

УДК 681.32

Республиканский суперкомпьютерный центр КОЛЛЕКТИВНОГО ПОЛЬЗОВАНИЯ

Маршалович Виктор Егорович

заведующий научно-исследовательским отделом «Республиканский суперкомпьютерный центр коллективного пользования»

E-mail: marshalovich@newman.bas-net.by

Рымарчук Александр Григорьевич

главный конструктор проекта научно-исследовательского отдела

«Республиканский суперкомпьютерный центр коллективного пользования»

E-mail: rymarchuk@newman.bas-net.by

Чиж Олег Петрович

заведующий лабораторией высокопроизводительных систем

E-mail: otchij@newman.bas-net.by

Мурашко Владимир Владимирович

ведущий инженер-программист научно-исследовательского отдела

«Республиканский суперкомпьютерный центр коллективного пользования»

E-mail: uladm@newman.bas-net.by

Введение. Разработка и использование технологий высокопроизводительных параллельных вычислений выступают важной мировой тенденцией развития. Так, созданное в 2018 г. совместное предприятие ЕугоНРС занимается разработкой общеевропейской инфраструктуры суперкомпьютеров и поддержкой научно-исследовательской и инновационной деятельности. Три суперкомпьютера ЕугоНРС входят в ТОП 10 мирового рейтинга ТОП 500 июля 2024 г. Для Союзного государства актуальной задачей является продолжение работ по развитию суперкомпьютерных вычислений. Экономический прогресс, политическая стабильность и безопасность Союзного государства существенно зависят от успехов в решении данной задачи. Поэтому важно рассмотреть уровень развития суперкомпьютерного направления СКИФ в Республике Беларусь, а также структуру и состав ресурсов Республиканского суперкомпьютерного центра коллективного пользования (далее – РСКЦ КП), включая системное и лицензионное прикладное программное обеспечение.

Общие сведения. Создание РСКЦ КП связано с завершением работ по первой программе развития суперкомпьютерных технологий Союзного государства «СКИФ». Венцом этой программы стало создание кластерных суперкомпьютерных конфигураций СКИФ VM-5100, K-500, K-1000.

Для объединения вычислительных мощностей кластерных суперкомпьютерных конфигураций (суперкомпьютеров) СКИФ VM-5100, K-500 и K-1000 и продолжения работ по созданию высокопроизводительных систем на основании постановления Бюро Президиума НАН Беларуси от 09.09.2004 № 503 было принято решение о создании РСКЦ КП.

Суперкомпьютерное направление СКИФ развивается в Республике Беларусь в рамках программ Союзного государства. Важнейшим практическим результатом выполнения программы СКИФ (2000–2004 гг.) стал выпуск образцов кластерных конфигураций семейства СКИФ ряда 1 и ряда 2 с пиковой производительностью в диапазоне от десятков миллиардов до нескольких триллионов операций в секунду. Суперкомпьютеры семейства СКИФ ряда 2 СКИФ-K500 и СКИФ-K1000 входили в Top 500 самых мощных суперкомпьютеров мира и в Top 50 самых мощных суперкомпьютеров СНГ. При этом в 2003 г. суперкомпьютер СКИФ-K500 занимал 407-е место в 22-м выпуске мирового рейтинга Top 500. В 2004 г. суперкомпьютер СКИФ-K1000 занял 98-е место в 24-м выпуске рейтинга Top 500 и возглавил рейтинг Top 50 самых мощных компьютеров СНГ [1].

Суперкомпьютерные конфигурации СКИФ ряда 3 и ряда 4 (очередная генерация моделей семейства СКИФ) созданы в рамках программы Союзного государства «СКИФ-ГРИД» (2007–2010 гг.). Примером конфигурации ряда 3 является созданный в Республике Беларусь кластер СКИФ К-1000М (пиковая производительность 5,0 Тфлопс).

В 2010 г. суперкомпьютер СКИФ-ГРИД имел самую высокую производительность в семействе белорусских моделей СКИФ ряда 4. Пиковая производительность суперкомпьютера СКИФ-ГРИД (36 вычислительных узлов и два управляющих узла) составляла на тесте Linpack без учета графических ускорителей вычислений 8,0 Тфлопс при показателе эффективности 82,15 %. Все суперкомпьютеры семейства СКИФ ряда 4 в свое время входили в соответствующие редакции рейтинга Top 50 самых мощных суперкомпьютеров СНГ.

