

Интеллектуальное программное обеспечение для решения научно-технических задач в GRID-системе

Химич А.Н.¹, Попов А.В.¹, Чистякова Т.В.¹, Яковлев М.Ф.¹

¹Институт кибернетики им. В.М. Глушкова, просп. Глушкова, 40, Киев, Украина

dept150@insyg.kiev.ua

Аннотация. В работе дано описание интеллектуального программного обеспечения для решения задач вычислительной математики с приближенно заданными исходными данными на параллельном компьютере MIMD-архитектуры - библиотеки интеллектуальных программ LIBINPAR для исследования и решения задач вычислительной математики с приближенно заданными исходными данными. Интеллектуальные программы библиотеки реализуют исследование характерных свойств компьютерных моделей задач с целью определения соответствия задачи выбранному методу решения, автоматическое построение топологии параллельного компьютера из заданного количества процессоров и распараллеливание вычислений, решение задачи с оценками достоверности результатов. Описывается архитектура дистанционной учебно-тренинговой системы, предназначенной для обучения пользователей в GRID-среде использованию программ библиотеки LIBINPAR, функционирующей на кластерном комплексе СКИТ.

Ключевые слова

Интеллектуальное программное обеспечение, библиотека интеллектуальных программ, приближенные исходные данные, GRID-среда, дистанционная учебно-тренинговая система.

1 Введение

В Институте кибернетики им. В.М. Глушкова НАН Украины создано интеллектуальное программное обеспечение для решения на MIMD-компьютерах базовых задач вычислительной математики с приближенно заданными исходными данными, к которым сводится большинство научно-технических задач.

Достаточно большой набор существующего в мире программного обеспечения по данной проблематике не решает многих проблем, возникающих при их использовании. Прежде всего, широко известные программные средства решения задач вычислительной математики ориентированы на точно заданные исходные данные, т.е. они не учитывают погрешности входных данных решаемой задачи, хотя задача, которая решается на компьютере (компьютерная задача), имеет всегда приближенный характер. Проблема заключается в том, чтобы в компьютерной среде исследовать свойства машинной задачи и создать компьютерный алгоритм получения приближенного решения, адекватного решению математической задачи.

При разработке алгоритмов и программного обеспечения для параллельных компьютеров, которые в настоящее время являются основным инструментом компьютерного моделирования, кроме выше упомянутых проблем математического характера, неотложными становятся проблемы, связанные с учетом архитектуры и технических особенностей компьютеров, выбором оптимального количества процессов для эффективного по времени решения задачи, распределением данных между процессами, синхронизацией вычислений и т. д.

Самостоятельное решение этих проблем требует от конечного пользователя значительных интеллектуальных усилий и знаний в непрофильных для него предметных областях. Таким образом, возникает необходимость создания программного обеспечения уровня конечного пользователя - интеллектуального программного обеспечения, которое исключает пользователя из этапов алгоритмизации и программирования задач, автоматизацию процесса вычисления решения в условиях приближенных исходных данных с анализом достоверности полученных результатов.

Все перечисленные проблемы в значительной мере решаются в предлагаемом интеллектуальном программном обеспечении для решения основных классов задач вычислительной математики, разработанном для компьютеров MIMD-архитектуры.

2 Назначение и состав интеллектуального программного обеспечения

Программное обеспечение - библиотека интеллектуальных программ LIBINPAR реализует исследование и решение задач с приближенно заданными исходными данными следующих классов [1]:

- системы линейных алгебраических уравнений;
- алгебраическая проблема собственных значений;
- нелинейные уравнения и системы;
- задачи с начальными условиями для систем обыкновенных дифференциальных уравнений (задачи Коши).

