

О НЕКОТОРЫХ ПРОБЛЕМАХ «ЗАОБЛАЧНОГО» МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ¹

В.П. Ильин

Разработка интегрированного прикладного программного окружения для математического моделирования, ориентированного на решение междисциплинарных прямых и обратных задач широким кругом пользователей в рамках облачных вычислений на суперцентрах петафлопсного уровня ставит большой круг вопросов методического, технологического и организационного характера. В работе рассматривается концепция базовой системы моделирования (БСМ), функционирование которой предполагается в рамках вычислительного центра коллективного пользования (ВЦКП). БСМ представляет собой интегрированное программное окружение, поддерживающее все основные технологические этапы крупномасштабных вычислительных экспериментов, адаптируемое к эволюции моделей и алгоритмов решения задач, а также архитектур многопроцессорных вычислительных систем (МВС) и ориентированное на длительный жизненный цикл, обеспечиваемый эффективной генерацией пакетов прикладных программ (ППП) для конкретных предметных областей. Проблема достижения высокой суммарной производительности ВЦКП рассматривается как задача условной оптимизации расписания потока расчетных заданий с учетом используемых ресурсов конкретных приложений.

Ключевые слова: масштабируемый параллелизм, облачные вычисления, математическое моделирование, многопроцессорная вычислительная система, базовая система моделирования, прикладное программное обеспечение.

Введение

Одна из актуальных проблем вычислительного сообщества заключается в кардинальном повышении востребованности компьютерных расчетов как третьего пути познания процессов и явлений, наряду с теоретическими исследованиями и натурными экспериментами. Другими словами, математизация различных наук и моделирование должны сыграть значительную инновационную роль в многочисленных производственных и социальных сферах, сравнимую по масштабам с информационными потрясениями, привнесенными массовым внедрением мобильных телефонов и интернета в течение последних десятилетий.

С точки зрения математического моделирования, требующего выполнения крупномасштабных вычислительных экспериментов при решении прямых и обратных междисциплинарных задач, ориентированных на достижение качественно нового уровня получения принципиальных фундаментальных знаний и производственных решений, в суперкомпьютерном развитии следует отметить две главные тенденции. С одной стороны — это концентрация экстремальных ресурсов в рамках центров коллективного пользования (Data Centers, [1]) пост-петафлопсных масштабов с миллионами разнородных компонент, включая многоядерные центральные универсальные и специализированные ускорительные процессорные устройства, программируемые логические интегральные схемы (ПЛИС), а также вычислительные сети (Grid), объединяющие удаленные расчетные мощности.

Другая тенденция — это формирование математического и программного обеспечения в рамках многопользовательской вычислительной интегрированной среды, поддерживающей основные технологические этапы реализации наукоемких проблем: геометрическое и

¹Статья рекомендована к публикации программным комитетом Международной научной конференции «Параллельные вычислительные технологии — 2014»

функциональное моделирование, генерация сеток, аппроксимация и дискретизация исходных уравнений, решение алгебраических задач, оптимизационные подходы к решению обратных задач, пост-обработка и визуализация результатов, средства принятия решений по итогам расчетов, см. [2–4]. В некотором смысле примерами программных прототипов могут служить такие комплексы, как OpenFOAM [5] и DUNE (Distributed Unified Numerical Environment [6]), или более узко направленные OpenCascade [7] и Salome [8] .

Мотивации такого пути развития заключаются в следующем:

- наличие общих эволюционных направлений создания открытых программных систем (Open Source), в соответствии с разработанной международным комитетом под руководством Дж.Донгарры «дорожной карты» экзавычислений [9], а также принципов открытых инноваций, см. [10, 11];
- несоответствие современным условиям суперкомпьютерного развития широко распространенных традиционных проблемно-ориентированных пакетов прикладных программ (ППП) типа ANSYS [12], NASTRAN [13] и многих других, имеющих историю развития еще с прошлого века, а также узкая область применимости различных алгоритмических библиотек (алгебраических, графических и т.д.);
- насущная потребность создания вычислительных интегрируемых программных окружений с длительным жизненным циклом, адаптируемых к эволюции компьютерных платформ, легко развиваемым и решающим проблему взаимодействия с внешними разработками, а также скрывающим от конечных пользователей излишние технические детали путем предоставления дружественных интеллектуальных интерфейсов; фактически здесь идет речь о резком повышении интеллектуальности прикладного программного обеспечения (ППО), связанной с автоматизацией построения математических моделей и алгоритмов или, образно говоря, о переходе от палео-информатики к нео-информатике [14].

