Суперкомпьютерный центр «Политехнический» - вычислительные системы для любых задач

В Санкт-Петербургском политехническом университете (СПбПУ) запущен в эксплуатацию гетерогенный суперкомпьютерный центр нового поколения с интегральной производительностью 1,23 Пфлопс, показателем энергоинформационной эффективности вычислений 1.4 ГФлопс/Вт и PUE не более 1.2 (рисунок 1). Проектной целью создания СКЦ является внедрение методов предсказательного математического и имитационного моделирования в практику инженерного анализа и проектирования сложных технических систем, а также решения прикладных задач, находящихся «за гранью интуиции главного инженера-конструктора», использования технологий «вычислительного интеллекта» и обработки больших объемов данных.

Согласно программе развития СПбПУ СКЦ «Политехнический» должен играть ключевую роль в реорганизации учебно-научной деятельности вуза в рамках новой парадигмы политехнического образования и научных исследований в промышленности, основанной на интеграции фундаментальных знаний и инженерных компетенций с помощью информационно-вычислительных технологий. Выбранный подход требует непрерывного роста вычислительных ресурсов, используемых для решения возникающих междисциплинарных инженерных задач.

Рис. 1. Машинный зал СКЦ «Политехнический»

СКЦ «Политехнический» включает в себя следующие вычислительные системы:

1) Гетерогенная кластерная вычислительная система (668 двухпроцессорных вычислительных узлов, 56 узлов с ускорителями NVIDIA Tesla K40);
2) Система с глобально-адресуемой памятью (64 вычислительных узла, содержащих 192 16-ти ядерных процессора AMD Opteron 6380, 12ТБ оперативной памяти и сеть NumaConnect);
3) Система с ультравысокой многопоточностью (32 модуля RSC Petastream, содержащих 256 сопроцессоров Intel Xeon Phi 5120D);
4) Оборудование облачной инфраструктуры (44 двухпроцессорных вычислительных узлов, из них 8 узлов дополнительно оснащены графическими адаптерами NVIDIA Grid K1 и 8 узлов – NVIDIA Grid K2, средства хранения данных емкостью 576ТБ).
5) Система хранения данных (Xyratex ClusterStor 6000 с доступным дисковым пространством 1ПБ);
6) Сетевое оборудование (общую вычислительную сеть Infiniband; служебные и сервисные сети Ethernet).

Оценки характеристик пиковой производительности: кластерной вычислительной системы 938 Тфлоп/с; системы с ультравысокой многопоточностью 259 Тфлоп/с; системы с глобально-адресуемой памятью 31 Тфлоп/с.

Вычислительные системы СКЦ объединены в единую платформу для синхронизации процессов моделирования с помощью общего для всех этих систем хранилища данных. Такая технология объединения суперкомпьютерных ресурсов с использованием разделяемого хранилища данных и полученных расчетных моделей позволяет проводить согласованные расчеты различных характеристик создаваемых инженерных систем и в кратчайшее сроки «вычислять» оптимальные решения, которые могут находиться за гранью профессионального опыта.

π - Подход к развитию суперкомпьютерных технологий в СПбПУ

Подход развиваемый в СПбПУ основан на декомпозиции всех известных научно инженерных задач на классы эквивалентности вычислительных алгоритмов, для реализации которых выбираются оптимальные

вычислительные структуры, допускающие реализацию с помощью существующих суперкомпьютерных технологий, обеспечивающих [3]:

1. обработку «больших данных»;
2. мультимасштабное моделирование дискретных и непрерывных процессов;
3. виртуализацию вычислительных ресурсов и создание гибридных вычислительных структур.

Использование гибридных суперкомпьютерных вычислительных систем как инструментов проектирования новых объектов и систем открывает для России широкое окно технологических возможностей, которое позволяет сформировать устойчивую волну экономического роста, а также поднять эффективность и повысить конкурентоспособность национальной экономики на глобальном рынке наукоемкого производства и разделения труда. В некоторых вычислительных задачах декомпозиция расчетов по вычислителям с различными архитектурами позволяет сократить время вычислений в сотни раз, от недель до часов. Локализация вычислительных систем вышеприведённых классов позволяет решать одну задачу в нескольких системах одновременно. Отдельно необходимо отметить облачные технологии, которые являются основой СКЦ «Политехнический». Применение таких свойств облачных систем как динамичность, реконфигурируемость, виртуализация и эластичность к суперкомпьютерным ресурсам позволяет вывести высокопроизводительные вычисления на новый уровень и открывает новые возможности для предоставления вычислений в виде сервиса потребителям услуг СКЦ.

На базе СКЦ «Политехнический» создается центр компетенций по суперкомпьютерным технологиям, который призван создать должен интегрировать научные и инженерную группы высококвалифицированных специалистов не только для поддержки работы вычислительной техники, но и для разработки новых решений и продуктов, которые с одной стороны будут наиболее эффективно использовать ресурсы уникального вычислительного оборудования, а с другой стороны решать широкие классы уникальных научно-технических «супер задач» в первую очередь в интересах науки и промышленности страны.