

## МАТЕМАТИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ЯК ГРІД-СЕРВІС

Згуровський М.З., Петренко А.І., Ладогубець В.В., НТУУ «КПІ»

Розглянуто архітектуру і можливості міждисциплінарного програмного комплексу моделювання складних об'єктів і процесів різної фізичної природи (МПКМ) для грід-застосувань, що використовує сервісно-орієнтований підхід та базується на окремих незалежних функціональних одиницях – грід-сервісах.

### Вступ

В НТУУ «КПІ» виконується проект з розробки **міждисциплінарного програмного комплексу моделювання складних об'єктів і процесів різної фізичної природи (МПКМ)**, у рамках якого створюється система для проведення математичного експерименту на грід-ресурсах, що працює через звичайний веб-браузер. Причиною виконання проекту є бажання задовольнити потреби вітчизняних користувачів українського грід у наукових та науково-прикладних дослідженнях, підтримуючи мережне колективне дослідження складних об'єктів (процесів) розподіленою групою розробників.

Грід-обчислення як технологія експлуатації віддалених обчислювальних ресурсів, наданих у спільне використання учасникам певних об'єднань користувачів (віртуальних організацій), вже давно успішно застосовуються для рішення різноманітних задач науки та інженерії високої обчислювальної складності[1]. Однак навіть сьогодні більшості користувачів (зокрема й українського грід) доступна лише базова функціональність грід-середовища, що **дозволяє віддалено запускати поодинокі обчислювальні задачі**, контролювати стан їх виконання та вивантажувати результати обчислень. Для організації виконання складних сценаріїв обчислень, що **вимагають скоординованого виконання у грід-системі десятків-сотень задач**, такі можливості є, як правило, недостатніми. Тому стає актуальною задача розробки і подальшого розвитку таких прикладних грід-середовищ, які би використовували принципи сервісно-орієнтованої архітектури (SOA [2]), зокрема, композицію грід-сервісів для організації власних гетерогенних обчислювальних сценаріїв. Під обчислювальним сценарієм будемо далі розуміти попередньо визначену послідовність виконання обчислень, спрямовану на отримання певного визначеного результату.

### 2. Архітектура МПКМ

Суть сервісно-орієнтованої архітектури полягає в тому, що весь обчислювальний процес розбивається на набір незалежних взаємодіючих грід-сервісів (певних програмних компонентів зі стандартним інтерфейсом), що можуть бути виконанні на різних кластерах [3]. Доступ до грід-сервісів (керування ними) здійснюється через веб-сервіси мережі із застосуванням стандартних протоколів (рис.1).



Рис. 1. Багатошарова архітектура МПКМ

Під обчислювальним потоком робіт будемо розуміти такий обчислювальний сценарій, який можна представити у вигляді  $N$  відокремлених кроків обчислень  $S_i, i=1, \dots, N$ , що виконуються у певній послідовності відносно один одного [4]. Якщо кроками потоку є ґрід-задачі, такий потік будемо називати потоком ґрід-задач [5]. Було запропоновано описувати потік робіт на мові «бізнес-процесів» WS-BPEL-2, в результаті потік робіт представляється одним «композитним» веб-сервісом.

Архітектуру запропонованої системи виконання потоків задач складають (рис.1):

- **сервер порталу, або** платформи-незалежна клієнтська частина з інтерфейсом доступу до систем постановки, контролю виконання та відображення результатів завдання, в якості якого використовується звичайний браузер;
- **сервер системи виконання завдання**, що є незалежною обчислювальною ґрід-системою, яка не тільки виконує роль обчислювальних потужностей для розрахунків, але й забезпечує пошук необхідних ресурсів для вирішення задачі, організацію взаємодії між веб-сервісами та виступає системою масового обслуговування, що працює з клієнтськими задачами у багатозадачному режимі;
- **сервер ґрід-сервісів**, з якими взаємодіє ПЗ автоматичного виконання потоку згідно отриманого BPEL-опису.

Взаємодія компонентів серверів порталу і системи виконання завдання, складених з веб- та ґрід-сервісів, представлена на рис.2.