Целью разработки таких инструментальных сред является создание предпосылок для инновационного внедрения и массового применения математического моделирования путем оперативной генерации приложений нового поколения для фундаментальных исследований или анализа и оптимизации производственных процессов. Необходимо иметь в виду, что темпы развития современных и будущих высокотехнологичных производств (новые материалы, био- и нано-технологии, и пр.) напрямую зависят от уровня математизации и компьютеризации данных сфер деятельности, а главным орудием познания здесь становится моделирование. Следует даже подчеркнуть, что компьютерное моделирование наиболее актуально именно в прорывных технологиях, где традиционные подходы исследований имеют ограниченную применимость. Другая важная диалектическая тенденция заключается в том, что наряду с активным развитием различных научных дисциплин, в последние десятилетия идет бурное накопление результатов в теоретической, прикладной и вычислительной математике, которые ждут своего компьютерного воплощения. А это означает, что новое ППО должно быть «живым организмом», комфортная перманентная эволюция которого требует самой серьезной поддержки.

В данной работе излагается концепция коллективной (многопользовательской) базовой системы моделирования (БСМ), включая архитектуру построения разработки и особенностей ее функционирования в рамках облачных вычислений и технологий программно-вычислительных услуг (SaaS – Software as a Service). В п. 1 рассматриваются вопросы стратегического и тактического планирования параллельных вычислений с точки зрения

различных целевых функций в оценках эффективности использования технического оборудования вычислительного центра коллективного пользования (ВЦКП). Надо сказать, что новое — это хорошо забытое старое, и в определенной степени аналогичные проблемы обсуждались в работе [15] 1988 года. Пункт 2 посвящен некоторым системным аспектам, возникающим при реализации предлагаемых приложений, а также их возможным обобщениям и дальнейшим путям развития.

1. Технологии и критерии эффективности распараллеливания

Одной из главных характеристик параллелизма вычислительного процесса или алгоритма (или же решаемой задачи) является масштабируемость, которая, вообще говоря, может пониматься по-разному. Сама задача, с точки зрения ее вычислительной сложности, или ресурсоемкости, специфицируется количеством необходимых арифметических операций C и памяти M , которые естественно измерять во флопах (действия с плавающей запятой) и машинных словах, причем в современном моделировании следует понимать стандартные 64-разрядные представления чисел, достаточно надежно гарантирующие требуемую на практике точность. В свою очередь, величины C и M зависят от количества степеней свободы N , которое может определяться, например, числом узлов сетки или порядком системы линейных алгебраических уравнений (СЛАУ).

Под масштабируемостью можно понимать в простейшем случае ускорение расчетов, пропорциональное увеличению количества процессоров P . Несколько отличное от этого понятие — сохранение времени решения задачи при одновременном увеличении ее ресурсоемкости и количества процессоров в одинаковое число раз. Вообще говоря, зачастую в распараллеливании главное — это возможность интегрирования памяти для решения большой задачи, которую при малом количестве процессоров просто нельзя реализовать.

Для некоторого абстрактного рассмотрения многоцелевого использования коллективных компьютерных ресурсов необходимо в первую очередь выбрать формальную модель многопользовательской вычислительной системы, а также и самого вычислительного процесса.

В достаточно общем виде мы можем рассмотреть неоднородную, или гетерогенную, многопроцессорную – многоядерную вычислительную систему (или сеть), которую будем сокращенно называть МВС, как совокупность соединенных между собой различных кластеров и серверов. Кластер, в свою очередь, представляется набором многопроцессорных узлов, в которых процессоры могут быть или «стандартные» (центральные, CPU), содержащие относительно небольшое количество вычислительных ядер (например, 8 или 12) с общей памятью, или специальные (наиболее распространенные — это графические процессоры общего назначения, GPGPU), насчитывающие несколько сот ядер (например, 512). Представляемая для расчетов память имеет, как правило, иерархическую структуру и включает оперативную память процессоров и три уровня кэша, отличающиеся между собой объемом и быстродействием. Отдельный сервер формально можно считать кластером, состоящим из одного «большого» узла, содержащего достаточно емкую общую оперативную память и значительное количество многоядерных процессоров различных типов.

Вычислительный сеанс на такой МВС заключается в управляемом диспетчером выполнении арифметических действий на соответствующих устройствах, а также в информационных обменах между ними. Идеальным является выполнение расчетов непосредственно в

процессоре с использованием только сверхбыстрых регистров памяти, однако их количество ограничивается несколькими десятками.

