, геометрические деформации, физические явления и процессы гидромеханики в функции скалярного времени. С использованием тензорных объектов формулируются основные законы гидромеханики, а их конструирование и анализ образуют этапы численного моделирования.

## Заключение

Вычислительная гидромеханика обладает наибольшим историческим авторитетом в построении сложных программно-технических средств для прикладных инженерных задач. Новейшие компьютерные технологии формально не связаны с решением прикладных задач гидромеханики и не противоречат развитию фундаментальных идей для совершенствования вычислительной математики и методов проектирования сложных вычислительных экспериментов. Настоящая работа посвящена синтезу функциональных и алгоритмических методов в прямых вычислительных экспериментах в аэрогидромеханике с явными численными схемами, органично объединяющихся в теоретических построениях тензорной математики, наилучшим образом отображающей законы гидромеханики и вычислительной геометрии на архитектуру современных гибридных информационно-вычислительных комплексов.

## Список литературы

*Богданов А. В.* К выводу обобщенного кинетического уравнения больцмановскоо типа // Вестник ЛГУ, Сер. мат., мех., астр. — 1976. — № 13. — С. 66.

*Богданов А. В., Горбачев Ю. Е., Дубровский Г. В., Фурсенко А. А., Жмакин А. И. и др*. Теоретические модели релаксационной газодинамики и методы расчета неравновесных течений структурного газа. III. Численное исследование влияния релаксационных процессов на газодинамику течений. Изд. ЛИЯФ, препринт ФТИ, № 861, 36 с. 1983.

*Боголюбов Н. Н., Ширков Д. В.* Введение в теорию квантованных полей (изд. 4-е). — М.: Наука, 1984. — 600 с.

*Власов А. А.* Нелокальная статистическая механика. — М.: Наука, 1978. — 264 с.

*Дегтярев А. Б., Храмушин В. Н.* Проектирование и построение вычислительных экспериментов в гидромеханике с использованием явных численных схем и алгоритмов тензорной математики // Математическое моделирование. — 2014. — 26 (11). — С. 4–17.

*Каданов Л., Бейм Г.* Квантовая статистическая механика. Методы функций Грина в теории равновесных и неравновесных процессов. — М.: Мир, 1964. — 255 с.

*Ладыженская О. А.* О динамической системе, порождаемой уравнениями Навье–Стокса // Краевые задачи математической физики и смежные вопросы теории функций. 6, Зап. научн. сем. ЛОМИ, 27, Ленинград. отд. — Л.: Наука, 1972. — С. 91–115.

Программа построения числовых объектов и функций трехмерной тензорной математики для вычислительных экспериментов в гидромеханике (Tensor). — СПбГУ, Роспатент № 2013619727.

Federal Plan for High-end Computing: Report of the High-end Computing Revitalization Task Force (HECRTF), Executive Office of the President, Office of Science and Technology Policy, 2004

High Performance Computing Act of 1991.

Task Force on Grand Challenges. Final Report of the NSF Advisory Committee for Cyberinfrastructure [электронный ресурс]. — 2011. — URL: http://www.nsf.gov/od/oci/taskforces (дата обращения: 17.01.2015).

The Fourth Paradigm: Data-Intensive Scientific Discovery. Hey T., Tansley S., and Tolle K. (Eds.) Microsoft Research, Redmond, Washington, October 2009.

*Wilson K. G.* Grand challenges to computational science, in Modern physics in America: a Michelson-Morley centennial symposium. Cleveland, Ohio, 30–31 October 1987, AIP conference proceedings 169, ed. William Fickinger and Kenneth L. Kowalski.

*Wilson K. G.* Grand Challenges to Computational Science (Cornell Center for Theory and Simulation in Science and Engineering: 1987). — P. 2.

*Wilson K. G.* Grand challenges to computational science. Future Generation Computer Systems 5, i.2-3, 1989. Pp. 171–189. DOI: 10.1016/0167-739X(89)90038-1.