

# ПОДСИСТЕМЫ УПРАВЛЕНИЯ И КОНТРОЛЯ РАБОТОСПОСОБНОСТИ РЕШАЕМОЙ ЗАДАЧИ И АППАРАТУРЫ ГЕТЕРОГЕННОГО ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОГО КЛАСТЕРА

*Е.А. Шамов*

*Волгоградский государственный технический университет*

Рассматриваются методы и подходы по организации возможности управления и контроля работоспособности высокопроизводительных вычислительных комплексов. Показано, что использование командной логики и организация контроля работоспособности аппаратуры и задач дает возможность динамически управлять с необходимым функционалом не только кластером в целом, но и каждой конкретной задачей в частности. Кроме того, такой подход позволяет организовывать надежные вычисления, как на уровне потока задач, так и на уровне отдельно решаемой задачи. В результате, применение этого подхода апробировано и показало эффективность при работе систем моделирования динамики электронных потоков и динамики жидкости.

## **Введение**

В современном мире существует большое количество задач, требующих значительных вычислительных затрат. Задачи данного класса не представляется возможным решать при помощи обычных ЭВМ с последовательными методами, алгоритмами и программами за приемлемое время, а иногда и вовсе нет возможности их решить по причине нехватки ресурсов. Единственная возможность решать такие задачи – применять специальные аппаратно-программные комплексы (кластеры, гриды, облачные системы). К сожалению, при создании, программировании, управлении и, в общем, работе таких комплексов существует ряд трудностей и проблем, которые необходимо эффективно решать.

Одни из ключевых направлений развития высокопроизводительных вычислительных комплексов – управление, надежность и отказоустойчивость. При этом стоит особо отметить, что развитие подсистем управления и организация надежных вычислений относится не только непосредственно к комплексу, но и к решаемым на нем задачам. По сути, современная ситуация обстоит таким образом, что нет возможности управлять комплексом в полной мере или в той степени и теми функциями, которые необходимы. Кроме того, насколько бы ни был комплекс высоконадежным, у него все равно может отказывать оборудование, что, как правило, приводит к завершению корректного выполнения задачи или даже к «зависанию» выполнения задачи, которое нет возможности или сложно обнаружить извне задачи.

## **Управление комплексом**

Современные высокопроизводительные вычислительные комплексы, как правило, имеют подсистемы управления с ограниченным функционалом. В основном такие подсистемы позволяют лишь управлять очередью задач и отображают текущее состояние вычислительных узлов (например, MS HPC Cluster Manager). Такие подсистемы базируются на жесткой логике и обладают соответствующими достоинствами и недостатками.

Стоит отметить, что большинство программ, разрабатываемых для высокопроизводительных комплексов, также построены на жесткой логике и, как правило, не облада-

ют внешними функциями управления (нет возможности контролировать извне). Однако такие программы удобны тем, что работают по принципу «запустил и забыл», но для ряда случаев это неприемлемо. Простейшим примером являются задачи, работающие на пета- и экзафлопсных (в перспективе) комплексах. При работе таких комплексов отказы оборудования – достаточно частое явление, а значит, каждая программа должна корректно и эффективно работать при соответствующих отказах, что очень сложно предусмотреть при использовании жесткой логики. Еще одним примером служит класс задач, требующих организации эффективной динамической нагрузки. Динамическая нагрузка при использовании жесткой логики требует значительных усилий при проектировании программы, и к тому же практически нет возможности реализовывать нагрузку эффективно при смене аппаратной платформы и изменении вычислительной сложности задачи или подзадач и т.д. По сути, жесткая логика и называется жесткой, так как не обладает свойством приспособляемости под какие-либо изменения.

Для организации универсальной системы управления предлагается использовать командную логику – подход, при котором вычислительный комплекс и каждая отдельно решаемая задача выполняют соответствующий поток инструкций. По причине того, что поток можно динамически менять, появляется возможность автоматически перестраивать ход работы комплекса и/или задач для их корректного функционирования и повышения эффективности.

Командная логика позволяет:

- управлять любыми аспектами работы комплекса, а именно его очередями, аппаратурой, индивидуально каждой задачей (если требуется) и т.д.;

- полностью управлять ходом выполнения каждой задачи и ее подзадачами.

В итоге командная логика предоставляет возможность полностью управлять всем комплексом, как единым целым, и каждой, отдельно взятой, его частью.

К сожалению, за использование командной логики приходится зачастую платить производительностью, но потери можно свести к минимуму при помощи специальных подходов считывания и обработки команд. В целом основной проблемой применения командной логики является сложность проектирования и кодирования, которые и без нее сложно реализовать по причине использования огромного количества различных методов, технологий и подходов.

### **Высокая надежность комплекса**

Организация надежных вычислений на высокопроизводительном вычислительном комплексе – трудная и ресурсоемкая задача. К тому же эффективность современных систем повышения надежности оставляет желать лучшего.

Проблема надежности приводит к тому, что необходимо контролировать не только аппаратуру комплекса, но и ход выполнения задачи и отдельно взятых ее частей. Для корректного функционирования комплекса необходимо не только вовремя находить отказы и сбои оборудования, но и динамически модифицировать логику работы задач и комплекса.

В итоге для высоконадежных вычислений необходимо динамически отлавливать отказы и сбои, а соответственно лучше всего использовать командную логику, которая позволяет проводить диагностику комплекса, «на лету» перераспределять подзадачи, предназначенные для расчета на вышедшем из строя оборудовании, скорректировать задачи, находящиеся в очереди и т.д. Без организации такого контроля зачастую решение задачи попадает в тупиковую ситуацию, что сложно обнаружить и, как результат, будут впустую потрачены ресурсы.

