

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ
ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
«ДОНСКОЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ ТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ»

**«СОВРЕМЕННЫЕ ПРОБЛЕМЫ
МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ,
ОБРАБОТКИ ИЗОБРАЖЕНИЙ И
ПАРАЛЛЕЛЬНЫХ ВЫЧИСЛЕНИЙ 2017»
(СПММОИиПВ-2017)**

Труды
Международной научной конференции

Том I

(пос. Дивноморское, г. Геленджик, Краснодарский край
4 – 11 сентября 2017 г.)

Ростов-на-Дону
ДГТУ
2017

БАЗОВАЯ СИСТЕМА МОДЕЛИРОВАНИЯ (БСМ): КОНЦЕПЦИЯ, АРХИТЕКТУРА И МЕТОДОЛОГИЯ^{§§}

В.П. Ильин^{1,2}, В.С. Гладких¹

¹Институт вычислительной математики и
математической геофизики СО РАН,

²Новосибирский Государственный Университет,
г. Новосибирск, Россия

Аннотация. Рассматриваются архитектура и основные компоненты базовой системы моделирования (БСМ), являющейся высокопроизводительной вычислительной средой разработки для решения прямых и обратных задач на много-процессорных системах (МВС) с распределенной и иерархической общей памятью. Модули системы БСМ содержат средства геометрического и функционального моделирования, генерации сетки, аппроксимаций высокого порядка, быстрых алгебраических решателей и т.д. Эффективное распараллеливание достигается за счет использования гибридных программных средств: MPI, OpenMP; векторизации кода, вычислительных библиотек для графических ускорителей.

Ключевые слова: Базовая система моделирования; среда разработки высокопроизводительных математических приложений; поддержка крупномасштабного вычислительного эксперимента.

Введение. Настоящая ситуация и мировые тренды развития математического моделирования имеют три главные особенности. Первая – это бурный рост суперкомпьютерных мощностей с грядущим появлением в ближайшие годы эксафлопсника (10^{18} операций в секунду и до 10^9 расчетных устройств) предоставляют необозримые пока до конца вычислительно-информационные возможности. Данная эволюция неизбежно сопровождается усложнением архитектуры многопроцессорных вычислительных систем с распределенной и иерархической общей памятью, со сложной организацией многопоточковых и векторизованных операций, с применением различного типа ускорителей и облачных вычислений, без эффективного использования которых не может быть обеспечена общая высокая производительность.

Вторым моментом является резко возросший уровень требований к полноте изучаемых моделей, требующих решения междисциплинарных прямых и обратных начально-краевых задач, описываемых нелинейными

^{§§} Работа поддержана грантами РНФ №14-11-00485П и РФФИ №16-29-1512 офи_м

системами дифференциальных и интегральных уравнений в классических или обобщенных вариационных постановках с реальными данными, включающими сложные конфигурации многомерных расчётных областей с многосвязными кусочно-гладкими граничными поверхностями, многомасштабными геометрическими деталями и контрастными материальными свойствами сред. Крупномасштабный машинный эксперимент для обеспечения эффективного прогностического моделирования предполагает использование иерархии физико-математических моделей для достижения, с одной стороны, высокого разрешения и адекватности численных результатов, а с другой – оперативного и наглядного получения основных свойств исследуемых объектов.

Третий важный аспект текущей исторической ситуации заключается в чрезвычайно активном развитии самой математики: теоретической, прикладной и вычислительной, – а также технологий программирования и искусственного интеллекта. Здесь следует отметить следующие знаковые тенденции: переход к алгоритмам, обладающим законами сохранения субстанции (в том числе на основе гамильтонова формализма) и высокими порядками точности, быстрые методы решения задач вычислительной алгебры сверхбольшой размерности, масштабируемый параллелизм на различных стадиях вычислительного процесса, поддерживающий высокую производительность расчётов средствами гибридного программирования, автоматизация построения алгоритмов с целью повышения производительности труда программистов-математиков.

Совокупный потенциал математического моделирования делает его, наряду с теоретическими изысканиями и натурными экспериментами, основным орудием получения фундаментальных знаний, а также проведения научно-исследовательских и опытно-конструкторских работ (НИОКР) во всевозможных производственных отраслях. Однако, чтобы эти ожидания осуществились, необходимо провести огромный объём работ по созданию программного обеспечения нового поколения, которое должно довести вычислительно-информационные технологии до уровня профессиональных инструментов для широкого круга пользователей.

