

Об экзапроблемах математического моделирования

В.П. Ильин

1. Введение

Развитие математического моделирования происходит под воздействием трех основных факторов: появление новых актуальных практических задач, в том числе междисциплинарных, обратных и оптимизационных, требующих экстремальных ресурсов; достижения теоретической и вычислительной математики по созданию и обоснованию современных моделей и эффективных алгоритмов; разработка высокопроизводительных компьютерных технологий на базе бурно прогрессирующих многопроцессорных вычислительных систем (МВС).

Стоящие на повестке дня проблемы изучения динамических процессов и явлений включают понятия хаоса, странных аттракторов, фрактальных сред, синергетической самоорганизации сложных систем, иницирующие новые принципы моделирования и требующие сверхвысокого разрешения.

Последние десятилетия ознаменованы созданием новых математических подходов и постановок реализуемых или ожидающих своего воплощения в вычислительных алгоритмах и технологиях, см. [1]–[5]. Здесь можно назвать комплексные согласованные модели механики сплошных сред, единообразно описывающие свойства упругих, пластических, жидких, газообразных и многофазных сред, а также переходы из одних состояний в другие, использование теории групп, дифференциальных форм, распределений, дискретных эйлеровых и лагранжевых представлений, и т.д.

Кардинально меняется понятие “большой” задачи, предполагающей уже применение сеток с миллионами, десятками и сотнями миллионов узлов, для решения которой численные методы стали принципиально параллельными и ориентированными на МВС с сотнями и тысячами процессоров. Проблема обеспечения высокой производительности и масштабируемости крупномасштабных вычислений требует углубленного изучения структуры алгоритмов и их отображения на архитектуру ЭВМ, а также создание и эффективное использование современных программных технологий, см. [6]–[9].

Хотя первый в мире компьютер петафлопной производительности запущен только в 2008 г., уже объявлено грядущее появление в 2019 г. “экзафлопника” с быстродействием 10^{18} операций в секунду (1000 петафлоп!, [10]). А поскольку закон Мура успешно “работает” более 40 лет, данный прогноз представляется вполне реальным, что означает создание в недалеком будущем МВС с миллионами вычислительных ядер. В связи с этим по инициативе Дж.Донгарры и П.Бекмана сформирован международный Exascale Software Project, миссией которого является выработка новых концепций и моделей программирования для компьютеров экстремального и экзафлопного уровня (авторами [10] такое программное обеспечение названо X – stack). Именно глобальные проблемы программного обеспечения, включая операционные системы, компиляторы, базы данных и всевозможные инструментари, являются главными на ближайшее десятилетие, поскольку существующее “софтверное” оснащение вычислительных систем своими корнями связано с последовательными вычислениями на фон-неймановской машине, а наступающая эра массового параллелизма неизбежно требует перехода количества в качество.

Основной заявленный в [10] принцип построения нового программного обеспечения – создание открытых (Open Source) библиотек для виртуальных машин. Эта стратегия

естественным образом соответствует исторически складывающейся методологии развития прикладного программного обеспечения задач математического моделирования. Чтобы понять возникающие на текущем этапе проблемы, необходимо оценить тенденции возникающих практических задач, эволюцию современных вычислительных методов и новые технологические требования, возникающие из особенностей развития компьютерных архитектур.

2. Прикладные задачи и математические модели

Актуальные практические проблемы из различных сфер человеческой деятельности, требующие все более глубокого понимания протекающих процессов и явлений, являются главным двигателем прогресса в математическом моделировании. Если говорить о естественно-научных направлениях, то практически все они охватываются следующим списком: материаловедение и нанотехнологии, энергетика, машиностроение и металлургия, физика плазмы и высоких энергий, электроника и связь, астрофизика и астрономия, науки о Земле (атмосфера, океан, твердь), биология и медицина.

В терминах уравнений математической физики, или механики сплошных сред (или теоретической физики) эти задачи составляют физику твердого тела, т.е. упругости, пластичности и разрушения, классическую и магнитную гидрогазодинамику, тепломассоперенос в многофазных и пористых средах, электромагнетизм. Каждая из этих дисциплин представляет собой фундаментальное научное направление, изучение которого требует глубокого погружения и профессионализма.

