УДК 519.6

И.В. СЕРГИЕНКО, И.Н. МОЛЧАНОВ, А.Н. ХИМИЧ

ИНТЕЛЛЕКТУАЛЬНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ ВЫСОКОПРОИЗВОДИТЕЛЬНЫХ ВЫЧИСЛЕНИЙ

Ключевые слова: *приближенные исходные данные, достоверность решения, параллельные алгоритмы, интеллектуальное программное обеспечение, интеллектуальный MIMD-компьютер*.

ВВЕДЕНИЕ

Высокопроизводительная вычислительная техника в развитых странах становится одним из основных средств научных и инженерных исследований. В [1] приведены некоторые характеристики высокопроизводительных компьютеров.

С расширением возможностей компьютеров для научных и инженерных исследований усложняются проблемы их создания и эксплуатации. По прогнозам западных экспертов, число транзисторов на кристалле за период 1999–2012 гг. возрастет в 70 раз. Увеличение числа процессоров в этой ситуации будет означать значительный рост коммуникационных потерь и снижение эффективности параллельных компьютеров. В настоящее время имеются существенные различия за счет коммуникационных потерь между максимальной и эксплуатационной производительностями (например, пиковая производительность суперкомпьютеров компании IBM Roadrunner (BladeCenter QS22/LS21 Cluster, PowerXCell 8i 3.2 Ghz / Opteron DC 1.8 GHz, Voltaire Infiniband) $R_{\text{peak}} = 1456$ TFLOPS, а эксплуатационная производительность $R_{\max} = 1105$).

Создание алгоритмов и программ для высокопроизводительных компьютеров, насчитывающих несколько тысяч или даже несколько сотен тысяч процессоров (ядер), является сложной задачей и требует значительных интеллектуальных усилий и времени. Кроме того, проблемы достоверности компьютерных решений с ростом объемов решаемых задач на таких компьютерах также усугубляются. В Институте кибернетики накоплен значительный опыт разработки численных методов с параллельной организацией вычислений [2–5].

Известно, что в ряде случаев при решении научных и инженерных задач на компьютерах пользователи получают машинные решения, не содержащие физического смысла. Это происходит по многим причинам, но прежде всего из-за погрешности в исходных данных, различия свойств математических и машинных моделей задач, арифметики и машинной арифметики и т.д. Проблема достоверности компьютерных решений остается и далее одной из практически важных. Исследование полных погрешностей рассмотрено в работах [6–11].

Другой, не менее важной, стороной практической реализации технологии высокопроизводительных вычислений является создание программного обеспечения уровня конечного пользователя — интеллектуальных программных средств, обеспечивающих общение с компьютером на языке предметной области и автоматизацию всех этапов решения задачи на компьютере (алгоритмизация, программирование, решение задачи в условиях приближенных исходных данных с анализом достоверности компьютерных решений). Методология создания интеллектуального программного обеспечения для исследования и решения научно-технических задач разработана в Институте кибернетики имени В.М. Глушкова НАН Украины [12–18].

В развитие идеологии интеллектуального программного обеспечения для исследования и решения задач разработана концепция интеллектуальных MIMD-компьютеров для научно-технических расчетов, архитектура и системное программное обеспечение которых поддерживают интеллектуальное программное обеспечение. Эта концепция реализована в проекте Инпарком, выполненном совместно с Государственным научно-производственным объединением «Электронмаш» [18–22] (http://www.inparcom.com).

В данной статье анализируются проблемы математического и технологического характера, которые появляются при проведении на современных высокопроизводительных компьютерах (суперкомпьютерах) вычислительного эксперимента. На конкретных примерах демонстрируется различие свойств математических и машинных моделей задач вследствие приближенного характера исходных данных и ограниченной длины машинного слова, обсуждается специфика методов компьютерного исследования машинных моделей задач. Анализируются проблемы реализации численных алгоритмов с параллельной организацией вычислений. Как средство преодоления трудностей, связанных с исследованием и решением машинных моделей задач в условиях приближенных исходных данных на компьютерах параллельной архитектуры, предлагаются интеллектуальные технологии на основе интеллектуального программного обеспечения, поддерживаемого архитектурными решениями интеллектуального компьютера и его системного программного обеспечения, позволяющего существенно перераспределить работы по постановке и решению задач между пользователем и компьютером по сравнению с традиционной технологией.

ПРОБЛЕМЫ ДОСТОВЕРНОСТИ КОМПЬЮТЕРНЫХ РЕШЕНИЙ

Математические модели, описывающие прикладные задачи, всегда содержат погрешности в исходных данных. Но в подавляющем большинстве случаев при исследовании математических уравнений предполагается неявно, что исходные данные задачи точно заданы. Характерной особенностью математических моделей с приближенными исходными данными является то, что их математические свойства априори неизвестны. В пределах заданного уровня погрешности могут быть совместные и несовместные задачи, как корректно, так и некорректно поставленные, плохо и хорошо обусловленные. При этом машинная модель задачи, которую в конечном итоге приходится решать на компьютере, всегда имеет приближенный по отношению к исходной задаче характер (из-за наследственной погрешности исходных данных, погрешности дискретизации, погрешности ввода числовых данных о задаче в компьютер).

Влияние погрешности исходных данных на точность полученных решений проиллюстрируем на простейших примерах.

Свободные члены систем уравнений

$$100x_1 + 500x_2 = 1700, \ 100x_1 + 500x_2 = 1700,$$

$$15x_1 + 75{,}01x_2 = 255, \ 15x_1 + 75{,}01x_2 = 255{,}03$$

различаются в пятой значащей цифре. Решением первой системы является $x_1 = 17, \ x_2 = 0$, а второй — $x_1 = 2, \ x_2 = 3$. Отметим, что определитель обеих систем равен единице.

