МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РФ
Проект комиссии Президента по модернизации и техническому развитию экономики России «Создание системы подготовки высококвалифицированных кадров в области суперкомпьютерных технологий и специализированного программного обеспечения»
Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова

ПРЕЗЕНТАЦИИ
к конспекту лекций по дисциплине
«Введение в суперкомпьютерные технологии и их приложения»

Проф. Юрий Яковлевич Болдырев,
кафедра «Математическое и программное обеспечение высокопроизводительных вычислений»,
Физико-механический факультет
СПбГПУ

Раздел 1. Математическое моделирование его существо и развитие. Роль и место в нем компьютерных (суперкомпьютерных) систем и технологий.

1.1. Введение: цель курса и его основные задачи. .

Основная цель курса – ознакомление с современными суперкомпьютерными технологиями и их ролью и местом в системе технологий, которыми владеет человечество.

Такая цель достигается путем решения следующих основных задач:

- рассмотрение современной концепции математического моделирования и ролью и местом в ней компьютерных (суперкомпьютерных) систем и технологий;

- ознакомление с типами современных компьютеров (суперкомпьютеров) и историей их развития;

- ознакомление с историей развития программирования – от программирования в кодах до программных комплексов для инженерного и естественнонаучного анализа;

- роль и место компьютерных (суперкомпьютерных) технологий в системе технологий.

1.2. Современная концепция математического моделирования её существо. Важнейшие составляющие математического моделирования .

Сначала мы изложим современную Концепцию Математического моделирования в её существе.

Начнем с того, что математическое моделирование в течение XX века превратилось в тотальный инструментарий, которым владеет человечество. Сегодня его проявления видны во всем и не только в научных и инженерных исследованиях. Культура, искусство, медицина все эти области охватывает сегодня математическое моделировлание в самых разных формах.

Огромную роль в формировании современной концепции математического моделирования сыграла Российская наука в лице А.А. Самарского (1919-2008), О.М. Белоцерковского (р. 1927) и других выдающихся ученых.

Вообще, современное понимание существа математического моделирования начало формироваться в конце XIX начале XX веков. В его становлении выдающуюся роль сыграли труды Р. Фреше (1878-1973) и Д. Гильберта (1862-1943), которые ввели новое понимание близости в математике (соответственно, метрическое и гильбертово пространства). В итоге были созданы новые подходы в вычислительной математике и заложены теоретические основы современного математического моделирования. В дальнейшем в его формировании решающую роль сыграли новые идеи в формулировке задач математической физики в форме интегральных тождеств, а также восходящий к Р.Куранту (1888-1972) метод конечных элементов, послуживший основой разработки вариационных и проекционных разностных методов решения задач математической физики.

Итак, приведем поблочное описание Концепции Математического моделирования, следуя А. А. Самарскому.

***I блок**. Составление математической модели явления, процесса, задачи и т.д.* Это, вообще говоря, предметная область естественных и других наук, включая и социальные, где составляются **количественные соотношения** для описываемых явлений и процессов. И это труднейшая область научной деятельности.

Мы знаем законы Ньютона, выражаемые количественно, уравнения Максвелла электродинамики и так далее. Отметим лишь, что в М.М. рассматриваемый блок один из самых критикуемых и обсуждаемых, поскольку с ним связана не только простота или сложность описания изучаемого явления, но и каждый раз свое понимание исследователем глубины этого описания.

Итак, выделяя самое основное, блок - это некоторая «замена» реального физического или иного явления его математической моделью, то есть описание всех его свойств-характеристик с помощью математических соотношений. Эта идея оказывается чрезвычайно плодотворной, особенно при изучении сложных явлений и конструировании высокотехнологичных систем машин и приборов.

Например, исследование аэродинамики с
аэродинамической трубе, при больших скоро
скорости 200 м/с практически невозможно, к
математическую модель его обтекания, по
характеристики этого обтекания с помощь
этом, вычислительный эксперимент позвол
такими скоростями обтекания самолета, к
гиперзвуковым (более 2-3 км/с), какие принципиально невозможно получить в натурном эксперименте в аэродинамической трубе.

