



ХІМІЧ

Олександр Миколайович —
член-кореспондент НАН
України, заступник директора
Інституту кібернетики
ім. В.М. Глушкова НАН України

СУПЕРКОМП'ЮТЕРНІ ТЕХНОЛОГІЇ ТА МАТЕМАТИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ СКЛАДНИХ СИСТЕМ

Шановні колеги!

Як ви знаєте, у сучасному світі неможливо створювати нову конкурентоспроможну продукцію без застосування передових інформаційних технологій. Очевидно, що математичне моделювання дає можливість на порядок (а інколи й більше) підвищити ефективність розв'язання різноманітних задач у сфері науки, техніки, економіки, промисловості, державного управління, безпекової політики держави тощо. Створення новітніх інформаційних технологій визначає рівень науково-технічного розвитку держави. Вони можуть стати локомотивом побудови хайтек-майбутнього: штучного інтелекту, кібербезпеки, блокчейн-технологій, роботизації тощо. З іншого боку, використання методів математичного моделювання, комп'ютерних технологій приводить до великорозмірних надскладних обчислювальних задач. Наприклад, при математичному моделюванні міцнісних характеристик літака в цілому виникає необхідність у розв'язуванні системи лінійних алгебраїчних рівнянь, порядок якої становить близько 30 млн. Постає проблема подолання трансобчислювальної складності, і високопродуктивні обчислення та суперкомп'ютерні технології на основі паралельних обчислень є одним з основних, а інколи і єдиним інструментом математичного моделювання в наукових та інженерних дослідженнях.

Однак разом зі зростанням можливостей комп'ютерів для наукових і інженерних досліджень зростають і проблеми, пов'язані з їх створенням і застосуванням. Збільшення числа процесорів (ядер) у паралельних комп'ютерах у цій ситуації означає зниження їх ефективності та істотне збільшення комунікаційних втрат. Уже зараз є значні відмінності внаслідок комунікаційних втрат між максимальною і експлуатаційною продуктивністю (див. Тор 500).

Підвищення ефективності суперкомп'ютерних технологій ґрунтується на реалізації сучасних парадигм математичного моделювання: комп'ютерна математика, високопродуктивні обчислення, штучний інтелект. Ефективна реалізація цих чинників дозволяє істотно перерозподілити роботи з постановки і розв'язування задач між користувачем і комп'ютером порівняно з традиційними технологіями, автоматизувати процес дослідження та розв'язання задач, забезпечити достовірність комп'ютерних розв'язків та істотно скоротити час моделювання. Коротко розповім про основні досягнення за цими напрямками.

Математичні моделі з наближеними даними. Розроблено математичний апарат комп'ютерного дослідження машинних моделей задач з наближеними даними і засобів оцінки достовірності комп'ютерних розв'язків; розвинуто теорію збурень, теорію похибок для задач псевдоінверсії та зваженої псевдоінверсії (вперше отримано оцінки для випадку незбігу рангів вихідної та збуреної матриць); одержано оцінки повної похибки розв'язків лінійних систем прямими та ітераційними методами. Розроблено критерії закінчення ітераційних процесів, що гарантують задану точність. Реалізовано апарат багаторозрядної і змішаної арифметики для MIMD- і гібридних MIMD-, SIMD-архітектур.

Методи високопродуктивних обчислень. Розроблено та досліджено методи паралельних обчислень та комп'ютерні алгоритми для базових задач обчислювальної математики з наближеними даними для MIMD-комп'ютерів та комп'ютерів гібридної архітектури; вперше запропоновано шарово-циклічну схему розподілу та обробки інформації на комп'ютерах паралельної MIMD-архітектури, схема увійшла у світову практику паралельних обчислень як інструмент побудови збалансованих паралельних алгоритмів; розроблено паралельні, розподілені та гібридні алгоритми для дослідження математичних моделей з розрідженою структурою даних; запропоновано методи структурної регуляризації розріджених матриць, реалізовано кеш-когерентні методи обробки даних.

Інтелектуалізація обчислень. Розроблено принципи, структуру та створено інтелектуальні програмні засоби з інноваційною функцією автоматичного адаптивного налаштування алгоритму, програми і топології паралельного комп'ютера на властивості задачі для дослідження та розв'язування базових задач обчислювальної математики: систем лінійних рівнянь, алгебраїчної проблеми власних значень, систем звичайних диференціальних рівнянь з початковими умовами, нелінійних рівнянь та систем.

