

**Информационно-аналитический обзор
по критической технологии
«Технологии и программное обеспечение высокопроизводительных
распределенных вычислительных систем: технологические тренды,
приоритетные направления, перспективы развития, основные
организации, оценка рынков, сопоставление российских и мировых
результатов»**

Информационно-аналитический обзор подготовлен коллективом НИИ НКТ, отвечающего в НИУ ИТМО за прогнозирование научно-технического развития по критической технологии РФ «Технологии и программное обеспечение высокопроизводительных распределенных вычислительных систем», во главе с ее директором – Бухановским А.В. Мы выражаем глубочайшую признательность нашим коллегам за участие в подготовке материала.

**Технологии и программное обеспечение высокопроизводительных
распределенных вычислительных систем**

1. Введение

Современные представления о технологиях распределенных вычислительных систем во многом формируются в рамках проблем, связанных с выполнением ресурсоемких расчетов и (или) обработкой больших объемов данных. К ним традиционно относятся:

- Решение больших задач. На текущий момент времени под *большими* задачами понимаются задачи, требующие использования систем производительностью порядка 100ТФлопс и выше. Одной из основных характеристик таких задач является масштабируемость соответствующих параллельных алгоритмов и программ. Проблема масштабируемости наиболее остро встает в связи с пилотными исследованиями в области создания суперкомпьютеров эксафлопного диапазона производительности.
- Моделирование сложных систем. В отличие от больших задач, *сложная* система подразумевает множественность связей между своими элементами (в частности, по принципу «каждый-с-каждым») и обладает естественной многомасштабностью. Как следствие, технологии моделирования сложных систем в общем случае ориентированы на управление параллельными процессами в иерархических неоднородных динамических средах, ориентированных на проблематику конкретных предметных областей. Моделирование сложных систем далеко не всегда требует такой же производительности суперкомпьютеров, как

решение больших задач, однако не является при этом менее трудоемким.

- Консолидация ресурсов и сервисов. Данная задача традиционно опирается на использование технологий распределенных вычислений. Однако она ориентирована не столько на предоставление конкретному пользователю доступа к глобальным вычислительным ресурсам, сколько на обеспечение возможности эффективного выбора и использования конкретных ресурсов и сервисов (прикладных программ, средств доступа к данным, измерительных систем и пр.) для решения прикладных задач разным пользователям. При этом отдельные задачи далеко не всегда должны решаться на суперкомпьютерных системах – на первый план выступает доступность сервиса, как такового, в распределенной среде. Данный подход отражен в парадигме Грид-технологий, облачных вычислений и пр.

В последнее время в мировой практике обнаруживаются симбиотические направления, сочетающие в себе одновременно два или сразу три перечисленных выше направления. В частности, отдельные элементы сложных систем могут рассматриваться как большие задачи, взаимодействие реализующих их ресурсов организуется на основе Грид, а доступ к результатам предоставляется посредством облачных интерфейсов.

В Российской Федерации исследования и разработки в области технологий высокопроизводительных распределенных вычислительных систем традиционно формируются за счет четырех активных групп:

- Исследовательские структуры РАН и связанные с ними отраслевые организации, традиционно развивающие технологии распределенных вычислений и систем, прежде всего, в научных целях. Данные структуры ориентированы на отдельные наукоемкие классы задач, в основном, связанные с решением больших задач и моделированием сложных систем.
- Высшие учебные заведения, специализирующиеся в области суперкомпьютерных технологий. На настоящее время не представляется возможным определить характерный для данной группы профиль исследований; в разных вузах компетенции формировались достаточно спонтанно.
- Российские производители аппаратной базы и программного обеспечения в области суперкомпьютерных технологий, которые интегрируют как потенциал, характерный для исследовательских структур РАН, так и зарубежные промышленные технологии. При этом ориентация на зарубежный опыт определяется в ряде случаев не объективными качествами заимствуемых объектов, а сложившимися партнерскими отношениями.

- Крупные зарубежные производители суперкомпьютеров и программного обеспечения, ориентированные на продвижение собственных разработок на российском рынке с возможностью поиска стабильных партнеров, в первую очередь, в вузах и научно-исследовательских структурах
- Отечественные промышленные компании, активно использующие суперкомпьютерные технологии в производственной деятельности. Их потребности во многом формируются под влиянием отечественных и зарубежных производителей, при этом в ряде случаев определяющим является зарубежный опыт по соответствующему профилю деятельности.

Специфика развития технологий высокопроизводительных распределенных вычислений и систем, как в России, так и во всем мире, связана с дотационным характером создания ведущих суперкомпьютерных систем. Современный суперкомпьютер в научных исследованиях является не средством производства, а скорее инструментом для проведения исследований в других предметных областях. В силу новизны получаемых результатов, прямая оценка эффективности использования суперкомпьютеров невозможна, а косвенная (на основе развития соответствующих предметных областей) – возможна лишь в простетии нескольких лет. При этом потенциальные возможности создаваемых компьютеров традиционно опережают темпы развития соответствующих параллельных алгоритмов и технологий параллельного программирования; как следствие, эти направления интенсивно развиваются в течение (в среднем) 1-3 лет после появления аппаратной реализации. Потому рассматривать технологии программирования и программное обеспечение высокопроизводительных распределенных вычислительных систем без учета специфики аппаратной базы не представляется возможным. Как следствие, это естественным образом управляет усилиями всех пяти групп игроков на «рынке» отечественных суперкомпьютерных технологий для реализации соответствующих технологических трендов.

2. Общие технологические тренды

Рассмотренная выше классификация проблем, связанных с выполнением ресурсоемких расчетов и (или) обработкой больших объемов данных позволяет подойти к оценке общих технологических трендов с точки зрения потенциального потребителя – пользователя высокопроизводительных программных комплексов компьютерного моделирования и обработки больших объемов данных. Указанные тренды связаны с особенностями архитектуры программных комплексов, спецификой их развертывания на вычислительных платформах, характеристиками аппаратной базы, характеристиками информационного обеспечения, поддержкой жизненного цикла и продвижения на рынке. Данные вопросы рассматриваются ниже.

От интегрированных комплексов – к проблемно-ориентированным средам. Традиционное представление о предметно-ориентированном комплексе компьютерного моделирования предполагает наличие в его составе как минимум трех функциональных составляющих: препроцессора данных, решателя (solver) и постпроцессора данных (часто совмещенного с системой визуализации). Решатель допускает численную реализацию заложенных в нем моделей одним или несколькими методами, выбор которых предопределен разработчиком и, тем самым, навязан пользователю; способы подготовки данных и обработки результатов расчетов ориентированы на особенности решателя. Альтернативой такому подходу является концепция проблемно-ориентированных сред (PSE, Problem Solving Environment) [1,2]. Она подразумевает организацию модульной архитектуры программного комплекса, в которой различные предметно-ориентированные модули (аналоги традиционных решателей) функционируют в рамках управляющей среды. Прерогативой среды является обеспечение единого интерфейса взаимодействия модулей, централизованный контроль их исполнения на вычислительных ресурсах, а также управление потоками данных (включая внешние средства их обработки). По сравнению с традиционными комплексами, это обеспечивает существенную гибкость, что позволяет пользователю самостоятельно строить и выполнять различные сценарии, исходя из собственных представлений о логике организации исследований средствами компьютерного моделирования.

От компонентов – к сервисам. Архитектура проблемно-ориентированной среды требует определения способа интеграции ее модулей, что тесно связано с общемировой тенденцией снижения сложности процессов разработки, тестирования и поддержки программных продуктов на фоне увеличения общей сложности решаемых задач. В частности, это привело к переходу от структурного, объектно-ориентированного и компонентно-ориентированного подходов в инженерии программного обеспечения к специфическим концепциям, таким как CCA (Common Component Architecture), AOA (Aspect Oriented Architecture), и (наиболее общая концепция) - SOA (Service Oriented Architecture). Эти концепции ориентированы на достижение высокого уровня функциональной изоляции компонентов программного комплекса, что позволяет интерпретировать отдельные программные модули в рамках PSE как сервисы (SaaS, Software as a Service) [3]. Сервисы в общем случае могут быть разработаны различными группами авторов, реализованы с использованием разных технологий программирования и функционировать, в общем случае, на различных вычислительных системах. Как следствие, такой подход существенно упрощает внедрение в PSE ранее разработанного инструментария компьютерного моделирования на основе уже морально устаревших информационных технологий. Объединяя отдельные сервисы в вычислительную цепочку (или более сложный поток заданий), пользователь может строить различные композитные приложения для решения сложных

междисциплинарных задач, не сосредотачиваясь на низкоуровневой реализации отдельных модулей.