Во время выполнения программы «Триада» (2005–2008 гг.) основное внимание уделялось внедрению суперкомпьютерных технологий в науку, образование, промышленность, а также созданию малогабаритных суперкомпьютерных конфигураций, которые в дальнейшем стали основой для персональных (офисных) кластеров.

В соответствии с программой Союзного государства «СКИФ-НЕДРА» (2015–2018 гг.) в Республике Беларусь были созданы три опытных образца суперкомпьютеров серии СКИФ-ГЕО. Суперкомпьютер СКИФ-ГЕО-ЦОД РБ предназначался для решения ресурсоемких геолого-геофизических задач в центрах обработки данных (ЦОД). Мини-суперкомпьютер СКИФ-ГЕО-АПК РБ – для обеспечения вычислительными ресурсами небольших предприятий типа «НПЦ геология». Компактный вычислительный кластер СКИФ-ГЕО-Офис РБ, удовлетворяющий требованиям условий эксплуатации в офисных помещениях, – для структурных подразделений (офисов) геолого-геофизической отрасли. В офисном кластере были реализованы отечественные конструктивно-технологические решения компоновки кластера и отвода тепла от процессора на основе радиатора с запрессованными тепловыми трубами. Суперкомпьютер СКИФ-ГЕО-ЦОД РБ вошел в 29-ю редакцию от 24 сентября 2018 г. рейтинга Top 50 самых мощных суперкомпьютеров СНГ под номером 37 с пиковой производительностью 100 Тфлопс. Вычислительный кластер СКИФ-ГЕО-Офис РБ включен в Топ 10 лучших разработок НАН Беларуси за 2017 г.



СКИФ-ГЕО-ЦОД РБ



СКИФ-ГЕО-ОФИС

В 2020 г. в рамках программы «Развитие инфраструктуры суперкомпьютерных центров в интересах инновационного развития стран – участниц СНГ» были завершены работы по созданию суперкомпьютера СКИФ-ГРИД-СНГ. Его вычислительные узлы оснащены графическими видеокартами для ускорения потоковых вычислений и поддержки визуализации вычислений на каждом узле [1].

В процессе разработки суперкомпьютерных конфигураций по программам «СКИФ» были получены следующие патенты Республики Беларусь и Российской Федерации [1]:

Корпус кластера персонального VM5300: пат. ВУ 1904 от 01.03.2010.

Серверная стойка с воздушным охлаждением: пат. ВУ 2339 от 01.02.2010.

Теплоотвод для процессора: пат. ВУ 12012 от 01.04.2019.

Компактный вычислительный кластер: пат. ВУ 12417 от 28.02.2020.

Теплоотвод для процессора: пат. RU 189231 от 16.05.2019.

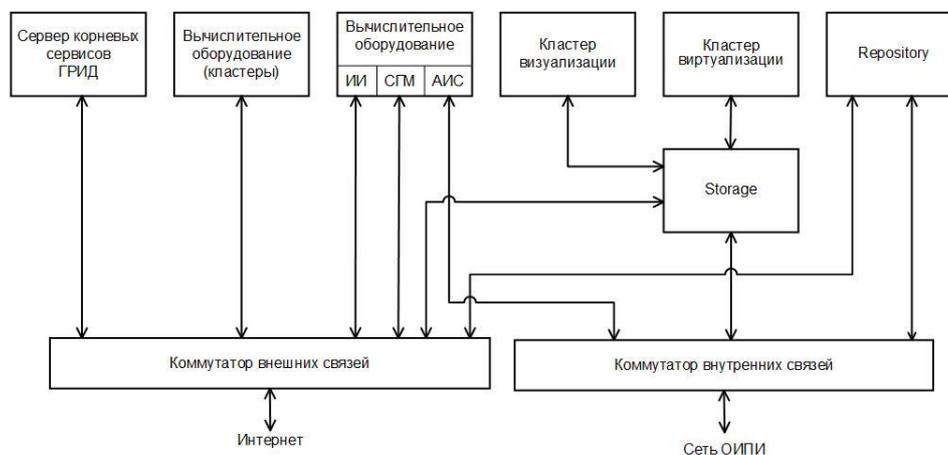
В настоящее время находятся в эксплуатации в РСКЦ КП опытные образцы суперкомпьютеров СКИФ-ГРИД-СНГ, СКИФ-ГЕО-ЦОД РБ и СКИФ-ГЕО-Офис РБ, опытный образец СКИФ-ГЕО-АПК РБ в НПЦ геология. В таблице представлены основные технические характеристики этих моделей.