Ограничиваясь тривиальной моделью вычислений, время $t(A)$ реализации фрагмента алгоритма (или задачи) A на каком-то одном процессоре компьютера можно выразить формулой

$$t(A) = t_a + t_c + t_w, \quad t_a = \tau_a N_a, \quad t_c = (\tau_0 + \tau_c N_c) m_c, \quad (1)$$

где τ_a и N_a – среднее время выполнения одного действия и общее количество арифметических операций, t_c – время реализации межпроцессорных информационных обменов, τ_c – время межпроцессорной передачи одного числа, N_c – количество передаваемых чисел, τ_0 – время задержки (настройки) одной транзакции, m_c – число обменов, а t_w – время простоев (ожидания) процессора, которые можно рассматривать как неизбежную плату за рассогласованность структуры конкретного алгоритма и архитектуры МВС, на которой он выполняется. Для реальных вычислительных систем имеют место соотношения $\tau_a \ll \tau_c \ll \tau_0$, в силу чего повышение производительности расчетов в значительной степени связано с минимизацией коммуникаций. Здесь следует отметить и другой немаловажный фактор: операции передачи данных являются намного более энергозатратными, в сравнении с арифметическими действиями, что сильно влияет на стоимость эксплуатации МВС (потребление электроэнергии суперкомпьютера постпетафлопсной производительности достигает нескольких мегаватт).

Несовершенство формул в (1) с введением величины τ_a сродни понятию «средней температуры по больнице», поскольку реальная длительность различных арифметических действий сильно отличается друг от друга и, более того, на самом деле необходимо учитывать совокупную скорость выполнения арифметических выражений на процессорном конвейере.

Реально единицей измерения времени в компьютере является «такт», длительность которого определяется частотой электропитания и составляет несколько гигагерц. Длительность выполнения каждого арифметического действия характеризуется количеством тактов и, например, при «хорошей» организации вычислений выражения $y_i = ax_i + b, i = 1, \dots$, значение каждого y_i будет занимать только один такт.

Второе грубое приближение заключается в том, что τ_0 и τ_c тоже представляют собой усредненные характеристики скоростей обменов между различными устройствами. В пределах одного CPU — это связи умножителей и сумматоров с процессорными регистрами, обмены между регистрами и кэшем, а также между различными уровнями оперативной общей памяти. Намного медленнее идет передача данных между CPU и GPU, между вычислительными узлами одного кластера и тем более — между различными кластерами, соединяемыми в рамках ВЦКП с помощью Grid-технологий. В последнем случае итоговое быстродействие определяется техническими характеристиками телекоммуникационных каналов.

С другой стороны, значительного уменьшения расчетного времени $t(A)$ можно добиться путем специальной организации вычислительного процесса: совмещение обменов и арифметических операций во времени, организация информационных буферов, различные приемы оптимизации программного кода типа «развертка циклов», и т.д.

Качество распараллеливания задачи A на P процессорах в первом приближении можно охарактеризовать двумя параметрами — коэффициентом ускорения S_P и эффективностью

использования процессоров:

$$S_P(A) = \frac{t_1(A)}{t_P(A)}, \quad E_P(A) = S_P(A)/P, \quad (2)$$

где $t_P(A)$ – время выполнения задачи на P процессорах. Естественно, в данном случае процессор подразумевается одноядерным, чего на практике уже почти не бывает. Если же в (2) за P принимать количество ядер, то здесь надо учитывать возможные конфликты при работе с общей памятью. В этой ситуации надо иметь в виду, что оцениваемая теоретическая пиковая производительность может сильно отличаться от реальной.

В определенном смысле идеальным считается линейное распараллеливание, когда ускорение S_P пропорционально числу процессоров P , а эффективность E_P близка к единице. На практике зачастую считаются приемлемыми значения $E_P = 0.1 \div 0.5$. Однако иногда случаются и чудеса со значениями $E_P > 1$ (сверхлинейное ускорение), когда, например, с удвоением P алгоритм, изначально выполняемый в медленной памяти, начинает «умещаться» в кэше.

Здесь и ниже под числом понимается вещественная переменная со стандартной двойной точностью в 64-битовом представлении с плавающей запятой, что является необходимым (и зачастую достаточным) при решении больших задач, например — при решении СЛАУ с размерностью порядка миллиона. Отметим, что в памяти объемом один гигабайт размещается $128 \cdot 10^6$ таких чисел. Отсюда, например, следует, что для хранения элементов разреженной квадратной матрицы с размерностью $N = 10^9$ и со средним числом ненулевых элементов в строке, равным 100, требуется около одного терабайта памяти. Это означает, во-первых, что размещение такого объема памяти требует большого числа процессоров, а во-вторых, что соответствующие межпроцессорные пересылки представляют весьма дорогую операцию.

