

3. ДЕЯТЕЛЬНОСТЬ НАУЧНЫХ СОВЕТОВ

О ДЕЯТЕЛЬНОСТИ СОВЕТА СО РАН ПО СУПЕРВЫЧИСЛЕНИЯМ

Совет по супервычислениям СО РАН координирует деятельность суперкомпьютерных центров СО РАН, участвует в организации научных и образовательных мероприятий, взаимодействует с вузами с целью разработки и поддержки образовательных программ в области суперкомпьютерных технологий.

Суперкомпьютерные центры СО РАН

Центр коллективного пользования Сибирский суперкомпьютерный центр (ССКЦ) на базе Института вычислительной математики и математической геофизики СО РАН
Центр коллективного пользования «Иркутский суперкомпьютерный центр СО РАН» (ИСКЦ) на базе Института динамики систем и теории управления СО РАН
Красноярский суперкомпьютерный центр (КСКЦ) на базе Института вычислительного моделирования СО РАН
Томский суперкомпьютерный центр (ТСКЦ) на базе Института сильноточной электроники СО РАН
Омский суперкомпьютерный центр (ОСКЦ) на базе Омского филиала Института математики СО РАН

СИБИРСКИЙ СУПЕРКОМПЬЮТЕРНЫЙ ЦЕНТР, ИВМиМГ СО РАН

<http://www.sccc.icmmg.nsc.ru/>

Вычислительные ресурсы

- 1) Кластер НКС-1П, изготовитель РСК, Россия, 91,24 Тфлопс (пиковая), место 40 в TOP50 СНГ (09.2018). Сети: OMNI-Path 100 Gb/s, GbE. ФС Lustre 150 ТБ.
- 2) Кластер НКС-30Т, HP, США. 115 Тфлопс (по состоянию на 2012 г., 79 Тфлопс – Nvidia Tesla 2090). Сети: QDR Infiniband, GbE. ФС Ibrix 81 ТБ. К декабрю 2018 года пиковая производительность НКС-30Т упала до 67.312 Тфлопс, ФС Ibrix 41 ТБ. См. <http://www.sccc.icmmg.nsc.ru/news.html>
Гарантийная поддержка НКС-30Т давно закончилась.
- 3) Сервер HP ProLiant DL980 G7, 8 x Intel E7-4870, ОЗУ 1ТБ, 768 Гфлопс (пик).
- 4) Сервер HP ProLiant DL380 G8 для работы с NVIDIA Kepler K40.

Программное обеспечение/инструментальные средства разработки

Кластер НКС-1П: 1) Intel Cluster Studio 2017 XE и Intel Parallel Studio XE, 2) Gaussian g09 Rev D.01, 3) Quantum Espresso, Gromacs 16.3 и NAMD, nvchem.

Кластер НКС-30Т: 1) Intel Cluster Studio XE и Intel Parallel Studio XE, 2) Gromacs 4.6.3, Quantum Espresso и Bioscope, 3) ANSYS CFD 14.5.7 с лицензиями HPC, 4) Gaussian g09 Rev D.01 , 5) CUDA Toolkit 6.5 и PGI Accelerator 14.9.

Распределение использования процессорного времени по организациям

Организация	2015 %	2016 %	2017 %	2018 %	Организация	2015 %	2016 %	2017 %	2018 %
АГТУ (Барнаул)			1	<1	ИТ	6	8	12	4
ВГУ (Воронеж)	4	2			ИТПИМ	7	3	4	1
ИАТЭ (Обнинск)		<1		<1	ИФП		<1		1
ИБРАЭ (Москва)			<1		ИХБФМ	4	2	1	<1
ИВМиМГ	10	7	14	15	ИХКГ	8	7	9	1
ИВТ	<1				ИХТТМ	5	13	7	3
ИВЭП (Барнаул)	<1	<1	<1		ИХХТ (Красноярск)	3	6	4	7
ИГД	1	<1	1	<1	ИЦиГ	6	1	1	<1
ИГиЛ	<1	1	<1	1	ИЯФ	10	5	3	1
ИГМ				<1	МГУ (Москва)				1
ИК	20	26	15	46	НГТУ	<1	<1		
ИКЗ (Тюмень)	1	<1	<1	<1	НГУ	1	1	2	<1
ИЛФ	4	2	1	1	НИОХ	<1	1	3	1
ИНГГ	4	1	13	1	СибНИГМИ	<1	<1		
ИНХ	2	5	8	1	СФУ (Красноярск)	2	1		<1
ИНЭОС (Москва)			<1	6	ЮУрГУ (Челябинск)				<1
ИОА (Томск)	<1	8	1	<1	Другие	<1	<1	<1	<1
ИОГен (Москва)	<1			<1					