От суперкомпьютеров – к распределенным вычислительным комплексам. Несмотря на появление относительно недорогих кластерных архитектур и стандартизацию соответствующих интерфейсов параллельного программирования для них, суперкомпьютерные системы на практике доступны далеко не каждому пользователю. Развитие концепции Грид первого поколения лишь отчасти способствовало улучшению ситуации. Это связано с тем, что Грид первого поколения был ориентирован, в первую очередь, на обеспечение пользовательским приложениям доступа к распределенным вычислительным ресурсам. Вопросы подготовки и настройки программного обеспечения для исполнения в Грид остаются за пользователем; при этом эффективная работа параллельной программы при запуске на целевой системе в Грид также не гарантируется. Кардинальное решение данной проблемы стало возможным лишь с появлением концепции Грид второго поколения [4]. Грид второго поколения ориентирован на консолидацию не столько распределенных вычислительных ресурсов, сколько сервисов – прикладных программ, установленных на вычислительных системах в рамках распределенной среды, и поддерживающих единый интерфейс взаимодействия [5]. В силу того, что пользователь получает удаленный доступ к сервису как к программно-аппаратному решению, это заведомо снимает вопросы совместимости внутренних интерфейсов и эффективности параллельного исполнения.

От формальных инструкций – к интеллектуальному взаимодействию сервисов. Интерпретация прикладной программы как сервиса подразумевает не только описание формальных правил его использования (например, форматы входных и выходных данных), но и описание знаний, касающихся логики его применения, исходя из специфики предметной области [6]. К таким знаниям, например, относятся правила, регламентирующие область применения, используемые методы, а также методические (не программные) ограничения. Необходимость использования технологий, основанных на знаниях, связана с тем, что разработчик сервиса, предоставляемого в распределенной среде, является, по сути, экспертом в вопросах его практического использования. Как следствие, набор сервисов и ассоциированных с ними априорных знаний предметной области, объединенных в рамках PSE, образует распределенную базу знаний. На основе базы знаний (например, заданной в форме продукций) может выполняться логический вывод в целях обеспечения пользователя рекомендациями по выбору конкретного сервиса для решения его задачи. При этом акценты интеллектуальной поддержки могут быть смещены как в сторону поиска подходящих сервисов в открытых распределенных системах [7] (поиск в ширину), так и оптимальной настройки сервиса для решения конкретной прикладной задачи [8] (поиск в глубину). Использование интеллектуальных технологий взаимодействия сервисов является

принципиальным аспектом при создании проблемно-ориентированных распределенных сред, в частности, в силу существенных различий в интерпретации одних и тех же подходов, методов и моделей в рамках различных научных школ.

От профилировки приложений – к параметрическим моделям параллельной производительности. Обеспечение эффективного исполнения вычислительных сервисов требует знаний об их параллельной производительности на заданной вычислительной платформе в зависимости от характеристик решаемой задачи. Традиционно такие знания основываются на результатах профилировки (benchmarking) вычислительного сервиса, представленных в табличной форме или в виде некоторой аппроксимации. Этот подход правомерен с точки зрения обоснования качества распараллеливания, однако не является достаточным с точки зрения отчуждения знаний о производительности, в силу того, что в процессе эксплуатации пользовательские задачи могут не соответствовать условиям, в рамках которых строился профиль. Потому для представления знаний необходимо использовать параметрические модели параллельной производительности. Параметрическая модель связывает характеристику производительности (время выполнения, параллельное ускорение, эффективность, реактивность) с характеристиками задачи и параметрами вычислительной системы (количеством и производительностью процессоров и пропускной способностью коммуникационной сети). Несмотря на формальный способ записи, параметрическая модель может интерпретироваться как представление экспертного знания, поскольку она представляется непосредственно экспертом – разработчиком сервиса. При этом структура модели отражает компетенции разработчика в области параллельных вычислений и может варьироваться в широких пределах – от модификаций закона Амдала до специфических конструкций, учитывающих стохастические эффекты исполнения программы [9]. В том случае, когда пользователь конструирует композитное приложение из нескольких сервисов, его параллельная архитектура может формироваться динамически, исходя из минимизации времени исполнения на основе знаний о параллельной производительности каждого из сервисов [10].

От «коробочного» программного обеспечения – к облачным сервисам и композитным приложениям. Характерной особенностью традиционных программных комплексов компьютерного моделирования являются высокие трудозатраты на их установку и настройку. Это связано с тем, что большинство отчуждаемых программных решений такого рода сформировалось на основе исследовательского инструментария с невысокими эргономическими характеристиками. Эта проблема полностью устраняется, когда пользователь ориентируется на распределенные композитные приложения, создаваемые на основе отдельных предметно-ориентированных сервисов, которые устанавливаются непосредственно своими разработчиками на выделенных целевых системах и могут даже не

существовать в форме «коробочных» решений. Как следствие, для распространения таких приложений становится эффективной бизнес-модель SaaS (Software as a Service), в рамках которой провайдер предоставляет пользователю в аренду через Интернет приложение, функционирующее на его же технологической площадке. При этом в качестве таких приложений могут рассматриваться как отдельные сервисы, так и объединяющее их *композитное* приложение (AaaS, Application as a Service). Использование моделей SaaS и AaaS изменяет требования и к самим вычислительным сервисам. Так, для многих задач использование суперкомпьютерных систем традиционной архитектуры далеко не всегда является оправданным в силу весьма низкой параллельной эффективности. Если пренебречь переносимостью программы (тем самым принципиально отказываясь от традиционного «коробочного» способа ее распространения), в ряде случаев можно эффективно реализовать ее сервисную версию для исполнения на вычислительных системах реконфигурируемой архитектуры (FPGA) [11]. Несмотря на то, что стоимость разработки в данном случае будет выше в разы, этот недостаток окупается за счет стоимости последующего владения комплексом в целом.

От сайтов информационной поддержки – к профессиональным виртуальным сообществам в Интернет. Модель распространения программного обеспечения определяет форму информационного сопровождения его жизненного цикла. Для программных комплексов компьютерного моделирования, помимо справочной системы-руководства пользователя, необходима дополнительная документация, связанная с особенностями его применения к задачам предметной области (например, в форме печатного документа или интерактивного справочного портала). Однако ориентация на композитные приложения, созданные на основе сервисов, разработанных разными группами специалистов, делает такой путь неэффективным. Альтернативой ему является концепция профессиональных виртуальных сообществ в Интернет, которая во главу угла ставит не программный продукт или сервис, а ассоциированных с ним специалистов – экспертов, разработчиков, пользователей [12]. В отличие от традиционных социальных сетей, эволюция которых происходит за счет процессов самоорганизации и самомодерации, в данном случае устойчивое развитие сообщества обеспечивается за счет мотивации пользователей в области получения необходимых им сервисов (включая справочную информацию) и установления соответствующих профессиональных связей. Иными словами, возникновение такого сообщества является реакцией на доступность проблемно-ориентированных сред на основе сервисов. Образующая при этом обратная связь стимулирует дальнейшее развитие инструментария проблемно-ориентированной среды, одновременно формируя рыночную конъюнктуру на предоставляемые услуги и сервисы. Этот аспект является принципиальным с точки зрения вывода на рынок наукоемких инновационных программных продуктов, для которых традиционные

способы внедрения являются малоэффективными в силу кажущегося отсутствия потенциальных потребителей.

Таким образом, перечисленные выше аспекты определяют основные тренды развития технологий высокопроизводительных распределенных вычислений и систем с точки зрения пользователя-предметника. Однако для их реализации необходимо рассмотреть специфику отдельных содержательных элементов данной технологии.

3. Перспективы развития платформ высокопроизводительных вычислений

Эффективное решение задач компьютерного моделирования и обработки больших объемов данных связано с выбором платформы высокопроизводительных вычислений (конкретной вычислительной системы и способа ее использования). Возрастающая сложность решаемых задач приводит к тому, что современные платформы высокопроизводительных вычислений допускают взаимопроникновение и иерархичность вычислительных архитектур. Этот эффект достаточно хорошо прослеживается на рис. А7.1, где изображены графики эволюции интенсивности запросов в системе Google по ключевым словам, характеризующие различные аспекты высокопроизводительных вычислений. В частности, видно, что с 2004 г. наблюдается плавное падение количества запросов по словосочетаниям «суперкомпьютинг» и «вычисления в Грид»; в то же время резко растет количество запросов, связанных с облачными вычислениями. При этом в целом интерес к технологиям высокопроизводительных вычислений остается практически постоянным. Такое поведение графиков можно, в частности, объяснить спецификой модели облачных вычислений, которая реализуется как *надстройка* над другими распределенными системами, в том числе, Грид, который, в свою очередь, объединяет отдельные суперкомпьютеры. При этом коммерческая направленность технологий облачных вычислений также сыграла немаловажную роль в стимуляции интереса к ним. Следует отметить, что достаточная доля запросов по облачным вычислениям относится к развивающимся странам Азии (Индия, Таиланд, Пакистан), что, вероятно, обусловлено спецификой экономической ситуации, характеризующейся невозможностью (или нецелесообразностью) затрат на собственную вычислительную инфраструктуру.

Таким образом, современные вычислительные платформы строятся в форме надстройки над распределенным облаком ресурсов различной архитектуры, каждый из которых имеет специализированное применение. В частности, суперкомпьютеры кластерной архитектуры играют роль высокопроизводительных серверов для компьютерного моделирования, системы на основе GPU могут использоваться как ускорители ряда расчетных приложений, а также в качестве платформ для осуществления логического вывода на сложной системе правил. Для исполнения отдельных

классов приложений могут использоваться системы на основе FPGA-архитектуры. Для консолидации вычислительных систем и управления композитными приложениями должны быть использованы технологии Грид; которые также обеспечивают доступ к распределенным источникам и хранилищам данных. В целом для внешнего пользователя такой комплекс представляет собой *облачный продукт*.

