

ПАРАЛЛЕЛЬНЫЕ КОМПЬЮТЕРНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ И ВЫСОКОПРОИЗВОДИТЕЛЬНЫЕ ВЫЧИСЛЕНИЯ КАК ИННОВАЦИОННОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ НАПРАВЛЕНИЕ В ПЕРМСКОМ ГОСУДАРСТВЕННОМ УНИВЕРСИТЕТЕ

А.Г. Деменев

Введение

Современные наука и техника не могут обойтись без применения высокопроизводительных вычислительных систем, в том числе суперкомпьютеров. Поэтому требуются «элитные» специалисты, компетентные в области суперкомпьютерных технологий. Но бурное развитие техники и технологий делает вполне доступным очень широкому кругу людей то, что относительно недавно было доступно весьма ограниченному кругу пользователей суперкомпьютерных центров. Вычислительные кластеры часто объединяют в грид-сети, получая распределенные вычислительные системы суперкомпьютерной (пиковой) производительности. В компьютерной индустрии разрабатываются и производятся процессоры, содержащих не одно вычислительное ядро, а несколько или даже десятки, а то и сотни вычислительных ядер. Количество вычислительных ядер на кристалле микропроцессора будет возрастать год от года, а вычислительно сложные приложения должны эффективно использовать эту многоядерность компьютеров. Поэтому актуальны исследования новых параллельных компьютерных платформ и создание необходимого программного обеспечения. Необходимо учитывать особенности современных многоядерных архитектур при разработке новых приложений и оптимизации существующих параллельных программ.

В соответствии с вышесказанным, обществу требуются специалисты, имеющие особые компетентности:

1. формулировать математическую постановку задачи и выбирать численный метод так, чтобы был большой потенциал для распараллеливания вычислений;
2. выбирать соответствующий или конструировать новый алгоритм такой, чтобы он допускал эффективную реализацию на многоядерных вычислительных системах;
3. свободно владеть современными технологиями разработки параллельных программ.

Формирование качественно новой высокоразвитой информационно-образовательной среды, необходимой для подготовки высокопрофессиональных специалистов, обладающих качественно новым уровнем такой компетентности, стало целью инновационного образовательного направления «Параллельные компьютерные технологии и высокопроизводительные вычисления» (ПКТиВВ).

Формирование компетентностей по направлению ПКТиВВ в ПГУ до 2006 г.

До 2006 г. Пермский государственный университет имел (и имеет) коллективы исследователей значительный и успешный опыт как разработки параллельных компьютерных технологий, так и применения высокопроизводительных вычислений. После развала Советского Союза до 2006 г. формирование компетентностей, необходимых для этой деятельности формировалось в основном у преподавателей и аспирантов в ходе совместных научных исследований и научных стажировок. Не претендуя на полный охват соответствующей деятельности, далее приведу ряд характерных примеров.

В 1991-2003 гг. на кафедре математического обеспечения вычислительных систем под руководством профессора А.И. Микова, при активном участии доцента Е.Б. Замятиной велись исследования и разработки технологий моделирования параллельных вычислительных систем на основе языка TRIAD. После 2003 г. о руководством доцента Е.Б. Замятиной активно велись (и ведутся) исследования и разработки интеллектуальных технологий распределенного имитационного моделирования распределенных вычислительных систем.

В 1993-1996 гг. при участии доцента кафедры механики сплошных сред и вычислительных технологий И.И.Вертгейма на параллельном компьютере СМ-2 в Королевском технологическом институте в Стокгольме был реализован новый параллельный алгоритм быстрого преобразования Лежандра, позволивший эффективно решать задачи Бюргерсовской турбулентности, описывающей такие процессы, как развитие крупномасштабной структуры Вселенной и распространение нелинейных импульсов в средах без дисперсии.

В 1994 году кафедрой теоретической физики ПГУ и Лабораторией вычислительной гидродинамики УрО РАН совместно с Институтом вычислительной математики и математической геофизики СО РАН, Институтом механики жидкостей (Марсель, Франция) и Королевским технологическим институтом (Стокгольм, Швеция) был подготовлен и получил финансовую поддержку Европейских Комиссий в рамках Программы ITDC проект "Параллельные вычисления в механике сплошных сред" (1995-1998). В рамках этого проекта был приобретен параллельный компьютер немецкой фирмы "Parsytec", запуск которого позволил осуществлять расчеты гидродинамических задач с использованием параллельных вычислений в Перми.

В 1996-97 гг. И.И. Вертгеймом на параллельном 8-процессорном MIMD- компьютере "Parsytec Power Explorer", установленном на физическом факультете ПГУ, выполнялись расчеты термокапиллярной и термогравитационной конвективной неустойчивости в многослойных системах.

