

3. ДЕЯТЕЛЬНОСТЬ НАУЧНЫХ СОВЕТОВ

О ДЕЯТЕЛЬНОСТИ СОВЕТА СО РАН ПО СУПЕРВЫЧИСЛЕНИЯМ

Совет СО РАН по супервычислениям координирует деятельность суперкомпьютерных центров СО РАН, взаимодействует с вузами с целью разработки образовательных программ, обеспечивающих подготовку специалистов пользователей суперкомпьютерных вычислений и разработчиков программного обеспечения для организации крупномасштабных вычислений, участвует в организации научных и образовательных мероприятий.

Суперкомпьютерные центры СО РАН:

- Центр коллективного пользования Сибирский суперкомпьютерный центр (ЦКП ССКЦ) на базе Института вычислительной математики и математической геофизики СО РАН;
- Иркутский суперкомпьютерный центр (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;

ЦЕНТР КОЛЛЕКТИВНОГО ПОЛЬЗОВАНИЯ СИБИРСКИЙ СУПЕРКОМПЬЮТЕРНЫЙ ЦЕНТР (ЦКП ССКЦ) НА БАЗЕ ИНСТИТУТА ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ МАТЕМАТИКИ И МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ГЕОФИЗИКИ СО РАН

<http://www2.sccc.ru>

Инфраструктура ЦКП ССКЦ СО РАН

Общая площадь – 205 кв. м, оборудован автоматической системой газового пожаротушения, пожарной и охранной сигнализацией

Общая мощность двух источников бесперебойного электропитания составляет 240 кВт, общая мощность прецизионных кондиционеров по холоду составляет 276 кВт. **Общее потребление ЦКП ССКЦ составило: 2016 год – 992,132 тыс. кВтч.**

Вычислительная техника работает в круглосуточном режиме.

ЦКП ССКЦ подключен по выделенному каналу (1 Гбит/с) к сети Новосибирского научного центра и дополнительно по скоростному каналу (10 Гбит/с) к суперкомпьютерной сети ННЦ.

Вычислительные ресурсы ЦКП ССКЦ СО РАН

1) Кластерный суперкомпьютер НКС-30Т, изготовитель Hewlett – Packard, США. Пиковая производительность 115 Тфлопс, в том числе 79 Тфлопс на GPU NVIDIA Tesla M2090.

Коммуникационная сеть – QDR Infiniband. Транспортная и сервисная сети – Gigabit Ethernet. Кластерная файловая система Ibrx, 32 Тбайт полезной ёмкости. Полная информация: см. <http://www2.sccc.ru/НКС-30Т/НКС-30Т.htm>

2) На части кластера НКС-30Т развернута, основанная на KVM, виртуализованная вычислительная среда, используемая для обработки данных физических экспериментов в физике высоких энергий, осуществляемых в ИЯФ СО РАН.

3) Сервер с общей памятью HP ProLiant DL980 G7 (архитектура SMP) включает восемь 10-ядерных процессора Intel E7-4870 с тактовой частотой 2,4 ГГц, оперативной памятью 1024 Гбайт и 8 SAS дисками по 300 Гбайт. Пиковая производительность сервера составляет 768 Гфлопс. Включён в кластер НКС-30Т как нестандартный вычислительный узел.

4) Сервер HP ProLiant DL580 G8 используется для работы с NVIDIA Kepler K40.

5) Три дисковые полки HP D2700 с дисками HP 1.2 TB 6G 10K SAS. Одна полка HP D2700 подключена к серверу HP DL980, а две к IBRIX (BIOIFS). Объём внешней памяти составляет 2x47 Тбайт.

Программное обеспечение/инструментальные средства разработки

1) Intel Cluster Studio XE и Intel Parallel Studio XE for OS Linux. На кластере НКС-30Т установлен Intel MPI 4.1, Intel TraceAnalyzer/Collector, компиляторы Intel C++/Fortran из состава Composer XE 2013 SP1, библиотеки Intel MKL, Intel IPP и Intel TBB.

