

Федеральное государственное бюджетное учреждение  
РОССИЙСКИЙ ФОНД ФУНДАМЕНТАЛЬНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ

**СБОРНИК  
НАУЧНО-ПОПУЛЯРНЫХ СТАТЕЙ –  
ПОБЕДИТЕЛЕЙ КОНКУРСА РФФИ  
2013 ГОДА**

**Выпуск 17**

Под редакцией члена-корреспондента РАН  
В.А. Шахнова

Москва  
Молнет  
2014

# Ухабы на дорожной карте математического моделирования

В.П. Ильин

*Валерий Павлович Ильин, главный научный сотрудник Института вычислительной математики и математической геофизики СО РАН, доктор физико-математических наук, профессор Новосибирского государственного университета, руководитель проекта РФФИ № 11-01-00205.*

## **Введение. Успехи порождают проблемы**

В Согласно закону Мура о компьютерной эволюции, 2013 г. является приблизительной «медианой» постпетафлопного периода: 2008 г. – время появления первого в мире «петафлопника», а через 11 лет, в 2019 г., прогнозируется рождение экзафлопной машины. На текущий момент можно сказать, что все идет по плану. Согласно объявленному в ноябре 2012 г. списку суперкомпьютеров TOP-500, в мире имеется 23 многопроцессорные вычислительные системы (МВС) с производительностью выше 1 пфс. (петафлопса, т.е. 1015 «усредненных» арифметических операций в секунду). Другие ключевые характеристики – это теоретическое, или пиковое, быстродействие, объем оперативной памяти, количество вычислительных ядер и потребляемая электрическая мощность. Например, самый мощный в мире компьютер ТИТАН имеет скорость 17,6 пфс., 560 640 ядер, память – 0,71 петабайт и энергопотребление – 8,2 Мвт.

На 2014 г. в мире уже запланировано появление компьютера с реальным быстродействием более 100 пфс., так что «пришествие»

экзафл–опника в 2019 г. наверняка состоится. Количественный рост технического оборудования приносит качественно новую ситуацию для математика-программиста. Во-первых, становится вполне реальным отказ какого-либо устройства во время исполнения алгоритма, и это необходимо учитывать при программировании. Во-вторых, стоимость электроэнергии оказывается очень существенной в общих расходах на эксплуатацию суперкомпьютера. Причем оказывается, что коммуникационные операции намного более энергозатратные, чем арифметические. Отсюда возникает новая проблема построения наиболее «дешевых» алгоритмов в необычном смысле этого слова, т.е. требующих наименьших обменов данными.

Естественно ожидать, что суперкомпьютер петафлопного уровня должен становиться центром коллективного пользования, или центром обработки данных, а сами расчеты могут проводиться в режиме удаленного доступа через Интернет. Такие технологии «облачных» вычислений уже становятся реальностью, и при этом пользователю зачастую предлагается не просто машинное время, а вычислительные услуги с программным обеспечением для решения требуемых задач. В результате какой-либо отраслевой организации уже нет смысла заводить собственный вычислительный центр и структурную службу, а лучше обращаться к «облаку».

Следует отметить, что если за последние 11 лет компьютерные мощности увеличились в 1000 раз, то отнюдь нельзя сказать, что за этот период выросла массовость эффективного применения математического моделирования хотя бы в 100 раз, в том числе и в России. Сейчас в мире существует многомиллиардный рынок прикладных программных пакетов для моделирования самых разных процессов и явлений. Как правило, такие ППП разрабатываются коллективами из многих десятков человек в течение нескольких десятилетий. Широко известны, например, коммерческие продукты MSC NASTRAN, ANSYS, COMSOL, которые успешно используются в задачах гидродинамики, упругопластичности, электрофизики и т.д. Как правило, идеологически – это закрытые инновации [1], почти не приспособленные к модификации пользователями, желающими их адаптировать к своим конкретным условиям. Кроме того, в Интернете имеется большое количество общедоступных программных библиотек и вычислительно-информационных инструментариев, решающих некоторые необходимые, но частные проблемы моделирования. Грубо говоря, имеется огромный программный «зоопарк», и конечному пользователю надо потратить слишком много времени для изучения объемных технических материалов, что практически невозможно для эксперта в предметной профессиональной области.

