
НАУКОВІ НАПРЯМИ

УДК 004.45; 004.2

А.Л. ГОЛОВИНСЬКИЙ, А.Л. МАЛЕНКО,
І.В. СЕРГІЄНКО, В.Г. ТУЛЬЧИНСЬКИЙ

Інститут кібернетики ім. В.М. Глушкова Національної академії наук України
просп. Академіка Глушкова, 40, Київ, 03680, Україна

ЕНЕРГОЕФЕКТИВНИЙ СУПЕРКОМП'ЮТЕР СКІТ-4

У роботі розглянуто загальні принципи та сучасні апаратні рішення для підвищення енергоефективності комп'ютерів, описано їх застосування в побудові вітчизняного суперкомп'ютера СКІТ-4. Проаналізовано використання суперкомп'ютерів в Україні, нагальні проблеми і перспективи розвитку галузі високопродуктивних обчислень.

Ключові слова: суперкомп'ютер, кластер, гібридна архітектура, GPU, енергоефективність обчислень.

ВСТУП

В Інституті кібернетики ім. В.М. Глушкова (ІК) НАН України створено енергоефективний суперкомп'ютер СКІТ-4 з продуктивністю 11,82 терафлопс за тестом LINPACK, тобто майже 12 трільйонів операцій за секунду при розв'язуванні систем лінійних рівнянь [1]. Це більше, ніж сумарна продуктивність суперкомп'ютерів НТУУ «КПІ» та ІК НАН України, які впродовж останніх чотирьох років очолювали список найпотужніших обчислювальних засобів України. За вдвічі більшої продуктивності СКІТ-4 споживає вчетверо менше електроенергії, ніж суперкомп'ютер попереднього покоління СКІТ-3 [2].

СКІТ-3 і СКІТ-4 разом становлять кластерний комплекс СКІТ (рис. 1), зв'язаний високошвидкісною академічною мережею з понад 20 інститутами й університетами, розташованими в різних регіонах України. СКІТ є основою Ресурсного центру Українського національного гріду (УНГ) і пройшов сертифікацію Європейської грід-ініціа-

тиви (EGI) [3]. Суперкомп'ютери СКІТ доступні для проведення обчислювальних експериментів та застосування в наукових дослідженнях установами НАН України через УНГ і в режимі використання кластера.

СУПЕРКОМП'ЮТЕРИ ЯК ІНСТРУМЕНТ НАУКОВО-ТЕХНІЧНОГО РОЗВИТКУ КРАЇНИ

Завдяки застосуванню суперкомп'ютерів СКІТ, починаючи з 2005 р., науково-дослідні інститути НАН України отримали важливі фундаментальні та прикладні результати з біофізики, біохімії, фізичної хімії, квантової механіки, матеріалознавства, медицини, геології/геофізики, нанотехнологій тощо. Суперкомп'ютери СКІТ використовують також для розв'язання загальнодержавних задач (зовнішня розвідка, державний бюджет, оптимізація обслуговування державного боргу) і задач високотехнологічних державних підприємств (АНТК «Антонов», Український державний геологорозвідувальний інститут, НВП «Карат»).

Впроваджено застосування СКІТ в екології (зокрема, моделювання впливів споруд глибоководного суднового ходу «Дунай —

© А.Л. Головинський, А.Л. Маленко,
І.В. Сергієнко, В.Г. Тульчинський, 2013

Чорне море» на гідрологічні й морфодинамічні параметри у транскордонному контексті, прогнозування наслідків скидання вод АЕС у водосховища та прогнозування затоплення прибережних зон і заплав), енергозаощаджені (система «Маневр» для оптимізації рішень у задачах добового погодинного електричного і теплового навантаження енергоблоків теплоцентралі), геологій й видобутку корисних копалин (система «Надра» для аналізу усталеного руху рідини в природних тривимірних багатокомпонентних ґрутових об'єктах із повним або частковим вологонасиченням, програми моделювання та оброблення даних сейсморозвідки геологічно-складних нафтогазових родовищ з наявністю ризикових розломів, зон тріщинуватості, соляних куполів), метеорології (система зведеніх гідрометеорологічних моделей з урахуванням супутникової інформації) тощо.

Обчислювальні ресурси СКІТ активно використовують понад 15 організацій НАН і МОНмолодьспорт України. Споживачі найбільшої частини ресурсів СКІТ наведено на рис. 2. Крім того, суперкомп'ютери застосовують Харківський національний університет ім. В.Н. Каразіна та низка установ НАН України: Інститут геохімії, мінералогії та рудоутворення ім. М.П. Семененка, Інститут металофізики ім. Г.В. Курдюмова, Донецький фізико-технічний інститут ім. О.О. Галкіна. Ще більше користувачів виходять на СКІТ через УНГ. Частка грід-задач за останні три роки зросла втрічі – з менш ніж 6% до 18–20% від загального обсягу ресурсів комплексу СКІТ.

