

© 2012 г. Г.В. СЕКРИЕРУ, канд. физ.-мат. наук
П.П. БОГАТЕНКОВ, канд. техн. наук
(Институт Математики и Информатики АНМ, Кишинев, Молдова),
Б.П. РЫБАКИН, докт. физ.-мат. наук
(МГУ им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия)
Н.П. ИЛЬЮХА
(Ассоциация RENAM, Кишинев, Молдова)

РАЗВИТИЕ ВЫСОКОПРОИЗВОДИТЕЛЬНОЙ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ ИНФРАСТРУКТУРЫ ДЛЯ НАУЧНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ В МОЛДОВЕ¹

Доклад посвящен вопросам применения высокопроизводительных вычислений и разработке суперкомпьютерных приложений в Молдове. Работы проводятся в рамках регионального сотрудничества в области развития НРС вычислений, поддержанного Европейским проектом HP-SEE и направленного на преодоление цифрового разрыва и стимулирования исследований. Изложены основные этапы реализации компьютерной инфраструктуры, приведены перспективные направления использования высокопроизводительных вычислений и некоторые результаты решения конкретных задач.

**DEVELOPMENT OF HIGH PERFORMANCE COMPUTING
INFRASTRUCTURE FOR RESEARCH IN MOLDOVA** / G.V. Secrieru,
P.P. Bogatencov (Institute of Mathematics and Computer Science of
ASM, str. Academiei, 5, Chisinau MD 2028, Moldova, E-mail: secrieru@renam.md, bogatencov@renam.md), B.P. Rybakin (M.V. Lomonosov Moscow State University, Moscow 119991, Russia, E-mail: rybakin@mail.ru), N.P. Iliuha (Research and Educational Networking Association of Moldova-RENAM, str. Academiei, 5, Chisinau MD 2028, Moldova, E-mail: nick@renam.md) The report is devoted to the using High-Performance Computing (HPC) resources and supercomputing applications development in Moldova. The works are stimulated by an important factor of regional cooperation in the field of HPC supported by European project HP-SEE having the aim to bridge the digital divide and promote joint research. Described the main stages of the HPC infrastructure implementation, provided perspective directions of HPC resources utilization and some results of solving of specific tasks.

¹ Работа выполнена при поддержке проекта Европейской Комиссии «High-Performance Computing Infrastructure for South East Europe's Research Communities (HP-SEE)» (грант 261499).

1. Введение

Развитие и широкое распространение суперкомпьютерных вычислительных средств и компьютерных сетей является характерной особенностью современных подходов для решения сложных научно-технических задач и создания технологий распределенной обработки больших объемов информации. В совокупности они позволяют сформировать высокопроизводительные параллельные вычислительные системы (ПВС), которые могут быть охарактеризованы как стратегические ресурсы каждого современного государства. Определенным образом это свидетельствует об актуальности исследований в области технологий построения высокопроизводительных вычислительных сред и распределенных систем. Важная особенность этих систем состоит в организации доступа к удаленным вычислительным средствам и обеспечении их совместного использования.

Переход от традиционной науки к e-Science обусловлен все возрастающими потребностями для сравнения теоретических, физических и математических моделей с экспериментальными результатами. Платформа e-Science включает в себя вычислительную компоненту, которая определяет требования к вычислительным ресурсам для обработки больших объемов данных, для моделирования и решения сложных, ресурсоемких задач – моделирования структур различных твердых тел, задач газодинамики, моделирования наноструктур и других. Математическое моделирование формирует теоретические и прикладные основы для описания и изучения поведения сложных научно-технических и производственных систем. Экспериментальная наука использует более сложные инструменты, чтобы сделать точные измерения, а численное моделирование процессов становится все более адекватным. В этом контексте роль высокопроизводительных вычислений (HPC - High-Performance Computing) и распределенных вычислительных сред принципиально возрастает в современных научных исследованиях и значительно определяет уровень развития научного потенциала общества.

Развитие систем высокопроизводительных вычислений обусловлено широкими перспективами их применения в науке, образовании и в других научно-технических и практических областях. Главным образом эти системы предназначены для решения сложных научных, производственных и инженерных задач, которые не могут быть решены в разумные сроки на традиционных однопроцессорных установках. Владение навыками разработки алгоритмов и создания приложений для таких систем, которые предлагают различные сервисы и всевозрастающие объемы вычислительных ресурсов, является важнейшим фактором, определяющим прогресс во многих областях, в которых возникают потребности в высокопроизводительных вычислениях и обработке больших объемов данных.

