

СУПЕРКОМПЬЮТЕР "ЧЕБЫШЁВ" И ОПЫТ ЕГО ИСПОЛЬЗОВАНИЯ

А. В. Тихонравов

*(Научно-исследовательский вычислительный центр Московского
государственного университета им. М.В. Ломоносова)*

tikh@srcc.msu.ru

В данной заметке рассказывается об уникальном суперкомпьютере Московского университета "Чебышёв", введенном в эксплуатацию в марте 2008 г. Ввод в строй этого суперкомпьютера — результат работы большого коллектива сотрудников университета, возглавляемого ректором МГУ, академиком Виктором Антоновичем Садовничим. С появлением суперкомпьютера "Чебышёв" Московский университет вошел в число ведущих суперкомпьютерных центров мира, и новый вычислитель сразу же стал важнейшим инструментом исследователей для большого числа научных коллективов университета. Успех освоения и эффективное использование "Чебышёва" были бы невозможны без накопленного в МГУ опыта работы с вычислительной техникой. Поэтому заметка начинается с краткого экскурса в историю ее развития в Московском университете.

1 Исторический экскурс

Московский университет был первой учебной организацией страны, начавшей освоение вычислительной техники. В 1956 г. в университете был установлен один из первых экземпляров ЭВМ "Стрела". Это была первая отечественная серийная вычислительная машина, производившая вычисления со скоростью около двух тысяч операций в секунду. "Стрела" использовалась для решения важнейших для своего времени задач. На ней, в частности, производились расчеты, связанные с подготовкой к полету Юрия Гагарина.

В последующие годы парк вычислительной техники Московского университета стремительно обновлялся, причем в МГУ поступали все новейшие отечественные ЭВМ: в 1961 г. — ЭВМ М-20, в 1966 г. — ЭВМ БЭСМ-4,

в 1968 г. — ЭВМ БЭСМ-6. В эти же годы группой сотрудников МГУ под руководством Н.П. Брусенцова был разработан первый в мире компьютер, основанный на троичной системе вычислений.

В семидесятые—восьмидесятые годы XX века в Московском университете был реализован уникальный вычислительный и информационный проект. Это — знаменитый проект создания системы коллективного пользования вычислительными мощностями университета (СКП МГУ). Работами по созданию СКП МГУ руководили академики Андрей Николаевич Тихонов и Виктор Антонович Садовничий. Даже сейчас масштабы этого проекта поражают воображение. Вычислительная сеть СКП включала в себя более трехсот терминалов и обеспечивала доступ к центральным вычислительным ресурсам всех основных подразделений университета. За работы по созданию СКП МГУ большое число сотрудников университета было удостоено премии Совета Министров СССР.

Даже в самые сложные для страны годы Московский университет находил средства для развития своей вычислительной базы. Благодаря поддержке Виктора Антоновича Садовничего в 1999 г. в НИВЦ на основе нескольких десятков персональных компьютеров был собран кластер, позволявший производить параллельные вычисления. Это был первый высокопроизводительный вычислительный кластер в системе образования России. По инициативе академиков Виктора Антоновича Садовничего и Вениамина Петровича Мясникова на новом кластере сразу же был организован первый в стране практикум по параллельным вычислениям для студентов механико-математического факультета МГУ. В это же время под руководством Виктора Антоновича Садовничего начал работу научный семинар "Высокопроизводительные вычислительные системы в науке и образовании". В первые годы нового тысячелетия вычислительные мощности Московского университета постоянно возрастали за счет ввода в строй новых более производительных вычислительных кластеров.

Следует отметить, что на рубеже XX и XXI веков в области высокопроизводительных вычислений доминировали вычислительные системы, основанные на архитектуре с общей памятью, и было далеко не очевидно, что

через несколько лет наиболее мощные вычислительные системы мира будут создаваться на основе кластерных технологий. Благодаря правильно определенной стратегии развития вычислительной техники Московский университет накопил ценнейший опыт в области высокопроизводительных вычислений и смог в кратчайший срок ввести в действие уникальный по своей архитектуре и своим возможностям суперкомпьютер "Чебышёв".