2) Gromacs, Quantum Espresso и Bioscope. Пакет Gromacs 4.6.3 поддерживает параллельную работу как на ядрах CPU, так и на GPU NVIDIA.

3) ANSYS CFD версии 14.5.7. с лицензиями HPC, обеспечивающими параллельное выполнение программ Fluent.

4) Gaussian g09 Rev D.01 w/LINDA.

5) CUDA Toolkit 6.5 и PGI Accelerator версии 14.9.

Распределение использования процессорного времени между организациями – 2014-2016 гг.

Организация	2014, %	2015, %	2016, %
ИК	11	21	26
ИХТТМ	0	5	15
ИХКГ	12	9	8
ИТ	3	6	8
ИОА (Томск)	0	0	8
ИВМиМГ	13	11	7
ИХХТ (Красноярск)	3	4	6
ИЯФ	2	11	5
ИНХ	6	2	5
ИТПМ	2	7	3
ИЛФ	19	4	2
ВГУ (Воронеж)	0	4	2
ИХБиФМ	2	4	2
ИЦиГ	11	6	1
ИНГГ	6	4	1
СФУ (Красноярск)	6	2	1
НГУ	4	0	1
НИОХ	0	0	1
Другие	<1	<1	<1

Направления решаемых задач – 2016 г.
(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, Вычислительная математика, Вычислительная техника, Численные методы, Физика, Физика элементарных частиц, Геофизика, Исследование материалов, Квантовая химия, Математика, Математическое моделирование природных явлений, Структура и свойства полимеров, Суперкомпьютерное моделирование.

Подготовка кадров, повышение квалификации, образовательные и научные мероприятия

1) Поддержка практических занятий в пакете Gaussian 09 на ресурсах ССКЦ в рамках учебного курса «Теоретическая и вычислительная спектроскопия» (2016 г.), проводимого приглашённым профессором Энрико Бенасси из университета Пизы (Италия). Описание курса: <http://www.htt.nsu.ru/?p=1469>

Как результат – рост числа пользователей, в том числе и новых, желающих работать с Gaussian 09 .

2) Ведется подготовка специалистов по высокопроизводительным вычислениям на 5-х кафедрах: Математических методов геофизики НГУ (зав. кафедрой д.ф.-м.н. А.Г. Фатьянов); Параллельных вычислений НГУ (зав. кафедрой профессор В.Э. Малышкин); Вычислительных систем НГУ (зав. кафедрой профессор Б.М. Глинский); Параллельных вычислительных технологий НГТУ (зав. кафедрой профессор В.Э. Малышкин).

3) Проводится регулярный семинар «Архитектура, системное и прикладное программное обеспечение кластерных суперЭВМ» на базе ССКЦ, кафедры Вычислительных систем НГУ и Центра Компетенции по высокопроизводительным вычислениям СО РАН - Intel. Презентации: <http://www2.sccc.ru/Seminars/NEW/Seminars.htm>.

4) В ИВМиМГ СО РАН в 2016 г. проведены городская Зимняя и международная Летняя школы по параллельному программированию совместно с Новосибирским государственным университетом и Новосибирским государственным техническим университетом. В работе зимней школ участвовали студенты НГУ, НГТУ. В летней школе участвовали студенты НГУ, НГТУ, лицея Lycée Saint Joseph - La Salle de Lorient, г. Lorient (Лорьян), Франция, студенты, аспиранты и научные Казахского национального университета им. Аль-Фараби, г. Алма-Ата.

Объём финансирования 2016 г.

Собственные средства: 2016 – 3,3 млн руб.

Основные итоги 2016 года

1) Получена субсидия ФАНО России в размере 60 млн руб. на модернизацию ЦКП ССКЦ.

2) Разработано Техническое задание и проводится аукцион на новый кластер с ориентацией на современные компоненты вычислительной техники.