Простейшим способом повышения надежности является организация опроса подсистем и оборудования комплекса, а также каждого узла (потока) решаемой задачи.

При грамотной реализации такой способ позволяет обнаруживать отказы и, автоматически направлять ход решения задач в нужное русло.

### Апробация

Проверка практической применимости и эффективности подсистем управления и контроля работоспособности решаемой задачи и аппаратуры комплекса была частями реализована в системах моделирования динамики жидкости и электронных потоков. Отказы систем эмитировались при помощи специальных функций прекращения корректной работы потока узла, а также физическим отключением линий сети. Подсистемы управления и контроля работоспособности экспериментально подтвердили свою эффективность, так как обнаруживали все отказы и эффективно перераспределяли нагрузку между оставшимися ресурсами, а в итоге задачи корректно завершали свое функционирование и выдавали правильные результаты.

Далее коротко рассмотрим решение задачи падения куба воды на ограниченную наклонную поверхность при помощи созданной системы моделирования динамики жидкости. Данная система базируется на межмолекулярном взаимодействии на основе потенциала Леннарда-Джонса. При моделировании динамики жидкостей на молекулярном уровне важны такие свойства реальных жидкостей, как вязкость и сжимаемость. На рис. 1 в области 1 выделены центры масс, не подвергшиеся явлениям сжимаемости и вязкости, а в области 2 выделены центры масс, подвергающие или подвергшиеся явлению вязкости.

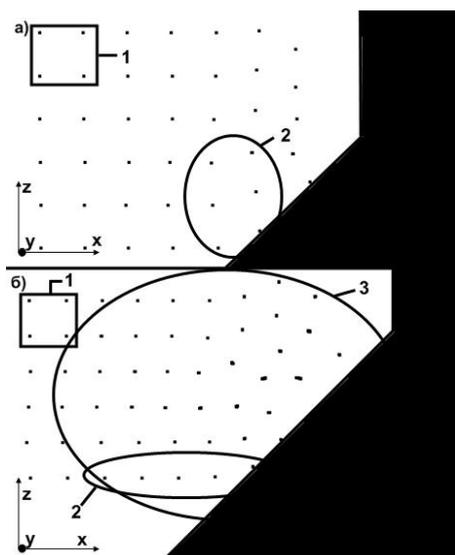


Рис. 1. Явления сжимаемости и вязкости при ударе куба воды об ограниченную наклонную поверхность

В области 3 на рис. 1 выделены комплексные явления сжимаемости и вязкости. Изучение рисунка 1 дает возможность наглядно убедиться в том, что центры масс отдельных частей куба воды смещаются, а соответственно проявляются явления вязкости и сжимаемости жидкости, что, в свою очередь, подтверждает адекватность метода и модели.

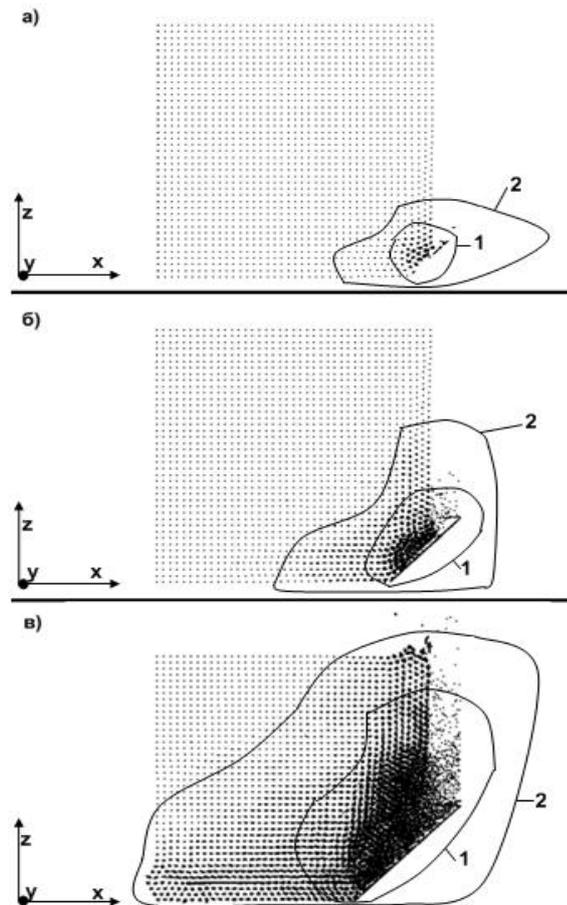


Рис. 2. Явление зарождения и динамики волн внутри куба воды

На рис. 2 изображены картины зарождения и динамика волн внутри куба воды при столкновении с ограничительной поверхностью. Области 2 на рис. 2 показывают передовой край волны, а области 1 показывают край волны, приводящий к сильным «деформациям».

Рис. 2а, 2б, 2в отличаются лишь временем моделирования – 0,4, 0,41 и 0,45 секунды соответственно. Как видно из рис. 2в, волны давления жидкости приводят даже к отделению нескольких капель жидкости от основной массы не по причине соударения, а по причине воздействия высокоэнергетической волны. Рисунки 1 и 2 подтверждают адекватность используемых методов, применяемых для моделирования задач гидродинамики.

