

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ГИБРИДНОГО ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОГО КЛАСТЕРА ВОРОНЕЖСКОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО УНИВЕРСИТЕТА ДЛЯ ОБУЧЕНИЯ СТУДЕНТОВ НАВЫКАМ РАБОТЫ С ВЫСОКОПРОИЗВОДИТЕЛЬНЫМИ ВЫЧИСЛЕНИЯМИ

А. Г. Потапов^{1,}, А. В. Романов^{1,**}, К. О. Петрищев^{1,***}*

¹ Воронежский государственный университет, Воронеж, Россия

В связи со значительными темпами развития гибридных вычислительных комплексов перед университетами стоит задача по подготовке специалистов для работы с высокопроизводительными технологиями. В 2016 г. в Воронежском государственном университете был введен в эксплуатацию гибридный вычислительный кластер, архитектура которого предоставляет широкие возможности для обучения студентов навыкам параллельного программирования с использованием технологий OpenMP, MPI и CUDA. Рассмотрены аппаратно-программные особенности кластера, и предложены стратегии наиболее полной реализации имеющихся ресурсов для подготовки высококвалифицированных кадров.

Due to the significant pace of development of hybrid supercomputers, universities face the task of training specialists to work with high-performance technologies. In 2016, a hybrid computing cluster was put into operation at Voronezh State University, the architecture of which provides extensive opportunities for teaching students parallel programming skills using OpenMP, MPI and CUDA technologies. The hardware and software features of the cluster are considered and strategies are proposed for the most complete implementation of available resources for training highly qualified personnel.

PACS: 01.50ht; 07.05Wr; 29.50.+v

ВВЕДЕНИЕ

Регулярно обновляется список самых мощных суперкомпьютеров мира Top 500 [1], состоящий из вычислительных комплексов с различными архитектурами. Наряду с привычными CPU в них активно используются

* E-mail: artem2011.ap@inbox.ru

** E-mail: alphard.rm@gmail.com

*** E-mail: vrn.kostyan.p@mail.ru

математические и графические сопроцессоры, находящие свое применение во множестве научных направлений, включая обучение нейронных сетей и проведение расчетов методом молекулярной динамики.

В то же время работа со специфическим оборудованием требует особых навыков. Для его квалифицированного использования необходимо создавать учебные комплексы, состоящие из небольшого числа различных компонентов, которые позволят наглядно продемонстрировать будущим специалистам особенности взаимодействия с гибридными системами на этапе обучения в университете [2]. В настоящее время именно с этой целью используется высокопроизводительный вычислительный кластер суперкомпьютерного центра Воронежского государственного университета (ВГУ).

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ КЛАСТЕРА В УЧЕБНОМ ПРОЦЕССЕ

Вычислительный кластер ВГУ состоит из шлюза с двумя 6-ядерными Intel(R) Xeon(R) CPU X5650 @ 2.67GHz, головного узла с двумя 6-ядерными Intel(R) Xeon(R) CPU E5-2620 v3 @ 2.40GHz и десяти вычислительных узлов, на каждом из которых установлено по два 12-ядерных Intel(R) Xeon(R) CPU E5-2680 v3 @ 2.50GHz. На семи из десяти вычислительных узлов установлено также по два сопроцессора Intel Xeon Phi 7120P, каждый из которых способен задействовать в параллельном режиме до 240 логических ядер. Последние три узла оснащены суммарно шестью графическими сопроцессорами NVIDIA Tesla K80 с 4992 CUDA-ядрами. Обмен сообщениями между узлами происходит по высокоскоростной сети Mellanox Technologies MT27500 Family [ConnectX-3] 56GB/s. Схема кластера [3] представлена на рисунке.

Разнообразная архитектура позволяет использовать кластер для обучения студентов ВГУ направлений «Математика и компьютерные науки», «Информационные системы и технологии», «Программная инженерия» навыкам работы с высокопроизводительными вычислениями в рамках курсов «Параллельное программирование», «Технологии параллельных вычислений», «Параллельные и grid-технологии», «Информационно-коммуникационные технологии». Наличие в кластере сопроцессоров Intel Xeon Phi дает возможность опытным путем прочувствовать базовые принципы многопоточности, включая условия Бернштейна и закон Амдала.