Однако, проблема полномасштабного применения методов математического моделирования является весьма многоплановой и имеет много трудных сторон.

Стоит задуматься, например, над вопросом точного описания явления с помощью количественных (математических) соотношений. Как точно мы описываем то или иное явление? Для одного круга проблем достаточно выявления главных факторов описывающих процесс, для другого требуется гораздо более тонкое и глубокое описание явления.

II блок. *Анализ математической корректности построенной математической модели, описывающей нашу задачу***.**

Весь спектр рассматриваемых здесь проблем носит сугубо математический характер и в подавляющем большинстве обходится исследователями. У опытного исследователя всегда есть понимание, «чутье» если угодно на то, что должно получиться. Однако такой путь весьма опасен, особенно для начинающих, и примеров, которые показывают к чему это может привести, имеется довольно много.

Путь отрицания анализа корректности в постановке задачи особенно опасен, при слепой вере в то «что компьютер все посчитает». Всегда желательно обратиться к профессионалам математикам, которые скажут Вам, есть ли в задаче какие - то проблемы.

Приведем пример. Пусть имеется система из двух линейных алгебраических уравнений:

$$1.0x_1+0.9x_2=1.9$$
$$0.9x_1+0.8x_2=1.7$$

Очевидно, что решением этой системы являются $x_1=x_2=1$. Однако, $x_1=3$ и $x_2==-1,22$ являются решением следующей системы:

$$1.0x_1+0.9x_2=1.902$$
$$0.9x_1+0.8x_2=1.724$$

то есть малое изменение

$$\delta b = (0,002;\ 0,024)^T$$

в исходных данных задачи, а именно в столбце правой части

$$b = (1,9;\ 1,7)^T$$

привело к очень большой ошибке в результате

$$\delta x = (2,0;\ -1,22)^T$$

Попытаемся выяснить, в чем дело, почему малые изменения исходных данных привели к столь большим изменениям решения?

В данном случае ситуации можно придать наглядный геометрический смысл (рис. 1). Действительно, как мы знаем из курса алгебры, решение системы из двух линейных уравнений находится как точка пересечения соответствующих линий:

$$x_2=(-1.0x_1+1.9)/0.9\ ,$$
$$x_2=(-0.9x_1+1.7)/0.8$$

Как видим наши линии, пересекающиеся в точке *(1,1)* почти параллельны. Поэтому малые изменения коэффициентов определяющих эти линии приводит к сильному изменению положения точки их пересечения.

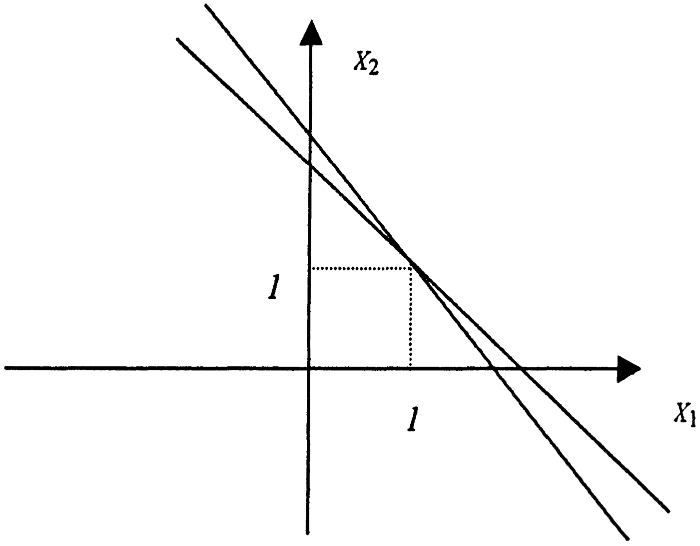


Рис. 1

Вообще решение проблемы корректности той или иной задачи включает в себя решение следующих ключевых задач:

- существования решения (решений) в том или ином классе (векторов, функций, целых или вещ. чисел и т.д.);
- единственность решения;
- устойчивость решения по отношению к возмущению параметров задачи (в нашем примере это возмущение правой части).

