



УДК 378.1
ББК 22.1р3

ВНЕДРЕНИЕ СУПЕРКОМПЬЮТЕРНЫХ ТЕХНОЛОГИЙ В ОБРАЗОВАТЕЛЬНЫЙ ПРОЦЕСС ПО НАПРАВЛЕНИЮ «ИНФОРМАТИКА И ВЫЧИСЛИТЕЛЬНАЯ ТЕХНИКА»¹

А.В. Хоперсков

Обсуждаются проблемы внедрения в учебный процесс подготовки студентов по направлениям укрупненной группы специальностей 230000 Информатика и вычислительная техника лабораторных практикумов, основанных на использовании суперкомпьютеров с массивно-параллельной архитектурой «Ломоносов» и «Чебышев», технологий параллельных вычислений на графических процессорах и облачных вычислений. Переход на графические процессоры позволяет решить проблему развития собственной материальной базы на кафедре для проведения параллельных вычислений. Разработка компьютерных моделей магистрантами в процессе обучения обеспечивает целый ряд компетенций, предусмотренных Федеральным государственным образовательным стандартом.

Ключевые слова: параллельные вычисления, облачные технологии, суперкомпьютеры, графические процессоры, лабораторный практикум.

Суперкомпьютеры с массивно-параллельной архитектурой

Суперкомпьютеры в современном понимании появились в начале 70-х годов. В эти годы был создан первый отечественный суперкомпьютер – многопроцессорная ЭВМ М-10, и вплоть до 1976 г. она оставалась наиболее мощным инструментом в СССР и мире [10]. Дальнейшее развитие такой техники отмечено легендарными сериями машин «Cray», БЭСМ, «Эльбрус», «Грап», IBM RS, SGI, NEC – SX, «Tesla GPU». В настоящее время в мировой рейтинг суперкомпьютеров «Тор 500» ежегодно включается порядка 100 новых либо обновленных машин [11]. 13 ноября 2012 г. была опубликована 40-я редакция списка 500 наиболее мощных компьютеров мира. На первом месте списка стоит новый суперкомпьютер «Titan Cray XK7», установленный в Oak Ridge National Laboratory (США), с пиковой производительностью 27.1 PFlop/s и производительностью на тесте Linpack 17.59 PFlop/s. В данной редак-

ции списка Россия представлена восьмью системами (против пяти в прошлой редакции списка).

На 26-м месте списка «Тор 500» находится суперкомпьютер МГУ «Ломоносов» производства компании «Т-Платформы», установленный в Научно-исследовательском вычислительном центре МГУ имени М.В. Ломоносова. Его пиковая производительность составляет 1.7 PFlop/s, а производительность на тесте Linpack – 901.9 TFlop/s.

Сдерживающим фактором для внедрения в учебный процесс и отчасти более широкого использования традиционных суперкомпьютеров в научной работе является использование консоли в операционной системе Linux в качестве стандартного интерфейса работы [6].

Одним из возможных решений может быть использование системы SCMS, являющейся веб-порталом с использованием методики проектирования систем Web 2.0 со специализированным программным обеспечением промежуточного уровня для взаимодействия с системным программным обеспечением суперкомпьютера [13]. Система имеет графический интерфейс пользователя, рассчитанный на неподготовленного пользователя

при условии изучения документации небольшого объема. В этом случае в качестве рабочего инструмента выступает стандартный веб-браузер. Система SCMS обеспечивает развитый графический интерфейс администратора кластера и запуск задач с помощью менеджера ресурсов кластера [6].

Для доступа к суперкомпьютеру из более традиционной ОС Windows необходимо установить дополнительные программы типа WinSCP и Putty для работы с удаленной консолью.

Внедрение суперкомпьютеров в учебный процесс подразумевает в первую очередь наборы научных задач, требующие для решения соответствующих ресурсов. Использование суперкомпьютерной техники в учебном процессе для решения рутинных задач, не обладающих научной новизной и актуальностью, представляется малоэффективным и затратным подходом. Решение оригинальных задач требует по-другому организовывать лабораторные практикумы, поскольку затруднительно заранее формализовать процесс работы в духе «делай раз, делай два», требуется организа-

ция научных групп в составе 1–2 преподавателей, 1–2 аспирантов и 2–3 студентов. Тем самым обеспечивается выполнение новых стандартов 3-го поколения, в которых научно-исследовательская работа (НИР) приобретает особо важное значение. В наибольшей степени это касается магистерских программ.