Однако особенность реальных требований в серьезных технических разработках, в наукоемких производствах и в исследовании природных явлений заключается в необходимости междисциплинарного подхода к моделированию с обязательным учетом факторов самой различной природы. Примером может служить проблема долгосрочного прогноза погоды и климата [11], которая включает циркуляции атмосферы и океана, учет мезометеорологических структур и морфологии приземной поверхности, солнечной радиации и ионосферных процессов, распространения примесей и антропогенных воздействий. Математическая модель такой суперзадачи представляет собой начально-краевую задачу для сложнейшей системы нелинейных дифференциальных уравнений или эквивалентных вариационных соотношений со многими неизвестными функциями, имеющими многочисленные разномасштабные во времени и пространстве особенности. Зачастую коэффициенты решаемых уравнений, определяющие важные физические факторы (вязкость, теплопроводность и т.д.), известны с большой долей неопределенности, которую надо устранить путем сопоставления расчетных данных с результатами натурных измерений. Таким образом возникает проблема идентификации параметров модели – одна из типичных обратных задач, для нахождения ответа которой, как правило, требуется многократное решение прямых задач (которые проще хотя бы потому, что в них задается вся информация, необходимая для получения искомого результата). В целом моделирование динамики атмосферы, океана и климата – это работа для профессиональной команды, которая фактически является коллективным естествоиспытателем.

Иллюстрация совсем другого рода – это комплексное моделирование технологических процессов в алюминиевом электролизере [12], представляющем собой в определенном смысле сложный организм, длительное и успешное функционирование которого требует тщательного внимания и управления. Здесь подаются огромные токи и загружается сырье, из которого выплавляется периодически отгружаемый жидкий металл. Конечная практическая проблема в данном случае –

оптимизация производственного режима, обеспечивающего минимизацию целевого функционала, т.е. отношение эксплуатационных расходов (стоимость электроэнергии, материалов, ремонтных работ и т.д.) к стоимости получаемого продукта, характеризуемой итоговым объемом алюминия определенного качества. При этом необходимо удовлетворять различным эксплуатационным ограничениям, например, на температурные напряжения, во избежание разрушения конструкции. Такая обратная задача включает решение множества прямых задач, каждая из которых описывается джентльменским набором уравнений математической физики: Максвелла (электромагнетизм), Ламе (упругость и прочность), Навье–Стокса (циркуляции жидкого металла и электролита), теплопереноса с фазовыми переходами, химической кинетики. Решать эти взаимосвязанные уравнения необходимо в реальных трехмерных областях сложной конфигурации. Достаточно сказать, что компьютерная модель электролизера (среднего уровня детализации) насчитывает более 500 геометрических объектов и 30 различных материалов (анодные и катодные узлы, графитовые блоки, футеровочные материалы, корпус и т.п.). К этому следует добавить, что в заводском цехе работает “линейка” из электрически взаимосвязанных более чем 100 электролизеров, магнитные поля которых существенно влияют друг на друга.

Можно привести много других больших задач, решение которых с необходимой точностью (на практике постоянно ужесточающейся) требует привлечения вычислительных ресурсов пета- и эксафлопного масштаба (будем их называть “экстремального”, или X-ресурсов). Подчеркнем еще раз общую для них тенденцию: серьезные задачи являются междисциплинарными и обратными, а расчет какого-то одного поля (например, температурного) представляет собой частный или методический интерес.

Важно отметить, что при всем необозримом многообразии актуальных приложений, их математические постановки могут быть строго классифицированы и составлять конечный набор основных формулировок, который может при необходимости расширяться и углубляться, не выходя при этом за рамки унифицированной технологии. В целом формальное описание достаточно абстрактной начально-краевой задачи может быть представлено следующим образом.

Пусть $\vec{u} = \{u_\mu, \mu = 1, \dots, m_f\}$ есть вектор-функция, у которой каждая скалярная составляющая u_μ зависит от вектора пространственных координат $\vec{x} = (x_1, x_2, x_3)$ и, возможно, от времени t . Система координат может быть декартовая, цилиндрическая или сферическая (или какая-то специальная), а количество независимых пространственных переменных d (размерность задачи) может уменьшаться с трех до двух или одного.

Обозначим через $\bar{\Omega} = \Omega \cup \Gamma$ замкнутую ограниченную область евклидова пространства с границей Γ , в которой определена функция $\vec{u}(\vec{x}, t)$ для каждого момента времени $0 < t \leq T < \infty$. Предполагается, что $\vec{u}(\vec{x}, t)$ принадлежит некоторому функциональному пространству, в котором имеют смысл операторы L и l . Требуется в расчетной области $\bar{\Omega}$ найти решение системы дифференциальных уравнений (линейной или нелинейной) с известной функцией $\vec{f} = \{f_\mu, \mu = 1, \dots, m_f\}$

$$L\vec{u} = \vec{f}(\vec{x}, t), \quad \vec{x} \in \bar{\Omega}, \quad 0 < t \leq T < \infty, \quad (1)$$

удовлетворяющее заданным граничным и начальным условиям

$$l\vec{u} = \vec{g}(\vec{x}, t), \quad \vec{x} \in \Gamma, \quad \vec{u}(\vec{x}, 0) = \vec{u}^0(\vec{x}). \quad (2)$$