III блок. Переход от непрерывной математической модели к модели дискретной.

Отметим, предварительно, что в ряде задач этот блок может отсутствовать, то есть, он, как правило, характерен для таких моделей - явлений, которые описываются дифференциальными и интегральными соотношениями.

При переходе от непрерывной модели к дискретной мы, по сути дела, переформулируем нашу задачу и получаем некоторую новую в которой присутствует один или несколько параметров, характеризующих новую дискретную задачу и которых не было в исходной задаче.

Простым примером этого являются задача вычисления интеграла, когда мы вычисляем его с помощью формул трапеций или Симпсона, в которых появляется параметр N, как раз и характеризующий степень точности такого приближения.

Приведем еще один пример, наглядно демонстрирующий эту новую формулировку задачи. Пусть требуется решить задачу Коши (А.Л. Коши 1789-1857):

$$y' = -y, \quad x \in [0,1], \quad \text{при условии: } y(0)=1. \qquad (А)$$

Упростим задачу - пусть требуется найти только значение $y(1)$. Для поставленной задачи построим вычислительную процедуру, опираясь на определение производной в точке x_i.

$$y'(x_i)=\lim(y(x_i+\Delta x)-y(x_i))/\Delta x, \text{ при } \Delta x \to 0,$$

Теперь зафиксируем величину Δx и рассмотрим соответствующее приближение для производной. Заметим, что этому Δx отвечает такое разбиение промежутка [0,1]: $\Delta x=1/N$, например, на N одинаковых шагов (частей). В таком случае исходное уравнение (А) приближенно (на всем промежутке) мы можем записать в виде

$$y(x_i+\Delta x) - y(x_i) = -y(x_i)\Delta x \qquad (i=0,1,\dots,N-1)$$

или используя обозначение $y(x_i)=y_i$ $(i=0,1,\dots,N-1)$ перепишем последнюю систему уравнений в виде

$$y_{i+1}=y_i(1-\Delta x), \quad i=0,1,\dots,N-1 \qquad (Б)$$

При этом, в согласии с уначальным условием: $y0=1$ система уравнений (Б), , разрешается таким образом:

$$y_1=y_0(1-\Delta x)=1-\Delta x;$$

$$y_2=y_1(1-\Delta x)= (1-\Delta x)2;$$

$$\dots \dots \dots \dots \dots$$

$$y_{i+1}=y_i(1-\Delta x) = y_{i-1}(1-\Delta x)^2=\dots=(1-\Delta x)^{i+1}$$

Откуда для искомого $y_N=(1-\Delta x)\ N=(1-1/N)^N$ имеем $y \approx e^{-1}$, что как легко видеть является решением исходной задачи Коши при $x=1$. Понятно, что это решение мы могли написать и сразу, здесь же нам важно не это, а то, что мы его нашли «явно» как предельное для численного решения.

Чем оно характеризуется? Во-первых, оно получено из новой задачи (Б), в которой присутствует некоторый параметр N, - которого не было в исходной задаче (А). Во-вторых, как мы видим, при $N \to \infty$ решение новой (приближенной) задачи стремиться к решению нашей исходной.

IV блок. *Анализ математической корректности вновь полученной дискретной задачи (на основе исходной)*

По сути дела это и есть предмет вычислительной математики. Здесь рассматриваются те же проблемы, что и в блоке II, к которым добавляется еще одна задача, - весьма важная.

Эта задача должна ответить на такой вопрос: - будет ли при параметре $N \to \infty$ (или для их совокупности) дискретная задача, построенная в блоке III, стремиться к исходной непрерывной задаче?

V блок. *Написание алгоритма для дискретной задачи, то есть последовательности вычислительных шагов и его перенос на вычислительную систему, - программирование (или кодирование).*

Этот блок носит совершенно особый характер и его роль, со времени внедрения вычислительных машин в научную и инженерную практику, непрерывно менялась и как видится и будет меняться.

Вообще эта область Знания, сегодня относится к *программному обеспечению* вычислительных машин или используя принятую терминологию к области *«software».* Сегодня это огромный пласт прикладной математики, где на первый план выдвигаются так называемые наукоемкие программные системы (подробнее об этом далее).