Предметная область по каждому классу задач включает в себя широкий спектр задач, методов, алгоритмов, вычислительных схем с учетом приближенного характера исходных данных [2, 3]. Для систем линейных уравнений с матрицами различной структуры, кроме решения с оценками достоверности, вычисляются обратная матрица, сингулярные числа, ранг матрицы, оценка числа обусловленности и т. д. Для алгебраической проблемы собственных значений (обычной и обобщенной) решается как частичная, так и полная проблема собственных значений с матрицами различной структуры (полностью заполненной, ленточной или разреженной). Для систем нелинейных алгебраических и трансцендентных уравнений вычисляются локальное число обусловленности, условия окончания итерационных процессов, точность полученного решения. При исследовании и решении систем обыкновенных дифференциальных уравнений с начальными условиями можно интегрировать как обычные, так и жесткие системы уравнений с различным порядком точности, в том числе с любой наперед заданной точностью. По желанию пользователя можно провести исследования жесткости систем, вычислить константу Липшица и т. д.

С точки зрения использования библиотека интеллектуальных программ LIBINPAR предназначена для исследования и решения задач по программам, которые самостоятельно выбирает пользователь.

Функционально интеллектуальные программы библиотеки LIBINPAR обеспечивают постановку задач с приближенно заданными исходными данными, исследование математических свойств машинных моделей задач и проверку их соответствия области применения алгоритма решения, получение решения с оценкой достоверности или мотивированный отказ в решении. При этом обеспечивается автоматическое построение топологии параллельного компьютера и распределение исходных данных по процессам с учетом требований программы решения, равномерная загрузка процессов, синхронизация обменов данными между процессами, минимизация коммуникационных потерь, которые обусловлены необходимостью обменов информацией между процессами.

С точки зрения конечного пользователя программы библиотеки LIBINPAR являются повторно используемыми компонентами (reuse-компонентами) при решении прикладных задач, где задачи вычислительной математики являются промежуточным или завершающим этапом.

В состав библиотеки LIBINPAR вошли драйверные программы, реализующие исследование свойств задач с приближенно заданными исходными данными и их решение с оценками достоверности компьютерных результатов. Они в свою очередь вызывают функциональные модули, реализующие логически законченные части соответствующих алгоритмов, которые также входят в состав библиотеки. Кроме того, в состав библиотеки входят некоторые вспомогательные программы, использование которых позволяет автоматически распределять входные массивы данных по процессам так, как это необходимо для реализации выбранного алгоритма, а также сбор результатов решения от всех процессов в одном из них, сохранения решения задачи в файле и т.д.

Программные модули написаны на Си на удвоенной точности с использованием системы параллельного программирования MPI. Кроме того, имеются некоторые программы, реализующие параллельные алгоритмы решения задач с произвольной разрядностью [4]. Например, если матрица системы линейных алгебраических уравнений в компьютере оказалась плохо обусловленной, то для получения достоверного решения зачастую требуется более высокая разрядность. Для этого можно использовать программы, позволяющие повышать разрядность вычислений.

3 Дистанційна учебно-тренінгова система по використанню бібліотеки LIBINPAR

Дистанційна учебно-тренінгова система по використанню бібліотеки LIBINPAR призначена для оволодіння користувачем в ґрид-середі необхідними знаннями і навичками вирішувати науково-технічні задачі на СКІТ-3, використовуючи програми з даної бібліотеки.

Учебно-тренінгова система це - апаратно-програмний комплекс, призначений для навчання користувачів використанню того чи іншого об'єкта. Розрізняють автономні і дистанційні (сетеві) учебно-тренінгові системи. Дистанційне навчання це - процес набуття знань і навичок з допомогою освітньої середовища, базуючої на використанні інформаційних технологій, забезпечуючих обмін навчальною інформацією на відстані.

Основна задача розглядаваної учебно-тренінгової системи заключається в ефективному представленні знань, необхідних для користувачів при вирішенні задач на СКІТ, використовуючи бібліотеку LIBINPAR. Вона побудована за принципом навчання на прикладах. Навчання на прикладах - це вид навчання, при якому користувачу надаються демонстраційні задачі з позитивними і негативними результатами рішення задач по різних програмах з даної бібліотеки. Крім того до результату рішення додаються докладні пояснення: якими методами було досліджено задачу, які характерні її властивості були виявлені, чому отримано такий результат рішення і т. д. В разі отримання негативного результату пояснюється, чому задача не була вирішена, а також даються рекомендації про подальші дії користувача по отриманню рішення.