В качестве примера можно привести дифференциальный оператор второго порядка

$$L = A \frac{\partial}{\partial t} + \nabla B \nabla + C \nabla + D, \quad (3)$$

где ∇ есть градиент, а A, B, C, D – некоторые квадратные матрицы порядка m , элементы которых суть или постоянные, или функции \bar{x}, t , или зависят от \bar{u} . В зависимости от конкретного вида матричных коэффициентов, математическая постановка (1)–(3) формально описывает стационарные или нестационарные, линейные или нелинейные процессы и явления в огромном числе приложений. Расчетную область будем всегда считать связной (хотя формально это и не обязательно), иначе задача (1)–(2) распадается на независимые подзадачи.

Простейшей иллюстрацией граничных условий является смешанная краевая задача, в которой граница области Γ состоит из частей Γ_D, Γ_N , на которых заданы условия разных типов:

$$u = g_D, \quad x \in \Gamma_D; \quad D_N u + A_N \nabla_n u = g_N, \quad x \in \Gamma_N, \quad (4)$$

где D_N и A_N – матрицы (в общем случае прямоугольные, т.к. на разных участках границы может быть задано разное число условий), а g_D, g_N – вектор-функции, элементы которых или известны, или зависят от искомых решений (∇_n – оператор дифференцирования по направлению внешней нормали к границе).

Вместо классического дифференциального описания (1)–(4) исходная задача может быть представлена в эквивалентной (в каком-то смысле) вариационной постановке для обобщенного решения. Кроме того, вместо дифференциальных могут фигурировать интегральные уравнения, а в общем случае – системы дифференциально-интегральных равенств и/или неравенств.

Приведенная выше формулировка определяет прямые задачи математического моделирования. Исходные данные каждой из них можно определить зависящими от вектора параметров $\vec{p} = (p_1, \dots, p_{m_0})$, компоненты которого надо оптимизировать по условию минимума описанного заранее целевого функционала от определенного на параметризованном решении $\bar{u}(\bar{x}, t, \vec{p})$ поставленной задачи (см. [13] и цитируемые там работы):

$$\Phi_0(\bar{u}(\bar{x}, t, \vec{p}_{opt})) = \min_{\vec{p}} \Phi_0(\bar{u}(\bar{x}, t, \vec{p})), \quad (5)$$

при заданных линейных или функциональных ограничениях ($m_1 + m_2 = m_0$):

$$p_k^{\min} \leq p_k \leq p_k^{\max}, \quad k = 1, \dots, m_1, \quad \Phi_l(\bar{u}(\bar{x}, t, \vec{p})) \leq \delta_l, \quad l = 1, \dots, m_2. \quad (6)$$

В этом случае описание прямой задачи фигурирует формально как дополнительное ограничение в виде уравнения состояния

$$L\bar{u}(\vec{p}) = \vec{f}, \quad \vec{p} = \{p_k\}. \quad (7)$$

Таким образом мы приходим к оптимизационной постановке обратной задачи, заключающейся в идентификации параметров модели математической проблемы, которая может включать и комплексное моделирование различного вида полей, когда рассматривается одновременно совокупность физических эффектов, а целевой функционал Φ_0 включает отклонение натуральных и расчетных данных для всех видов измеряемых полей.

Расчетную область можно представить как объединение $N_D \geq 1$ замкнутых непересекающихся подобластей, т.е. $\bar{\Omega} = \bigcup_k \bar{\Omega}_k, \quad \bar{\Omega}_k \cap \bar{\Omega}_{k'} = \emptyset$, при $k \neq k'$, где $k, k' = 1, \dots, N_D$, в каждой из которых могут задаваться свои коэффициенты или даже

различные типы решаемых уравнений. Граница k -ой подобласти может быть представлена как объединение смежных границ с примыкающими подобластями:

$$\bar{\Omega}_k = \Omega_k \cap \Gamma_k, \quad \Gamma_k = \bigcup_{k'} \Gamma_{k,k'}, \quad \bar{\Omega}_k \cap \bar{\Omega}_{k'} = \Gamma_{k,k'} = \Gamma_{k',k} \neq \emptyset. \quad (8)$$

Если внешнее пространство (дополнение) по отношению к Ω обозначить формально как подобласть $\Omega_0 = R^d / \bar{\Omega}$, то внешняя граница расчетной области представляется в виде $\Gamma = \Gamma^{(e)} = \bigcup_k \Gamma_{k,0}$, а граница каждой подобласти

может быть разбита на ее внешнюю и внутреннюю части, т.е.