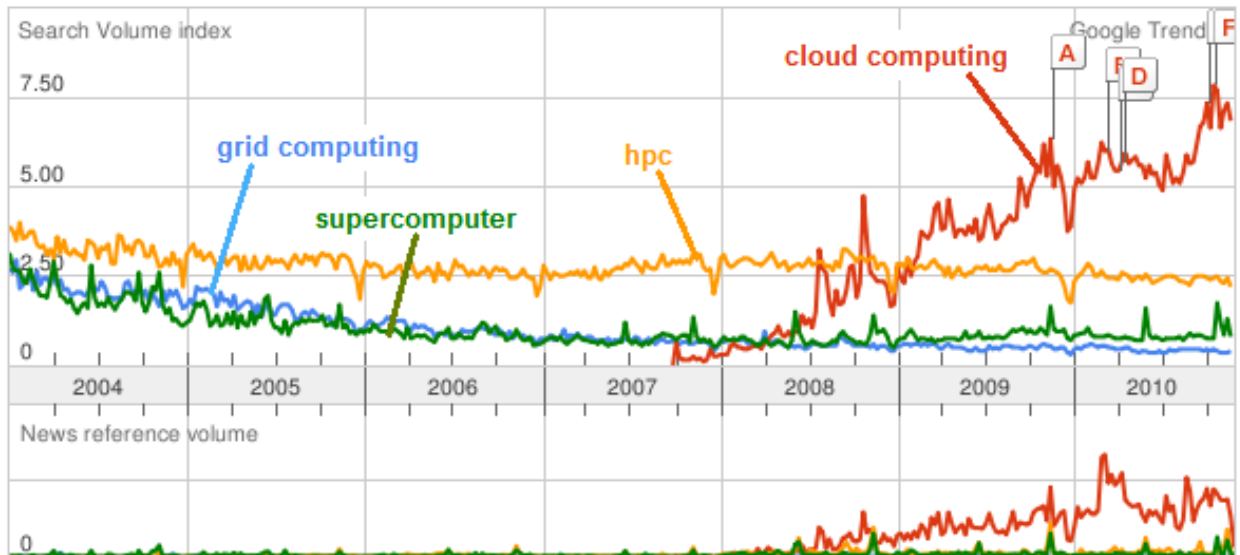


Рис. А7.1 Тенденции эволюции количества запросов по различным аспектам высокопроизводительных вычислений в системе Google.

Рассматривая различные архитектуры в составе распределенных вычислительных сред, следует особо отметить суперкомпьютерные системы сверхбольшого (эксафлопсного) диапазона производительности. Для решения ряда традиционных *больших* задач такие системы в целом не могут быть заменены набором суперкомпьютеров меньшей производительности в составе распределенной среды. Их потребителями традиционно являются такие области знаний, как фундаментальные исследования, ядерно-оружейный комплекс, машиностроение, материаловедение, атомная и традиционная тепловая энергетика, медицина и фармакология. Результатом применения эксафлопных технологий должно стать радикальное улучшение технико-экономических характеристик сложных технических систем за счет одновременной оптимизации свойств материалов, конструкции и процесса их изготовления. В настоящее время в Госкорпорации «Росатом» активно ведутся работы по созданию импортозамещающего базового прикладного программного обеспечения, ориентированного на использование суперЭВМ, в интересах различных отраслей промышленности. В рамках проекта «Развитие суперкомпьютеров и грид-технологий», принятого к реализации Комиссией при Президенте Российской Федерации по модернизации и технологическому развитию экономики России, развернуты работы по оснащению организаций Российской Федерации современным отечественным программным обеспечением для имитационного

моделирования в атомной энергетике, автомобилестроении, авиастроении, нефтегазовой отрасли. Математические модели, вычислительные алгоритмы и программные продукты, созданные в рамках работ по этому проекту, являются основой для разработки прикладного программного обеспечения с целью решения задач экзафлопного класса [13].

Достижение суперкомпьютерными системами производительности 1 Эксафлопс (10^{18} оп/с) планируется на 2018-2020гг. В настоящее время в мире ведутся интенсивные разработки средств, позволяющих преодолеть эти ограничения. В частности, в 2009 году по указанию президента США с целью сохранения лидирующих позиций США в области суперкомпьютерных технологий, их внедрению в науку, промышленное производство и социальные сферы, был разработан план действий под названием Exascale Initiative [14]. Кроме того, министерство энергетики США является одним из основных финансистов международного проекта International Exascale Software Project (IESP) [15]; соучредителем проекта является также национальный научный фонд (NSF) США. Аналогичные работы, предусматривающие достижение экзафлопной производительности, выполняются под патронажем министерства обороны США через агентство DARPA [16]. В Европе экзафлопные технологии реализуются в проекте PRACE (предусматривается создание экзафлопного компьютера в 2019 году) [17] и в финансируемых Евросоюзом проектах European Exascale Software Initiative (EESI) [18] и Towards EXascale ApplicaTions (TEXT) [19], направленных на разработку программных технологий для использования в компьютерах экзафлопного класса.

Основные трудности в достижении экзафлопной производительности – это необходимость эффективного использования 10^8 - 10^9 процессорных ядер и преодоление физических ограничений, обусловленных энергопотреблением, надежностью и конструктивными размерами. В частности, необходим принципиально новый подход к созданию программного обеспечения, основанный на интеллектуальном децентрализованном управлении параллельными процессами в динамической среде (что принципиально отличается от традиционных MPI-программ). При этом проблема может быть отчасти решена за счет специфики аппаратной реализации, например, комбинирования MIMD (традиционные кластерные узлы) и SIMD (графические ускорители) функциональных устройств. Кроме того, в качестве дополнительных ускорителей могут быть использованы FPGA-процессоры; однако это существенно увеличивает стоимость разработки и отладки приложений, а также ограничивает область применения системы.

В Российской Федерации шаг к стимулированию исследований в области экзафлопных вычислений был сделан в рамках ФЦП «Исследования и разработки по приоритетным направлениям развития научно-технологического комплекса России на 2007-2012 годы». В 2011 г. были объявлены конкурсы на НИР в области применения экзафлопных

вычислений в различных предметных областях (нанотехнология, биология и пр.), а также в области исследования самих проблем организации вычислений на экзафлопсных системах. Сопоставление тематики заявок на проекты по данным направлениям в целом демонстрирует традиционную проблему развития сверхбольших вычислительных систем. Так, в предметных областях продемонстрирован ряд задач, которые требуют применения экзафлопсных систем и имеют внутренние (на основе предметной области) механизмы эффективного распараллеливания задач. В то же время предложения по технологиям их разработки основаны в целом на экстенсивном подходе, который предлагает модифицировать уже существующие технологии параллельного программирования, забывая про необходимость революционных изменений самого подхода к разработке приложений в таких средах. В частности, только в одном проекте из восьми (Новосибирский государственный университет) была предпринята попытка предварительного исследования особенностей вычислительных процессов в экзафлопсных средах на основе имитационного моделирования.

Таким образом, проведенный анализ данного направления показывает целесообразность развития, как минимум, трех ключевых задач:

- Развитие программного инструментария для разработки и исполнения приложений на перспективных экзафлопсных системах,
- Развитие специализированных аппаратных средств повышения производительности вычислений (ускорители GPGPU, FPGA) в целях обеспечения экзафлопсного диапазона производительности для частных задач,
- Разработка новых технологий консолидации и управления разнородным облаком вычислительных ресурсов (подробнее данная технология рассмотрена ниже).

4. Перспективы развития параллельных алгоритмов и прикладного программного обеспечения компьютерного моделирования и обработки данных

Инструментарий компьютерного моделирования в настоящее время перестал рассматриваться как некоторый придаток предметных областей и; напротив, эволюция общих закономерностей его развития оформилась в самостоятельное направление Simulation-Based Engineering Science (SBES) [20]. Именно этот подход является определяющим для развития содержательной составляющей технологий высокопроизводительных вычислений и систем, поскольку он определяет основные подходы, методы и приемы к получению информации о реальных явлениях путем компьютерного моделирования (in-silico). В настоящее время основные проблемы развития SBES связаны с созданием многомасштабных и (или) мультидисциплинарных моделей, усвоением данных измерений в вычислительные модели в реальном времени, валидацией и верификацией

моделей, а также с техническими аспектами работы с большими объемами модельных данных, включая их визуализацию.