2 Технические решения суперкомпьютера "Чебышёв"

19 марта 2008 г. председатель Государственной Думы Борис Николаевич Грызлов и ректор Московского университета Виктор Антонович Садовничий открыли новый суперкомпьютер МГУ с пиковой производительностью 60 Tflops (60 триллионов операций в секунду). Суперкомпьютер получил имя великого русского математика Пафнутия Львовича Чебышёва, который окончил Московский университет в 1841 г. В записке академиков А.А. Маркова и В.Я. Сониной, прочитанной в Академии Наук после смерти П.Л. Чебышёва, говорилось: "Труды Чебышёва носят отпечаток гениальности. Он изобрел новые методы для решения многих трудных вопросов, которые были поставлены давно и оставались нерешенными". Суперкомпьютер, получивший имя П.Л. Чебышёва, также предоставил ученым Московского университета принципиально новые возможности для решения огромного числа сложнейших научных задач.

Символическим является то, что новый уникальный вычислитель расположен на том же самом месте, где когда-то стояла первая в МГУ ЭВМ "Стрела". Превосходя свою предшественницу по производительности более чем в тридцать миллиардов раз, "Чебышёв" занимает по сравнению с ней существенно меньшие площади (менее ста квадратных метров). По своей компактности и экономичности потребления энергии "Чебышёв" намного превосходит аналогичные по производительности системы, расположенные в других странах мира. Так, например, второй по величине в Германии суперкомпьютер HRLB II в центре им. Лейбница под Мюнхеном, имея такую же пиковую производительность, занимает на порядок большие площади и

потребляет в несколько раз больше энергии.

В суперкомпьютере "Чебышёв" использованы новейшие четырехядерные процессоры Intel Xeon с тактовой частотой 3.0 ГГц, связь между процессорами реализована с помощью наиболее совершенной на настоящее время сети InfiniBand, применены новейшие файловые системы и дисковые системы хранения данных. Несмотря на то, что элементная база суперкомпьютера — иностранного производства, "Чебышёв" с полным правом можно назвать отечественной разработкой. Архитектура суперкомпьютера, все конструктивные решения, инженерно-технические системы — результат совместной работы ученых МГУ, сотрудников российской компании "Т-платформы" и ученых Института программных систем РАН.

Новизна архитектурных решений суперкомпьютера "Чебышёв" подчеркивается тем фактом, что на момент его запуска в списке Top-500 самых мощных компьютеров мира не было ни одного, использующего процессоры с четырьмя вычислительными ядрами. Такие компьютеры появились только в летней редакции этого рейтинга (июнь 2008 г.) и сразу же заняли в нем верхние строчки. Суперкомпьютер "Чебышёв" занял в нем 36-е место, совершив огромный скачок в рейтинге российских вычислителей. При этом "Чебышёв" вошел в пятерку самых мощных компьютеров Европы.

3 Организация работы суперкомпьютера "Чебышёв"

В Московском университете накоплен огромный опыт организации работы большого числа научных коллективов на мощной общеуниверситетской вычислительной технике. Прочная основа этого опыта была заложена еще во времена проекта СКП МГУ. Он был сохранен и расширен в последующие годы в значительной мере благодаря правильно определенной линии на развитие кластерных вычислительных технологий.

Всеми работами в области высокопроизводительных вычислений руководит Совет информационных систем МГУ, возглавляемый ректором МГУ академиком Виктором Антоновичем Садовничим. Текущую работу суперкомпьютерного комплекса МГУ координирует рабочая группа по высоко-

производительным вычислениям этого Совета. Подробное описание суперкомпьютерного комплекса Московского университета, правила доступа к нему, детальную информацию для пользователей по всем наиболее важным для них вопросам можно найти на интернет-сайте www.parallel.ru, работу которого обеспечивают сотрудники Научно-исследовательского вычислительного центра МГУ.

