Третий компонент познания – научные компьютерные супервычисления

Ю.С. Васильев[†] и[*] В.Г. Корнеев[†,‡]

6 апреля 2008 г.

[†] Санкт-Петербургский государственный политехнический университет
[‡] Санкт-Петербургский государственный университет

Vadim.Korneev@pobox.spbu.ru, Vasiliev@stu.neva.ru

Together with theory and experimentation, computational science now constitutes the "third pillar"of scientific inquiry...[1]

Предви́дение без действия – мечта. Действие без предвидения – кошмар. Японская поговорка.

Аннотация

Для второй половины 20-го столетия характерно поразительно быстрое развитие численных методов решения задач механики, физики, химии и прикладных задач из самых различных областей, которое происходило параллельно и во взаимодействии с быстрым развитием вычислительной техники. Появилось много новых важных направлений таких как вычислительная медицина или компьютерный инжиниринг и т.п., были созданы мощные коммерческие пакеты программ, и еще более мощные пакеты программ для научных вычислений, позволяющие экономить колоссальные средства при проектировании разнообразных объектов человеческой деятельности и исследовании окружающего нас мира. В то же время невероятно усложняются стоящие перед человечеством и наукой проблемы, решение которых требует от науки огромных усилий, изменяет ее облик. Продвижение во многих важнейших областях науки и техники возможно только при опоре на *вычислительную науку*, понимаемую как совокупность всех компонентов, позволяющих решать наиболее сложные проблемы путем моделирования и симулирования на суперкомпьютерах. В научном сообществе становится общепризнанным, что наряду с теорией и практикой вычислительная наука стала необходимой

[*]Исследование поддержано грантом РФФИ N 05-01-00779-а. Второй автор был поддержан также Специальной исследовательской программой (SFB) F013, проект 16 Австрийского научного фонда.

[1]Из доклада президенту США: *Вычислительная наука: обеспечение конкурентоспособности Америки.* Президентский комитет советников по информационным технологиям (PITAC – President's Information Technologies Advisory Committee), июнь 2005, [2].

третьей опорой процесса познания. Тем не менее, Россия утратила свои передовые позиции по целому ряду направлений в этой области знаний. Степень нашего отставания от запада сопоставима с отставанием в разработке компьютеров. В таких условиях особенно важен выбор основных направлений усилий. Не ставя своей целью невыполнимую задачу всестороннего анализа причин и ответ на вопрос: что делать? – авторы попытались дать адекватное интегральное представление о роли вычислительной науки в современном, в основном западном, обществе и, до некоторой степени, ее отражении в высшем образовании. Мы прибегаем в основном к опыту США. Статья не претендует на окончательность выводов, цель ее будет достигнута, если она будет способствовать продуктивному обсуждению поднятых в ней вопросов.

1 Введение

Интенсивное развитие вычислительной математики как в теоретическом так и практическом аспектах, равносильное ее второму рождению, было связано как у нас, так и в США с созданием атомного оружия. Причина была не только в острой необходимости оружия решающего перевеса и опережения противника в его разработке, но и в невозможности проведения необходимого объема экспериментов. Впервые возникла проблема огромного научного и инженерного масштаба, в решении которой применение компьютерных алгоритмов вычислительной математики должно было сыграть значительную роль. Вот как описывает это академик А.А. Самарский [1].

"Взрыв ядерной бомбы – это одновременное протекание многих взаимосвязанных процессов – деления ядерного горючего нейтронами, распространения образующихся при этом нейтронов, выделения энергии и ее переноса по веществу, газодинамического разлета чудовищно разросшегося вещества. Все эти процессы описываются системой нелинейных уравнений в частных производных. Такие задачи ни физики, ни математики в 1947–48 г.г. не умели решать.

В 1947 году заканчивались конструкторские работы по созданию советской атомной бомбы. Возник вопрос о теоретическом прогнозе мощности взрыва... Присутствовавший на семинаре А.Н. Тихонов предложил провести методом конечных разностей прямой расчет взрыва на основе полных моделей физических процессов (распространения нейтронов и тепла, ядерного горения и газодинамики) ... В то время ни теории, ни опыта практического применения разностных схем для сложных задач математической физики фактически не было. Поэтому это заявление было неожиданным для физиков и вызвало реплику Л.Д. Ландау, что такой расчет был бы подвигом."

А.А. Самарский заканчивает свою статью заключением, близким взятому в эпиграф из доклада президенту США Президентского консультативного комитета по ИТ (информационным технологиям). "Работы, связанные с созданием атомного и водородного оружия, привели к колоссальному ускорению развития не только многих разделов техники, физики, химии, но и перестройке математических наук в связи с появлением компьютеров и вычислительных методов. *Ведущую роль* **в познании** *теперь играет математическое моделирование с технологией математического эксперимента.*"

Сейчас признание вычислительной науки третьей опорой познания, наряду с теорией и экспериментом, становится на западе общим местом не только в устах ученых, но и чиновников. Об этом свидетельствует, например, интервью одного из ведущих руководителей федеральной программы по мониторингу ядерного оружия и другим В. Рейса [3]. Вычислительная наука, как она понимается в США, где этот термин широко используется, покрывает значительно более широкую область по сравнению с вычислительной математикой и математическим моделированием. Это связано с тем, что компьютерный анализ многих явлений современного мира не сводится к математическому моделированию и предполагает огромную компьютерную мощь, соответствующие матобеспечение и инфраструктуру. В докладе президенту США [2] дается развернутое определение вычислительной науки, которое мы приводим в Разделе 4.

Головокружительному развитию во второй половине 20-го столетия численных методов решения задач математической физики, математического моделирования, вычислительной техники а затем и ИТ способствовали, помимо совершенствования оружия, возрастающие потребности многих сторон человеческого существования. Невозможно указать тихую заводь, в границах которой можно было обойтись без них. Без алгоритмов вычислительной математики и математического моделирования многое, ставшее уже привычным, осталось бы за занавесом. Например, не было бы полетов в космос, эндоскопической хирургии и многого другого. Многие области изменили свое лицо, дальнейшее развитие других невозможно без мощной вычислительной разведки. В медицине мы не знали бы о компьютерной диагностике, томографии и о широко применяемых методиках лечения ряда опасных внутренних болезней, в которых теперь компьютеру отведена решающая роль. Степень вторжения компьютерных и других современных технологий, например, лазерных и радиологических, в хирургию настолько значительна, что хирургия без операций уже не мечта [4].

Яркой иллюстрацией роли математического моделирования в адекватном восприятии вызовов времени и причин, по которым вычислительная наука стала необходимым компонентом познания, является создание термоядерных реакторов. Ядерный синтез открыт в 1934 в лаборатории Э. Резерфорда, на несколько лет раньше энергии деления ядер. Однако атомные электростанции работают с 1954, в то время как промышленное получение энергии ядерного синтеза ожидается лишь к середине 21-го века. И это несмотря на готовность стран-участников проекта строительства ITER – *Международного экспериментального термоядерного реактора* истратить только на его создание несколько десятков миллиардов евро. Одна из проблем – организация контроля происходящих в плазме процессов. Нужен контроль, не изменяющий процесс горения, то есть, например, посредством лазерного зондирования, магнитных ловушек и других устройств, расположенных по краям плазмы. Получаемые в этом случае данные могут быть правильно интерпретированы лишь с помощью компьютерных программ, симулирующих процесс горения с достаточными точностью и быстротой. Такие программы остро нужны и для проектирования реактора. Существующие алгоритмы и суперкомпьютеры не справляются с этой задачей. В 2004 Ливерморской национальной лабораторией США совместно с Университетом Висконсина-Мэдисона (The University of Wisconsin-Madison) на основе комплекса программ NIMROD была осуществлена симуляция 4-х миллисекунд горения, давшая температуры близкие к экспериментальным. Она производились на суперкомпьютере Национального исследовательского научного вычислительного центра энергии (NERSC's). Из-за сложности системы уравнений в частных производных, описывающих процесс горения плазмы, каждый расчет требовал 100 000 шагов по времени, выполнявшихся за 50-80 сеансов по 10-12 часов каждый. В целом одна симуляция требовала порядка 30 000 часов процессорного времени [5].

Нужно подчеркнуть, что компьютерные симуляции такого объема и сложности требуют не только создания адекватных физико-математических моделей, применения новейших вычислительных методов и новых методов программирования, ориентированных на суперкомпьютеры петафлопного уровня, но и применения продвинутых технологий обработки гигантского объема получаемых данных. В свою очередь, все это не осуществимо без создания инфраструктуры, способной поддерживать эффективные работу и взаимодействие физиков, прикладных математиков, программистов и персонала, обслуживающего промышленные установки и суперкомпьютеры, и их разработчиков. В совокупности перечисленное и составляет предмет вычислительной науки, нацеленной на серьезные продвижения в науке и других проблемных направлениях человеческого существования посредством супервычислений.

В одном интервью академик Е. Велихов сказал, что для реализации ITER потребуется компьютер с быстродействием в несколько тысяч TF (терафлопов) [6], в то время как сейчас наиболее мощные компьютеры способны производить порядка 300TF. Отметим, что в США на базе имеющихся суперкомпьютеров уже создаются объединенные системы с производительностью в PF (петафлоп)[2] [7].

2 Вычислительная математика, коммерческие и научные пакеты программ

Впечатляющие достижения вычислительной науки, понимаемой как многодисциплинарная наука, включающая разработку численных методов и алгоритмов, математического обеспечения и компьютеров с необходимой инфраструктурой, имели результатом создание мощных пакетов программ, ориентированных как на научные исследования, так и практические задачи. Число их в настоящее время весьма велико. Опираясь на западный опыт и преимущественно на опыт США, универсальные пакеты программ, предназначенные для решения широких классов задач механики, физики и других областей можно разбить на четыре следующие группы.

α) Коммерческие пакеты, примерами которых являются ANSYS, NASTRAN, FLUENT, LS-DYNA и т.д.

β) Проектно-изыскательские, создаваемые для своих нужд крупными научными подразделениями, такими как Sandia Laboratories, Национальный исследовательский научный вычислительный центр энергии NASA и др.

γ) Пакеты, которые можно назвать целевыми, разрабатываемые как правило консорциумами университетов и других научных организаций в связи с крупной, в частности, федеральной научной программой.

δ) Университетские, т.е. принадлежашие университетам, ими финансировавшиеся и разрабатывавшиеся их подразделениями. Они часто ориентированы на более узкий класс задач, но имеют какой либо отличительный новый научный элемент. Им может быть, например, либо новый численный метод, либо метод программирования, которые позволяют повысить быстродействие или решать ранее недоступные для численного решения классы задач.

Конечно, это деление условно, университеты участвуют в создании всех типов пакетов, но рамки участия и финансирования различны. Государство может субсидировать работы по любым пакетам, но разработка пакетов α) финансируются владельцами пакетов. С другой стороны, университетские пакеты, не могут быть коммерческим продуктом[3]. По своим быстродействию, возможностям анализа особых ситуаций и даже величине пакеты групп β),γ) могут значительно превосходить коммерческие пакеты. Однако, взаимодействие между составляющими такие пакеты программами не всегда полностью автоматизировано, их использование предполагает более сведущего пользователя, круг задач часто более узок, несмотря на то, что в рамках преимущественного направления они способны решать наиболее сложные задачи.

Наше отставание в области вычислительной науки и ИТ закладывалось не сейчас. В 60-е мы только начали оправляться от войны, порадовались радикальным снижениям цен, имели грандиозные прорывы в создании ядерного и другого оружия, освоении космоса и многом другом, обходясь в

[2] 1TF$\simeq 10^{12}$ flops/sec, 1PF $\simeq 10^{6}$TF. Заметим, что обозначения TF и PF не являются общепринятыми.

[3] С их помощью можно зарабатывать, выполняя проекты для различных организаций, но их нельзя продавать.