$$\Gamma_k = \Gamma_k^{(e)} \cap \Gamma_k^{(i)}, \quad \Gamma_k^{(e)} = \Gamma_{k,0}, \quad \Gamma_k^{(i)} = \bigcup_{k' \neq 0} \Gamma_{k,k'}. \quad (9)$$

Если подобласть Ω_k – трехмерный объект, имеющий свой ненулевой объем, то ее граница Γ_k в качестве меры измерения имеет площадь. Каждый из граничных фрагментов $\Gamma_{k,l}$ внешней или внутренней границы (на каждом из которых ставится какое-то краевое условие) будем считать кусочно-гладкой поверхностью, т.е. состоящей из совокупности гладких поверхностных сегментов, характеризуемых своим уравнением. Граница расчетной области Γ является в общем случае многосвязной, или конечносвязной, т.е. состоящей из конечного числа связных множеств. Граница Γ является односвязной, если сама расчетная область не имеет "дыр".

Каждый поверхностный сегмент имеет свою граничную линию, состоящую из конечного числа криволинейных (пространственных в общем случае) отрезков, характеризуемых парой своих концевых точек, длиной и уравнениями двух поверхностей,

пересечением которых он является. Такие граничные отрезки будем называть ребрами расчетной области, а их концевые точки, лежащие на пересечении ребер, будем называть вершинами. Совокупность ребер и вершин назовем каркасом области, который формально можно представить в виде многомерного графа.

3. Вычислительные методы и технологии

При всем многообразии математических задач и моделей, поддающихся тем не менее вполне обозримой систематизации, количество методов их решения, естественно, во много раз больше. Однако этапы вычислительного эксперимента также могут быть четко выделены и классифицированы, а алгоритмы их реализации – фрагментированы по модульному принципу, в зависимости от их назначения, применяемых подходов, эффективности, ресурсоемкости, параллелизуемости и т.д.

3.1. Дискретизация математической модели

Задачи математического моделирования в подавляющем своем большинстве описываются в терминах интегро-дифференциального исчисления над функциями непрерывного аргумента. Исключения составляют процессы масштаба межатомных расстояний, которые актуальны, например, в нанотехнологиях, где могут быть даже неприменимы понятия производных, но мы на них останавливаться не будем.

Дискретизация расчетной области, т.е. построение сетки, представляет особо сложную проблему в многомерных случаях с кусочно-гладкими криволинейными и, возможно, движущимися границами (для последних специальный класс составляют т.н. свободные границы, положение которых заранее неизвестно). Сама сетка определяется

совокупностью своих объектов различной размерности: узлы, ребра, грани, конечные объемы, – а также топологическими связями между ними. Между геометрической структурой расчетной области с подобластями и сеточной структурой существует большая аналогия, и они содержат по сути однотипные наборы объектов макро- и микро-уровня. Если математическая постановка является дифференциальной или в форме граничных интегральных уравнений, то отличие дискретизации заключается в том, что в последнем случае сетка строится только на граничных поверхностях расчетной области.

Существует большое количество критериев качества сетки, от которых в значительной степени зависит точность и экономичность численного решения. Одно из главных требований к сетке – адаптивность, означающая в том или ином смысле учет особенностей конфигурации границы и свойств искомого решения, которые определяются или теоретически априори или апостериори экспериментально, т.е. на основе предварительных расчетов.

В первую очередь требуется, чтобы вершины, ребра и граничные поверхности расчетной области составлялись из соответствующих сеточных объектов, или в крайнем случае аппроксимировались ими с возможно малой погрешностью. Второй аспект связан с возникающей сингулярностью, т.е. сильным ростом производных, в окрестности углов и ребер границы, что требует специального сгущения узлов в таких подобластях. А при наличии сильно меняющихся пространственно-временных особенностях решения сетки должны быть динамическими, т.е. регулярно или периодически перестраиваемыми.

Распространенные сеточные технологии включают триангуляции Делоне, ячейки Дирихле–Вороного и различные приемы контроля вырожденных случаев. Важным вычислительным средством являются многосеточные методы, основанные на построении последовательности вложенных сеток или на их локальном сгущении.

Наиболее просто конструируемыми и одновременно обеспечивающими большой порядок точности являются равномерные сетки, которые могут иметь различные типы конечных элементов: кубы или параллелепипеды, призмы, тетраэдры и т.д. Однако в реальных задачах сетки приходится строить неравномерные и нерегулярные, или неструктурированные, у которых для каждого узла номера его ближайших соседей можно задать только перечислением. Существуют компромиссные квазиструктурированные сетки, когда расчетная сеточная область состоит из сеточных подобластей, в каждой из которых сетка строится по своим правилам и может быть структурированной. Такие сетки могут быть несогласованными или согласованными – в последних случаях узлы на смежных границах раздела соседних сеточных подобластей являются совпадающими, т.е. общими.