Ситуация значительно усугубляется, когда речь идет о необходимости эффективного распараллеливания алгоритмов на современных МВС сложнейшей архитектуры. С одной стороны, это неизбежно повышает требования к уровню знаний пользователя, но главное – разработчикам фактически приходится создавать новое поколение прикладного математического и программного обеспечения, рассчитанное на эффективное использование миллионов вычислительных процессоров и ядер. Именно данная проблема ставится во главу угла в Дорожной карте IESP – Международного проекта экзамасштабного программирования. Сейчас эта деятель-

ность расширяется за счет EESI – Европейской экзапроблемной инициативы, а также за счет подключения Национальных экзамасштабных программ Японии и Китая. Критическая проблема в области высокопроизводительных вычислений – это кадры, поскольку цивилизованное сообщество оказалось не готово к техническому прорыву в производстве суперкомпьютеров. Для преодоления этой болезни роста нужны целенаправленные скоординированные усилия в создании новых массовых профессий – разработчиков математического и прикладного программного обеспечения и его квалифицированных пользователей, включая вооруженных современными информационными технологиями физиков, химиков, биологов, машиностроителей и т.д.

### **Четыре инкарнации, или ипостаси, математики**

Главная особенность суперкомпьютерного развития заключается в том, что человечество получило доселе невиданные возможности решения сверхзадач – прямых и обратных, междисциплинарных, с реальной адекватностью моделей и высоким разрешением результатов, – которые открывают новые пути к прорывным фундаментальным знаниям и технологическим инновациям.

Важно понимать, что в этом историческом процессе ключевую роль играет математизация всех научно-производственных сфер, причем в большинстве случаев технологический прогресс в какой-то отрасли связан именно с тем, насколько успешно здесь применяются компьютерные расчеты. Понятно, что сегодня роли и технологии внедрения математики должны быть переосмыслены. В США именно с этой целью создана Рабочая группа по «экзамаматематике». Перед входящими в нее экспертами поставлены следующие задачи:

- проанализировать потенциальные расхождения в понимании миссии прикладной математики для экзавычислений;
- идентифицировать новые алгоритмические подходы, которые ориентированы на экзамасштабные вызовы;
- осмыслить математические возможности для решения новых фундаментальных проблем посредством интегрирования различных математических дисциплин;
- сформировать целостную кооперативную концепцию экзамаматематических исследований, которая включала бы диалог ученых из прикладных областей с учеными-вычислителями.

Чтобы попытаться вникнуть в суть поставленных вопросов, мы представим четыре инкарнации, или ипостаси, математики, которая, как известно, является и царицей наук, и слугой всех наук.

Начнем рассмотрение с теоретической математики, которая закладывает для нас основания о сути изучаемых проблем. Другими словами, речь идет о формировании, изучении и обосновании математической модели процесса или явления: естественного происхождения, научно-технического или социального. Надо сказать, что за последние десятилетия произошло идеологическое сближение теоретических физиков и математиков, и здесь на стыке наук получены замечательные результаты в области топологических мето-

дов, гомологий, внешней алгебры и дифференциальных форм, гамильтонова формализма, прикладной теории групп, дифференциально-геометрического исчисления и т.д. Эти достижения только относительно недавно начали внедряться в приложения, и их широкое воплощение в алгоритмы как раз совпадает исторически с переходом на пета- и экса-компьютеры.