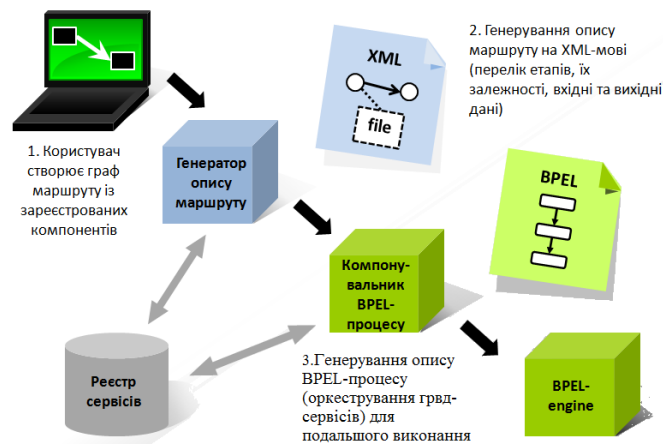


Рис.2. Взаємодія компонентів архітектури системи керування виконанням потоків робіт

Таким чином розробляемий програмний комплекс моделювання в ґрід-інфраструктурі доступний користувачеві через мережу Інтернет і надає йому можливість самому формувати і налагоджувати маршрут математичного експерименту, включаючи автоматичне формування рівнянь математичної моделі задачі, для наступного виконання на ґрід-ресурсах необхідних для нього процедур і обчислень. При цьому перелік видів обчислень, які закладені в комплекс, покриває значну частину можливих потреб в них при вирішенні науково-прикладних досліджень, наприклад, віддаленого моделювання різних за фізичною природою об'єктів (процесів) з можливістю формування макромоделей цих об'єктів, а також відображення об'єктів з математичним описом на основі методу кінцевих елементів у вигляді еквівалентних схем заміщення варійованої точності та розмірів

### 3. Можливості МПКМ

Міждисциплінарний комплекс оптимального математичного моделювання пропонує наступне:

- Автоматичне формування математичної моделі об'єкта (процесу) за описом його структури і властивостей складових у вигляді алгебро-диференціальних чи диференціальних рівнянь, приведених до формату, з яким можуть працювати інші підсистеми комплексу.
- Зменшення розмірності сформованої математичної моделі об'єкта (процесу) шляхом перетворення структури об'єкта (трикутник - зірка) і отримання макромоделі об'єкта.

## Міжнародна конференція «Кластерні обчислення»

- Статичний аналіз об'єкту (процесу) на базі автоматично сформованої його моделі з використанням методів Ньютона- Рафсона, продовження рішення з змінним параметром, пошуку кривої рішення та інш.
- Застосування метода діагональної модифікації при вирішенні систем супутніх лінійних рівнянь, який запобігає необхідності переупорядкування рівнянь у випадках нульових пілотних елементів матриці і дозволяє оброблювати погано обумовлені задачі.
- Аналіз частотних характеристик об'єкту (процесу) на базі автоматично сформованої його моделі шляхом вирішення лінійних систем рівнянь з комплексними коефіцієнтами і автоматичним визначенням відповідних вихідних параметрів ( смуги пропускання, резонансних частоти і значення тощо).
- Аналіз динамічних режимів об'єкта (процесу) в часовому просторі на базі автоматично сформованої його моделі шляхом використання неявних методів змінного порядку ( 1-6) і змінного кроку, а також автоматичного визначення відповідних проектних параметрів ( час затримки, час зростання переднього фронту, амплітуда імпульсу ).
- Аналіз чутливості параметрів і характеристик об'єкта (процесу) на базі автоматично сформованої його моделі в часовому чи частотному просторах від зміни параметрів внутрішніх компонентів.
- Параметричну оптимізацію параметрів і характеристик об'єкта (процесу) на базі автоматично сформованої його моделі в часовому чи частотному просторах з використанням новітнього методу змінного порядку (1-4), який вбирає в себе градієнтні методи 1-го порядку і квазі- ньютонівські методи змінної метрики 2-го порядку.
- Статистичний аналіз параметрів і характеристик об'єкта (процесу) на базі автоматично сформованої його моделі в часовому чи частотному просторах методом Монте - Карло з можливістю оптимізації коефіцієнту виходу ( гідності).
- Візуалізатор результатів обчислень в графічній формі.
- Демо з прикладами вирішення науково-прикладних задач з енергетики, електроніки, механіки, екології та інш.
- Навчальну систему з складання необхідних маршрутів математичних експериментів.

На рис.3 показані різні можливості опису об'єкту математичного дослідження, на рис.4- вибір типу математичного моделювання, на рис.5- процес налагодження параметрів обчислювальної задачі.