Не всегда близость элементов матриц обеспечивает близость их собственных значений. Так, собственными значениями матрицы $\begin{pmatrix} 1 & 10^4 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$ являются $\lambda_1 = 1, \lambda_2 = 1$, а матрицы $\begin{pmatrix} 1 & 10^4 \\ 10^{-4} & 1 \end{pmatrix}$ — $\lambda_1 = 2, \ \lambda_2 = 0$. В этом случае из-за возмущения элементов меняется каноническая форма матрицы от жордановой клетки до матрицы простой структуры.

Уравнение $x^{1/3} - 2x^{1/6} + 1 = 0$ имеет один действительный корень $x_1 = 1$, а уравнение $x^{1/3} - 2x^{1/6} + 0{,}99 = 0$, отличающееся от предыдущего уравнения лишь погрешностью свободного члена $\varepsilon = 10^{-2}$, имеет два действительных корня — $x_1 = 1{,}771561, x_2 = 0{,}531441$.

Такие примеры можно привести также из других классов задач вычислительной математики.

Следующий пример показывает, что увеличение точности задания исходных данных далеко не всегда может приводить к уточнению результатов решения. Чтобы проиллюстрировать этот факт, рассмотрим матрицы

$$H = \begin{pmatrix} 4 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \overline{H} = \begin{pmatrix} 4 & 0 \\ 0 & 10^{-10} \end{pmatrix}.$$

Очевидно, что соответствующие псевдообратные матрицы

$$H^{+}=\begin{pmatrix}1/4 & 0\\ 0 & 0\end{pmatrix},\quad \overline{H}^{-1}=\begin{pmatrix}1/4 & 0\\ 0 & 10^{10}\end{pmatrix}$$

будут иметь сильно отличающиеся элементы.

Используя представление

$$H^{+}=\sum_{i=1}^{m}\lambda_i^{+}t_i t_i^T \quad ,$$

где t_i — собственные векторы матрицы H, λ_i — собственные значения,

$$\lambda_i^{+}=\begin{cases}1/\lambda, \text{ если } \lambda\neq 0,\\ 0, \quad \text{ если } \lambda=0,\end{cases}$$

легко понять этот факт, поскольку функция λ_i^{+} имеет разрыв в точке $\lambda=0$. Причем, как следует из представления H^{+}, различие между H^{+} и $\overline{H}^{-1}$ будет тем больше, чем меньше погрешность в исходных данных. Выше приведены примеры плохо обусловленных и некорректных задач в условиях приближенных исходных данных.

В этом случае чрезвычайно усложняет ситуацию тот факт, что большое математическое различие между матрицами полного и неполного ранга существует только в математически идеальном мире вещественных чисел. Поскольку действия над матрицами проводятся с округлением, то это различие становится неопределенным. Таким образом, некоторая невырожденная матрица может стать в компьютере вырожденной. В то же время очень вероятно, что вырожденная в действительности матрица за счет погрешностей округлений будет превращена в близкую, но невырожденную.

Проблема состоит в том, чтобы в машинной среде определить свойства решаемой задачи и сформировать машинный алгоритм получения приближенного решения математической задачи как для корректных задач, так и для некорректных, как плохо, так и хорошо обусловленных.

Анализ особенностей реализации компьютерной арифметики показал, что:

— континуум всех вещественных чисел в компьютере аппроксимируется конечным множеством конечных дробей (уже при вводе численных данных возникают ошибки округления);

— феномен «машинного нуля» порождает ряд трудностей при реализации вычислительных алгоритмов (любой современный компьютер имеет наименьшее положительное число, которое может быть в нем представлено, и все числа, меньше по абсолютной величине этого числа, заменяются нулем);

— арифметические операции на компьютере отличаются от математических: законы ассоциативности и дистрибутивности не выполняются ни на одном современном компьютере, а законы коммутативности в операциях с плавающей запятой выполняются только при правильной процедуре округления.

Таким образом, аксиоматика математики, в том числе вычислительной математики, отличается от аксиоматики машинной математики.

В ходе численного решения уравнений машинных моделей задач алгоритмами прямых методов, которые представлены в компьютерах в машинных кодах, в зависимости от длины мантиссы машинного слова происходит накопление погрешностей вычислений. Влияние вычислительной погрешности на решение систем линейных алгебраических уравнений видно на примере решения системы алгоритмами методов Банча и Гаусса.

После ввода системы линейных алгебраических уравнений

$$Ax=b,$$

где A и b имеют вид

$$A=\begin{matrix}0.1348531574394464 & 0.1878970588235294 & 0.1909117647058824 & 0.1779264705882353\\ 0.187897058823294 & 0.262 & 0.265 & 0.247\\ 0.1909117647058824 & 0.265 & 0.281 & 0.266\\ 0.1779264705882353 & 0.247 & 0.266 & 0.255\end{matrix}$$

$$b=0.3516,\ 0.4887,\ 0.5105,\ 0.4818,$$

а решение

$$x = 6.66216\ldots e12,\ -4.01689\ldots e12,\ -1.66554\ldots e12,\ 9.79729\ldots e11,$$

в компьютере возникает система

$$A_1 x_1 = b_1$$

с матрицей A_1 и правой частью b_1, имеющих вид

$$A_1 = \begin{matrix} 0.134853157439446397 & 0.187897058823529389 & 0.190911764705882391 & 0.177926470588235297 \\ 0.187897058823529389 & 0.262000000000000010 & 0.265000000000000013 & 0.246999999999999999 \\ 0.190911764705882391 & 0.265000000000000013 & 0.281000000000000027 & 0.266000000000000014 \\ 0.177926470588235297 & 0.246999999999999997 & 0.266000000000000014 & 0.255000000000000004 \end{matrix}$$

$$b_1 = 0.3516,\quad 0.4887,\quad 0.5105,\quad 0.4818,$$

точное решение которой:

$$x_1 = 3.547\ldots e12,\ -2.138\ldots e12,\ -8.867\ldots e12,\ 5.216\ldots e11.$$

Машинные решения этой системы алгоритмом метода Банча

$$x_{\text{Banch}} = 2.810\ldots e12,\ -1.694\ldots e12, \ldots -7.027\ldots e11,\ 4.133\ldots e11$$

и алгоритмом метода Гаусса

$$x_{\text{Gauss}} = 3.164\ldots e12,\ -1.908\ldots e12, \ldots -7.911\ldots e11,\ 4.653\ldots e11$$

весьма далеки как от решения машинной модели задачи, так и от математического ее решения.