В 1998 году получил поддержку Европейских Комиссий в рамках программы INCO-COPERNICUS международный проект "Высокопроизводительные вычисления в многофазной гидромеханике: активное управление системами с поверхностями раздела жидкость-жидкость, жидкость-газ" (1998-2000). Участниками проекта с европейской стороны являлись Средиземноморский университет (Марсель, Франция), Университет Бордо (Франция), Комитет по атомной энергии (Гренобль, Франция), университет Фрайбурга (Германия) и Институт физики Академии наук Латвии; с российской стороны Институт механики сплошных сред УрО РАН, Пермский государственный университет и Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН.

В 1998 г. И.И.Вертгеймом в сотрудничестве с исследователями из Миланского политехнического института был разработан новый алгоритм, основанный на комбинации спектральных и конечноразностных методов, для численного решения уравнений Навье-Стокса при турбулентных режимах течений в каналах, предназначенный для реализации на параллельных MIMD-компьютерах. В 1999-2007 гг. И.И.Вертгеймом совместно с В.Г.Захаровым разрабатывались численные методы, использующие вейвлет-преобразования для решения и анализа нелинейных уравнений гидродинамики, весьма перспективные для реализации параллельных алгоритмов.

В 2000 году Пермским государственным университетом, Институтом механики сплошных сред УрО РАН, Нижегородским государственным техническим университетом, Новосибирским государственным техническим университетом, Институтом вычислительной математики и математической геофизики СО РАН, французскими учеными из университетов Марселя, Тулузы, Лиона и Авиньона (Франция) и немецкими учеными из университетов Берлина, Карлсруэ, Потсдама, Фрайбурга и Фрайберга (Германия) был представлен на рассмотрение Трехсторонней Министерской комиссии проект создания Российско-Германо-Французской научно-образовательной сети "Сложные жидкости. Моделирование и управление процессами". Проект был отобран для реализации в рамках Программы "Германо-Российско-Французский университет" (2000-2004). В рамках этого проекта аспиранты кафедры теоретической физики ПГУ и Лаборатории вычислительной гидродинамики ежегодно проходили стажировки во Франции, где в Национальном Вычислительном Центре (CINES, Montpellier) прослушали курсы и прошли практику по использованию параллельных вычислений на суперкомпьютерах (IBM кластер "Regatta" с 32 узлами, включающими 512 процессоров Power4/1,3 Ghz).

В 2001 году получил поддержку Международного научного фонда ИНТАС проект «Новые способы управления течениями гидродинамических систем с поверхностями раздела. Приложения к выращиванию кристаллов в условиях невесомости или земных условиях» (2001-2003). В рамках этого проекта, в сотрудничестве с группами из Москвы и Новосибирска и зарубежными учеными из Франции и Германии проводилось прямое численное моделирование поведения систем с деформируемыми поверхностями раздела, течений и теплообмена при наличии вибраций и электромагнитных полей. Расчеты проводились с применением параллельных вычислительных технологий. Численные расчеты, проведенные в рамках проектов INCO-COPERNICUS и ИНТАС, послужили основой при подготовке и интерпретации результатов международных космических экспериментов по физике жидкости и материаловедению.

В 2001 году Министерство образования РФ и Американский фонд гражданских исследований и развития объявили совместную программу «Фундаментальные исследования и высшее образование». В рамках объявленной программы в РФ в течение 2001-2003 годов на конкурсной основе было создано 16 научно-образовательных центров (НОЦ). Один из этих центров НОЦ-009 «Неравновесные переходы в сплошных средах» был создан в 2002 году в Перми на базе Пермского государственного университета и Института механики сплошных сред УрО РАН. Центр создан на основе двух научных школ – Пермской гидродинамической школы и Школы по механике деформируемого твердого тела. Участниками Центра являются ученые и преподаватели всех кафедр физического и механико-математического факультетов и кафедры метеорологии и охраны атмосферы Пермского государственного университета и Института механики сплошных сред УрО РАН. В 2003 году НОЦ ПГУ выиграл дополнительный грант CRDF на приобретение уникального оборудования. На средства этого гранта был приобретен высокопроизводительный вычислительный кластер HP LC300 Series, являющийся разработкой фирмы Hewlett Packard. Конфигурация кластера: управляющий узел HP ProLiant DL145 1xOpteron 244/ 2 Gb RAM/HDD ATA 40 Gb; файловый сервер HP ProLiant DL380G3 1xXeon 3,06/1 Gb RAM/ Raid5 HDD SCSI 3 x73Gb; 16 вычислительных узлов HP ProLiant DL145 2xOpteron 244/3Gb RAM/HDD ATA 40 Gb; вычислительная сеть Myrinet; управляющая сеть.