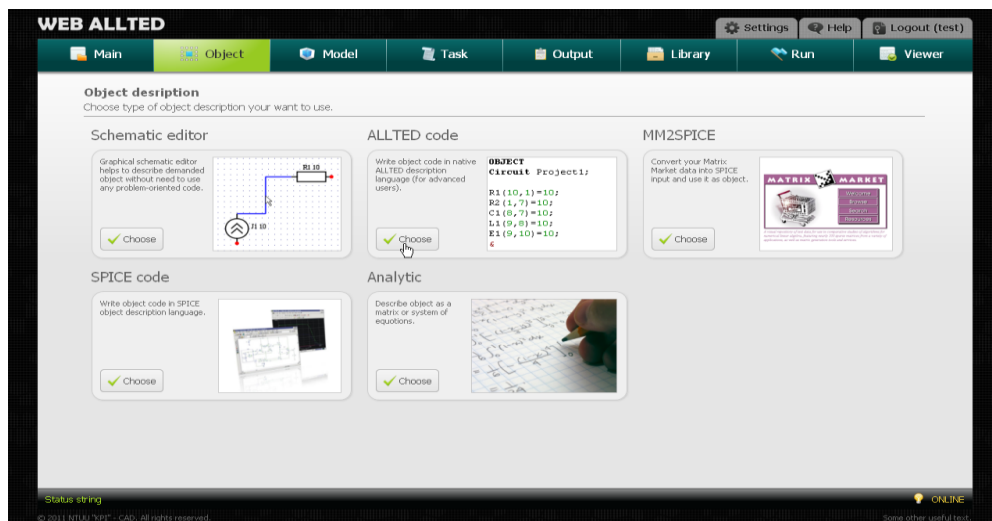


Рис.3. Вибір способу опису об'єкту дослідження

Важливо відмітити, що більшість алгоритмів, на базі яких побудований МНКМ, є оригінальними [6,7]. Серед них, перш за все, можна виділити метод діагональної модифікації для вирішення погано обумовлених лінійних задач, метод пошуку кривої рішення для надійного вирішення нелінійних задач, неявний метод змінного порядку і кроку для вирішення жорстких диференціальних нелінійних рівнянь, метод оптимізації змінного порядку, який за можливостями перевершує існуючі; метод максимізації коефіцієнту виходу та інші.

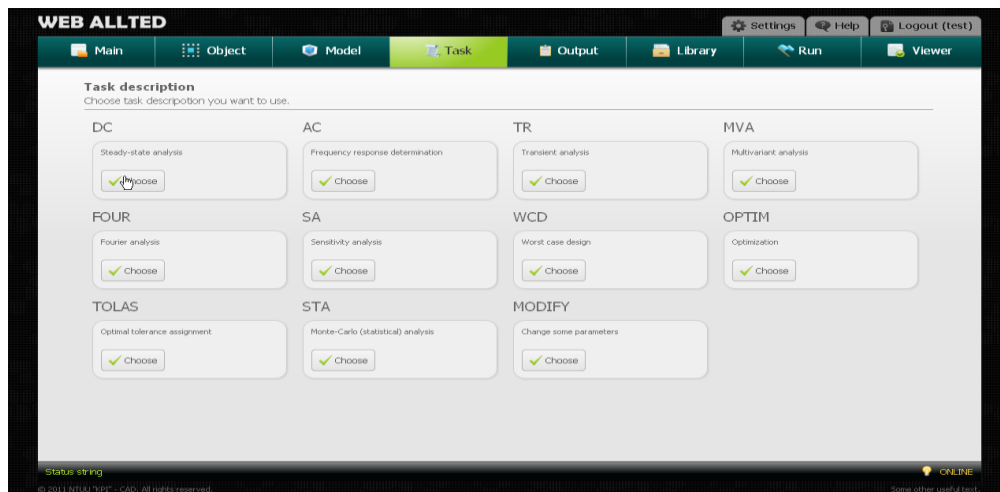


Рис.4. Вибір виду математичного експерименту

Розроблені також нові методи керування обчисленнями, які відрізняються від існуючих стратегіями вибору робочої точки та критеріями визначення ознаки відкинутого кроку, що дає змогу здійснити програмну реалізацію процедури динамічного аналізу, коли розв'язуються нелінійні алгебро-диференційні системи рівнянь, розміри яких можуть досягати 5000, з мінімальним впливом інструментальних та методичних похибок на якість та ефективність вирішення задач динамічного аналізу складних об'єктів чи процесів.