Направления решаемых задач по отчётам пользователей

ПРИОРИТЕТНЫЕ НАПРАВЛЕНИЯ РАЗВИТИЯ НАУКИ, ТЕХНОЛОГИЙ И ТЕХНИКИ РФ
Индустрия наносистем – ИВМиМГ, ИК, ИНХ, ИТПМ, ИФП, ИХБФМ, ИЦиГ, ИЯФ, НИОХ, СФУ (Красноярск), ВГУ (Воронеж).
Информационно-телекоммуникационные системы - ИВМиМГ, ИВТ, ИК, НГУ, ИВЭП (Барнаул).
Энергоэффективность, энергосбережение, ядерная энергетика – ИВМиМГ, ИК, ИВТ, ИТ, ИТПМ, ИХКГ, НГУ.
Науки о жизни - ИВМиМГ, ИК, ИНГГ, ИХБФМ, ИХКГ, ИХТТМ, ИЦиГ, ИЯФ, НГУ, ИКЗ (Тюмень), ИОГен РАН (Москва)
Рациональное природопользование - ИВМиМГ, ИГД, ИНГГ, СибНИГМИ, ИХХТ (Красноярск), ИВЭП (Барнаул), ИКЗ (Тюмень), ИОА (Томск)
Транспортные и космические системы – ИВМиМГ, ИЛФ, ИТПМ.
Другие направления: биология, вычислительная гидродинамика, химия, химические технологии, процессы и аппараты химической технологии, физика элементарных частиц, геофизика, исследование материалов, квантовая химия, математика, структура и свойства полимеров

Объём финансирования

Собственные средства: 0,6 млн. руб.

Общее потребление электроэнергии ЦКП ССКЦ составило: 846,08 кВтч.

Подготовка кадров, образовательные и научные мероприятия

1) Подготовка специалистов на кафедрах НГУ: Математических методов геофизики (зав. каф. чл.-корр. Кабанихин С.И.); Параллельных вычислений (проф. Малышкин В.Э.); Вычислительных систем (проф. Глинский Б.М.); НГТУ: Параллельных вычислительных технологий (проф. В.Э.Малышкин).

2) Регулярный семинар «Высокопроизводительные вычисления» кафедры Вычислительных систем НГУ.

Презентации: www.sccc.icmmg.nsc.ru/seminar.html.

3) Зимняя школа (29.01-02.2018 г.) и Летняя международная молодежная Школа-конференция по параллельному программированию (2-13.07.2018 г.) по параллельному программированию, Новосибирск, организаторы: ИВМиМГ, НГУ, НГТУ, <http://ssd.sccc.ru/ru/school>.

Основные итоги 2018 года

1) Включение 7 вычислительных модулей ИГиЛ СО РАН в состав НКС-1П.

2) Оказание вычислительных услуг пользователям для выполнения работ по госзаданиям, грантам, программам, проектам.

3) Объединение НКС-30Т + НКС-1П сетью 10 Гбит/с, что позволило использовать НКС-1П для сохранения и реорганизации ФС Ibrix.

Планы на 2019 год

- 1) Поддержка пользователей ЦКП;
- 2) Сопровождение программного обеспечения НКС-30Т + НКС-1П;
- 3) Наращивание вычислительных ресурсов НКС-1П (при наличии финансирования);
- 4) Участие в работах по планированию, организации и созданию СНЦ ВВОД, включая ЦОД, разработка предложений по организации консультационного обслуживания: <http://hpcda.nsc.ru/img16.html>.

