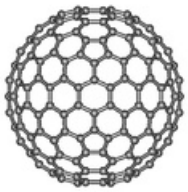
KBFI materjaliteadlased said graafikaprotsessoritel baseeruva tippjõudlusega (HPC) serveri

12 aastat tagasi - 01.06.2013 Autor: AM



Teaduslike probleemide lahendamine sellistes uurimisvaldkondades nagu materjaliteadus, vooludünaamika, kõrge energia füüsika, molekulaarbioloogia nõuab väga suuremahuliste arvutusülesannete tegemist. Niisama lauaarvutite või isegi väikeste serveritega hakkama ei saa.

Arvutirakendused, mis vastavaid arvutusi teevad, eeldavad reeglina tippjõudlusega (HPC) riistvara. Klassikalised superarvutid on aga väga kallid, nende soetamine pikaajaline ja töömahukas protsess ning kasutamine kulukas.

Sellepärast otsivadki teadlased kõrgtootlikke ja hinnasõbralikke säästulahendusi. Üks huvitav suund efektiivse riistvara loomisel on graafikaprotsessorite (GPU) kasutamine HPC arhitektuurides. Graafikaprotsessorid on võimelised töötlema väga suuri andmekogusid paralleelrežiimis palju kordi kiiremini, tõstes rakendustarkvara jõudlust juba sadu kordi.

KBFI kvantkeemia töörühm toetus oma suurele kogemusele HPC tehnoloogia rakendamisel materjaliteaduses ning otsustas just ülalmainitud põhjustel arvutipargi ajakohastamist teha uusimate graafikaprotsessoritel baseeruvate HPC serveritega.

Töörühma valituks osutus Hewlett-Packardi skaleeritav HPC süsteem ProLiant SL6500, milles arvutussõlmedeks on ProLiant SL250s Generation 8 serverid. ProLiant SL250s serverites kasutatakse akseleraatorina NVIDIA Tesla Kepler K20X graafikaprotsessorit. K20X GPU arhitektuur sisaldab 14 konveiertöötluse moodulit (SMX), milledes on kokku 2688 tuuma. Mitmed uuenduslikud lahendused nagu dünaamiline paralleelsus ja protsesside järjekorra optimiseerimine (Hyper-Q) võimaldavad saavutada teoreetilise jõudluse 1.3 TFlops kahekordse täpsusega ujukomaarvude (64-bit) ja 4 TFlops ühekordse täpsusega (32-bit) arvude puhul.

KBFI kvantkeemia töörühmale tarnis IT Grupp Hewlett–Packard ProLiant SL6500 kahe SL250s serveriga, mille tehnilised baasnäitajad on järgmised:

Hewlett–Packard ProLiant SL6500

- Protsessor: 2x E5-2660(20M Cache, 2.20 GHz, 8.00 GT/s Intel® QPI)
- Kiirendi: NVIDIA Tesla K20X 6GB RAM
- RAM: 64 GB (PC3-12800)

KBFI materjaliteadlastele avab uus tehnoloogia suuremad võimalused keerukamate ja aeganõudvamate ülesannete kiiremaks ja säästlikumaks lahendamiseks.

Ühe näitena võib tuua spetsiaalselt GPU rakendusena loodud kvantkeemia tarkvara TeraChem, mille tööjõudlus ületab sarnase funktsionaalsusega, kuid traditsioonilisel protsessoriarhitektuuril baseeruva tarkvara vastavaid näitajaid 44-650 korda.

TeraChemi puhul on ühe 8 GPU-d sisaldava arvutussõlme jõudlus sarnane 4096 neljatuumalise tavaprotsessoriga varustatud superarvuti võimsusega SCF arvutusprotseduuri täitmisel C_{240} fullereeni molekuli jaoks.

ÜLEMISEL PILDIL: Fullereen C240 molekul, HP ProLiant SL6500 Scalable System ja HP ProLiant SL250s G8 server.

- Lahendused

- Serverid
- Lahendused