Традиционными формами создаваемого прикладного программного обеспечения являются открытые (Open Source) или коммерческие пакеты прикладных программ (ППП), ориентированные на решение определенного класса задач, среди огромного разнообразия которых мы приведем только две популярные разработки – ANSYS [1] и Fenics [2]. Имеется также большое количество методо-ориентированных

библиотек программ (NETLIB [3], MKL [4] и многие другие), которые представляют полезный, но вспомогательный материал для решения конкретных задач.

Альтернативной тенденцией, проявляющейся в последние десятилетия, является создание интегрированных программных окружений, открытых для участия в их развитии различных групп разработчиков всевозможных приложений. Примерами таких проектов являются OpenFoam [5], DUNE (Distributed Unified Environment [6]) и MATLAB [7]. В ИВМ и МГ СО РАН в течение ряда лет ведутся исследования по разработке концепции, архитектуры и методологии базовой системы моделирования (БСМ [8], [9]), ориентированной на согласованную поддержку всех основных технологических этапов крупномасштабного вычислительного эксперимента. Целью данной работы является описание общей структуры, компонентов функционального наполнения и принципов построения БСМ.

Функциональное наполнение основных стадий моделирования. Концепция БСМ заключается в создании интегрированной вычислительной среды, состоящей из достаточно автономных компонентов, или блоков, каждый из которых обеспечивает соответствующую технологическую стадию моделирования и взаимодействует с остальными блоками посредством согласованных структур данных. Совокупность этих компонентов образует инструментальное ядро БСМ, главным назначением которого является сборка, или формирование, для каждой решаемой задачи необходимой конфигурации ППП (а при необходимости – и его выполнение), рассчитанного на эффективную реализацию конкретного класса приложений. И вычислительный сеанс состоит из последовательного или циклического выполнения следующих этапов.

Геометрическое и функциональное моделирование. Содержание данной стадии заключается в описании заданной математической модели поставленной задачи для последующего автоматизированного формирования вычислительно-информационной модели, которая в дальнейшем представляется исходным или исполняемым программным кодом. Характерные геометрические объекты – это подобласти, граничные поверхностные сегменты, ребра и вершины, а типичные действия над ними включают сдвиг, поворот, сжатие (растяжение), а также теоретико-множественные операции, связанные в том числе с изменением топологии. В области аналитической и дифференциальной геометрии имеется много красивых результатов, которые ещё ждут своего программного воплощения: здесь и аппарат R-функций харьковской школы В. Л. Рвачева [10], и дифференциальные или

дискретные формы на многообразиях, и оптимизация геометрических структур [11]. С другой стороны, значительный объем геометрических технологий заложен в САПР-овских продуктах (CAD, CAE, CAM, PLM, см. [12]), имеющих широкое мировое распространение и с которыми БСМ должна, естественно, иметь тесное информационное согласование. В частности, здесь таким партнером выбран отечественный проект ГЕРБАРИЙ [13]. Результатом выполнения геометрического моделирования является геометрическая структура данных (ГСД) [14].

Функциональными объектами математической модели являются типы и коэффициенты решаемых уравнений, начальные и краевые условия и другие данные, которые составляют в совокупности функциональную структуру данных (ФСД), отображающую совместно с ГСД всю постановку задачи.

Построение сеток является самостоятельной наукоемкой проблемой, решению которой посвящено огромное количество публикаций, специальных конференций и программных продуктов - общедоступных или коммерческих, например, NETGEN [15] и GMESH [16]. Наиболее распространенными являются адаптивные сетки, подстраивающиеся под геометрические особенности расчетной области и дифференциальные свойства искомого решения. В практических задачах такие сетки являются неструктурированными, в которых свойства соседства узлов могут быть указаны только перечислением. В работе [17] описаны основные характеристики библиотеки DELAUNAY, представляющие собой интегрированное окружение для генерации квазиструктурированных сеток, в которых сеточная расчетная область может состоять из подобластей со своими различными типами подсеток. Функциональное наполнение библиотеки включает как оригинальные алгоритмы, так и согласованное использование внешних генераторов сеток. Итогом работы DELAUNAY является сеточная структура данных (ССД), которая с учетом ГСД и ФСД полностью определяет дискретизированную постановку задачи. Отметим такой важный технологический аспект, что для эффективного масштабируемого распараллеливания на базе декомпозиции областей именно на данном этапе необходимо проводить формирование сеточных подобластей и соответствующих распределенных по процессорам ССД, в соответствии с априорной оценкой трудоемкости вычислений в каждой подобласти.