расчетах Мерседесами и маломощными ЭВМ. В ВЦ ЛГУ – Вычислительном центре Ленинградского университета расчетами траекторий занималась, в частности, лаборатория профессора впоследствии члена-корреспондента РАН В.И. Зубова. В нескольких комнатах Меньшиковского дворца на Университетской набережной, там тогда находился ВЦ ЛГУ, за обитыми железом дверьми сидели сотрудники, в основном женщины, и стоял треск от арифмометров. Примерно в то же время Германии в Институте статистики и динамики аэрокосмических конструкций г. Штуттгарт (Institute of Statics and Dynamics of Aerospace Structures) под руководством Дж. Аргириса (J. Argyris) на базе МКЭ (метода конечных элементов) разрабатывался пакет программ общего назначения ASKA – Automatic System for Kinematic Analysis. Он стал первым коммерческим пакетом такого рода и был выпущен в 1969 г. В 80-х число сотрудников созданной к этому времени компании Static und Dynamik Forschungsgesellschaft достигало 350 а годовой оборот \$50 млн.[4]

Ирония истории в том, что сейчас развитие численных методов в России существенно замедлилось, на фоне мировых достижений в этой области вклад России в развитие ИТ несоизмеримо мал, но зато сложилась идеология в поддержку достаточно широкого продвижения коммерческих пакетов прикладных программ (спустя почти 40 лет после их появления на западе!) в "научные" исследования и высшее образование. На самом деле слишком часто она – лишь прикрытие (иногда под претенциозным лозунгом необходимости развития "критических" технологий) для свертывания значимых научных исследований и снижения уровня высшего образования, приближающегося к катастрофическому.

Трудно представить, что в 60-е, героическое еще во многих отношениях время, можно было бы сделать больше для возрождения нашей промышленности и науки. Нельзя, как это случалось и иногда случается до сих пор, и пренебрежительно относиться к универсальным коммерческим пакетам программ, которые начали разрабатываться тогда на западе. Как правило это добротные, обладающие многими уникальными возможностями программные продукты. Они будут интенсивно разрабатываться и усовершенствоваться и в будущем и составят серьезную конкуренцию многим кафедрам и др. научным коллективам, неспособным преодолеть задаваемую ими высокую планку, отделяющую работу пользователя, оператора, техника или инженера-проектировщика от научного исследования. В то же время делать овладение такими пакетами одним из центральных мест высшего образования пагубно для высшего образования. Мировая наука, в частности, вычислительная математика и математическое моделирование ушли далеко вперед, существуют и не менее интенсивно разрабатываются нередко значительно более мощные пакеты программ для фундаментального характера научных исследований в естественных и других науках.

Обратимся к одной из областей вычислительной математики – созданию численных методов решения уравнений в частных производных, незаменимого инструмента анализа в самых разнообразных направлениях человеческой деятельности от проектирования ядерного реактора, наноматериала или гидротехнической плотины до решения проблем экологии и экономики. За последние даже не пол-века, а четверть века эта область неузнаваемо изменилась, были созданы и теоретически обоснованы (т.е. их понимание было доведено до уровня необходимого для успешного применения на практике) многие и многие алгоритмы, которые несомненно войдут в *золотой фонд быстродействующих алгоритмов* вычислительной математики и которые через несколько лет станут базовыми в конкурентоспособных пакетах программ. К ним относятся[5] метод декомпо-

[4]Эти данные приводятся по памяти. Во время проектирования зеркала диаметром 6 м для телескопа Специальной астрофизической обсерватории один из авторов пытался организовать расчет напряженно-деформированного состояния зеркала с помощью пакета ASKA. В этой связи ему пришлось тесно контактировать с разработчиками пакета. Выбор наших проектировщиков пал на украинский пакет *Лира* и некоторые российские разработки.

[5]Мы даем лишь ссылки на пионерные работы, если в них характерные черты нового метода отраже-

зиции области [8, 9, 10, 11, 12], многосеточные и многоуровневые итерационные методы решения систем алгебраических уравнений метода сеток [13, 14, 15, 17], BPX и другие многоуровневые предобусловливатели[6] [18], апостериорные оценки погрешности приближенных решений [19, 20, 21], вэйвлетные алгоритмы, широко применяемые для самых разнообразных целей от расшифровки сигналов и упаковки информации изображений до быстрых методов решения систем алгебраических уравнений МКЭ [22], *hp*-адаптивные алгоритмы метода конечных элементов [23, 24, 25, 26] и другие. В это время наряду с МКЭ приобрели зрелую форму метод конечных объемов, метод частиц, обширный класс бессеточных методов и др. Невозможно перечислить все классы труднейших задач, которые стало возможным приближенно решать на компьютере, хотя еще в 70-х они были за видимой гранью достижимого.

Вклад России в некоторые из этих направлений, особенно на их начальной стадии, существен и незаменим, однако не будет преувеличением сказать, что своим дальнейшим развитием и современной формой они обязаны западу. Характерна судьба многосеточного метода, пионерами которого были Р.П. Федоренко и Н.С. Бахвалов [13, 14]. Применение его в 70-х было искусством, – не было известно, как находить наиболее важные параметры метода, – в силу чего в инженерных расчетах он не был востребован. Интенсивное развитие метода началось со второй половины 70-х на западе в связи с экспансией результатов численного анализа в инженерное проектирование и необходимостью решать СЛАУ (системы линейных алгебраических уравнений) с большим числом неизвестных. Это развитие стимулировалось несколькими факторами.

- Компьютеры позволяли решать СЛАУ с десятками тысяч неизвестных, но это могло занимать значительное время, например, несколько суток и более.

- Пользователи оплачивали компьютерное время.

- Для решения СЛАУ с N неизвестными метод исключения по Гауссу требует в общем случае порядка N^3 а.о. (арифметических операций). Для СЛАУ МКЭ наиболее распространенные тогда ленточные варианты метода исключения требовали порядка N^2 а.о., в то время как многосеточный метод – только порядка N а.о.

Таким образом, применение многосеточного метода для решения системы с $N = 10^4$ неизвестных, могло сократить компьютерное время и плату за него в 10^4 и более раз. К середине 80-х он приобрел достаточно простую и убедительную форму и стал на практике наиболее эффективным итерационным методом решения решения систем алгебраических уравнений МКЭ [15]. Появился целый ряд *алгебраических*[7] многосеточных и многоуровневых методов, в частности, методов типа черного ящика, не использующих информацию об источнике СЛАУ. С 1993 г. раз в два года в США проводится весьма представительная научная конференция, целиком посвященная многосеточным методам решения (Copper Mountain Conference on Multigrid Methods), с ней чередуется с той же частотой не менее представительная европейская конференция (GAMM Workshops on Parallel Multigrid Methods). Изданы многие книги не только общего характера, но и по многосеточным методам для специальных трудных классов инженерных задач. Примером является книга [27], посвященная многосеточному методу Ньютона для решения системы нелинейных уравнений в частных производных, описывающих весьма специфическую задачу о поведении гидродинамической смазки в подшипниках. Присуждение Государственной премии 2003 г. первопроходцам многосеточного метода профессору Р.П. Федоренко, академику Н.С. Бахвалову, профессору Г.П. Астраханцеву и руководителю коллектива, активно работавшего над его развитием в период его экспансии и обретения современной формы, чл. корреспонденту РАН В.В. Шайдурову явилось скорее результатом зарубежного многосеточного бума, чем его распространения в России. В настоящее время немногие отечественные коллективы применяют его в вычис-

---

ны достаточно полно, и на одну-две книги, выпущенные недавно. На самом деле литература, в основном зарубежная, по этим направлениям огромна. По вэйвлетам дается ссылка ссылка на одну из многих библиографий, содержащей более 100 книг, опубликованных в 90 -х.

[6]BPX – первые буквы фамилий создателей J.H. Bramble, J.E. Pasciak и J. Xu.

[7]В отличие от *классического* метода, называемого также *геометрическим*, поскольку он существенно использует геометрическую информацию о сетке.

лениях и еще меньше разрабатывают новые варианты для еще неосвоенных задач. В то же время в Европе и США многосеточные и многоуровневые методы наряду с методом декомпозиции области определяют лицо современного численного анализа и активно работают не только в научных, но и инженерных вычислениях. Его можно найти во многих коммерческих пакетах программ, даже таких общего назначения пакетах как, например, Matlab, в пакетах для решения краевых задач математической физики, подобных ANSYS'у, и мощных некоммерческих проблемно-ориентированных пакетах программ, примеры которых приводятся в настоящей статье.

Огромное внимание, уделяемое в США развитию научных исследований и особенно исследований посредством современных вычислительных технологий, подтверждается многими хорошо финансируемыми программами федерального уровня. Их названия характерны. Вот две из них одного только Министерства энергии США:

программа SciDAC , начатая в 2001, полное название которой *Scientific Discovery Through Advanced Computing* (Научное открытие посредством передовых вычислений) [3, 28, 29], и

программа ASC – *Advanced Simulation and Computing*, стартовавшая в 1995 как продолжение программы ASCI – Accelerated Strategic Computing Initiative[8] Администрации национальной ядерной безопасности (National Nuclear Security Administration) [30, 31, 32].

Целевое направление второй программы – в условиях моратория создать компьютерную альтернативу ядерным испытаниям, разработать боеголовки безопасные для длительного хранения, смоделировать поведение имеющегося боезапаса в условиях длительного хранения и воздействия разнообразных факторов. Назначение одной из подпрограмм формулируется предельно просто: обеспечить безопасность и эффективность ядерного оружия от склада до поражения цели. Основные исполнители программы – три Национальные лаборатории США: Lawrence Livermore, Los Alamos и Sandia National Laboratories. В связи с расширением программы и необходимостью усиления ее научной составляющей в 1997 в ее рамках была инициирована Программа академического стратегического альянса (Academic Strategic Alliance Program – ASAP), подключившая к ASC 5 центров, созданных при 5 университетах. Усилия каждого из которых фокусируются на одном из направлений национального уровня важности:

`Калифорнийский институт технологий (Caltech)` – Центр симулирования динамического сопротивления материалов. Цель – создание матобеспечения для Виртуального испытательного центра воздействиями с шоковой физикой (Virtual Shock Physics Test Facility). В частности, – создание новых материалов с высоким сопротивлением интенсивным динамическим нагрузкам путем разработки математических моделей, учитывающих многомасштабную физику, и их компьютерного тестирования.

`Стэнфордский университет (Stanford University)` – Центр для интегрированных симуляций турбулентности. Объединяющая исследования цель – создание математических моделей и матобеспечения для симуляции и компьютерного тестирования реактивных двигателей до их сборки. Ключевая задача – моделирование турбулентности и многомасштабной физики в основных компонентах двигателя – компрессоре, камере сгорания и турбине.

`Чикагский университет (University of Chicago)` – Центр астрофизических термоядерных вспышек. Цель – симуляция ядерного зажигания, взрыва и турбулентного перемешивания сложных многокомпонентных жидкостей и других материалов, представленных, например, в суперновых. Анализ физики суперновых поможет ответить на фундаментальные

[8] Один из используемых в литературе вариантов перевода: *Стратегическая суперкомпьютерная инициатива.* В материале 1999 г.: *Ядерные взрывы становятся виртуальными*, `http://www.lenta.ru/internet/1999/10/29/nuclear/`,– указывалось, что в течение 10 лет правительство планировало истратить на программу $4.5 миллиарда.

космологические вопросы, например, о скорости расширения вселенной.

`Иллинойский университет (University of Illinois at Urbana-Champaign)` – Центр для симулирования усовершенствованных ракет.

`Университет Юты (University of Utah)` – Центр симуляции случайных возгораний и взрывов с концентрацией на возгораниях и взрывах в связи с обработкой, хранением и транспортировкой легко воспламеняемых материалов.

Бюджет программы ASC в 2003 г. составил $621 млн. Она имеет уникальную компьютерную платформу (включающую BlueGene/L), которая в 2002 г. обеспечивала быстродействие 100TF для секретных (classified) и значительно большее,– 360TF согласно [30],– для несекретных компьютерных симуляций. Были начаты работы с окончанием, запланированным на 2010 г., по усовершенствованию и приспособлению программ к вычислениям на системе, имеющей от 30000 до 50000 процессоров и производительность, измеряемую петафлопами.

