

ИННОВАЦИОННО-ИНТЕГРАЦИОННАЯ ПОЛИТИКА СУПЕРКОМПЬЮТЕРНОГО ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОГО ЦЕНТРА ИММ УРО РАН

М.Л. Гольдштейн, А.В. Созыкин

Введение

Решение фундаментальных и прикладных ключевых задач, обуславливающих научно-технический прогресс в экономике и бизнесе, и ведущих к получению новых знаний и информации, требует новых всё более производительных вычислительных систем - суперкомпьютеров. В УрО РАН задачей обеспечения научно-образовательного сообщества Уральского региона современным вычислительным инструментарием занимается Суперкомпьютерный вычислительный центр (СКЦ) при Институте математики и механики УрО РАН (ИММ), который является головной организацией по созданию и развитию вычислительных ресурсов в УрО РАН.

История СКЦ

История СКЦ начинается с апреля 1961 г., когда было открыто Свердловское отделение Математического института им. Стеклова, при котором организован Вычислительный центр (ВЦ) и запущена в эксплуатацию первая ЭВМ "Урал". В 1963 г. были пущены в эксплуатацию машины М-20 и БЭСМ-2, в 1964 г. - М-220, в 1970 г. - М-220М, в 1971 г. появилась первая машина БЭСМ-6, а в 1977 г. - вторая БЭСМ-6. В 1980 г. было принято решение о дальнейшем техническом оснащении ВЦ ЭВМ линий БЭСМ-Эльбрус и ЕС ЭВМ. В 1993 г. ВЦ взял направление на развитие вычислительных систем с массовым параллелизмом на базе отечественных ЭВМ серии МВС (МВС-100 - 1994-1997 гг., МВС-1000/16, МВС-1000/17ЕК - 2000-2003 гг., МВС1000/2ББ - 2005 г.).

С 2006г. был взят курс на самостоятельные разработки вычислительных систем, как оптимальный по временным и материальным затратам. В качестве первого вычислителя специалистами СКЦ в 2007 г. был разработан масштабируемый вычислительный комплекс кластерной архитектуры на базе двухъядерных микропроцессоров Opteron 285 серии с пиковой производительностью 0,7 Тфлопс.

Таким образом, в СКЦ накоплен значительный опыт разработки, эксплуатации и практического использования высокопроизводительной вычислительной техники.

Современное состояние СКЦ

В настоящее время в состав СКЦ входят вычислительные комплексы:

- "УРАН" на базе четырехъядерных микропроцессоров Intel Xeon серии 5450, пиковая производительность 19,5 Тфлопс, 2009 г.
- UM/Opteron на базе двухъядерных микропроцессоров AMD Opteron 285 серии, пиковая производительность 0,7 Тфлопс, 2007 г.
- Fujitsu-Siemens Prime Power-850, пиковая производительность 48 Гфлопс, 2003 г.
- МВС-1000/17К, пиковая производительность 160 Гфлопс, 2003 г. (используется только для учебных целей)

За счет создания кластера "УРАН" в 2009 г. СКЦ удалось на порядок увеличить производительность наиболее мощной вычислительной системы, как показано на рис. 1.

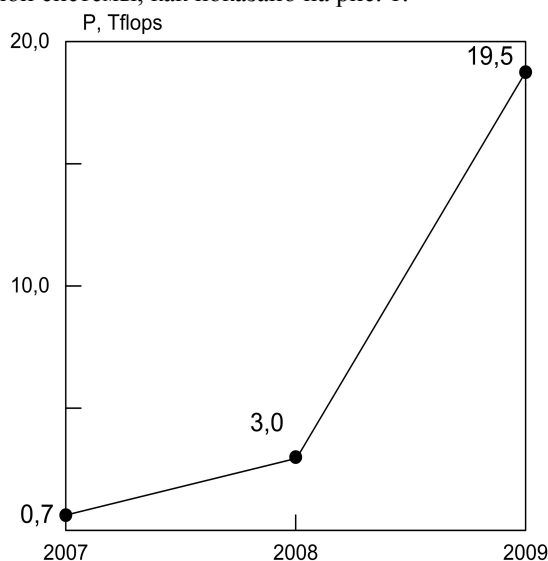


Рис. 1. График роста пиковой производительности (P) наиболее мощной вычислительной системы СКЦ