Методы построения сеток отличаются большим разнообразием и имеют обширную профессиональную литературу. Здесь используются и квазиконформные отображения, и вариационные принципы, и специальные метрические пространства, и многочисленные эмпирические приемы. Соответствующее программное обеспечение, или генераторы сеток, существует в широком ассортименте, или в свободном доступе через Интернет, или в качестве коммерческих продуктов. Зачастую процедуры построения сеток являются неотъемлемой частью проблемно-ориентированных пакетов прикладных программ (ППП), но они также существуют и в автономной форме, позволяющей их встраивать в различные приложения.

Рассмотренные выше принципы дискретизации базируются на эйлеровом подходе. Однако при моделировании движущейся среды оказывается более удобно лагранжевая система координат, порождающая многочисленные варианты методов больших частиц. Широко распространены алгоритмы “частиц в ячейках”, использующие сочетание

эйлеровых сеток с дискретизацией потоков субстанции. Имеются также и “бессеточные” методы с чисто лагранжевым описанием процессов.

Все рассматриваемые выше подходы относятся к детерминистским алгоритмам, альтернативу которым составляют статистическое моделирование и методы Монте–Карло. Основанные на вероятностном принципе, они являются незаменимым инструментом исследования процессов и явлений со случайными исходными данными или описываемыми многомерными дискретными соотношениями. Они обладают высокой универсальностью и формально могут быть применены к решению практически любых дифференциальных и/или интегральных уравнений, однако вопрос о целесообразности их выбора – это уже компетенция конкретного квалифицированного пользователя.

3.2. Алгоритмы аппроксимации

Строго говоря, генерация сетки является первым этапом дискретизации, конечной целью которой является переход от исходных функциональных соотношений к конечно-мерным уравнениям, неравенствам или рекурсиям. При этом фактически задача алгебраизируется, что достигается путем аппроксимации функций, производных и интегралов. Основные подходы к построению сеточных соотношений – это методы конечных разностей, конечных объемов, конечных элементов (МКР, МКО, МКЭ), коллокаций и спектральные методы, связанные с разложениями в ряды Фурье. Не пытаясь делать обзора имеющегося огромного материала по данным вопросам, мы коротко остановимся главным образом на технологических аспектах наиболее универсальных МКО и МКЭ, позволяющих конструировать сеточные аппроксимации высоких порядков точности на различных типах конечных объемов для широкого класса задач математического моделирования.

Важным моментом этих двух близких подходов является поэлементная технология вычисления локальных матриц и векторов правых частей с последующей сборкой (ассемблированием) глобальных матриц и систем алгебраических уравнений (линейных или нелинейных – СЛАУ или СНАУ). Этот прием значительно упрощает программную реализацию и естественным образом обеспечивает эффективное распараллеливание данного вычислительного этапа.

В нестационарных проблемах пространственная аппроксимация осуществляется на каждом временном шаге, а при наличии нелинейностей такая процедура повторяется итерационно для всех шагов. Наиболее трудоемкими оказываются задачи с динамическими сетками, если их приходится перестраивать на каждой итерации для каждого шага по времени.

Совокупность аппроксимационных алгоритмов для типовых задач математической физики может быть систематизирована и классифицирована по следующим признакам:

- по типу аппроксимируемого члена дифференциального уравнения (градиент, дивергенция и т.д.) или его механического смысла; примером могут быть матрицы жесткости и матрицы масс;
- по виду конечных элементов или объемов: тетраэдры, параллелепипеды, призмы и т.д.; при этом могут выделяться частные случаи, которые наиболее экономично реализуются (например, правильные фигуры);
- по характеру базисных функций, которые могут отличаться своими носителями, порядками и структурными свойствами (лагранжевые и эрмитовые, скалярные и векторные, и т.п.);

- по конфигурации сеточного шаблона, т.е. совокупности узлов, участвующих в одном уравнении, получаемом в итоге формирования алгебраических систем; наиболее экономичными оказываются компактные схемы, в которых участвуют только наиболее близкие геометрически соседние узлы; как правило, повышение порядка аппроксимации ведет к “растягиванию” сеточного шаблона и расширению ленточной структуры итоговых матриц, так что с точки зрения общей эффективности алгоритмов приходится искать компромиссную “золотую середину”.

3.3. Задачи вычислительной линейной алгебры

Если решаемая проблема в целом является нестационарной и нелинейной, все равно после этапов временной аппроксимации и квазилинеаризации мы приходим к задачам линейной алгебры, из которых наиболее типичны – это решение СЛАУ или проблемы собственных значений (как правило, частичной, т.е. вычисление нескольких собственных чисел и соответствующих собственных векторов).