На головном и вычислительных узлах установлена операционная система Linux CentOS 7. Подключаясь к кластеру по протоколу SSH, студенты в первую очередь учатся взаимодействовать с терминалом Linux, так как сегодня невозможно представить работу с кластерными системами без знания UNIX-подобных систем. К примеру, первыми необходимыми командами становятся `cd`, `ls`, `cat`. Осуществляется работа с файловым менеджером Midnight Commander, происходит знакомство с компилятором GCC и базовыми командами очереди исполнения SLURM, включая

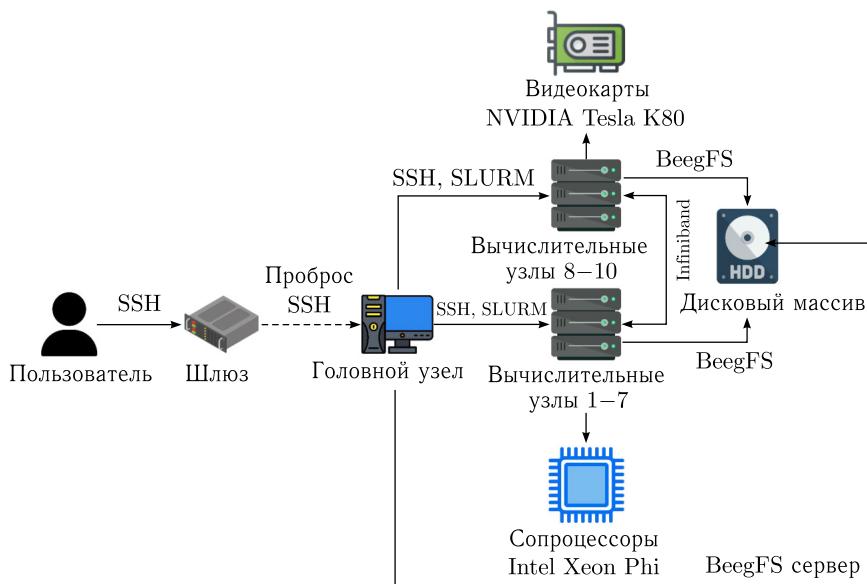


Схема вычислительного кластера ВГУ

проверку состояния очереди `squeue` и постановку задачи в очередь через `sbatch` и `srun`.

Обучение навыкам параллельного программирования начинается с изучения языка C как одного из самых производительных и часто используемых в математической среде языков. Гибридная структура кластера позволяет попрактиковаться в использовании технологий работы как с общей, так и с распределенной памятью [4].

В первом случае подробно рассматривается технология OpenMP как одна из самых простых для начального изучения. Вводится понятие нити (thread), демонстрируются базовые директивы, отвечающие за порождение параллельной области, разделение переменных на общие и локальные, выполнение редукции для объединения результата выполнения параллельной программы на разных нитях. Объясняются основные методы распараллеливания и синхронизации нитей, включающие использование параллельных циклов, параллельных секций и замков.

Работа с технологией OpenMP подразумевает необходимость задействовать множество логических ядер внутри одного вычислительного узла, поскольку использование общих переменных требует физического доступа всех нитей к общей оперативной памяти. В случае кластера ВГУ для этих целей лучше всего подходят сопроцессоры Xeon Phi, содержащие наибольшее число ядер среди имеющегося оборудования.

Для изучения методов работы с распределенной памятью используется технология MPI как одна из самых распространенных и востребован-

ных для суперкомпьютерных вычислений. Вводится понятие коммуникатора, приводятся базовые функции для обмена сообщениями. Обсуждаются способы наиболее эффективного распределения входных данных по процессам с помощью функций коллективного взаимодействия. Большое внимание уделяется правильной расстановке таймеров в коде программы, позволяющих выполнить корректное сравнение времени выполнения задачи разным числом процессов.