Несмотря на наличие высокопроизводительного кластера "УРАН", менее мощные вычислительные системы также активно используются. Кластер UM/Orteron применяется для расчета небольших задач (до 100 процессорных ядер), SMP-сервер Prime Power-850 для более эффективного решения задач с малоразмерными межпроцессорными обменами, а система МВС-1000/17К – для обучения студентов.

Вычислительные ресурсы доступны пользователям через региональную сеть УрО РАН по каналам Интернет. На сайте <http://parallel.uran.ru> расположен Консультационно-методический материал по работе с высокопроизводительными вычислительными системами.

Суперкомпьютер "УРАН"

Суперкомпьютер "УРАН" в настоящее время является самым производительным вычислительным ресурсом СКЦ УрО РАН. Его пиковая производительность составляет 19,5 Тфлопс, производительность на тесте Linpack 14,621 Тфлопс, в 12-ой редакции списка ТОП-50 суперкомпьютер занимает 10 место.

Кластер "УРАН" построен на базе аппаратной платформы Hewlett-Packard BladeSystem, и включает 8 базовых блоков HP BladeSystem c7000 с серверами HP Proliant BL 460 (48 шт.) и HP Proliant BL 2x220 (80 шт). Всего кластер содержит 416 четырехядерных процессора Intel Xeon E5450 3,0 ГГц, 3584 ГБ оперативной памяти (192 узла с 2 ГБ памяти на вычислительное ядро и 16 узлов с 4 ГБ памяти на вычислительное ядро).

В качестве коммуникационной счетной среды используется сеть Infiniband 4x DDR на основе коммутатора QLogic 9120 и встроенных в базовые блоки коммутаторов HP Switch Module for HP c-Class BladeSystem. Коммуникационная среда ввода/вывода построена по технологии Gigabit Ethernet на основе коммутатора HP ProCurve 4208v1. Сеть управления основывается на технологии HP Integrated Lights-Out (iLo).

Конструктивно кластер "УРАН" состоит из 3-х стандартных серверных шкафов 19". Размещение кластера "УРАН" в машинном зале ИММ УрО РАН показано на рис. 2.



Рис.2. Размещение кластера "УРАН" в машинном зале ИММ УрО РАН

Системное программное обеспечение кластера "УРАН" включает:

- ОС RedHat Linux 5 и Windows HPC Server 2008 (с возможностью выбора ОС при загрузке);
- Операционную среду параллельного программирования MPI;
- Систему запуска задач, разработанную совместно ИПМ РАН и ИММ УрО РАН;
- Систему мониторинга Ganglia.

Для математических расчетов на кластере используется прикладное программное обеспечение:

- MATLAB Distributed Computing Engine;
- ANSYS CFD.

Примеры задач, решаемых с применением ресурсов СКЦ

"Исследование алгоритмов оптимального управления ракетой носителем класса СОЮЗ-2" (ИММ УрО РАН + НПОА им. акад. Н.А.Семихатова). Задача оптимального вывода полезной нагрузки на заданную

орбиту ракетой-носителем (РН) класса Союз-2 начиная от момента старта до выхода на орбиту. Новизна постановки задачи в 2009 г. заключалась в наличии дополнительного требования вывода РН не только на заданную орбиту, но в заданную точку орбиты, а также в оценке множества достижимых точек орбиты. На суперкомпьютере "УРАН" было проведено более 100 миллионов виртуальных пусков, имитирующих вывод полезной нагрузки на эллиптическую орбиту. В итоге разработана методика оценки эффективности управления и на её основе созданы алгоритмы формирования оптимального управления, удовлетворяющего всем ограничениям задачи, в том числе ограничениям на районы падения отделяемых частей. Данное исследование выполнялось по заказу НПОА им. акад. Н.А.Семихатова (г. Екатеринбург), которое является разработчиком системы управления РН Союз-2. Результаты исследования получили высокую оценку заказчика.