ИРКУТСКИЙ СУПЕРКОМПЬЮТЕРНЫЙ ЦЕНТР СО РАН, ИДСТУ СО РАН

<http://hpc.icc.ru>

Базовая организация - ИДСТУ СО РАН

Основной вычислительный ресурс ЦКП ИСКЦ

Вычислительный кластер «Академик В.М. Матросов»

Ввод в эксплуатацию – 2012 г., модернизация – 2017 г.

Основные характеристики: 120 вычислительных узлов, 240 процессоров, 4080 процессорных ядер x86_64 суммарной пиковой производительностью **90,24** TFlops.

Место в ТОП-50 СНГ: **30-е** в 29-й редакции рейтинга от 24.09.2018 г.

Актуальная конфигурация кластера:

- 60 вычислительных узлов T-Blade V205S: два 16-ядерных процессора AMD Opteron 6276 «Bulldozer» 2.3 GHz, 64 GB оперативной памяти DDR3-1600;
- 60 вычислительных узлов в составе 30 лезвий Supermicro SBI-7228R-T2F: два 18-ядерных процессора Intel Xeon E5-2695 v4 «Broadwell» 2.1 GHz, 128 GB оперативной памяти DDR4-2400;
- 2 управляющих узла, 2 узла доступа;
- система хранения данных Panasas ActiveStor 40 TB;
- коммуникационная сеть QDR Infiniband
- транспортная и сервисная сети;
- вспомогательная инженерная инфраструктура.

Деятельность ЦКП ИСКЦ в 2018 году

- Работа с пользователями ЦКП ИСКЦ: регистрация и инструктаж новых пользователей, информационно-методическая и техническая поддержка пользователей, установка и настройка пользовательского программного обеспечения и т.д.
- Мониторинг состояния оборудования ЦКП ИСКЦ, сопровождение встроенного и системного программного обеспечения
- Поддержание в актуальном состоянии сайта ЦКП ИСКЦ и документов, регламентирующих деятельность ЦКП ИСКЦ (в соответствии с

Постановлением Правительства Российской Федерации от 17 мая 2016 года № 429).

- Разработка проекта модернизации ЦКП ИСКЦ с целью дооснащения центра новейшим вычислительным оборудованием и увеличения совокупной пиковой производительности вычислительного кластера «Академик В.М. Матросов» до 300 TFlops.

- Регистрация ЦКП ИСКЦ в качестве объекта инфраструктуры Российского научного фонда.

- Организация и проведение сервисного (технического) обслуживания и текущего ремонта оборудования вычислительной и инженерной инфраструктуры ЦКП ИСКЦ.

- Проведение лекций и экскурсий в ЦКП ИСКЦ для зарубежных и российских научных делегаций, представителей научных и образовательных учреждений, студентов и школьников.

Использование вычислительных ресурсов ЦКП ИСКЦ

В 2018 году ресурсами ЦКП ИСКЦ воспользовались **72** пользователя из **14-и** научных и образовательных учреждений Сибири и Дальнего Востока. С применением вычислительного кластера ЦКП ИСКЦ проведены научные исследования по **27-и** государственным заданиям, **12-и** грантам РФФИ и **4-м** грантам РНФ. По результатам проведенных численных экспериментов пользователями ЦКП ИСКЦ подготовлено более **50** научных работ, **28** работ опубликовано в журналах, входящих в международные базы цитирования Scopus и Web of Science (в т.ч. **5** работ – в журналах квартиля Q1). По результатам исследований, выполненных с использованием оборудования ЦКП ИСКЦ, пользователями ЦКП ИСКЦ защищены две кандидатские и одна докторская диссертации.

Вычислительные ресурсы ИСКЦ использовались для решения задач, относящихся к следующим научным областям:

- органическая и элементоорганическая химия,
- химия комплексных соединений,
- квантовая химия твердого тела,
- физическая химия,
- физика элементарных частиц,
- физика высоких энергий,
- физика плазмы,
- ядерная физика,
- физика ускорителей заряженных частиц
- физика твердого тела
- физика наноструктур,
- астрофизика, физика Солнца,
- радиофизика,
- гамма-астрономия,
- дискретная математика и математическая кибернетика,
- машинное обучение и исследование операций,
- криптография и криптоанализ,
- теория управления,
- энергетическая безопасность,
- геномика
- филогенетика,
- молекулярная генетика,
- эволюционная генетика,
- экологическая генетика
- экология биосистем.