Для регистрации в качестве пользователя суперкомпьютерного комплекса МГУ необходимо направить запрос на имя ректора. Форму этого запроса также можно найти на сайте www.parallel.ru. После регистрации пользователь направляет администратору суперкомпьютера запрос на предоставление машинного времени, в котором указываются: приоритетное направление науки, по которому ведется исследование, тип выполняемых параллельных программ, необходимый объем дисковой памяти и запрашиваемое число процессоров-часов в месяц. Этот запрос обрабатывается в кратчайшее время, и пользователь может начинать свою работу на комплексе. Как видно, процесс начала работы пользователя минимально формализован и позволяет получить доступ к суперкомпьютеру всем научным коллективам Московского университета. При этом сотрудники НИВЦ оказывают пользователям необходимую консультативную помощь, часто помогая во много раз повысить эффективность работы их параллельных программ.

Контроль за эффективностью работы пользователей и целесообразностью предоставления им запрашиваемых ресурсов возложен на рабочую группу Совета информационных систем. Одной из основных форм данного контроля является обсуждение полученных пользователями результатов на семинарах различного уровня. По правилам работы суперкомпьютерного комплекса МГУ все пользователи обязаны приводить ссылку на его использование в своих научных публикациях. В дальнейшем наличие и уровень таких публикаций также станут одним из важнейших критериев оценки эффективности работы пользователей.

К осени 2008 г. уже более ста научных групп работало на суперкомпьютере "Чебышёв". Эти группы представляют около двадцати подразделений Московского университета. Как и следовало ожидать, лидерами в

использовании суперкомпьютерных ресурсов являются физический и химический факультеты, НИВЦ, факультет ВМК, механико-математический факультет, НИИЯФ, МЛЦ. С конца лета 2008 г. суперкомпьютер "Чебышёв" работает в непрерывном круглосуточном режиме, причем загрузка его вычислительных ядер практически постоянно близка к 100%.

4 Некоторые результаты работы суперкомпьютерного комплекса

В короткой заметке невозможно отметить все заметные результаты, полученные на суперкомпьютере "Чебышёв" всего за несколько месяцев его использования. В этом разделе рассмотрены лишь некоторые из них, отражающие различные возможности этого уникального вычислителя.

Суперкомпьютер "Чебышёв" является по сути дела огромной вычислительной фабрикой, предоставляющей пользователям принципиально новые возможности для проведения научных исследований. Эти возможности были очень быстро осознаны учеными Московского университета. Если посмотреть на типичную таблицу использования вычислительного поля суперкомпьютера, то сразу же видно, что основная масса пользователей задействует относительно небольшое число процессоров (как правило, несколько десятков). Все вычислительное поле или его существенную часть запрашивают лишь немногие пользователи. Однако при этом большинство пользователей запускает на счет одновременно несколько вариантов своих задач. Такой подход позволяет принципиально ускорить процесс научного поиска.

Предположим, что задача пользователя требует для своего решения несколько суток расчетного времени на самом совершенном персональном компьютере. Расчет на 24 процессорах суперкомпьютера "Чебышёв" при условии эффективного параллельного использования процессоров сократит время счета до нескольких часов. Если учесть, что при этом одновременно может считаться несколько вариантов задачи, то становится ясным колоссальное ускорение процесса научного поиска. Ученый получает необходимые ре-

результаты для осмысления и продолжения этого поиска не через несколько месяцев, а в тот же день.