"Моделирование внутренней динамики Земли и других планет" (ИММ УрО РАН + Международный институт теории прогноза землетрясений и математической геофизики РАН). Моделирование внутренней динамики Земли и других планет с целью изучения истории и перспектив их развития, определения их глобальных свойств в прошлом и будущем (теплового потенциала, сейсмичности и т.д.). С практической точки зрения решение данной задачи на суперкомпьютере "УРАН" может открыть новые горизонты в поисках полезных ископаемых, генерация которых тесно связана с эволюцией теплового поля Земли. В случае решения такой задачи Россия будет первой страной в мире, которая осуществит грандиозный научный проект по изучению эволюции земных недр. Крайняя необходимость скорейшего начала такого проекта заключается в том, что несколько крупнейших мировых научных центров (e.g., Californian Technological Institute) нацелены на решение такой задачи с использованием российской методологии, разработанной в ИММ УрО РАН и МИТП РАН.

"Структурный анализ изображений объектов на космических снимках земной поверхности" (ИММ УрО РАН). Задачи распознавания образов, обработки данных дистанционного зондирования земной поверхности. Суперкомпьютерная обработка массивного потока данных космической съемки с целью:

- Создания и обновления электронных карт местности.
- Оперативного экологического мониторинга окружающей среды.
- Прогноза техногенных катастроф.
- Оценки сейсмической опасности.

Целью работы было создание эффективных методов автоматической интерпретации данных дистанционного зондирования земной поверхности космическими аппаратами. Эти методы предназначены для решения задач обнаружения на космоснимках изображений линейных и площадных объектов и оперативного мониторинга их изменений. Разработаны математические модели для указанных задач, в которых существенно учитываются специфические для рассматриваемых типов объектов морфологические и текстурные свойства их изображений. Построен эффективный численный метод ее приближенного решения, основанный на последовательной минимизации оптимизируемых критериев. Другая модель описывает морфологическую инвариантность изображений объектов относительно широкого класса яркостных преобразований изображений. Алгоритмы реализованы в программном комплексе автоматизированного дешифрирования космических снимков "ДЕКОС". Разработанные программные средства получили положительную экспертную оценку таких государственных предприятий как ФГУП "Госцентр "Природа" (г. Москва) и ФГУП "УралГеоИнформ" (г. Екатеринбург).

Создание математической модели сердца (Институт иммунологии и физиологии УрО РАН, ИММ, Институт механики сплошных сред УрО РАН). В 2009 г. начаты совместные работы по созданию математической модели сердца, отличающейся от существующих применением уникальной модели сократительного процесса мышечных волокон. Рассматриваются проблемы возбуждения и сокращения сердечной мышцы, построения, верификации и компьютерной реализации подобных моделей. Ее использование в вычислительном эксперименте позволит решить целый ряд проблем актуальных для современной кардиологии.

Моделирование газо-гидродинамических процессов в двигателях (ИМСС УрО РАН). Проведение распределенного натурного эксперимента PIV [1] с применением суперкомпьютера и высокоскоростной сети с целью моделирование течения газа в реактивных двигателях. Математическое моделирование течения газа в реактивных двигателях позволяет выявлять патологические эффекты течений (вихревые структуры), избавляться от них, изменяя конструкцию двигателей. Для оперативной обработки непрерывного потока изображений, снимаемого с действующих экспериментальных установок, необходим суперкомпьютер.