В работе представлена концепция развития и текущее состояние региональной вычислительной инфраструктуры для разработки и выполнения параллельных приложений. Изложены этапы реализации проекта по созданию системы, приведены перспективные направления использования высокопроизводительных вычислений и некоторые результаты решения конкретных задач.

В качестве пилотного приложения рассматривается задача компьютерного моделирования взрыва сверхновой. Процесс коллапса звезды описывается системой уравнений гравитационной газовой динамики. В этих уравнениях значение гравитационного потенциала определяется из уравнения Пуассона.

2. Региональная HPC инфраструктура

Развитие ресурсов HPC и современных технологий открывает принципиально новые возможности для исследователей по организации сервисов, математическому моделированию и разработке конкретных приложений. Воплощение в жизнь этой идеи связано с большими инвестициями и поэтому особое внимание уделяется запуску крупных международных инициатив. В последние годы эти инициативы направлены на создание суперкомпьютерных центров и их интеграции в единую европейскую инфраструктуру HPC. В настоящее время координация деятельности в этой области организована в рамках крупного европейского проекта PRACE (Partnership for Advance Computing in Europe - партнерство для перспективных вычислительных систем в Европе). PRACE инициатива является не просто проектом, она также представляет собой общеевропейское объединение, деятельность которого направлено на создание уникальной компьютерной экосистемы, которая объединит поставщиков вычислительных ресурсов и различных сообществ пользователей - научных учреждений, учебных заведений, крупных предприятий и других организаций. Создание инфраструктуры HPC опирается на гибкость предоставления ресурсов и сервисов, что в коечном счете обеспечивает снижение стоимости и капитальных вложений в локальную инфраструктуру пользователя.

Развивающаяся европейская инфраструктура HPC включает в себя несколько уровней и может быть представлена в виде пирамиды (Рис. 1). На вершине этой пирамиды представлены вычислительные ресурсы - верхнего уровня (Tier-0), который составляют 6-7 мощных суперкомпьютерных центров (с вычислительной мощностью PetaFlops - 10). Ниже нулевого уровня расположен первый уровень (Tier-1) – это уровень национальных суперкомпьютерных центров. В основание пирамиды находятся ресурсы 2-го уровня (Tier-2) – это система HPC центров научно-исследовательских институтов, университетов и крупных компаний. Вычислительные ресурсы каждого уровня должны удовлетворять определенным требованиям для включения в единую инфраструктуру HPC.