Необходимо заметить, что ресурсоемкость вычислительных задач и компьютеров эволюционирует при сохранении баланса между быстродействием и объемом памяти МВС: терафлопсам соответствуют терабайты, петафлопсам – петабайты и т.д. Такая закономерность приводит к тому, что реализация большой расчетной задачи на МВС — это фактически комплексная вычислительно-информационная проблема (Intensive Data Computing). Хотя стоит подчеркнуть, что чисто информационные задачи традиционно относятся не к математическому моделированию, а к другой проблематике — Big Data или Data Mining.

Парадоксальным, на первый взгляд, является тот факт, что аналитические оценки компьютерной производительности являются «терра инкогнито» вычислительной информатики. Реальные операции при наличии конвейеров, многоуровневой памяти и внутренних особенностях компиляторов настолько сложны, что даже смоделировать выполнение простейших векторно-матричных выражений не представляется возможным. Поэтому проблема оптимизации программного кода приоткрыта только немногим посвященным, а единственный реальный путь ее исследования и понимания — это систематический эксперимент с квалифицированными измерениями, в которых должны помогать инструментальные профилировщики вычислительных процессов. Справедливости ради надо сказать, что многие частные приемы распараллеливания поддерживаются достаточно профессионально или компиляторами, или библиотечными функциями, что зачастую освобождает от излишней головной боли прикладных математиков и программистов.

Отметим, что попытки построения систем автоматического распараллеливания алгоритмов (типа долго развиваемого, но затем закрытого, проекта HPF — High Performance Fortran) пока не завершились созданием промышленного компилятора. Существующие же

средства распараллеливания — различные варианты системы передачи сообщений MPI для распределенной по кластерным узлам памяти и инструменты OpenMP или CUDA для общей памяти многоядерных CPU или GPU имеют «полуручной» принцип управления. При этом классическая проблема «отображение алгоритмов на архитектуру ЭВМ» фактически сводится к интуитивному сопоставлению MPI-процессов и вычислительных потоков конкретному доступному составу процессоров. Вопросы же высокопроизводительных вычислений в «облаках» и в сетевых технологиях в большой степени относятся не непосредственно к эффективности распараллеливания алгоритмов, а к управлению расчетными заданиями и к интегрированию компьютерных ресурсов, см. [16].

В заключение данного пункта укажем, что в разные годы изобреталось большое количество специализированных вычислительных устройств, которые для определенного класса задач или алгоритмов достигали рекордных скоростей. Однако эти спецпроцессоры не выдержали рыночной конкуренции с универсальными МВС. Возможным исключением являются реконфигурируемые ПЛИС [17], однако вопросы высокопроизводительных вычислений с их использованием представляют собой самостоятельную проблему, выходящую за рамки данной статьи. В идеале представляется процесс конвергенции между создателями компьютерных архитектур и разработчиками математического и программного обеспечения, результатом чего было бы осуществление голубой мечты и математиков, и конструкторов – оперативное проектирование сверхбыстрых устройств «под задачу» или «под алгоритм».

2. О концепции «заоблачного» моделирования

Для качественного ППО, которое могло бы способствовать инновационности, массовой востребованности и практической эффективности математического моделирования на современных МВС, можно сформулировать следующие технические требования:

- применимость к решению широкого класса проблем: прямые и обратные междисциплинарные задачи, описываемые системами дифференциальных и интегральных уравнений в многомерных расчетных областях со сложной геометрией и контрастными материальными свойствами, включая стационарные и динамические, линейные и нелинейные постановки;
- высокое разрешение численных решений, определяемое адекватностью математических моделей и аппроксимационными качествами методов, адаптируемых под свойства задачи, а также робастностью (надежностью и безотказностью) алгоритмов;
- высокая производительность расчетов, включая масштабируемую параллельность с отображением алгоритмов на архитектуру гетерогенных многопроцессорных и многоядерных вычислительных систем;
- интеллектуальность программных реализаций, обеспечивающая автоматическое формирование моделей и построение алгоритмов, управление вычислительным процессом и создание дружественных профессиональных интерфейсов для различных категорий пользователей;
- гибкие конфигурационные свойства, способствующие длительному жизненному циклу ППО с непрерывным пополнением состава применяемых моделей и алгоритмов, а также адаптации к изменениям компьютерных платформ;
- открытость к внешним программным разработкам и возможность переиспользования сторонних продуктов.