Участие в единых информационно-вычислительных пространствах

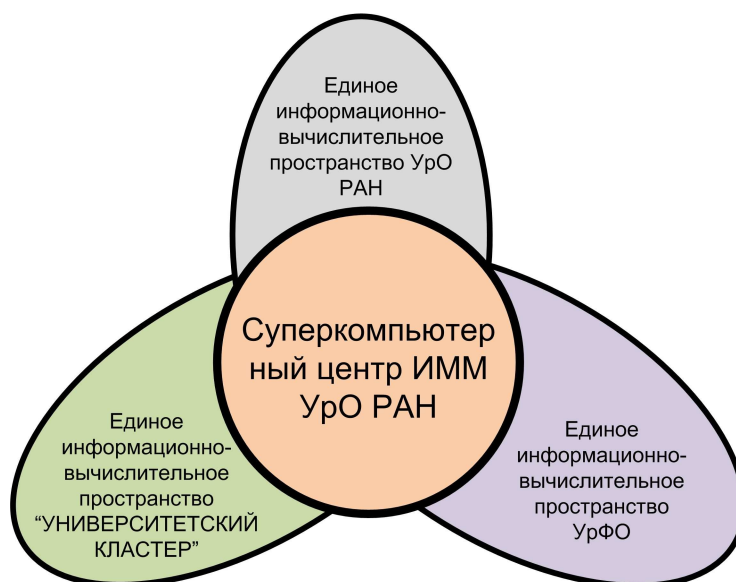


Рис. 3. Вхождение СКЦ в единые информационно-вычислительные пространства

В целях повышения доступности вычислительных ресурсов, СКЦ участвует в нескольких проектах по созданию единого информационно-вычислительного пространства (рис. 3):

- Единое информационно-вычислительное пространство УрО РАН. СКЦ – главный ресурсный центр, пользователи: научные учреждения УрО РАН ВУЗы, в гг. Екатеринбурге, Перми, Ижевске, Челябинске, Сыктывкаре. Статус – существует и действует.
- Единое информационно-вычислительное пространство Уральского Федерального округа. СКЦ - один из четырех главных ресурсных центров, пользователи: научные организации, ВУЗы, промышленные предприятия УрФО (рис. 4.). Статус - утверждены Концепция, составы координационного совета, научно-технического совета, план работ.
- "Университетский кластер" (СКЦ – один из многих ресурсных центров, пользователи: 48 университетов и научных институтов по всей стране) [2]. Статус - подписано соглашение о сотрудничестве и утверждено координационным советом.