Задачі, які вирішують за допомогою суперкомп'ютерів, часто взагалі неможливо розв'язати в інший спосіб із потрібною точністю чи детальністю. Насамперед це стосується задач моделювання, де критичним параметром є розмір сітки. Наприклад, дослідження довготривалого впливу забруднення на якість питної води неефективно проводити на окремій ділянці з огляду на невизначеність умов на краях моделі, якщо вони не відповідають природним межам системи



Рис. 1. Кластерний комплекс СКІТ після підключення СКІТ-4

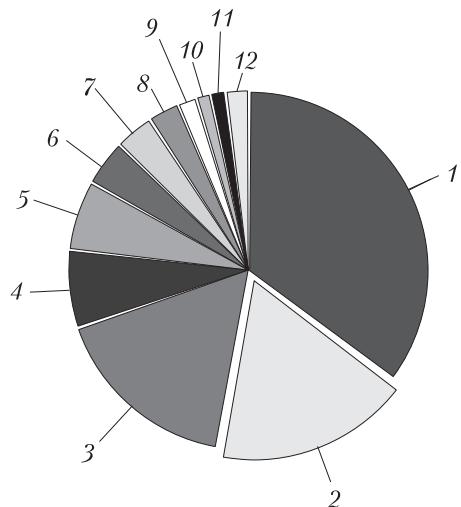


Рис. 2. Використання суперкомп'ютерів СКІТ у 2010–2012 рр.: 1 – Інститут молекулярної біології і генетики; 2 – Інститут кібернетики ім. В.М. Глушкова; 3 – державні установи; 4 – Український національний грід; 5 – Інститут фізики конденсованих систем; 6 – Фізико-технічний інститут низьких температур ім. Б.І. Веркіна; 7 – Інститут математичних машин і систем; 8 – Інститут гідромеханіки; 9 – Ужгородський національний університет; 10 – Інститут органічної хімії; 11 – Запорізький інститут державного та муніципального управління; 12 – інші

вододілу поверхневих і підземних потоків. Отже, масштаб такого дослідження – тисячі й десятки тисяч квадратних кілометрів, а глибинність – сотні метрів. Потужність

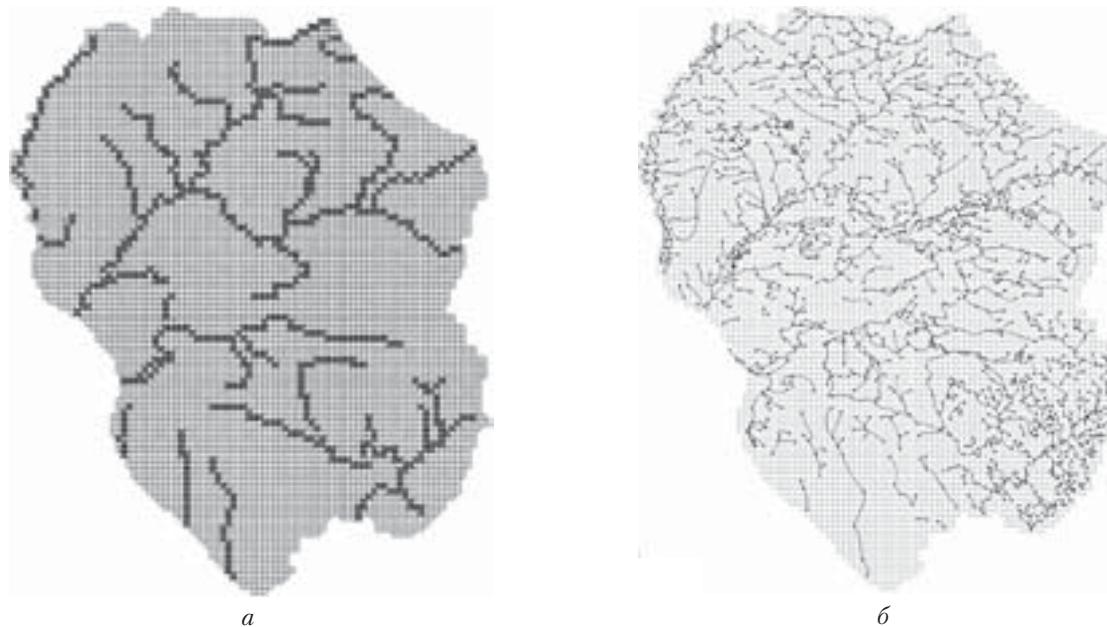


Рис. 3. Зміна детальноти гідродинамічної моделі Чернігівської області завдяки використанню суперкомп'ютерів СКІТ; *a* – стара сітка, *b* – нова [4, 5]

водоносного шару – від кількох метрів, ширина більшості річок не перевищує 10–20 м. Тож ідеться про сітки з мільйонів чи десятків мільйонів комірок. Обрахунок таких сіток потребує на кожному часовому кроці розв'язку системи рівнянь відповідного розміру (кілька рівнянь на комірку). Використання суперкомп'ютера дає змогу кардинально підвищити детальність моделі, а отже, і достовірність результатів (рис. 3).