Рассмотрим теперь эффективность применения технологии параллельного программирования на кластере центральных и графических процессорных устройств (ЦПУ и ГПУ). В рамках исследования на базе Волгоградского государственного технического университета (ВолгГТУ), кафедры ЭВМ и систем, был собран кластер ЦПУ и ГПУ с пиковой мощностью в 8 TFlops.

Таблица 1. Эффективность распараллеливания задач гидродинамики

Число контролируемых центров масс, штук	Число итераций, штук	Аппроксимированное время расчета на одном ядре ЦПУ, с (дни)	Время расчета на кластере ЦПУ и ГПУ, с (дни)	Ускорение, разы
1331	10000	37891 (0.43855)	137 (0.0015856)	276
10648	10000	2847951 (32.96239)	5456 (0.06315)	522
68921	10000	45224657 (523.4336)	72943(0.8443)	620

Из табл. 1 можно сделать заключение о том, что распараллеливание задачи падения куба воды на ограниченную наклонную поверхность при помощи технологий MPI, OpenMP и Nvidia CUDA является эффективным, а соответственно, методы, примененные для задач гидродинамики, также эффективны.

### **Заключение**

Моделирование задач динамики жидкостей и электронных потоков на кластере ЦПУ и ГПУ позволяет на несколько порядков сократить время расчета, получать более точные данные и проводить качественный анализ. Благодаря использованию параллельного программирования появилась возможность анализа сложных электромагнитных и гидродинамических систем и устройств, что крайне затруднительно при его отсутствии. В результате, использование командной логики и организация контроля работоспособности аппаратуры и задач дало возможность динамически управлять не только кластером в целом, но и каждой конкретной задачей в частности. Кроме того, такой подход позволил организовывать надежные вычисления, как на уровне потока задач, так и на уровне отдельно решаемой задачи.

### **Литература**

1. Шеин А.Г., Шамов Е.А. Стохастическая модель динамики плоского электронного потока в скрещенных статических электрическом и магнитном полях // Известия ВолгГТУ. Сер. Электроника, измерительная техника, радиотехника и связь. Вып. 3. 2009. – С. 48–53.
2. Шамов Е.А. Проблемы, возникающие при моделировании динамики произвольных объектов на кластере центральных и графических процессорных устройств. // Барышникова С.С., Жариков Д.Н., Попов Д.С. – Пермь: Издательство ПГТУ, 2010.
3. Шамов Е.А., Лукьянов В.С., Жариков Д.Н., Попов Д.С. Технологии достижения параллелизма mpi, cuda, openmp и моделирование динамики электронного потока в скрещенных полях с применением гибрида технологий mpi и openmp. // Известия ВолгГТУ. Сер. Актуальные проблемы управления, вычислительной техники и информатики в технических системах. Вып. 8. 2010.
4. Шамов Е.А. Применение параллельного программирования при моделировании динамики плоского электронного потока в скрещенных статических электрическом и магнитном полях // Известия ВолгГТУ. Сер. Электроника, измерительная техника, радиотехника и связь. 2011.
5. Шамов Е.А., Шеин А.Г., Андреев А.Е., Барышникова С.С. О применении системы моделирования динамики произвольных объектов для решения задач гидродинамики на примере моделирования падения куба воды на ограниченную наклонную поверхность. // Известия ВолгГТУ. Сер. Актуальные проблемы управления, вычислительной техники и информатики в технических системах. Вып. 11. 2011. С. 37–41.
6. Шамов Е.А. Моделирование динамики электронного потока в скрещенных полях на кластере центральных и графических процессорных устройств // Шестнадцатая Всероссийская научная конференция ВНКСФ-16. Волгоград – 2010.
7. Shamov E.A., Shein A.G. Introduction to the method of space miniaturization / First International Conference "Innovative Information Technologies" – Czech Republic, Prague – 2012.

# ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ГРАФИЧЕСКИХ УСКОРИТЕЛЕЙ ПРИ РАСЧЕТЕ ОПТИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ НАНОКРИСТАЛЛОВ В РАМКАХ ТЕОРИИ ФУНКЦИОНАЛА ПЛОТНОСТИ

*А.В. Швецов, Д.В. Осокин*

*Нижегородский госуниверситет им. Н.И. Лобачевского*

Рассматривается задача расчета оптических свойств многоэлектронных систем на основе динамической версии метода функционала плотности. Предлагается параллельный алгоритм расчета для систем с графическими ускорителями, который может быть использован для определения спектров как изолированных, так и взаимодействующих кремниевых нанокристаллов (квантовых точек). Приведены результаты вычислительных экспериментов.

## **Введение**

Расчет оптических свойств многоэлектронных атомных и молекулярных систем представляет огромный интерес для спектроскопии, лазерной физики и оптоэлектронных приложений. В современной оптоэлектронике актуальной проблемой является исследование воздействия лазерного поля на отдельные кремниевые нанокристаллы (квантовые точки) и ансамбли взаимодействующих нанокристаллов, в которых состояния оккупируют большое число электронов. Интерес также представляют сложные гибридные структуры, в которых проявляется резонансная связь дискретных состояний экситонов в полупроводниковых квантовых точках с плазмонами в металлических наночастицах, приводящая к усилению фотолюминесценции полупроводниковых квантовых точек.