Одним из важнейших направлений использования суперкомпьютера "Чебышёв" является моделирование климатических изменений, связанных с различными факторами, такими, например, как изменение уровня выброса углекислого газа в атмосферу Земли. Соответствующие расчеты проводятся сотрудниками НИВЦ МГУ на основе совместной модели атмосферы и океана, разработанной в Институте вычислительной математики РАН. Эта модель реализована на суперкомпьютере "Чебышёв" в виде двух независимых модулей (атмосфера и океан). При этом для расчета атмосферной части модели используются 24 процессора и технология программирования MPI, а для расчета океанической части модели – 32 процессора и технологии программирования MPI и Open MP. При программировании модели значительные усилия были потрачены на максимально эффективное использование архитектуры суперкомпьютера "Чебышёв" и, в частности, эффективное использование всех ядер его процессоров. Применение смешанных технологий программирования связано с задачей максимально эффективного использования архитектуры суперкомпьютера "Чебышёв".

За сутки счетного времени удастся рассчитывать эволюцию климатической системы за 8 лет модельного времени. Типичный период в расчетах по моделированию климата составляет 100 лет, и, таким образом, "Чебышёв" решает соответствующие задачи за время чуть большее двенадцати суток. Понятно, что подобные расчеты без использования суперкомпьютеров абсолютно нереальны. За короткий срок эксплуатации "Чебышёв" уже позволил получить ряд интереснейших результатов по предсказанию изменений климата, в частности, по предсказанию эволюции вегетационного периода и количества дней с заморозками на всей территории России.

Как уже было отмечено, "Чебышёв" — один из первых в мире суперкомпьютеров, использующих процессоры с четырьмя вычислительными ядрами. Задача эффективного одновременного использования всех ядер процессоров является абсолютно нетривиальной и новой для всего суперкомпьютерного сообщества. Всего за несколько месяцев работы учеными Москов-

ского университета уже накоплен значительный опыт в ее решении. Примером могут служить расчеты региональных атмосферных циркуляций, в частности, бризовых циркуляций над водоемами. Подобные расчеты имеют важнейшее практическое значение для регионов нефтедобычи в Западной Сибири, поскольку огромная часть площади этих регионов покрыта водоемами.

Расчеты региональных атмосферных циркуляций требуют использования очень больших трехмерных сеток с общим числом узлов до нескольких десятков миллионов. При расчетах на 16 процессорах суперкомпьютера "Чебышёв" (64 вычислительных ядра) удастся достичь более чем семидесятипроцентной эффективности использования каждого вычислительного ядра. Таким образом, достигается ускорение счета почти в пятьдесят раз по сравнению с персональным компьютером. Из этого примера видно, насколько эффективным инструментом исследования может быть новый суперкомпьютер даже при использовании чуть более одного процента его счетного поля.

Суперкомпьютер "Чебышёв" является мощнейшим инструментом исследований не только для математиков, физиков, химиков, но и для специалистов в других естественно-научных областях, где большие по объему вычисления ранее практически не применялись. Приведем лишь два примера. Первый — это использование суперкомпьютера в медицине на первой стадии разработки новых видов лекарств. Эта стадия состоит в поиске новых химических соединений — ингибиторов, которые могут являться кандидатами на роль нового лекарства для данной конкретной болезни. В процессе поиска ингибиторов с помощью суперкомпьютерной техники приходится решать несколько сложнейших трехмерных задач. Во-первых, это квантовохимические расчеты пространственной структуры молекулы по ее заданному химическому составу. Во-вторых, это комплекс задач по определению связываемости этой молекулы с активным центром белка, ответственным за данную болезнь. Указанные задачи необходимо решать многократно, поскольку поиск ингибиторов приходится производить среди многих миллионов возможных химических соединений, претендующих на их роль.

В результате совместной работы ученых Московского университета с сотрудниками Гематологического научного центра РАМН был открыт и запатентован новый класс ингибиторов тромбина — основа новых лекарств от тромбозов и важный элемент кровезаменителей. Применение суперкомпьютерной техники позволило осуществить эту работу всего за полтора года, что в несколько раз меньше типичного срока поиска ингибиторов без использования супервычислений. При этом затраты на эксперименты по проверке новых химических соединений уменьшились в 300 раз. В настоящее время на суперкомпьютере "Чебышёв" ведутся интенсивные расчеты, направленные на поиск веществ, способных останавливать деление раковых клеток, а также расчеты, связанные с поиском лекарств против СПИДа.