Сучасні суперкомп'ютери як інструменти розв'язання класів надскладних задач створюють умови для нового прискорення техніко-економічного розвитку в світі, нарешті забезпечивши можливість моделювати природні та штучні об'єкти з необхідною точністю й детальністю. В останні роки вартість і тривалість віртуального моделювання стали меншими за витрати на створення й випробування відповідного матеріального зразка. Це досягнення радикально змінює умови конкуренції в проектуванні сучасної техніки, розробленні нових матеріалів, лікарських засобів тощо. Важливим застосуванням суперкомп'ютерів у розвинених країнах

стає керування раціональним використанням матеріальних і фінансових ресурсів. Понад 60% високопродуктивних комп'ютерів у світі використовують для потреб економіки й фінансів, промисловості та нафтогазової галузі, і лише 40% – на розв'язання традиційних військових і наукових задач. Сполучені Штати Америки, Об'єднана Європа, Китай і Росія вкладають значні кошти у підвищення темпів розвитку технологій високопродуктивних обчислень. Президенти Росії та США віднесли розвиток цієї галузі до завдань національного пріоритету, вважаючи, що застосування високопродуктивних обчислювальних технологій найближчим часом визначатиме як загальну конкурентоспроможність економіки, так і здатність країни забезпечувати різноманітні потреби населення та суб'єктів господарювання в інформаційному суспільстві. Серед задач, для розв'язання яких Україні потрібен суперкомп'ютер, можна назвати такі:

1. В енергетиці:

- розрахунки геологічної моделі за даними геофізичних, насамперед сейсмічних до-

сліджень для визначення місця і способу буріння свердловин для видобутку нафти й газу на материкову та на шельфі. Така задача вимагає ітеративного оброблення сотень гігабайтів і терабайтів даних, причому найбільш застосовні методи потребують чималих розрахунків. Вартість робіт за умови замовлення їх за кордоном становить 500–1000 дол. США на 1 км²;

- моделювання геофізичних експериментів для підвищення якості та зниження собівартості польових робіт: вартість оброблення даних сейсморозвідки становить лише близько 5–10% вартості польових спостережень. Моделювання 3D є надзвичайно обчислюально складним процесом. Для типових схем спостережень розмір сітки досягає 5–6 терабайт, розрахунок хвильової картини від одного сейсмоджерела на сучасному кластері з 2000 процесорів триває 12–13 годин, а таких джерел потрібно розрахувати тисячі;

- розроблення й підтримання постійно діючої гідродинамічної моделі родовища для оптимізації видобутку продукту. Застосування суперкомп'ютера для підвищення детальноти таких моделей забезпечує збільшення нафтovidобутку залежно від родовища до 50–80% замість сучасних 20–25%. Аналогічні моделі використовують для моніторингу та керування підземними газовими сховищами, що є основою газотранспортної системи України;

- гідродинамічне моделювання систем тепловідведення й охолодження ТЕЦ, котелень та АЕС дає змогу зменшити собівартість конструкцій і підвищити їхні ККД. Переважна більшість атомних енергоблоків України майже відробили свій ресурс і мають бути оновлені впродовж найближчих років. Розмірність гідродинамічних розрахунків визначається детальністю моделі, а загальна розмірність оптимізаційної задачі експоненційно зростає з кількістю розглянутих варіантів.

2. У промисловості:

- гідродинамічні/аеродинамічні дослідження є основою якості та економічності двигу-

нів, літаків, суден, автомобілів. У цій галузі суперкомп'ютерні розрахунки вже стали дешевими і швидшими за натурні експерименти. Йдеться про прискорення проектування майже вдвічі та зниження кількості натурних експериментів уп'ятеро. Останнє особливо відчутно для авіапромисловості, оскільки в Україні немає жодної аеродинамічної труби достатнього розміру для випробування справжнього літака;

- розрахунки міцності конструкцій потрібні як для промислових виробів (двигунів, літаків, автомобілів тощо), так і для проектування будівель і споруд — від мостів до атомних реакторів. Звичайні методики, основані на нормативах, не працюють, якщо розміри або форма конструкцій виходять за традиційні рамки. Наприклад, причину відомої аварії в аквапарку «Трансвааль» у Москві в 2004 р. було встановлено за допомогою моделювання на паралельному комп'ютері;

- молекулярна динаміка і квантова хімія є основою сучасної фармакології, розроблення нових матеріалів і сплавів. Обидва ці методи чисельного моделювання вимагають величезних розрахунків.

3. У сільському господарстві та екології:

- оброблення аерокосмічної інформації в реальному часі є обчислюально складною задачею, але воно дозволяє прогнозувати врожай і погоду, виявляти й визначати проблеми росту рослин, небезпеку пожеж, оперативно оцінювати стан ґрунту, лісу, відстежувати процеси посіву, збору врожаю тощо;

- моделювання є потужним інструментом передбачення екологічних і техногенних катастроф, основою планування заходів з мінімізації та усунення їх наслідків. На відміну від моделей, застосуваних в енергетиці та промисловості, екологічні моделі охоплюють цілі регіони і внаслідок надзвичайних розмірів узагалі не можуть бути розраховані з корисною детальністю без суперкомп'ютерів.