Для описания возбуждений в наноструктурах необходимо решить уравнение Шредингера для многоэлектронной волновой функции в многомерном пространстве и времени. В случае систем, состоящих из десятков и более частиц, подход, основанный на прямом решении уравнения Шредингера для многочастичной волновой функции, является крайне затратным. Упрощение возможно, если ограничиться кругом явлений, где проявляются свойства наблюдаемых, определяемых только электронной плотностью. В основе теории Кона-Шэма (теории функционала плотности) лежит тот факт, что наблюдаемые многоэлектронные системы могут быть выражены через электронную плотность и для этого не требуется находить многоэлектронную волновую функцию. Теория Кона-Шэма расширена Рунге и Гроссом на случай нестационарных систем и позволяет рассчитывать динамический отклик многоэлектронных систем.

Расчеты даже в рамках теории функционала плотности в случае большого числа частиц требуют большого объема вычислений. Одним из выходов является разработка параллельной реализации данного метода на графических процессорах.

## **1. Моделирование спектров электронных возбуждений в нанокристаллах**

Ограничим рассмотрение взаимодействием сильного лазерного поля с электронной подсистемой в кремниевой квантовой точке; расчет отклика проведем в рамках нестационарной теории функционала плотности.

Отправной точкой теории функционала плотности является уравнение Шредингера для многоэлектронной функции  $\psi(t)$  в присутствии нестационарного поля. Гамильтониан системы  $H=T+V_{ext}+W_{ee}$  представляет собой сумму кинетической энергии электронов, потенциала взаимодействия электронов с ядрами решетки и внешними полями, а также энергии электрон-электронного взаимодействия. Одноэлектронный гамильтониан в квантовой точке берется в приближении эффективной массы. С учетом сказанного, гамильтониан многоэлектронной системы записывается в виде

$$\hat{H}(t) = -\frac{\hbar^2}{2m_e^*} \sum_{i=1}^{N_p} \nabla_i^2 + \sum_{i=1}^{N_p} v(\vec{r}_i, t) + \hat{W}_{ee},$$

где  $m_e^*$  – эффективная масса электронов, которая для конкретных материалов известна из экспериментальных работ.

Далее выбрана атомная система единиц:  $e=\hbar=m_0=1$ , где  $m_0$  – масса свободного электрона. В приведенном выше выражении фигурирует внешний потенциал  $v(\vec{r}, t)$ , который согласно теореме Рунге–Гросса однозначно связан с электронной плотностью  $n(\vec{r}, t)$  для многоэлектронной системы, эволюционирующей из начального состояния  $\psi(t=0)$ . Следовательно, если известна лишь электронная плотность системы, эволюционирующей из заданного начального состояния  $\psi(t=0)$ , то она однозначно определяет внешний потенциал, который ее создает. Внешний потенциал полностью определяет гамильтониан системы, тогда нестационарное уравнение Шредингера может быть решено, и получены наблюдаемые характеристики системы. Для этого выбирается система невзаимодействующих электронов, называемая KS системой, определенная таким образом, что точно воспроизводит электронную плотность истинной взаимодействующей системы. Тогда свойства истинной системы могут быть выражены через электронную плотность невзаимодействующей системы. Поскольку однозначное соответствие между зависящей от времени электронной плотностью и внешним потенциалом установлено для любого  $\hat{W}_{ee}$ , то оно справедливо и для  $\hat{W}_{ee} \equiv 0$ , то есть и для KS системы. Следовательно, внешний потенциал  $v_{KS}(\vec{r}, t) \equiv v_{KS}[n; \Phi_0](\vec{r}, t)$  невзаимодействующей системы, воспроизводящий электронную плотность  $n(\vec{r}, t)$ , эволюционирующую из состояния  $\Phi_0$ , однозначно определен. KS состояние  $\Phi_0$  невзаимодействующих электронов выбирается в виде детерминанта одночастичных орбиталей  $\phi(\vec{r}, 0)$ . При этом KS состояние должно соответствовать заданной начальной электронной плотности, воспроизводить ее саму и ее первую производную по времени. Электронная плотность взаимодействующей системы может быть определена как

$$n(\vec{r}, t) = \sum_{j=1}^{N_p} |\phi_j(\vec{r}, t)|^2,$$

где  $\phi_j(\vec{r}, t)$  являются решениями уравнения Шредингера с потенциалом  $v_{KS}(\vec{r}, t)$ :

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \phi_j(\vec{r}, t) = \left[ -\frac{\nabla^2}{2m_e^*} + v_{KS}[n; \Phi_0](\vec{r}, t) \right] \phi_j(\vec{r}, t)$$

$$v_{KS}[n; \Phi_0](\vec{r}, t) = v[n; \psi_0](\vec{r}, t) + \int d^3\vec{r}' \frac{e^2 n(\vec{r}', t)}{|\vec{r} - \vec{r}'|} + v_{XC}[n; \psi_0, \Phi_0](\vec{r}, t).$$

Здесь  $v(\vec{r}, t)$  – потенциал внешнего поля, второе слагаемое представляет собой потенциал Хартри  $v_H(\vec{r}, t)$ , третье слагаемое – обменно-корреляционный потенциал. Функ-

циональная зависимость  $\nu(\vec{r}, t)$  определяется тем фактом, что внешний потенциал  $\nu(\vec{r}, t)$  является заданной функцией (складывается из потенциала, связанного с барьером на границе нанокристалла со средой, в которой он находится, и потенциальной энергии во внешнем электромагнитном поле волны). Для аппроксимации  $\nu_{xc}(\vec{r}, t)$  используется адиабатическое приближение локальной плотности, которое хорошо зарекомендовало себя при расчетах спектров многоэлектронных систем. В этом случае  $\nu_{xc}$  зависит лишь от значения электронной плотности в данной точке в данный момент времени. Таким образом, задача сводится к решению  $N_p$  нестационарных уравнений Шредингера с потенциалом  $\nu_{KS}(\vec{r}, t)$  для орбиталей  $\varphi_j(\vec{r}, t)$ .