3) Поддержка практических занятий в пакете Gaussian 09 на ресурсах ССКЦ курса лекций «Теоретическая и вычислительная спектроскопия» (2016 г.), проводимого приглашённым профессором Энрико Бенасси из университета Пизы (Италия).

4) Оказание вычислительных услуг пользователям для осуществления работ в рамках грантов, программ, проектов, диссертаций, дипломов:

По статистике	По отчётам пользователей	
<p>Всего пользователей – 191 Всего организаций – 34</p> <p>Академических организаций – 24 Университетов – 7 (НГУ, НГТУ, СФУ (Красноярск), ВГУ (Воронеж), АлтГТУ (Барнаул), АлтГТПУ (Барнаул), ХГУ (Абакан)) Другие организации – 3 (СибНИА, СибНИГМИ, Компания Котэс)</p>	<p>Всего грантов, программ, проектов, тем — 174</p> <p>Из них Российских — 170 Международных — 4</p> <p>Программ РАН – 16 Грантов РФФИ – 71 Грантов РНФ – 19 Проектов СО РАН – 37 Программ Минобрнауки – 19 Другие – 12</p>	<p>Всего публикаций – 158</p> <p>Российских – 56 Зарубежных – 102</p> <p>Доктор. диссерт. – 1, Кандидат. диссерт. – 7, Дипломы – 10, Патенты – 1.</p>

Планы на 2017 г.

- 1) Восстановление системы охлаждения машинного зала.
- 2) Замена дисков в файловой системе (СХД).
- 3) Текущее обслуживание кондиционеров.
- 4) Текущее обслуживание кластеров.
- 5) Взаимодействие и обучение пользователей ЦКП.
- 6) Сопровождение системного программного обеспечения НКС-30Т +НКС-1П.
- 7) Ввод в эксплуатацию нового кластера, расширение круга пользователей.
- 8) Установка накупаемый суперкомпьютер PARMONC, DVM (ИПМ им. Келдыша) и перенос Gaussian 09.
- 9) Установка свободно распространяемых пакетов Open Source, такие как Ganglia Monitoring System, Quantum Espresso, Gromacs, OpenFoam.

**ИРКУТСКИЙ СУПЕРКОМПЬЮТЕРНЫЙ ЦЕНТР (ИСКЦ)
НА БАЗЕ ИДСТУ СО РАН
<http://hpc.icc.ru>**

Основной вычислительный ресурс коллективного пользования

Вычислительный кластер (ВК) «Академик В.М. Матросов»

1. 110 двухпроцессорных узлов в составе 11 шасси T-Platforms T-Blade V-CLASS.
2. 220 16-ядерных процессоров AMD Opteron 6276 2,3 GHz на основе x86_64-микроархитектуры Bulldozer (всего – 3520 процессорных ядра).
3. 2 Гб оперативной памяти на каждое ядро процессора; объем памяти в узле – 64 Гб.
4. Узел с графическими процессорами NVidia C2070 Fermi.
5. Коммуникационная сеть – QDR Infiniband.
6. Система хранения данных Panasas ActiveStor 12 40 TB 1,5 GB/s.
7. Системное программное обеспечение и средства разработки: CentOS Linux, PBS/Torque, Intel Cluster Toolkit, NVidia CUDA Toolkit, GNU C++, Fortran и др.
8. Суммарная пиковая производительность кластера – 33,7 TFlops.
9. Максимальная достигнутая производительность на тестах HPL (x86) – 25,12 Tflops.

**Распределение использования процессорного времени
между организациями, 2014-2016 гг.**

Организация	2014, %	2015, %	2016, %
ИДСТУ СО РАН	20	15	20
ИрИХ СО РАН	15	30	15
ЛИН СО РАН	15	25	20
ИСЗФ СО РАН	15	5	10
ИГХ СО РАН	10	10	15
Другие	25	15	20

Деятельность ИСКЦ в 2016 году

Работы по обеспечению функционирования ИСКЦ

1. Подготовка отчетов о деятельности ИСКЦ в рамках мониторинга деятельности ЦКП.
2. Разработка документов, регламентирующих деятельность ЦКП, в соответствии с требованиями Постановления Правительства РФ от 17 мая 2016 г. № 429.