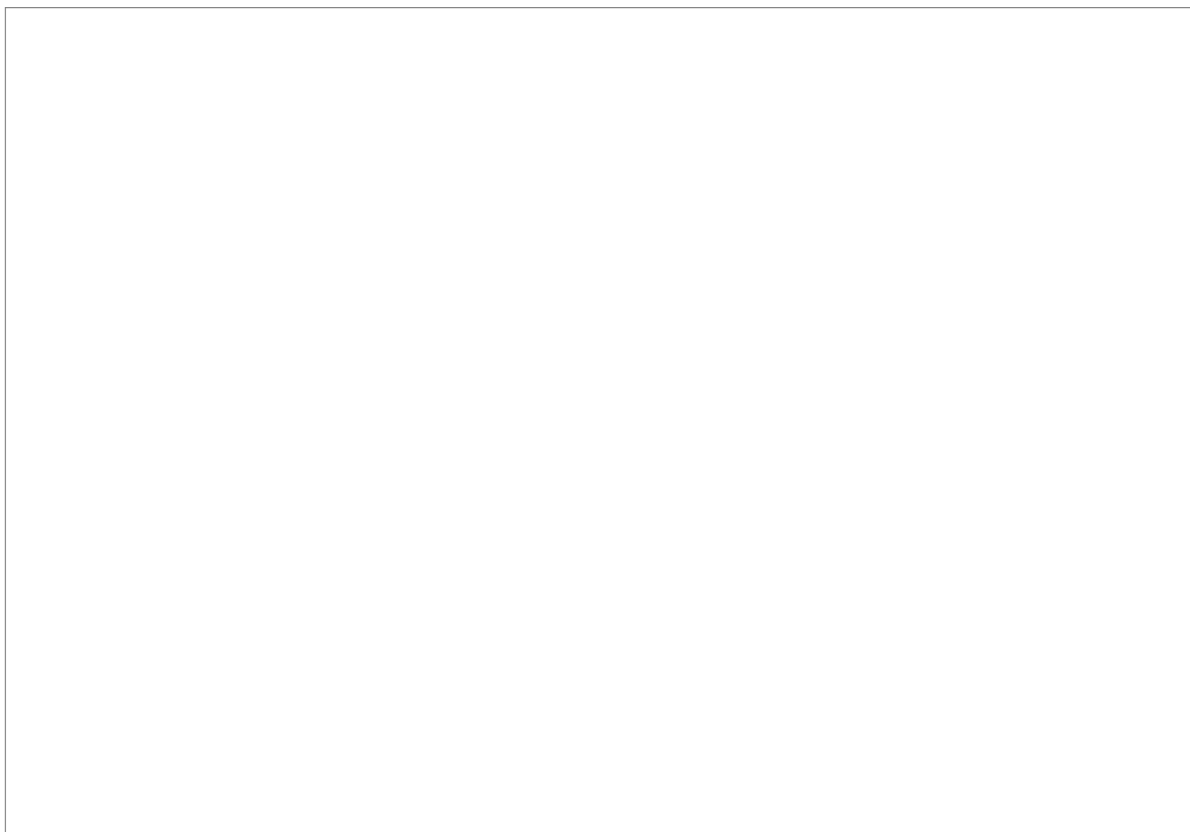


Рис. 4. Схема единого информационно-вычислительного пространства Уральского Федерального округа

Учебная работа

Большое внимание в СКЦ уделяется учебной работе со студентами. Для этого в 1998 г. была создана кафедра "Высокопроизводительные компьютерные технологии", являющаяся структурным подразделением в Уральском Государственном университете (УрГУ) и в ИММ. Кафедра создана для совершенствования профессиональной подготовки студентов УрГУ по специальностям 01.01.02, 01.01.10, 05.13.11 с целью быстрой адаптации их к условиям будущей деятельности и подготовки кадров для работы в научных подразделениях УрО РАН.

Для проведения практических занятий и НИРС сформирован учебно-исследовательский класс-кластер. Оборудование класса включает Linux – и Windows – вычислительные кластеры, связанные выделенной локальной сетью с СКЦ, ряд уникальных лабораторно-исследовательских стендов и подсистему интеллектуального сопровождения в виде интеллектуального системного подсказчика на основе тезаурусной системы знаний.

Выпускники кафедры получают реальные навыки разработки параллельных алгоритмов и программ для решения крупномасштабных вычислительных задач.

Интеграция УрО РАН, УрФО и УрФУ

В целях интенсификации суперкомпьютерных вычислений и оптимального расходования бюджетных средств на развитие суперкомпьютерных технологий в Уральском регионе, Губернатором и правительством Свердловской области, полномочным представителем Президента РФ по УрФО уделяется серьезное внимание интеграции научной и образовательной деятельности УрО РАН и вновь созданного Уральского Федерального Университета (УрФУ). Предлагается организовать совместное использование и развитие СКЦ с установкой терминальных классов на площадях УрФУ. Также рассматривается вопрос об интеграции финансовых, научных и технических усилий УрО и УрФУ, направленных на развитие совместной кафедры Уральского государственного Университета – ИММ УрО РАН "Высокопроизводительные компьютерные технологии" с целью подготовки специалистов для науки и промышленности. Цель интеграции усилить базовую кафедру, осуществляющую подготовку специалистов в области параллельных вычислений на суперкомпьютерах. Для чего предлагается:

- увеличить количество направлений подготовки: инженеры, постановщики задач, системные и прикладные программисты;
- предусмотреть подготовку профессорско-преподавательского состава;
- увеличить количество ставок преподавателей;

- увеличить количество специализированных учебных классов в ИММ УрО РАН и вновь организовать в УрФУ;
- разработать новые спецкурсы и магистерские программы.