4. У державному й місцевому управлінні:

- застосування суперкомп'ютера як «хмарного» сховища даних забезпечує найдешевший

спосіб інформаційно-безпечного, надійного та безвідмовного збереження інформації в електронному вигляді;

- «хмарні» сервери для органів управління набагато дешевші за фізичні комп'ютери за всіма параметрами (придбання, обслуговування, оновлення).

У багатьох випадках використання закордонних суперкомп'ютерів небажане не тільки з економічних причин, але й з погляду інформаційної безпеки. Зокрема це стосується оброблення даних, що становлять комерційну або державну таємницю. Наприклад, у Росії діють обмеження на вивезення польових даних геофізичних досліджень родовищ корисних копалин, тому нафтогазова галузь є одним із головних користувачів російських суперкомп'ютерних технологій.

Проте не лише створення, а й експлуатація суперкомп'ютерів є надзвичайно витратною, особливо у зв'язку з постійним зростанням цін на електроенергію. Роботи зі зниження експлуатаційних витрат суперкомп'ютерів насамперед пов'язані з підвищенням їхньої енергоефективності, що вимірюється в мільйонах операцій, тобто мегафлопсах на 1 ват (Мфлопс/Вт).

Розглянемо докладніше парадигму енергоефективних обчислень, що радикально змінила суперкомп'ютерну галузь упродовж останніх трьох років, та її втілення в архітектурі й технічних рішеннях апаратно-програмного комплексу вітчизняного суперкомп'ютера СКІТ-4.

НЕОДНОРІДНА БАГАТОЯДЕРНІСТЬ ЯК ШЛЯХ ДО ЕКОНОМІЇ ЕЛЕКТРОЕНЕРГІЇ

Масовий перехід індустрії від переважного випуску одноядерних процесорів до переважного випуску багатоядерних, що розпочався в 2005 р., зумовлений низкою причин [6]. По-перше, проектувальники процесорів зіткнулися з необхідністю обмежити частоту, щоб захистити процесор від перегрівання, спричиненого технічною неможливістю наявними способами відведення тепла компенсувати теплову щільність, яка зростає експоненційно (рис. 4). Ця проблема відома

як «енергетична стіна» (power wall, чи frequency wall).

Рекорд тактової частоти (3,8 ГГц) був установлений процесором Intel Pentium 4 Prescott у 2004 р., однак відтоді частоти процесорів знизилися через необхідність раціонального співвідношення ефекту до витрат поблизу «енергетичної стіни».

По-друге, подвоюючись кожні два роки відповідно до закону Мура, кількість транзисторів на кристал досягла в середині 2000-х років таких значень, які вже неможливо було раціонально використати в одному ядрі. Так, ніколи не комерціалізована процесорна архітектура Intel Tejas містила 40-етапний конвеєр. Конвеєри, кеш, засоби передбачення циклів, обчислення наперед та інші внутрішні механізми оптимізації традиційного процесора спрямовані на винайдення й використання неявного паралелізму, який програміст склав у послідовних кодах програми. Звичайно, можливості автоматичного пошуку паралельності на рівні асемблерних команд обмежені. Це так звана «стіна розпаралелювання інструкцій» – Instruction Level Parallelism (ILP) wall. Більше того, вбудовані механізми оптимізації займають транзистори, які можна було б використати в арифметично-логічному пристрой (АЛП), що, власне, виконує всі обчислення (рис. 5а).

Відносне зменшення споживання електроенергії виявилося додатковою перевагою багатоядерних процесорів. Теорія цього ефекту відома з середини 1990-х років. Уперше багатоядерність як спосіб підвищення енергоефективності обґрунтували А. Чандракасан з колегами [7]. За їхньою моделлю, заміна одного ядра на два ядра половинної частоти знижує споживання енергії у 2,5 раза, проте зберігає пікову продуктивність. У реальних задачах такий процесор з двох повільних ядер буде менш потужним, ніж початковий одноядерний. Проте загалом багато ядер, що працюють на меншій частоті, мають принципово вищу енергоефективність.

За 7 років з початку масового випуску багатоядерних процесорів число ядер на кристал зросло з 2 до 16 (в IBM Power BQC, що

разом з технологією Hyper-Threading забезпечує одночасне виконання 64 потоків на процесор). Проте подальше зростання кількості ядер обмежене латентністю спільної однорідної пам'яті, що типово сягає тисяч тактів. Це обмеження відоме як «стіна пам'яті» (memory wall).

Вихід полягає у відмові від підтримання ілюзії однорідного доступу до пам'яті, тобто заміни симетричної мультиобробки (SMP) на більш складну архітектуру. Історично перший крок у цьому напрямі було зроблено трансп'ютерами 1980-х років, однак вони не набули значного поширення і швидко відійшли під тиском поступу дешевих універсальних процесорів. Успішнішим виявилося запровадження неоднорідного доступу до пам'яті (NUMA) у суперкомп'ютерах 1990-х років, коли швидкість арифметично-логічних операцій значно випередила швидкодію доступу до пам'яті. На рівні загальної архітектури NUMA втратила позиції у зв'язку з широким розповсюдженням кластерів, натомість у формі неоднорідного доступу до кеша з підтримкою когерентності (ccNUMA) вона і нині є основою численних багатоядерних і багатопроцесорних архітектур. Зокрема, Intel у 2007 р. почала використовувати її в процесорах x86 та Itanium (архітектури Nehalem і Tukia).