## 2. Численный метод решения

Для демонстрации общей методики исследуем динамику электронных состояний в сферической потенциальной яме с бесконечными стенками. Данная модельная система должна отражать свойства сферической квантовой точки с достаточно большим потенциальным барьером (в реальных системах барьер составляет несколько электрон-вольт).

На первом шаге происходит расчет электронной плотности, после чего решением уравнения Пуассона определяется потенциал Хартри для данной  $n(\vec{r}, t)$

$$\Delta \nu_H(\vec{r}, t) = -4\pi(n(\vec{r}, t) - n_+(\vec{r})).$$

Здесь  $n_+(\vec{r})$  – плотность положительных зарядов, которая выбирается в виде равномерно размазанного по всему объему нанокристалла положительно заряженного желе.

После этого определяется обменно-корреляционный потенциал по аппроксимирующей формуле

$$\nu_{xc}(\vec{r}, t) = -\frac{1,222}{r_s(n)} - 0,066 \ln\left(1 + \frac{11,4}{r_s(n)}\right), \quad r_s(n) = 3\sqrt{\frac{3}{4\pi n(\vec{r}, t)}}.$$

Далее решаются нестационарные уравнения Шредингера для  $N_p$  орбиталей (для KS системы) на одном шаге по времени. В результате находятся орбитали KS системы на новом шаге по времени, по которым рассчитывается электронная плотность на новом шаге по времени и происходит переход к расчету  $n(\vec{r}, t)$  на следующем шаге по времени.

В настоящей работе для решения самосогласованных уравнений Кона-Шэма выбраны итерационный метод сопряженных градиентов и метод Рунге-Кутты, поскольку допускают блочное разбиение пространства, и, следовательно, будут хорошо сочетаться в параллельной реализации метода Кона-Шэма для расчета многоэлектронных задач.

## 3. Результаты вычислительных экспериментов

Предложенный алгоритм расчета оптических свойств полупроводниковых нанокристаллов в рамках теории функционала плотности на основе блочного разбиения пространства был реализован для гетерогенных систем с распределенной памятью (вычислительных кластеров с графическими процессорами на узлах).

Вычислительные эксперименты проводились на следующей платформе:

- язык программирования: C;
- используемые технологии: OpenMP, CUDA, MPI;
- операционная система: Microsoft Windows Server 2008 HPC Edition SP2 x64;
- среда разработки: Microsoft Visual Studio 2010;
- компилятор: Intel C++ Compiler XE 12.1;

- 16 узлов: 2 CPU Intel Xeon L5630 2.13 ГГц, 4 ядра; 24 ГБ оперативной памяти; NVidia Tesla M2050.

Результаты проведенных экспериментов (рис. 1) демонстрируют эффективность применения графических процессоров для решения задачи. Видно, что GPU-реализация быстрее однопоточной CPU-версии более, чем в 30 раз при размерах трехмерной пространственной сетки от 60 узлов в каждом направлении. Рисунок 2 показывает зависимость ускорения параллельной GPU-реализации метода Кона-Шэма для систем с распределенной памятью в зависимости от числа используемых графических процессоров.

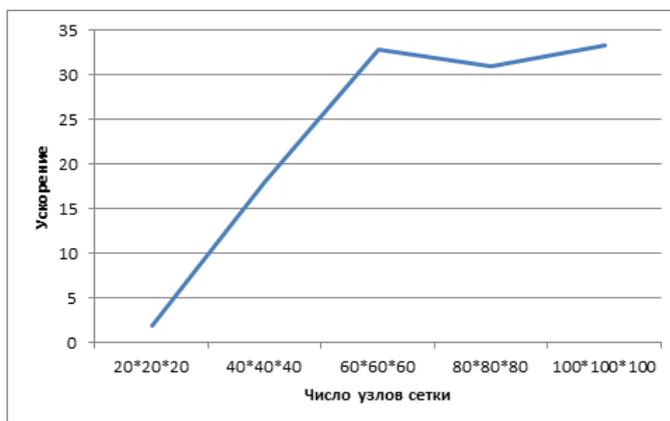


Рис. 1. Ускорение GPU-реализации метода Рунге-Кутты относительно многопоточной CPU-реализации

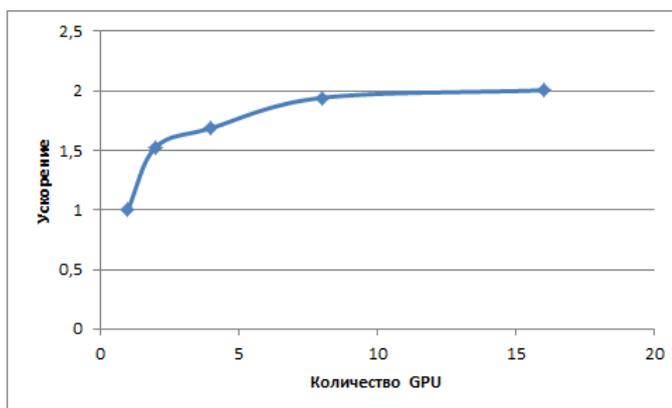


Рис. 2. Масштабируемость параллельной GPU-реализации метода Кона-Шэма

На рис. 3 приведены результаты следующего набора экспериментов: рассматривается параллельная GPU-версия для систем с распределенной памятью, и производится ее запуск на кластере с графическими ускорителями на каждом из узлов. Осуществляются параллельные запуски алгоритма на разном числе узлов кластера, причем количество процессов (узлов) соответствует размеру пространственной сетки, используемой для расчетов. Эффективность распараллеливания при использовании 68 GPU здесь составляет примерно 31.4%.