Даже хорошим специалистам в области вычислений трудно оценить возможности такой компьютерной мощи. Оправдано ли ее создание для программы ASC? Возможно, достижения вычислительной математики в области быстрых численных методов решения уравнений в частных производных и других областей вычислительной науки были использованы не в полной мере? Однако даже поверхностное знакомство с материалами программы ASC и публикациями убеждает: численное моделирование производится с использованием самых последних достижений вычислительной математики. Для апологетов коммерциализации науки, выстраивающих высшее образование в области механики и математики в хвост западным коммерческим пакетам программ, небезынтересно иметь представление об этой стороне ASC и других аналогичных программ. Замечательно следующее: роль вычислительной математики и вычислительной науки в целом четко обозначена не только в научных статьях, но уже в документах, приглашающих к участию в конкурсе для включения в федеральную программу ASC-ASAP. В Приложении приводится почти целиком содержательная часть (без описания способа представления и формы проектов) приглашения конца 1997 г. [32] к участию в конкурсе на включение в программу ASAP, в которой перечислены направления исследований. Из него очевидно, что применению новейших достижений вычислительной математики отводится в ASC-ASAP ключевая роль. При этом во вводной части подчеркивается, что бóльшая часть финансирования предназначается для раздела (1) *Компьютерная наука и вычислительная математика (Computer Science and Computational Mathematics).*

Несмотря на впечатляющие компьютерные ресурсы, применение последних достижений вычислительной математики и вычислительной науки в целом а также значительную длительность каждого расчета, к 2003 г. не удалось добиться надежного симулирования в 3-х пространственных переменных. Точность результатов вычислений симуляций оружия оказалась сопоставимой с точностью физических моделей, что препятствовало осмыслению как моделей, так и численных результатов. К середине декады ожидалось, что надежная симуляция в 3-х пространственных переменных будет занимать порядка 2-х месяцев на компьютере производительностью в 100TF. Запланированный на 2010 г. переход на пета-уровень быстродействия и памяти – прямое следствие этих затруднений.

Интересно сравнение влияния усовершенствования алгоритмов вычислительной математики и усовершенствования компьютеров на ускорение вычислений. Такое сравнение произведено в докладе президенту США [2]. Оно тем более заслуживает внимания, что среди авторов доклада подавляющее большинство не являются специалистами непосредственно по вычислительной математике. Известен закон Г. Мура [33], согласно которому мощность компьютеров удваивается каждые 18-24 месяца. Так вот, авторы доклада делают вывод, что *убыстрения решения СЛАУ благодаря последовательному введению в программы ленточных алгоритмов исключения, метода Зейделя,* *метода последовательной верхней релаксации (SOR), метода сопряженных градиентов и многосеточного метода были либо такими же, как убыстрение от усовершенствования компьютеров согласно закону Мура, либо превосходили его [2, стр. 53-54].*

3 Супервычисления на главных направлениях познания

Не следует думать, что упоминавшиеся примеры крупных проектов, команды которых объединяют специалистов по компьютерным наукам, специалистов по прикладной и вычислительной математике и специалистов предметных областей, единичны. Скорее наоборот – трудно найти университет США, имеющий относящиеся к основным инженерным и естественно научным подразделения, в котором исследования подобных масштабов и значимости не производились бы. В сентябре 2006 только по подпрограмме SAP's (Science Application Partnerships) программы SciDAC 17 университетов получили гранты от $0.3 млн до $6.1 млн за проекты по вычислительному исследованию крупных научных проблем [28]. Для участия в 30 проектах SciDAC-2, объявленных в тоже время, было отобрано более 75 университетов, лабораторий и корпораций [28, стр. 19] из 240 поданных на конкурс проектов. При этом, большинство проектов нацелено на вычисления пета-масштаба. Не пытаясь дать цельное представление о размахе вычислительных исследований, их государственного и частного финансирования и организационной структуры, которое выходит за рамки данной статьи, остановимся на докладе PITAC президенту США [2], в котором даны 28 примеров тем исследований, важнейших по мнению авторов, для существования и сохранения приоритета США в области вычислительной науки и ИТ. Их выполнение требует без преувеличения огромных усилий от вычислительной науки, имеет смысл хотя бы перечислить их, чтобы почувствовать масштабы вложений в науку и, в частности, в вычислительную науку и ту роль, которая отводится математическому моделированию. Решение лежащих в их основе проблем весьма часто не приносит сегодняшней выгоды[9], а завтра, через 15-20 лет или раньше, может изменить и изменит мир. Будем ли мы активными участниками этого (кроме всего прочего в среднесрочной перспективе коммерчески весьма выгодного!) предприятия и сумеем ли правильно выбрать приоритеты?

Вот названия 28 проектов.

1. Социальные науки

1.1. Мониторинг экономики США.

1.2. Киберинфраструктура и социальные науки.

1.3. Вычислительная экономика на базе представителей (Agent-based computational economics).

1.4. Архивы политических и социальных наук.

2. Физические науки

2.1. Квантовая хромодинамика: предсказание масс частиц.

2.2. Модели высокотемпературных полупроводников.

2.3. Плавление плазмы и источники энергии.

2.4. Проектирование компактных ускорителей частиц.

2.5. Открытие коричневых карликов посредством обработки данных.

2.6. Черная материя, черная энергия и структура вселенной.

[9]Не приносит выгоды на нашем ориентированным в значительной степени на одномоментную выгоду "свободном" рынке. А в США, видимо, приносит, раз такие исследования столь обильно финансируются и позволяют США небезвозмездно снабжать весь мир их результатами.

2.7. Моделирование суперновых.

3. Национальная безопасность

3.1. Радиотехническая разведка (Signals intelligence).

3.2. Моделирование в режиме реального времени сложных систем в человеческой среде.

3.3. Распространение инфекционных болезней.

4. Геонауки

4.1. Предсказание сильных штормов.

4.2. Моделирование калифорнийских землетрясений и анализ данных.

5. Инженерное дело и производство

5.1. Эффективный инжиниринг хайвэев (Efficient highway engineering).

5.2. Преобразование биомассы в этанол для получения энергии.

5.3. Моделирование землетрясений и симуляция поведения нефтяных резервуаров.

5.4. Охлаждение турбинных лопаток для эффективного движения и мощности.

5.5. Микропузырьки и снижение силы сопротивления для кораблей.

5.6. Моделирование полупроводящих полимеров для оптоэлектроники.

5.7. Высокопроизводительные вычисления для национальной авиапространственной системы.

6. Биологические науки

6.1. Идентификация умственных расстройств посредством совместной инфраструктуры.

6.2. Расшифровка общения пчел.

6.3. Моделирование белков-моторов.

6.4. Динамика и функционирование белков.

6.5. Вычислительная наука и медицинский уход.

Отличительная черта проектов: необходимость обработки громадного объема экспериментальной, натурной и другой информации, громадный объем вычислений, осуществляющих моделирование или симуляцию, сложность алгоритмов. Приведем дополнительные детали по некоторым из них.

Вот "понятная" проблема 4.2 предсказания землетрясений, степени их опасности и районов концентрации разрушений. Чтобы попытаться ее решить, нужно *только* иметь достаточно обширные данные о структуре платформы, характере толчков и ускорениях, иметь эффективные методы решения некоторых прямых и обратных задач, сильных программистов и мощную компьютерную платформу. Это не считая сплоченной группы ученых, сведущих в землетрясениях, математических моделях и хороших численных методах решения соответствующих уравнений. Все это, по-видимому есть, в Южно-калифорнийском центре землетрясений SCEC (Southern California Earthquake Center). Последнее землетрясение в этом районе было в 1690 г. и ученые считают, что можно ожидать новое землетрясение в 7.7 баллов. В SCEC в одной из симуляций смоделировали район длиной 600 км, шириной 300 км и глубиной 80 км, покрывающий основные центры концентрации населения в южной Калифорнии [34, 35]. Расчетная сетка содержала 1.8 миллиардов кубов со стороной 200 м (более 5млрд степеней свободы), объем полученной в результате моделирования информации составил 47 TB. Объем необходимой для моделирования и получаемой в результате его информации был настолько велик, что была создана специальная электронная библиотека с 1.5 млн файлами и специальный комплекс программ для работы с ней. В симуляции значительно меньшего объема ($400\times800\times800$ узлов) потребовалось произвести 3000 шагов по времени, которые на суперкомпьютере NPACI Blue Horizon[10] с 512 процессорами заняли 12 часов и 6000 часов CPU времени. Для параллелизации вычислений применялся метод декомпозиции области и язык MPI. Загрузка исходной информации в 10 TB занимала сначала 25 дней, а затем посредством усовершенствования алгоритмов была сокращена до 5 дней. В результате расчетов были выявлены, например, места концентрации разрушений в зависимости от направления толчка.

Работы финансировались федеральным и местным правительствами. Несомненно, они закладывают основу для колоссального преимущества США в будущем в области весьма востребованных в мире интеллектуальных технологий.

Сопостави́м по масштабу проект 5.3 численных исследований поведения при землетрясениях нефтяных резервуаров, создаваемых часто глубоко под землей или под водой. Он выполняется командой из 19 ученых из разных университетов, включающих группу специалистов в области вычислительной математики и математического моделирования, возглавляемую выдающимся ученым M. Wheeler[11]. Одна из трудностей – сбор информации о сейсмичности и геологии района и свойствах образующих ее пород, получаемой, например, звуковым зондированием. Другая – сложность в создании существенно нелинейных математических моделей и разработке численных методов расчета резервуаров и обработки необходимой для него информации, объем которой по каждому району предполагается довести до порядка 1PB. Проект финансируется Программой исследований ИТ Национального научного фонда США и Министерствами энергии и обороны [36].

Проект 5.2 – один из многих и многих по этанолу в США[12]. Узкое место в одной из перспективных технологий производства этанола – медленное расщепление целлюлозы энзимом целлюлазы. Если понять процесс на молекулярном уровне, то, возможно, удастся управлять им в сторону ускорения. Однако размер вычислительной проблемы столь велик, – требуется симулировать динамику более 1 млн атомов, причем для симуляции 10 наносекунд требуется порядка 5000 шагов по времени, – что существующая программа SHARMM на современном суперкомпьютере не справляется с задачей. В настоящее время San Diego Supercomputing Center, Colorado School of Mines, National Laboratory of Renewable Energy, Cornell Univrsity и Scripps Research Institute объединили усилия по совершенствованию алгоритмов и самой программы SHARMM, чтобы осуществить симуляцию в требуемом объеме.

Есть проекты, ярко демонстрирующие особую роль ИТ в науке, проистекающую из возможности анализа значительных объемов данных. Проект 6.2 связан с расшифровкой способов общения пчел, которые развили коммуникационные системы значительной сложности. Информация о пыльце, нектаре, воде, смоле и гнездах передается разными способами, причем возможно кодирование звуковых сигналов, которые воспринимаются коспецифичными сенсорами. Ученые пытаются понять механизмы передачи информации и ее защиты путем анализа видеозаписей поведения пчел. На каждый вид пчел ежегодно накапливается 1.2TB цифровой, в частности, визуальной информации, которая затем анализируется на предмет общих элементов поведения, моментов и способов передачи информации. Кроме прочего, исследование может способствовать пониманию процессов адаптации пчел в процессе эволюции.

Космические полеты побудили к созданию в 90-х годах обширных астрономических баз данных, которые с самого начала создавались с учетом стандартов ИТ. Позднее в 1999 возникла

[10] Компьютеры этого типа имеют производительность порядка 1.7TF.

[11] Персональная стр.: http://www.ices.utexas.edu/ mfw.

[12] В соответствии с биоэнергетической инициативой президента Дж. Буша МЭ (Министерство энергетики) 28.02.2007 выделило $200 млн на создание небольших рафинировочных предприятий и 01.05.2007 – $385 млн на создание полномасштабных предприятий. Это далеко не все средства, отпущенные МЭ в 2007 г. Например, в марте объявлено о выделении $27 млн на 5 лучших проектов по получению этанола из целлюлозы. К 2012 г. планируется добиться конкурентоспособности биотоплива с бензином.

концепция Национальной виртуальной обсерватории – НВО США, интенсивно обсуждавшаяся в течение двух последующих лет в том числе и на нескольких научных конференциях. В 2001 Исследовательская программа по ИТ Национального научного фонда США выделила 17-ти организациям $10 млн на создание инфраструктуры НВО. В 2003 г. НВО США и АВО – Астрофизическая виртуальная обсерватория (европейская альтернатива НВО) выпустили первые научные прототипы. НВО дает возможность обозревать *виртуальное небо* и открывает путь к новому типу астрономических исследований. После эры наблюдений небольших тщательно выбранных объектов на одной или нескольких волнах и раздельного их анализа различными исследователями наступает время активного использования объединенных данных в широких диапазонах волн для миллионов, если не миллиардов объектов. Это позволит исследователям открывать едва различимые, но существенные новые закономерности в статистически богатых и объективных данных путем сравнения и численной симуляции. НВО обеспечивает одновременно *быстрый доступ к архивам, визуализацию на основе продвинутых технологий и инструменты статистического анализа*. На демонстрации одного прототипа НВО была поставлена задача найти все известные коричневые карлики. НВО исследовала информацию о 10 млн объектах одной базы данных и 160 млн другой. На участке неба, составляющем 0.4%, было обнаружено сначала 300000 общих объектов или, возможно, вариантов информации об одном объекте. Последовательное введение дополнительных критериев отбора оставили семь новых кандидатов в коричневые карлики, а затем три, из которых один действительно оказался неизвестной звездой а два других требовали дополнительного изучения. Впервые посредством ИТ был получен феноменальный результат – открытие новой звезды [37].