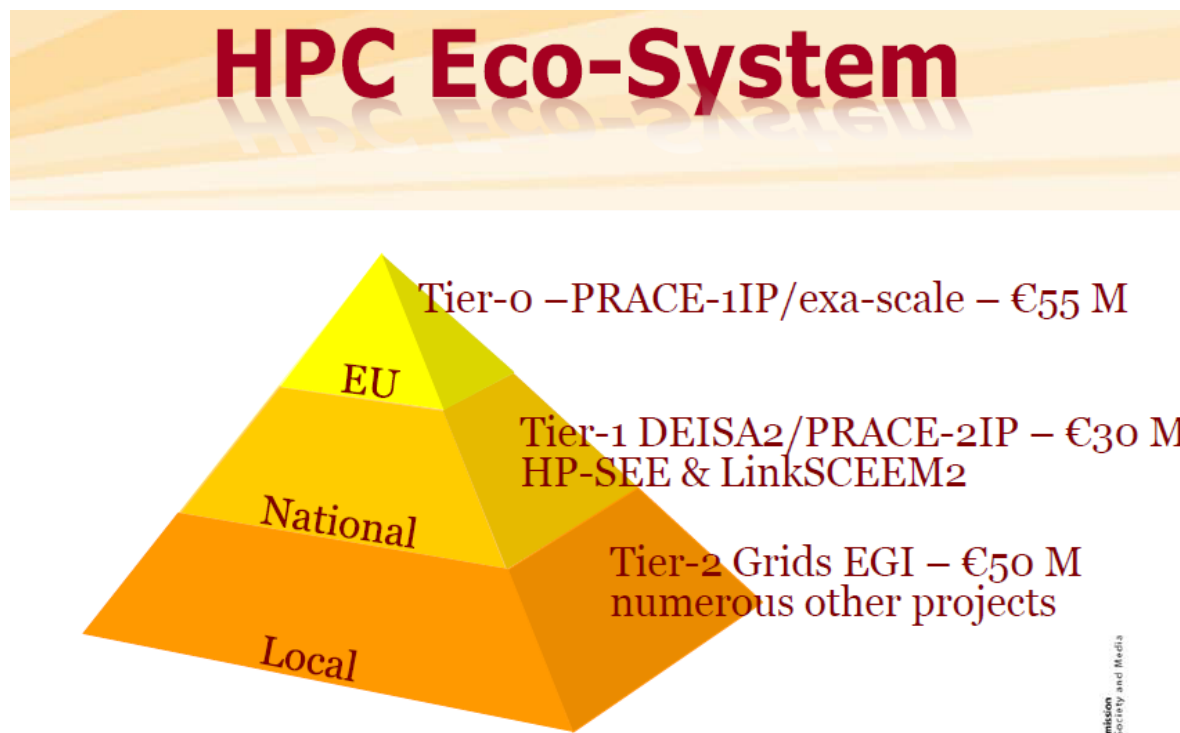


Рис. 1. Европейская экосистема HPC

Наряду с глобальными инициативами, Европейская комиссия поддерживает развитие НРС инфраструктур и сервисов для региональных сообществ. Для развития научных исследований, новых образовательных технологий и других высокотехнологичных направлений в странах Юго-Восточной Европе (SEE - South East Europe) важным фактором является региональное и европейское сотрудничество в области НРС. В этом контексте для Молдовы значительный интерес представляет участие в проектах регионального сотрудничества для преодоления цифрового разрыва и стимулирования исследований с использованием современных средств обработки данных. Чтобы покрыть потребности научных сообществ в регионе SEE был разработан проект «High-Performance Computing Infrastructure for South East Europe's Research Communities (HP-SEE)» [1], который был профинансирован Европейской Комиссией (грант 261499). Проект HP-SEE (<http://www.hp-see.eu/>) начался в сентябре 2010 года и объединяет партнеров из 14 стран региона SEE: Грецию, Болгарию, Румынию, Турцию, Венгрию, Сербию, Албанию, Македонию, Черногорию, Молдову, Армению, Грузию и Азербайджан. Концепция проекта сосредоточена на ряде стратегических направлений:

- связь существующих и будущих НРС установок в регионе в общую инфраструктуру и обеспечение оперативного управления ресурсами для решения важных региональных задач;
- открытие инфраструктуры НРС широкому спектру новых сообществ пользователей, в том числе из стран с ограниченными ресурсами (таких, как Молдова), с упором на создание стратегических сообществ по вычислительной физике, химии и в области наук о жизни;
- создание при местной политической и финансовой поддержке организационных структур, таких как национальные НРС инициативы, для долгосрочного и устойчивого развития НРС инфраструктур в странах – участницах проекта.

От Молдовы в проекте HP-SEE участвуют Ассоциация RENAM (National Research and Educational Network of Moldova) и Институт математики и Информатики Академии наук Молдовы (ИМИ АНМ) [2]. Эффективное функционирование инфраструктуры и предоставления ресурсов опирается на широкополосные каналы связи. Сетевые ресурсы для участников проекта из Молдовы предоставляются сетью RENAM (пропускная способность внешних каналов 10 Gbps). Поэтому усилия RENAM сконцентрированы на обеспечении доступа национальных организаций к ресурсам региональной инфраструктуры высокопроизводительных вычислений, организации профессиональной подготовки пользователей и оперативной поддержке разработчиков приложений. Основной задачей ИМИ АНМ является разработка приложений для высокопроизводительных систем и их развертывание в региональной НРС инфраструктуре.

Создаваемая в рамках проекта HP-SEE региональная НРС инфраструктура объединяет ресурсы мощных НРС кластеров и суперкомпьютеров, имеющихся у партнеров из следующих шести организаций [2]:

- Greek Research & Technology Network (Греция);
- Институт информационных и коммуникационных технологий (ИКТ), Болгарской академии наук (Болгария);
- Национальный институт исследований в области физики и ядерной инженерии «Хория Хулубей» (Румыния);
- Национальный институт развития информационных инфраструктур (Венгрия);
- Институт физики (Белград Сербия);
- Университет им. Святых Кирилла и Мифодия в Скопье (Македония).