Ставится задача создания лабораторного практикума на основе имеющегося доступа к суперкомпьютерам «Чебышев» и «Ломоносов» Научно-исследовательского вычислительного центра Московского государственного университета имени М.В. Ломоносова, используя файловый менеджер Filezilla и клиентскую программу Putty для протоколов SSH и Telnet. Одна из работ основана на «Программном комплексе для численного моделирования газодинамических течений в промышленном цеху для задач вентиляции воздуха с применением параллельных технологий» (свидетельство об официальной регистрации программы для ЭВМ № 2012610119 от 10.01 2012 г.). На рисунке 1 приведен пример использования данной программы.

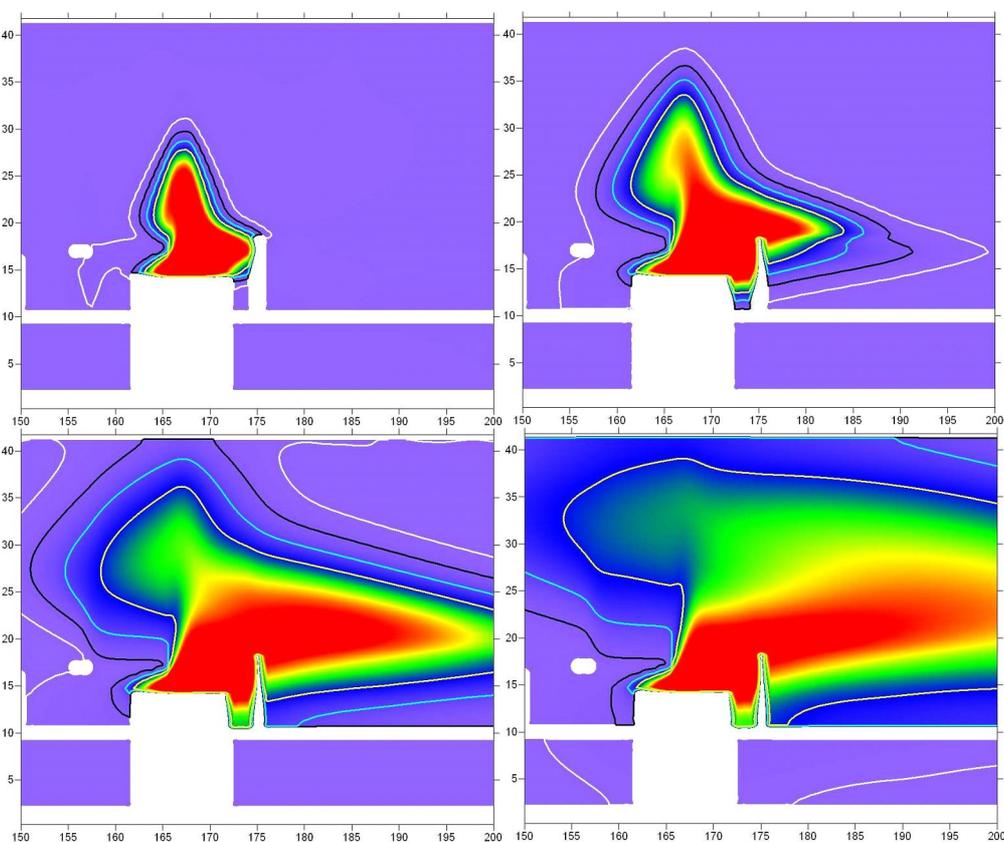


Рис. 1. Результат моделирования распределения температуры в промышленном цехе на суперкомпьютере «Ломоносов»

**Особенности ФГОС ВПО
по укрупненной группе
специальностей 230000 Информатика
и вычислительная техника**

Рассмотрим в первую очередь магистерские программы: ФГОС ВПО 230100.68 Информатика и вычислительная техника, 231000.68 Программная инженерия, 230400.68 Информационные системы и технологии.