В ASC и SciDAC и др. программах новейшие алгоритмы вычислительной математики играют решающую роль, особенно в проектах групп типа 2,4,6 SciDAC. Уже способ дискретизации, приводящей к успеху и зависящей от класса задач, существенно отражается на многих аспектах численного моделирования, например, на наборе методов вычислительной математики для решения систем дискретных уравнений, возможностях распараллеливания и т.п. В [28] подчеркивается, что *основным узким местом масштабных симуляций является часто солвер*[13]. В частности, по той причине, что асимптотическая вычислительная стоимость солверов как правило суперлинейна, в то время как остальных операций – линейна. Кроме того солверы труднее распараллеливаются по сравнению с пред- и постпроцессорными операциями. В связи с этим в рамкам программы SciDAC-2, к которой относятся многие из 28 проектов, создан центр TOPS – Towards Optimal Petascale Simulations Center, один из девяти центров – концентраторов исследований по программе. Его основная цель – пакет программ новейших солверов для вычислительных симуляций по программе SciDAC всеми участниками этой программы и др. пользователями на компьютерных платформах пета-масштаба, имеющих от 1000 до 100000 процессоров. Он создается путем объединения и усовершенствования возможностей известных мощных пакетов свободного доступа: hypre, PETSc, SUNDIALS, SuperLU, TAO, и Trilinos [28].

Интересно прояснить роль коммерческих пакетов программ в выполнении ASC и SciDAC. В отчетах, обширной научной и др. литературе, связанной ASC и SciDAC, нами не обнаружено примеров прямого или не прямого использования коммерческих пакетов за исключением одного слу-

[13]Термин *солвер (solver)* понимается в [28] как алгоритм/программа численного решения системы уравнений в частных производных, описывающих математическую модель. Алгоритм солвера имеет две основные компоненты: метод дискретизации, то есть сведения задачи к системе линейных или нелинейных алгебраических уравнений, и метод численного решения полученной системы. В литературе этот термин часто понимается в более узком смысле как алгоритм/прогамма решения системы дискретных уравнений. Создание быстрых солверов – одна из основных задач вычислительной математики.

чая, на котором мы остановимся ниже. Причины этого понятны. Коммерческие пакеты подобные ANSYS, FLUENT, LS-DYNA др. ориентированы преимущественно на выполнение достаточно массовых расчетов, например, при проектировании зданий, гидротехнических сооружений, авиалайнеров и т.п. Но уже уникальные сооружения, подобные подводным нефтяным резервуарам, лежат практически за пределами их возможностей. Слишком много разнородных типов материалов и физических процессов, математичские описания которых часто приходится создавать в процессе написания программ, влияет на сопротивляемость таких конструкций. Это многократно усложняет дискретную модель (даже по сравнению, напр., с моделями газовой динамики и прочности при расчетах авиалайнеров) особенно в сейсмических районах, слишком большая цена аварий, требующая повышенной надежности симуляций. Кроме всего прочего эти пакеты ориентированы на компьютеры с доступной массовому пользователю-инженеру стоимостью компьютерного времени. Даже если бы они покрывали классы задач таких программ как ASC и SciDAC, их нужно было бы переписать для суперкомпьютеров с быстродействием >100TF. В противном случае стоимость их использования стала бы слишком большой. Задачи многих проектов, призванных обеспечить превосходство США в ключевых направлениях развития, еще более сложны. Для их выполнения создаются пакеты групп β) и γ), называемые в докладе часто [2] *community codes*, т.е. пакеты научных сообществ, такие, например как пакет Trilinos, развиваемый Sandia National Laboratories с привлечением квалифицированных специалистов со всего мира, включая Россию. По своим возможностям на предметной области эти пакеты могут на порядки превосходить известные коммерческие пакеты.

Сказанное не призвано умалить значение развития коммерческих пакетов программ, весьма успешно работающих в области их предназначения и быстро расширяющих эти области. Разработки коммерческих пакетов иногда служат основой для научных пакетов нового уровня. Если учесть, что большинство коммерческих пакетов произошли из научных, то такой "возврат" естествен. Характерным примером являются пакеты DYNA3D и ParaDYN, родившиеся в Ливерморской лаборатории. Архитектура серийного пакета DYNA3D[14] была взята за основу в пакете ParaDYN, создаваемым в Ливерморской лаборатории в рамках программы W Program ASCI, предназначенной для создания и мониторинга безопасности ядерного оружия от склада до поражения цели. В ParaDYN реализованы все возможности DYNA3D, но применительно к вычислительным системам пета-масштаба, значительно усилена часть, связанная с применением *неявных методов* интегрирования задач динамики. К 2004 г. программа была способна решать нелинейные динамические задачи с большими перемещениями для нескольких десятков тел, например, нитей тросов. При этом время счета по сравнению с программой Sandia Laboratories для того же класса задач оказалось в 17 раз меньшим.

С чисто коммерческой точки зрения грань между коммерческими и пакетами и пакетами для научных вычислений можно было бы обозначить так: на первых можно зарабатывать неплохие деньги сегодня, в то время как вторые принесут возможно существенно больший доход или выгоду, но через несколько лет и не обязательно напрямую измеряемые через рынок. Если проект 4.2 позволит уменьшить разрушения и сократить число жертв, то разработчики могут получить медаль или премию, но основной их сегодняшний заработок обусловлен государственным и частным финансированием в процессе разработки пакета. Путь от создания ТОКОМАКов до перевода программ их расчета и управления ими в коммерческую область пройдет, видимо, значительное время. При этом, он будет осуществлен другим поколением разработчиков. В этом, между прочим,

[14] Первая версия пакета DYNA3D была выпущена и 1976 г. в Ливерморской лаборатории Калифорнийского университета [38], разработка коммерческого программного обеспечения была продолжена в Livermore Software technology Corporation's (LSTC).

одна из причин, сдерживающих развитие вычислительной науки не только у нас, но и в США, которая подчеркивается в авторами доклада: учеными вычислительной математики и вычислительной науки в целом разрабатываются мощные инструменты численного анализа, но прежде, чем попасть на рынок, они обкатываются, приспосабливаются к своим частным задачам учеными предметных областей науки и инженерами, и они-то и зарабатывают на эксплуатации этих инструментов. Сколько заработали создатели современных алгоритмов решения систем алгебраических уравнений, многосеточных методов, метода декомпозиции области и др. в сравнении с создателями коммерческих пакетов, использующими эти находки? Очевидный ответ: несопоставимо меньше. Как пишут авторы доклада [2, стр. 5]: *Универсальность вычислительной науки – ее интеллектуальная сила. Но это также ее политическая слабость. Потому что она вносит свой вклад во все области исследований, но ни одна из областей не определяется целиком вычислительной наукой. Дисциплине исторически нехватало сплоченной хорошо организованной группы адвокатов, которыми обладают другие дисциплины.*

Разумеется, общая картина не однородна. Если обратиться, например, к проектам по этанолу, то можно ожидать быстрого вхождения достижений вычислительной науки в этой области в рыночные продукты матобеспечения.

4 Вычислительная наука, вычислительная математика и смешение языков с английским

Терминология ИТ притекает к нам из США, поскольку они на десятки лет опережают нас в этой области. И в Европе она в основном англоязычная по той же, хотя и не столь ярко обозначенной причине. Экспансия английского языка происходит и в других областях. В Дании каждая шестая книжка издается на английском, английский официально сделан корпоративным языком. Коммерческая организация Danish Commerce & Service выступила с предложением, что преподавание в университетах и торговых школах Дании должно вестись не на датском, а на английском языке. "После трех лет обучения студенты являются вполне подготовленными для того, чтобы слушать курсы предметов на английском", – сказал в интервью национальной радиосети консультант конфедерации Confederation of Danish Industries доктор Андерсен (R. N. Andersen). В Германии распространяется англо-немецкий мутант под названием *Дэнглиш*, в котором многие привычные слова заменены английскими: baby, relax, happy, cool, OK,... и сотнями других, формирующими устойчивые выражения.

Причина засилья английских терминов в ИТ, видимо, не только в доминировании США в этой и др. областях. Английский язык, как и менталитет, очень быстр и легок в создании и освоении новых научных терминов и слов: Skylab, CAM – computer aided medicine, computational mechanics, solver, processor, outsourcing... Может быть, потому что в инглише больше коротких слов а окончаний кот наплакал и они не подавляют свободу слова? CAM – *медицина с помощью компьютера*, но наша конструкция звучит повествовательно, читается с остановками между словами, а английская – почти как пушкинский ямб[15]. Последнее – преувеличение, и, так или иначе, правильное приме-

[15] *Компьютерный инжиниринг* – хороший эквивалент *CAE – computer aided engineering*, но можно ли назвать этот термин русским? У многих возникнет сомнение, как написать правильно: как в названии *4-й Всероссийский конкурс - выставка "Компьютерный инжиниринг"*, или в названии *Инженерная компания "Бест Инженириng" ?* Немецким терминам, видимо, тоже не грозит широкое распространение; даже относительно простое слово *differentialgleichungen* требует от иностранца тренировки для правильного про-

нение сложившихся за рубежом терминов не создает проблем непосредственно для ИТ. Но при отсутствии их единообразного понимания в научной среде и полном непонимании в среде чиновников часто новыми звучными многообещающими терминами обозначается деятельность далекая от их смысла – лишь бы деньги платили. Например, распространенный у нас тип расчетов – это расчеты, связанные с проектированием массовых инженерных объектов на основе западных коммерческих пакетов программ: ANSYS, NASTRAN, FLUENT – и многих других. Подобные работы украшаются нередко терминами: вычислительная механика, быстродействующие вычисления, мегавычисления, критические технологии, параллельные вычисления..., хотя критическими ни в каком смысле современной вычислительной наукой эти технологии считаться не могут, равно как и быстродействующими. В лучшем случае мы имеем дело с CAD (Computer aided design) и CAE, а , например, не с вычислительной механикой. Этот термин в соответствии с прожитой им сравнительно долгой и несомненно плодотворной жизнью подразумевает существенную научную компоненту непосредственно в области механики или численных методов решения какого либо важнейшего класса ее задач.

Проекты, рассмотренные в предыдущей части статьи, являются примерами решения крупных задач вычислительной наукой – термин, появившийся в научной литературе США в конце прошлого столетия. В связи с тем что вычислительная наука становится необходимой третьей составляющей познания, имеет смысл остановиться на том, как этот термин понимается.

Российские специалисты при первичном восприятии не увидят большой разницы между *вычислительной наукой* и *вычислительной математикой.* Авторы доклада [2] дают развернутое определение вычислительной науке, суммируя сложившееся на западе представление о ней как о значительно более широком по сравнению с вычислительной математикой поле научной деятельности, включающем последнюю в качестве одной из составляющих. Вот основные положения их определения.

> *Вычислительная наука обслуживает использование компьютерных возможностей для решения проблем реального мира.* Она является *многодисциплинарной областью*, которая имеет целью реализацию наиболее совершенных вычислительных технологий для понимания и решения сложных проблем. Вычислительная наука объединяет три различных элемента.
>
> **1.** *Алгоритмы (численные и нечисленные) и программное обеспечение* моделирования и симуляции, созданные для решения научных (например, биологических, физических, социальных), инженерных и гуманитарных проблем.
>
> **2.** *Компьютерную и информационную науки*, которые развивают и оптимизирует аппаратные, программные и сетевые компоненты систем, необходимые для проблем, нуждающихся в компьютерном решении.
>
> **3.** *Вычислительную инфраструктуру,* которая поддерживает решение как научных, так и инженерных проблем и развитие компьютерной и информационной наук.

Там же написано: "Мы находимся в ключевой точке с долговременными порядка поколения последствиями для научного лидерства и экономической конкурентоспособности, если мы будем не способны действовать с предвидением и ответственностью. Как свидетельствуют наши выводы, мы должны предпринять масштабное и длительное сотрудничество между правительством, наукой и промышленностью, чтобы США обладали экспертизой вычислительной науки и ресурсами для гарантирования национальной безопасности, экономического успеха и растущего стандарта жизни в 21-м веке."