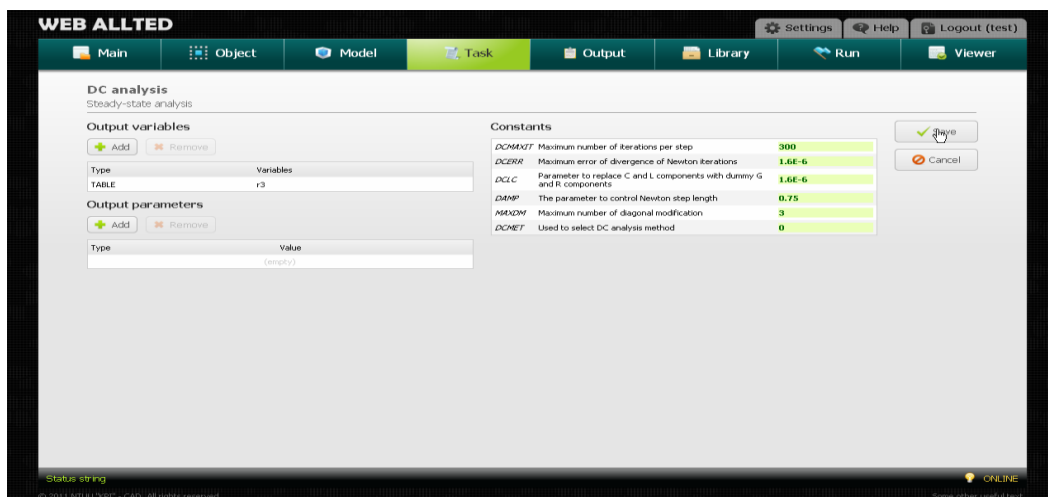


Рис.5. Налаштування параметрів обчислювальної задачі

#### 4. Висновки

В Україні успішно розробляється міждисциплінарний програмний комплекс моделювання складних об'єктів і процесів різної фізичної природи (МПКМ) з паралельною організацією обчислень і з автоматичним формуванням математичної моделі об'єкту досліджень, який встановлений на кластері НТУУ «КПІ», що є складовою національної грид-інфраструктури, при цьому доступ до нього можливий з будь-якого робочого місця національної грид-інфраструктури, оснащеного звичайним браузером. Цей комплекс задовольняє потреби вітчизняних користувачів українського Грид у наукових та науково-прикладних дослідженнях, підтримуючи мережне колективне дослідження складних об'єктів (процесів) розподіленою групою розробників, і забезпечує користувачу можливість в інтерактивному режимі обирати маршрут математичного експерименту, тобто послідовність потрібних процедур моделювання чи обчислень, для чого створено відповідний інтерфейс з мовою планування маршруту обчислень.

Сьогодні в світі немає визнаних прикладних грід- програм для підтримки математичного експерименту під час науково- прикладних досліджень [8]. Міждисциплінарному комплексу оптимального математичного моделювання в грід-середовищі, розробленому в НТУУ «КПІ», можна протиставити лише програму *GridModelica* [9], яка суттєво поступається йому за своїми можливостями і параметрами. Тому здається дуже імовірною зацікавленість науково-інженерної європейської спільноти в випробуванні нової української інноваційної розробки, для якої немає зарубіжного повного аналогу. Окрім того, вітчизняні науковці різних відомств отримують можливість, не витрачаючи кошти на придбання і налагодження засобів комп'ютерного моделювання, проводити свої науково-прикладні дослідження і розробки на базі міждисциплінарного комплексу оптимального математичного моделювання, вбудованого в ресурси національної грід- інфраструктури.

## Література

1. Згуровський М. З. Grid-технології для е-науки і освіти / Згуровський М. З., Петренко А. І. // Наукові вісті НТУУ «КПІ». – 2009. – №2. – С. 10–17 .
2. Erl T. Service-Oriented Architecture: Concepts, Technology & Design / Erl T. – New York : Prentice Hall/PearsonPTR, 2005. – 792 p.
3. Talia D. The Open Grid Services Architecture: Where the Grid Meets the Web // IEEE. Internet Computing. – 2002. – Vol. 6, № 6. – P. 67–71.
4. Workflows for e-Science. Scientific Workflows for Grids / Edited by I.J. Taylor, E. Deelman, D.B. Gannon, M. Shields. – Guildford : Springer, 2007. – 530 p.
5. Yu J. A Taxonomy of Workflow Management Systems for Grid Computing / Yu J., Buyya R. // Journal of Grid Computing. – 2005. – Vol. 3, № 3. – P. 171–200.
6. Petrenko A. ALLTED – a computer-aided engineering system for electronic circuit design / Petrenko A., Ladogubets V., Tchkalov V., Pudlowski Z. – Melbourne : UICEE, 1997. – 205 p.
7. Петренко А.І. Дослідження архітектури комплексу схемотехнічного проектування GridALLTED / Петренко А.І., Ладогубець В.В., Фіногенов О.Д., Булах Б.В. // Фінформатика, обчислювальна техніка та кібернетика : вісник університу «Україна». – 2011. – № 2. – С. 65–70.
8. Центр комп'ютерного моделювання.- Режим доступу: <http://scishop.ru/>.- Дата доступу: 01.10.2011
9. GridModelica.- Режим доступу: [www.ida.liu.se/labs/pelab/modelica/GridModelica.html](http://www.ida.liu.se/labs/pelab/modelica/GridModelica.html)), - Дата доступу: 06.02.2012.