Кроме того, при разработке вычислительных схем и программ возникает проблема неоднозначной машинной реализации математических операций.

Рассмотрим уравнение

$$f(x) = 0{,}001 - 100e^{-\left(10 + \frac{x}{5}\right)} = 0, \quad 0 \le x \le 10,$$

имеющее математическое решение

$$x = 5(5 \ln 10 - 10) = 7{,}567.$$

Для решения этого уравнения можно использовать метод простой итерации, реализуемый по формуле

$$x_{k+1} = x_k \ = 0{,}001 + 100e^{-\left(10 + \frac{x_k}{5}\right)},$$

так как выполнены достаточные условия сходимости данного метода

$$\varphi'(x) = \left| \ 1 - 20e^{-\left(10 + \frac{x}{5}\right)} \ \right| < 1, \quad 0 \le x \le 10.$$

Решение, полученное на компьютере с длиной машинного слова четыре десятичных знака и условием окончания итераций $\dfrac{|x_{k+1} - x_k|}{|x_k|} < \inf |f'(x)| \dfrac{\varepsilon}{1+\varepsilon}$, для $\varepsilon = 10^{-3}$ было получено за 3145 итераций: $x = 5{,}005$, в то время как математическое решение: 7,565, т.е. относительная погрешность машинного решения 33,8%. Увеличение длины машинного слова до восьми десятичных знаков по той же программе и тем же условиям окончания итераций для $\varepsilon = 10^{-3}$ позволило получить решение за 33 237 итераций: $x = 7{,}559\,634\,1$ с относительной погрешностью 0,53%.

Исходя из изложенного, приходим к необходимости исследования математических свойств машинных моделей задач.

Например, для систем линейных алгебраических уравнений в целях выбора необходимого алгоритма решения и получения достоверных результатов целесообразно:

— исследовать корректность постановки математических задач;

— определить или оценить число обусловленности сформулированной системы линейных алгебраических уравнений;

— оценить погрешность машинного решения.

Определяющим фактором при исследовании корректности систем линейных алгебраических уравнений является ранг матрицы, в частности, для квадратных матриц — исследование матрицы на сингулярность. Но использование классического определения ранга матрицы сводится, как известно, к вычислению определителя. Однако точно вычислить определитель матрицы на компьютере невозможно из-за огромного объема операций вычислений и погрешностей машинной реализации, которые исказят истинный ранг матрицы. Сравнение вычисленного определителя с машинным нулем, очевидно, не даст правильного результата. Поэтому, исходя из компьютерной математики, разработаны алгоритмы определения ранга матрицы в условиях приближенно заданных исходных данных, в том числе и в условиях машинной погрешности.

Таким образом, для каждого класса математических задач с приближенно заданными исходными данными возникает необходимость создания компьютерного инструментария для исследования математических свойств машинных моделей задач, построения алгоритма их решения с учетом структуры и архитектуры компьютеров и оценки достоверности полученных результатов.

Вопросам достоверности получения компьютерных решений задач различных классов посвящены работы [6–11].

ИНТЕЛЛЕКТУАЛЬНОЕ ЧИСЛЕННОЕ ПРОГРАММНОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ

Исследования в области машинной математики являются теоретической основой создания интеллектуального численного и прикладного программного обеспечения [12–18].

Под интеллектуальным программным обеспечением решения класса научно-технических задач будем понимать комплекс программ, позволяющий на языке предметной области сформулировать в компьютере задачу, автоматически исследовать свойства машинной модели задачи с приближенно заданными исходными данными, в соответствии с выявленными свойствами и с учетом математических и технических возможностей компьютера определить необходимое для решения задачи число процессоров и построить алгоритм решения, сформировать для решения задачи конфигурацию из процессоров параллельного компьютера, синтезировать программу параллельных вычислений, решить задачу, оценить достоверность полученного машинного решения и визуализировать результаты решения на языке предметной области.

С функциональной точки зрения интеллектуальное программное обеспечение в автоматическом режиме реализует исследовательскую функцию и адаптивную настройку алгоритма, синтезированной программы и архитектуры компьютера на свойства решаемой задачи и получение компьютерного решения с оценкой достоверности.

Алгоритмической основой интеллектуального программного обеспечения являются алгоритмы исследования и решения задач с приближенно заданными исходными данными и оценкой погрешности получаемых компьютерных решений, в частности в [2–5].

Возможности использования компьютеров для исследования математических свойств машинных моделей задач и их решения автоматически построенными алгоритмом и программой были показаны в ходе реализации проектов ISPAR (Интеллектуальное программное обеспечение для исследования и решения задач вычислительной математики на параллельных компьютерах) [23] и ISKON (Интеллектуальное программное обеспечение для исследования и решения задач анализа прочности конструкций) [24], выполнявшихся для Немецкого центра по авиакосмическим полетам (DLR).

На рис. 1 представлена схема интеллектуального программного обеспечения Inparsoft, а также его взаимодействия с прикладным программным обеспечением.

Структурно Inparsoft состоит из интеллектуального программного средства Inpartool для автоматического исследования и решения задач и библиотеки интеллектуальных программ Inparlib.

Интеллектуальное программное средство Inpartool предназначено для исследования и решения основных классов задач вычислительной математики, а именно:

— систем линейных алгебраических уравнений;
— алгебраической проблемы собственных значений;
— уравнений и систем нелинейных уравнений;
— систем обыкновенных дифференциальных уравнений с начальными условиями.