изношения.

5 О цене вопроса

Масштабы нашего отставания в развитии вычислительной науки, приобретающей исключительное значение в современном обществе, трудно поддаются какой либо надежной количественной, временной или стоимостной, оценке. На вопрос, что делать, краткого ответа нет: *надо делать все* или по крайней мере очень многое. Возможно, самый "простой" ответ: обеспечить каждого вузовского преподавателя и научного сотрудника со степенью достойным рабочим местом, лучше отдельным офисом со своим компьютером, поднять оснащенность компьютерами и офисной техникой до современного уровня. А работа и результаты потом сами пойдут, потому что желающих и способных продуктивно заниматься исследованиями и супервычислениями даже при сравнительно небольшой зарплате, как можно ожидать, в России еще хватает (раз их хватает на США и др. страны[16]). Очевидно, что даже при наличии финансовых средств, реализация этого плана на самом деле никак не может быть простой: одновременно надо поднять на другой уровень всю жизнь ВУЗов, найти много новых специалистов.

Вопрос о соотношении вычислительных потенциалов у нас и в США возникал не однажды. Один из эпизодов описан академиком Г.И. Марчуком [39]. В 1972 Нобелевская премия в области молекулярной биологии была присуждена американским ученым, а наших ученых среди награжденных не было, хотя идеи, лежавшие в основе исследований, были высказаны одновременно. Среди причин называлось то, что компьютерная обработка результатов экспериментов у американцев занимала неделю, а у нас около полугода и что американские приборы в 10 раз точнее. Позднее в связи с созданием Государственной программы научно-технического прогресса под руководством академика В.А. Котельникова было предпринято основательное сопоставление, приведшее к выводу, что соотношение потенциальных возможностей и материального обеспечения научно-технического прогресса у нас и в США равно 1:7.

У нас много сторонников копирования опыта США. Копировать надо и это происходит ежечасно и повсеместно (разве практически все матобеспечение "наших" PC и многое другое не оттуда?), но всегда ли это приносит ожидаемые результаты? Попытки повторения опыта США добиться серьезных продвижений в областях, опирающихся на многие отрасли промышленности и науки и требующих развития сложной разветвленной инфраструктуры и значительного контингента разнообразного профиля специалистов, часто неудачны. Можно напомнить отказ от развития ЭВМ собственного дизайна и переход на единую систему ЭВМ, свершившийся под флагом переноса опыта IBM на отечественную почву. Многие согласятся с тем, что эффект был отрицательным и в целом обозначил начало свертывания как разработок отечественных ЭВМ, так и широкомасштабного применения ЭВМ в научных и инженерных исследованиях[17]. Интересно отметить, что против тотального перехода на ЕС ЭВМ и особенно копирования аппаратных и программных средства IBM/360 выступали многие наиболее сведущие в предмете люди: А.А. Дородницын,В. М. Глушков, С.А. Лебедев, И.С. Брук, Б.И. Рамеев, зам. министра радиопромышленности М.К. Сулим и др.

Прямое перенесение опыта США затруднительно не только для России, но и для развитых европейских стран. По числу ВУЗов РФ, возможно, превосходит США. На сайте *Index of American Universities* приведен 1641 университет а на сайте *Вузы России* – 1150[18]. А.Фурсенко называет в

[16]Между прочим директором федеральной программы ASC Администрации национальной ядерной безопасности США - NNSA является Дмитрий Кузнецов.

[17]Краткое заключение о положительных и отрицательных следствиях введения ЕС можно найти в статье *ЕС ЭВМ* Викепедии, http://ru.wikipedia.org/wiki. Итоги перехода обсуждались также во многих статьях, см., например: Ю. Ревич. *Совинфотех и реформа РАН,* 2005. http://www.computerra.ru/focus/39303/.

[18]См. http://5ballov.ru/universities/ и http://www.clas.ufl.edu/au/

выступлениях фантастическую цифру более трех тысяч российских ВУЗов, правда, вместе с филиалами [40]. Однако надо иметь в виду, что если даже взять за основу первое число, получим, что около половины теперешних ВУЗов РФ родилось недавно, во времена перемен. В СССР было 650 ВУЗов, из них около 50 в других республиках. Кроме того в США много больших университетов. Например, три крупнейших университета только штата Техас имеют каждый около 40 тыс. студентов. Разница в уровнях финансирования в науке и образовании, скорее всего, будет постепенно выравниваться, но малая "населенность" учеными некоторых областей науки уже составляет серьезную проблему. Достаточно точные цифры привести затруднительно, но представлятся, что числа плодотворно работающих ученых, например, в вычислительной математике у нас и в США может разниться в несколько десятков раз. Может показаться, что область компьютерных наук и математического обеспечения находится в более благоприятном состоянии – там оседают многие выпускники наших математических специальностей. На самом деле первое не соответствует действительности, и в этом может убедиться каждый, если имеет компьютер и доступ к интернету. Факультеты *Computer Science* имеются в США в десятках, если не сотнях, университетов. Например, в Техасском университете в Остине он насчитывает около 60 преподавателей, а в сравнительно небольшом Ренселлаерском политехническом институте ($\sim$ 6000 студентов) – порядка 30, это не считая сотрудников научных подразделений, работающих в этой области. Но кроме того, в каждом университете имеется вычислительный центр с довольно многочисленным штатом, обслуживающим объединенные компьютерные системы каждого из университетов, замкнутые как правило на несколько суперкомпьютеров. Нередко имеются также мощные вычислительные центры специального назначения, примеры которых упоминались в данной статье. У нас даже в крупнейших университетах нет таких факультетов, хотя есть кафедры, которые могли бы быть выделены в такие факультеты. Но в университетах – бывших технических ВУЗах нет даже кафедр математического обеспечения, не говоря уже об адекватных потребностям вычислительных центрах. Для сравнения скажем еще, что в Вестминстерском университете Лондона, в котором обучается порядка 24000 (из них боле 13000 дневных) студентов, есть две Школы компьютерных наук – Harrow School of Computer Science и Cavendish School of Computer Science, переименованная недавно в School of Informatics. В них учится соответственно 2465 (1232) и 1291 (1053) студентов по весьма широкому спектру компьютерных наук [41].

Но дело не только в этом. В наших университетах, бывших ранее техническими ВУЗами, как правило есть кафедры *Математика* и *Прикладная математика*. Но во многих случаях заведующие этими кафедрами – кандидаты технических наук, не имеющие научных работ в области математики, так же как и многие преподаватели.

Часто западный опыт копируется по отдельным формальным признакам, кажущимся лоббистам финансово якобы выгодных быстрых перемен к лучшему и руководящим чиновникам ключевыми. Примером является вопрос о сокращении аудиторной нагрузки, поднятый с целью увеличения, следуя западным образцам, роли самостоятельной работы студентов. Само по себе увеличение роли самостоятельной работы не вызывает возражений, но оно (особенно если оно совершается быстро, унифицированно и повсеместно) требует выполнения некоторых предварительных условий и дополнительного финансирования. Создается впечатление, что в реально исполняемом варианте оно подразумевает обратное, т.е. сокращение затрат на обучение, что конечно приведет к дальнейшему снижению уровня образования. Что подразумевает увеличение доли самостоятельной работы и могут ли наши даже хорошие университеты обеспечить удовлетворительного уровня самостоятельную работу? Обратимся сначала к опыту США, поскольку он часто служит источником радикальных нововведений. Ключевой элемент для интенсивной и качественной самостоятельной работы студента – возможность ее выполнения не выходя из стен университета. В США она обеспечивается многими весьма весомыми факторами.

✓ Значительным числом современных свободного доступа компьютеров, предназначенных для работы студентов практически в любое время суток, расположенных в просторных помещениях с мебелью, удобных для длительной одновременной работы студентов. Эти компьютеры включены в университетские сети, что позволяет студенту пользоваться ее более широкими возможностями на любом из них.

✓ Значительной стандартизацией курсов особенно первых лет обучения с очень подробным изложением материала и большим числом домашних заданий. Это дает преподавателю возможность не тратить время на собственный конспект лекций и на подготовку домашних заданий и проектов а студенту – более легкое освоение материала. Книги по начальным курсам обновляются с достаточной частотой, примерно раз в три-четыре года. Американский учебник – это совершенно особый тип литературы, не встречающийся ни в России, ни в западной Европе. Прежде всего – подробнейшее изложение материала. Вот, например, типичный учебник: Дж. Ректенвальд, *Численные методы с Матлабом: реализация и применение* [42]. Цель книги – изложить материал обычный для читаемых у нас и в США на 3-м и 4-м годах обучения курсов "Начала численных методов", "Информатика", "Введение в вычислительную математику" и т.п. вместе с вопросами реализации алгоритмов и упражнениями на Матлабе. Помимо 4-х глав по Матлабу главы по выч. мат. включают следующие:

5. Неизбежные ошибки в вычислениях.
6. Нахождение корней уравнений $f(x) = 0$.
7. Обзор линейной алгебры.
8. Решение систем линейных алгебраических уравнений.
9. Построение кривых, приближающих дискретные данные, методом наименьших квадратов.
10. Интерполяция.
11. Численное интегрирование.
12. Численное интегрирование обыкновенных дифференциальных уравнений.

    Приложение A. Собственные числа и собственные системы.

    Приложение B. Разреженные матрицы.

Курс предназначен для инженеров, автор читает его для студентов машиностроительного факультета (Department of Mechanical and Materials Engineering), и содержит минимальный набор тем для такого сорта курсов. Наши учебные пособия даже более высокого математического уровня и значительно более широкого охвата материала имеют порядка 250 стр., см., например, [43]. В американском учебнике указанному стандартному для инженерных специальностей материалу отводится 590 стр. (вся книга 806 стр.), учебник содержит 131 рисунок, 37 таблиц, 381 упражнений с указанием 4-х основных и 5-ти промежуточных классов их сложности (что помогает преподавателю легче определять максимальное число баллов за решение каждой из задач). Кроме этого на персональной странице лектора содержатся два варианта конспекта лекций в виде слайдов, примерно по 50 слайдов на каждую главу, пояснения, как читать книгу, как будут выставляться оценки за курс и т.п. Кроме того автор создал пакет Численные методы на Матлабе, в котором собраны программы на языке Матлаб и файлы исходных данных для упражнений. Его можно найти на сайте http://www.prenhall.com/recktenwald или получить на дискете.

Курсы обычно читаются, следуя одному учебнику, максимум 2-м. Это связано со стремлением к стандартизации (на заданном уровне) традиционных курсов и с тем, что студент как правило должен купить учебник, указанный лектором в описании курса, а цена его может быть $120 и больше. Начальная цена учебника Дж. Ректенвальда, изданного в 2000 г., как раз была несколько выше $120, а сейчас снизилась до $90. Один из авторов статьи, при чтении подобного курса в одном из американских университетов, включил в рекомендованный список литературы 5 очень хороших книг. Его спросили: Вы считаете студентов богатыми, и почему книги такие старые, когда есть учебники, изданные в последние годы? На вторую часть вопроса подмывало сказать: Эти книги не старые, а вечные, а авторов ваших новых книг в науке никто не знает. Впоследствии пришлось убедиться, что при чтении общих курсов большим аудиториям студентов, из которых лишь единицы останутся в математике, американский учебник обладает неоспоримыми достоинствами, обеспечивая наиболее комфортное усвоение основного материала.

В американских университетах сохраняется замечательная традиция чтения общих курсов большим аудиториям 100–150 чел. и более. На таких лекциях лектор тоже выдает домашние задания. Проверка и оценка их производится в таких случаях ассистентом лектора с последним словом, оставляемым за лектором.

✓ Обеспеченностью каждого преподавателя офисом достаточной площади со своим компьютером и специальными стандартными для всех США металлическими шкафами для хранения материалов. В США как правило каждый преподаватель со степенью PhD имеет отдельную комнату. В объявлении о курсе преподаватель указывает часы, когда он обязательно находится в офисе и принимает своих студентов по любым вопросам, связанным с обучением.

✓ Наличием мощной копировальной техники, которая позволяет быстро размножать задания, конспекты лекций и т.д., сокращая время, затрачиваемое преподавателями на подготовку к занятиям а студентами на знакомство с заданиями.