В отличие от технологии OpenMP передача сообщений хорошо работает и на разных вычислительных узлах, поскольку MPI не требует единой оперативной памяти для всех процессов. Наличие в кластере интерконнекта InfiniBand позволяет задействовать для расчетов 240 ядер десяти вычислительных узлов, не прибегая к помощи сопроцессоров.

Наряду с языком C активно используется Python для обучения навыкам высокопроизводительных вычислений. К примеру, MPI4PY позволяет распространить ранее изученные концепции обмена сообщениями на данный язык программирования с целью использования параллелизма при работе с более высокоуровневыми структурами, такими как базы данных. Наличие в кластере сопроцессоров позволяет также использовать модули PyMIC и PyCUDA.

Кластерные расчеты играют заметную роль в научной деятельности на физическом и химическом факультетах университета. С их помощью проводится изучение атомных процессов, исследование генерации высоких гармоник (НГГ) оптического излучения, расчет статических электрических дипольных поляризуемостей, моделирование адсорбции водорода на поверхности металлов, изучение динамических характеристик макромолекул методом молекулярной динамики, моделирование пространственной и электронной структуры наносистем и др.

С использованием кластера выполняются расчеты и для выпускных бакалаврских и магистерских работ. К примеру, в 2024 г. была защищена выпускная работа бакалавра на тему «Особенности выбора симметричных функций Бехлера–Парринелло для системы многих частиц» [5]. Во время ее выполнения проводился расчет квантово-химической системы на основе меди с использованием библиотек ASE и GPAW. Работа по этой теме была продолжена в рамках магистратуры, на кластере проводится обучение нейронной сети Бехлера–Парринелло с помощью программы Fortnet [6].

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Наличие в университете гибридного вычислительного кластера существенно расширяет возможности для проведения исследований в различных естественно-научных направлениях. Разнообразие архитектурных решений в структуре кластера позволяет обучать студентов методам работы с различными технологиями в области высокопроизводительных вычислений, включая технологии работы с общей и распределенной

памятью, а также проведение вычислений на математических и графических сопроцессорах.

Кроме того, использование высокопроизводительных технологий уже на этапе обучения способствует повышению интереса студентов к суперкомпьютерным системам, что может благоприятно сказаться на выборе направлений их профессиональной деятельности после завершения обучения.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. TOP500 Lists. <https://www.top500.org/lists/top500/> (accessed 13.09.2025).
2. *Kurgalin S. D., Borzunov S. V.* The Supercomputer System as a Factor of Influence on the Educational Process // Proc. Intern. Sci. Conf. "Actual Problems of Applied Mathematics, Computer Science and Mechanics", Voronezh, 2024. P. 4–9.
3. *Potapov A. G., Romanov A. V.* A New Approach to the Organization of the Software Architecture of the Hybrid Computing Cluster of the Computer Science Faculty of VSU // The Works of Young Scientists of the Computer Science Faculty of VSU. Iss. 5. Voronezh, 2025. P. 581–585.
4. Flaticon. <https://www.flaticon.com/> (accessed 13.09.2025).
5. *Borzunov S. V., Kurgalin S. D.* Supercomputing: A Practical Approach. St. Petersburg: BHV, 2019. 206 p.
6. *Potapov A. G., Romanov A. V.* Modeling of the Interatomic Potential Based on the Results of Quantum Chemical Calculations Using Symmetric Bechler–Parrinello Functions // The Works of Young Scientists of the Computer Science Faculty of VSU. Iss. 4. Voronezh, 2024. P. 215–222.
7. *Potapov A. G., Romanov A. V.* Features of the Selection of Parameters for the Bechler–Parrinello Neural Network Using the Example of a Lithium Crystal // XIX All-Russ. Sci. Conf. with Intern. Participation "Parallel Comput. Technologies" (PaCT'2025), Moscow, April 8–10, 2025. Short Articles and Poster Descriptions. SUSU Faculty Center, 2025. P. 226–234.