Основні концептуальні засади інтелектуального програмного забезпечення такі:

- дослідження і розв'язання задач з наближеними даними;
- автоматизація процесу дослідження та розв'язання задачі;
- оцінка достовірності комп'ютерного розв'язку;
- реалізація принципу прихованого паралелізму;
- інтелектуальний інтерфейс для спілкування з користувачем.

З урахуванням наведених сучасних вимог створено програмно-технічні комплекси: сімейство суперкомп'ютерів СКІТ та сімейство інтелектуальних комп'ютерів Інпарком.

Сімейство комп'ютерів СКІТ. В Україні створено інфраструктуру для математичного моделювання на основі високопродуктивних обчислень на базі ресурсних центрів, основу яких становить суперкомп'ютер СКІТ Інституту кібернетики ім. В.М. Глушкова НАН України. На сьогодні ми маємо одну з найпотужніших кластерних систем з піковою продуктивністю близько 46 Тфлопс і кілька десятків технологій, які дозволяють з великою ефективністю вирішувати найскладніші завдання економіки, екології, захисту інформації, охорони навколишнього середовища, космічних досліджень, вивчення закономірностей біологічних процесів та ін. Інститут безкоштовно надає обчислювальний ресурс суперкомп'ютера СКІТ понад 30 академічним установам із 12 відділень НАН України, університетам, державним організаціям і підприємствам, які щороку розв'язують на СКІТ порядку 40–50 тис. задач.

Зокрема, СКІТ використовується для прогнозування наслідків скидання вод АЕС у водосховища, затоплення прибережних зон і заплав, в енергозбереженні (система «Маневр» для оптимізації рішень у задачах добового погодинного електричного і теплового навантаження енергоблоків теплоцентралі), геології та видобутку корисних копалин (система «Надра», програми моделювання та обробки даних сейсморозвідки складнопобудованих нафтогазових родовищ з наявністю ризикових геологічних розломів, зон тріщинуватості, соляних куполів), метеорології (система зведених гідрометеорологічних моделей з урахуванням супутникової інформації) та ін.

Спільно з літакобудівниками ДП «Антонов» розроблено програмно-технічний комплекс на базі суперкомп'ютера СКІТ і адаптовано його для розв'язання відповідних розрахункових задач надвеликої розмірності.

СКІТ успішно застосовують для розроблення новітніх комп'ютерних технологій математичного моделювання складних систем, процесів і для прийняття рішень у сфері державного управління. Так, створено ефективний сучасний інструментарій для розрахунку різних варіантів бюджетно-податкової політики на державному та регіональному рівнях і прогнозування середньострокових наслідків прийнятих рішень.

Створено низку технологій, зокрема технологію Nadra-3D, спрямованих на аналіз стану і прогноз динаміки процесів, які відбуваються в гідротехнічних спорудах, технічних конструкціях, ґрунтових схилах, масивах ґрунтів, що зазнають техногенного впливу. Зараз ця технологія використовується в роботах з оцінки запасів підземних вод регіонів України, для прийняття стратегічних рішень у сфері природокористування та будівництва важливих споруд.

Комплекс СКІТ пройшов сертифікацію як ресурсний центр Українського національного гріду і є членом європейської грид-інфраструктури EGI. Суперкомп'ютер СКІТ брав участь в обробленні даних Великого адронного колайдера (експеримент ALICE).

Сімейство інтелектуальних комп'ютерів Інпарком. Комп'ютери цього сімейства призначені для дослідження і розв'язання наукових та інженерних задач і покликані заповнити нішу між персональними комп'ютерами з порівняно низьким обчислювальним ресурсом та суперкомп'ютерами. В них реалізовано принцип «не числом, а вмінням». На відміну від традиційних інтелектуальні комп'ютери забезпечують дослідження властивостей задач та автоматизацію процесу адаптивного налаштування алгоритмів, програм та архітектури комп'ютера на властивості задач. Ще одним стимулом для створення таких комп'ютерів була економічна складова — для деяких задач достатньо ресурсу робочих станцій, тоді як використання суперкомп'ютерів справа дуже коштовна. Робочі станції можна також застосовувати для відлагодження програм для суперкомп'ютерів.

Інститут кібернетики спільно з ДП «Електронмаш» розробили концепцію та створили сімейство інтелектуальних паралельних комп'ютерів Інпарком різних архітектур: багатоядерної (MIMD), гібридної (MIMD, SIMD) та MIMD-архітектури на основі новітніх процесорів Intel Xeon Phi для розв'язування науково-технічних задач.