3. Работа с пользователями вычислительных систем ИСКЦ: регистрация и инструктаж новых пользователей, реагирование на обращения в службу технической поддержки, установка и настройка прикладного программного обеспечения по запросам, консультации.

4. Обновление контента сайта ИСКЦ <http://hpc.icc.ru>.

5. Организация и проведение сервисного обслуживания вычислительной и инженерной инфраструктуры.

6. Обновление системного программного обеспечения.

7. Организация и проведение текущего ремонта оборудования.

8. Организация капитального ремонта оборудования: 1) Подготовка заявки на предоставление субсидии ФАНО России на капитальный ремонт оборудования ИСКЦ (системы бесперебойного энергоснабжения – СБЭ). Получено дополнительное финансирование в размере ~1,1 млн рублей на проведение капитального ремонта. 2) Разработка технического задания и иной аукционной документации, организация закупки через портал <http://www.zakupki.gov.ru>. Определен подрядчик для выполнения работ по капитальному ремонту СБЭ.

Работы по развитию МТБ ИСКЦ

– Разработка проекта модернизации оборудования ИСКЦ в рамках пилотного проекта ФАНО России по модернизации оборудования суперкомпьютерных центров первой категории. Разработан двухэтапный проект модернизации вычислительной и инженерной инфраструктуры ИСКЦ.

– Подготовка заявки на предоставление субсидии ФАНО России на модернизацию оборудования ИСКЦ. Привлечено дополнительное финансирование в размере 40 млн рублей на проведение первого этапа модернизации.

– Разработка технического задания на модернизацию оборудования ИСКЦ, подготовка аукционной документации и организация закупки через портал <http://www.zakupki.gov.ru>. Определен поставщик оборудования для модернизации, определена спецификация поставки.

Деятельность по запросам Минобрнауки и ФАНО России

1. Подготовка предложений к проекту Концепция развития сети ЦКП, СКЦ и УНУ в организациях, подведомственных ФАНО России (запрос ФАНО России от 11.01.2016).

2. Подготовка материалов о ходе реализации основ государственной политики в области создания и применения суперкомпьютерных и грид-технологий (запрос ФАНО России от 27.01.2016).

3. Подготовка предложений о возможных механизмах предоставления ресурсов действующих суперкомпьютерных центров для решения актуальных научно-технических задач науки, образования и

промышленности (запрос, инициированный рабочей группой Межведомственного совета Национальной суперкомпьютерной инфраструктуры при Минобрнауки России от 11.04.2016).

4. Подготовка предложений в перечень первоочередных задачи по использованию суперкомпьютерных технологий в сфере экономики, промышленности, науки и образования, а также в интересах обеспечения национальной безопасности (запрос Минобрнауки России от 05.07.2016, запрос ФАНО России от 13.07.2016).

5. Подготовка предложений к проекту Концепции создания и обеспечения функционирования Национальной суперкомпьютерной инфраструктуры (запрос Минобрнауки России от 24.08.2016, запрос ФАНО России от 13.09.2016).

Деятельность, связанная с популяризацией и пропагандой науки, достижений науки и техники

1. Лекции и экскурсии в ИСКЦ в рамках Дня науки и Всероссийского фестиваля науки «НАУКА 0+» для студентов, школьников и всех желающих.

2. Экскурсии в ИСКЦ для зарубежных и российских научных делегаций, представителей органов власти и т.д.

Использование вычислительных ресурсов ИСКЦ в 2016 г.

Количество зарегистрированных пользователей ИСКЦ – 156 (из 12 научных учреждений и вузов).