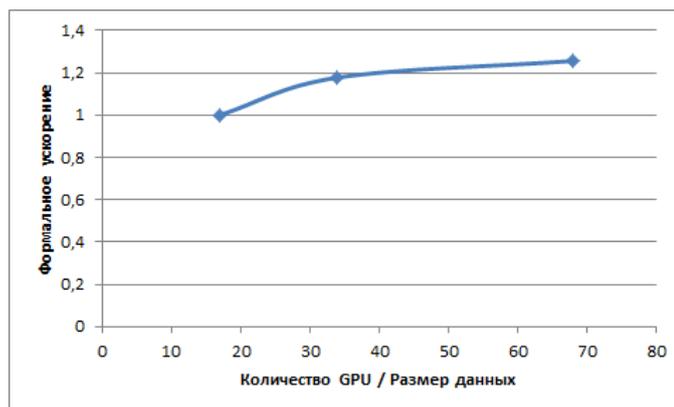


Рис. 3. Масштабируемость параллельной GPU реализации метода Кона-Шэма при пропорционально увеличивающемся объеме данных

### Заключение

Предлагаемый алгоритм решения динамических уравнений Кона-Шэма на основе блочного разбиения пространства может давать существенное ускорение при реализации на гетерогенных системах с распределенной памятью. Использование дополнительных графических процессоров в данной задаче наиболее полезно при расчетах с пропорционально увеличивающимся объемом данных. Эффективность распараллеливания продемонстрирована на вычислительных системах при использовании 68 GPU и составляет приблизительно 31.4%.

Реализация была использована при разработке методики расчета оптических свойств многоэлектронных систем – полупроводниковых квантовых точек. Также, алгоритм может быть использован для определения спектров как изолированных, так и взаимодействующих кремниевых нанокристаллов (квантовых точек) различной формы.

### Литература

1. Shimizu K.T., Woo W.K., Fisher B.R., Eisler H.J., and Bawendi M.G. // *Phys. Rev. Lett.* 2002. V. 89. P. 117401.
2. Runge E., Gross E.K.U. // *Phys. Rev. Lett.* 1984. V. 52. P. 997-1000.
3. Ferconi M., Vignale G. // *Phys. Rev. B.* 1994. V. 50. P. 14722.
4. Лундквист С., Марч Н. Теория неоднородного электронного газа. М.: Мир, 1987.
5. Broin C.O., Nicolopoulos L.A.A. An OpenCL implementation for the solution of TDSE on GPU and CPU architectures // *Computer Physics Communications* 183, 2012. P. 2071-2080.
6. Маркус Е.Д. Исследование параллельной реализации метода расщепления для уравнения теплопроводности на кластерных вычислительных системах // *Вестник Томского государственного университета* 1(14), 2011. С. 73–78.
7. Игнатъев А.А., Затевахин М.А. Параллельный метод для решения уравнения Пуассона // *Параллельные вычислительные технологии: Доклад Международной научной конференции, Нижний Новгород, Россия, 30 марта – 3 апреля 2009.* С. 491–495.

# СУПЕРКОМПЬЮТЕРЫ И ВОПРОСЫ ФУНДАМЕНТАЛЬНЫХ ОСНОВ ИНЖЕНЕРНОГО ОБРАЗОВАНИЯ

*Ю.Я. Болдырев, К.Ю. Замотин, Е.П. Петухов*

*Санкт-Петербургский государственный политехнический университет*

## **Введение**

Сегодня в России повсеместно наблюдается парадоксальная и тревожная для развития высокотехнологичных секторов промышленности ситуация – при увеличивающейся армии выпускников вузов растет нехватка молодых, владеющих современными технологиями инженеров. Несмотря на то, что в вузах на гуманитарных и управленческих специальностях фактически нет бюджетных мест, соотношение между «физиками и лириками» по-прежнему склоняется в пользу последних. Статистика свидетельствует, и вакансии крупных российских кадровых агентств подтверждают, что изо дня в день растет спрос на специалистов таких отраслей, как информационные технологии (ИТ), машино- и приборостроение, энергетика, строительство. А прогноз рынка труда на 2015 год и вовсе неутешительный: тотальный дефицит специалистов технических (инженерных) специальностей.

Задача высшего образовательного учреждения всегда была, и сегодня это особенно актуально, в том, чтобы не только выучить, но и правильно сориентировать молодых людей: они должны быть востребованы и иметь возможность самореализации. «Ахиллесовой пятой» высшего технического образования также всегда была, хотя и в разные времена в разной же степени, его серьезная оторванность от производства. Здесь центральной проблемой является гармоничное сочетание сильных фундаментальных основ инженерных знаний с современным существом будущей специализации. Отсюда появляется значительный пробел между подготовкой кадров в вузе и реализацией их знаний на практике. Принципиально это проблема не только каждого отдельного вуза, но и всей системы образования, которая усугубляется не всегда внятно проводимыми реформами и определенными деформациями отношений высшей школы и предприятий, порожденных рынком. В то же время современная российская промышленность, как-то: машиностроение, радиоэлектроника, строительство, другие отрасли – остро нуждается в специалистах-практиках, сочетающих специфические профессиональные знания с умением работать в команде, знанием современных ИТ-технологий.