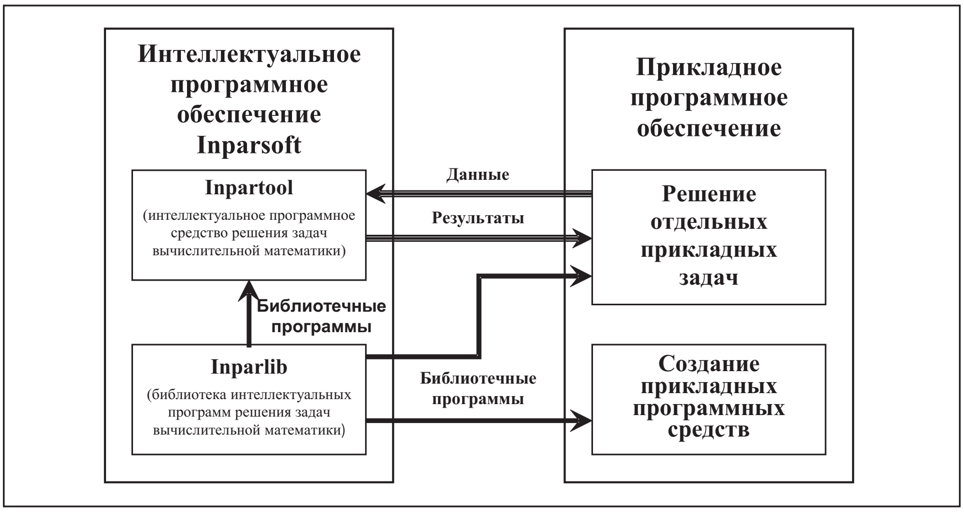

Рис. 1

Inpartool реализует следующие возможности:

• исследование математических свойств и решение задач с приближенными исходными данными;

• автоматический выбор эффективных алгоритмов в соответствии с выявленными свойствами решаемых задач, математическими и техническими характеристиками MIMD-компьютера;

• исследование достоверности компьютерных решений;

• реализация принципа скрытого параллелизма.

Реализация принципа скрытого параллелизма обеспечивает:

• автоматическое управление распределением и перераспределением информации между процессами; исключение эффекта Гайдна;

• автоматическое определение необходимого для эффективного решения задачи числа процессов;

• автоматическое построение эффективной топологии межпроцессорных связей.

Программное средство Inpartool состоит из четырех отдельных компонентов — каждый для исследования и решения задач одного из четырех названных основных классов задач вычислительной математики.

В Inpartool в классе «Системы линейных алгебраических уравнений», кроме исследования и решения СЛАУ с оценками достоверности результатов, предусматривается также решение следующих задач: обращение/псевдообращение матрицы с оценками достоверности результатов, вычисление оценки числа обусловленности матрицы, сингулярное разложение матрицы, вычисление ранга матрицы. Эти задачи решаются для таких видов матриц: плотные невырожденные, плотные симметричные положительно-определенные, ленточные симметричные положительно-определенные, ленточные симметричные положительно-полуопределенные, прямоугольные произвольного ранга.

В классе «Алгебраическая проблема собственных значений» исследуются и решаются следующие задачи: полная стандартная АПСЗ $Ax = \lambda x$ с трехдиагональной симметричной матрицей; полная стандартная АПСЗ с плотной симметричной матрицей; частичная (нахождение нескольких минимальных собственных значений и соответствующих им собственных векторов) стандартная АПСЗ с ленточной симметричной положительно-определенной матрицей; частичная обобщенная АПСЗ $Ax = \lambda Bx$ с ленточными симметричными положительно-определенными матрицами. Исходные данные каждой из этих задач могут быть приближенными. Для всех перечисленных задач Inpartool исследует достоверность полученных результатов.

В классе «Системы нелинейных уравнений» в Inpartool решаются следующие задачи: нахождение всех корней одного уравнения на заданном интервале, вычисление решения системы уравнений в заданной области. В окрестности искомого решения (корня одного уравнения или решения системы) проводится исследование свойств задачи и на этой основе оцениваются наследственная и вычислительная погрешности полученного решения задачи. При автоматическом способе решения используется глобально сходящийся итерационный метод, при интерактивном способе пользователю предлагается для выбора список итерационных методов.

В классе «Системы обыкновенных дифференциальных уравнений» исследуются и решаются задачи с начальными условиями для системы обыкновенных дифференциальных уравнений (СОДУ) первого порядка. Inpartool позволяет интегрировать как обычные, так и «жесткие» СОДУ с различным порядком точности, в том числе с любой наперед заданной точностью. Inpartool всегда проводит исследование «жесткости» системы обыкновенных дифференциальных уравнений, вычисляет константу Липшица, оценивает наследственную и вычислительную погрешности полученного решения задачи. При автоматическом способе решения задачи в соответствии с выявленными свойствами Inpartool сам выбирает численный метод решения. При интерактивном способе решения пользователю выдается информация о свойствах СОДУ и предлагается для выбора список численных методов, которые позволяют вычислить решение задачи с требуемой точностью.

Функционально Inparsoft является, с одной стороны, инструментом для автоматического исследования и решения перечисленных основных классов задач вычислительной математики, с другой — параллельные программы библиотеки Inparlib служат материалом (как reuse-программы) для создания прикладного программного обеспечения решения научных и инженерных задач. С точки зрения пользователя Inpartool — продукт конечного пользователя, Inparlib — инструмент пользователя-разработчика прикладных программных систем.

На рис. 2 представлена блок-схема клиент-серверной архитектуры Inpartool. Клиентская часть состоит только из диалоговой системы, в серверную часть входят системы, обеспечивающие локальный и удаленный доступ пользователей к Inpartool, а также системы, с помощью которых на MIMD-компьютере проводится исследование и решение задач с приближенными данными.