В 2016 г. вычислительные ресурсы ИСКЦ использовались для решения задач, относящихся к следующим научным областям: химия и науки о материалах, индустрия наносистем, микробиология, геномика, экология и рациональное природопользование, мониторинг и прогнозирование состояния окружающей среды, ядерная энергетика, энергетическая безопасность, наземная гамма-астрономия, астрофизика, дискретная математика и математическая кибернетика, криптография и криптоанализ, исследование сложных информационных систем.

План модернизации оборудования ИСКЦ в 2017 г.

Частичная модернизация вычислительных узлов ВК «Академик В.М. Матросов» на средства субсидии ФАНО России, полученной в 2016 г. в рамках пилотного проекта по модернизации оборудования суперкомпьютерных центров первой категории. До конца I кв. 2017 г. будет обновлено 45% узлов ВК.

Подготовка заявки на получение субсидии ФАНО России для модернизации оставшейся части вычислительных узлов и масштабирования инженерной инфраструктуры ИСКЦ.

КРАСНОЯРСКИЙ СУПЕРКОМПЬЮТЕРНЫЙ ЦЕНТР (КСКЦ) НА БАЗЕ ИНСТИТУТА ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ СО РАН

Состав технических средств

В связи с отсутствием целевого финансирования в 2015, 2016 г. технические средства остались на уровне 2014 г.

1. Основной суперкомпьютер кластерной архитектуры: MBC-1000/ИВМ (274 вычислительных ядра) с пиковой производительностью 2.04 Тфлопс и производительностью по Linpack 1.51 Тфлопс.

2. Вычислительный комплекс Flagman RX240T8.2 для вычислений с графическими сопроцессорами на базе процессоров Tesla C2050, имеющий 2 шестиядерных процессора Intel Xeon X5670 и 8 GPU Nvidia Tesla C2050. Пиковая производительность сервера при использовании графических вычислителей составляет 8.24 Тфлопс при операциях с одинарной точностью и 4.12 Тфлопс при операциях с двойной точностью.

3. Вычислительный сервер для многоядерной архитектуры Intel Xeon Phi (2 процессора Intel Xeon E5-2660 Sandy Bridge-EP (2200 MHz, LGA2011, L3 20480 Kb, 8 core), 2 сопроцессора Intel Xeon Phi 5110P (8 GB, 1.053 GHz, 60 core), оперативная память – 128 ГБ, HDD: 2000 TB). Пиковая производительность сервера составляет около 2.3 Тфлопс.

4. Для научно-образовательной деятельности используется установленный на площадях Института малый кластер Сибирского федерального университета (СФУ) (28 четырехъядерных процессоров Intel Xeon Quad-Core E5345 2.33 ГГц) с производительностью по LINPACK 450 Гфлопс и пиковой – 1.04 Тфлопс.

Эксплуатируется сетевое хранилище данных Synology RackStation RS3412RPxs объемом 30 TB (закуплено в 2014 г.), используемое для резервного копирования систем и пользовательских данных. Для пользователей Красноярского научного центра СО РАН поддерживается доступ по гигабитной сети к большому кластеру СФУ с пиковой производительностью 16.87 Тфлопс.

На всех вычислительных кластерах поддерживается доступ из городской научно-образовательной сети на скорости 1 Гбит/с, а из сетей общего пользования – 60 Мбит/с.

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.

В 2016 г. производилось текущее обновление компиляторов и системного программного обеспечения.

На комплексе Flagman с графическими процессорами Nvidia функционирует специализированное программное обеспечение MathWorks: MATLAB, Simulink и Parallel Computing Toolbox с поддержкой графических вычислений. Производилось обновление CUDA SDK до актуальной версии.

На вычислительном сервере для многоядерной архитектуры Intel Xeon Phi установлен комплекс специализированного программного обеспечения Intel Cluster Studio XE for Linux OS, включающего в себя следующие компоненты:

- интегрированный набор инструментов для разработки кластерных приложений;
- высокопроизводительная библиотека MPI;
- высокопроизводительные компиляторы C++, Fortran и мощные модели параллельности для многоядерных процессоров;
- инструменты анализа корректности и инструменты профилирования для приложений общего доступа и для распределенных и гибридных приложений.