Характерные матрицы, возникающие в сеточных методах решения дифференциальных задач, являются разреженными, ленточными и большими. Это означает, во-первых, что порядки N достигают десятков и сотен миллионов, а ненулевые элементы сосредоточены в некоторой полосе ширины m около главной диагонали, причем величина m и число ненулевых элементов в каждой строке не зависят от N . Дискретизированные алгебраические системы, возникающие из аппроксимации интегральных уравнений (определенных на границе или в объеме расчетной области) являются, наоборот, плотными, но зачастую имеют специальные структурные свойства (например, являются теплицевыми, квази- или блочно-теplicевыми).

Вычислительная линейная алгебра – хорошо продвинутая математическая дисциплина и содержит большое количество алгоритмов для решения задач с самыми разными типами матриц: вещественными и комплексными, квадратными и прямоугольными, эрмитовыми и неэрмитовыми, положительно определенными и знаконеопределенными. Имеется также соответствующее обширное программное обеспечение в виде библиотек или прикладных пакетов, как свободно распространяемых в Интернете, так и коммерческих. Данные алгоритмы и программы делятся в основном на два класса: ориентированные на плотные матрицы и на разреженные. Первый из них содержит в основном прямые методы, основанные на точной факторизации матрицы, а второй – предобусловленные итерационные алгоритмы или же быстрые прямые процедуры для специальных матричных структур (например, происходящих из многомерных краевых задач с частично или полностью разделяющимися переменными, где эффективно работают знаменитые методы быстрого преобразования Фурье, циклической редукции и некоторые другие).

Алгебраические задачи – “узкое горлышко” математического моделирования, поскольку потребляемые вычислительные ресурсы нелинейно растут с увеличением порядка N . Поэтому здесь особенно актуально распараллеливание алгоритмов на МВС с общей, разделенной и гибридной памятью. Ключевым принципом является в данном случае алгебраическая декомпозиция областей, или “разделяй и властвуй”.

Существенным моментом программного обеспечения для разреженных матриц является оптимизация кода, поскольку здесь для хранения ненулевых элементов неизбежно применение сжатых форматов данных, которые позволяют кардинально сокращать объем хранимой информации, но существенно усложняют реализацию

доступа к матричным элементам, что особенно критично при многоуровневой неоднородности кэша и оперативной памяти.

3.4. Методы оптимизации и решения нелинейных уравнений

Алгоритмы оптимизации решения обратных задач, сводящихся к проблеме условной минимизации функционала, являются бурно развивающейся в последние десятилетия областью вычислительной математики. Здесь развиты модификации методов множителей Лагранжа и внутренних точек, являющихся развитием подходов со штрафными функциями, использование доверительных интервалов для регулировки последовательности шагов, а также варианты алгоритмов Ньютона и последовательного квадратичного программирования для решения возникающих на промежуточных этапах СНАУ.

В данной тематике имеется много актуальных и далеко не решенных вопросов, связанных с поиском глобального минимума и оптимального управления, применения методов теории возмущений и сопряженных уравнений, нахождения градиентов функционалов или функций чувствительности к вариациям исходных данных. Зачастую постановки требуют “штучного” исследования устойчивости и корректности задачи для поиска соответствующего регуляризационного подхода. К этой же области можно отнести изучение нелинейных динамических систем, связанных с эффектами бифуркаций, самоорганизации и хаоса, странных аттракторов и т.д., где зачастую еще остаются открытыми методологические принципы математического моделирования.

3.5. Постобработка и визуализация результатов

Непосредственная реализация наукоемких алгоритмов в многомерных задачах может составлять отнюдь не главную долю общего вычислительного процесса, поскольку анализ получаемых результатов требует их презентабельной визуализации с предварительной обработкой сеточных функций, что требует выполнения ресурсоемких технологических операций по формированию сечений, изолиний и изоповерхностей, различных графиков с возможной анимацией многоцветных изображений. Такие технологические проблемы особенно актуальных в системах принятия решений по результатам математического моделирования.

4. Конвергенция алгоритмических структур и компьютерных архитектур

Развивающиеся МВС остаются на текущий момент в рамках типовой кластерной архитектуры: соединенные общей шиной вычислительные узлы, состоящие из определенного количества процессоров и/или ядер с общей многоуровневой памятью. Основные программные средства распараллеливания алгоритмов – это системы MPI и OpenMP для работы с распределенной и общей памятью соответственно. Создаваемые так же интенсивно GRID-системы предназначены в основном для интеграции разнородных вычислительных ресурсов и не должны, по-видимому, рассматриваться как орудие эффективного распараллеливания алгоритмов.