✓ Интегральной оценкой освоения курса. Например, Дж. Ректенвальд ставит весовую интегральную оценку: `домашние задания - 20% + два краткие опроса - 20% + экзамен в середине семестра - 30%+ заключительный экзамен -30%`. При этом интегральной оценке соответствуют оценки A,B,..,F: $A>0.85$, $0.75<B\leq 0.85$, $0.65<C\leq 0.75$, $0.50<D\leq 0.65$, $F\leq 0.50$. Заметим, что проценты в интегральной оценке и границы оценок A,B,..,F доверяется определять самому лектору.

✓ Наличием библиотеки с электронным каталогом содержания основных библиотек США, которая может снабдить студента практически любым материалом, имеющимся в каталоге, или его копией.

✓ Платой за обучение от $10000 до $20000 для постоянных жителей США и значительно больше для иностранцев. Это весьма существенный фактор, видимо, мало желающих платить такие деньги только для того, чтобы получить диплом. В США практически отсутствует списывание друг с друга, большинство домашних заданий и проектов выполняется, хотя бы потому что система получения проходного балла, кажущаяся на первый взгляд игрушечной, излишне детализированной и формализованной, на самом деле работает: не набрал проходного балла за прослушанный курс (включая всю самостоятельную работу) – плати снова и слушай его снова, или выбирай другой курс, более подходящий, плати и обязательно набери проходной балл. При этом за повторное слушание курса плата возрастает в два-три раза. Распространенное правило для американцев: в первый раз платишь как американский резидент а за повторное слушание курса – как иностранец. Может показаться, что в этой системе мало человечности. Но такое заключение было бы ошибочным: американский преподаватель уделяет много времени работе со студентами, на наш взгляд, больше, чем наш преподаватель, хотя бы потому, что большую часть жизни он проводит в университете в непосредственной близости к студентам.[19]

Число аудиторных занятий студентов в США на первый взгляд меньше, чем в России, и это, возможно, действительно так. Прохождение студентом того или иного курса обучения или выполнение программы академического семестра измеряется заработанным числом кредитов или кре-

[19]В университетах США преподаватель имеет возможность уменьшить себе учебную нагрузку. Это можно сделать, например, в том случае, если его исследовательские и др. проекты и гранты, приносят университету достаточную сумму денег.

дитных часов (semester credit hour – к.ч.). Существуют различные системы кредитов[20]: один за лекционный курс, за час в неделю занятий в классе, за количество часов в неделю (включая выполнение домашних заданий), отведенных для освоения курса и т.п. По одной из них, принятой во многих университетах США, 1 к.ч. предполагает один академический лекционный час в неделю, сопровождаемый 3-мя часами самостоятельной работы. При 2-х семестрах в учебном году за один семестр студент должен набрать в среднем от 16 до 20 к.ч. (для гуманитарных специальностей как правило меньше), для получения степени бакалавра требуется набрать 120-140к.ч. Подчеркнем, что при этом применяется весьма версифицированная система оплаты за обучение, поэтому скорость прохождения курса до значительной степени определяется самим студентом в зависимости от его интеллектуальных и финансовых возможностей. На самом деле в каждом университете имеются верхние и нижние границы числа кредитов, например, не ниже 12 (чтобы не потерять статус студента дневного обучения) и не выше 21 (без дополнительной оплаты[21]) кредита в семестр [44]. В особых случаях способный студент может набрать до 30 к.ч. в семестр, но для этого требуется разрешение декана или соответствующего факультетского органа. Один к.ч. соответствует одному аудиторному часу только для лекций, один час лабораторных работ, презентаций, объяснений заданий и т.д. оценивается в 0.5 к.ч. и ниже. По правилам, принятым в 2001 г. в Университете Пердью, 1 к.ч. может соответствовать даже 4-м часам лабораторных работ и 6 часам работы в клинике [45]. Весьма существенно, что каждый лекционный к.ч. предполагает 2-3 часа самостоятельной работы и число и сложность домашних заданий и проектов рассчитаны так, что студент должен быть занят и действительно занят учебой 45-51 (!) часов в неделю, см. [45].

В нашей практике, много часов отводится НИР, семинарам и лабораторным занятиям, которые в практике США падают на хорошо продуманную и *материально обеспеченную* самостоятельную работу. У нас эти часы, во-первых, "компенсируют" отсутствие возможностей для самостоятельной работы студентов в стенах университетов и, во-вторых, увеличивают преподавателям нагрузку, что до некоторой степени компенсирует малые зарплаты.

Сравнение нагрузки по аудиторным часам может вообще дезориентировать. Система обучения в Англии весьма отлична по существу от американской и европейской, хотя вместе с европейскими странами вводится система оценок и образовательных эквивалентов, позволяющая один или несколько лет учиться в одной стране а затем в другой. Учебный год часто делится на 3 семестра по 8 недель. В буклете "Обучение математике в Оксфорде" [46, стр. 2] читаем: *Преимущественная часть обучения математике в Оксфорде, особенно первые два года программы для получения степени, производится путем наставничества. Это беседы, длящиеся один час, между наставником, обычно одним из старших сотрудников колледжа, и небольшой группой студентов (как правило из двух человек). Такое обучение является весьма гибким и персонофицированным, давая наставнику время, чтобы учесть специфические трудности группы, а студентам возможность задавать вопросы. ... Наставники колледжа внимательно следят за прогрессом обучения своих студентов, помогают им в обучении, обсуждают возможности выбора предметов и рекомендуют учебники и способны ответить на вопросы об Оксфорде в целом.*

Материальное обеспечение самостоятельной работы студентов весьма высокое. Вот Школа компьютерных наук в Харроу[22] (Harrow School of Computer Science – HSCS), другого не столь известного британского университета – University of Westminster в Лондоне, в которой учится по-

[20] http://en.wikipedia.org/wiki/Credit%5F%28education%29.

[21] В Техасском A&M университете при превышении числа кредитов со студента взимается плата за обучение, как с иностранца, которая также как правило в 2 раза выше, см http://admissions.tamu.edu/Registrar/General/ExcessCredHr.aspx.

[22] http://www.wmin.ac.uk/hscs

рядка 2500 студентов. Помимо Центра учебных ресурсов, включающего библиотеку и более 200 PC и рабочих станций Macintosh, студенты могут пользоваться 20-ю (!) компьютерными лабораториями с 600 рабочими станциями Windows/Unix, из которых 5 специализируются на проблемах развития сетей. Кроме того имеется полностью оборудованная современная мультимедийная лаборатория с 45 компьютерами Silicon Graphics , позволяющими, в частности, проводить видео конференции посредством национальной Super-Janet сети[23]. Такая насыщенность первоклассным оборудованием без сомнения покрывает все потребности самостоятельной работы студентов и способна обеспечить ее высокий уровень. В Математическом институте Оксфордского университета в некоторые семестры выполняется весьма значительный объем самостоятельной работы. Обеспечение компьютерами, доступными для студентов 24 часа в сутки, не уступает HSCS. Более того, в каждой комнате общежития можно подключить свой персональный компьютер к университетской сети, которая обеспечивает каждого студента электронной почтой, персональной web-страницей, виртуальной обучающей системой Оксфордского университета и централизованной системой Линукс.

Приведенные выше краткие сведения об организации учебного процесса за рубежом говорят о том, что в вопросе о повышении доли самостоятельной работы студентов основное – не формальное снижение числа часов аудиторных занятий, а обеспечение такой работы всеми необходимыми элементами, гарантирующими ее высокий уровень, отвечающий высоким современным стандартам. После этого снижение аудиторных часов произойдет само собой. Кроме того, вводя элементы унификации, европейские страны не спешат отказываться от сложившихся хороших национальных традиций в высшей школе.

6 Немного о супервычислениях в Россиии

В ноябре 1999 г. Исполнительным Комитетом Союза Беларуси и России была утверждена программа *СКИФ, Разработка и освоение в серийном производстве семейства моделей высокопроизводительных вычислительных систем с параллельной архитектурой (суперкомпьютеров) и создание прикладных программно-аппаратных комплексов на их основе.* Программа была рассчитана на 2000-2003 г.г. и затем продлена на один год. Она привела к созданию суперкомпьютера Skif-K-1000 с пиковой производительностью 2.5TF, установленного в 2003 г. в Институте информатики АН Беларуси в Минске. В рейтинге TOP 500 он занимал 98 место и был наиболее быстродействующей вычислительной системой в восточной Европе. Участники нового проекта *СКИФ Университеты*, среди которых Московский и Санкт-Петербургский государственные университеты и Объединенный институт проблем информатики НАН Беларуси, смогут подключить свои вычислительные системы к распределенной сети с аналогичным названием, развиваемой в рамках компьютерной программы *СКИФ-ГРИД*. Они смогут также получить доступ к ресурсам вузов-партнеров, которые установят отечественные суперкомпьютеры. Согласно рейтингу лета 2007 г. Россия имела 10 систем производительностью 1TF и выше (из них только 2 отечественного производства), один в Сбербанке и 9 в университетах и исследовательских институтах: Москвы – 6, Томска – 1, Нижнего Новгорода – 1 и С.–Петербурга – 1 [47]. В Москве наиболее мощная система установлена в 2005 г. в Межведомственном суперкомпьютерном центре АН РАН и занимала 56-е место среди TOP 500 2005 г., однако в рейтинге TOP 500 июня 2007 г. она уже была 187-ой. В 2007 г. в Межрегиональном вычислительном центре при Томском Государственном Университете вве-

[23]Это не считая других компьютеров сотрудников, например, ноутбуков, вручаемых каждому сотруднику при поступлении на работу и не подлежащих возврату

дена система с 1128 процессорами производительностью 9TF[24], которая в рейтинге TOP 500 июня 2007 г. идет под номером 105, пропуская вперед себя суперкомпьютеры 14 стран, включающих Южную Корею, Малазию и Новую Зеландию. Заметим, что суперкомпьютер BlueGene/L-eServer США имеет 131072 процессора и быстродействие 280TF.

Вот числа суперкомпьютеров нескольких стран, представленных в TOP 500 июня 2005 г.:

США – 277, Объединенное королевство – 32, Германия – 40, Япония – 23,..., Россия – 3.

В июне 2007 г. имеем:

США – 281, Объединенное королевство – 42, Германия – 24, Япония – 23,..., Россия – 5.

Среди TOP 10 2005 г. США – 5, Япония – 2, Испания, Нидерланды и Швейцария по 1-му, а в 2007 – США – 8, Испания– 1, Германия –1.

Конечно, сопоставление только по числу суперкомпьютеров не дает полной картины. Например, Испания, имея 6 суперкомпьютеров, сравнима по их числу с Россией, но суммарная мощность ее суперкомпьютеров составляет примерно 98TF, в то время как российских – 31TF. Существенно различен уровень матобеспечения и его назначение. В Объединенном королевстве 9 суперкомпьютеров обслуживают производство продуктов питания (Food Industry), в Китае 6 из 13 обслуживают игровую компанию (Gaming Company), все немецкие суперкомпьютеры установлены в университетах, известных крупных научно-исследовательских институтах и крупных автомобильных и промышленных компаниях и компаниях ИТ.

Сейчас обнародован список TOP 500 ноября 2007 г., согласно которому Россия имеет 7 суперкомпьютеров (США - 283), составляющих 1.4% мировой суперкомпьютерной мощи (США - 56.6%).

Таким образом, вряд ли пока можно сказать, что после старта с некоторого рубежа в создании суперкомпьютеров мы стали приближаться к лидерам. Важной характеристикой суперкомпьютеров является единичная мощность, и в этом показателе мы отодвинулись назад, хотя ситуация может измениться после установки новых систем. Одна из причин, несомненно не главная, в том, что разрабатываемые системы только условно можно назвать нашими, многие их *жесткие* и *мягкие* компоненты, как и информация о них, приходят из-за рубежа, т.е. с запозданием и в обработанном виде, и это затрудняет приближение к передовому краю. Основная причина отсутствия суперкомпьютерного бума в России видится в другом: нашим обществом, в том числе и научным, еще недостаточно понята их решающая роль в будущем и они недостаточно востребованы, в частности, нашей существующей, оплачиваемой по бедной схеме наукой, которой пока отказано в возможности работать даже на среднесрочную перспективу. Они не востребованы нашим рынком, в котором быстрое обогащение возможно без наукоемких технологий за счет гигантских природных ресурсов. Не секрет, что иногда установленные достаточно высокопроизводительные кластеры не используются на полную мощность и по существу простаивают. В сложившейся в России ситуации с супервычислениями большее отставание, чем по суммарной мощности суперкомпьютеров, уже достаточно ясно обозначено в другом: в недостатке необходимых кадров и условий труда, позволяющих выполнять масштабные вычислительные проекты. Наличная, небольшая в сравнении с другими странами, суперкомпьютерная мощь тем не менее достаточна для анализа путем численного симулирования серьезных проблем в естественных и социальных науках, экономике, медицине, обеспечении ядерной безопасности и др. Производительность каждого из 5-ти наших

[24]Как и далее, приведена цифра максимальной производительности $\mathbf{R}_{\max}$, достигнутой при использовании пакета LINPACK для решения заполненных систем алгебраических уравнений, см. подробнее http://top500.org/list/2007/06/200.