Якщо користувач хоче тільки ознайомитися з програмним складом бібліотеки LIBINPAR, йому надається список програм і коротке описання їх функціональних можливостей.

Якщо користувач вже користувався програмами з бібліотеки, то йому достатньо вибрати необхідну інформацію про програму, яку він буде використовувати, з описанням входних і вихідних параметрів.

В разі, коли користувач хоче оволодіти навичками роботи з бібліотекою або окремою програмою, йому надається більш докладна інформація про програми і набір навчальних і демонстраційних задач, які користувач може запустити на виконання самостійно.

Для функціонування учебно-тренінгової системи в ґрид-середі створено набір ґрид-сервісів [5, 6]: (сервіси даних / вирахувань, інформаційні сервіси, сервіси знань). Ці набори будуть доступні користувачам в Національній ґрид-сегменті в онлайн-режимі через Інтернет. Ґрид-сервіс по визначенню Open Science Grid [7] - це спосіб доступу до ресурсу або агента. На рівні сервісів користувачам надаються програмні інтерфейси для роботи в ґрид-середі.

При розробці сервісів ставились наступні вимоги:

- сервіси можуть бути корисними кожен сам по собі або вони можуть бути об'єднані, щоб надати єдиний високоуровневий сервіс;
- сервіси спілкуються зі своїми клієнтами, обмінюючись повідомленнями: фактично, сервіси розрізняються / ідентифікуються відповідно до сукупності повідомлень, які вони можуть прийняти, і відповідей, які вони можуть надіслати запитуючій стороні;
- сервіс може бути повністю незалежним або може залежати від існування інших сервісів, або яких-небудь ресурсів, наприклад, баз даних.

В даній учебно-тренінговій системі сервіси даних / вирахувань надають вихідні дані навчальних задач і різноманітні програмні засоби для забезпечення навчального процесу. Інформаційні сервіси забезпечують користувачів відомостями про призначення і склад бібліотеки, докладним описанням кожної програми, різними демонстраційними і навчальними задачами і т. д. Сервіси знань надають необхідні знання з предметних областей, які розглядаються. Це в першу чергу, навчальні матеріали по описанню алгоритмів, які реалізовані в бібліотеці, глосарій термінів з розглядаваних предметних областей, які використовуються в даній програмній системі, пояснення процесу рішення задачі і оцінок достовірності отримуваних результатів в формі протоколу вирахувального процесу, а також обробка помилок, які можуть бути допущені користувачами при самостійній підготовці навчальних задач до їх запуску на СКІТ.

В учебно-тренінговій системі передбачено навчання запуску задач на виконання з використанням бібліотеки LIBINPAR по наступній схемі:

1. Подготовка main-программы, которая вызывает необходимые программные модули из библиотеки.
2. Компиляция и линкование main-программы из личного каталога пользователя, подключив библиотеку.
3. Запуск задания на СКИТ-3 через Интернет, заполняя стандартный паспорт задания (см. по адресу <http://icybcluster.org.ua/>), или в Национальной в грид-среде.

Поскольку Национальный грид-сегмент в настоящее время работает под управлением ПО промежуточного уровня middleware ARC (Advanced Resource Connector) Nordugrid [8], то управление задачами, ресурсами и данными можно организовать с помощью специальных утилит командной строки.