Технические характеристики моделей кластеров

Характеристики	СКИФ-ГРИД-СНГ	СКИФ-ГЕО-ЦОД-РБ	СКИФ-ГЕО-АПК-РБ	СКИФ-ГЕО-ОФИС-РБ
Количество узлов / GPU	17/17 (дискретные GPU)	34/1 (дискретный GPU)	6/1 (дискретный GPU)	9/9 (встроенные GPU)
Количество ядер	340	1224	120	18
Объем ОП на узле, ГБ	96	192–768	64	32
Производительность в архитектуре x86-64 на Linpack, Тфлопс	10,62 (16 узлов)	65,95 (36 узлов)	3,43 (6 узлов)	0,591 (9 узлов без GPU)
Системная сеть, Гбит/с	InfiniBand EDR, 100	InfiniBand EDR, 100	Ethernet 10	Ethernet 1,0
Объем дисковой памяти файлового сервера, ТБ	80	32	24	1,2

В зале РСКЦ КП размещаются суперкомпьютерные конфигурации, созданные по программам «СКИФ», «СКИФ-ГРИД», «ТРИАДА», «СКИФ-НЕДРА», «Развитие инфраструктуры суперкомпьютерных центров в интересах инновационного развития стран – участниц СНГ». Также в нем расположены вычислительные установки ОИПИ НАН Беларуси, требующие для своей работы определенные условия эксплуатации, которые поддерживаются в РСКЦ КП.

На структурной схеме (рисунок) показаны основные функциональные группы оборудования РСКЦ КП и сетевые связи между ними. На схеме не показаны отдельные вычислительные кластеры и вычислительные установки ОИПИ НАН Беларуси, так как они объединены в две отдельные группы.



Укрупненная структурная схема вычислительного оборудования РСКЦ КП
(ИИ – искусственный интеллект; СГМ – система глобального мониторинга;
АИС – автоматизированная информационная система)

Технические сведения. Вычислительный зал центра занимает площадь $\sim 90 \text{ м}^2$ и имеет два подключения к трехфазной электросети мощностью 120 и 98 кВт·А. Для контроля работы источников бесперебойного питания, электропитания, подаваемого в монтажные шкафы с оборудованием, температуры и влажности в монтажных шкафах используется разработанный сотрудниками РСКЦ КП аппаратно-программный комплекс управления инфраструктурой суперкомпьютерного центра.

Для поддержания климатических условий в РСКЦ КП применяется комбинированная система воздушного охлаждения на основе гибридного фрикулинга. Для этого имеются приточно-вытяжная вентиляция и кондиционирование (три кондиционера). Подача уличного воздуха, прошедшего через фильтры, осуществляется в зал с вычислительным оборудованием и на вхо-

ды кондиционеров. С выходов кондиционеров происходит заброс охлаждающего воздуха через воздуховоды и жалюзи в зал непосредственно перед монтажными шкафами с оборудованием. Горячий воздух от монтажных шкафов отводится в вытяжную вентиляцию (на улицу). В зависимости от температуры холодного воздуха, поступающего с улицы, производится автоматическое управление положением заслонок в воздуховодах приточно-вытяжной вентиляции и смешивание входящего воздуха с нагретым воздухом, который отводится из зала. Выбранная комбинированная система охлаждения позволяет с сентября по май (семь – восемь месяцев) обходиться возможностями приточно-вытяжной вентиляции, обеспечивая экономию электроэнергии для охлаждения.

Также РСКЦ КП оборудован системой газового пожаротушения с контролем задымления вычислительного зала.

Программное обеспечение РСКЦ КП. Программное обеспечение суперкомпьютеров поддерживает разработку параллельных программ и выполнение задач в распределенной среде.

Системное программное обеспечение для суперкомпьютерных конфигураций включает следующие основные программные компоненты:

- операционную систему (ОС). В качестве базовой используется ОС Linux на основе последних версий дистрибутива Fedora с обновлениями для повышения производительности вычислительных кластеров;

- программные средства поддержки системной сети Infiniband (IB). Для работы с сетевой средой Infiniband используются программные средства проекта OFED (Open Fabrics Enterprise Distribution) – набор программного обеспечения (ПО) с открытым исходным кодом для развертывания и управления сетей IB;

- средства разработки параллельных программ. В качестве средства параллельного программирования используется библиотека функций обмена данными между процессами MPI, реализованная для различных языков программирования (C, C++, Fortran);

- системы пакетной обработки заданий. В качестве программных средств пакетной обработки заданий используется свободно распространяемая версия системы пакетной обработки PBS (Portable Batch System) – Torque (Terascale Open-source Resource and QUEue Manager), разработанная компанией ClusterResources, Inc. на основе OpenPBS; в качестве планировщика задач – свободно распространяемый программный пакет Maui. Применяются последние версии пакетов Torque и Maui, полученные с сайтов разработчиков.