Вторая инкарнация – это вычислительная математика, обеспечивающая нас методами и технологиями получения приближенных численных решений. Данный этап заключается в превращении математической модели в вычислительную модель. Отметим, что эта фундаментальная наука пересекается со смежной областью – информатикой, а структурно делится на свою теоретическую и экспериментальную части. Если в первом случае мы имеем теоремы об аппроксимации, устойчивости, гарантированных оценках точности, вычислительной ресурсоемкости и т.д., то вторая часть – это обязательная проверка теории практикой. В более чем полувековой эпохе перманентной компьютерной революции численные методы переживают бурное развитие, и последние десятилетия не являются исключением. Дискретные формы и внешние конечно-элементные исчисления, методы преобразования графов и символьные вычисления, геометрические численные интеграторы, симплектические алгоритмы решения гамильтоновых систем – вот неполный перечень новых направлений, которые в совокупности с недавними, но ставшими уже классическими, достижениями XX в., составляют современное поколение алгоритмов решения уравнений математической физики. Важно подчеркнуть, что как теоретическая, так и вычислительная математика представляют весь свод математических знаний по прикладным задачам, но каждая из них имеет дело со своими объектами, терминами и целями исследований. А поскольку науки не стоят на месте, то в нашем случае следует исключительно значимый для практики вывод: совокупности математических и вычислительных моделей представляют не застывшие, а динамически меняющиеся структуры, и данная объективная сущность должна гибко поддерживаться средствами их реализации. Что касается численных методов, то с ними ситуация еще «усугубляется» необходимостью их распараллеливания и инвариантного отображения на архитектуры непрерывно меняющихся суперкомпьютеров [2].

Главная ипостась в рассматриваемой нами цепочке – это математическое моделирование, т.е. проведение численных экспериментальных исследований, которые осуществляются на конкретной МВС средствами прикладного программного обеспечения. Понятие компьютерного, или вычислительного, моделирования является фундаментальным и заслуживает особого внимания, поскольку венцом математического творчества является изучение прикладного предметного объекта. Вычислительные эксперименты могут иметь самый разный исследовательский характер, но в первую очередь должны быть проведены методические расчеты на специально подобранных примерах, которые могли бы охарактеризовать качество применяемого орудия моделирования. Здесь спецификациями являются адекватность модели, погрешности и устойчивость методов, оценки и контроль гарантированной точности, вычислительная сложность и ресурсоемкость расчетов. Нахождение

этих характеристик сродни градуировке, или калибровке, инструментария, которая определяет производительность последующей деятельности и является неотъемлемой частью любой инженерной деятельности.

Что касается содержательных вычислений экстремального масштаба, то здесь можно, в первую очередь, выделить расчеты, направленные на получение новых фундаментальных знаний. Например, популярная сейчас проблема – моделирование эволюции или столкновения галактик, и задачи такого рода могут при желании полностью загрузить ресурсы любого суперкомпьютера. Среди практических суперзадач есть не менее критические, и сюда относятся прогностические проблемы, которые в принципе вряд ли будут решены окончательно: долгосрочный прогноз погоды и климата, землетрясений и экономических кризисов, а также различных техногенных катастроф. Однако наиболее востребованными должны быть «рутинные» проблемы: георазведка углеводородов и других полезных ископаемых, медицинские и фармакологические проблемы, материаловедение и нанотехнологии, традиционные и перспективные виды энергетики, проектирование новой техники в машиностроении, электронике, химических технологиях и т.д.

Потенциально применение моделирования в этих и других отраслях – это повышение производительности труда, снижение себестоимости и повышение качества продукции, уменьшение рисков и другие факторы, которые должны поднять планку востребованности суперкомпьютерных расчетов на небывалую высоту, чего в реальной жизни пока не происходит. Здесь можно назвать две основные причины. Первая – это качество инструментов моделирования, на чем мы подробно остановимся позже. Вторая проблема заключается в кадрах, являющимися экспертами в прикладных областях и призванных сделать квалифицированное моделирование своим постоянным атрибутом профессиональной деятельности.