В обобщающих исследованиях [20, 21] отмечается, что в общем случае развитие технологий SBES целесообразно вести шаг за шагом, постепенно улучшая вычислительные методы и модели. Такие проекты обычно реализуются в течение 1-3 лет, что сопоставимо со сроком действия проектов федеральных целевых программ. При этом считается, что достижение кардинально новых результатов, которые способны привести к изменению существующей идеологии SBES, требует достаточно большого объема работ мультидисциплинарных команд. Ожидаемый эффект, вероятно, сможет в полной мере проявить себя только по прошествии десятилетия от начала исследований. Как следствие, несмотря на то, что документ [20] выпущен около 6 лет назад, его выводы остаются актуальными и на сегодняшний день. В частности, можно выделить следующие приоритетные классы задач, требующие развития общих подходов к созданию прикладного программного обеспечения высокопроизводительных вычислений и систем:

- Моделирование явлений на основе системы комплексных вычислительных моделей, описывающей рассматриваемое явление в различных диапазонах (масштабах) пространственной и временной изменчивости. При этом комплексные модели могут распадаться на систему отдельных (поддиапазонных) моделей, связанных между собой параметрически. При этом должна достигаться прозрачная взаимосвязь и трактовка параметров, входных и выходных данных на всех масштабах изучения явления (в настоящее время эта проблема окончательно не решена). Подобные модели являются традиционными для исследования экстремальных гидрометеорологических явлений [22] или для моделирования нанотехнологических процессов из первых принципов [23].
- Сбор, анализ, консолидация и усвоение распределенной измерительной информации в расчетных моделях, непосредственно в процессе вычислений. Данная информация необходима как для инициализации параметров расчетных моделей, так и для адаптивного контроля процесса вычислений. Учитывая сложность моделируемых объектов и систем, это требует использования специальных методов идентификации моделей на основе косвенных измерений. Наряду с этим недостаточно ограничиваться классическими методами валидации и верификации расчетных моделей на контрольных точках и отдельных экспериментальных данных. Каждая вычислительная модель должна иметь интегрированный аппарат учета неопределенности, выражающейся в отличиях модельного расчета от текущих измерений, в реальном масштабе времени. В частности, к таким методам относится физико-статистическое

усвоение данных в гидродинамических моделях, характерное для гидрометеорологии [24].

- Создание вычислительно эффективных композитных приложений на основе уже разработанных прикладных пакетов. Проблема в данном случае связана с тем, что современное прикладное программное обеспечение компьютерного моделирования в целом не удовлетворяет потребностям SBES, поскольку (а) не обеспечивает «прозрачности» реализуемых моделей, необходимой для их консолидации в составе мультидисциплинарного приложения, и (б) не обладает соответствующими программными интерфейсами. Причина этого, в частности, связана с тем, что прикладное ПО во многом разрабатывается специалистами в достаточно узкой предметной области, которые преследуют утилитарные цели. Как следствие, прикладное ПО компьютерного моделирования для эффективного использования в VLUC должно быть переработано (адаптировано) междисциплинарными командами специалистов, включая предметников и разработчиков, знакомых со спецификой SBES. Как следствие, это требует развития специальных технологий унификации и интеграции прикладных пакетов [25].
- Разработка вычислительно эффективных параллельных алгоритмов для новых вычислительных архитектур. Использование современных достижений (методов и моделей) в ключевых предметных областях при разработке приложений компьютерного моделирования должно выполняться совокупно с разработкой соответствующих численных методов и параллельных алгоритмов их реализации. Прямой перенос существующих алгоритмов на новые модели часто не приводит к положительному результату с точки зрения вычислительной эффективности. Это же относится и к переходу к новым компьютерным архитектурам. Как следствие, перспективные приложения компьютерного моделирования требуют согласования комплекса «модель – численный метод – параллельный алгоритм – вычислительная архитектура».
- Развитие технологий визуализации и виртуальной реальности для анализа результатов расчетов. Использование суперкомпьютерных технологий позволяет получать столь большие массивы данных, что их анализ и интерпретация возможны (а) или с использованием методов формального сжатия информации (например, статистической обработки), или (б) посредством невербальных методов (например, путем научной визуализации). При этом прогресс в области научной визуализации, который достигнут в последние годы, был вызван

активным развитием вычислительных и мультимедийных технологий. Применительно к проблеме эффективного развития суперкомпьютерных технологий, использование технологий интерактивной визуализации имеет ряд специфических особенностей, например, *computational steering* (как спектр технологий, позволяющих управлять изображением в реальном времени, устраняя при этом задержки, связанные с отсутствием синхронизации параллельных процессов).

Таким образом, рассмотренные выше требования позволяют определить в целом ожидаемый облик прикладного программного обеспечения высокопроизводительных вычислений и систем. В настоящее время в Российской Федерации существует ряд организаций, имеющих успешный опыт реализации отдельных задач в рамках перечисленного перечня. К ним, в частности, относятся: РНЦ Курчатовский институт, Институт прикладной математики РАН, Санкт-Петербургский государственный политехнический университет, ООО «Тесис», ЗАО «Сигма Технология», Южно-Уральский государственный университет, Национальный исследовательский университет информационных технологий, механики и оптики, Национальный исследовательский университет - МФТИ, и др.

5. Перспективы развития технологий Грид

Сегодня распределенные инфраструктуры на базе Грид пользуются заслуженной популярностью и могут рассматриваться как инфраструктурная основа для организации предметно-ориентированных сред высокопроизводительных вычислений, рассмотренных в разделах 4 и 5. Однако на существующем этапе развития Грид инфраструктурные проекты, ориентированные на консолидацию географически разнесенных ресурсов в единую среду, уже ушли в прошлое. В настоящее время наиболее актуальной является задача продвижения технологий Грид в предметные области, обеспечивая, с одной стороны, эффективное использование ресурсов распределенной среды, а с другой – поддержку пользователей-неспециалистов в процессе разработки и запуска вычислительных приложений.

Современный Грид порождает специфические требования к инструментальным средствам, ориентированным на работу с распределенными вычислительными ресурсами. К примеру, в мире существует ряд проектов, ориентированных на упрощение работы пользователя с Грид путем создания визуальных инструментов конструирования распределенных приложений [26, 27] или даже полнофункциональных сред разработки параллельных приложений [28, 29]. Другим направлением развития инструментальных средств, оперирующих распределенными вычислительными ресурсами, является построение средств анализа распределенных инфраструктур и оптимизации распределенных

приложений. Примерами таких средств могут служить:

- набор утилит ASKALON [30], предназначенный для анализа распределенных приложений в Грид-средах,
- средство для анализа производительности параллельных программ SCALEA [31],
- средство массовой автоматической генерации тестов для Грид-систем ZENTUTIO [32],
- средство для анализа производительности в параллельных и распределенных приложениях Aksum [33],
- инструмент для оценки производительности в Грид-системах приложений, построенных в форме потока заданий (workflow, WF) [34] и пр.

Использование вычислительных ресурсов Грид для решения задач моделирования сложных систем сопряжено с необходимостью формального описания сценариев моделирования как приложений, использующих сервисы, доступные в Грид. Традиционно, такие приложения представляются в форме WF [35]. При этом должен формироваться язык взаимодействия между пользователем и системой управления вычислительной инфраструктурой. Можно выделить две базовых нотации таких языков: графическая и текстовая. В первом из этих подходов предполагается конструирование композитного приложения в форме цепочки заданий с помощью визуальных инструментов (в частности с использованием концепции *drag-and-drop*). Примерами таких систем могут служить Kepler [36], Taverna [37], Triana [38]. Во втором подходе основным инструментом описания композитных приложений является высокоуровневый (зачастую предметно-ориентированный – *domain-specific*) язык описания цепочек заданий. Примером системы, использующей такой подход, может служить Geodise [39]. В тоже время, независимо от подхода, исполняя роль интегрирующего инструмента, такие системы зачастую поддерживают широкий спектр открытых протоколов, стандартов и языков представления информации, что обеспечивает возможность использования сторонних сервисов, предоставляющих требуемую функциональность или доступ к необходимым данным. Как следствие, в зависимости от задач разрабатываемой системы могут использоваться различные средства уровня промежуточного программного обеспечения, обеспечивающего решение вспомогательных задач (в том числе задач интеграции). Например, в рамках проекта Virtual Laboratory for e-Science [40] для обеспечения унифицированного программного доступа к ресурсам Грид было использовано средство Grid Operation Invoker [41], а для организации доступа к данным – хранилище RegaDB [42]. Следует отметить, что при построении сложных программных решений на базе Грид возникает необходимость решения ряда вспомогательных задач. Важными задачами являются обеспечение контроля источников информации (например, эту задачу решает PROToS [43]), предоставление отладочной информации разработчику

цепочки исполнения композитного приложения (для решения может использоваться средство EclipseRCP [44]), организация миграции заданий в рамках Грид-среды (например, попытка решения этой задачи на базе стандартных механизмов ОС Linux предпринята в рамках проекта XtreamOS [45]).