С целью контроля работоспособности суперкомпьютеров используется свободно распространяемая система Ganglia, которая предназначена для мониторинга вычислительных комплексов, ведет сбор статистики и отслеживает историю (загруженность процессоров, сети) вычислений в реальном времени для каждого из наблюдаемых вычислительных узлов суперкомпьютеров.

На вычислительных кластерах также установлено лицензионное прикладное ПО. Оно оптимизировано под вычислительную архитектуру кластеров. Коммерческая версия LS-DYNA используется для решения задач в области нелинейных быстропротекающих динамических процессов (машиностроение, приборостроение, электроника, строительство). Многоцелевой программный пакет ANSYS применяется для проведения инженерных расчетов. Квантово-химические расчеты осуществляются в программном комплексе Gaussian, молекулярно-механические – Amber. Также для инженерных расчетов используется пакет открытого свободно распространяемого ПО OpenFoam, для молекулярно-динамического моделирования – пакет NAMD. Большинство прикладных программных пакетов функционируют в режиме распределенных вычислений MPI.

ГРИД-инфраструктура. Полноценное развитие грид-технологий в Республике Беларусь связано с выполнением программы Союзного государства «СКИФ-ГРИД», в рамках которой началось создание национальной грид-инфраструктуры с целью привлечения пользователей к использованию новых технологий.

В основу грид-инфраструктуры положено открытое ПО системы Unicore. Физически грид-система подключается к сети Интернет через шлюзы. Главными ее функциями являются сопо-

ставление внешних и внутренних адресов и на основе совпадений организация безопасных соединений как между клиентской частью и сервисами грида, так и между компонентами грида.

Вычислительные сервисы грида работают на Linux-системах. Клиентская часть может работать также с другими ОС, такими как Windows, Android.

Для подключения к шлюзу используется протокол SSH (Secure SHell). SSH – сетевой протокол прикладного уровня, предоставляющий возможность удаленного управления ОС или туннелирования TCP-соединений (для передачи файлов). Поскольку при помощи SSH возможна безопасная передача практически любых других сетевых протоколов, становится возможным не только удаленное управление компьютером, но и защищенная передача информации по зашифрованному каналу.

Для прохождения аутентификации необходимо наличие сертификатов X.509 как у клиента, так и у серверных компонентов системы.

В процессе формирования национальной грид-инфраструктуры были созданы опытный участок грид-сети на базе ресурсов ОИПИ НАН Беларуси, Объединенного института энергетических и ядерных исследований «Сосны» НАН Беларуси, Белорусского государственного университета, Белорусского государственного университета информатики и радиоэлектроники, Белорусского национального технического университета и региональный грид-сегмент на базе ресурсов Гродненского государственного университета. В ОИПИ НАН Беларуси созданы операционный центр и удостоверяющий центр по выдаче сертификатов сервисов и пользователей [2].

Информационная телекоммуникационная инфраструктура РСКЦ КП базируется на республиканской академической сети BAS-NET. РСКЦ КП подключен к сети BAS-NET посредством волоконно-оптических линий связи со скоростью 1 Гбит/с.

Защищенность одновременно выполняющихся грид-заданий на вычислительных кластерах обеспечивается внутренними механизмами защиты и шифрования обмена. Минимальным уровнем обеспечения безопасности при работе с кластерной системой является использование защищенных соединений. Взаимодействие удаленных пользователей с РСКЦ КП по сети осуществляется по защищенному протоколу на основе пользовательских и серверных сертификатов.

Для защиты информации в РСКЦ КП используются также сетевые средства защиты информации, такие как межсетевые экраны и зашифрованные соединения между суперкомпьютером и удаленной сетью типа VPN.

Для обеспечения работы сервисов ГРИД и повышения их надежности применяются облачные решения на многоузловых вычислительных платформах.

Визуализация данных. Неотъемлемой и важнейшей частью современного анализа различных процессов в любой отрасли естественных наук является визуализация данных. Существует значительное число средств визуализации научных данных, обладающих широкими функциональными возможностями. К сожалению, объем визуализируемых с их помощью данных естественным образом ограничен ресурсами персонального компьютера клиента системы. Система визуализации РСКЦ КП, реализованная на базе технологии клиент-сервер, включает: суперкомпьютерные вычислительные ресурсы в рамках распределенной грид-инфраструктуры, удаленное рабочее место (клиент системы), локальную (или глобальную) сеть. В качестве технологических решений, обеспечивающих работу системы визуализации, был выбран графический протокол VNC.