VI блок. ***Отладка программы (или настройка программной системы на нашу задачу), то есть её тестирование, получение результатов и их анализ.***

Изложенная схема, конечно, является очень общей и её применение в полном объёме отдельным исследователем при решении какой либо задачи, в общем, не характерно и является, как правило, функцией научной группы или коллектива.

1.3. Роль математического моделирования в познании природы и его фундаментальная значимость для инженерного и естественнонаучного анализа.

Математическое моделирование, оказало по своему существу не меньшее, а скорее даже большее влияние на достижения цивилизации, чем революция в физике, восходящая к теории А.Эйнштейна и работам великих физиков: Э. Резерфорда, Н.Бора и других, работавших на рубеже XIX - XX веков.

Действительно, замена эксперимента физического, который стоял во главе угла во все века в исследовательской и инженерной деятельности, на эксперимент вычислительный (которым по своей сути и является математическое моделирование) привел к революционной смене методологии в изучение природы и развитии техники.

1.4. Развитие и роль и место в математическом моделировании компьютерных систем и технологий

Безусловно, прорывом в широчайшем внедрении Математического моделирования в инженерную и научную практику стало появление в начале второй половины XX века ЭВМ и сопутствующих технологий. Сегодня они играют главенствующую роль в проникновении Математического моделирования во все отрасли жизни – от науки до искусства и т.д. При этом использование суперЭВМ позволяет решать такие классы задач, к которым не могли даже подступиться исследователи и инженеры предыдущих поколений.

1.5. Суперкомпьютеры и что такое суперкомпьютерные технологии.

Что же мы понимаем под суперкомпьютерными технологиями. Это следующая «триада»:

1. **Производство СуперЭВМ.**
2. **Разработка программного обеспечения для СуперЭВМ.**
3. **Совокупность знаний и технологий для решения задач пп. 1 и 2, а также для задач предметного использования СуперЭВМ**

По своей сути курс раскрывает содержание этой триады.

В частности, в области программного обеспечения современные компьютерные (суперкомпьютерные) технологии продвинулись очень далеко, приняв форму наукоемких программных комплексов (систем). Для своего применения такие системы требуют глубоких физико-математических знаний, знаний вычислительной математики и конечно предметной, например, инженерной области физики, механики, биологии и т.д.

Сегодня, решение очень большого числа задач оказывается возможным в рамках таких комплексов, в которых, говоря образно, «встроена» изложенная выше концепция математического моделирования. Но об этом более подробно мы расскажем далее

Что же мы понимаем под суперкомпьютерными технологиями. Это следующая «триада»:

1. Производство СуперЭВМ.
2. Разработка программного обеспечения для СуперЭВМ.
3. Совокупность знаний и технологий для решения задач пп. 1 и 2, а также для задач предметного использования СуперЭВМ.

По своей сути курс раскрывает содержание этой триады.

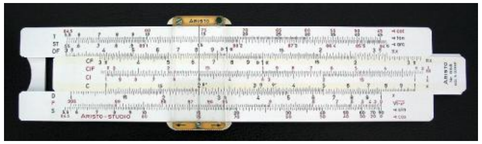
В частности, в области программного обеспечения современные компьютерные (суперкомпьютерные) технологии продвинулись очень далеко, приняв форму наукоемких программных комплексов (систем). Для своего применения такие системы требуют глубоких физико-математических знаний, знаний вычислительной математики и конечно предметной, например, инженерной области физики, механики, биологии и т.д.

Сегодня, решение очень большого числа задач оказывается возможным в рамках таких комплексов, в которых, говоря образно, «встроена» изложенная выше концепция математического моделирования. Но об этом более подробно мы расскажем далее.

1.6. История развития ЭВМ в мире и в нашей стране – от первых ЭВМ к суперЭВМ.

Вообще говоря, тема истории развития ЭВМ интересна и поучительна со всех сторон, - как с научно-технической, так и с социально-экономической. Прежде всего, напомним историю вычислителей, созданных людьми в разных странах. Это в первую очередь такие наиболее известные, типы инструментов и машин, основанные на механических и электромеханических принципах.