В ходе реализации проекта было произведено расширение существующей инфраструктуры для подготовки и выполнения приложений в Молдове. Кластер IMI-RENAM (8 серверов) был полностью переведен на платформу виртуализации Citrix XenServer. Ресурсы этого кластера развиваются в соответствии с потребностями развития приложений, их тестирования и отладки. Они доступны всем пользователям из организаций, разрабатывающих и отлаживающих свои приложения для их запуска в региональной НРС инфраструктуре.

3. Пример параллельного приложения и детали реализации

В качестве приложения рассматривается задача компьютерного моделирования гравитационного коллапса звезд с массами в диапазоне от 7 до 70 солнечных масс. При этом следует учитывать тот факт, что плотность коллапсирующей звезды меняется на много порядков – от 1014 кг/м³ в центре нейтронной звезды до плотности разреженного газа на границе оболочки звезды. Поэтому необходимо создать сетку, размер которой зависит от плотности, то есть ячейки в центре должны иметь минимальный размер, и должны увеличиваться по мере удаления от центра. Построить такую сетку можно с помощью метода Adaptive Mesh Refinement (AMR), который использует иерархическую структуру ячеек сетки на разные уровни [3,4]. Иерархия этой сетки включает различные уровни измельчения сетки от самого грубого уровня ($L=0$), до самого тонкого уровня ($L=L_{max}$). Каждый уровень представляет собой набор из заплат (patch) различного размера. Кроме того, разбиение расчетной области изменяется со временем. Самый грубый уровень ($L=0$) представляет собой прямоугольный параллелепипед, который содержит в себе все остальные уровни. Кроме того, предполагается, что все остальные уровни тоже строго вложены друг в друга.

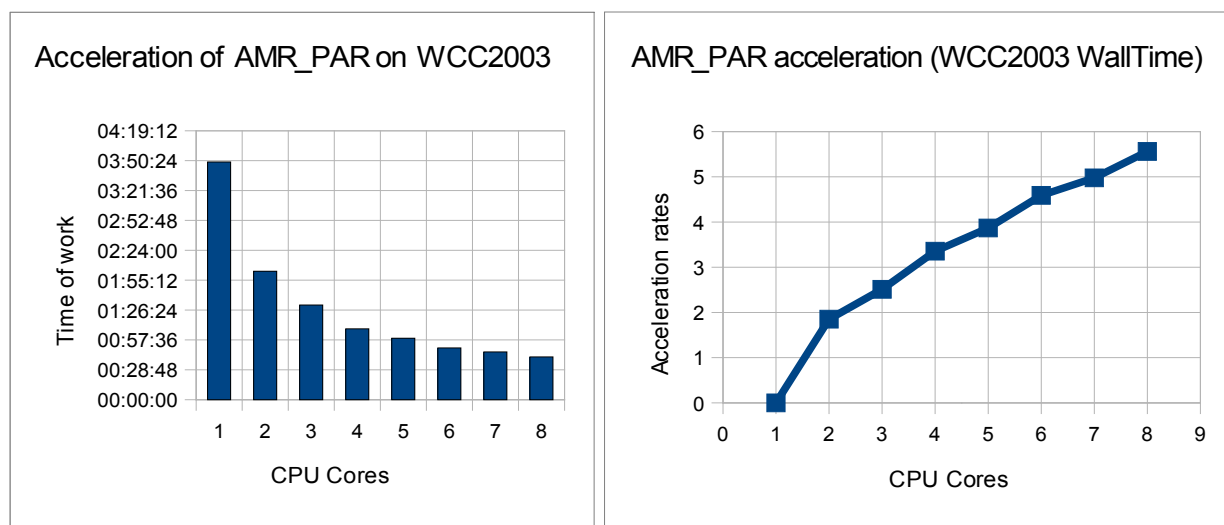
Вся расчетная область разделена на уровни. Самый нижний уровень - это исходная сетка. Так как в задаче моделируется расчет гравитационного потенциала коллапсирующей звезды, необходимо создавать новые уровни в центре расчетной области. Это реализовано следующим образом: В центре начального куба - сетки нулевого уровня, выделяется область равная половине начальной сетки. В этой области строится сетка ($m+1$) уровня. Этот уровень имеет такое же количество ячеек, как и исходная сетка, но размер каждой ячейки в два раза меньше по каждой координате. В середине области ($m+1$) аналогично строится сетка следующего уровня ($m+2$) и так далее. Общее количество вложенных сеток зависит от необходимого уровня разбиения и от количества оперативной памяти и других факторов вычислительной системы.