В Российской Федерации исследования и разработки в области Грид во многом ориентированы на использование зарубежного опыта создания распределенных систем доступа к данным мегаустановок (БАК); в частности к ним относится российский сегмент EGI (ранее EGEE). По-видимому, на настоящий момент наиболее продвинутой является Грид-среда Национальной нанотехнологической сети (ГридННС), поддерживаемая РНЦ Курчатовский институт и НИИ ядерной физики МГУ, в рамках которой удалось отчасти отойти от традиционных для зарубежных аналогов решений на основе gLite и Globus в пользу более удобных реализаций на основе технологии REST. Грид-среды, созданные в рамках программы «СКИФ-Грид», а также разработанные РНЦ ВНИИЯФ (г. Саров) для доступа к собственным суперкомпьютерам, не являются в полной мере Грид-средами, поскольку не отвечают классической функциональности [46]. Отдельные проработки в области развития средств разработки приложений над Грид, выполнены в 2007-2010 г. в Южно-Уральском государственном университете и Национальном исследовательском университете информационных технологий, механики и оптики (что соответствует описанному выше мировому опыту). Таким образом, современный уровень развития Грид второго поколения позволяет не только обеспечить решение проблем высокопроизводительных вычислений (решение больших задач, моделирование сложных систем, консолидация ресурсов и сервисов), но и дать возможность построения распределенных сценариев моделирования сложных систем в форме WF, включающих в себя различные прикладные Грид-сервисы (что позволяет разрешить ряд аспектов раздела 4). Эти Грид-сервисы могут размещаться физически на разных узлах, принадлежать разным авторам и реализовывать различные технологии. Как следствие, с точки зрения применения Грид принципиальной проблемой является эффективное планирование исполнения композитного приложения, составленного из таких сервисов, в целом удовлетворяющего пользовательским ограничениям для достижения минимального времени решения задачи.

6. Перспективы развития проблемно-ориентированных платформ распределенных вычислений

Проблемно-ориентированные среды распределенных вычислений предназначены для эффективного решения прикладных задач компьютерного моделирования и обработки данных с использованием высокопроизводительных вычислительных ресурсов. В настоящее время, как

в мире, так и в Российской Федерации не существует унифицированного подхода к решению данной задачи. В частности, в настоящее время известны различные образцы отечественных платформ распределенных вычислений, находящиеся на различных уровнях развития. Например, платформа для вычислительной и квантовой химии ИПХФ РАН [47] предоставляет сервис для запуска пакета GAMESS на собственных распределенных вычислительных ресурсах. Поддерживается запуск нескольких экземпляров приложения для решения общей задачи с распараллеливанием по данным. Кроме того, поддерживается возможность доставки и развёртывания пакета GAMESS на целевой кластер. Система СИВС [48] является профессиональной платформой для поддержки профессионального сообщества пользователей с расширяемым web-интерфейсом. Интерфейс динамически строится на основе онтологического описания. Предполагается возможность использования этого интерфейса для встраивания в него высокопроизводительных приложений. Web-интегрированный исследовательский центр конструирования лекарств ИМБХ РАМН [49] представляет собой веб-портал с возможностью запуска приложений собственной разработки по конструированию лекарств и прогнозированию их свойств на основе базы данных лекарств и вычислительных мощностей ИМБХ РАМН. Портал построен на основе платформы HubZero, что определяет его основные возможности и ограничения. К преимуществам данного решения можно отнести наличие готового web-интерфейса для сообщества пользователей, а также поддержку онтологий, а к недостаткам – отсутствие поддержки WF. Библиотека GridMD [50] используется в задачах молекулярной динамики для формирования и запуска WF в распределенных средах Грид. Формирование WF осуществляется непосредственно в выполняемой программе на языке C++. Никаких дополнительных средств библиотека не предоставляет. Проект «Пирамида» [51] представляет собой платформу для назначения подзадач распараллеленной по данным задачи на распределенные вычислительные ресурсы. Планирование в данной системе осуществляется иерархически - каждый нижестоящий обработчик заданий при отсутствии заданий в собственной очереди забирает новую порцию заданий у соответствующего ему вышестоящего обработчика. Непосредственный запуск заданий на вычислительном ресурсе осуществляют обработчики нижнего уровня. Такая иерархическая система позволяет уменьшить количество обращений к основной очереди задач и тем самым разгрузить центральный обработчик заданий, что позволяет избежать «бутылочного горлышка» в планировщике при большом количестве коротких заданий. Система GMDH Shell [52] представляет интегрированную проблемно-ориентированную среду с графическим интерфейсом пользователя для интеллектуального анализа данных (data mining) с возможностью запуска расчета на удаленном кластере. Выбор кластера осуществляется пользователем вручную. Данный программный продукт не предоставляется в качестве сервиса и пользователь должен конфигурировать

и запускать его на собственных вычислительных ресурсах. Проблемно-ориентированная среда для задач механики сплошной среды GIMM [53] предоставляет пользователю графический интерфейс с возможностью запуска на удалённом кластере. Выбор кластера осуществляет сам пользователь. Кроме того, пользователю доступна возможность загружать и запускать свои решатели. Проект MathCloud [54, 55] является проблемно-ориентированной средой для математических задач с веб-интерфейсом. Данная система предоставляет услуги по графической компоновке WF из элементов списка математических пакетов и запуску сформированного WF на предоставляемых распределённых вычислительных ресурсах. Поддерживается возможность объединения части WF в отдельный блок с его дальнейшим сворачиванием/разворачиванием. Система имитационного моделирования Triad.Net [56] предполагает задание пользователем трёхуровневой модели (объекты, сообщения, обработчики сообщений) с последующим запуском процесса моделирования на кластере. Процесс обмена сообщениями между моделируемыми объектами является, по сути, процессом динамического формирования WF. Элементами такого WF являются ассоциированные с объектами подпрограммы-обработчики сообщений, а связями – сами сообщения. Планировщик системы осуществляет балансировку нагрузки между узлами кластера на основе мультиагентного подхода, используя знания об особенностях работы объектов имитационной модели. Платформа CAEBeans [57, 58] предоставляет возможность создания собственной проблемно-ориентированной среды с возможностью запуска WF на распределённых вычислительных ресурсах через web-интерфейс. Однако сам WF проектируется системным программистом на этапе разворачивания среды и остаётся фиксированным. Соответственно, пользователь не может ни выбрать другой WF, ни изменить существующий. Платформа CLAVIRE [59] разрабатывается ЗАО «АйТи. Информационные технологии» для поддержки различных вычислительных сервисов и композитных приложений в среде облачных вычислений.

Таблица А7.1 Сравнительные характеристики отечественных платформ распределённых вычислений

Проект	Предметная область	Интегрированная среда	SaaS	Поддержка WF	Распределённые вычислительные ресурсы	Знания	Сообщество пользователей
--------	--------------------	-----------------------	------	--------------	---------------------------------------	--------	--------------------------

ИПХФ РАН	Вычислительная и квантовая химия	веб-форма	+	по данным	+	–	–
СИБС	Платформа	–	+	–	–	+	+
w- ИЦКЛ	Конструирование лекарств	веб-форма	+	–	+	+	+
GridMD	Молекулярная динамика	–	–	+	+	–	–
«Пирам ида»	Платформа	–	–	по данным	+	–	–
GMDH Shell	Data mining	+	–	–	вручную	–	–
GIMM	Задачи механики сплошной среды	+	+	–	вручную	–	–
MathClo ud	Математика	+	+	+	+	+	+
Triad.Ne t	Имитационное моделирование	–	–	неявная	–	+	–
CAEBea ns	Платформа	веб-форма	+	+	+	–	–
CLAVIR E	Платформа	+	+	+	+	+	+

Сводные данные по вышеуказанным проектам по ряду качественных технико-экономических характеристик приведены в таблице А7.1. Указание значения «платформа» в графе «предметная область» означает, что данный проект не предназначен для решения каких-либо определённых прикладных задач, а является основой для создания высокопроизводительного приложения в произвольной предметной области. Как видно из приведенной таблицы А7.1, ни один из существующих отечественных продуктов не поддерживает в полной мере всех современных тенденций развития распределенных вычислений, перечисленных в заглавной строке таблицы. Главным образом следует отметить слабое распространение композитных приложений (большинство проектов либо не поддерживают WF вовсе, либо поддерживают лишь частные случаи распараллеливания по данным), а также

практически полное отсутствие проектов, использующих интеллектуальные технологии.

При этом можно выделить только две платформы, в полной мере отвечающие всем требованиям п. 2. Это среда MathCloud, разрабатываемая в Центре Грид-технологий института системного анализа РАН, и платформа CLAVIRE, разрабатываемая ЗАО «АйТи. Информационные технологии» в кооперации с Национальным исследовательским университетом информационных технологий, механики и оптики.

7. Перспективы развития технологий облачных вычислений

Парадигма облачных вычислений (cloud computing) ориентирована на модели, методы и технологии для предоставления пользователю удобного доступа к массиву конфигурируемых компьютерных и информационных ресурсов, которые могут быть быстро зарезервированы и высвобождены с минимальными действиями со стороны их провайдера [60]. Она обобщает и систематизирует ранее известные бизнес-модели IaaS (инфраструктура как сервис), PaaS (платформа как сервис) и SaaS (программное обеспечение как сервис), рассматривая их как вложенные механизмы, реализуемые в облаке [61]. При этом в качестве предоставляемых ресурсов могут выступать вычислительные системы, хранилища данных, системные приложения, средства разработки, прикладные программы и композитные приложения на их основе. Для развитых сред облачных вычислений характерна интеграция между собой различных бизнес-моделей, что связано, в первую очередь, с ориентацией на конкретные потребности пользователей в различных предметных областях. Для их классификации и анализа используется модель становления облачных вычислений CCMM (Cloud Computing Maturity Model) [62]. Она декларирует пять этапов развития облачных вычислений:

- I. консолидация и модернизация доступных организации ресурсов;
- II. виртуализация доступных ресурсов в рамках облачной парадигмы;
- III. автоматизация процессов использования виртуальных ресурсов с обеспечением адаптивности, безопасности и повторяемости;
- IV. обеспечение поддержки автоматизированных сервисов (проведение аудита, проверка отказоустойчивости, обеспечение качества);
- V. полнофункциональная реализация облачной инфраструктуры на основе объединения сервисов, находящихся в различных облачных средах.