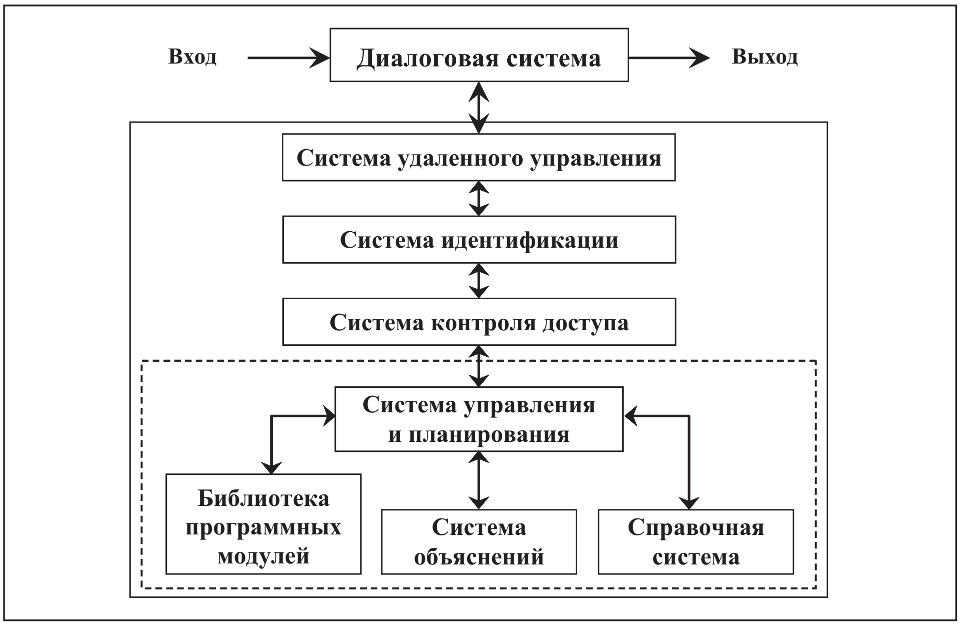

Рис. 2

Далее приведен фрагмент протокола автоматического исследования и решения задач на параллельном MIMD-компьютере Инпарком:

```
PROBLEM:
      solving of the linear algebraic system
      with a symmetric positive defined matrix
```

```
    Data:
         - matrix  dimension                            =  1000
         - number  of  the  right-hand  side
             of  the  systems                           =  1
         - maximum  relative  error
             of  the  matrix  elements                  =  0.00000e+00
         - maximum  relative  error
             of  elements  of  the  right-hand  sides   =  0.00000e+00

Process  of  investigating  and  solving

      Method:
              - Cholesky  decomposition
      RESULTS:
            !!!  THE  MATRIX  IS  NOT  POSITIVE  DEFINED  !!!

          Number  of  processors:  4
Method:
        - Gauss  elimination  with  partial  pivoting
      RESULTS:
                !!!  THE  MATRIX  IS  MACHINE-SINGULAR  !!!
          Number  of  processors:  4
Method:
                - singular  value  decomposition
                    of  a  general  matrix
      RESULTS:
          SOLUTION  WAS  CALCULATED
        first  4  components  of  solution  (vector  1)  are:

      -3.7747582837255322e-010       1.0000000000000031e+000
       3.8857805861880479e-010       3.6489927986770073e-010

The  vector(s)  of  solution  are  successfully  stored  in  the  file
result.out

          Error  estimations:     4.99145e-08
          Properties:

      - estimation  of  conditional  number:  7.49316e+07
      - matrix  rank:  999

        Number  of  processors:  12
```

Из протокола видно, что в качестве пробного алгоритма исследования задачи с помощью Inpartool выбран алгоритм метода Холецкого как наиболее экономичный для симметричных матриц. Однако оказалось, что матрица не является положительно-определенной, и для дальнейшего исследования с помощью Inpartool выбран алгоритм метода Гаусса. Матрица СЛАУ идентифицирована как машинно-вырожденная. Для такой СЛАУ, используя сингулярное разложение матрицы, получено нормальное псевдорешение компьютерной задачи. Задача решена с оценками достоверности решения. В ходе решения задачи автоматически устанавливалось оптимальное количество процессов для каждого алгоритма, строилась эффективная топология, в соответствии с алгоритмом решения распределялись (перераспределялись) данные между процессами.

КОНЦЕПЦИЯ ИНТЕЛЛЕКТУАЛЬНОГО MIMD-КОМПЬЮТЕРА ДЛЯ ВЫСОКОПРОИЗВОДИТЕЛЬНЫХ ВЫЧИСЛЕНИЙ

Интеллектуальное программное обеспечение автоматизирует процесс проведения расчетов в задачах численного моделирования и обеспечивает эффективное решение задач за счет соответствующего алгоритмического и программного инструментария. Очевидно, что наибольшая эффективность достигается, когда архитектура компьютера согласуется с возможностью программно-алгоритмических средств.

Исследовательскую функцию при решении задач усилит возможность компьютера и его архитектуры (количество процессоров, виртуальная топология), а также математических характеристик процессоров (длина машинного слова, память) адаптироваться к свойствам решаемой задачи.

Отметим, что знание свойств решаемых задач вычислительной математики, к которым сводится 90% всех инженерных и научных задач, дает возможность не только оценить достоверность получаемых решений, но и существенно сократить время решения задач. Сокращение времени достигается за счет алгоритмов, учитывающих свойства решаемых задач, архитектуру процессоров и топологию параллельного компьютера, а также возможности перестройки топологии из процессоров кластерных компьютеров («линейка»», «решетка», «кольцо», «ветвящееся дерево» и т.д.).

Таким образом, компьютер и операционная среда должны:

• поддерживать интеллектуальное численное программное обеспечение;

• иметь автоматически перенастраиваемую топологию параллельного компьютера в зависимости от свойств задачи.

Такую возможность позволяет реализовать интеллектуальный MIMD-компьютер, архитектура которого поддерживает интеллектуальное программное обеспечение.

Технологическая схема исследования и решения научных и инженерных задач (рис. 3) предполагает, с одной стороны, создание и исследование физических, математических и дискретных моделей задач, с другой — разработку методов и алгоритмов в соответствии со свойствами задач, вычислительных схем, учитывающих структуру и архитектуру высокопроизводительных компьютеров и их процессоров, запись вычислительных схем в языках программирования и ввод исходных данных о задаче и программы решения в компьютер. При использовании традиционной технологии решения задач компьютер применяется только на последнем этапе решения.