Второй пример — использование супервычислений в геологии. Как известно, ядро Земли содержит большое количество железа, которое находится в нем в связанном с углеродом состоянии. До последнего времени считалось, что при огромном давлении и высокой температуре ядра Земли таким связанным состоянием является кристаллическая структура Fe_3C . Расчеты на суперкомпьютере "Чебышёв" показали, что при характерных для ядра Земли давлении и температуре существенно более стабильной формой является кристаллическая структура Fe_2C . Сейчас полученный результат проверяется на основе косвенных геологических и геофизических данных.

Ряд задач, решаемых на суперкомпьютере "Чебышёв", требует использования практически всех его вычислительных ресурсов. К таковым относятся нестационарные задачи аэродинамики и гидродинамики, задачи магнитной гидродинамики. "Чебышёв" позволяет решать эти задачи на сетках с миллионами и даже миллиардами узлов, что обеспечивает высокую точность моделирования сложнейших физических процессов, таких, например, как турбулентность воздушных и газовых потоков. При использовании многих сотен и тысяч вычислительных ядер особенно острой становится проблема эффективного отображения алгоритмов вычислений на архитектуру процессора. В этом плане "Чебышёв" является не только мощнейшим инструментом решения важных фундаментальных и прикладных задач, но и новейшим полигоном для отработки современных технологий програм-

мирования. Ученые Московского университета и ведущих институтов Российской Академии Наук приобретают на нем уникальный вычислительный опыт, достигая при этом результатов мирового класса. В качестве примера можно привести работы группы сотрудников Института математического моделирования РАН. При решении сложнейших трехмерных нестационарных задач им удастся достичь более чем пятидесятипроцентной эффективности использования практически всех вычислительных ядер суперкомпьютера "Чебышёв".

5 Заключение

Во всем мире суперкомпьютерная вычислительная техника и связанные с ней направления в образовании и науке рассматриваются как элементы национальной безопасности. Особое внимание этим вопросам уделяется в США. Показательно то, что более половины суперкомпьютеров из последней редакции списка TOP 500 самых мощных компьютеров мира установлено в этой стране. Суперкомпьютеры США занимают также первые девять строчек этого списка. Особое внимание к супервычислениям связано и с тем, что весь мир вычислений быстрыми темпами становится параллельным. Уже сейчас персональные компьютеры с несколькими двухядерными процессорами – рядовое явление. Несомненно, что доля многопроцессорных и многоядерных персональных компьютеров будет расти быстрыми темпами. Все это ставит на повестку дня проблему всестороннего образования в области параллельных вычислений.

Подготовка специалистов, способных эффективно использовать суперкомпьютеры для решения сложных фундаментальных и прикладных задач, требует глубоких знаний в предметной области, владения математическими методами и алгоритмами, знания языков программирования, понимания современных архитектур суперкомпьютеров и, наконец, навыка использования основных современных технологий программирования. Понятно, что такое всестороннее образование способны обеспечить только университеты.

К счастью, многие российские университеты понимают остроту этой проблемы.

В результате выполнения национального проекта "Образование" многие российские университеты стали обладателями суперкомпьютерной техники. В последней редакции списка Топ 50 самых мощных компьютеров СНГ пять из шести первых позиций занимают университеты России. При этом Московский университет является признанным лидером в этом сообществе. Только что учреждена Суперкомпьютерная ассоциация университетов России, президентом которой избран ректор Московского университета Виктор Антонович Садовничий. Эта ассоциация призвана сыграть ведущую роль в развитии супервычислений в нашей стране.

