

Вторая инкарнация — это вычислительная математика, обеспечивающая нас методами и технологиями получения приближённых численных решений. Данный этап заключается в превращении математической модели в вычислительную модель. Отметим, что эта фундаментальная наука неизбежно пересекается со смежной областью — информатикой, а структурно делится на свою теоретическую и экспериментальную части. Если в первом случае мы имеем теоремы об аппроксимации, устойчивости, гарантированных оценках точности, вычислительной ресурсоёмкости и т.д., то вторая часть — это обязательная проверка теории практикой. В более чем полувековой эпохе перманентной компьютерной революции численные методы переживают бурное развитие, и последние десятилетия не являются исключением. Дискретные формы и внешние конечно-элементные исчисления, методы преобразования графов и символьные вычисления, геометрические численные интеграторы, симплектические алгоритмы решения гамильтоновых систем — вот неполный перечень новых направлений, которые в совокупности с недавними, но ставшими уже классическими достижениями XX столетия (вычислительная алгебра, аппроксимационные принципы, методы оптимизации и т.д.), составляют современное поколение алгоритмов решения уравнений математической физики.

Важно подчеркнуть, что как теоретическая, так и вычислительная математика представляют весь свод математических знаний по прикладным задачам, но каждая из них имеет дело со своими объектами, терминами и целями исследований. А поскольку науки не стоят на месте, то в нашем случае следует исключительно значимый для практики вывод: совокупности математических и вычислительных моделей представляют не законченные, а динамически меняющиеся структуры, и данная объективная сущность должна гибко поддерживаться средствами их реализации. Что касается численных методов, то с ними ситуация «усугубляется» необходимостью их распараллеливания и инвариантного отображения на архитектуры непрерывно меняющихся суперкомпьютеров.

### Фундаментальные проблемы вычислительного эксперимента

Главная ипостась в рассматриваемой нами цепочке — это математическое моделирование, т.е. проведение численных экспериментальных исследований, которые осуществляются на конкретной МВС средствами прикладного программного обеспечения, пока нами преднамеренно пропускаемого для последующего пристрастного рассмотрения. Системное программное обеспечение не является предметом нашего анализа и представляется как составная часть компьютера, создающая внешнюю операционную обстановку.

Понятие компьютерного, или вычислительного, моделирования является фундаментальным и заслуживает особого внимания. Создание моделей, методов и технологий очень важно и интересно, но венцом математического творчества является изучение прикладного предметного объекта. Вычислительные эксперименты могут иметь самый разный исследовательский характер, но в первую очередь должны быть проведены методические расчёты на специально подобранных примерах, которые могли бы охарактеризовать качество применяемого орудия моделирования. Здесь спецификациями являются адекватность модели, погрешности и устойчивость методов, оценки и контроль гарантированной точности, вычислительная сложность и ресурсоёмкость расчётов. Нахождение этих характеристик сродни градуировке, или калибровке, инструментария, который определяет производительность последующей работы и является неотъемлемой частью любой инженерной деятельности, без которой моделирование может отражать не явления реального мира, а виртуальные артефакты.

Что касается содержательных вычислений экстремального масштаба, то здесь можно в первую очередь выделить расчёты, направленные на получение новых фундаментальных знаний. Например, популярная сейчас проблема — моделирование эволюции или столкновения галактик, и

задачи такого рода могут при желании полностью загрузить ресурсы любого суперкомпьютера. Среди практических суперзадач есть не менее критические, и сюда относятся прогнозные проблемы, которые в принципе вряд ли будут решены окончательно: долгосрочный прогноз погоды и климата, землетрясений и экономических кризисов, а также различных техногенных катастроф. Наиболее востребованными должны быть «рутинные» проблемы: георазведка углеводородов и других полезных ископаемых, медицинские и фармакологические проблемы, материаловедение и нанотехнологии, традиционные и перспективные виды энергетики, проектирование новой техники в машиностроении, электронике, химических технологиях и т.д. Условия эффективности математических инноваций в таких массовых приложениях — это отнюдь не тривиальная проблема для достижения успешного результата.