Современная инновационная деятельность в сфере инженерного образования также сильно затруднена и рядом серьезных глобальных проблем, стоящих перед ним, даже если это образование признается качественным. Как отмечают многие зарубежные исследователи, противоречия между современной инженерной практикой на производстве и преподаванием дисциплин в вузе с каждым годом накапливаются все больше. Современный студент сильно отличается от своего предшественника, но преподаватели продолжают учить так, как 30-40 лет тому назад учили их самих. Проблема серьезно усугубляется отсутствием молодых преподавателей в вузе, а инертность образовательных программ и курсов – также одна из главных проблем сегодняшнего инженерного образования.

Процесс инженерного образования должен рассматриваться как освоение наиболее характерных для инженерного сообщества компетенций: овладение важнейшим для той

или иной группы данного сообщества инструментарием, важнейшим из которых, практически для всех групп, сегодня является использование вычислительных систем, а также умение работать с технической литературой. Все это способствует приобретению необходимых инженерных навыков.

Сущностью инженерной деятельности являются не только расчеты, но и разработка изделий (например, дизайн), важными элементами которой – творческий подход и открытость в смысле возможности множественных технических решений для данной проблемы. Как правило, грамотные выпускники вузов «находятся в предположении» существования единственного того или иного численного решения при анализе какой-либо инженерной проблемы. Однако современное программное обеспечение в связке с суперкомпьютерами позволяет быстро и эффективно решать поставленные задачи в весьма широком круге возможностей, освобождая инженера на творческую самореализацию: работа в ключе «что, если», модификация деталей и, что пожалуй, особенно важно, оптимизация конструкции (процесса), которая как раз обеспечивает многовариантность получаемого решения в зависимости от тех или иных параметров, и т.д.

В современном производстве компьютер из вспомогательного средства превращается в некий «центральный пункт», вокруг которого вращается вся творческая деятельность инженера. Однако «зацикливание» последнего только на одном направлении деятельности, только на персональном компьютере для вычислений приводит к своеобразной одномерности инженерного мышления, это означает тупик развития и невозможность решить сложную задачу. У современного инженера должен быть широкий кругозор как в методах решения задач, так и в средствах, с помощью которых эти решения разыскиваются.

Развитие суперкомпьютерных технологий с позиций чисто вычислительных мощностей (ресурсов) привело в наши дни научное и инженерное сообщество к возможности ставить и решать такие классы естественно-научных и инженерных задач, которые были немыслимы для инженеров и исследователей даже 10 лет тому назад. При этом в части инженерных задач главным инструментом здесь являются САЕ (Computer-Aided Engineering) технологии и их параллельные реализации для суперкомпьютеров. САЕ – общее название для программ и программных пакетов, предназначенных для решения различных инженерных задач: расчетов, анализа и симуляции физических процессов. Сегодня САЕ является основным инструментом математического моделирования в инженерной области.

### **Математическое моделирование и инженерное знание**

Все современное естественно-научное и инженерное знание представляет собой совокупность многотысячелетнего человеческого опыта. Причем в своем подавляющем большинстве все бесчисленные составляющие этого опыта есть продукт физического эксперимента. Именно многовековой экспериментальный опыт служил основой инженерному сообществу с незапамятных времен, примерно до конца XVIII века, в создании всех машин и механизмов, служивших человеку.

В начале XIX, когда стал массово развиваться железнодорожный транспорт и паровой флот, стала все более и более проявляться необходимость создания теоретических основ того, что мы сегодня понимаем под инженерным анализом и проектированием. Полномасштабная потребность и значимость инженерного анализа окончательно сформировались во второй половине – конце XIX века, а с началом XX века, когда очень быстрыми темпами стали появляться принципиально новые механизмы и машины, начали формироваться и новые требования к самому существу инженерного анализа. В связи с последним важно будет отметить, что именно глубокое понимание этих проблем и стремление вывести Россию на передовые мировые научно-технические и

экономические позиции лежали в основе самой идеи создания Санкт-Петербургского политехнического института.

В течение первой половины XX века многовековая практика физического эксперимента подошла к практическому исчерпанию своих возможностей при создании новых типов машин и систем, поскольку при решении все большего числа инженерных, да и многих естественно-научных проблем вообще, не позволяла провести сам физический эксперимент либо из-за его сложности, либо по причине принципиальной его невозможности. Последние обстоятельства привели инженерное и научное сообщество к необходимости использования все более и более мощных методов математики или, говоря современным языком, методов математического моделирования. Таким образом, в течение XX века произошло революционное изменение инструментария исследования природы и всего того, что создается человеком, т.е. многовековая практика физического эксперимента стала активно дополняться и заменяться экспериментом математическим. Этому способствовали два обстоятельства: во-первых, новейшие достижения в фундаментальной и вычислительной математике, как инструменте количественного описания явлений и процессов, и, во-вторых, возникновение и мощное развитие вычислительной техники.

Активное внедрение математического моделирования [1-3] в инженерную практику способствовало переходу на качественно новый уровень в инженерных расчетах и проектировании всего множества машин и систем во всех отраслях промышленности. Особенно сильно это новое качество стало проявлять себя в последние десятилетия в связи с широким применением суперкомпьютеров. Но прежде чем раскрывать существо этого качества, необходимо понять, как и в каких направлениях компьютерные технологии повлияли на развитие промышленности. При этом сразу же отметим, что сфера применения компьютеров в промышленности, практически одновременно с их внедрением в нее, стала быстро расширяться и, конечно, не исчерпывалась инженерными расчетами.

