



Активности Кемеровского государственного университета в программе «УНИВЕРСИТЕТСКИЙ КЛАСТЕР»

Афанасьев К.Е., Андреев Н.Е.

Докладчик:
Малышенко В.В.



Проблемы эффективного использования высокопроизводительных вычислений

1. подготовка высококвалифицированных кадров и специалистов по направлению высокопроизводительных параллельных вычислений;
2. перенос существующего, накопленного за многие предшествующие годы, программного обеспечения для решения ресурсоемких задач с последовательной на параллельную (многопроцессорную) архитектуру СуперЭВМ;
3. создание инструментальных средств, облегчающих процесс создания параллельных приложений и работу с многопроцессорными вычислительными системами.

Содержание доклада

- Подготовка кадров
- Информационно-вычислительный портал
- Техническое обеспечение
- Разработка систем и инструментов для организации параллельных вычислений
- Создание параллельной библиотеки
- Решение прикладных задач

Подготовка кадров



Учебно-методическое обеспечение курсов по параллельному программированию

- учебные пособия:
 - Афанасьев К. Е., Стуколов С.В. Многопроцессорные вычислительные системы и параллельное программирование: Учебное пособие с грифом СибРУМЦ. Кемеровский госуниверситет. Кемерово: Кузбассвузиздат, 2004. 233с.
 - Афанасьев К.Е., Домрачев В.Г., Ретинская И.В., Скуратов А.К., Стуколов С.В. Многопроцессорные системы: построение, развитие, обучение / Учебно-справочное издание под ред. Тихонова А.Н. М.: КУДИЦ-ОБРАЗ, 2005. 224 с.
- Электронные учебно-методические комплексы в рамках программы «Учебные электронные издания КемГУ»:
 - «Многопроцессорные вычислительные системы и параллельное программирование» (2003 г.)
 - «Параллельное программирование» (2009 г.)



Учебно-методическое обеспечение курсов по параллельному программированию

- Высокопроизводительные вычислительные системы
- Технологии параллельного программирования
- Параллельные вычислительные алгоритмы



Кафедра ЮНЕСКО по НИТ: подготовка кадров

- 010100 "Математика" с присвоением квалификации "Математик. Преподаватель".
- 010501 "Прикладная математика и информатика" с присвоением квалификации "Математик. Системный программист".
- 010503 "Математическое обеспечение и администрирование информационных систем" с присвоением квалификации "Математик. Программист".



Кафедра ЮНЕСКО по НИТ: программа подготовки

- архитектура современных многопроцессорных вычислительных машин;
- системное программное обеспечение параллельных ЭВМ и сетей;
- технология программирования на параллельных ЭВМ;
- параллельные алгоритмы вычислительной математики;
- математическое моделирование и вычислительный эксперимент.



Кафедра ЮНЕСКО по НИТ: курсы

- курс «Основы параллельного программирования»
- курс «Параллельные вычисления»
- Специальный курс «Распараллеливание современных численных методов для моделирования течений жидкости со свободными границами»

Информационно- вычислительный портал (ИВП)

Поддержка
высокопроизводительных
вычислений

Информационно-вычислительный портал

- НИР «Создание типового информационно-вычислительного портала для организации учебной и научной деятельности ВУЗа» в рамках аналитической ведомственной целевой программы “Развитие научного потенциала высшей школы (2006-2008 годы)”
- <http://icp.kemsu.ru>
- Разрабатывается программный комплекс, в полной мере удовлетворяющий потребностям пользователей, занимающихся высокопроизводительными вычислениями.
- Портал предоставляет некоторый инструментарий для работы с информационными ресурсами, и в то же время предоставляет интерфейс для проведения вычислений на кластерных системах.