суперкомпьютеров превосходит NPACI Blue Horizon со стандартной производительностью 1.7TF, на котором по проекту 4.2 производились симуляции землетрясений с 150 млн и более степеней свободы для сложного геологического района Южной Калифорнии. Проект 5.2 по этанолу выполняется на системе производительностью порядка нескольких TF и включающей SGI Altix и Linux cluster. Можно привести примеры и более масштабных проектов на системах такой производительности. Однако, – за исключением немногочисленной группы известных активно работающих в этой области организаций, – информация об отечественных вычислительных проектах сопоставимого масштаба практически отсутствует, особенно если сравнивать с обильной информацией по программам ASC и SciDAC.

У нас осталось слишком мало специалистов, не только высококлассных, но и просто хороших во многих ветвях вычислительной науки, способных воспринимать и реализовывать достижения мирового уровня. Сильно поредели ряды вычислительных математиков[25] и особенно лидеров в области научных вычислений, на бедность которыми мы не могли пожаловаться всего лишь несколько десятков лет назад. Практически нет вычислителей-программистов, способных писать большие разветвленные со значительным весом логических операций наукоемкие программы для научных вычислений в области естественных наук. До некоторой степени поправить дело может специальное обучение программистов-вычислителей высокого уровня. Но надо иметь в виду, что такие программисты у нас да и за рубежом раньше не готовились специально. Чаще они появлялись из специалистов по вычислительной математике, механике, физике, инженеров, заинтересовавшихся решением каких либо классов научных или прикладных задач и самостоятельно освоивших дополнительные области знаний. Выше уже упоминалось имя Аргириса, создателя пакета ASKA. Характерен также пример Дж. Свенсона (John Swanson), создателя ANSYS'а, который в 1963 г. вел прочностные расчеты систем ядерных реакторов в Астроядерных лабораториях Вестингхауз (Westinghouse Astronuclear Labs) в Питтсбурге[26]. Там же он начал объединение программ в единый комплекс, но затем уволился, поскольку в компании Вестингхауз не разделяли его идеи. Корпорация Swanson Analysis Systems, была зарегистрирована в середине 1970 г. в его собственном доме. Первая версия ANSYS'а была запрограммирована к концу 1970 г. и вскоре Вестингхауз стал ее первым арендатором. Сходные в рассматриваемом аспекте биографии типичны, в том числе для России, и они говорят в пользу многодисциплинарной подготовки специалистов для разработки комплексов программ в области численного решения уравнений в частных производных и других областях. Важность именно такой подготовки особенно подчеркивается в [2].

Министерство энергии США запустило программу стипендий (DOE High-Performance Computer Science Fellowships) для студентов старших курсов, специализирующихся в области супервычислений, проводит ежегодные конференции стипендиатов этой и других ориентированных на супервычисления программ, выпускает информационный бюллетень. Директор программы ASC Д.

[25]Такова ситуация и во многих других областях и не только науки. Например, одной из важных проблем в сфере возобновляемой электроэнергетики, по словам аналитика ИК *Велес Капитал* Олега Зотикова, является отсутствие высококлассных специалистов. "Из-за того что данный вид электроэнергетики в России до последнего времени практически не развивался, произошел отток кадров в другие страны, а новых кадров практически не готовили", - говорит эксперт. Однако ГидроОГК в данный момент "занимается активным поиском и привлечением специалистов в этой сфере электроэнергетики, тем более что потенциал у России в этом виде электроэнергетики очень высок." См. Татьяна Романова. *ГидроОГК может стать мировым лидером в сфере возобновляемой энергетики.* Quote.ru 19.10.2007, `http://www.quote.ru/stocks/news.shtml?2007/10/19/31679130`.

О сокращении кадрового потенциала в науке недавно говорил резидент РАН академик Ю.С. Осипов на собрании Совета по науке, технологиям и образованию при президенте РФ [49].

[26]См. http://www.fea-optimization.com/ans_macro/ANS-history.txt.

Кузнецов, как сообщается в одном из них [48], на конференции 2004 г. "рекомендовал, *чтобы студенты компьютерных наук изучали как создавать модели, как аппроксимировать эти модели, как их дискретизировать посредством инструментов численного анализа и затем интегрировать индивидуальные модели в одну программу, которая могла бы симулировать сложность всего явления. Однако создание модели – только первый шаг к развитию эффективной симуляции. Вы должны постоянно спрашивать себя: Откуда я знаю, что это верно? Модели должны проверяться а симуляции сопоставляться с реальностью..."*

В этой статье в соответствии с ее основной целевой направленностью не нашли сколь либо достаточного отражения значительный потенциал и достижения в вычислительной науке наиболее продвинутых в этой области отечественных научных коллективов. Они, на наш взгляд, должны были бы играть бо́льшую роль в формировании федеральных программ интенсификации развития вычислительной науки, отвечающих вызовам времени, и в определении их приоритетов и главных направлений. В усилении амбициозности этих программ, обеспечения их нацеленности на завоевание рынка высокопроизводительных вычислительных технологий. В [2, стр. 24-26] вопрос о тесном взаимодействии правительства с наукой в руководстве этой областью ставится остро и конкретно. Речь, в частности, идет о привлечении в правительство наиболее талантливых (top talent) специалистов вычислительной науки. Отмечается недостаток высоко квалифицированных, обладающих разносторонними знаниями талантливых лидеров, способных руководить вычислительными проектами большого масштаба[27]. При высокой населенности этой области науки в США, по оценке PITAC в стране найдется не более 100 руководителей в вычислительной науке, желающих и способных играть национальную роль в правительстве, высшем образовании и науке и промышленности. PITAC находит это число чрезвычайно малым и сигнализирующим о будущих трудностях. Интересно, что среди причин, мешающих привлечению специалистов вычислительной науки в правительственные органы на постоянную работу, указывается *сопутствующее переходу в разряд правительственных чиновников снижение заработной платы*.

Вычислительные проекты терафлопного уровня требуют, чтобы каждый участник имел адекватное рабочее место. Они не выполняются в домашней обстановке, особенно в квартирах, которые многие специалисты унаследовали с советских времен, или в пользовательских центрах типа тех, которые сейчас создаются в ряде ВУЗов для работы с коммерческими пакетами программ. На западе не только участники подобных проектов, но и практически каждый преподаватель со степенью доктора как правило имеют свои офисы с терминалами в виде, напр., Work Station, подсоединенным к суперкомпьютеру, и кроме того PC. В процессе работы приходится перерабатывать весьма значительные объемы информации, в том числе печатной, поэтому офисы имеют достаточно места и удобного оборудования для ее хранения. Сюда можно было бы добавить быстродействующую множительную и др. офисную технику. В наших ВУЗах в силу понятных причин пока даже не ставится задача приблизиться к такому положению.

Программа терафлопного уровня обычно создается командой специалистов нескольких университетов и других научных и производственных институтов, имеющих разные специальности и насчитывающей несколько десятков человек.[28] Например, в команду проекта 5.2 входит два

[27] Кроме всего прочего, супервычислительные проекты дороги, особенно в части оборудования. Например, многие проекты NSF (Национального научного фонда), связанные с оборудованием, – в частности, Программа создания расширяемой системы тера-уровня, – включают строительные бюджеты, превышающие $50 млн [2, стр. 25].

[28] В интервью журналу SciDAC Review В. Рейса, одного и ведущих руководителей программы ASCI и других, особо подчеркнута решающая роль в выполнении проектов совместной работы трех групп специалистов: специалистов компьютерных наук, прикладных математиков и специалистов предметных наук (computer scientists, applied mathematicians, and discipline scientists) [3].

университета, вычислительный центр, Национальная лаборатория обновляемой энергии, выполняющая, в частности, координирующую роль, и исследовательский институт. Это подразумевает возможность быстрого обмена информацией (взаимных командировок, общения по телефону на семинарах и конференциях и т.д.) и работы в единой сети. Если вы зайдете на сайт *Факультета прикладной математики и статистики* средней величины Мерилэндского университета,[29] то увидите, что на его семинаре в осеннем семестре 2007 г. больше половины докладчиков были гостями из других университетов, в частности, университетов других стран. Это стоит денег, т.к. помимо оплаты проезда и проживания, каждому приглашенному докладчику в конце прошлого века выплачивалось $200.

Эта статья была написана летом 2007 и доложена на Седьмом Всероссийском семинаре "Сеточные методы для краевых задач и приложения", проходившем 21-24 сентября в Казани. Уже после этого состоялось заседание Совета по науке, технологиям и образованию с участием президента В.В. Путина [49], на котором прозвучали важные слова академика Е.П. Велихова о важной роли вычислительной науки: "Сегодня стоит вопрос, конечно, для всех стран, особенно высокоразвитых, - это лидерство на рынках высокотехнологической продукции. Лидерство в значительной степени сегодня, так вообще иногда и раньше было в истории, определяется использованием математики, а сегодня - высокопроизводительных вычислений. Это ключ к лидерству. Соединенные Штаты поставили эту программу очень остро - высокопроизводительные вычисления, суперЭВМ". Он также сказал, что к весне 2008 года МГУ будет иметь суперкомпьютер производительностью в 100TF. На заседании было высказано много общих положений и конкретных предложений, которые вселяют надежду, что отечественная наука вступает в новое время[30]. Президент РАН академик Ю.С. Осипов говорил, в частности, о программе развития фундаментальной науки, выполнение которой "позволит обеспечить сохранение и поддержку ведущих научных школ, а также воспроизводство и повышение качества кадрового потенциала, включая подготовку кадров высшей квалификации, если можно так сказать, развитие человеческого капитала как основного конкурентного преимущества российской экономики."

Авторы считают своим приятным долгом выразить благодарность профессору Санкт-Петербургского государственного университета С.М. Ермакову и профессору Казанского государственного университета Р.З. Даутову за прочтение рукописи статьи, полезные замечания и дискуссии.

7 Приложение

Основное содержание приглашения к участию в конкурсе [32] – раздел "Потенциальные направления работы", содержащий перечисление областей, на которые нацелена программа ASCI в стратегических исследованиях второго уровня ASAP. Он приведен ниже полностью.

ПОТЕНЦИАЛЬНЫЕ НАПРАВЛЕНИЯ ДЛЯ РАБОТЫ

Вычислительная наука и вычислительная математика

Ожидаемое общее финансирование этой подпрограммы – $3M - $5M в год. Ожидаемый уровень финансирования одного проекта – $200тыс. - $400тыс. в год. Ограниченное число (1-2) грантов с финансированием

[29] В 2007 г. в нем училось 12041 студент и работало 636 с полной и 683 с неполной нагрузкой преподавателей.

[30] Заметим все же, что на заседании не было ни одного выступления, посвященного непосредственно проблемам развития вычислительной науки.

в \$700тыс. - \$1000тыс. в год может быть предоставлено для более широких многопроблемных исследований в зависимости от сложности сотрудничества и близости к проблемам ASCI.

Следующие широкие категории характеризуют области, на которые нацелена программа *ASAP-Стратегические исследования, Уровень 2* .

1. Обработка данных, визуализация и их интеграция с целью получения решений для управления, сбора и доставки научных данных тера-масштаба на панели управления проектировщиков, аналистов и разработчиков программ. Примеры тем, представляющих интерес, включают:

- ○ Научная обработка данных тера-масштаба для интеллектуальных выборок и сжатия:
  - открытие знаний и поиск данных в научных базах данных,
  - инструменты локализации в метаданных, просмотр и сравнение,
- ○ Визуализация многомерных данных тера-уровня:
  - усовершенствованные интерфейсы для трехмерных взаимодействий пользователь-компьютер,
  - визуализация в многомерных пространствах (5-10 переменных),
  - параллельная визуализация больших множеств неструктурированных данных,
  - визуализация сечений ленточных сетей небольшой ширины,
  - структуры визуализации для разделяемых научных программ и модулей.