- *К механическим вычислителям можно отнести:*
- Абак и счеты, логарифмическая линейка (1617).
- Вычислительная машина Паскаля (1642).
- Разностная и аналитическая машина Бэбиджа (1834).
- Арифмометр Лейбница (1673).
- Арифмометр Однера (1876) («Феликс»).



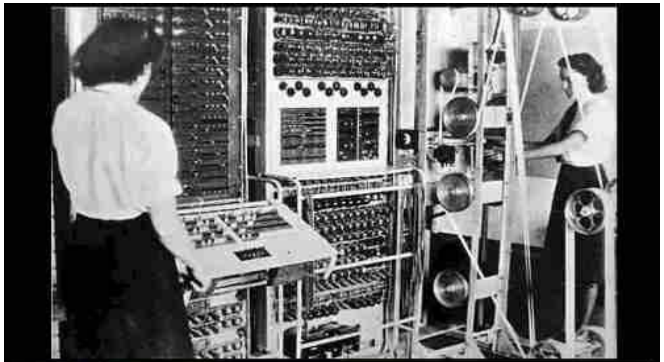
К электромеханическим вычислителям обычно относят

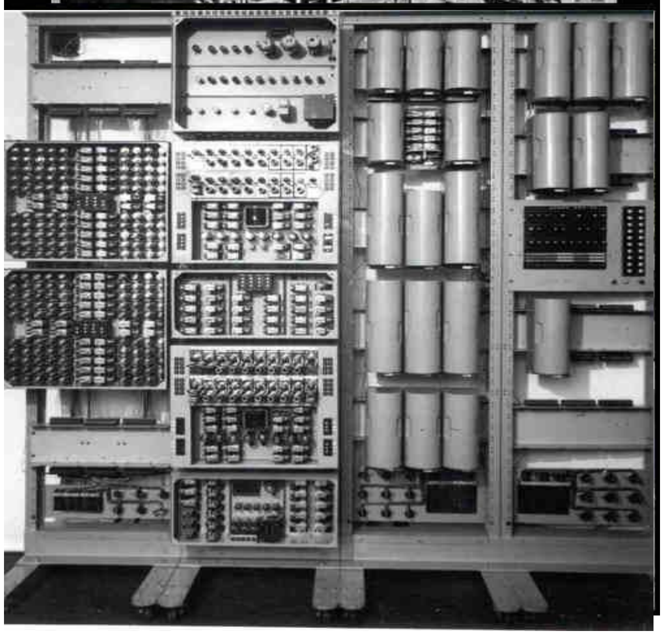
- **Табулятор** Холлерита(1887).

  В табуляторе на каждый объект переписи заводилась 80-колоночная перфокарта, в которой с помощью перфоратора в определенных позициях делались отверстия, отвечающие определенным значениям признаков.

- **Проекты Конрада Цузе** (Германия, 1938-1945).

  Разработанный немецким инженером Конрадом Цузе (Konrad Zuse), Z4 последовал за моделью Z3 1941 года, являющейся, по –видимому, первой программируемой автоматической вычислительной машиной. Z4 потреблял около 4 кВт энергии и работал на тактовой частоте около 40 Гц. В качестве памяти выступали 64 32-битных регистра – эквивалент 256 байт памяти. Одна операция сложения выполнялась за 0,4 с.