Здесь надо развеять имеющиеся заблуждения, которым подвержены зачастую даже высококвалифицированные специалисты в своих научных или производственных отраслях (будем их условно называть физиками). Типичные рассуждения звучат так: «Мы сами все запрограммируем и посчитаем» или «Дайте нам программиста, и мы с ним все промоделируем». При этом зачастую добавляется или подразумевается: «Все равно математики ничего не понимают в наших задачах». Последнее утверждение, к сожалению, имеет место, и для этого есть объективные обстоятельства. Сейчас маловероятно появление энциклопедистов – уникальных людей, являющихся носителями всех знаний своей эпохи. И по этой же причине физику всей своей реальной жизни не хватит на то, чтобы профессионально овладеть современными вычислительными методами и технологиями. Существует и другая крайность: от математика-вычислителя требуют провести расчеты, образно говоря, завтра, хотя физическая задача может требовать действительно непростого вхождения в суть проблемы. И здесь фактически возникает необходимость преодоления возникшего языкового барьера между физиками и математиками.

В научном плане процесс общения заключается в обмене информацией и по определению является прерогативой информатики. В этом професси-

ональном кругу одни из самых популярных терминов – это трансляторы, конверторы, интерфейсы, в том числе «дружественный пользовательский интерфейс», – которые как раз и осуществляют взаимосогласованность разных программ или диалог между программой и человеком.

## Вычислительная интегрированная среда

Теперь обратимся к опущенной изначально инкарнации, миссия которой состоит в том, чтобы убрать существующие барьеры между математиками–вычислителями и практиками–«модельерами». Речь идет о создании для последних не просто «спасательного круга» в океане алгоритмической и программистской информации, а вполне комфортного операционного окружения, «закрывающего» от физика излишние для него детали и кардинально повышающего эффективность работы конечного пользователя. Мы рассматриваем формирование вычислительной инструментальной среды, или базовой системы моделирования БСМ [3], которая представляла бы общедоступный набор высокопроизводительных методов и технологий, поддерживающих все основные стадии крупномасштабного численного эксперимента:

- геометрическое и функциональное моделирование, т.е. интерактивное описание и модификация исходных постановок задач со сложными геометрическими объектами и контрастными материальными свойствами сред, задаваемых системами дифференциальных и/или интегральных уравнений, начально-краевыми условиями и целевыми функционалами для обратных задач;
- построение адаптивных неструктурированных сеток с возможностями локальных сгущений, многосеточных подходов и автоматической сбалансированной декомпозиции подобластей в целях распараллеливания;
- сеточные и спектральные аппроксимации исходных задач, включая методы конечных объемов и конечных элементов высокой точности;
- решение получаемых систем линейных и нелинейных алгебраических уравнений сверхвысоких порядков с масштабируемым распараллеливанием на МВС;
- оптимизационные алгоритмы условной минимизации для решения обратных задач;
- постобработка и визуализация результатов расчета;
- управление вычислительным процессом и средства принятия решений.

Совокупность программных реализаций этих инструментальных компонент представляет собой экосистему, не ориентированную на конкретные задачи. Но различные прикладные пакеты могут быть оперативно собраны из таких «строительных» блоков, наподобие интеллектуального детского конструктора LEGO. Подчеркнем, что отдельные компоненты данного программного окружения могут разрабатываться независимыми группами, а внутренние интерфейсы должны обеспечиваться согласованными структурами данных (геометрическими и функциональными, сеточными и алгебраическими, и т.д.).

Необходимо отметить, что сейчас в Интернете имеется информация о прототипах аналогичных проектов, например, FOAM и DUNE, однако эти разработки основаны на более ограниченных концепциях.

БСМ предполагается рассчитанной на длительный жизненный цикл и удовлетворяющей некоторым естественным требованиям:

- обеспечение высокого разрешения расчетов с автоматическим контролем гарантированной точности численных решений, а также отсутствие программных ограничений на число степеней свободы в практических задачах;
- отображение структуры алгоритмов на архитектуру гетерогенных МВС и масштабируемый параллелизм на всех стадиях вычислительного эксперимента, без программных ограничений на количество процессоров и ядер;
- расширяемость состава математических моделей, алгоритмов и технологических средств, поддерживающая гибкую адаптацию программного обеспечения к динамической эволюции постановок задач, численных методов и компьютерных платформ;
- совместимость с внешними программными продуктами на основе множественности представлений и конвертации форматов данных;
- поддержка интеллектуальных возможностей конфигурационного управления приложениями на основе концепции метамоделей и проблемно ориентированных языков программирования [4].