Лет 20 и более назад в тематике компьютерных архитектур наблюдалось заметное многообразие: разрабатывались матричные ЭВМ, транспьютеры и различные виды

вычислительных сетей (гиперкубы и т.п.), обсуждались клеточные автоматы, нейросети и нейрочипы, исследовались специализированные процессоры. Но все они не выдержали конкуренции с универсальными компьютерами общего назначения.

Однако в последние годы ситуация начинает серьезно меняться. Появились многоядерные видеокарты, серьезно повышающие быстродействие формирование многоцветных и многоплановых графических изображений. А главное – благодаря современным кремниевым технологиям активно разрабатываются программируемые логические интегральные схемы (ПЛИС), которые делают реальной давнюю мечту математиков и программистов о создании компьютеров, ориентированных на экономичную реализацию конкретного класса задач или алгоритмов.

Говорить о возможном соответствии алгоритмических структур и компьютерных архитектур удобнее всего в терминах графов. Рассмотрим для примера блочную запись СЛАУ

$$(Au)_k \equiv A_{k;k}u_k + \sum_{l \in \omega_k} A_{k,l}u_l = f_k, \quad k \in \Omega_k, \quad (10)$$

где u_k и f_k подвекторы векторов u и f , Ω_k – совокупность номеров его индексов, $A_{k,l}$ – блочные подматрицы матрицы A , а ω_k – совокупность номеров ненулевых блоков $A_{k,l}$. В сеточных системах матрицы могут быть несимметричными ($A_{k,l} \neq A_{l,k}^t$, где t означает транспонирование), но всегда являются структурно симметричными, т.е. $A_{k,l}$ и $A_{l,k}$ могут равняться нулю только одновременно. Блочную структуру СЛАУ (10) можно изобразить в виде некоторого макрографа, вершинам которого соответствуют подвекторы и диагональные матричные блоки, а ребрам – соответствующие ненулевые блоки. Можно также с помощью полного матричного графа изобразить матричный портрет A , т.е. всю совокупность ее ненулевых элементов с указанием их расположения.

Соотношения (10) можно рассматривать также как схему алгебраической декомпозиции расчетной области. В этом случае Ω_k есть сеточная подобласть, $A_{k,l}$ и $A_{l,k}$ – матричные записи связей между Ω_k и Ω_l , которые бывают ненулевыми только для геометрически соседних подобластей, а диагональные блоки $A_{k,k}$ представляют подзадачи для соответствующих Ω_k (которые могут решаться независимо и одновременно, в чем и состоит суть распараллеливания). Иллюстрация двумерной прямоугольной декомпозиции приводится на рис. 1, где смежные границы $\Gamma_{k,l}$ соответствуют внедиагональным блокам $A_{k,l}$.

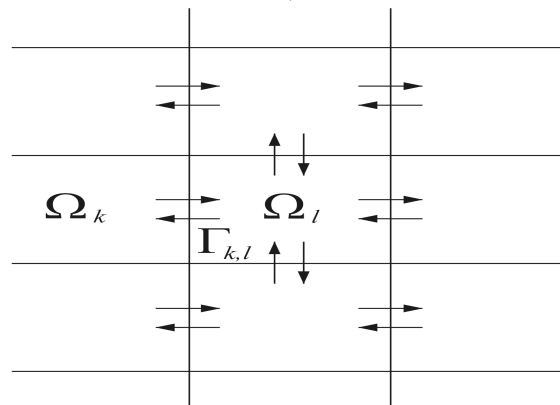


Рис 1. Иллюстрация двумерной декомпозиции

Очевидно, что топологические связи подобластей, в зависимости от способа разбиения расчетной области, могут быть представлены в виде сеточного макрографа – одномерного, двумерного или трехмерного.

А каждая сеточная подобласть, в свою очередь, может быть изображена с помощью сеточного двунаправленного графа (структурированного или неструктурированного), пример которого представлен на рис. 2, где каждое ребро соответствует матричным элементам $a_{i,k}$ и $a_{k,i}$ матрицы A .

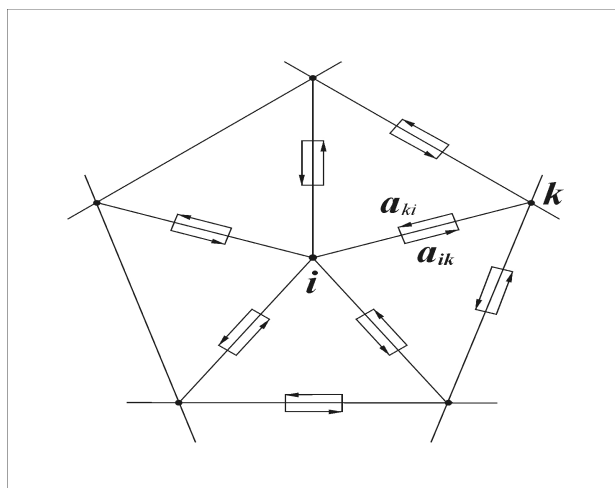


Рис. 2. Фрагмент пространственной сетки

Идеально отображение сеточных алгоритмов на архитектуру МВС достигается в том случае, когда последняя составляет вычислительную сеть, представимую в виде аналогичного сетевого графа, в котором узел представляет многоядерный процессор с собственной памятью, а ребро выполняет и вычислительные, и коммутирующие функции по соединениям соседних узлов, т.е. принадлежащих одному сеточному шаблону.