Информационно-вычислительный портал обеспечивает

- Проведение численного эксперимента на вычислительных ресурсах (кластерах), предоставляемых по запросу пользователя, обработку результатов;
- Представление информации о предстоящих и проходящих научных конференциях;
- Доступ к пополняемой и обновляемой электронной библиотеке информационных образовательных ресурсов (ИОР) по тематике высокопроизводительных вычислений;
- Организацию виртуальных обсуждений (форумов) между специалистами в области высокопроизводительных вычислений, студентами и другими пользователями портала;
- Обратную связь (анкетирование, адресное оповещение, опросы общественного мнения и др.).

Техническая поддержка



Техническое обеспечение учебный кластер

Назначение	техническое обеспечение ведения дисциплин по технологиям параллельного программирования и параллельным вычислениям
Целевая аудитория	студенты
Кол-во процессоров/ядер	10/1
Производительность	5-10 GFlops
Технология	MPI, OpenMP
Метод доступа	Telnet



Техническое обеспечение кластер-полигон

Назначение	<ul style="list-style-type: none">– Создание, отладка и тестирование параллельных приложений, реализующих различные численные методы решения прикладных задач.– Разработка и тестирование инструментов, облегчающих работу с многопроцессорными вычислительными комплексами и процесс создания эффективных параллельных алгоритмов.
Целевая аудитория	магистры, аспиранты, молодые ученые
Кол-во процессоров/ядер	4/2
Производительность	≈50 GFlops
Технология	MPI, OpenMP, UPC
Метод доступа	ssh, web-интерфейс



Техническое обеспечение университетский кластер

Назначение	Проведение численных расчетов задач гидродинамики со свободными границами Проведение численных расчетов задач электронной структуры кристаллов
Целевая аудитория	молодые ученые
Кол-во процессоров/ядер	8/4
Производительность	0,3 TFlops
Технология	MPI, OpenMP, UPC
Метод доступа	ssh

Разработка систем и инструментов для организации параллельных вычислений

Системы и инструменты для организации параллельных вычислений

1. Мониторинг состояния вычислительных узлов;
2. Автоматический контроль корректности параллельных программ;
3. Оптимизация параллельных программ;
4. Веб-доступ к библиотекам параллельных программ, размещенных на информационно-вычислительном портале, для проведения численных экспериментов;
5. “Виртуальная лаборатория”.



1. Подсистема мониторинга состояния вычислительных узлов

Цель разработки :

- эффективное использование вычислительных ресурсов

Функции системы :

- Система мониторинга основывается на сборе параметров с узлов кластера по протоколу SNMP и интегрирована в систему управления.
- Статистика с узлов кластера посредством системы управления аккумулируется в базе данных и используется системой управления для равномерной загрузки вычислительных машин кластера.

В данный момент написана система мониторинга и разрабатывается алгоритм распределения нагрузки.

2. Система автоматического контроля корректности параллельных программ

Цель разработки :

- автоматический контроль корректности MPI-программ

Функции системы:

- динамическое обнаружение ошибок во время исполнения;
- неограниченная масштабируемость по числу вычислительных узлов;
- незначительное влияние на производительность исполняемой параллельной программы.

В настоящее время реализованы методы обнаружения ошибок в операциях типа точка-точка и ведется дальнейшее развитие сервиса.



3. Система оптимизации параллельных программ

Цель разработки:

- Анализ производительности UPC программ

Функции системы:

- сборка и подготовка трассы;
- анализ трассы при помощи запрограммированных на языке экспертной системы шаблонов неэффективного поведения;
- представление результатов анализа пользователю.

Анализируемые параметры:

- Выявление разбалансировки вычислений;
- Подсчет задержек, вызванных синхронизацией и коммуникациями;
- Кэш промахи, ошибки предсказания переходов
- Накладные расходы на трассировку;
- Объем отправленных/полученных данных.



4. Система Веб-доступа к библиотекам параллельных программ

Цель разработки :

- Размещение параллельных решателей в рамках портала

Назначение:

- предоставление доступа к уже разработанным и апробированным методам решения задач динамики жидкости со свободными границами;
- запуск параллельного решателя со своим набором входных данных и параметров задачи;
- ускорение проведения расчетов сложных физических явлений;
- получение высокоточных результатов за счет существенной детализации параметров расчетов.