Распределение использования процессорного времени между организациями-пользователями, 2016-2018 гг.:

Организации	2016, %	2017, %	2018, %
ЛИН СО РАН	20	15	20
ИДСТУ СО РАН	20	20	20
ИрИХ СО РАН	15	15	15
ИГХ СО РАН	15	15	10
ИСЗФ СО РАН	10	10	5
остальные	20	25	30

КРАСНОЯРСКИЙ СУПЕРКОМПЬЮТЕРНЫЙ ЦЕНТР, ИВМ СО РАН

Состав технических средств

В 2018 году в рамках программы развития ФИЦ КНЦ СО РАН для основного вычислительного кластера были приобретены восемь высокопроизводительных вычислительных узлов (два 20-ядерных процессора, 256ГБ оперативной памяти) пиковой производительностью по 1.4 Тфлопс, что позволило увеличить производительность кластера в 5 раз. Таким образом, на конец 2018 года технические средства центра состоят из:

1. Основной универсальный суперкомпьютер кластерной архитектуры: МВС-1000/ИВМ с пиковой производительностью 14 Тфлопс и системой хранения емкостью 64ТБ.

2. Вычислительный комплекс Flagman для расчетов с графическими сопроцессорами (8 GPU Nvidia Tesla C2050, пиковая производительность 8.24 Тфлопс).

3. Вычислительный сервер для многоядерной архитектуры Intel Xeon Phi: 2 сопроцессора Intel Xeon Phi 5110P (8 GB, 1.053 GHz, 60 core), оперативная память – 128 ГБ, HDD: 2000 ТБ. Пиковая производительность 2.3 Тфлопс.

4. Малый кластер Сибирского федерального университета (СФУ) с пиковой производительностью 1.04 Тфлопс.

Функционирует сетевое хранилище данных объемом 30 ТБ, используемое для резервного копирования систем и пользовательских данных.

Программное обеспечение

Все вычислительные ресурсы центра работают под управлением 64-битных версий свободно распространяемой операционной системы Linux. Прикладное программное обеспечение составляют: компиляторы GNU C/C++ и GNU Fortran, компиляторы Intel C/C++ и Intel Fortran, коммуникационные среды – реализации MPI (MPICH1, MPICH2, LAM), система параллельного

программирования DVM, специализированные пользовательские вычислительные пакеты, коммерческие продукты MathWorks (MATLAB, Simulink и Parallel Computing Toolbox), Intel Cluster Studio XE for Linux OS. В связи с отсутствием средств коммерческое ПО не обновлялось более двух лет.

Пользователи, загрузка кластеров, инфраструктура

На всех вычислительных кластерах с телекоммуникационным доступом ведется статистика использования ресурсов, поддерживается доступ из городской научно-образовательной сети на скорости 1 Гбит/с, а из сетей общего пользования – 60-100 Мбит/с.