Оптимизация массивного распараллеливания в конкретных случаях требует анализа коэффициентов ускорения и использования

$$S_p = T_1 / T_p, \quad E_p = S_p / p, \quad (11)$$

где T_p – время решения задачи (или реализации алгоритма) на p процессорах. К сожалению, сделать это непросто в силу отсутствия адекватных моделей машинных вычислений на МВС с иерархической памятью.

Поскольку главное снижение производительности многопроцессорных компьютеров происходит из-за коммуникационных потерь, с точки зрения эффективности решения рассматриваемых задач перспективными являются следующие направления развития архитектур МВС:

- вычислительные сети (ВС) различной размерности (одно-, дву- и трехмерные);
- динамическая реконфигурация ВС с реализацией как структурированных, так и неструктурированных сеток;
- быстрые ближние связи и некоторые специальные коммуникации (типа гиперкуба);
- синхронизация обменов и вычислений, совмещение во времени двусторонних обменов;

- специализированные вычислительные устройства и гетерогенные МВС (например, аппаратная поддержка постобработки, визуализации и алгоритмов линейной алгебры).

С точки зрения концепции прикладного математического и программного обеспечения кардинальным представляется создание автономных библиотек алгоритмов и инструментариев, поддерживающих различные технологические этапы моделирования (генераторы сеток, аппроксиматоры) на основе разработки согласованных структур данных (геометрических, сеточных, алгебраических, графических). Такой модульный принцип позволит осуществить независимую реализацию, развитие и переиспользование продуктов коллективов разработчиков, а также их адаптацию на вновь появляемым платформам МВС. Кроме того, эта модель ориентирована на сборку конкретных приложений из представительного набора программных блоков наподобие детского конструктора, что должно обеспечить такие трудно совместимые категории, как универсальность и эффективность. Разумеется, достижение этой цели требует координации усилий вычислительного сообщества, но примеры успешного сотрудничества такого рода уже имеются: в области линейной алгебры общепринятыми являются форматы и стили пакетов BLAS, SPARSE BLAS, а также коллекции типовых матриц для сравнительного тестирования.

Литература

1. Годунов С.К., Роменский Е.И. Элементы механики сплошных сред и законы сохранения.–Новосибирск, Научная книга, 1998.
2. Hiptmair R. Finite elements in computational electromagnetism.–Acta Numerica, Cambridge Univ. Press, 2002, 237-339.
3. Дородницын В.А. Групповые свойства разностных уравнений.–М., Физматлит, 2001.
4. Франк А.М. Дискретные модели несжимаемой жидкости.–М., Физматлит, 2001.
5. Чиркунов Ю.А. Групповой анализ линейных и квазилинейных уравнений.–Новосибирск, НГУЭУ – НИИХ, 2007.
6. Воеводин В.В. Математические основы параллельных вычислений.–М., МГУ, 1991.
7. Воеводин В.В., Воеводин Вл.В. Параллельные вычисления.–С.-Пб., “БХВ-Петербург”, 2002.
8. Asanovic K., et. al. The Landscape of Parallel Computing Research: A View from Berkeley. Techn. Rep. UCB/EECS – 2006–183.
9. Asanovic K., et. al. The Parallel Computing Laboratory at U.C.Berkeley: A Research Agenda Based on the Berkeley View. Techn. Rep. UCB/EECS – 2008–23.
10. Dongarra J., Beckman P., et. al. – IESP: International Exascale Software Project. Read Map, 18 Nov., 2009, www.exascale.org.
11. Марчук Г.И., Дымников В.П. и др. Математическое моделирование общей циркуляции атмосферы и океана.–Л., Гидрометеиздат, 1984.
12. Голосов И.С., Горбенко Н.И., Гурьева Я.Л., Ильин В.П. и др. Комплексное моделирование технологических процессов в алюминиевом электролизере.–В сб.: “Актуальные научно-технические проблемы алюминиевой промышленности России”.–М., изд. ИГЕМ РАН, 2003, 72-80.
13. Ильин В.П. О численном решении прямых и обратных задач электромагнитной георазведки.–Сиб.Ж.Выч. Мат., т. 6, № 4, 2003, 381-394.