Аппроксимация исходных уравнений в теоретическом плане составляет наиболее ответственную стадию моделирования. Самые распространенные здесь подходы – это методы конечных объемов (МКО [18]), конечных элементов (МКЭ [19]) и разрывные алгоритмы Галеркина различных порядков точности, которые все имеют

универсальную технологическую базу – параллельные поэлементные принципы вычисления локальных матриц и сборки глобальных матриц в типовых разреженных форматах. Результирующие алгебраические структуры данных (АСД) для больших задач формируются распределенными по сеточным подобластям и по соответствующим процессорам. В БСМ вся реализация аппроксимационных методологий осуществляется библиотекой CHEBYSHEV [20].

Решение алгебраических задач – это наиболее ресурсоемкий вычислительный этап, реализуемый в БСМ с помощью библиотеки KRYLOV [21]. Современные подходы к реализации больших разреженных СЛАУ базируются на двухуровневых предобусловленных итерационных методах сбалансированной декомпозиции областей в подпространствах Крылова, ускоряемых с помощью методов грубосеточной коррекции, наименьших квадратов, агрегации, дефляции и малоранговой аппроксимации исходных матриц, а также путём оптимизации параметров пересечения подобластей и интерфейсных условий на их внутренних границах. Масштабируемый параллелизм достигается средствами гибридного программирования, путем использования моделей MPI, OpenMP, графических ускорителей и векторизации вычислений, а также с помощью буферизации данных для минимизации коммуникационных потерь между подобластями. Эффективная реализация алгоритмов на основе АСД, представляемой с помощью сжатых разреженных форматов типа CSR (Compressed Sparse Row) с активным использованием функций библиотеки Sparse BLAS. Архитектура библиотеки KRYLOV поддерживает взаимодействие с внешними программными продуктами типа PETSc.

Общие принципы и технические требования к построению БСМ. Концептуальные принципы построения БСМ исходят из определения её как открытого методо-ориентированного интегрированного вычислительно-информационного окружения для решения широкого класса задач математического моделирования, ориентированного на длительный жизненный цикл с активным применением различными группами разработчиков и конечных пользователей. На основе такой общей формулировки можно определить следующие технические требования, которые должны обеспечить успешность рассматриваемого программного проекта.

- Гибкая расширяемость состава моделей решаемых междисциплинарных проблем, а также методов решения прямых и обратных задач, без программных ограничений на число степеней свободы и на количество используемых вычислительных процессоров и ядер.

- Адаптируемость к эволюции компьютерных архитектур. Компонентные технологии обеспечения согласованности внутренних и внешних межмодульных интерфейсов.

- Гибкие расширяемые структуры данных, согласованные с имеющимися распространенными форматами и поддерживающие возможности переиспользования внешних программных продуктов.

- Многоязыковость и кросс-платформенность программного функционального наполнения, открытость к согласованному участию в проекте различных групп разработчиков.

- Высокая производительность программного кода с масштабируемым параллелизмом на основе средств гибридного программирования на гетерогенных МВС с распределенной и иерархической общей памятью.

- Наличие разнообразных пользовательских интерфейсов с ориентацией на широкое применение в различных производственных сферах.

Принципы и требования к БСМ сформировались из опыта воплощения новых математических методик в виде ППП для применения в практических задачах. Возрастающие требования к детальности математических моделей и скорости их реализации в программном коде привели к тому, что увеличение эффективности труда оказалось в фокусе мирового внимания, а создание на основе накопленного опыта инструментария является важной задачей текущего столетия. Особо отметим, что одним из факторов дальнейшего успеха проекта является формирование сообщества разработчиков и пользователей, обеспечивающего дальнейшее аккумулирование опыта и ускорение развития среды разработки.