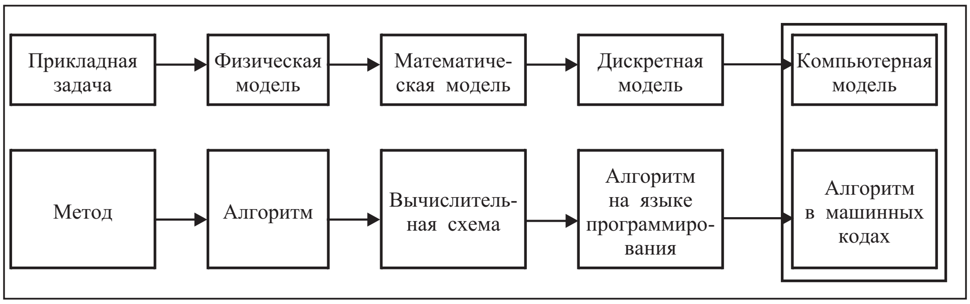

Рис. 3

Вместо традиционной схемы интеллектуальный компьютер реализует схему (рис. 4), в которой компьютер вместо пользователя выполняет все необходимые исследования, создает алгоритм, топологию и программу параллельных вычислений.

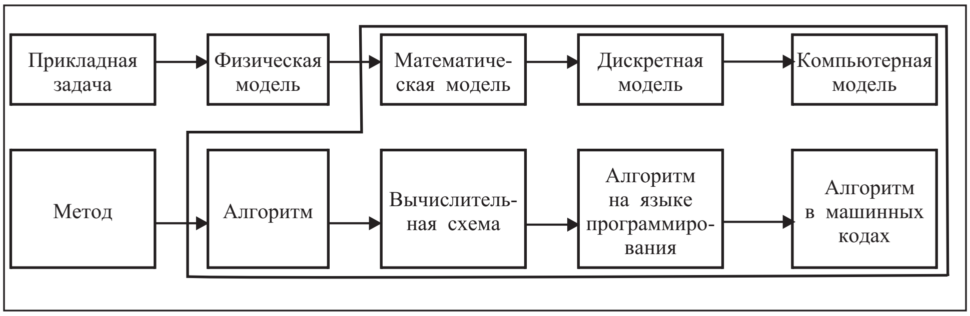

Рис. 4

Кроме того, интеллектуальные компьютеры имеют следующие преимущества:

— освобождение пользователя от работы по исследованию задачи, созданию алгоритмов, написанию и отладке программ, что сокращает время постановки и решения задач не менее чем в 100 раз;

— постановка задачи пользователя в компьютере на языке предметной области;

— решение задачи на MIMD-компьютере с реализацией принципа скрытого параллелизма, при котором режим работы пользователя на мультипроцессорной системе (многоядерной) не отличается от работы на однопроцессорном компьютере и обеспечивает автоматизацию следующих процессов: выбор оптимального числа процессоров и построение эффективной топологии компьютера по результатам исследования свойств задачи; распределение исходной информации о задаче по процессорам в соответствии с построенным параллельным алгоритмом; реализация обменов информацией между процессорами, их синхронизация и т.д.);

— получение машинного решения с оценкой его достоверности, а также, по желанию пользователя, всех свойств решаемой машинной модели задачи с приближенно заданными исходными данными;

— сокращение времени машинного исследования и решения научно-технических задач по сравнению с решением той же задачи на MIMD-компьютере с тем же числом процессоров и на той же элементной базе, но с традиционной параллельной архитектурой.

Интеллектуальный компьютер облегчает общение конечного пользователя с компьютером, повышает производительность труда по постановке, исследованию и решению научно-технических задач, освобождает от необходимости исследовать свойства математических и дискретных моделей задач, создавать алгоритмы и программы с параллельной организацией вычислений, а также анализировать полученные результаты.

СЕМЕЙСТВО ИНТЕЛЛЕКТУАЛЬНЫХ РАБОЧИХ СТАНЦИЙ ИНПАРКОМ

Представленная концепция интеллектуальных MIMD-компьютеров реализована в совместном проекте Института кибернетики им. В.М. Глушкова НАНУ и ГНПП «Электронмаш». Создано семейство интеллектуальных рабочих станций Инпарком, занимающее промежуточную нишу между супер- и персональными компьютерами.

Как знаниеориентированный компьютер Инпарком получает и хранит знания о свойствах компьютерной модели задачи и на основании этого автоматически строит алгоритм решения, формирует топологию из процессоров MIMD-компьютера и создает код программы параллельных вычислений, а по окончании вычислений оценивает достоверность полученных результатов.

В состав комплекса Инпарком входит: хост-система, обрабатывающая часть, коммуникационная среда.

Хост-система осуществляет управление многопроцессорным (многоядерным) вычислительным ресурсом, общесистемный мониторинг, общение с терминальными сетями пользователей, визуализацию результатов решения задачи и реализацию той части процесса вычислений и обработки данных, которая не распараллеливается («плохо» распараллеливается). Хост-система состоит из хост-компьютеров (Xeon Quad-Core GHz, 64 bit длина машинного слова, 8 Gbyte оперативной памяти, 72 Gbyte памяти на дисках каждый), внешнего оборудования и может входить в локальную или глобальную сеть.

Обрабатывающая часть, поддерживающая решение задачи с организацией параллельных вычислений, — однородная масштабируемая структура, состоящая из множества процессоров (с собственной оперативной и дисковой памятью), объединенных коммуникационной средой межпроцессорного взаимодействия. Обрабатывающая часть может включать вычислительные узлы (Xeon Quad-Core GHz, 64 bit длина машинного слова, 2 Gbyte оперативной памяти, 36 Gbyte памяти на дисках каждый).