Перечисленные экстремальные условия ориентированы главным образом на решение суперзадач на суперкомпьютерах постпетафлопсного уровня, а их воплощение предполагает создание проекта не отдельной группы разработчиков, а сообщества разнопрофильных специалистов с широкой координацией и кооперацией многолетнего фронта работ.

Реализация данного амбициозного круга проблем рассматривается в рамках базовой системы моделирования, структура которой включает следующие основные части:

- интегрированное инструментальное ядро, состав которого определяет класс решаемых задач и применяемых алгоритмов;
- конфигурационные средства, ответственные за уровень интеллектуальности и пользовательской доступности разрабатываемого ППО;
- семейство ППП и алгоритмических библиотек, характеризующих конечную практическую направленность и эффективность создаваемых приложений.

Ядро БСМ представляет собой методо-ориентированное окружение, предназначенное для поддержки всех основных технологических этапов крупномасштабного вычислительного эксперимента, а его функциональное наполнение определяется следующим набором компонент, или подсистем:

- геометрическое и функциональное моделирование, на основе которого реализуется автоматизация когнитивных методик, формируются профессиональные пользовательские интерфейсы для конкретных приложений, а также импорт-экспорт с САПРами и внешними графическими пакетами;
- генерацию адаптивных неструктурированных сеток, с поддержкой параллельных методов декомпозиции сеточных подобластей, многосеточных подходов и локальных сгущений дискретизации в окрестности сингулярностей решений, на основе априорного и/или апостериорного анализа решаемой задачи;
- сеточные и спектральные алгоритмы различных порядков аппроксимации исходных задач, обеспечивающие высокое разрешение численных решений и апостериорные оценки точности (методы конечных объемов, конечных элементов, методы граничных интегральных уравнений, разрывные схемы Галеркина и др.);
- параллельные алгебраические решатели для возникающих в практических задачах больших плохо обусловленных систем сеточных линейных и нелинейных уравнений, а также для решения проблем собственных значений соответствующих матриц;
- методы оптимизации для решения проблем условной минимизации, локальной или глобальной, как основной подход к реализации обратных задач (идентификация параметров модели, автоматизация проектирования, оптимизация эксплуатационных режимов и т.д.);
- обработка и визуализация результатов численных расчетов;
- управление вычислительным процессом, формирование и реализация сценариев моделирования;
- анализ результатов моделирования и средства принятия решений.

Важно подчеркнуть, что каждая из подсистем ядра является открытой и легко пополняемой инструментальной средой для соответствующей технологической стадии, которая практически не зависит от других компонент, а взаимодействие между ними происходит через унифицированные структуры данных: геометрические (ГСД), функциональные (ФСД), сеточные (ССД), алгебраические (АСД) и т.д., – со множественными представлениями и возможностями конвертизации, для обеспечения гибких внутренних интерфейсов между

различными вариантами методов или моделей и внешних контактов со сторонними программными продуктами. Подчеркнем, что многоверсионность данных и алгоритмов требует специальных средств поддержки, но зато позволяет достичь такого уникального качества, как совмещение универсальности и эффективности разработки, за счет ее адаптивности к специфическим свойствам задачи.

Помимо перечисленных алгоритмических компонент, функциональное наполнение должно включать средства методической поддержки математического и программного обеспечения: верификации, тестирования, сравнительного анализа, т.е. экспериментального исследования. Это подразумевает создание каталогизированной библиотеки тестовых примеров и типовых задач с архивами расчетных результатов и соответствующими описаниями.

Средства конфигурационного управления составляют системное наполнение БСМ и обеспечивают автоматизированное пополнение состава математических моделей решаемых задач и применяемых алгоритмов, конструирование вычислительных схем в составе ППП для классов приложений, диалоговых графических интерфейсов для профессионалов в прикладных областях, а также адаптацию на конкретные компьютерные платформы и операционные обстановки. Фактически набор системных средств определяет интеллектуальный уровень БСМ, а их реализация предполагает активное использование специализированных языков программирования [14]. Главное назначение системного блока — это поддержка длительного жизненного цикла всего проекта, который должен обеспечиваться пользователями высокого уровня — разработчиками новых алгоритмов и приложений в составе БСМ.

Семейство ППП, образуемое конфигуратором из инструментальных модулей ядра, представляет собой непосредственное орудие математического моделирования и определяет производственные сферы его реального эффективного применения.