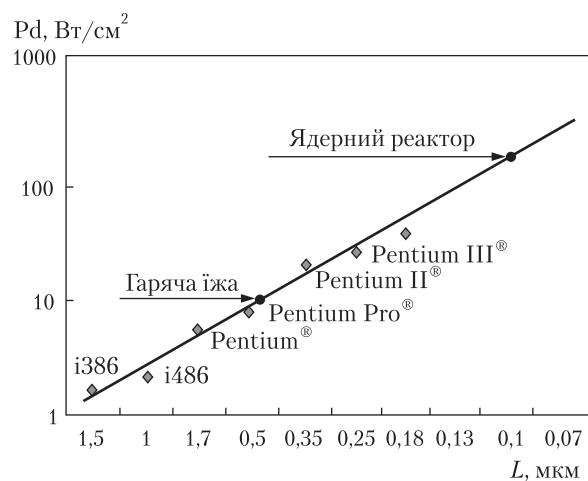


Рис. 4. Щільність транзисторів і енергетична щільність процесорів Intel

Прямий шлях до неоднорідної багатоядерності було обрано на початку 2000-х стратегічним альянсом Sony Computer Entertainment, Toshiba та IBM, відомим під власною назвою STI. Вони скомбінували процесорне ядро загального призначення IBM PowerPC з кількома векторними співпроцесорами, досягнувши значного прискорення однотипного оброблення даних. Цю архітектуру, відому під назвами Cell Broadband Engine Architecture (CBEA), Cell BE

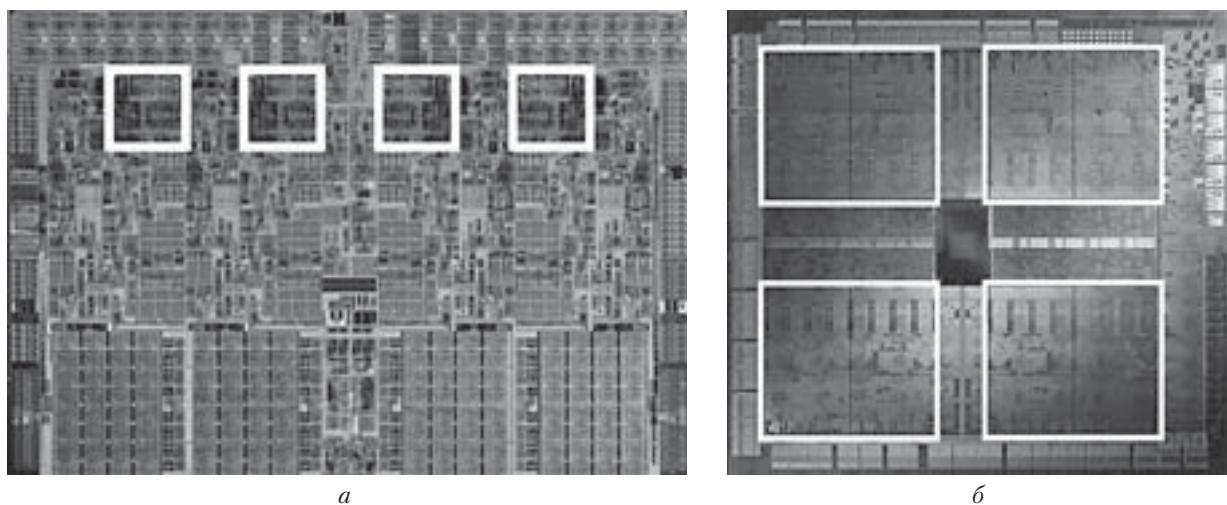


Рис. 5. Кристали *a* – Intel Core i7 та *б* – GK104 архітектури NVIDIA Kepler; білими рамками оточено «корисні» АЛП і ядра

чи просто Cell, було в 2005 р. реалізовано в процесорі PowerXCell 8i для ігрової консолі Sony PlayStation 3. У травні 2008 р. гібридний суперкомп'ютер IBM Roadrunner з вузлами, побудованими на комбінації процесорів Opteron та PowerXCell, вперше у світі подолав поріг продуктивності в 1 петафлопс. Він очолював рейтинг понад 4 роки. Водночас архітектура PowerXCell 8i утримувала лідерство у рейтингу енергоефективних суперкомп'ютерів Green500 (www.green500.org).Хоча в наступні роки IBM відмовилася від розвитку гібридних комп'ютерів і зосередилася на низькочастотних SMP з універсальних ядер, цей напрям підхопили Intel (процесори Xeon Phi з архітектурою MIC) та AMD (процесори FX з архітектурою Bulldozer).