Принципиальным моментом является то, что базовая система моделирования создается как проект вычислительного сообщества, открытый и к согласованному участию в нем различных групп разработчиков, и к доступному использованию его содержания в конкретных приложениях. Объем предполагаемых в таком проекте работ, естественно, невозможно осуществить без строгой координации и широкой кооперации, с вовлечением ведущих математиков и программистов. Реальная организация такого окружения естественно может осуществляться в альянсе с имеющимися аналогичными проектами типа упомянутых выше FOAM и DUNE, а также при активном использовании распространенных в Интернете вычислительно-информационных инструментов (генераторов сеток, алгебраических решателей и др.).

## **Заключение. Что делать?**

Резюмируя, можно кратко поговорить на означенную в заголовке традиционную российскую тему. В данном случае вопрос ставится следующим образом: «Как поднять востребованность экстремального моделирования, т.е. значительно активизировать применение высокопроизводительных суперкомпьютеров для решения суперзадач в интересах фундаментальных прорывных проблем и создания новых эффективных отраслевых технологий?» Мы приведем три тезисных соображения на данную тему.

- Во-первых, необходимо изменить парадигму физика-теоретика, который в прошлом веке ассоциировался с человеком, вооруженным справочником таблиц, рядов и интегралов, логарифмической линейкой и ручкой. Сейчас уровень компетенции физика требует знания и умения пользоваться современными функциональными возможностями математического и программного обеспечения суперкомпьютеров. То же самое относится и к отраслевым менеджерам, ответственным за научно-технический прогресс в производствах.

- Во-вторых, необходимо создать новое поколение математического и программного обеспечения, которое стало бы массовым, эффективным и высокопроизводительным орудием моделирования. Главные три качества формируемой инфраструктуры: динамическая поддержка современных вычислительных методов и технологий, эффективная адаптация к непрерывно меняющимся суперкомпьютерным платформам и комфортные эксплуатационные характеристики. Непременное условие реализуемости такой большой разработки – фактически беспрецедентная кооперация и координация ее участников, а также интегрированность самых многообразных инструментальных компонент и приложений.
- Успешность рассматриваемого суперпроекта определяется не только вычислительно-информационными аспектами, но и организационно-финансовыми. Здесь, безусловно, требуется решать много непростых вопросов, и мы можем только обозначить некоторые из них. Стратегии подготовки кадров для суперкомпьютерных технологий в целом просматриваются. Открытыми же являются вопросы национальной поддержки и частных инвестиций, заинтересованности компаний – разработчиков информационных технологий и «тяжелых» игроков на рынке производства суперкомпьютеров.

Ключевой проблемой остается повседневное внедрение современных технологий математического моделирования в такие наукоемкие производства, как электроника, машиностроение, металлургия, новые материалы, разведка и добыча полезных ископаемых и т.д., которое зависит от осознания руководителями госкорпораций и «олигархами» того факта, что тотальные интеллектуальные супервычисления – это реальное ближайшее будущее. А те из круга лиц, принимающих решения, которые первыми придут к такому открытию, станут лидерами новой волны научно-технической революции. И если атрибуты недавних социальных потрясений: Интернет и мобильный телефон – базируются на операциях хранения и передачи информации, то теперь к ним добавляется третье звено – вычислительные преобразования.

## Литература

1. *Чесбро Г.* Открытые инновации. – М., изд. Поколение. – 2007.
2. *Ильин В.П.* Параллельные процессы на этапах петафлопного моделирования.– Вычислительные методы и программирование. – т.12, № 1. – 2011. С. 93–99.
3. *Ильин В.П., Скопин И.Н.* Технологии вычислительного программирования. – Программирование. – № 4, 2011. С 53–72.
4. *Kleppe A.* *Software Language Engineer. Creating Domain-Specific-Languages Using Metamodels.*–Addison-Wesley. – Boston. – 2008.