В целом конгломерат предлагаемых в составе БСМ приложений — это и есть непосредственный пакет решений для конечного пользователя, которому неинтересны (а в определенном смысле — даже вредны) знания о «внутренней кухне» информационно-вычислительных технологий, а нужны реальные возможности продукта для исследования его конкретной проблемы. В некотором смысле идеальным является представление ППП в виде «черного ящика» с минимальным набором кнопок и инструкций. Однако на практике неизбежны и компромиссные варианты в форме «серых ящиков» с возможностями модификаций режимов моделирования для заинтересованных продвинутых конечных пользователей.

Типовая вычислительная блок-схема для решения стационарной линейной краевой задачи представляется следующим образом: формирование с помощью графического редактора исходных данных о расчетной области и решаемых уравнениях (в виде ГСД и ФСД), построение сетки (ССД), реализация аппроксимаций и формирование АСД, решение СЛАУ, пост-обработка, визуализация и анализ полученных результатов. Если поставленная проблема является нелинейной, то необходимые этапы (а возможно, и все) повторяются с проведением итераций по нелинейным членам. В случае нестационарности моделируемого процесса рассмотренные этапы выполняются последовательно для различных шагов по времени. И наконец, для обратных задач с формулируемым целевым функционалом, зависящим от некоторых параметров в исходных данных, все предыдущие стадии, представляющие собой решение одной прямой задачи, циклически повторяются в соответствии с оптимизационными алгоритмами условной минимизации функционала.

Таким образом, формально вычислительная схема решения одной абстрактной большой задачи в общем случае представляется вложенными циклами, в каждом из которых распараллеливание алгоритмов может осуществляться в соответствии со своими тактиками и стратегиями.

Начать рассмотрение следует с нижнего уровня — этапа решения СЛАУ, который играет ключевую роль в силу того, что его ресурсоемкость нелинейным образом растет с увеличением порядка системы, или числа степеней свободы. Главным орудием распараллеливания здесь является метод декомпозиции расчетной области на подобласти (с пересечениями или без), в каждой из которых независимо и синхронно (в идеальном случае) решаются соответствующие подсистемы, а с их помощью устраивается итерационный процесс по подобластям.

Одно из важных условий распараллеливания методов решения современных сверхбольших СЛАУ на МВС — это отсутствие программных ограничений на порядки решаемых систем и на количество используемых процессоров и/или ядер. По этой причине реализацию алгоритмов надо делать в строго распределенном варианте, без чрезмерной концентрации ресурсов на корневом процессе системы MPI.

Отметим еще один серьезный момент: во избежание простоя вычислительного оборудования при одновременном решении вспомогательных задач в подобластях разными MPI-процессами декомпозиция расчетной области должна быть сделана сбалансированной. Последнее понятие, строго говоря, означает, что алгебраические подсистемы для подобластей должны решаться за одинаковое время, которое в первом приближении определяется порядком, т.е. количеством строк в соответствующем блоке глобальной матрицы.

Разбиение краевой задачи на подзадачи может рассматриваться в трех ипостасях: геометрическом, сеточном и алгебраическом. Наиболее близки между собой две последние интерпретации, поскольку каждому узлу сетки соответствует своя строка матрицы, а ребру сеточного графа соответствуют симметрично расположенные ненулевые внедиагональные элементы матрицы.

Алгебраическая декомпозиция предполагает, что дана только информация о портрете большой разреженной матрицы порядка N , представленной в одном из сжатых форматов, например — CSR (Compressed Sparse Row), когда хранятся только ненулевые элементы матрицы и информация об их расположении. Задача в данном случае сводится к формированию CSR-форматов для заданного числа блочных строк $P \ll N$, причем в одном блоке должны быть собраны наиболее тесно связанные между собой матричные строки. Проблема эта решается методами преобразования графов и является довольно ресурсоемкой.

Более перспективным является сеточная декомпозиция на этапе дискретизации расчетной области. Сеточная структура данных является намного более экономичной, чем АСД, поэтому достаточно большую сеточную расчетную область можно создать в корневом MPI-процессе, а затем из нее сформулировать сеточные подобласти в распределенном по процессорам варианте. Более того, после генерации исходных сеток в подобластях к ним можно применить несколько раз процедуру сгущения и получить семейства иерархических вложенных сеток. После окончания этапа дискретизации выполнение этапа аппроксимации и формирования АСД для подобластей проводится сразу в параллельной (распределенной) версии, без чрезмерной перегрузки корневого MPI-процесса.