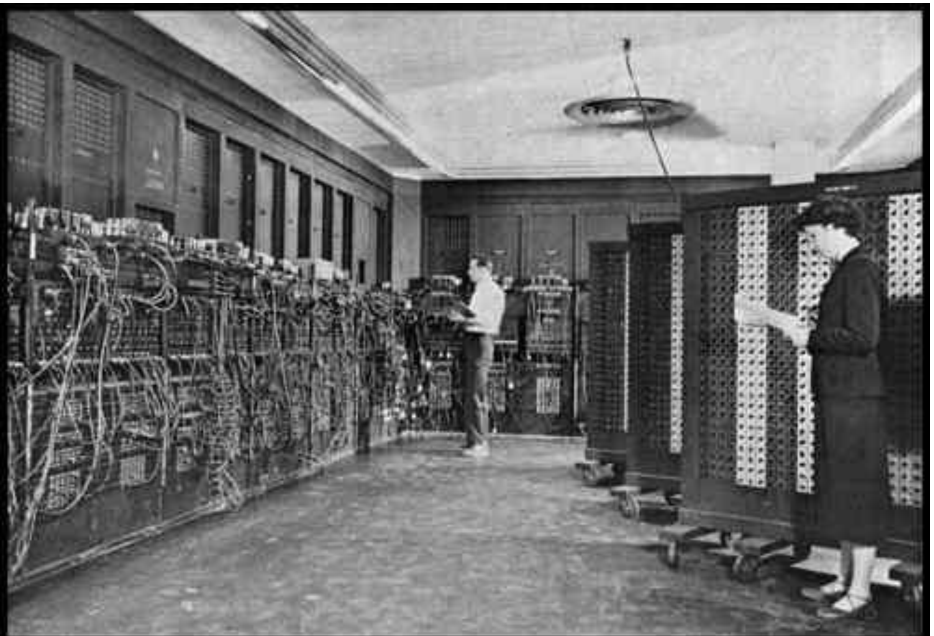


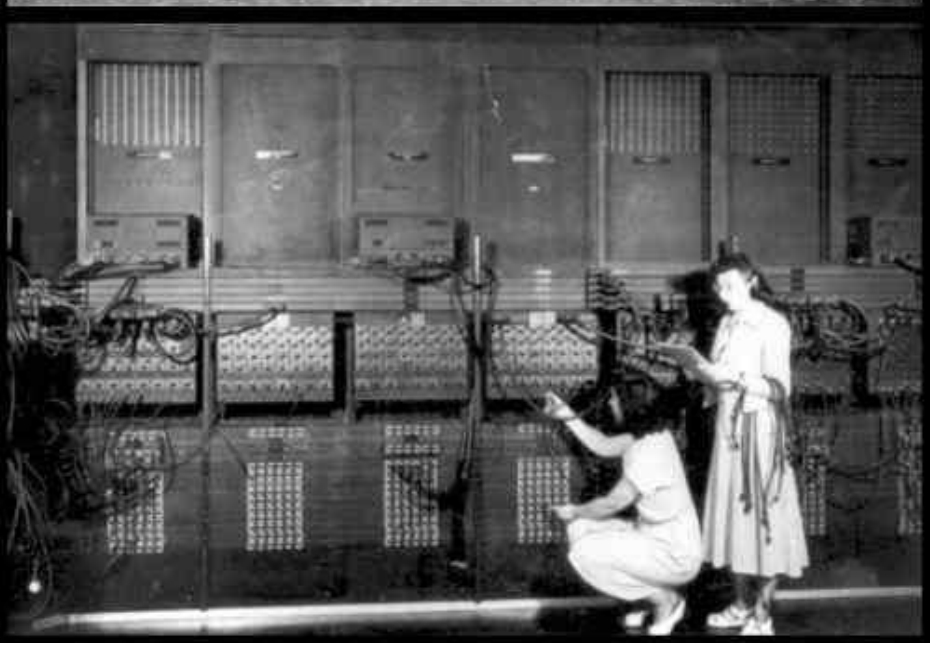


- **Проект MARK-1 (Эйкен, IBM, 1939-1944) и MARK-2.**

Использовались под конец Второй мировой войны криптографами для взлома зашифрованных вермахтом сообщений. Машина обрабатывала 5000 символов в секунду (скорость могла быть повышена, но значительно увеличивался риск повреждения бумажных лент с данными). **MARK-1** содержал около 765 тысяч деталей (электромеханических реле, переключателей), соединенных проводами общей длинной более 800 метров. Длина компьютера составляла почти 17 м, а высота — более 2,5 м при весе около 4,5 т. Основные вычислительные модули синхронизировались механически при помощи 15-метрового вала, приводимого в движение электрическим двигателем мощностью 4 кВт.