В 2002-2003 гг. в рамках научной стажировки при кафедре теоретической физики ПГУ А.Г. Деменев реализовал исследовательские проекты "Развитие и применение параллельных методов компьютерного моделирования многомасштабной нелинейной динамики спиновых систем" (при финансовой поддержке администрации Пермского госпедуниверситета) и «Развитие и применение параллельных методов для вычисления временных корреляционных функций неравновесных процессов в твердых растворах наномангнитов» (грант 03-02н-006и НОЦ ПГУ).

Формирование компетентностей по направлению ПКТиВВ в ПГУ после 2006 г.

После 2006 года формирование компетентностей, необходимых для этой деятельности продолжало формироваться у преподавателей и аспирантов в ходе совместных научных исследований и научных стажировок. На механико-математическом факультете ПГУ прикладными информатиками активно ведутся исследования и разработки в области распределенных вычислительных систем. На механико-математическом факультете ПГУ механиками параллельные вычисления используются в основном для решения задач деформируемого твердого тела. На физическом факультете ПГУ параллельные вычисления используются в основном при решении трехмерных задач конвекции с учетом влияния осложняющих факторов (вращение, вибрации, учет термодиффузии в бинарных смесях), моделировании воздействия вибраций и электромагнитных полей на поведение многофазных сред и на процессы выращивания кристаллов методами Бриджмена, Чохральского и плавающей зоны. На химическом факультете параллельные вычисления используются в основном при решении задач квантовой химии.

Проблему формирования таких компетентностей у выпускников Пермского государственного университета мы решали в 2006-2007 гг. в рамках Инновационной образовательной программы ПГУ (приоритетный национальный проект "Образование"). В 2006 в рамках Национального проекта «Образование» кафедра теоретической физики приобрела высокопроизводительный вычислительный кластер с пиковой производительностью 281.6 Gflop/s. Конфигурация кластера: Subcontrol Etegro Hyperion RS150SA – 2xAMD Opteron 248/2 Gb/HDD SATA 160GB/DVD-Rom; файловый сервер Etegro Hyperion RS250SA - 2xAMD Opteron 248/4 Gb/ RAID5 HDD SCSI 6x73GB/DVD-Rom; вычислительные узлы Etegro Hyperion RS150SA – 2xAMD Opteron 275/4 Gb/HDD SATA 160GB/DVD-Rom. Кафедрами участвующими в деятельности НОЦ ПГУ приобретено несколько десятков персональных компьютеров с двухъядерными процессорами Intel, связанных локальной сетью GigabitEthernet., которые могут использоваться для организации распределенных вычислений. Приобретено 24 комплекта лицензий Intel на новейшие средства разработки параллельных программ под Windows.

Чтобы профессорско-преподавательский состав (ППС) университета мог успешно работать в данном направлении, необходимо было активно повышать его квалификацию. По данному направлению нами были разработаны учебные программы повышения квалификации ППС. Содержание учебной программы «Параллельные вычисления» было в основном ориентировано на эффективное использование и программирование многопроцессорных вычислительных систем (МВС) с распределенной памятью, в первую очередь — высокопроизводительных компьютерных кластеров. Содержание учебной программы «Параллельное программирование» было в основном ориентировано на эффективное использование и программирование МВС с разделяемой памятью, в первую очередь — компьютеров с многоядерными процессорами. Содержание учебной программы «Параллельные вычисления в механике сплошных сред» было в основном ориентировано на эффективное использование кластеров при моделировании с помощью программного обеспечения компании Ansys. Профессорско-преподавательский состав активно повышал квалификацию в ведущих российских и зарубежных научных и образовательных центрах, в том числе при участии НОЦ ПГУ несколько десятков работников ПГУ повысили квалификацию на курсах: «Параллельные вычисления», «Параллельное программирование», «Параллельные вычисления в механике сплошных сред».

Для реализации основной цели данного направления в университете были разработаны и внедрены новые учебные дисциплины, необходимые для реализации и обновления специализаций, магистерских и аспирантских программ в области компьютерных специальностей, направлений и наук. Для программно-технической поддержки новых учебных дисциплин были приобретены компьютерные классы с двухъядерными процессорами и новейшие версии средств разработки параллельного ПО. Под преподавание в ПГУ курсов, разработанных автором доклада, корпорация Intel бесплатно предоставляет ежегодно до ста единиц лицензий на новейшие версии средств разработки программного обеспечения. В рамках данного направления при выполнении курсовых и выпускных работ студентами на кафедре прикладной математики проведен ряд исследований, предусматривающих разработку параллельных программ, оценку производительности и оптимизацию на компьютерах с двухъядерными процессорами Intel.

Научно-образовательный центр «Параллельные и распределенные вычисления» (ПиРВ) ПГУ был образован в 2009 г., фактически «отпочковавшись» от существующего с 2002 года Научно-образовательного центра ПГУ (созданного в рамках совместной программы «Фундаментальные исследования и высшее образование»). Т.е. исследования ряда научно-образовательных групп ПГУ в области распределенных вычислительных систем ранее велись в рамках НОЦ «Неравновесные переходы в сплошных средах» ПГУ, а сейчас — в рамках НОЦ ПиРВ, существенно расширив круг участников исследований.