Библиографический список

1. ANSYS. URL: www.ansys.com (дата обращения: 31.07.2017)
2. FEniCS. URL: <http://fenicsproject.org/> (дата обращения: 31.07.2017)
3. Netlib. URL: <http://www.netlib.org/> (дата обращения: 31.07.2017)
4. Intel ®.Mathematical Kernel Library. URL: <http://software.intel.com/en-us/intel-mkl> (дата обращения: 31.07.2017)
5. OpenFOAM. URL: <http://www.openfoam.com> (дата обращения: 31.07.2017)
6. DUNE. <http://www.dune-project.org> (дата обращения: 31.07.2017)
7. MATLAB. URL: <https://www.mathworks.com/products/matlab.html> (дата обращения: 31.07.2017)

8. Ильин, В.П. О производительности и интеллектуальности суперкомпьютерного моделирования. / Ильин В.П., Скопин И.Н. // Программирование. – 2016. – № 1. – С. 10-25.
9. Ильин, В.П. Фундаментальные вопросы математического моделирования. / Ильин В.П. // Вестник РАН. – 2016. – т. 86. – № 4. – С. 26-36.
10. Кравченко, В.Ф. Алгебра логики, атомарные функции и вейвлеты в физических приложениях / Кравченко В.Ф., Рвачев В.Л. // М.: Физматлит, 2006.
11. Delfour, M. Metrics, Analysis, Differential Calculus, and Optimization. / Delfour M., Zolesio J. Shapes and Geometries. // Philadelphia: SIAM – 2011.
12. Ушаков, Д.М. Введение в математические основы САПР. / Ушаков Д.М. // Новосибирск: Изд-во ЗАО "ЛЕДАС". – 2008.
13. «Гербарий». URL:
<http://tflex.ru/about/publications/detail/index.php?ID=3846> (дата обращения: 31.07.2017)
14. Голубева, Л.А. О программных технологиях в геометрических аспектах математического моделирования / Голубева Л.А., Ильин В.П., Козырев А.Н. // Вестник НГУ. Серия "Информационные технологии". – 2012. – Т. 10. – С. 25-33.
15. Schoberl J. Netgen – an advancing front 2D/3D-mesh generator based on abstract rules / Schoberl J. // Computing and Visualization in Science. 1997. – V.1. – P. 41-52.
16. GMESH. URL: <http://gmsh.info/> (дата обращения: 31.07.2017)
17. Ильин, В.П. DELAUNAY: технологическая среда генерации сеток / Ильин В.П. // СибЖИМ. – 2013. – Т. 16. – С. 83-97.
18. Ильин, В.П. Методы конечных разностей и конечных объемов для эллиптических уравнений. / Ильин В.П. // Новосибирск: Изд-во ИВМиМГ СО РАН. – 2001.
19. Ильин В.П. Методы и технологии конечных элементов. / Ильин В.П. // Новосибирск: Изд-во ИВМиМГ СО РАН. – 2007.
20. Бутюгин, Д.С. Chebyshev: принципы автоматизации построения алгоритмов в интегрированной среде для сеточных аппроксимаций начально-краевых задач. / Бутюгин Д.С., Ильин В.П. // Труды Международной Конференции ПАВТ-2014. Челябинск: Изд-во ЮУрГУ. – 2014. – С. 42-50.
21. Бутюгин, Д.С. Функциональность и технологии алгебраических решателей в библиотеке Krylov. / Бутюгин Д.С., Гурьева Я.Л., Ильин В.П. и др. // Вестник ЮУрГУ. Серия "Вычислительная математика и информатика". – 2013. – Т. 2. – С. 92-105.

22. Ильин, В.П. О проблемах решения больших СЛАУ. / Ильин В.П. // Записки научных семинаров ПОМИ РАН – 2015 – т.439 – С. 112-127.
23. Ильин, В.П. О численном решении прямых и обратных задач электромагнитной электроразведки / Ильин В.П. // Сибирский журнал вычислительной математики – 2003 – Т. 6 – С. 381-391
24. Ильин, В.П. О компонентных технологиях высокопроизводительного математического моделирования. / Ильин В.П. // Труды Междунар. конф. ПАВТ-2015. Екатеринбург:УФУ,ИММ УрО РАН – 2015 – С. 166-171.

METADATA

Title: Basic modeling system (BMS): the concept, architecture and methodology.

Authors: V.P. Il'in, V.S. Gladkih.

Abstract: The paper covers the architecture and main functional components of the basic system of modeling (BSM), as the integrated high-performance computational framework to solve interdisciplinary direct and inverse problems on the multi-processor computational system (MCS) with distributed and shared hierarchical memory. BSM subsystems support the stages of geometric and functional modelling, grid generation, high orders approximations, fast algebraic solutions, etc. The scalable parallelism is provided by means of hybrid programming models: MPI, OpenMP, computational libraries for graphic accelerators and vectorization. The BSM main principles are discussed to have wide applications and long life cycle.

Key words: Basic modelling system; framework for high-performance computation; large-scale computational experiment.