В настоящее время развитие облачных инфраструктур (и реализующих их технологий) в полной мере обеспечивает прохождение *первых трех* этапов. Уже четвертый этап, связанный с проведением аудита, измерением производительности и полным контролем над выполнением сервисов, к сожалению, находится в зачаточном состоянии, как в силу специфики измерения характеристик сервисов в распределенной среде, так и из-за отсутствия достаточно продвинутых глобальных проектов облачных вычислений, требующих полномасштабного решения данных задач. Исходя

из модели ССММ, имеет смысл разделить технологии облачных вычислений на два класса (по аналогии с технологиями Грид, см. раздел 5): облачные вычисления первого поколения (С-1) и облачные вычисления второго поколения (С-2). Технологии первого поколения соответствуют этапам I-III ССММ и покрывают все три бизнес-модели (IaaS, PaaS, SaaS). Рынок таких решений уже достаточно насыщен, хотя продолжает эволюционировать весьма быстро [63]. Технологии С-2, напротив, во многом остаются предметом исследовательских проектов. Это связано с тем, что требования этапов IV-V ССММ реализуемы только при совокупном использовании возможностей современных информационных технологий и априорных знаний предметных областей, на которые ориентируется разработка. Иными словами, облачные вычисления второго поколения основываются на проблемно-ориентированных технологиях решения комплексных задач в распределенной вычислительной среде.

В настоящее время развитию технологий С-2 препятствует ряд технологических аспектов, например:

- Разнообразие и неоднородность предметно-ориентированных сервисов в неструктурированном облаке, что делает необходимым развитие интеллектуальных технологий аннотирования, поиска, применения сервисов (формализация знаний).
- Декларативная запись композитных приложений, которая не допускает явной алгоритмической интерпретации. Для решения этих задачи требуются технологии эффективного управления их исполнением в распределенной среде.
- Использование коммуникационных сетей общего назначения со случайными вариациями загрузки сказывается на специфике учета, распределения и балансировки нагрузки в облачной среде. Как следствие, целесообразно планирование исполнения, квотирование и тарификация на вероятностной основе.
- Высокая инерционность среды облачных вычислений делает необходимым, в частности, развитие специальных технологий сопряжения с системами, работающими в режиме реального времени (например, для интерактивной визуализации в ситуационных центрах).

Совокупное преодоление указанных факторов становится возможным на основе симбиотического подхода в рамках концепции iPSE (Intelligent Problem Solving Environment) [64], которая ориентирована на развитие интеллектуальных технологий поддержки жизненного цикла проблемно-ориентированных сред распределенных вычислений. В настоящее время решения на основе данной концепции развиваются в РИЦ Курчатовский институт (среда NanoCloud), ЗАО «ИБС-Экспертиза», ЗАО «АйТи. Информационные технологии» и в Национальном исследовательском университете информационных технологий, механики и оптики.

В целом развитие технологий облачных вычислений, как первого, так и второго поколения, выполняется силами ряда организаций, ориентированных

на различные технологические аспекты и приложения (что характерно для облачной парадигмы). В частности, к ним относятся Институт системного анализа РАН, Институт системного программирования РАН, Вычислительный центр РАН, Томский государственный университет, Южно-Уральский государственный университет, и др.

8. Особенности образовательной деятельности в области технологий высокопроизводительных распределенных вычислений и систем

В настоящее время в Российской Федерации активно стимулируются процессы формирования и поддержания образовательного пространства для подготовки высококвалифицированных кадров в области суперкомпьютерных технологий (СКТ). В настоящее время СКТ занимают передовые позиции в области информационных технологий и используются практически во всех отраслях индустрии. Подготовка кадров в области СКТ в соответствии с мировыми тенденциями развития данного направления станет одним из механизмов вывода страны на передовые позиции в науке и высокотехнологичной индустрии, что должно повлечь ускорение темпов экономического развития и повышение качества жизни населения. Решение вопросов подготовки кадров требует предварительного анализа состояния образования в области СКТ как в России, так и во всем мире, с целью сопоставления и заимствования положительного опыта. Такой анализ можно разбить на две составляющие – определение текущих потребностей в использовании СКТ в индустрии и выявление соответствующей им СКТ-составляющей в образовательных программах.

В первую очередь, рассмотрим, какие прорывные направления в использовании СКТ отмечаются в России и за рубежом. Их перспективность является определяющим фактором для формирования соответствующих образовательных программ, которые традиционно должны быть построены с временным сдвигом 2-4 года относительно текущих (устоявшихся) нужд промышленности. Мы не будем касаться потребности использования суперкомпьютеров в оборонной отрасли. Причиной тому является то, что большая часть информации закрыта, а полученные из доступных источников результаты не будут соответствовать реальной картине. В качестве отправной точки для определения потребностей можно рассмотреть таксономию Седьмой Европейской рамочной программы [2]. В ней можно выделить следующие разделы:

- автоматическое распараллеливание, новые языки высокого уровня и расширения существующих языков;
- методологии, технологии и средства параллельного программирования: непрерывная адаптация в многоядерных и реконфигурируемых системах, виртуализация, настраиваемые процессы и средства разработки;

- имитационное моделирование и анализ сложных многоядерных систем;
- интеграция гетерогенных материалов, элементов и многоядерных технологий;
- параллельные вычисления в системах с триллионами вычислителей: проектирование и эксплуатация гетерогенных многоядерных систем, проектирование надежных систем из ненадежных элементов, принципиально новые парадигмы программирования.

По вышеперечисленным формулировкам видно, что цели FP-7 в основном ориентированы на разработку и совершенствование средств эффективной эксплуатации сложнейших вычислительных комплексов по двум направлениям: (а) с сильной неоднородностью архитектуры и (б) с очень большим количеством функциональных устройств. Также отмечается развитие языковых средств программирования с выходом их на более высокий уровень, позволяющих сделать разработку соответствующих программных средств доступной большей аудитории. Аналогичные потребности отражены и в отечественной ФЦП «Исследования и разработки по приоритетным направлениям развития научно-технологического комплекса России на 2007—2013 годы» [3]. В частности, ориентация на сверхбольшие системы отразилась в запуске в 2011 г. ряда НИОКР, связанных с экзафлопными вычислениями, а учет неоднородности – в развитии подходов на основе концепции REST.

Рассмотренные тенденции связаны с приоритетными направлениями развития науки и технологий, которые не в полной мере восприняты образовательной средой в области СКТ, как в России, так и за рубежом. Однако их внедрение в образовательный процесс в настоящее время целесообразно выполнять в рамках межуниверситетских (совместных) образовательных программ, например, Erasmus-Mundus (в части подготовки магистров). Анализ состояния проектов Erasmus-Mundus продемонстрировал, что в основном представляемые курсы ориентированы на базовую подготовку в области параллельного программирования; в ряде случаев предлагаются специализированные курсы по Грид и по администрированию суперкомпьютерных систем. Только в одной из программ («Distributed Computing») присутствует курс «Облачные вычисления» (Cloud Computing). Аналогичные тенденции просматриваются и в отечественном СКТ-образовании. В частности, даже в МГУ им. М.В. Ломоносова, где реализуется программа подготовки магистров по СКТ в рамках государственного стандарта направления «Прикладная математика и информатика», такие направления, как cloud, pervasive, urgent computing, не затрагиваются.

Следует отметить, что программы обучения специалистов в области ИКТ и прикладных (инженерных) направлений, как правило, не пересекаются по СКТ-дисциплинам. Например, если взять направления «Прикладная математика и информатика» и «Нанотехнология», то в первом

направлении нет курсов, посвященных хотя бы основам нанотехнологий, а во втором – курсов, дающих представление о параллельном программировании и суперкомпьютерных технологиях. Как показывает практика, выпускникам обоих направлений сложно вести совместную инженерную и/или научную деятельность. Разработчик со специальностью «Прикладная математика и информатика» с трудом понимает постановку задачи нанотехнолога, т.к. последний ставит задачу, владея только своей предметной областью, не вникая при этом в нюансы разработки компьютерных систем. Аналогичная ситуация в полной мере проявляется и в зарубежной образовательной среде в области СКТ.

Таким образом, проведенный анализ в целом показывает, что зарубежное СКТ-образование переживает те же сложности, что и отечественное. А именно: отсутствуют системные механизмы интеграции СКТ в предметные (инженерные) области, заметно отставание предлагаемых образовательных программ и курсов от приоритетных направлений развития науки и технологий, а также становится очевидной невозможность выхода из данной ситуации силами отдельно взятых университетов. Как следствие, прямой перенос зарубежного опыта на развитие российского СКТ-образования, по-видимому, нецелесообразен. Взамен этого необходима реализация комплекса совместных (международных) мероприятий:

- Развитие мультидисциплинарных программ подготовки магистров в области СКТ (Computational Science for Multidisciplinary Research) одновременно с массовым и системным внедрением СКТ в программы обучения специалистов-предметников.
- Расширение образовательных программ новыми СКТ-курсами, охватывающими передовые направления развития отрасли, в соответствии с номенклатурой соответствующих отечественных и зарубежных научных программ.
- Разработка и внедрение *совместных* образовательных программ в области СКТ. Данное мероприятие позволит получить качественные и современные учебные материалы в области СКТ за счёт привлечения ведущих российских и зарубежных партнёров, обеспечит мобильность студентов, аспирантов и молодых ученых, а также сформирует основы для франчайзинга образовательных программ отечественных университетов в ближнее зарубежье (страны СНГ).