Пользователи, загрузка кластеров

Средняя загрузка кластеров по данным собираемой статистики составляет 40% (от 15% до 68% в разные периоды). Из общего объема около 60% загрузки дают задачи пользователей Института химии и химической технологии СО РАН, 30% – Института физики СО РАН, 10% – Института вычислительного моделирования СО РАН.

Загрузка кластера в отдельные месяцы 2016 г. достигает 70%, что примерно на 20% меньше по сравнению с 2015 годом. Это связано с моральным устареванием основного кластера и переходом пользователей на более производительные доступные по телекоммуникационной сети вычислительные комплексы. Часть пользователей ИВМ СО РАН использует для длительных расчетов доступные более мощные вычислительные системы в других научных центрах: в городах Новосибирске, Томске и Москве, а также кластер Сибирского федерального университета.

Решаемые задачи и распределение процессорного времени 2014-2016 гг.

В таблице 1 приведены характерные области исследований с применением кластеров ИВМ СО РАН.

Таблица 1

Направление исследований	Институт	Вклад в загрузку 2014 (%)	Вклад в загрузку 2015 (%)	Вклад в загрузку 2016 (%)
Молекулярная динамика	ИФ СО РАН	55	62	30
Молекулярная динамика, Квантовая химия	ИХХТ СО РАН	38	35	60
Газовая динамика	ИВМ СО РАН	5	2	6
Механика	ИВМ СО РАН			2
Гидродинамика	ИВМ СО РАН			2

Общее количество запусков задач на основном кластере снизилось на 40% в 2016 г. по сравнению с 2015 г., большинство запусков является долговременными, что свидетельствует о практическом характере расчетов.

Кроме вышеперечисленных направлений ресурсы центра активно используются для решения задач моделирования процессов горения и газовой динамики (Красноярский филиал Института теплофизики СО РАН), моделирования потоков людей и численности популяций.

Основные публикации 2016 г.

1. V. S. Gerasimov, A. E. Ershov, A. P. Gavriilyuk, S. V. Karpov, H. Agren, and S. P. Polyutov. Suppression of surface plasmon resonance in Au nanoparticles upon transition to the liquid state // Opt. Express 24, 26851-26856 (2016).
2. V. Sadovskii, O. Sadovskaya. Numerical Implementation of Mathematical Model of the Dynamics of a Porous Medium on Supercomputers of Cluster Architecture // AIP Conference Proceedings, 1684, 070005-1-070005-9, 2015.
3. V. Shaydurov, G. Shchepanovskaya, and M. Yakubovich. Mathematical model and numerical algorithm for aerodynamical flow// AIP Conference Proceedings, 1773, 020006-1–020006-10, 2016.

Подготовка кадров и повышение квалификации 2016 г.

На базовой кафедре вычислительных и информационных технологий Института математики и фундаментальной информатики СФУ (заведующий кафедрой член-корреспондент РАН В.В. Шайдулов) читаются курсы по методам решения задач на высокопроизводительных вычислительных системах, в том числе: «Параллельное программирование», «Высокопроизводительные вычисления» для бакалавров и «Математическое моделирование с применением высокопроизводительных вычислений» для магистров.

Проводились заседания совместного семинара ИВМ СО РАН и СФУ «Компьютерное решение многомерных задач», на котором обсуждаются вопросы использования высокопроизводительных вычислений.

Издательством СФУ выпущено совместно с ИВМ СО РАН учебное пособие: Основы многопоточного и параллельного программирования, Карепова Е.Д. (зав. отделом ИВМ СО РАН, доцент базовой кафедры вычислительных и информационных технологий СФУ).

Велись текущие работы по консультированию пользователей вычислительных ресурсов по возникающим проблемам.

Объем финансирования 2016 г.