Каждый уровень представляет собой структуру, в которой содержится вся необходимая информация об уровне. При создании нового уровня порождается новая структура, которая заполняется необходимой информацией, включающей граничные условия. Необходимо корректно рассчитывать переходы от грубого уровня (m) к более "тонкому" уровню ($m+1$) при движении к более точной сетке; и наоборот, от уровня ($m+1$) к уровню m , при движении к исходной сетке верхнего уровня. Расчеты на каждом уровне проводятся с помощью нескольких итерационных алгоритмов (простой итерации Якоби, методом последовательной сверхрелаксации (SOR), методом сопряженных градиентов), которые хорошо распараллеливаются с помощью технологии параллельного программирования OpenMP [3,4,5].

В качестве теста приводится решение трехмерного уравнения Пуассона с заданными начальными и граничными условиями. Это решение протестировано на 5 уровнях вложенности AMR.

Разработан алгоритм и создано AMR_PAR 64-битное приложение в MS Visual Studio 2010. Сравнительный анализ применения AMP_PAR приложений в режиме OpenMP был протестирован на Microsoft Windows Compute Cluster 2003 ИМИ АНМ (сетка 64x64x64 ячеек и 5 уровней). В таблицах показаны ускорения приложений при использовании OpenMP режиме от одного до восьми ядер.

В рамках проекта HP-SEE созданное параллельное приложение AMP было запущено на региональных ресурсах НРС - для сетки 512x512x512 ячеек на кластере, расположенном в Институте информационных и коммуникационных технологий Болгарской Академии наук. Для сетки 2048x2048x2048 ячеек планируется запуск приложения на Венгерском кластере, расположенном в Национальном институте развития информационных инфраструктур.



4. Заключение

Рассмотренная региональная НРС инфраструктура, создается в рамках европейского проекта HP-SEE и объединяет ресурсы мощных вычислительных систем из 6 разных стран. Представлена концепция обеспечения потребностей в высокопроизводительных вычислительных ресурсах на базе региональной инфраструктуры НРС. Изложенные результаты реализации параллельного приложения при использовании различных объемов вычислительных ресурсов показывают перспективность использования ресурсов региональной инфраструктуры для решения сложных задач.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. "High-Performance Computing Infrastructure for South East Europe's Research Communities (HP-SEE)", Grant agreement No: 261499; Annex I - "Description of Work", version: 2010-04-16, 135 p.
2. *ILIUHA, N.; ALTUHOV, A.; BOGATENCOV, P.; SECRIERU, G.; GOLUBEV, A.* SEE-HP P roject – Providing Access t o t he R egional H igh P erformance C omputing Infrastructure. În: P roceedings IIS " International W orkshop on Intelligent Information Systems", September 13-14, 2011, Chişinău, pp 183-186. ISBN 978-9975-4237-0-0.
3. *Bisnovatyî-Kogan G. S., Moiseenko S. G., Rybakin B. P., Secrieru G.V.* Моделирование взрыва сверхновой звезды на многопроцессорных ЭВМ. Труды Межд. Научной конф. "Параллельные вычислительные технологии (ПаВТ 2008)" 28.01 - 01.02.08, Санкт-Петербург, Россия, с. 319-323.

4. *Б.П. Рыбакин*. Параллельная реализация решения трехмерных уравнений Пуассона на структурированных адаптивных сетках для моделирования взрыва сверхновой звезды. Международная конференция «Научный сервис в сети INTERNET. Технологии параллельного программирования», Абрау-Дюрсо, сентябрь 18-23, 2007 г. 87-89 стр.
5. *Б.П. Рыбакин*. Параллельная трехмерная TVD схема для решения задач гравитационной газовой динамики. ПАРАЛЛЕЛЬНЫЕ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ (ПаВТ'2009) г. Нижний Новгород, 30 марта– 3 апреля 2009 г., стр.673-679.