- **Проекты Джорджа Стибица (Bell Laboratories, 1939-1947).**





Первая действующая ЭВМ **ENIAC** (Electronic Numerical Integrator And Calculator) была создана в 1945 г. в Пенсильванском университете.

Длина 26 м, высота 6 м, масса 27т. 18000 ламп, 1500 реле, потребляемая мощность 150 кВт.

Когда ENIAC продемонстрировали в 1946 году, американская пресса немедленно окрестила его.

Это был первый универсальный электронный цифровой компьютер. ENIAC, в частности, использовали для вычислений, связанных с созданием водородной бомбы. Программирование могло занимать недели и требовало выполнения множества манипуляций с аппаратной структурой вручную.

Развитие отечественных ЭВМ

- В развитии отечественной вычислительной техники можно выделить следующие важнейшие этапы: зарождение (1948 - 1952 годы);

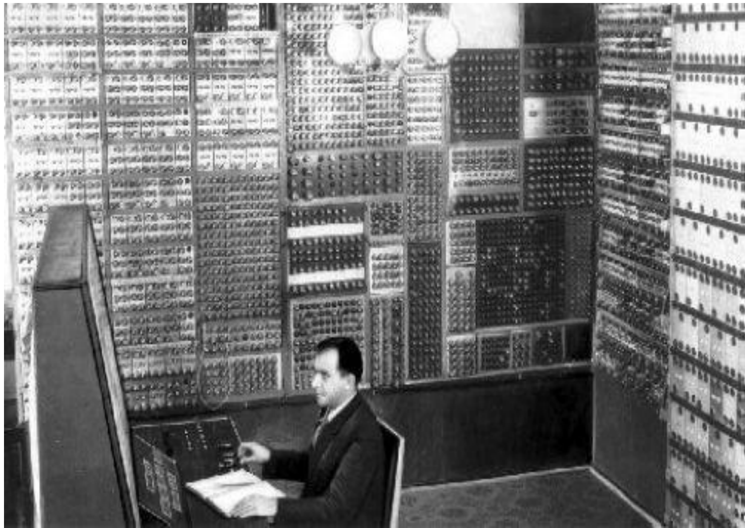
  - расцвет (1950-е – 1960-е годы);

  - подражание (1970-е – 1980-е годы);

  - кризис (1990-е годы).

- Этап зарождения интересен и поучителен для нынешнего времени. Началось с того, что в 1950 году академик М.А. Лаврентьев написал письмо И.В. Сталину, в котором обратил внимание на важность вычислительных машин для обороны страны. В результате в удивительно короткие сроки были подготовлены соответствующие постановления правительства и началась разработка ЭВМ одновременно в Академии наук СССР и Министерстве машиностроения и приборостроения.

В результате уже в 1951 году появилась первая отечественная ЭВМ МЭСМ (1951 г., Киев), гл. конструктор С.А. Лебедев. Она имела следующие характеристики: 6000 электронных ламп, быстродействие 50 оп./с, ОЗУ 94 16-разрядных слов, потребляемая мощность 15 кВт, занимаемая площадь - 60 кв.м.