### **Суперкомпьютерные технологии**

«Современный уровень развития вычислительной техники и методов математического моделирования дает уникальную возможность для перевода как промышленного производства, так и научных исследований на качественно новый уровень. Цифровые модели сложных конструкций, точное описание и воспроизведение природных явлений и процессов, тонкая многопараметрическая оптимизация — все это становится реальным сегодня. Для индустрии — это повышение конкурентоспособности на мировом рынке, для науки — это завоевание лидирующих позиций нашими учеными, и все это вместе составляет один из важных элементов перехода к инновационной экономике. Именно поэтому суперкомпьютерные технологии отнесены руководством страны к приоритетным направлениям модернизации экономики и технологического развития», — ректор Московского университета, академик В.А. Садовничий [4].

Центральной проблемой, обуславливающей трудности и вопросы, встречающиеся на пути широкого внедрения суперкомпьютерных технологий в инженерное образование, является их универсальный и всеобъемлющий характер. Сущность этой универсальности заключается в том, что суперкомпьютерные технологии позволяют нам в максимальном объеме реализовать технологии математического моделирования. А это, в свою очередь, дает возможность ставить и решать во всей полноте междисциплинарные задачи, которые, как указывалось, дают возможность весьма близко подойти к описанию реального физического мира. При этом проходит вся универсальная цепочка от постановки задачи, выбора эффективных вычислительных схем, обеспечивается требуемая быстрота получения результата и, что особенно важно, инженер и ис-

следователь получают возможность полномасштабной визуализации результатов вычислений.

Но такое высокое и все более нарастающее в своих возможностях качество описания явлений природы и мира техники требует и все более высокого уровня освоения инженерным сообществом самих фундаментальных основ инженерного знания. При этом сами эти основы становятся малоразличимыми со знанием естественно-научным. Именно здесь и кроется проблема слабого внедрения суперкомпьютерных технологий в инженерное образование – высшая техническая школа, в своем подавляющем большинстве, не готова и во многих случаях принципиально не способна к радикальной и быстрой перестройке учебного процесса на такие технологии. Еще раз подчеркнем, что суперкомпьютерные технологии революционно изменили весь процесс инженерной деятельности, а это требует радикальной перестройки образовательного процесса подготовки инженерных кадров.

Какими же видятся пути решения обозначенных проблем? Во-первых, это полномасштабное внедрение как CAE (Computer-Aided Engineering) технологий, так и суперкомпьютерных технологий, которые придадут совершенно новый характер деятельности инженера, – она все более и более приобретает характер деятельности исследовательской, опирающейся на фундаментальное знание. Во-вторых, в недалеком будущем произойдет смена самой парадигмы инженерной деятельности. Что имеется в виду? Рассмотрение всей последовательности этапов работы инженеров – разработчиков новой техники и систем (конструкторов, расчетчиков, проектировщиков и т.д.), т.е. тех категорий, которые заняты созданием новых машин, механизмов и систем, ведет к выводу – эта деятельность в ближайшем будущем «обречена» на все более и более творческий характер, при которой сама проектно-конструкторская, рутинная, расчетно-технологическая работа будет возложена на расчетно-технологические вычислительные среды. Роль инженера разработчика будет определяться такой творческой деятельностью, как разработка концепции нового изделия, включая эффективность и быстроту его производства, а также определение его эксплуатационно-технических характеристик.

Но использование CAE-технологий, даже в их полномасштабной связке с CAD (Computer-Aided Design) и CAM (Computer-Aided Manufacturing) технологиями, есть только один из сегментов того, что в недалеком будущем станет основой нового содержания инженерного образования. Как нам видится с позиций сегодняшнего дня, само содержание инженерного образования должно включать в себя преподавание реализованной в суперкомпьютерном варианте группы дисциплин, в основе которых лежит триада CAD/CAE/CAM-технологий. И здесь задача ведущих технических вузов состоит в том, чтобы, во-первых, предложить концепцию инженерного образования на базе суперкомпьютерных технологий и, во-вторых, определить те группы дисциплин, которые будут составлять некоторое ядро – основу такого образования.

На сегодняшний день Санкт-Петербургский государственный политехнический университет подготовил проект создания Суперкомпьютерного центра на базе вуза, который подержан Минэкономразвития, Минобрнауки и Минкомсвязи России и будет реализован в 2013 – 2014 гг. Важнейшим аспектом работы Суперкомпьютерного центра станет переход всей системы учебной работы на его основу, что позволит вузу готовить кадры мирового уровня с использованием наиболее передовых технологий.

### **Литература**

1. Самарский А.А., Михайлов А.П. Математическое моделирование: Идеи. Методы. Примеры. – 2-е изд., испр. М.: Физматлит, 2001. 320 с.

2. Болдырев Ю.Я. Суперкомпьютерные технологии как современное воплощение междисциплинарного подхода в научно-образовательной деятельности // СПб. Научно-технические ведомости СПбГПУ. № 4, 2010. С. 99–106.
3. Болдырев Ю.Я., Петухов Е.П. Суперкомпьютерные технологии и их приложения. Учебное пособие. СПбГПУ, 2010. 92 с.
4. Суперкомпьютерные технологии в науке, образовании и промышленности / Под редакцией: академика В.А. Садовниченко, академика Г.И. Савина, чл.-корр. РАН Вл.В. Воеводина. М.: Изд-во МГУ, 2009. 232 с.