5. Система “Виртуальная лаборатория”

Цель разработки:

- организация виртуального лабораторного практикума в рамках курсов по высокопроизводительным вычислениям.

Назначение:

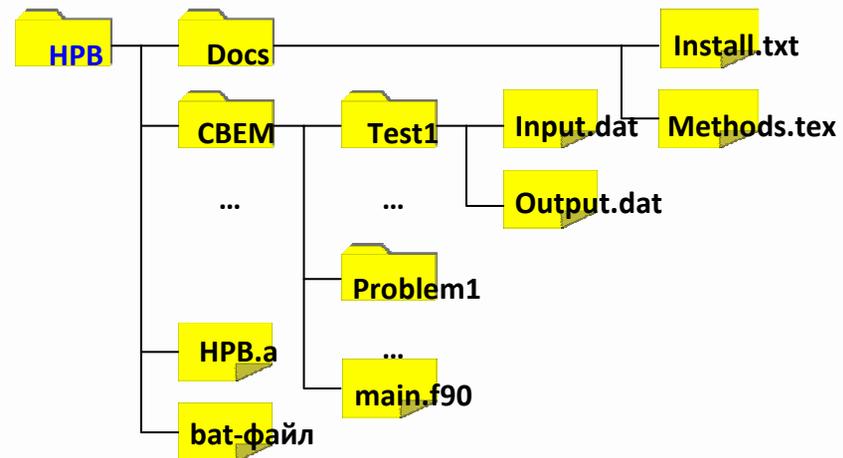
- Предоставление механизма для формирования лабораторного задания, предусматривающего исследование поведения определенного численного алгоритма;
- Предоставление возможности просмотра текста лабораторной работы, а также выполнения задания и просмотра результатов для проведения анализа.

Разрабатывается в рамках информационно-вычислительного портала КемГУ и взаимодействует с системой удаленного доступа и управления вычислительными ресурсами.

Параллельная библиотека HydroParaLib

Структура библиотеки

- Библиотека параллельных программ “HydroParaLiB” представляет собой набор подпрограмм, реализующих различные численные методы решения задач гидродинамики со свободными границами.





Методы, реализованные в библиотеке HyrdoParaLiB

- Метод граничных элементов (BEM);
- Комплексный метод граничных элементов (CBEM);
- Метод сглаженных частиц (SPH);
- Метод естественных соседей (NEM);
- Метод частиц (PM).



Расширение библиотеки для многопроцессорных систем с общей памятью

В настоящее время

- программный код библиотеки реализован с использованием функций библиотеки MPI.

Для повышения эффективности параллельного кода библиотеки требуется:

- реализация представленных в библиотеке «HydroParaLib» методов моделирования динамики жидкости для параллельных вычислительных систем с общей и распределенной памятью в виде программного кода с использованием директив OpenMP и функций MPI.
- Часть алгоритмов будет реализована на UPC с целью определения эффективности данной технологии в сравнении с гибридным использованием MPI+OpenMP.

Решение прикладных задач

Использование
«Университетского кластера»



«Университетский кластер» использование ресурса

- Факультеты:
 - кафедра ЮНЕСКО по НИТ (математический)
 - кафедра теоретической физики (физический)
- Количество пользователей:
 - 1 ученый (д.ф.-м.н.)
 - 4 молодых ученых (к.ф.-м.н.)
 - 3 преподавателя
 - 3 аспиранта
 - 2 магистра



«Университетский кластер» использование ресурса

- Решаемые задачи:
 - Расчет задачи гидродинамики со свободными границами
 - Расчет электронной структуры кристаллов
 - Система автоматического контроля корректности параллельных программ MPI
 - Система автоматизированного поиска шаблонов неэффективного поведения UPC программ

Спасибо за внимание

Малышенко В.В

vlad@kemsu.ru