Выделим те положения ФГОС, выполнение которых может обеспечить использование суперкомпьютерных технологий. Объектами профессиональной деятельности магистров 230100.68 являются вычислительные машины, комплексы, системы и сети и их математическое, информационное, техническое, программное, эргономическое, организационное обеспечение (п. 4.2). Научно-исследовательская деятельность является одной из пяти видов профессиональной деятельности, в рамках которой, в частности, студент должен уметь разрабатывать математические модели исследуемых процессов и изделий, а также организовывать проведения экспериментов и испытаний, анализ их результатов (п. 4.2). Долговременная работа в научной группе обеспечивает навыки организационно-управленческой деятельности по организации работы коллектива исполнителей, принятию исполнительских решений в условиях спектра мнений, определению порядка выполнения работ.

Требования к результатам освоения основных образовательных программ магистратуры определяют набор компетенций:

- способность к профессиональной эксплуатации современного оборудования и приборов (в соответствии с целями магистерской программы) (ОК-7, 230100.68);
- способность применять перспективные методы исследования и решения профессиональных задач на основе знания мировых тенденций развития вычислительной техники и информационных технологий (ПК-1, 230100.68);
- способность организовывать работу и руководить коллективами разработчиков аппаратных и/или программных средств информационных и автоматизированных систем (ПК-7, 230100.68), которые достаточно эффективно приобретаются в рам-

ках НИР с использованием суперкомпьютерных технологий.

Ряд дисциплин из базовых частей ФГОС подразумевает привлечение в той или иной мере суперкомпьютеров. Укажем:

- «Вычислительные системы» и «Технология разработки программного обеспечения» (230100.68);
- «Моделирование» (231000.68).

Задачи для суперкомпьютеров

Приведем краткие постановки задач, решаемых на кафедрах института математики и информационных технологий и физико-технического института в ВолГУ, требующих использования суперкомпьютеров:

1. Задачи прогноза и управления гидрологическим режимом для заданной территории на основе прямого гидродинамического моделирования [8].

2. Численное моделирование эволюции астрофизических объектов: галактик, сверхновых, аккреционных и протопланетных дисков, межзвездной среды [12].

3. Экология воздушно-атмосферного бассейна, моделирование распространения химико-биологических примесей [3].

4. Моделирование распространение радиации в атмосфере Земли [14].

5. Моделирование GPS-сигналов с учетом ионосферных и тропосферных задержек, многолучевости на урбанизированной территории.

6. Задачи радиолокации [5].

7. Моделирование технических объектов и процессов [2; 16].

8. Построение моделей нанобъектов (нанотрубки, графен, фуллерены) [4].

9. Расчеты кинетики химических реакций [9].

Суперкомпьютерные технологии в учебном процессе представляются наиболее эффективным способом вовлечения студентов в реальную практику научных исследований. Такой подход развивается в ведущих университетах страны и мира [7]. Характеристика суперкомпьютерных центров в отечественных университетах приведена в таблице 1, отметим также суперкомпьютеры в Новосибирском ГУ, Уфимском государственном авиационном ТУ, Южном федеральном университе-

те, Вятском ГУ, Сибирском ФУ. Укажем на программу «Университетский кластер» – ряд мероприятий, направленных на создание единой инфраструктуры исследований, разрабо-

ток и образования в области параллельных и распределенных вычислений, а также создание сообщества пользователей и разработчиков соответствующих технологий.

Таблица 1

Параметры отечественных суперкомпьютеров

Название университета	Характеристики	Примечание
Московский государственный университет	«Ломоносов»: пиковая производительность – 1.7 PFlop/s, производительность на тесте Linpack – 901.9 TFlop/s; кол-во CPU/ядер = 12422/82468	26-е место Top500
Южно-Уральский государственный университет	«РСК Торнадо ЮУрГУ»: производительность на тесте Linpack – 146.8 TFlop/s	170-е место Top500
Южно-Уральский государственный университет	«СКИФ-Аврора»: пиковая производительность – 117.64 PFlop/s, производительность на тесте Linpack – 100.4 TFlop/s	303-е место Top500
Нижегородский государственный университет	«СКИФ»: пиковая производительность – 103.31 PFlop/s, производительность на тесте Linpack – 51.86 TFlop/s; кол-во CPU/ядер = 120/3040	2 кластера
Томский государственный университет	«СКИФ-Cyberia»: пиковая производительность – 62.35 PFlop/s, производительность на тесте Linpack – 47.88 TFlop/s; кол-во CPU/ядер = 1280/5424	2006 г.
Московский физико-технический институт	«SCALARE»: пиковая производительность – 41.57 PFlop/s, производительность на тесте Linpack – 36.28 TFlop/s; кол-во CPU/ядер = 224/1792	2010 г.
Северо-Восточный федеральный университет	Пиковая производительность – 23.50 PFlop/s, производительность на тесте Linpack – 20.21 TFlop/s; кол-во CPU/ядер = 320/1920	2 кластера
Белгородский государственный университет	Пиковая производительность – 32.74 PFlop/s, производительность на тесте Linpack – 19.47 TFlop/s; кол-во CPU/ядер = 40/980. «Нежеголь»: 32 Tflop/s, 320 ядер	2012 г.
Санкт-Петербургский государственный университет	Пиковая производительность – 40.14 PFlop/s, производительность на тесте Linpack – 17.66 TFlop/s; кол-во CPU/ядер = 40/980	7 кластеров

