

Інтелектуальні суперкомп'ютерні технології в математичному моделюванні

Сергієнко І.В., Хімич О.М.

Інститут кібернетики ім. В.М. Глушкова НАН України, пр. Глушкова, 40, Київ, Україна

Анотація. *Ефективність застосування комп'ютерних технологій розглядається з точки зору реалізації трьох основних парадигм математичного моделювання: комп'ютерна математика, високопродуктивні обчислення і інтелектуальний інтерфейс. Реалізація цих чинників дозволить істотно перерозподілити роботи по постановці і розв'язуванню задач між користувачем і комп'ютером в порівнянні з традиційними технологіями, скоротити терміни розробки застосувань для вирішення науково-технічних задач і підвищити якість комп'ютерних рішень.*

Abstract. *Efficiency of application of computer technologies is considered from the point of view realization of three basic paradigms of computer modeling: computer mathematics, HPC and intellectual interface. Realization of these factors will allow substantially to redistribute works in the process of mathematical modeling between an user and computer on comparison with traditional technologies, to shorten the terms of development of applications for the decision of scientific and technical problems and improve quality of computer solutions.*

1 Вступ

Високопродуктивні обчислення є одним з основних засобів наукових і інженерних досліджень. Разом із зростанням можливостей комп'ютерів для наукових і інженерних досліджень ростуть і проблеми їх створення і експлуатації. Збільшення числа процесорів (ядер) в паралельних комп'ютерах в цій ситуації означатиме істотне збільшення комунікаційних втрат і зниження їх ефективності. Вже зараз є істотні відмінності за рахунок комунікаційних втрат між максимальною і експлуатаційною продуктивністю [1]. Розробці комп'ютерних методів високопродуктивних обчислень (паралельних, розподілених, гібридних) присвячена значна кількість робіт (див. наприклад [2, 3]).

Крім того проблема достовірності комп'ютерних розв'язків із зростанням об'ємів задач на таких комп'ютерах також ускладнюється. Відомо, що у ряді випадків при вирішенні наукових і інженерних задач на комп'ютерах користувачі одержують машинні рішення, що не містять фізичного змісту. Це відбувається із багатьох причин, але перш за все через похибки в початкових даних, відмінності властивостей математичних і машинних моделей задач, відмінності арифметики і машинної арифметики і т.д. Проблема дослідження достовірності комп'ютерних розв'язків залишається однією з практично важливих.

Іншою, не менше важливою, актуальною проблемою практичної реалізації високопродуктивних обчислень є створення програмного забезпечення рівня кінцевого користувача - програмних засобів, що забезпечують спілкування з комп'ютером на мові предметної області і автоматизацію процесу розв'язування задачі на комп'ютері (алгоритмізація, програмування, вибір топології, розв'язування задачі в умовах наближених початкових даних з аналізом достовірності комп'ютерних результатів).

Ефективність застосування комп'ютерних технологій в математичному моделюванні визначають три основних складові досліджень: комп'ютерна математика, високопродуктивні обчислення і інтелектуальний інтерфейс. Врахування цих чинників дозволить істотно перерозподілити роботи по постановці і розв'язуванні задач між користувачем і комп'ютером в порівнянні з традиційними технологіями, скоротити терміни розробки застосувань для вирішення науково-технічних задач і підвищити якість одержуваних комп'ютерних рішень.

2 Особливості комп'ютерної математики

Математичні моделі, що описують прикладні задачі, завжди містять похибки в початкових даних. Але в переважній більшості випадків при дослідженні математичних задач передбачається неявно, що початкові дані задачі точно. Характерною особливістю математичних моделей з наближеними початковими даними є те, що їх

математичні властивості апіорі невідомі. В межах заданого рівня похибки можуть бути як сумісні так і несумісні задачі, як коректно так і некоректно поставлені, як погано так і добре обумовлені. При цьому машинна задача, яку зрештою і доводиться вирішувати на комп'ютері, завжди має наближений по відношенню до початкової задачі характер (через спадкову похибку в початкових даних, через похибку дискретизації, через похибку отримання (введення) числових даних в комп'ютер).

В цьому випадку надзвичайно ускладнює ситуацію той факт, що велика математична відмінність між матрицями повного і неповного рангу існує тільки в математично ідеальному світі дійсних чисел. Оскільки дії над матрицями проводяться з округленням, то ця відмінність стає невизначеною. Таким чином, невироджена матриця може стати в комп'ютері виродженою. З іншого боку, дуже ймовірно, що вироджена насправді матриця за рахунок похибки заокруглень буде перетворена на близьку, але невироджену.