Отметим, что проблема декомпозиции на самом верхнем — геометрическом — уровне с информационной точки зрения вообще не представляет трудностей, поскольку объемы

данных в ГСД и ФСД малы, так что они легко могут быть растиражированы по всем процессам.

Рассмотренная выше алгоритмическая структура может составлять часть схемы расчетов серии однотипных задач, которые должны выполняться или одновременно, или только последовательно. Такие вычислительные сеансы с решениями однотипных прикладных проблем могут быть как эпизодические, так и составлять регулярную область деятельности некоторой группы пользователей. В таких случаях целесообразно формирование некоторого «частного облака» с выделением виртуального кластера проблемно-ориентированной конфигурации, производительность которого может быть оптимизирована на основе анализа соответствующего вычислительного процесса.

Следующий уровень организации вычислений в абстрактном плане — это решение не связанных между собою задач независимыми пользователями, объединяемых только общностью используемого прикладного программного обеспечения, т.е. БСМ. Здесь проблемы управления интегрированными ресурсами ВЦКП и планирования компьютерных экспериментов требуют создания некоторой инфраструктуры с использованием не только облачных, но и сетевых технологий. Соответствующие решения требуют еще самих определений и оптимизационных постановок, понимание и актуальность которых неизбежно приходит с погружением в практику массового математического моделирования.

Заключение

Главный вывод данной работы состоит в том, что математическое моделирование представляет актуальнейшую инновационную проблему для всевозможных сфер человеческой деятельности, и для ее решения имеются все объективные предпосылки в достижениях суперкомпьютеров, информационных технологий и математических методов. Однако воплощение видимых здесь перспектив в реальность представляет собой самостоятельную задачу поиска новых прорывных решений, в которых положительный результат невозможен без интегрированных целенаправленных усилий разноплановых профессионалов вычислительного сообщества; компьютерщиков, программистов, математиков и представителей конкретных прикладных областей.

Работа поддержана грантом РФФИ № 14-07-00128, а также грантами Президиума РАН № 15.9-4 и ОМН РАН № 1.3.3-4.

Литература

1. DATA CENTER: URL: www.datacenterknowledge.com (дата обращения: 01.12.2013).
2. Ильин, В.П. Технологии вычислительного программирования / В.П. Ильин, И.Н.Скопин // Программирование. — 2011. — № 4. — С. 53–72.
3. Голубева, Л.А. О программных технологиях в геометрических аспектах математического моделирования / Л.А. Голубева, В.П. Ильин, А.Н. Козырев // Вестник НГУ, серия «Информационные технологии». — 2012. — Т. 10. — № 2. — С. 25–33.
4. Ильин В.П. DELAUNAY: технологическая среда генерации сеток / В.П. Ильин // СибЖИМ. — 2013. — Т. 16, — № 2(54). — С. 83–97.
5. OpenFOAM® — The Open Source Computational Fluid Dynamics (CFD) Toolbox: URL: www.openfoam.com (дата обращения: 01.12.2013).

6. DUNE Numerics: URL: www.dune-project.org (дата обращения: 01.12.2013).
7. OPEN CASCADE: URL: www.opencascade.org (дата обращения: 01.12.2013).
8. SALOME: URL: www.salome-platform.org (дата обращения: 01.12.2013).
9. IESP: URL: www.exascale.org/iesp (дата обращения: 01.12.2013).
10. Чесбро, Г. Открытые инновации / Г. Чесбро. — М., изд. «Поколение». — 2007. — 333 с.
11. OPEN NOVATION: URL: www.opennovation.org (дата обращения: 01.12.2013).
12. ANSYS — Simulation Driven Product Development: URL: www.ansys.com (дата обращения: 01.12.2013).
13. MSC Nastran — Industry Leading Multidisciplinary FEA: URL: www.mssoftware.com/product/msc-nastran (дата обращения: 01.12.2013).
14. Kleppe, A. Software Language Engineering: Creating Domain-Specific Language Using Metamodels / A. Kleppe // N.Y. Addison-Wesley. — 2008. — 207 p.
15. Алексеев, А.С. Комплексный центр математического моделирования: концепция программного обеспечения / А.С. Алексеев, В.И. Гололобов, В.П. Ильин, В.И. Карначук // Новосибирск, препринт N 821; ВЦ СО АН СССР. — 1988. — 43 с.
16. Городничев, М.А. HPC Community cloud: эффективная организация работы научно-образовательных суперкомпьютерных центров / М.А. Городничев, В.Э. Малышкин, Ю.Г. Медведев // Научный вестник НГТУ. — 2013. — № 3(52). — P. 92–96.
17. Каляев, И.А. Семейство реконфигурируемых вычислительных систем с высокой производительностью / И.А. Каляев, И.И. Левин // Вычислительные методы и программирование. — 2009. — Т. 10. — № 1. — С. 207–214.