Потокова архітектура з'явилася на ринку високопродуктивних обчислень невдовзі після Cell. Вона розширила традиційну векторну архітектуру концепціями ієрархічної кеш-пам'яті та дублюванням АЛП у ядрах, що дало змогу ефективно обробляти набагато більше потоків, ніж кількість ядер. Наприклад, кожне з 80 ядер NVIDIA CUDA Fermi паралельно обслуговує до 1024 потоків, і переключення між ними займає 1 такт, що на два порядки швидше за переключення між 2–4 потоками на ядро універсальних процесорів з підтримкою Hyper-Threading. Ідею потокової архітектури було вперше запропоновано і реалізовано лабораторією графіки Стенфордського університету. Перший потоковий комп'ютер Merrimac мав на порядок більшу продуктивність на одиницю вартості, ніж кластерні комп'ютери того часу, але не знайшов комерційного впровадження. Тоді розробники Merrimac, Ян Бак з колегами, запропонували використовувати як потокові співпроцесори потужні графічні карти (GPU) і розробили першу мову програмування Brook-GPU для потокових обчислень на GPU. Наприкінці 2006 р. NVIDIA та ATI (дещо пізніше приєднана до AMD) почали рекламиувати комерційні графічні карти як обчислювальні прискорювачі загального призначення (GPGPU) для гібридних комп'ютерів.

GPGPU перевершує інші паралельні архітектури, пропонуючи сотні процесорних ядер і підтримку тисяч паралельних потоків. На відміну від універсальних процесорів більша частина транзисторів GPGPU виконують обчислення — порівняйте розмір оточених білими рамками АЛП на рис. 5а і б. У деяких задачах це дає можливість досягти продуктивності, еквівалентної сотням ядер звичайних процесорів. Програмна архітектура GPGPU суттєво відрізняється від традиційної, проте набагато зручніша, ніж засоби програмування векторних комп'ютерів, трансп'ютерів, ПЛІС та процесорів цифрових сигналів (DSP). У результаті GPGPU, переважно NVIDIA CUDA, викликали революційні зміни в суперкомп'ютерній галузі.

На сьогодні (лютий 2012 р.) гібридні системи посідають перші позиції у світових рейтингах як продуктивності (www.top500.org), так і енергоефективності суперкомп'ютерів. У Green500 їм належать 4 найвищі оцінки. І хоча загалом у цьому рейтингу переважають численні інсталяції IBM Blue-Gene/Q, те, що лідери енергоефективності використовують різні гібридні рішення (на основі Intel Xeon Phi 5110P, AMD FirePro S10000 і NVIDIA K20), свідчить про загальну перспективність цього архітектурного напряму щодо енергозаощадження.

ПАРАМЕТРИ ЕНЕРГОЕФЕКТИВНОГО СУПЕРКОМП'ЮТЕРА СКІТ-4

Проектування енергоефективного комп'ютера, очевидно, не зводиться до вибору процесорів і співпроцесорів. Натомість саме вони споживають левову частку енергії й генерують значну частину тепла, яке потрібно відводити. На енергоефективність комп'ютера істотно впливають параметри системи охолодження, однак її вибір диктується переважно бюджетними міркуваннями, що виходять за рамки цієї роботи.

Аналіз роботи суперкомп'ютера в режимі колективного користування свідчить, що планування розподілу завдань по вузлах і керування чергою може бути джерелом значної додаткової економії електроенергії. За-

вдання, що виконують на суперкомп'ютері, значно різняться за часом розрахунків і розмірами, тобто кількістю залучених вузлів. Тому, навіть за умови заповненої черги, частина вузлів простоює, чекаючи на закінчення раніше запущених завдань і вивільнення достатньої кількості ресурсів для старту чергового великого завдання. Під час простою вузли можна вимкнути або перевести в енергоощадний режим «сну». Однак такі операції ефективні лише за умови досить тривалого очікування, оскільки завантаження або «пробудження» вузла є більш енергомістким процесом, ніж звичайний простій, та ще й затримує старт нового завдання. Зміна порядку виконання (керування чергою) також сприяє скороченню часу простою, якщо тривалість виконання кожного завдання відома. Додатковою перевагою оптимізованого порядку виконання задач є скорочення середнього часу очікування результатів завдання користувачем.

На жаль, оцінити, скільки часу потрібно для розрахунку певного завдання, користувач найчастіше не в змозі. Звідси випливає актуальність автоматичного прогнозування потоку завдань і реалізації керування чергою за допомогою прогнозів. На основі такого прогнозування в ІК НАН України створено комплекс унікальних рішень з енергоощадженням кластерних комплексів, до якого входить інтелектуальна система керування кластером з функціями управління енергоспоживанням вузлів, засобами підтримки безперервної роботоздатності великих комплексів і моніторингу стану обладнання [8].