9. Выводы

Таким образом, проведенный анализ показал, что в последнее десятилетие произошло смещение основных тенденций развития высокопроизводительного программного обеспечения для компьютерного моделирования и обработки больших объемов данных в сторону мультидисциплинарности рассматриваемых задач, а также распределенности, неоднородности и иерархичности используемых вычислительных

архитектур. Как следствие, развитие данного направления требует решения следующих задач:

- Развитие и обоснование предметно-независимых технологий разработки программного обеспечения для суперкомпьютеров экзафлопсного диапазона производительности (включая гибридные системы на GPGPU и FPGA).
- Разработка численных методов и параллельных алгоритмов нового поколения, обеспечивающих эффективное распараллеливание и балансировку нагрузки в процессе решения мультидисциплинарных вычислительно-сложных задач в распределенных иерархических средах.
- Разработка технологий для интерактивной визуализации в системах виртуальной реальности на основе результатов численного моделирования в распределенных средах (включая современные Грид-системы).
- Развитие Грид второго поколения; создание программного инструментария для поддержки процессов проектирования, разработки и исполнения предметно-ориентированных сервисов и композитных приложений в современных Грид-средах.
- Создание и продвижение унифицирующих платформ для консолидации разнородных вычислительных ресурсов в распределенной среде на основе технологий облачных вычислений; развитие технологий облачных вычислений второго поколения.
- Разработка и внедрение предметно-ориентированных программных комплексов компьютерного моделирования и обработки больших объемов распределенных данных, использующих передовые технологии п. (2-7), в различных предметных областях.
- Развитие мультидисциплинарных программ подготовки магистров в области СКТ одновременно с массовым и системным внедрением СКТ в программы обучения специалистов-предметников, с учетом передового зарубежного опыта в данной области.

Перечень источников

1. Sloot P.M.A., Frenkel D., Vorst H.A. Van der et al. Computational e-Science: Studying complex systems in silico. A National Coordinated Initiative. White Paper, February 2007.
<http://www.science.uva.nl/research/scs/papers/archive/Sloot2007a.pdf>
2. Computer as Thinker/Doer: Problem-Solving Environments for Computational Science" // S. Gallopoulos, E. Houstis, J. Rice, IEEE Computational Science and Engineering, Summer 1994.
3. Cohen S. Ontology and Taxonomy of Services in a Service-Oriented Architecture // The Architecture Journal.– Microsoft, 2007.– №11.– pp. 30–35

4. Foster I. What is the Grid. A three point checklist. GridToday / July 22, 2002: – Vol. 1–no. 6.– Режим доступа:
<http://www.gridtoday.com/02/0722/100136.html> , свободный.
5. Инструментальная оболочка поддержки принятия решений разработчика высокопроизводительных приложений в Грид / А.В. Дунаев, А.В. Ларченко, А.В. Бухановский // Научно-технические ведомости СПбГПУ — 2008.— №5. — С. 98–104.
6. Parastadis S. A Platform for All That We Know: Creating a Knowledge-Driven Research Infrastructure // The Fourth Paradigm. Data-Intensive Scientific Discovery. – Microsoft, 2009. – pp. 165-172.
7. Инструментальная оболочка проектирования высокопроизводительных приложений в Грид. Часть III: Приобретение и формализация знаний / А.В. Дунаев, А.В. Ларченко, А.В. Бухановский // Научно-технический вестник СПбГУ ИТМО: Технологии высокопроизводительных вычислений и компьютерного моделирования. — 2008. — Вып. 54. — С. 46–55.
8. Высокопроизводительный программный комплекс моделирования атомно-молекулярных наноразмерных систем / В.Н. Васильев [и др.] // Научно-технический вестник СПбГУ ИТМО. Выпуск 54. Технологии высокопроизводительных вычислений и компьютерного моделирования. – СПб.: СПбГУ ИТМО, 2008. – С. 3-12.
9. Ковальчук С.В. Параллельная производительность стохастических алгоритмов / С.В. Ковальчук, А.В. Бухановский // Известия высших учебных заведений. Приборостроение. – 2008. – №12. – С. 7-14.
10. Особенности проектирования высокопроизводительных программных комплексов для моделирования сложных систем / С.В. Ковальчук [и др.] // Информационно-управляющие системы. – 2008. – №3. – С. 10-18.
11. Каляев И.А., Левин И.И., Семерников Е.А., Шмойлов В.И. Реконфигурируемые мультиконвейерные вычислительные структуры // Изд. ЮНЦ РАН – Ростов-на-Дону – 2008 – 393 с.
12. Гуськов А.А. Виртуальное профессиональное сообщество в области компьютерного моделирования в нанотехнологиях / А.А. Гуськов, А.В. Ларченко // Технологии Microsoft в теории и практике программирования. Материалы конференции (Нижний Новгород, 13-14 мая 2010 г.). – Нижний Новгород: Изд-во Нижегородского государственного университета, 2010. – С. 424-426.
13. Эксафлопсные технологии. Концепция по развитию технологии высокопроизводительных вычислений на базе суперЭВМ эксафлопсного класса (2012-2020 гг.) // М., Росатом - 2011
14. Rick Stevens and Andy White. A DOE Laboratory plan for providing exascale applications and technologies for critical DOE mission needs [Электронный ресурс]. Режим доступа:
http://computing.ornl.gov/workshops/SCIDAC2010/r_stevens.pdf

15. International Exascale Software Project [Электронный ресурс]. Режим доступа: www.exascale.org
16. The Defense Advanced Research Projects Agency DARPA [Электронный ресурс]. Режим доступа: www.darpa.mil
17. PRACE [Электронный ресурс]. Режим доступа: www.prace-project.eu;
18. European Exascale Software Initiative (EESI) European roadmap for Exascale [Электронный ресурс]. Режим доступа: <http://www.eesi-project.eu/>
19. Towards EXascale Applications (TEXT) Project Overview [Электронный ресурс]. Режим доступа: <http://www.project-text.eu>
20. Simulation Based Engineering Science. Revolutionizing Engineering Science through Simulation / Report of the National Science Foundation. Blue Ribbon Panel on Simulation-Based Engineering Science // May 2006.
21. Benioff, M. and Lazowska, E. (Chairs), Computational Science: Ensuring America's Competitiveness; President's Information Technology Advisory Committee (PITAC) Report, June 2005. [<http://www.nitrd.gov>]
22. Высокопроизводительный программный комплекс моделирования экстремальных гидрометеорологических явлений. Часть II: Разработка и оценка программной архитектуры / С.В. Ковальчук [и др.] // Научно-технический вестник СПбГУ ИТМО. Выпуск 54. Технологии высокопроизводительных вычислений и компьютерного моделирования. – СПб.: СПбГУ ИТМО, 2008. – С. 64-71.
23. Высокопроизводительный программный комплекс моделирования атомно-молекулярных наноразмерных систем / В.Н. Васильев [и др.] // Научно-технический вестник СПбГУ ИТМО. Выпуск 54. Технологии высокопроизводительных вычислений и компьютерного моделирования. – СПб.: СПбГУ ИТМО, 2008. – С. 3-12.
24. Ансамблевые прогнозы экстремальных гидрометеорологических явлений в распределенной среде CLAVIRE / С.В. Мостаманди и др. // Изв. Вузов. Приборостроение, т. 54, №10, 2011 – С. 102-104.
25. Якововский М. В. Вычислительный эксперимент на многопроцессорных системах: алгоритмы и инструменты // Изв. Вузов. Приборостроение, т. 52, №10, 2009 – С. 50-57.
26. Accessing Grid Computing Resources with g-Eclipse Platform / Wolniewicz P. et al // Computational Methods in Science and Technology, 13 (2) – 2007 – p. 131-141.
27. Deak O. Grid Service Execution for JOpera. Master's thesis. – 2005. – 102 p.
28. P-GRADE: A Grid Programming Environment / P. Kacsuk, G. Dózsa, J. Kovács, R. Lovas, N. Podhorszki, Z. Balaton, G. Gombás // Journal of Grid Computing. Volume 1, Number 2. - 2003. - pp. 171-197.
29. GridLab: Enabling Applications on the Grid / G. Allen, D. Angulo, T. Goodale, T. Kielmann, A. Merzky, J. Nabrzysky, J. Pukacki, M. Russell, T.