Параллельные технологии на графических процессорах

Основным фактором, стоящим на пути внедрения традиционных суперкомпьютеров в учебный процесс, является их высокая цена. В последние годы достойным конкурентом стало применение систем на графических процессорах [1]. На кафедре информационных систем и компьютерного моделирования ВолГУ преподавание параллельных методов вычислений на графических процессорах ведется в рамках дисциплин:

- «Алгоритмы параллельных вычислений»;

- «Компьютерное моделирование»;

- «Вычислительные системы».

Технической основой данных курсов являются:

1) Вычислительная рабочая станция на основе вычислительного процессора NVIDIA Tesla C1060, 240 ядер.

2) Вычислительная станция на базе GPU Six Core Intel Core i7-990X 3460/6.4/12M, DDR3 24Gb, 4 x NVIDIA® TESLA C2070 6GB, 1792 ядра (рис. 2).

3) Вычислительная станция на базе графического чипа NVIDIA Quadro 5000, 16 Гбт, 352 ядра.

Вычислительные кластеры на графических процессорах используют отличную от суперкомпьютеров на CPU архитектуру NVIDIA Fermi, поддерживающую универсальные вычисления на GPU при помощи стандартных языков программирования, таких как C/C++ и Fortran, а также развивающихся API, таких как OpenCL и Direct Compute.

Распределенные и облачные вычисления

Анализ развития информатики и вычислительной техники указывает на начало массового перехода к облачным технологиям обработки данных, в которых вычислительные ресурсы и мощности предоставляются пользователю в виде Интернет-сервиса [15]. Облачные вычисления можно считать естественным развитием GRID-вычислений. Начинается внедрение в учебный процесс указанных технологий на основе сотрудничества с научно-исследовательскими подразделениями ИТМО и применения в первую очередь:

- SciLab – многоцелевого пакета компьютерной математики и визуализации. Прикладной пакет SciLab представляет собой свободно распространяемую систему, позволяющую проводить обработку и визуализацию научных данных и поддерживающую собственный скриптовый язык. Пакет SciLab предназначен для выполнения инженерных и научных вычислений, а также построения различных графиков и диаграмм;
- ORCA – прикладного пакета, позволяющего проводить высокоточные квантово-химические расчеты, в том числе расчеты атомно-молекулярных систем, рассчитывать характеристики как основного, так и возбужденных состояний. Пакет ORCA является универсальным квантово-химическим пакетом, реализующим набор высокоточных методов квантовой химии, позволяющих моделировать основное и возбужденные состояния произвольных молекулярных систем. В числе прочих реализуется набор методов, учитывающих эффекты межэлектронной корреляции, высокоэффективные методы, позволяющие оптимизировать геометрию, рассчитывать колебательные (инфракрасные и рамановские) спектры;
- GAMESS – прикладного пакета, реализующего разнообразные квантово-химические методы. Одной из его особенностей являются широкие возможности учета влияния растворителя в квантовой химии. В частности, он позволяет моделировать эффекты растворителя с использованием модели поляризуемого континуума, что непосредственно используется при решении задачи предсказания константы депротонирования;
- NAMD – прикладного пакета, предназначенного для моделирования методом молекулярной динамики в рамках постановок задач: классическая молекулярная динамика (моделирование систем вблизи состояния равновесия), неравновесная молекулярная динамика (моделирования процессов релаксации, моделирование систем при наличии внешних сил), расчет изменения свободной энергии вдоль заданных множеств фазовых траекторий, минимизация энергии системы;
- прикладного пакета NWChem для высокоточных расчетов атомно-молекулярных систем, анализа возбужденных состояний. Пакет содержит методы, базирующиеся на методах Хартри – Фока, функционала плотности, многоконfigurационного самосогласованного поля;
- MGL Tools – пакета для выполнения операции подготовки структуры рецептора. Предназначен для работы с молекулярными структурами, их обработки, конвертирования и визуализации;
- SWAN – пакета волнового моделирования на основе волновой модели третьего поколения, предназначенной для расчета случайных коротких ветровых волн в прибрежных морских районах и внутренних водах.