Архітектуру і технічний проект СКІТ-4 розроблено в результаті ретельного експериментального дослідження різних конфігурацій сучасного апаратного забезпечення [9]. Загальні характеристики СКІТ-4:

- реальна продуктивність за тестом Linpack – 11,8 Тфлопс;
- енергоefективність – 788 Мфлопс/Вт;
- пікова продуктивність – 25,6 Тфлопс;
- гіbridна кластерна архітектура;
- 12 вузлів, 192 обчислювальних ядра, 36 графічних прискорювачів;

- 768 ГБ оперативної пам'яті;
- комунікаційна мережа між вузлами: Infiniband FDR, 56 Гбіт/с;
- приєднаний до паралельного файлового сховища об'ємом 100 ТБ;
- базується на новітній платформі HP ProLiant Gen8 BladeSystems;
- центральні процесори Intel Xeon E5-2600 з частотою 2,6 ГГц;
- прискорювачі NVIDIA Tesla M2075.

Кожний вузол СКІТ-4 має реальну продуктивність 1 Тфлопс, 16 ядер (32 у режимі Hyper-Threading), 64 ГБ оперативної пам'яті, 3 прискорювачі NVIDIA Tesla M2075 з підтримкою технологій CUDA і OpenCL.

Розв'язання великих обчислювальних задач на СКІТ-4 значно прискорюється завдяки найсучаснішому інтерконекту Infiniband FDR. Тестування показало можливість практичного досягнення його пропускної здатності понад 6000 МБ/с за пікової теоретичної продуктивності 7000 МБ/с [1]. Обладнання такого класу в Україні використано вперше.

Швидкість доступу процесу до оперативної пам'яті вузла – 0,7–0,8 мкс, до оперативної пам'яті сусіднього вузла – 1,5–2,5 мкс, до пам'яті графічного прискорювача – 21 мкс. Швидкість обміну між графічними прискорювачами одного вузла – 21 мкс, між графічними прискорювачами різних вузлів – 41–42 мкс.

Дослідження історії використання комплексу СКІТ свідчить, що найбільшу частку ресурсів (понад 90%) споживають для розв'язання задач молекулярної динаміки, квантової хімії, гідро- та аеродинаміки та для розроблення спеціального програмного забезпечення. Для ефективного застосування СКІТ-4 у цих напрямах на суперкомп'ютері встановлено прикладне програмне забезпечення з підтримкою графічних прискорювачів: пакети GROMACS, NAMD і Abalone з молекулярної динаміки, NWChem і Quantum ESPRESSO з обчислювальної хімії, OpenFOAM з безкоштовним плагіном Vratis для задач гідродинаміки, математичні бібліотеки

закордонного і власного виробництва. Найближчим часом заплановано налагодження та випробування програм для астрономії й геофізики, розроблених українськими науковцями, користувачами УНГ.

ВИСНОВКИ

Енергоефективність 788 Мфлопс/Вт виводить СКІТ-4 на рівень 99-ї позиції у світовому рейтингу найбільш екологічних суперкомп'ютерів Green500. Такий результат свідчить про збереження НАН України високого рівня та потенціалу в розробленні найсучаснішої комп'ютерної техніки.

Проте за загальною продуктивністю СКІТ-4 відповідає лише 48 місцю в СНД і значно поступається найкращим зарубіжним суперкомп'ютерам. У світовому рейтингу Топ-500 від листопада 2012 р. є 8 російських суперкомп'ютерів, 4 польських, ізраїльський і словацький суперкомп'ютери — і жодного українського. В Росії більш як 50 комп'ютерів мають продуктивність понад 10 терафлопс (в Україні — лише СКІТ-4), швидкодія російського суперкомп'ютера «Ломоносов» наближається до петафлопсу. Ще потужнішим є суперкомп'ютер у Сарові, який будували на кошти «Росатома» і військового бюджету країни для завдань ядерної промисловості й оборони. Його продуктивність засекречено, але експерти оцінюють її в 10 петафлопс. Для порівняння, сумарна пікова продуктивність кластерів Українського національного гріду не перевищує 50 терафлопс.

Відставання України в суперкомп'ютерній галузі збільшилося останнім часом у зв'язку з відсутністю державної політики підтримки розвитку високопродуктивних обчислень. Ще на початку 2010 р. Україна мала два суперкомп'ютери в першій половині Топ-50 СНД (top50.supergcomputers.ru), а в 2005–2008 рр., коли розбудову українських суперкомп'ютерів активно підтримувала держава, — входила до першої десятки рейтингу СНД і посідала там до 5 позицій. Нині Україна вкрай потребує державної науково-технічної програми розвитку суперкомп'ютерних технологій.