- Radke, E. Seidel [et al.] // Lecture Notes in Computer Science, 2002, Volume 2536. - 2002. - pp. 39-45.
30. Askalon Programming Environment for Grid Computing [http://www.askalon.org/]
 31. H.-L. Truong, T. Fahringer SCALEA: a performance analysis tool for parallel programs // Concurrency and Computation: Practice and Experience. - Volume 15 Issue 11-12, - 2003. - P. 1001 – 1025
 32. R. Prodan, T. Fahringer ZENTURIO Experiment Management Tool // Lecture Notes in Computer Science, Volume 4340/2007. - 2003. - P. 69-112.
 33. Seragiotto, C. Fahringer, T. Geissler, M. Madsen, G. Moritsch, H. On using Aksum for semi-automatically searching of performance problems in parallel and distributed programs // Parallel, Distributed and Network-Based Processing, 2003. Proceedings. - 2003. - P. 385-392
 34. Parallel Computing. Numerics, Applications, and Trends // Roman Trobec, Marian Vajtersic, Peter Zinterhof / Springer, 2009, 520 p.
 35. Special section on workflow systems and applications in e-science / Z. Zhao, A. Belloum, M. Bubak // Future Generation Computer Systems, 25 (5). – 2009. – pp. 525-527.
 36. Accelerating the scientific exploration process with scientific workflows / I. Altintas [et al.] // J. Phys.: Conf. Ser. , 46(1). – 2006. – , p. 468.
 37. Taverna: lessons in creating a workflow environment for the life sciences / T. Oinn [et al.] // Concurrency and Computation: Practice and Experience, 18(10). – 2006. – pp. 1067-1100.
 38. Visual Grid workflow in Triana / I. Taylor, M. Shields, I. Wang, A. Harrison // Journal of Grid Computing, 3(3-4). – 2005. – pp. 153-169.
 39. Implementation and utilisation of a Grid-enabled problem solving environment in Matlab / M.H. Eres [et al.] // Future Generation Computer Systems, 21 (6). – 2005. – pp. 920-929.
 40. Virtual Laboratory for e-Science [http://www.vl-e.nl/frame_home.htm]
 41. A tool for building collaborative applications by invocation of Grid operations / M. Malawski, T. Bartynski, M. Bubak // Computational science - ICCS 2008, 8th International Conference, Kraków, Poland, June 23-25, 2008, Proceedings, part III. Berlin, Germany: Springer. – pp. 243-252.
 42. RegaDB: An Open Source, Community-Driven HIV Data and Analysis Management Environment / P. Libin [et al.] // Reviews in Antiretroviral Therapy (Vol. 2007-2). Fifth European HIV Drug Resistance Workshop, Cascais, Portugal, March 2007.
 43. Provenance Tracking in the ViroLab Virtual Laboratory / B. Baliś, M. Bubak, J. Wach // Lecture Notes in Computer Science, 2008, Volume 4967/2008. – pp. 381-390.
 44. GScript Editor as Part of the ViroLab Presentation Layer / W. Funika, P. Pegiel // Proceedings of Cracow Grid Workshop 2006 (CGW06). Kracow, Poland: ACC CYFRONET AGH. - pp. 320-327.

45. Virtual organization support within a grid-wide operating system / M. Coppola [et al.] // IEEE Internet Computing 12 (2). – 2008. – pp. 20-28.
46. Foster I., Kesselman C. The Grid: Blueprint for a New Computing Infrastructure. — Morgan-Kaufman, 1999.
47. Новые методы решения задач вычислительной химии в распределенных средах / В.М. Волохов, А.В. Пивушков, Н.Ф. Сурков, Д.А. Варламов, А.В. Волохов // сервис в сети Интернет: суперкомпьютерные центры и задачи: Труды Международной суперкомпьютерной конференции (20-25 сентября 2010 г., г. Новороссийск). – М.: Изд-во МГУ, 2010. – с. 181–184.
48. Об усовершенствовании сборочной технологии построения сетевой информационно-вычислительной системы поддержки инновационной деятельности / А.В. Веселов, С.В. Кратов, М.Б. Остапкевич, С.В. Пискунов // Научный сервис в сети Интернет: суперкомпьютерные центры и задачи: Труды Международной суперкомпьютерной конференции (20–25 сентября 2010 г., г. Новороссийск). – М.: Изд-во МГУ, 2010. – с.506–508.
49. Web-интегрированный исследовательский центр конструирования лекарств / В.С. Скворцов, И.В. Ромеро Рейес, В.А. Холина, В.В. Поройков, Д.С. Дружиловский, А.В. Степанчикова // Научный сервис в сети Интернет: суперкомпьютерные центры и задачи: Труды Международной суперкомпьютерной конференции (20–25 сентября 2010 г., г. Новороссийск). – М.: Изд-во МГУ, 2010. – с. 447.
50. Создание распределенных программ молекулярно-динамического моделирования с помощью библиотеки GridMD / И.В. Морозов, И.А. Валуев // Научный сервис в сети Интернет: суперкомпьютерные центры и задачи: Труды Международной суперкомпьютерной конференции (20-25 сентября 2010 г., г. Новороссийск). – М.: Изд-во МГУ, 2010. – с. 394–400.
51. Программный комплекс «Пирамида» организации параллельных вычислений с распараллеливанием по данным / А.В. Баранов, А.В. Киселёв, Е.А. Киселёв, В.В. Корнеев, Д.В. Семёнов // Научный сервис в сети Интернет: суперкомпьютерные центры и задачи: Труды Международной суперкомпьютерной конференции (20–25 сентября 2010 г., г. Новороссийск). – М.: Изд-во МГУ, 2010. – с. 299–302.
52. Прозрачная акселерация программной системы интеллектуального анализа данных / А.А. Кошулько // Научный сервис в сети Интернет: суперкомпьютерные центры и задачи: Труды Международной суперкомпьютерной конференции (20–25 сентября 2010 г., г. Новороссийск). – М.: Изд-во МГУ, 2010. – с. 313–314.
53. Программный комплекс GIMM для моделирования с помощью современных многопроцессорных систем задач механики сплошной среды / С.В. Поляков, Э.М. Кононов, О.А. Косолапов, Т.А. Кудряшова // Научный сервис в сети Интернет: суперкомпьютерные центры и

- задачи: Труды Международной суперкомпьютерной конференции (20–25 сентября 2010 г., г. Новороссийск). – М.: Изд-во МГУ, 2010. – с. 303-307.
54. A. Afanasev, I. Lazarev, A. Tarasov. MathCloud - a distributed mathematical environment // Proc. of XXI International Symposium on Nuclear Electronics & Computing. pp. 15–19, Dubna: JINR, 2008.
 55. Лазарев И.В., Сухорослов О.В. Реализация распределенных вычислительных сценариев в среде MathCloud. // Проблемы вычислений в распределенной среде / Под ред. С.В. Емельянова, А.П. Афанасьева. Труды ИСА РАН, Т. 46. – М.: КРАСАНД, 2009. – 304 с. (с. 6–23).
 56. Оптимизация распределенного имитационного эксперимента по времени и по надежности / Ермаков С.А., Замятина Е.Б., Козлов А.А. // Высокопроизводительные параллельные вычисления на кластерных системах (НПС-2010) : Материалы X Международной конференции : г. Пермь, 1–3 ноября 2010 г. / Пермский государственный технический университет. – Пермь, 2010. – с.251–260.
 57. Радченко Г.И. Грид-система CAEBeans: интеграция ресурсов инженерных пакетов в распределенные вычислительные среды // Вестник Нижегородского университета им. Н.И. Лобачевского. № 6. 2009. с. 192–202.
 58. Шамакина А.В. CAEBeans Broker: брокер ресурсов системы CAEBeans // Вестник ЮУрГУ. Серия «Математическое моделирование и программирование». 2010. № 16(192). Вып. 5.– с. 107–115.
 59. CLAVIRE: перспективная технология облачных вычислений второго поколения / Бухановский А.В. и др. // Изв. Вузов. Приборостроение, т. 54, №10, 2011 – С. 7-14.
 60. NIST.gov - Computer Security Division - Computer Security Resource Center [электронный ресурс]. Режим доступа: <http://csrc.nist.gov/groups/SNS/cloud-computing/>, свободный.
 61. Defining the Cloud Computing Framework | Cloud Computing Journal [электронный ресурс]. Режим доступа: <http://cloudcomputing.sys-con.com/node/811519>, свободный
 62. GTSI Cloud Computing Maturity Model [http://www.gtsi.com/cms/documents/White-Papers/Cloud-Computing.pdf]
 63. Twenty-One Experts Define Cloud Computing | Cloud Computing Journal [электронный ресурс]. Режим доступа: <http://cloudcomputing.sys-con.com/node/612375/>, свободный.
 64. Бухановский А.В., Ковальчук С.В., Марьин С.В. Интеллектуальные высокопроизводительные программные комплексы моделирования сложных систем: концепция, архитектура и примеры реализации // Известия высших учебных заведений. Приборостроение. – 2009. – т. 52, №10. – С. 5-24

65. Таксономия Рабочей программы по ИКТ Седьмой Рамочной программы ЕС. [<http://agora.guru.ru/display.php?conf=istok-soyuz-2009&page=item002&PHPSESSID=04b2aa32a4d9433283fd52d4b4e85de2>)]
66. ФЦП «Исследования и разработки по приоритетным направлениям развития научно-технологического комплекса России на 2007—2013 годы» [<http://www.fcpir.ru/>]