Ильин Валерий Павлович, д.ф.-м.н., г.н.с., Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН, профессор, Новосибирский Государственный Университет (Новосибирск, Российская Федерация), ilin@sscc.ru

Поступила в редакцию 14 февраля 2014 г.

*Bulletin of the South Ural State University
Series “Computational Mathematics and Software Engineering”
2014, vol. 3, no. 1, pp. 68–79*

ON SOME “OVER-CLOUD” PROBLEMS OF MATHEMATICAL MODELLING

V.P. Il'in, Institute of Computational Mathematics and Mathematical Geophysics of Siberian Branch of the Russian Academy of Sciences, Novosibirsk State University (Novosibirsk, Russian Federation)

The development of integrated applied software environment for mathematical modelling, which is oriented onto solving interdiscipline direct and inverse problems by the wide circle of users in the framework of cloud computing at the supercomputers of petaflops level stands the big set of issues of methodical, technological and organizational types. In this paper, we consider the

conception of basic system of modelling (BSM), whose functionality is supposed in the framework of collective using computing center (CUCC). BSM presents the integrated software environment which supports all main technological stages of large scale computational experiments, adapted to evolution of the problem models and algorithms, as well as to architectures of multi-processor computational systems (MCS), and intended to the long life circle, which is provided by the efficient constructing of applied program packages (APPs). The achievement of the total high performance of CUCC is considered as the constrained optimization problem for the schedule of computational tasks, under taking into account the necessary resources for the particular applications.

Keywords: scalable parallelism, cloud computing, mathematical modelling, multiprocessor computational system, basic system of modelling, applied software.

References

1. DATA CENTER: URL: www.datacenterknowledge.com
2. Il'in V.P., Skopin I.N. *Technologii vychislitel'nogo programmirovaniya.*//Programmirovaniye. – 2011. – №4. – P. 53-72.
3. Golubeva L.A., Il'in V.P., Kozyrev A.N. *O programmnykh technologiakh v geometricheskikh aspektakh matematicheskogo modelirovaniya.*//Vestnik NGU, seria "Informatsionnye technologii". – 2012. – Vol. 10. – № 2. – P. 25-33.
4. Il'in V.P. *DELAUNAY: technologicheskaya sreda generatsii setok.*//SibJIM. – 2013. – Vol.16, №2(54). – P. 83-97.
5. OpenFOAM® – The Open Source Computational Fluid Dynamics (CFD) Toolbox: URL: www.openfoam.com.
6. DUNE Numerics: URL: www.dune-project.org
7. OPEN CASCADE: URL: www.opencascade.org
8. SALOME: URL: www.salome-platform.org
9. IESP: URL: www.exascale.org/iesp
10. Chesbro G. *Otkrytye innovatsii.* – M., izd. "Pokolenie". – 2007. – 333с.
11. OPEN NOVATION: URL: www.opennovation.org
12. ANSYS – Simulation Driven Product Development: URL: www.ansys.com
13. MSC Nastran – Industry Leading Multidisciplinary FEA: URL: www.mssoftware.com/product/msc-nastran
14. Kleppe A. *Software Language Engineering: Creating Domain-Specific Language Using Metamodels.*//N.Y. Addison-Wesley. – 2008. – 207 p.
15. Aleksseev A.S., Gololobov V.I., Il'in V.P., Karnachuk V.I. *Kompleksnyi centr matematicheskogo modelirovaniya: kontseptsya programmno obespecheniya.*//Novosibirsk, preprint №821; VC SOAN SSSR. – 1988. – 43pp.
16. Gorodnichev M.A., Malyshkin V.E., Medvedev Yu. G. *HPC Community Cloud: effektivnaya organizatsiya raboty nauchno-obrazovatelnykh centrov.*//Nauchnyi Vestnik NGTU. – 2013. – №3(52). – P. 92-96.
17. Kalyaev I.A., Levin I.I. *Semeistvo rekonfiguriruemyykh vychislitelnykh system s vysokoi proizvoditelnostyu.*//Vychislitelnye Metody i Programmirovaniye. – 2009. – Vol. 10. – № 1. – P.207-214.

Received 14 February 2013