Аналіз особливостей реалізації комп'ютерної арифметики показав, що:

- континуум всіх дійсних чисел в комп'ютері апроксимується скінченною множиною скінченних дробів (вже при введенні числових даних в комп'ютер виникають похибки заокруглення, які визначаються так звані *machineps*);
- феномен „машинного нуля“ породжує ряд труднощів при реалізації обчислювальних алгоритмів (будь-який сучасний комп'ютер має найменше позитивне число, яке може бути в ньому представлено, і всі числа, менше по абсолютній величині від цього числа, замінюються нулем);
- арифметичні операції на комп'ютері відрізняються від математичних: закони асоціативності і дистрибутивності не виконуються на жодному сучасному комп'ютері, а закони комутативності в операціях з плаваючою комою виконуються тільки при правильній процедурі заокруглення.

Таким чином, аксіоматика математики, у тому числі обчислювальної математики, відрізняється від аксіоматики комп'ютерної математики.

Рішення проблеми полягає в тому, щоб в машинному середовищі визначити властивості комп'ютерної задачі і сформулювати машинний алгоритм отримання наближеного розв'язку математичної задачі як для коректних задач так і для некоректних, як погано так і добре обумовлених.

Отже, для кожного класу математичних задач з наближеними даними виникає необхідність створення комп'ютерного інструментарію для дослідження математичних властивостей машинних моделей задач, побудови комп'ютерного алгоритму їх розв'язування з урахуванням структури і архітектури комп'ютерів і оцінки достовірності отриманих результатів [4- 6].

3 Високопродуктивні обчислення

Високопродуктивні обчислення є одним з основних засобів наукових і інженерних досліджень. Сучасні дослідження зосереджені на розробці методів та комп'ютерних алгоритмів для розв'язання базових задач обчислювальної математики з наближеними вихідними даними для MIMD-комп'ютерів та комп'ютерів гібридної (MIMD, SIMD) архітектури.

Розробка в 1985 р. шарово-циклічних методів обробки даних дозволила суттєво підвищити ефективність алгоритмів та встановити сучасну ієрархію в алгоритмічному забезпеченні паралельних обчислень. Шарово-циклічна схема розподілу та обробки інформації на комп'ютерах паралельної MIMD-архітектури ввійшла в світову практику паралельних обчислень як інструмент побудови збалансованих високоефективних паралельних алгоритмів [2].

Актуальним напрямком розвитку високопродуктивних обчислень в математичному моделюванні є створення ефективних комп'ютерних алгоритмів і програм для обробки математичних моделей з розрідженими структурами даних. Один із підходів базується на методах структурної регуляризації матриць та застосування для отриманих структур даних ефективних алгоритмів (паралельних, розподілених, гібридних) [7 - 10].

Значна увага в цьому підході приділена методам факторизації матриць для гібридних архітектур, оскільки для багатьох прикладних застосувань використання факторизованої матриці є чи не єдиним засобом при математичному моделюванні різноманітних процесів та явищ (наприклад задачі статистики, динаміки, нелінійного аналізу при математичному моделюванні міцнісних процесів в галузі промислового та цивільного будівництва, [3, 14], моделювання в галузі електрозварювання [15, 16]) тощо.

Приоритетним також для багатьох предметних областей є створення одновузлових суперкомп'ютерних програмно-технічних комплексів на базі новітніх гібридних архітектур.

4 Інтелектуальне чисельне програмне забезпечення

Дослідження в області комп'ютерної математики і високопродуктивних обчислень є теоретичною основою створення інтелектуального чисельного і прикладного програмного забезпечення [11-13].

Під інтелектуальним програмним забезпеченням для розв'язання класу науково-технічних задач розумітимемо комплекс програм, що дозволяє на мові предметної області сформулювати в комп'ютері задачу, автоматично досліджувати властивості машинної моделі задачі з наближеними даними, відповідно до виявлених властивостей і врахуванням математичних і технічних можливостей комп'ютера визначити необхідну для розв'язання задачі кількість процесорів (ядер) і побудувати ефективний алгоритм розв'язування, сформувати для вирішення задачі конфігурацію з процесорів паралельного комп'ютера, синтезувати програму паралельних обчислень, розв'язати задачу, оцінити достовірність отриманого комп'ютерного розв'язку і візуалізувати комп'ютерні результати на мові предметної області.

З функціональної точки зору інтелектуальне програмне забезпечення в автоматичному режимі реалізує дослідницьку функцію і адаптивне налаштування алгоритму, синтезованої програми і архітектури комп'ютера на властивості задачі і отримання комп'ютерного розв'язку з оцінкою достовірності.