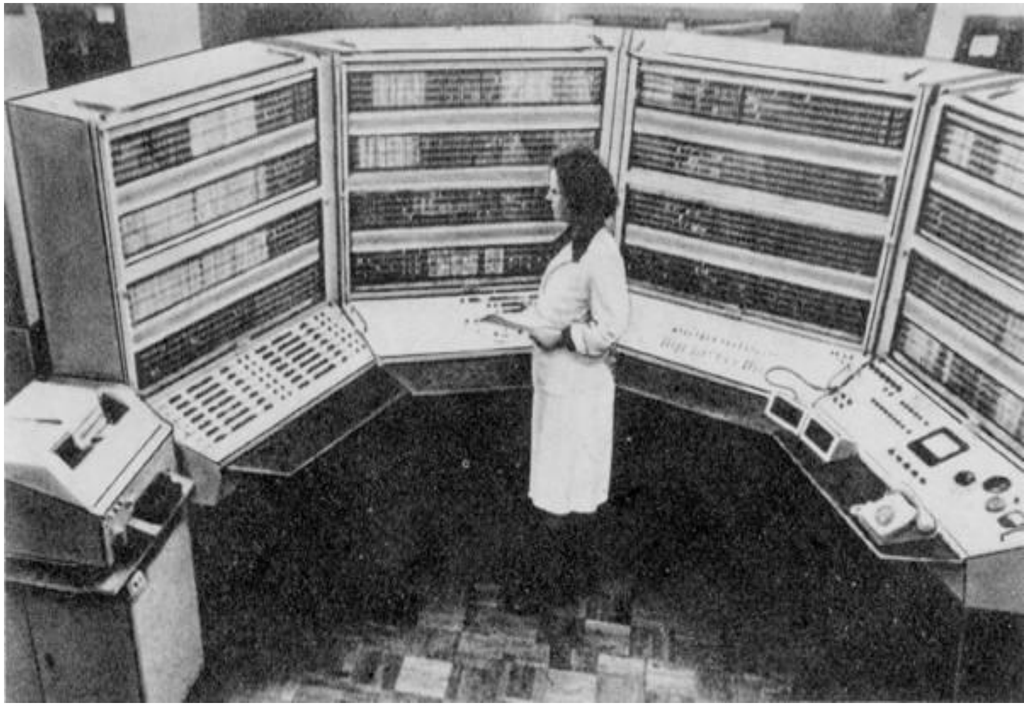
Одной из вершин отечественных разработок была ЭВМ БЭСМ-6 (1968 г.)

Это наиболее мощная из отечественных машин 2-го поколения, гл. конструктор С.А. Лебедев. Характеристики: 60 тыс. транзисторов, 180 тыс. диодов, быстродействие 1 млн оп./с, ОЗУ от 32К до128К 48-разрядных слов.

Производилась до 1987 г, всего выпущено 355 эк

Теперь уместно перейти к тому, а что мы понимаем под суперЭВМ!

Уместно потому, что 1969-1971 мне довелось работать на машинах БЭСМ 2М и М-220. Эти машины имели скорость порядка 5000-15000 оп/сек. Вопрос можно ли было назвать тогда БЭСМ-6 назвать суперЭВМ в сравнении с этими машинами? Наверно можно, т.к. её скорость была на 2 порядка выше!



Но, очевидно, что мы не можем отнести БЭСМ-6 к суперЭВМ по сегодняшним меркам! То есть понятие суперЭВМ временно верное.

К определению понятия суперЭВМ
(или что мы под этим понимаем)

Вообще говоря точного определения понятия суперЭВМ нет!

Имеется несколько определений, носящих не вполне строгий характер.

Например.

Было такое «определение» суперкомпьютер – это вычислительная система стоимостью 1-2 млн. долларов (!?).

Или, - суперкомпьютер это вычислительная система, производительность которой всего на порядок менее необходимой для решения «современных задач» (!?). (Но что такое современная задача?).

Нелепее всего выглядит определение Оксфордовского словаря вычислительной техники 1986 г. Оно предписывало суперкомпьютеру требование иметь производительность в 10 млн. арифметических операций в секунду! И не меньше!

Нам видится наиболее приемлемым определение суперкомпьютера как «сосредоточенной» вычислительной системы, которая имеет производительность на 3-4 порядка более высокую, чем массово распространенные компьютеры.

Итак, мы отнесли к **суперЭВМ** такие вычислительные системы, которые на данный момент времени имеют вычислительные мощности на 3-4 порядка более высокие чем массово распространенные машины.

Например, самый мощный на момент написания этих строк суперкомпьютер **JAGUAR-Cray XT5**, занимающий первую позицию в мировом рейтинге (см. далее таблицу 1) имеет 224162 ядер – процессоров (данная суперЭВМ построена на так называемых многоядерных процессорах, где каждый из процессоров **AMD Opteron Six Core 2.6 GHz** имеет по 6 ядер). Таким образом, с некоторой долей условности можно сказать, что суперЭВМ JAGUAR-Cray XT5 в 224162 раз производительнее, чем ординарный персональный компьютер!