При этом на удаленном сервере визуализации должна быть запущена программа-сервер (VNC server), которая играет роль клавиатуры, мыши и монитора и обменивается данными с компьютером пользователя. Доступ к VNC-серверу может быть защищен паролем.

На компьютере пользователя должна быть запущена программа-клиент (VNC client, VNC viewer), которая передает на удаленный сервер визуализации информацию о нажатиях на клавиши и движениях мыши, получает от него изображение и выводит его на экран [3].

Отличительными особенностями данного решения являются:

- возможность запуска серверной компоненты визуализации на любой аппаратной платформе, поддерживающей работу сервера XWindows (NVIDIA, ATI, Intel и т. п.);
- аппаратная поддержка работы приложений, реализованных с использованием технологий OPENGL, CUDA и OPENCL;

- авторизация пользователей с использованием X.509 сертификатов, выданных удостоверяющим центром национальной грид-сети;
- возможность работы клиентской компоненты в качестве отдельного приложения ssnvc или через веб-интерфейс;
- возможность полноценной работы в высоком разрешении со сложными 3D-моделями при использовании обычных 3G-каналов мобильной связи;
- наличие полных исходных кодов продукта с возможностью их модификации.

Используемые средства визуализации позволяют создавать для пользователя полноценный удаленный графический стол, работающий на суперкомпьютерных ресурсах (сервере визуализации) распределенной вычислительной среды. При этом используются единые механизмы информационной безопасности (пользовательские и серверные цифровые сертификаты), реализованные в национальной грид-сети. Применение данной системы визуализации позволяет целиком или частично избегать копирования громоздких результатов суперкомпьютерного моделирования на рабочее место пользователя.

Практическое использование суперкомпьютерных ресурсов. Начиная с 2005 г., ОИПИ НАН Беларуси активно проводит работы по использованию вычислительных ресурсов РСКЦ КП. На вычислительных кластерах ведутся работы по моделированию динамических процессов геомеханики, строительной и машиностроительной механики, по разработке новых лекарств, материалов, нанотехнологий, изучению радиационных свойств материалов и другим направлениям.

Необходимо отметить, что при создании новой продукции и учете требований системы качества промышленные предприятия постепенно начинают использовать суперкомпьютерное моделирование и виртуальные испытания проектируемых образцов, вкладывая собственные средства. К таким предприятиям относятся ОАО «Белшина», ОАО «ВОЛАТАВТО», УП «АТОМТЕХ», БелНИИС, научно-производственное общество с ограниченной ответственностью «ОКБ ТСП», Научно-практический центр НАН Беларуси по материаловедению и др.

Однако успешному освоению суперкомпьютерных технологий мешают недостаточная укомплектованность специалистами соответствующих профилей, отсутствие или нехватка информационно-вычислительных технологий, специального ПО, методик их использования, направленных на решение конкретных задач предприятий.

Заключение. В настоящее время кроме развития и замены вычислительного оборудования планируется:

- создать выделенную сетевую систему хранения на 200 ТБ для обеспечения архивирования ПО, наборов данных, хранения рабочих конфигураций кластеров;
- создать специализированные системы для визуализации данных, виртуализации процессов.
- обновить внутреннюю локальную сеть центра с 1 до 10/25/40 Гбит/с.

Серверное оборудование суперкомпьютеров, находящихся в эксплуатации более девяти лет, планируется после доукомплектования оперативной памятью и замены жестких дисков использовать для разработки облачных сервисов на основе системы виртуализации. Также планируется создание вычислительного кластера на основе процессоров AMD EPYC четвертого поколения. На РСКЦ КП будут продолжены установка и эксплуатация вычислительного оборудования приобретаемого другими подразделениями института.

Публикации

1. Белорусские суперкомпьютеры семейства СКИФ / Н. Н. Парамонов, О. П. Чиж, А. Г. Рымарчук [и др.] ; Обьединенный институт проблем информатики Национальной академии наук Беларуси. – Гомель : Вечерний Гомель-Медиа, 2020. – 268 с.
2. Операционный центр национальной грид-сети : [сайт]. – 2015. – URL: <http://noc.grid.basnet.by> (дата обращения: 25.05.2024).
3. X11vnc. VNC server for real X displays. – URL: <http://www.karlrunde.com/x11vnc/> (date of access: 25.05.2015).