2. Шкалируемые параллельные вычислительные алгоритмы для терафлопных систем (тысячи процессоров). Темы из вычислительной математики, матобеспечение и алгоритмы вычислительной физики/инженерии (например, радиация, диффузия/перенос и механика), представляющие интерес для ASCI включают:

- ○ Параллельные алгоритмы для решения разреженных систем линейных и нелинейных уравнений, возникающих на структурированных и неструктурированных сетках, так же как для бессеточных методов, такие как
  - геометрические и алгебраические многосеточные методы,
  - всплески (вэйвлеты),
  - методы декомпозиции области,
  - безматричные методы,
  - методы вычисления собственных значений,
  - параллельная численная оптимизация,
  - неточные методы Ньютона,
- ○ Методы вычисления неопределенности.
- ○ Генерация и декомпозиция сеток и инструменты динамическоой балансировки нагрузки:
  - параллельная генерация сеток для сложных геометрий,
  - алгоритмы декомпозиции блочно структурированных неструктурированных сеток,
  - техники адаптивной балансировки нагрузки приложений.

3. Параллельные шкалируемые программные инструменты для эффективного использования массово параллельных вычислительных систем тера-уровня (например, 100TF к 2004г.). Категории, представляющие интерес, включают:

- ○ Инструменты, компиляторы и технологии для оптимизации использования глубоких иерархий памяти на кластерных SMP[31] системах.
- ○ Инструменты для выполнения, профилирования и анализа на микро и макро уровнях.
- ○ Шкалируемая отладочная технология, интегрированная с другими технологиями
- ○ Инструменты для управления и оптимизации в процессе вычислений выполнения приложений в параллельных режимах.

4. Инструменты программного обеспечения для достижения тера-уровня быстродействия (например. 100TF к 2004г.) посредством дистанционных вычислений в форме неоднородных распределенных систем с тысячами потребительских SMP (с 8-256 процессорами в узле) и высокоскоростных потребительских взаимосвязях (SAN, LAN, WAN). Темы, представляющие интерес, включают:

- ○ Алгоритмы обнаружения сбоев, их устранения и локализации в параллельных неоднородных кластрированных вычислительных систем.
- ○ Алгоритмы глубоких иерархий памяти для таких распределенных компьютерных систем.

[31] Компьютер с симметричной многопроцессорной архитектурой, SMP – от Symmetric Multiprocessing.

◦ Модели компьютерной симуляции для определения общей эффективности систем (от архитектуры системы до приложений).

◦ Техники управления ресурсами (напр., CPU, память, сеть, ввод/вывод).

Приложения в вычислительной науке

Ожидаемое общее финансирование этой подпрограммы – $2 млн. в год. Ожидаемый уровень финансирования в год отдельного проекта, фокусированного на одной проблеме, имеющей отношение к пролграмме ASCI, составит в среднем $200 тыс.

5. Энергетические материалы: для программы ASCI представляет интерес способность предсказания свойств энергетических материалов с целью поддержания компьютерной оценки безопасности и надежности систем, содержащих взрывчатые и другие энергетические материалы в нормальных и ненормальных условиях.

6. Вычислительные физика материалов сжатого вещества: Особо важны прогнозирование на основе первичных принципов термических свойств материалов при высоких давлениях и эффектов старения и изменений материалов в процессе производства на поведение при хранении.

7. Вычислительная физика и вычислительная механика. Области интереса для программы ASCI: вычислительная гидродинамика, моделирование турбулентности, моделирование переноса и вычислительная механика (в частности, механика повреждений и механика разрушения).

Список литературы

[1] А.А. Самарский. *Прямой расчет мощности взрыва.* Сборник: Международный симпозиум `Наука и общество - история совместного атомного проекта (40-е-50-е годы)`, т. I. Дубна, 14–15 мая 1996. Издание ИПМ АН СССР, 1996: 1–9.

[2] *Computational science ensuring America's competitivness.* Report to the President of the President's information technology advisory committee, June 2005, http://www.nitrd.gov.pitac.

[3] V. Reis. *Advanced Computing: Scientific, Socio-Political & Global Solutions.* SciDAC Review, issue 2, 2006:8–12. http://www.scidacreview.org/0602/html/interview.html.

[4] *What is CAS?* http://homepage2.nifty.com/cas/what.htm#4.

[5] *Predicting plasma perfomance. Fusion simulation advance spheromack research.* In: `Energy research scientific computing center 2004 annual report`, 2004: 29-31. http://www.nersc.gov/news/annual_reports/annrep04/annrep04.pdf.

[6] T. Sinitsyna. *ITER project to solve global energy problem.* http://www.rian.ru

[7] H.D. Simon and T.C. Kramer. *The year in perspective.* In: `Energy research scientific computing center 2005 annual report`, 2005: 2-4. http://www.nersc.gov/news/annual_reports/annrep05/annrep05.pdf.

[8] Schwarz HA. *Uber einige Abbildungseigenschaften.* J. Reine Angew. Numer. Math., 1869, **70**:105–120.

[9] Соболев СЛ. *Алгоритм Шварца в теории упругости.* Доклады АН СССР, 1936, **4**(6):243–246.

[10] Matsokin AM and Nepomnyaschikh SV. *A Schwarz alternating method in a subspace.* Soviet Mathematics, 1985, **29**(10):78–84.

[11] Korneev V and Langer U. *Domain Decomposition Methods and Preconditioning.* In: `Encyclopedia of Computational Mechanics`, V.1. E. Stein, R. de Borst and Th.J.R. Hudges eds. 2004 John Wiley & Sons, Ltd., 617–647.

[12] Toselli A and Widlund O. *Domain Decomposition Methods – Algorithms and Theory.* Springer, 2005.

[13] Федоренко РП. *Релаксационный метод решения разностных эллиптических уравнений.* Журн. вычисл. матемю и матем. физики, 1964, **1**(5): 922-972.

[14] Бахвалов НС. *О сходимости релаксационного метода пр естественных ограничениях на эллиптический оператор. Журн. вычисл.* матемю. и матем. физики, 1966, **6**(5):101-135.

[15] Hackbusch, W. *Multigrid Methods and Applications*, Springer–Verlag, Berlin, 1985.

[16] Шайдуров В.В. *Многосеточные методы конечных элементов.* Изд. "Наука", 1989.

[17] Shaidurov, VV. *Multigrid Methods for Finite Elements*, Kluwer Academic Publishers, 1995.

[18] Bramble JH, Pasciak JE and Xu J. Parallel multilevel preconditioners. *Math. Comp.* 1990; **55**:1–22.

[19] Ainsworth M and Oden JT. *A posteriori estimation in finite element analysis.* John Wiley & Sons, Inc., New York, 2000: xx+240.

[20] Neittaanmäki P and Repin SI. *Reliable methods for computer simulation Error control and a posteriori estimates.* Elsevier, New York, 2004: 305.

[21] Anufriev I.E., Korneev V.G., Kostylev V.S. *Exactly equilibrated fields, can they be efficiently used for a posteriori error estimation?* Ученые записки Казанского государственного университета, Серия физико-математические науки, 2006, т. **148**, кн. 4. Казанский государственный университет, Казань: 94-143.

[22] *Wavelets – All Books.* http://www.non.com/books/Wavelets_cc.html.

[23] Karniadakis GE Sherwin SJ. *Spectral/hp element methods for CFD.* Oxford University Press, 1999: 390.

[24] Ch. Schwab, *p- and hp-Finite element Methods. Theory and Applicatons in Solid and Fluid Mechanics,* Clarendon Press, Oxford, 1998.

[25] *Korneev V, Langer U and Xanthis L. Fast adaptive domain decomposition algorithms for hp-discretizations of 2-d and 3-d elliptic equations: recent advances.* Hermis-$\mu\pi$: An International Journal of Computer Mathematics and its Applications. 2003, **4**: 27–44.

[26] *Error estimation and adaptive discretization methods in computational fluid dynamics*, T.J. Barth & H. Deconinck eds. Springer, 2003.

[27] Venner C.H. and Lubrecht A.A. *Multilevel methods in lubrication.* Elsevier Science, 2000.

[28] *SciDAC-2 - the next fase of discovery.* SciDAC Review, issue 3, 2007:16-35.
http://www.scidacreview.org/0702/index.html.

[29] Colella Ph. APDEC: *Algorithms and software for discovery.* SciDAC Review, issue 4, 2007:22–33.
http://www.scidacreview.org/0702/index.html.

[30] Michel G. McCoy. *A Summary Report to the Director's Review Committee*, `FY03 LLNL ASCI DRC Report.` Lawrence Livermore National Laboratory, 2003. http://www.llnl.gov/tid/lof/documents/pdf/243957.pdf.

[31] *Academic Strategic Alliances Program.* http://www.sandia.gov/NNSA/ASC/pdfs/3642-Krell

[32] *ASCI Academic Strategic Alliances Program (ASAP). Request for Proposal ASAP-02. Level 2 - Strategic Investigations.* 1997. http://www.llnl.gov/asci-alliances/asap/L2-RPF.html.

[33] G. Moore. *Cramming More Components Onto Integrated Circuits.* Electronics Magazine, 1965, **38**(8).

[34] G. Fly, Q. Xin, M. Faerman. G. Kremenek, B. Shkoler, S. Day, K. Olsen, B. Minster and R. Moore. *Data handling and of a high resolution ground motion.*
http://epicenter.usc.edu/cmeportal/docs/RDM_Description.pdf.

[35] *The SCEC community modelling environment (SCEC/CME): An information infrastructure for system-level earthquake research (EAR–0122464). Fourth annual research.*
http://www.scec.org/aboutscec/documents/SCEC_CME_Year4Status.pdf.

[36] J.W. Bell. *Good prospects.* http://access.ncsa.uiuc.edu/Stories/oil.

[37] *Discovery by VO demo.* http://www.us-vo.org/news/story.cfm?ID=9.

[38] Hullquist J.O. *A procedure for the solution of finite deformation contact-impact problems by the finite element method.* University of California, Lawrence Livermore National Laboratory, Rept UCRL-52066, 1976.

[39] Г.И. Марчук. *Ученый и гражданин. К 80-летию М.В. Келдыша.* В сб.: Келдыш М.В. Творческий портрет по воспоминаниям современников. М.:Наука, 2002. С. 29-33

[40] *А.Фурсенко предложил бизнесу сотрудничество в развитии системы образования.* http://www.asi.org.ru/sob2/sob.nsf/0/C3256E1D0042CCABC325703D004759B0.

[41] *University of Wesrminster Factcard 2006–2007.* http://www.wmin.ac.uk/pdf/Factcard%200607.pdf

[42] G.W. Recktenwald. *Numerical Methods with Mathlab. Implementation and applications.* Prentice Hall, New Jersey, 2000: xx+786.

[43] А.А. Самарский. *Введение в численные методы.* Изд–во "Лань", Московский государственный университет, 2005: 288.

[44] *Credit hour.* http://www.dbu.edu/academics/policies/credit_hour.asp.

[45] *Semester credit hours guidelines.* https://www.purdue.edu/registrar/Forms/general/Credit_Hour_Guidelines.pdf.

[46] *Studying mathematics at Oxford.* http://www.maths.ox.ac.uk.

[47] *Суперкомпьютеры top 50. Текущий рейтинг, 7-ая редакция от 25.09.2007.* http://www.supercomputers.ru/?page=rating.

[48] D. Kuznetsov. *Scientific computing at the largest scale.* http://www.krellinst.org/DOE_HPCS/hardwired/fall_04/hardwired_fall04.pdf

[49] Стенографический отчет о заседании Совета по науке, технологиям и образованию. http://kremlin.ru/text/appears/2007/11/152987.shtml#

Сведения об авторах

Васильев Юрий Сергеевич, академик РАН, профессор, докт. т. наук, Президент Санкт-Петербургского гос. политехнического университета,

`Vasiliev@stu.neva.ru`, (812) 5526240.

Корнеев Вадим Глебович, профессор, докт. ф.-м. наук, зав. Лабораторией новых вычислительнрых технологий Санкт-Петербургского гос. политехнического университета,

`Vadim.Korneev@pobox.spbu.ru`, (812) 5353029.