Создается паспорт задания с описанием задачи, используя специальный язык Extended Resource Specification Language (xRSL), например mytask.xrsl:

```
(jobName = "lpp")
(executable = "lpp.sh")
(cluster = "skit3")
(stdout = "lpp.out")
(stderr = "lpp.err")
(count = 8)
```

Здесь lpp - имя задания, lpp.out – файл с программными выводами результатов решения, lpp.err – файл с информацией про сбои при запуске задания, если они были, count – количество запущенных процессов. Наличие параметра cluster заставляет грид-систему запускать задачу на указанном кластере, lpp.sh – имя скриптового файла для получения выполнимого задания, который имеет вид:

```
#!/bin/sh
sbatch - pscit3 - Jlpp - nArun.ompilpp
```

Команда mytask.xrsl возвращает уникальный идентификатор задания, который пользователь может использовать для отслеживания прохождения задачи. Есть также ряд других команд: посмотреть прохождение задания, удалить задание и т. д.

4 Заключение

Математическое моделирование процессов из различных предметных областей (механической, физической, химической, экономической и др. природы) может быть представлено как декомпозиция предметных областей и реализовано с помощью программного обеспечения уровня "готовых решений" для стандартных задач вычислительной математики: систем линейных алгебраических уравнений, алгебраической проблемы на собственные значения, нелинейных уравнений и систем, систем обыкновенных дифференциальных уравнений с начальными условиями. Разработка программно-алгоритмического обеспечения такого качества в виде библиотеки программ LIBINPAR обеспечивает процесс автоматического распараллеливания при решении прикладных задач на основе готовых решений.

Интеллектуальные программы библиотеки LIBINPAR реализуют автоматическое исследование математических свойств компьютерных моделей задач с целью определения соответствия задачи выбранному методу решения, декомпозицию данных по процессам, распараллеливание вычислений, решение задачи с оценками достоверности результатов.

Предлагаемая учебно-тренинговая система позволяет пользователям в Национальной грид-среде приобретать необходимые знания для эффективного использования библиотеки интеллектуальных программ LIBINPAR как в Интернете, так и в грид-среде.

Работа выполняется в рамках проекта № 69-87 «Интеллектуализация информационных технологий кластерных вычислений в грид-среде», в рамках Государственной целевой научно-технической программы «Внедрение и использование грид-технологий на 2009-2013 годы» [9].

Список литературы

- [1] А.Н. Химич, И.Н. Молчанов, В.И. Мова и др. Численное программное обеспечение интеллектуального компьютера Инпарк. – Киев: *Наук. думка*, 2007. – 221 с.
- [2] И.Н. Молчанов Машинные методы решения прикладных задач. Алгебра, приближение функций, обыкновенные дифференциальные уравнения. – Киев: *Наук. думка*, 2007. – 550 с.
- [3] А.Н. Химич, И.Н. Молчанов, А.В. Попов и др. Параллельные алгоритмы решения задач вычислительной математики. – Киев: *Наук. думка*, 2008. – 248 с.
- [4] Е.А. Николаевская, Т.В. Чистякова. Програмно-алгоритмічні методи підвищення точності комп'ютерних розв'язків // *Кибернетика и системный анализ*. – 2009. № 6. – С. 172 – 76.
- [5]] С.И. Лавренюк, А.Ю. Бандура, С.А. Горенко. Сравнение и выбор грид-инфраструктуры // *Розподілені комп'ютерні системи // Збірн. праць ювіл. міжнар. науково-практичн. конф. РКС-2010*. - Київ, НТУУ «КПІ», 6-8 квітня 2010. – С. 32 – 35.
- [6] С.И. Лавренюк, О.Л. Перевозчикова. Определение оптимального метода прогноза загрузки кластерных ресурсов и грид-узлов // *Кибернетика и системный анализ*. – 2011. – № 2. – С. 159 – 172.
- [7] Foster et al. The Physiology of the Grid: An Open Grid Services Architecture for Distributed Systems Integration.. *TR Glous Project*. – <http://www.globus.org/research/papers/ogsa.pdf>.
- [8] NORDUGRID. – <http://www.nordugrid.org/>.
- [9] Державна цільова науково-технічна програма впровадження і застосування грид-технологій на 2009-2013 роки. – <http://grid.bitp.kiev.ua/images/stories/GRID/docs/programa.pdf>.