Рис. 2. Студентка группы ИСТ-081 Т. Дьяконова конфигурирует вычислительную станцию TESLA C2070

Научные издания и конференции по тематике суперкомпьютерных технологий

ФГОС уровня магистров требуют:

1. Умений «подготовки научно-технических отчетов, обзоров, публикаций по результатам выполненных исследований» (п. 4.4 230100.68); «анализа результатов проведения экспериментов, подготовки и составления обзоров, отчетов и научных публикаций» (п. 4.4 230400.68). Эти требования определяют профессиональную компетенцию (ПК-12, 230400.68) «способность проводить анализ результатов проведения экспериментов, осуществлять выбор оптимальных решений, подготавливать и составлять обзоры, отчеты и научные публикации».

2. В рамках профессионального цикла 230100.68 студент должен владеть «навыками самостоятельной научно-исследовательской и научно-педагогической деятельности, методиками сбора, переработки и представления научно-технических материалов по результатам исследований к опубликованию в печати», а ФГОС 230400.68 предусматривает владение «навыками составления инновационных проектов».

В связи с этим встает проблема выбора научных изданий для публикации студенческих научных работ, связанных с суперкомпьютерными технологиями. Ограничимся перечнем изданий на русском языке, в которых заметная доля публикуемых работ относится к параллельным вычислениям, проектированию облачных интерфейсов, GRID-вычислениям:

Журналы по суперкомпьютерной тематике

«Алгоритмы, методы и системы обработки данных»
 «Вестник кибернетики»
 «Вестник компьютерных и информационных технологий»
 «Вестник Южно-Уральского государственного университета. Серия “Математическое моделирование и программирование”»
 «Вестник Пермского университета. Серия “Информационные системы и технологии”»

«Вычислительные методы и программирование: новые вычислительные технологии»
 «Вычислительные технологии»
 «Информатика и её применения»
 «Информатика и системы управления»
 «Информационные системы и технологии»
 «Информационные ресурсы России»
 «Информационные технологии»
 «Информационные технологии моделирования и управления»

«Информационные технологии и вычислительные системы»
 «Компьютерные исследования и моделирование»
 «Математическое моделирование»
 «Прикладная информатика»
 «Программирование»
 «Программная инженерия»
 «Программные продукты и системы»

«Программные системы: теория и приложения»
 «Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики»
 «Открытые Системы/СУБД»
 «Сибирский журнал вычислительной математики»
 «Системы и средства информатики»
 «Т-Сотт – Телекоммуникации и Транспорт»

ПРИМЕЧАНИЕ

¹ Работа поддержана ФЦП «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» 2009–2013 гг. (проект № 14.В37.21.028), грантом РФФИ 11-07-97025, Минобрнауки (тема «Системы мониторинга, диагностики и управления в экологии и медицине на основе информационных технологий и компьютерного моделирования»).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Адинец, А. Графический вызов суперкомпьютерам / А. Адинец, В. Воеводин // Открытые системы. СУБД. – 2008. – № 4. – С. 35–41.
2. Афанасьев, А. М. Краевые эффекты при электромагнитной сушке протяженных образцов с прямоугольным поперечным сечением / А. М. Афанасьев, Б. Н. Сиплиный // Физика волновых процессов и радиотехнические системы. – 2010. – Т. 13, № 1. – С. 90–94.
3. Барт, А. А. Математическая модель для прогноза качества воздуха в городе с использованием суперкомпьютеров / А. А. Барт, Д. А. Беликов, А. В. Старченко // Вестник Томского государственного университета. Математика и механика. – 2011. – № 3. – С. 15–24.
4. Белоненко, М. Б. Усиление электромагнитных импульсов в графене с хаббардовским взаимодействием однородным высокочастотным переменным полем / М. Б. Белоненко, Н. Г. Лебедев, Н. Н. Янюшкина // Химическая физика. – 2010. – Т. 29, № 9. – С. 3–8.
5. Верстаков, Е. В. Потенциальная точность представления двумерного сигнала рядом Прони / Е. В. Верстаков, В. Д. Захарченко // Известия Волгоградского государственного технического университета. – 2010. – Т. 3, № 4. – С. 101–104.
6. Головинский, А. Л. Веб-портал системы управления суперкомпьютером / А. Л. Головинский, А. Л. Маленко, Л. Ф. Белоус // Вычислительные методы и программирование: новые вычислительные технологии. – 2010. – Т. 11, № 2. – С. 130–136.
7. Дюкова, Ю. В. Томском политехе тоже запустили суперкомпьютер / Ю. Дюкова // Новые технологии и формы обучения. – 2007. – № 5. – С. 49–51.