Уместно привести наглядный пример междисциплинарной обратной суперзадачи о комплексной нефтеразведке на основе совместного анализа формируемых различными источниками сейсмических и электромагнитных полей, которые описываются системами дифференциальных уравнений Ламе и Максвелла. В данном случае геофизик проводит физические измерения генерируемых полей, а также из своих профессиональных или интуитивных соображений задает начальную модель изучаемой среды и проводит расчёты полей с помощью имеющегося у него ППП, т.е. решает прямую задачу. Затем вычисляется целевой функционал, характеризующий расхождение натурных и расчётных данных, по некоторым правилам формируется новая модель среды, повторяется решение прямой задачи и так процесс повторяется, пока целевой функционал не уменьшится до приемлемой величины. При успешном завершении этих последовательных приближений мы получаем искомым геометрические и материальные свойства моделируемой геоструктуры. Ресурсоёмкость такого компьютерного эксперимента определяется количеством решаемых прямых задач и их алгебраической размерностью, а эти величины могут достигать многих тысяч и миллиардов соответственно.

Потенциально применение моделирования — это повышение производительности труда, снижение себестоимости и повышение качества продукции, уменьшение рисков и другие факторы, которые должны поднимать планку востребованности суперкомпьютерных расчетов на небывалую высоту, чего в реальной жизни пока не происходит. Здесь можно назвать две основные причины. Первая — качество инструментов моделирования, на чем мы подробно остановимся позже.

### Кадры решают всё

Вторая проблема заключается в кадрах, являющихся экспертами в прикладных областях и призванными сделать квалифицированное моделирование своим неременным атрибутом профессиональной деятельности.

Здесь надо развеять имеющиеся заблуждения, которые можно выразить строчкой «беда, коль пироги начнет печь сапожник» и которым подвержены зачастую даже высококвалифицированные специалисты в своих научных или производственных отраслях (будем их условно называть физиками). Типичные рассуждения звучат так: «Мы сами всё запрограммируем и посчитаем» или «Дайте нам программиста, и мы с ним всё промоделируем». При этом зачастую добавляется или подразумевается: «Всё равно математики ничего не понимают в наших задачах». Последнее утверждение, к сожалению, имеет место, и для этого есть объективные обстоятельства.

Академик В.И. Арнольд много ратовал за единство теоретической физики и математики, предупреждал об опасности разрыва между этими науками и с ужасом констатировал появление поколения математиков, которые не читали «Ландау и Лившица». Действительно, данный уникальный многотомник, на котором зиждется мировая физика конца прошедшего столетия, не читается студентами и математическими факультетами. Сейчас маловероятно появление энциклопедистов — уникальных людей, являющихся носителями всех знаний своей эпохи. И по этой же причине физики всей своей реальной

жизни не хватит на то, чтобы профессионально овладеть современными вычислительными методами и технологиями. Поэтому физик, пытающийся по сермяжному сам промоделировать свои сложнейшие процессы — это атавизм прошлого века. Существует и другая крайность: от математика-вычислителя требуют провести расчёты, образно говоря, завтра, хотя физическая задача может требовать действительно непростого вхождения в суть проблемы. И здесь фактически возникает необходимость преодоления вознившегося языкового барьера между физиками и математиками.

Чтобы понять серьёзность такого положения, достаточно вспомнить библейскую притчу о Вавилонской башне, которая не была достроена только из-за того, что её создатели по Божьему повелению стали говорить на разных языках и не смогли понимать друг друга. А нашим аналогом Башни является Свод знаний, который мы строим общими усилиями.

Историческая практика показывает, что смешение языков не является чрезвычайной ситуацией, поскольку она легко преодолевается с помощью переводчиков, которые знают по крайней мере два языка, и для этого даже не надо полиглотов. Можно, кстати, вспомнить, что спасительная, казалось бы, идея всеобщего единого языка эсперанто не нашла мировой поддержки.

В научном плане процесс общения заключается в обмене информацией и по определению является прерогативой информатики. В этом профессиональном кругу один из самых популярных терминов — это трансляторы, конверторы, интерфейсы, в том числе «дружественный пользовательский интерфейс», — которые как раз и осуществляют взаимосогласованность разных программ или диалог между программой и человеком. Недаром одно из самых знаменитых определений Никлауса Вирта есть «программа = алгоритмы + структуры данных». Это утверждение в последние годы только актуализируется и проявляется в появлении современных технологий создания предметных специализированных языков (Domain Specific Language).