Основными целями деятельности НОЦ ПиРВ являются:

- обеспечение высокого уровня подготовки, переподготовки и повышения квалификации специалистов, в том числе высшей квалификации, по приоритетным и перспективным направлениям науки и технологий, используя новейшие результаты исследований и разработок в области параллельных и распределенных вычислений;

- повышение эффективности научных исследований и инновационной деятельности путем объединения усилий и ресурсов с организациями (ВУЗами, институтами, предприятиями), подписавшими договор о таком сотрудничестве с Университетом.

За последние три года для студентов были разработаны и внедрены новые учебные курсы по проблематике НОЦ ПиРВ, в том числе: «Анализ параллельных вычислительных алгоритмов»; «Параллельные вычислительные системы»; «Программирование для параллельных вычислительных систем»; «Параллельное программирование»; «Распределенные алгоритмы»; «Современные теории имитационного моделирования»; «Параллельные архитектуры»; «Метакомпьютинг»; «Современные методы разработки программного обеспечения»; «Параллельные вычисления в механике сплошных сред»; «Современные проблемы прикладной математики и информатики»; «Интеллектуальные информационные системы»; «Проблемно-ориентированные пакеты прикладных программ»; «Криптографические протоколы»; «Криптографические методы защиты информации»; «Проектирование информационных систем». Для абсолютного большинства этих курсов были написаны учебно-методические пособия, авторы которых — ведущие участники коллектива НОЦ ПиРВ ПГУ.

Автором данной статьи лично было разработано четыре новые учебные дисциплины и три из них были внедрены в учебный процесс на механико-математическом факультете Пермского государственного университета с 2006-2007 учебного года.

- Дисциплина «Анализ параллельных вычислительных алгоритмов» [1]. Цель — ознакомить студентов с основами моделирования параллельных вычислений и методами анализа параллельных алгоритмов, научить оцениванию эффективности параллельного алгоритма и выбору оптимальной схемы решения вычислительно трудоемких задач.
- Дисциплина «Параллельные вычислительные системы» [2]. Цель – познакомить студентов с параллельными вычислительными системами, заложить основы эффективного использования таких систем для решения сложных научно-технических проблем методами компьютерного моделирования.
- Дисциплины «Программирование для параллельных вычислительных систем»[3]. Цель – познакомить студентов с основами разработки ПО для параллельных вычислительных систем, заложить основы эффективного использования таких систем для решения сложных научно-технических проблем методами компьютерного моделирования.

Форма обучения — сочетание аудиторной и самостоятельной работы студентов. Самостоятельная работа студентов предусматривает использование средств системы дистанционно-го обучения, а также активное использование Интернет-ресурсов в качестве источника информации. Лабораторный практикум предусматривает проведение микроисследований в составе команды из двух-трех студентов.

В настоящее время ведется разработка на основе современных информационно-коммуникационных технологий системы создания и использования информационных ресурсов для подготовки специалистов (включая бакалавров и магистров) в области параллельных и распределенных вычислений.

Заключение

Благодаря инновационной образовательной деятельности, которая финансировалась в рамках инновационной образовательной программы Пермского государственного университета «Формирование информационно-коммуникационной компетентности выпускников классического университета в соответствии с потребностями информационного общества» (приоритетный национальный проект «Образование») мы можем выпускать специалистов, обладающих достаточно высоким уровнем компетентностей в области параллельных компьютерных технологий и высокопроизводительные вычислений.

Создание в 2009 г. Научно-образовательного центра «Параллельные и распределенные вычисления» ПГУ нацелено на обеспечение еще более высокого уровня подготовки, переподготовки и повышения квалификации специалистов в этой области.

Данная работа проводилась при частичной финансовой поддержке проекта «Развитие моделей, методов и технологий создания информационных ресурсов для подготовки специалистов в сфере информатики и информационных технологий в системе высшего профессионального образования» в рамках аналитической ведомственной целевой программы «Развитие научного потенциала высшей школы (2009-2010 годы).

ЛИТЕРАТУРА:

1. А.Г. Деменев. Анализ параллельных вычислительных алгоритмов: учеб.-метод. пособие/ А.Г. Деменев; Перм. ун-т. — Пермь, 2007.
2. А.Г. Деменев. Параллельные вычислительные системы: учеб.-метод. пособие/ А.Г. Деменев; Перм. ун-т. — Пермь, 2007.
3. А.Г. Деменев. Программирование для параллельных вычислительных систем: учеб.-метод. пособие/ А.Г. Деменев; Перм. ун-т. — Пермь, 2007.