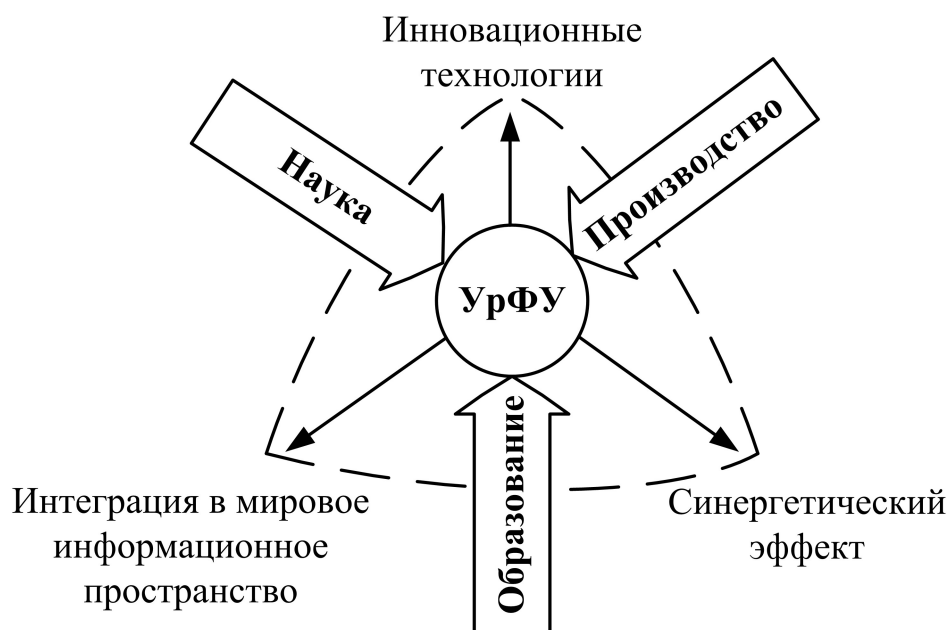


Рис. 5. Интеграция науки, образования и производства на базе УрФУ

Предлагаемые меры по интеграции позволят объединить финансовые, научные и технические усилия на развитие СКЦ в интересах науки, образования, промышленности, создания новых технологий, расширения инновационного рынка, активизации экономического развития Уральского региона и повышения его конкурентоспособности в России и за рубежом (рис.5).

Направления дальнейшего развития

В дальнейшем для обеспечения научно-образовательного сообщества Уральского региона вычислительным инструментарием мирового уровня, отвечающим актуальным потребностям науки, образования и практики планируется:

- Развитие вычислительного ресурса, обеспечивающее присутствие в десятке самых мощных суперкомпьютеров СНГ TOP-50.
- Создание вычислительного ресурса, входящего в список самых мощных суперкомпьютеров в мире TOP-500.
- Развитие вычислительного ресурса, обеспечивающее уверенное и гарантированное пребывание в TOP-500.
- Структуризация и упорядочивание сервисов единых вычислительно-информационных пространств (в первую очередь УрО РАН и УрФО);
- Вхождение в международную Grid-систему в качестве ресурсного центра по обработке и хранению больших объемов и массивов данных со скоростями обмена между РЦ в десятки гигабит.

ЛИТЕРАТУРА:

1. Р.А. Степанов, А.Г.Масич, Г.Ф.Масич. Инициативный проект "Распределенный PIV" // Сборник трудов Всероссийской конференции "Научный сервис в сети Интернет: масштабируемость, параллельность, эффективность". (г.Новороссийск, 21 - 26 сентября 2009 г.) – М.: Изд-во МГУ, 2009. С. 360-363.
2. А.И. Аветисян, С.С. Гайсарян, О.И. Самоваров. "Университетский кластер" - инфраструктура исследований, разработок и образования в области параллельных и распределенных вычислений // Сборник трудов Всероссийской конференции "Научный сервис в сети Интернет: масштабируемость, параллельность, эффективность". (г.Новороссийск, 21 - 26 сентября 2009 г.) – М.: Изд-во МГУ, 2009. С. 360-363.