Технічні характеристики інтелектуальних комп'ютерів Інпарком адаптовані до розв'язання задач науки і інженерії, зокрема персональний суперкомп'ютер Інпарком_pg перевищує швидкістю 4-ядерного персонального комп'ютера приблизно в 100 разів на подвійній розрядності, тобто час розв'язання прикладної задачі середньої складності скорочується з 5 діб до однієї години.

З використанням Інпарком уже розв'язано складні задачі в різних галузях інженерії. Так, створено та впроваджено в практику цивільного і промислового будівництва першу вітчизняну інтелектуальну систему автоматизації проектування унікальних будівельних конструкцій. Досягнуто істотне скорочення часу отримання проектних рішень, що дало можливість перейти до тривимірних математичних моделей при прийнятті проектних рішень і

підвищити надійність комп'ютерного моделювання. Така система особливо важлива в практиці висотного будівництва, для супроводу життєвого циклу будівель з метою їх безпечної експлуатації. Розв'язано аеродинамічні задачі обтікання планера АН-148, проведено газодинамічні і міцнісні розрахунки деталей та вузлів авіадвигунів. Здійснено математичне моделювання процесів в'язкого руйнування товстостінних елементів трубопроводів з дефектами стоншення, що дає можливість для визначення залишкового ресурсу відповідальних конструкцій та прийняття обґрунтованих рішень щодо подовження нормативних термінів їх безпечної експлуатації. Реалізовано моделювання процесу обтікання виробу і визначення аеродинамічних характеристик літальних апаратів, математичне моделювання процесів фільтрації в багатокомпонентних геологічних середовищах тощо.

Отже, суперкомп'ютери відіграють важливу роль у супроводі ключових напрямів державної політики, від національної безпеки до кліматичних змін. Саме тому суперкомп'ютери стали національним пріоритетом у США, ЄС, Китаї. Єврокомісія започаткувала Європейську технологічну платформу для високопродуктивних обчислень з метою розроблення суперкомп'ютерних технологій та застосувань, включила відповідні дослідження до програми «Горизонт-2020». Україна має зробити необхідні кроки, щоб долучитися до списку країн, які розвивають ці вкрай важливі технології, а для цього необхідна підтримка на державному рівні.

Зважаючи на ініціативу Єврокомісії щодо розроблення Європейського суперкомп'ютера продуктивністю понад 10 петафлопсів до 2020 р. для створення технологій штучного інтелекту та їх застосування у сфері охорони здоров'я, відновлюваній енергетиці, кібербезпеці та інжинірингу, Інститут кібернетики, маючи досвідчений колектив висококваліфі-

кованих спеціалістів зі створення високопродуктивних комп'ютерів і досвід створення сімейств СКІТ і Інпарком, спільно з інженерами та науковцями ДП «Електронмаш» могли б долучитися до цього амбітного для Європи проекту.

З огляду на світові тенденції, зростання кількості користувачів та рівня складності задач, а також виняткову важливість застосування сучасних суперкомп'ютерних комплексів для забезпечення реалізації наукових досліджень і розробок за пріоритетними напрямками, слід невідкладно вжити заходів щодо модернізації і збільшення потужності кластерних комплексів сімейства СКІТ до 100 Тфлопс з перспективою подальшого її нарощування до 400–450 Тфлопс. Модернізація СКІТ дозволить нам посісти хоча б 400–300-те місце у світовому рейтингу (до речі, потужність одного китайського кластера Sunway у понад 5000 разів більша за СКІТ).

Інформатика майбутнього — це квантова інформатика. На сьогодні у світі вже виконано ряд принципових досліджень щодо квантової обробки інформації. Передбачається, що створення повноцінного масштабованого квантового комп'ютера та застосування його для криптоаналізу дозволить побудувати принципово нові моделі і методи захисту інформації. У постквантовому світі основні асиметричні криптографічні системи шифрування, цифрового підпису, автентифікації та інших протоколів асиметричної криптографії можна буде зламати за реальний час. Тому основним напрямом розвитку є створення криптографічних алгоритмів і систем захисту інформації, оснований на абсолютно нових принципах і стійких у постквантовій криптографії. На часі також дослідження проблем квантових обчислень для математичного моделювання, що забезпечить інтенсивний, принципово новий шлях нарощування ресурсу високопродуктивних обчислень.

Дякую за увагу!