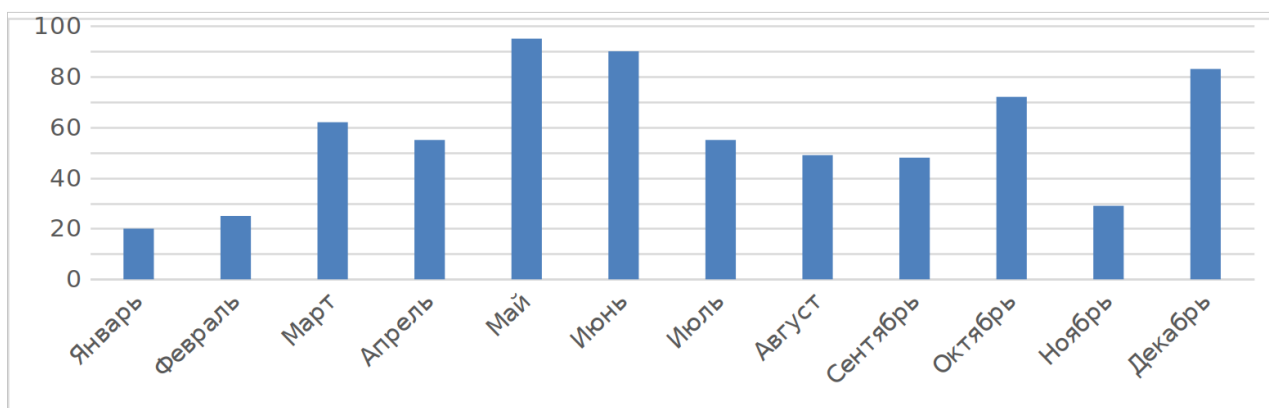


Рис. 1. Загрузка МВС-1000/ИВМ по месяцам

Средняя загрузка основного кластера (рис. 1) по данным собираемой статистики составляет 56%, что больше прошлогодней. Из общего объема около 98% загрузки дают задачи пользователей Института химии и химической технологии СО РАН, 1% – Института вычислительного моделирования СО РАН, 1% – прочие организации. Основные направления исследований: молекулярная динамика, квантовая химия, механика, газовая динамика.

На базовой кафедре вычислительных и информационных технологий Института математики и фундаментальной информатики СФУ (заведующий кафедрой член-корреспондент РАН Шайдуров В.В.) читаются курсы по методам решения задач на высокопроизводительных вычислительных системах.

Основные публикации

1. Sadovskii Vladimir M., Sadovskaya Oxana V. Numerical algorithm based on implicit finite-difference schemes for analysis of dynamic processes in blocky media // RUSSIAN JOURNAL OF NUMERICAL ANALYSIS AND MATHEMATICAL MODELLING. – 2018. – V. 33, № 2. – P. 111-121.

2. Sadovskii V.M., Sadovskaya O.V., Tarasov B.G. Modeling of fan waves taking into account the resistance to separation of domino-slabs in a fan-shaped system // AIP Conference Proceedings. – 2018. – V. 2025. – Art. no. 70006.

3. Gavriilyuk Anatoly P., Gerasimov Valeriy S., Ershov Alexander E., Karpov Sergey V. Temperature dependent elastic repulsion of colloidal nanoparticles with a polymer adsorption layer // COLLOID AND POLYMER SCIENCE. – 2018. – V. 296, № 10. – P. 1689-1697.

Объем финансирования в 2018 году

В 2018 г. Институт вычислительного моделирования СО РАН потратил на поддержку и развитие высокопроизводительных вычислений около 8,15 млн руб. собственных средств (оплата труда – 400 тыс. руб., оплата электроэнергии – 250 тыс. руб., приобретение оборудования – 7,5 млн руб.).

Планы на 2019 год

Планируется перевод основного вычислительного кластера на новое ПО, а также обновление вычислительных средств за счет внебюджетных средств (в случае их поступления).

ТОМСКИЙ СУПЕРКОМПЬЮТЕРНЫЙ ЦЕНТР, ИСЭ СО РАН

Состав технических средств

Гибридная вычислительная система: 1) 5 узлов – Intel Core i5, ОЗУ 8 Гб, HDD 500 Гб; ускорители на 2-х узлах: Nvidia C2050, 1 узел с Nvidia C2070, 1 узел с Nvidia C2090; 2) 1 узел – Intel Core i7 920, 2 x Nvidia Tesla C1060; 3) 4 узла – 2 x Intel Xeon E5-2650, ОЗУ 64 Гб, Intel Xeon Phi 7120, HDD 2Тб; 4) 1 узел – 2 x Intel Xeon E5-2680 V2, ОЗУ 256 Гб, 2 x HDD 2 Тб.

Основные результаты по предоставлению вычислительных услуг

Вычислительные ресурсы в основном используются для разработки и отладки программ. Основной счет проводятся на кластерах ТГУ и МГУ. Научные области решаемых задач: физика твердого тела, высоких энергий и пучков заряженных частиц, плазмы; численное моделирование атмосферного пограничного слоя и качества воздуха над урбанизированными территориями; разработка гидродинамической модели весеннего речного термобара в глубоком озере; разработка построенной на локальных весовых сплайнах разностной схемы для аппроксимации конвективных членов уравнения переноса, развитие параллельных алгоритмов для решения уравнений пространственной прогностической модели переноса примеси с учетом химических реакций.