### Вычислительная интегрированная среда

Теперь обратимся к опущенной изначально инкарнации, миссия которой состоит в том, чтобы убрать существующие барьеры между математиками-вычислителями и практиками-«модельерами». Речь идёт о создании для последних не просто «спасательного круга» в океане алгоритмической и программистской информации, а вполне комфортного операционного окружения, «закрывающего» от физика излишние для него детали и кардинально повышающего эффективность работы конечного пользователя. Мы рассматриваем формирование вычислительной инструментальной среды, или базовой системы моделирования (БСМ), которая представляла бы общедоступный набор высокопроизводительных методов и технологий, поддерживающих все основные стадии крупномасштабного численного эксперимента:

- геометрическое и функциональное моделирование, т.е. интерактивное описание и модификация исходных постановок задач со сложными геометрическими объектами и контрастными материальными свойствами сред, задаваемых системами дифференциальных и/или интегральных уравнений, начально-краевыми условиями и целевыми функционалами для обратных задач;

- построение адаптивных неструктурированных сеток с возможностями локальных сгущений, многосеточных подходов и автоматической сбалансированной декомпозиции подобластей в целях распараллеливания;

- сеточные и спектральные аппроксимации исходных задач, включая методы конечных объёмов и конечных элементов (МКО и МКЭ) высокой точности;

- решение получаемых систем линейных и нелинейных алгебраических уравнений сверхвысоких порядков с масштабированным распараллеливанием на МВС;

- оптимизационные алгоритмы условной минимизации для решения обратных задач;

- постобработка и визуализация результатов расчёта;

- управление вычислительным процессом и средства принятия решений.

Совокупность программных реализаций

этих инструментальных компонент представляет собой экосистему, не ориентированную на конкретные задачи. Но различные прикладные пакеты могут быть оперативно собраны из таких «строительных» блоков, наподобие интеллектуального детского конструктора LEGO. Подчеркнем, что отдельные компоненты данного программного окружения могут разрабатываться независимыми группами, а внутренние интерфейсы должны обеспечиваться согласованными структурами данных (геометрическими и функциональными, сеточными и алгебраическими, и т.д.).

Необходимо отметить, что сейчас в Интернете имеется информация об аналогичных проектах, например, OpenFOAM, SALOME и DUNE, однако эти разработки основаны на более ограниченных концепциях, поскольку ориентированы на определенные классы задач и алгоритмов. Кроме того, мини-прототипом БСМ можно считать BLAS — базовую систему для линейной алгебры, активно используемую во всём компьютерном мире и постепенно расширяемую различными авторами.

БСМ предполагается рассчитанной на длительный жизненный цикл и удовлетворяющей некоторым естественным требованиям:

- обеспечение высокого разрешения расчётов с автоматическим контролем гарантированной точности численных решений, а также отсутствие программных ограничений на число степеней свободы в практических задачах;

- отображение структуры алгоритмов на архитектуру гетерогенных МВС и масштабируемый параллелизм на всех стадиях вычислительного эксперимента, без программных ограничений на количество процессоров и ядер;

- расширяемость состава математических моделей, алгоритмов и технологий, поддерживающая адаптацию программного обеспечения к динамической эволюции постановок задач, численных методов и компьютерных платформ;

- совместимость с внешними программами (включая САПРовские комплексы) на основе множественности представлений и конвертации форматов данных;

- поддержка интеллектуальных возможностей конфигурационного управления приложениями на основе концепции метамоделей и проблемно-ориентированных языков программирования.

Принципиальным моментом является то, что базовая система моделирования создается как проект вычислительного сообщества, открытый и к согласованному участию в нём различных групп разработчиков, и к доступному использованию его содержания в конкретных приложениях, т.е. в соответствии с концепцией открытых систем (Open Source). Это, однако, не противоречит тому, что на основе БСМ могут осуществляться коммерческие продукты и услуги.

Объём предполагаемых в таком проекте работ, естественно, невозможно осуществить без строгой координации и широкой (в том числе международной) кооперации, с вовлечением ведущих математиков и программистов. Реальная организация такого окружения, естественно, может осуществляться в альянсе с имеющимися подобными проектами типа упомянутых выше OpenFOAM и DUNE, а также при активном использовании распространённых в Интернете вычислительно-информационных инструментариев (генераторов сеток, алгебраических решателей и др.).

Проблема подготовки дефицитных и крайне ценных кадров с навыками в моделировании может решаться с помощью создания обучающих и демонстрационных версий БСМ, организации учебных курсов, повышения квалификации по технологиям вычислительного эксперимента, издания методических материалов и т.д.

В стратегическом плане создание интегрированной среды должно привнести смену парадигмы вычислений, обусловленную переходом количества в качество, по мере драматического приближения к экзамасштабам компьютерного оборудования. На повестке дня стоит переход к малоизвестным потоковым принципам обработки данных (модель dataflow), призванным решить проблему синхронизации процессов и извлечь максимум возможного из параллелизма алгоритмов.

(Окончание на стр. 8)