Коммуникационная среда состоит из Gigabit Ethernet; Infiniband и гиперкуба. Программное обеспечение предусматривает три уровня:

— операционная среда, поддерживающая интеллектуальное программное обеспечение;

— интеллектуальное численное программное обеспечение для исследования и решения задач вычислительной математики с приближенно заданными исходными данными;

— прикладное программное обеспечение, например для исследования и решения задач анализа прочности конструкций.

В основу операционной среды положены бесплатные решения GNU/Linux. Однако пользователь может выбрать один из трех вариантов инсталлированных

ОС: Linux, Windows XP SP2 или Linux+Windows. По желанию пользователя хост автоматически переключается на Linux и Windows с перезагрузкой узлов. Версия Linux на основе Scientific Linux 4.2 оптимизирована под аппаратуру Инпаркома.

В ядре параллельного компьютера — системе передачи сообщений — реализован стандарт де-факто MPI. В Linux установлен MVAPICH, оптимизированный под Infiniband, и LAM MPI, в Windows — MPICH. Для поддержки максимального числа приложений сторонних пользователей настроена распространенная система передачи сообщений PVM.

Бесплатный компилятор GCC в составе Linux поддерживает Си/С++, Фортран и Java. Операционная среда включает Интернет-сервер Apach с поддержкой приложений на языке PHP, СУБД MySQL, стандартные математические библиотеки (в том числе ScaLAPACK), тесты (Linpack, Scali), сетевую файловую систему.

Операционная среда обеспечивает:

— формирование задания и его запуск на выбранных вычислительных узлах;
— мониторинг всего компьютера и выполняемых заданий;
— сохранение и визуализацию протоколов параллельных расчетов;
— запуск приложения (параллельной программы) на хост-компьютере;
— работу через локальную сеть и/или Интернет с удаленным доступом;
— разработку параллельных программ;
— администрирование доступных пользователю частей сетевой файловой системы.

Интеллектуальное численное программное обеспечение для исследования и решения задач вычислительной математики с приближенно заданными исходными данными поддерживает: автоматический режим полного исследования и решения задач; решение задач выбранной программой из библиотеки. Реализованы классы задач:

— системы линейных алгебраических уравнений;
— алгебраическая проблема собственных значений;
— системы нелинейных алгебраических и трансцендентных уравнений;
— системы обыкновенных дифференциальных уравнений с начальными условиями.

Прикладное программное обеспечение, например, для исследования и решения задач анализа прочности конструкций может содержать средства:

— формирования геометрической модели конструкции на основе моделей, имеющихся в банке данных;
— формирования в компьютере математической модели задачи;
— формирования конечно-элементной или конечно-разностной модели задачи;
— визуализации конечно-элементного покрытия элемента или исследуемой конструкции;
— формирования в автоматическом режиме дискретной модели задачи и рассылки данных по процессорам выбранной топологии;
— обращения к интеллектуальному численному программному обеспечению для исследования и решения сформулированных конечно-элементных задач на MIMD-компьютере с визуализацией полученных результатов;
— анализа достоверности полученного конечно-элементного или конечно-разностного решения.

Интеллектуальные рабочие станции Инпарком могут применяться как средство отладки параллельных программ для суперкомпьютеров.

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ НЕКОТОРЫХ ОБЪЕКТОВ И ПРОЦЕССОВ

Использование комплекса Инпарком целесообразно для численного моделирования объектов и процессов различной природы. Численный эксперимент позволяет рассмотреть несколько вариантов исследуемого объекта и в результате спланировать натурный эксперимент. Так, на Инпарком-64 промоделировано обтекание планера для АН-148, отработано натурное моделирование этого планера в аэродинамической трубе ЦАГИ. Корреляция данных численного и натурного экспериментов не превысила 3%, а сам натурный эксперимент обошелся КБ Антонова в 3–4 раза дешевле, чем без предварительного моделирования.

Создан программный комплекс для автоматизации прочностных расчетов уникальных сооружений в гражданском и промышленном строительстве (http://www.lira.com.ua). На комплексе Инпарком проанализирована прочность конструкций двухкорпусного 80-этажного офисного центра в Москве [25]. Показано существенное сокращение времени расчетов с использованием компьютерных технологий параллельных вычислений.

Совместно с Институтом электросварки им. Е.О. Патона НАН Украины решена задача нахождения кинетики температурных напряжений и деформаций (напряженно-пластическая задача) при сварке титановых балок пола в конструкциях самолетов [26]. Использование технологии высокопроизводительных вычислений дало существенную экономию времени проведения расчетов.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Возросшие возможности вычислительной техники (высокая производительность и значительные объемы запоминающих устройств) позволяют решать новые научно-технические задачи и организовывать численные эксперименты, существенно сокращающие средства и время разработки объектов современной техники [27, 28].

Теоретическое исследование возникающих математических и дискретных моделей является необходимым, но недостаточным условием получения достоверных компьютерных решений, так как из-за погрешностей свойства машинных моделей всегда будут отличаться от свойств дискретных моделей. Теоретическое исследование свойств математических и дискретных моделей, а также создание алгоритмов и программ параллельных вычислений, как показал опыт, для задач средней сложности требует двух-трех лет работы и не меньше двух специалистов, а для сложных задач — пяти-шести лет и трех-четырех сотрудников. Причем в традиционной технологии решения прикладных задач достоверность выявляется в ходе сопоставления данных численных и натурных экспериментов.

Отметим, что организация натурных экспериментов требует затрат времени и средств на два-три порядка больше, чем проведение численного эксперимента.