Подготовка кадров и повышение квалификации

В рамках специализации сотрудниками томских институтов СО РАН читаются курсы магистрантам ТПУ, ТГУ.

ОМСКИЙ СУПЕРКОМПЬЮТЕРНЫЙ ЦЕНТР, ОФ ИМ СО РАН

Состав технических средств

1) Кластер Tesla: 4 узла, всего ОЗУ 48ГБ, суммарно 6740 Gflops (пик, двойная точность) на GPU Nvidia: 4 x Tesla K20, 2 x Tesla C2075, 2 x Tesla C2050

2) Кластер MBC-1000/128: 196 Gflops, 64 узлов: 2 x DEC Alpha 21264, ОЗУ 2 ГБ.

Обеспечение температурных условий работы оборудования осуществляется прецизионным кондиционером Uniflair, отремонтированным за счет собственных средств ОФ ИМ СО РАН в 2017 году. В 2018 году проводилось текущее техническое обслуживание данного кондиционера: выполнена очистка фильтров, проведена профилактика наружного блока.

Также, за счет собственных средств ОФ ИМ СО РАН приобретен новый ИБП (без батарейных блоков). В то же время, ремонт вышедшего из строя еще в 2017 году APC Galaxy 3500 так и не был проведён в связи с полным отсутствием финансирования.

Программное обеспечение

1) Кластер MBC 1000/128: осуществлялась поддержка программных средств: ОС Debian Linux 5.0, C/C++ GNU GCC 4.6, OpenMPI;

2) Кластер Tesla: профилактические работы, обновление ОС и системных программных средств (C/C++, CUDA, OpenMPI, СУПЗ Torque). Используется только бесплатное, свободно распространяемое программное обеспечение.

Пользователи, загрузка кластеров, инфраструктура

В связи с отсутствием финансирования центра и в связи с выходом из строя ИБП Galaxy, эксплуатировать суперкомпьютер в круглосуточном режиме в настоящее время не представляется возможным. В периоды нормального функционирования комплекса Tesla загружался, преимущественно, задачами сотрудников ОФ ИМ СО РАН.

MBC 1000/128 используется студентами ОмГУ при выполнении учебных заданий, курсовых и дипломных работ в соответствии с учебными планами.

Решаемые задачи

Численное интегрирование специальных типов функций; компьютерные исследования алгебраических задач, задач дискретной оптимизации; создание алгоритмов и программ анализа медицинских данных; создание алгоритмов и программ для изучения динамики биологических и социальных сообществ.

Подготовка кадров и повышение квалификации

MBC 1000/128 используется в учебной работе на факультете компьютерных наук ОмГУ по Соглашению о сотрудничестве между ОФ ИМ СО РАН и ОмГУ.

В ОФ ИМ ведутся консультации пользователей кластера Tesla.

Объём финансирования

По программе «Суперкомпьютер» президиума СО РАН 0 (ноль) руб.
Собственных средств 98000,0 руб.

Планы на 2019 год

В 2019 году планируются работы по поддержке и развитию имеющихся вычислительных систем на основе специализированных вычислителей Tesla. Планируется модернизация кластера Tesla за счет приобретения новых вычислительных узлов, что позволит постепенно наращивать его вычислительную мощность. Также планируется проведение работ по приобретению батарейных блоков для закупленного в 2018 году ИБП (либо по подключению существующих батарейных блоков к новому ИБП).

План научных работ на 2019 год с использованием кластера Tesla включает в себя задачи почти всех плановых работ ОФ ИМ:

- Компьютерные исследования алгебраических задач.
- Компьютерные исследования задач дискретной оптимизации.
- Создание алгоритмов и программ для анализа медицинских данных.
- Создание алгоритмов и программ для изучения динамики биологических и социальных сообществ.

Однако, в связи с продолжающимся полным отсутствием финансирования, как планы по развитию кластера, так и план научных работ в настоящее время остаются под угрозой. Совершенно необходимо в срочном порядке решить вопрос с финансированием центра. Увеличивающаяся с каждым годом степень износа оборудования всё более и более осложняет данную проблему.