З точки зору кінцевого користувача реалізується автоматичний режим дослідження і розв'язання задач, створення паралельних програм, що звільняє користувача від проблем пов'язаних з особливостями паралельних обчислень. З програмної точки зору інтелектуальне програмне забезпечення реалізує концепцію знань.

5 Висновки

Збільшені можливості обчислювальної техніки (висока продуктивність і значні об'єми пам'яті) дають можливість розв'язувати нові науково-технічні задачі і організувати чисельні експерименти, що істотно скорочують вартість і час розробки об'єктів сучасної техніки. Відзначимо, що організація натурних експериментів вимагає витрат часу і вартості на два-три порядки більше, ніж організація чисельного експерименту.

Теоретичне дослідження математичних і дискретних моделей є необхідною, але не достатньою умовою отримання достовірних комп'ютерних рішень, оскільки через похибки даних і обчислень властивості машинних моделей задач можуть відрізнятися від властивостей математичних задач. Необхідно в машинному середовищі визначити властивості комп'ютерної задачі і сформувати машинний алгоритм отримання наближеного розв'язку математичної задачі

Інтелектуальні суперкомп'ютерні технології якраз і є ефективним інструментом для автоматичного дослідження, розв'язування і аналізу задач інженерії і науки, максимально звільняючи з цих процесів кінцевого користувача, істотно підвищуючи його продуктивність, гарантуючи достовірність комп'ютерних розв'язків.

Список літератури

- [1] www.top500.org
- [2] Михалевич В.С., Молчанов И.Н., Сергиенко И.В. и др. Численные методы для многопроцессорного вычислительного комплекса ЕС / Под ред. И.Н. Молчанова. – М.: ВВИА им. проф. Н.Е. Жуковского, 1986. – 401 с.
- [3] Химич А.Н., Молчанов И.Н., Попов А.В., Чистякова Т.В., Яковлев М.Ф.. Параллельные алгоритмы решения задач вычислительной математики. – Киев: Наук. думка, 2008. – 247 с.
- [4] Химич А.Н., Яковлев М.Ф. О полной погрешности расчета линейных математических моделей итерационными методами // Кибернетика и системный анализ. – 2002. – № 5. – С. 1–12.
- [5] Химич А.Н. Оценки полной погрешности решения систем линейных алгебраических уравнений для матриц произвольного ранга // Компьютерная математика. – 2002. – № 2. – С. 41–49.
- [6] Сергиенко И.В., Химич А.Н., Яковлев М.Ф. Методы получения достоверных решений систем линейных
- [7] Химич А.Н., Попов А.В., Полянюк В.В. Алгоритмы параллельных вычислений для задач линейной алгебры с матрицами нерегулярной структуры // Кибернетика и системный анализ, - 2011 г. – №6 – С. 159 –174.
- [8] Химич А.Н. Баранов А.Ю. Гибридный алгоритм решения линейных систем с ленточными симметричными матрицами // Компьютерная математика. – 2013. – №3. – С.80-88
- [9] Хімич О.М., Полянюк В.В. Оптимізація паралельного ітераційного процесу для лінійних систем з розрідженими матрицями // Теорія оптимальних рішень. – 2011. – № 10 – С. 47 – 53.
- [10] Хімич О.М., Сидорук В.А. Гібридний алгоритм для лінійної задачі найменших квадратів з напіввизначеною розрідженою матрицею // Теорія оптимальних рішень. – 2014. – С. 106-113.

- [11] Молчанов И.Н. Проблемы интеллектуализации MIMD-компьютеров // Кибернетика и системный анализ. – 1998. – № 1.– С. 37–46.
- [12] Химич А.Н., Молчанов И.Н., Мова В.И. и др. Численное программное обеспечение интеллектуального MIMD-компьютера Инпарком. – Киев: Наук. думка, 2007. – 221 с.
- [13] Сергиенко И.В., Молчанов И.Н., Химич А.Н. Интеллектуальные технологии высокопроизводительных вычислений. // Кибернетика и системный анализ. – 2010. – № 5.
- [14] 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.
- [15] Махненко В.И. Попов А.В. Семенов А.П. Химич А.Н. Яковлев М.Ф. Математическое моделирование на MIMD-компьютерах физических процессов при сварке // УСиМ. – 2007. – № 6. – С.80–87.
- [16] Е.А.Великоиваненко, А.С. Миленин, А.В. Попов, В.А. Попов, А.Н. Химич // Методы и технологии параллельных вычислений для математического моделирования напряженно-деформированного состояния конструкций с учетом вязкого разрушения. // Проблемы управления и информатики. – 2014. – №6.