Довідка. У США держава щороку витрачає близько 8 млрд дол. на створення суперкомп'ютерів. Починаючи з 2000 р., союзний бюджет Росії та Білорусі разом з федеральною цільовою програмою Росії витратили на розвиток суперкомп'ютерів близько 7 млрд рублів. Білорусь вклала 500 млн рублів, тобто близько 25%, у програму СКІФ-Грід і отримала у своє розпорядження відповідну частку ресурсу створених у Росії суперкомп'ютерів. Згідно з так званою 25-ю картою, яку узгодив і захистив «Росатом» на комісії з модернізації й технологічного розвитку при президентові РФ, до 2014 р. на розвиток галузі високопродуктивних обчислень витратять ще 7,3 млрд рублів, і це лише частина великого екзафлопсового проекту. В листопаді минулого року прем'єр Великої Британії відвідав один з британських суперкомп'ютерних центрів у Дерзбери й затвердив план його фінансування на п'ять років на суму 200 млн дол. [10]. Такі великі витрати компенсиуються ефектом від застосування суперкомп'ютерів у промисловості (моделювання в суднобудуванні, автомобільній, аерокосмічній і навіть текстильній промисловості), нафтогазовій галузі (моделювання родовищ дає змогу підвищити видобуток до 50–80% замість традиційних 20–25%), обороні, космічній галузі і, звичайно, економіці, фінансах, державному управлінні, приблизно вдвічі прискорюється розроблення інноваційної продукції і вп'ятеро знижуються витрати на нього. Відсутність потужних обчислювальних ресурсів істотно стримує науково-технологічний розвиток України і консервує її економічне відставання від промислово розвинених держав.

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. Головинський А.Л., Маленко А.Л., Бандура О.Ю. та ін. СКІТ-4 — суперкомп'ютер Інституту кібернетики ім. В.М. Глушкова НАН України // Високопродуктивні обчислення: матер. міжнар. конф. (8–10 жовтня 2012, Київ, Україна). — С. 149–151.
2. Сергієнко І.В., Коваль В.М. СКІТ — український суперкомп'ютерний проект // Вісник НАН України. — 2005. — № 8. — С. 3–13.

3. Zagorodny A., Zgurovsky M., Zinovjev G. et al. Integrating Ukraine into European Grid Infrastructure // Системні дослідження та інформаційні технології. — 2009. — № 2. — С. 35–49.
4. Дейнека В.С., Сергієнко І.В. Аналіз многокомпонентных распределенных систем и оптимальное управление. — К.: Наук. думка. — 2007. — 704 с.
5. Дейнека В.С., Білоус М.В. Побудова моделі ґрунтового масиву Чернігівського регіону в програмному комплексі Надра-3D // Обчислювальні методи і системи перетворення інформації: матер. II наук.-техніч. конф. (4–5 жовтня 2012, Львів, Україна). — С. 78–81.
6. Perevozchikova O., Smolarz A., Surtel W., Tulchinsky V. Multiprocessor computing structures // Modeling and Optimization / ed. J. Sikora, W. Wojcik. — Lublin: Politechnika Lubelska, 2011. — P. 147–238.
7. Chandarakasan A.P., Potkonjak M., Mehra R. et al. Optimizing power using transformations // IEEE Transactions on Computer-Aided Design of Integrated Circuits and Systems. — 1995. — V. 14, N. 1. — P. 12–31.
8. Головинський А.Л., Маленко А.Л. Аналіз ефективності планувальників чергі задач для суперкомп'ютера з кластерною архітектурою // Високопродуктивні обчислення: матер. міжнар. конф. (12–14 жовтня 2011, Київ, Україна). — С. 64–69.
9. Головинський А., Маленко А., Горенко С., Бандура О. Архітектура GPU-узлів обчислювального кластера // Високопродуктивні обчислення: матер. міжнар. конф. (12–14 жовтня 2011, Київ, Україна). — С. 70–75.
10. <http://supercomputer.com.ua/ua/186-finansuvannya-superkompyuteriv-v-rf-tcifri-ta-fakti.html>.

Стаття надійшла 26.11.2012 р.

А.Л. Головинський, А.Л. Маленко, І.В. Сергієнко,
В.Г. Тульчинський

Інститут кибернетики ім. В.М. Глушкова
Національної академії наук України
просп. Академіка Глушкова, 40, Київ, 03680, Україна

ЭНЕРГОЭФФЕКТИВНЫЙ
СУПЕРКОМПЬЮТЕР СКИТ-4

В работе рассмотрены общие принципы и современные аппаратные решения для повышения энергоэффективности компьютеров, описано их применение при построении отечественного суперкомпьютера СКИТ-4. Анализируется использование суперкомпьютеров в Украине, неотложные проблемы и перспективы развития отрасли высокопроизводительных вычислений.

Ключевые слова: суперкомпьютер, кластер, гибридная архитектура, GPU, энергоэффективность вычислений.

A.L. Golovynskyi, A.L. Malenko,
I.V. Sergienko, V.G. Tulchinsky

Glushkov Institute of Cybernetics
of National Academy of Sciences of Ukraine
40 Academician Glushkov Ave., Kyiv, 03680, Ukraine

POWER EFFICIENT SUPERCOMPUTER SCIT-4

General principles and modern hardware for improved power efficiency of computers are examined in the paper. Their application for the national supercomputer SCIT-4 development is described. Use of supercomputers in Ukraine is analyzed with emphasis on the high performance computing development obstacles and prospects.

Keywords: supercomputer, cluster, hybrid architecture, GPU, power efficiency of computing.