Интеллектуальные компьютеры с параллельной организацией вычислений являются эффективным инструментом для автоматического исследования, решения и анализа получаемых результатов задач инженерии и науки, максимально освобождая из этих процессов конечного пользователя и существенно повышая его производительность.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. http://www.top-500.org
2. Численные методы для многопроцессорного вычислительного комплекса ЕС / В.С. Михалевич, И.Н. Молчанов, И.В. Сергиенко и др.; Под ред. И.Н. Молчанова. — М.: ВВИА им. проф. Н.Е. Жуковского, 1986. — 401 с.
3. Молчанов И.Н. Введение в алгоритмы параллельных вычислений. — Киев: Наук. думка, 1990. — 127 с.
4. Исследование с помощью многопроцессорного вычислительного комплекса распределенных систем с большими объемами связанных данных / И.В. Сергиенко, В.С. Дейнека, А.Н. Химич и др. — Киев: Ин-т кибернетики им. В.М. Глушкова НАН Украины, 2005. — 32 с. — (Препр. / НАНУ. Ин-т кибернетики им. В.М. Глушкова; 2005-1).
5. Параллельные алгоритмы решения задач вычислительной математики / А.Н. Химич, И.Н. Молчанов, А.В. Попов и др. — Киев: Наук. думка, 2008. — 247 с.
6. Воеводин В.В. Вычислительные основы линейной алгебры. — М.: Наука, 1977. — 303 с.
7. Молчанов И.Н. Машинные методы решения задач прикладной математики. Алгебра, приближение функций, обыкновенные дифференциальные уравнения. — Киев: Наук. думка, 2007. — 550 с.
8. Химич А.Н., Яковлев М.Ф., Герасимова Т.А. Некоторые вопросы решения систем обыкновенных дифференциальных уравнений на MIMD-компьютерах // Кибернетика и системный анализ. — 2007. — № 2. — С. 175–182.
9. Химич А.Н., Яковлев М.Ф. О полной погрешности расчета линейных математических моделей итерационными методами // Там же. — 2002. — № 5. — С. 1–12.
10. Химич А.Н. Оценки полной погрешности решения систем линейных алгебраических уравнений для матриц произвольного ранга // Компьютерная математика. — 2002. — № 2. — С. 41–49.

11. Химич А.Н., Николаевская Е.А Анализ достоверности компьютерных решений систем линейных алгебраических уравнений с приближенно заданными исходными данными // Кибернетика и системный анализ. — 2008. — № 6. — С. 83–95.
12. Молчанов И.Н. Проблемы интеллектуализации MIMD-компьютеров // Там же. — 1998. — № 1. — С. 37–46.
13. Молчанов И.Н., Химич А.Н., Чистякова Т.В. Алгоритмическое обеспечение и вычислительные возможности интеллектуального программного средства LINSYST // Там же. — 1998. — № 3. — С. 40–50.
14. Молчанов И.Н., Яковлев М.Ф. Алгоритмические основы создания интеллектуального программного средства исследования и решения задач Коши для систем обыкновенных дифференциальных уравнений // Там же. — 2001. — № 5. — С. 3–16.
15. Интеллектуальный интерфейс для исследования и решения задач прочностного анализа конструкций / И.Н. Молчанов, Е.Ф. Галба, А.В. Попов и др. // Проблемы программирования. — 2002. — № 1–2. — С. 532–537.
16. Интеллектуальная система для исследования и решения матричных задач на собственные значения / И.Н. Молчанов, Т.А. Герасимова, О.В. Попов и др. // Там же. — 2004. — № 2–3. — С. 570–576.
17. Інтелектуальний інтерфейс для дослідження та розв'язування задач обчислювальної математики з наближено заданими вхідними даними на MIMD-комп'ютері / І.М. Молчанов, Є.Ф. Галба, О.В. Попов та ін. // Там же. — 2000. — № 1–2. — С. 102–112.
18. Численное программное обеспечение MIMD-компьютера Инпарком / А.Н. Химич, И.Н. Молчанов, В.И. Мова и др. — Киев: Наук. думка, 2007. — 221 с.
19. Молчанов И.Н. Интеллектуальные компьютеры — средство исследования и решения научно-технических задач // Кибернетика и системный анализ. — 2004. — № 1. — С. 174–178.
20. Интеллектуальный MIMD-компьютер для эффективного исследования и решения задач / И.Н. Молчанов, А.Н. Химич, А.В. Попов и др. // Искусственный интеллект. — 2004. — № 1–2. — С. 532–537.
21. Молчанов И.Н., Мова В.И., Стрюченко В.А. Семейство интеллектуальных рабочих станций для исследования и решения задач науки и инженерии // Тр. Междунар. конф. «50 лет Институту кибернетики имени В.М. Глушкова НАН Украины». — Киев, 2008. — С. 323–327.
22. Молчанов И.Н., Перевозчикова О.Л., Химич А.Н. Опыт разработки семейства кластерных комплексов Инпарком // Кибернетика и системный анализ. — 2009. — № 6. — С. 88–96.
23. Moltschanow I., Galba Ye., Popov A., et al. Intelligente Umgebung zur Untersuchung und Lösung wissenschaftlich-technischer Aufgaben auf Parallelrechnern (ISPAR). — 01 IR 64113 des BMBF. — Germany, 1998. — 192 S.
24. Moltschanow I., Galba Ye., Popov A., et al. Untersuchung und Lösung der ersten Hauptrandaugabe der Elastizitätstheorie auf MIMD-Rechnern, 2. Zwischenbericht zum Projekt ISKON, Fördermaβnahme. — 01IR 9053 des BMBF. — Germany, 2001. — 33 S.
25. Химич А.Н., Полянко В.В., Попов А.В., Рудич О.В. Решение задач расчета прочности конструкций на MIMD-компьютере // Искусственный интеллект. — 2006. — № 4. — С. 138–147.
26. Математическое моделирование на MIMD-компьютерах физических процессов при сварке / В.И. Махненко, А.В. Попов, А.П. Семенов и др. // УСиМ. — 2007. — № 6. — С.80–87.
27. Дородницын А.А. Проблемы математического моделирования в описательных науках // Кибернетика. — 1983. — № 4. — С. 6–10.
28. Сергієнко І.В. Методи оптимізації та системного аналізу для задач трансобчислювальної складності. — Київ: Акад. періодика, 2010. — 293 с.

Поступила 27.05.2010