8. Задача управления гидрологическим режимом в эколого-экономической системе «Волжская ГЭС – Волго-Ахтубинская пойма». Ч. 1. Моделирование динамики поверхностных вод в период весеннего паводка / А. В. Хоперсков, С. С. Храпов, А. В. Писарев, А. А. Воронин, М. В. Елисеева, И. А. Кобелев // Проблемы управления. – 2012. – № 5. – С. 18–25.
9. Иванов, А. И. Кинетика быстрых фотохимических реакций разделения и рекомбинации зарядов / А. И. Иванов, В. А. Михайлова // Успехи химии. – 2010. – Т. 79, № 12. – С. 1139–1163.
10. Крупский, А. А. Первому отечественному суперкомпьютеру – 30 лет / А. А. Крупский, В. С. Мухтарулин, Ю. В. Рогачев // Вопросы радиоэлектроники. – 2006. – № 2. – С. 1–10.
11. Норенков, И. П. Суперкомпьютеры списка TOP500 / И. П. Норенков // Информационные технологии. – 2011. – № 4. – С. 78.
12. Параллельный алгоритм для моделирования динамики газа в сильно неоднородных гравитационных полях / С. А. Хоперсков, А. В. Хоперсков, А. В. Засов, М. А. Бутенко // Вестник УГАТУ. Серия «Управление, вычислительная техника и информатика». – 2012. – Т. 16, № 3 (48). – С. 108–114.
13. Портал кластерных вычислений для управления вычислительными процессами на суперкомпьютерном комплексе / А. А. Якуба, А. Л. Головинский, А. Ю. Бандура, С. А. Горенко, Д. А. Ефременик // Кибернетика и системный анализ. – 2009. – Т. 6. – С. 97–105.
14. Распределенная информационно-вычислительная система «Атмосферная радиация» / К. М. Фирсов, Т. Ю. Чеснокова, Е. М. Козодоева, А. З. Фазлиев // Оптика атмосферы и океана. – 2010. – Т. 23, № 5. – С. 364–370.
15. Тарнавский, Г. А. Первый международный конгресс по «облачным» технологиям – CLOUD COMPUTING CONGRESS CCC-2010 / Г. А. Тарнавский // Информационные технологии. – 2010. – № 10. – С. 77–78.
16. Формирование нестационарных режимов при моделировании аспирационных течений: неустойчивость Кельвина – Гельмгольца / А. В. Хоперсков, В. Н. Азаров, С. А. Хоперсков, Е. А. Коротков, А. Г. Жумалиев // Вестник ВолГУ. Сер. 1, Математика. Физика. – 2011. – № 1 (14). – С. 151–155.

**INTRODUCTION OF SUPERCOMPUTER TECHNOLOGIES
IN THE EDUCATIONAL PROCESS IN “COMPUTER SCIENCE”**

A. V. Khoperskov

The paper considers the problems of introducing laboratory courses into the learning process for students of the enlarged group of specialties 230 000 Informatics and Computer Engineering, based on the use of supercomputers with massively parallel architecture ‘Lomonosov’ and ‘Chebyshev’, parallel GPU computing technology and cloud computing. Transition to graphics processors makes it possible to solve the problem of developing facilities for parallel computing at the chair. Computer models developed by Master students during their training contribute to building a number of competences provided by the Federal State Educational Standard.

Key words: *parallel computing, cloud computing, supercomputers, graphics processors, laboratory practice.*