В 2016 г. Институт вычислительного моделирования СО РАН потратил на поддержку и развитие высокопроизводительных вычислений 800 тыс. руб. собственных средств, в том числе:

- на оплату труда инженерно-технического персонала по поддержке и развитию вычислительных ресурсов и налоги израсходовано 500 тыс. руб.;
- на оплату электроэнергии – 300 тыс. руб.

Планы на 2017 г.

В 2017 г. планируется развитие инфраструктуры параллельных вычислений и телекоммуникационной сети за счет приобретения нового оборудования в рамках программы развития «Федерального исследовательского центра «Красноярский научный центр Сибирского отделения Российской академии наук».

**ТОМСКИЙ СУПЕРКОМПЬЮТЕРНЫЙ ЦЕНТР (ТСКЦ)
НА БАЗЕ ИНСТИТУТА СИЛЬНОТОЧНОЙ ЭЛЕКТРОНИКИ СО РАН**

Состав технических средств

Кластер на базе процессоров Intel Itanium2

Вычислительный кластер состоит из шести однотипных вычислительных узлов (один узел управляющий). Характеристики вычислительного узла кластера: два процессора Intel Itanium2 Madison с тактовой частотой 1595.706 МГц, Оперативная память 4 Гб, Жесткий диск 40 Гб (SCSI).

Все вычислительные узлы связаны высокопроизводительной сетью Mellanox SDR Infiniband, а также вспомогательной сетью Gigabit Ethernet.

Вычислительный кластер работает под операционной системой GNU/Linux Debian. Используемое программное обеспечение:

1. параллельные среды openmpi, mpich;
2. компиляторы GNU, используются языки программирования C/C++/Fortran;
3. менеджер ресурсов Torque;
4. система мониторинга Ganglia.

Гибридная вычислительная система

Гибридная вычислительная система на базе современных графических вычислителей компании Nvidia. В вычислительной системе используются графические вычислители последнего поколения: Nvidia Tesla C2050, Nvidia C2070 и Nvidia C2090, основанных на архитектуре CUDA (Compute Unified Device Architecture) GPU "Fermi", а также графические вычислители NVidia Tesla C1060.

Пять узлов оснащены процессором Intel Core i5, оперативной памятью 8 Гб, имеют жесткий диск объемом 500 Гб. Два узла оснащены графическим вычислителем Tesla C2050, и соответственно узел с Nvidia C2070 и узел с Nvidia C2090 . Один вычислительный узел оснащен четырех ядерным процессором Intel Core i7 920 с тактовой частотой 2.67 ГГц Hyper-Threading, двумя графическими вычислителями Nvidia Tesla C1060, графическим вычислителем Quadro NVS 290, 12 Гб оперативной памяти. Все узлы объединены сетью 10G.

В 2013-2015 годах развернуты четыре узла Intel Xeon E5 2GHz 64 Gb ОЗУ с сопроцессорами Intel Xeon Phi 7120.

1. 2 процессоров Intel Xeon E5-2650 8-core, с тактовой частотой 2.0 GHz, 2+50Mb встроенного кэша на соquete LGA 2011, с сопроцессором Intel Xeon Phi которое имеет 61 ядро, 244 потока, частоту 1,23/1,33 ГГц, 30,5 МБ кэша второго уровня, 16 ГБ буферной памяти GDDR5, TDP 300 Вт

2. 8 линеек оперативной памяти Kingston 8GB 240-Pin DDR3 SDRAM ECC Registered DDR3 1333 Server Memory Model KVR1333D3D4R9S/8G

3. HDD 2 Tb SATA 6Gb/s Seagate Constellation ES.2 <ST32000645NS> 7200rpm 64Mb

В 2015 году закуплен высокопроизводительный вычислительный узел с большим объемом оперативной памяти (256 Gb) на базе 2-х процессорной серверной платформе INTEL P4308IP4LHKC 1600W в следующей конфигурации:

Процессор CPU Intel Xeon E5-2680 V2 2.8 GHz / 10core / 2.5+25Mb / 115W / 8 GT / s LGA2011	шт.	2
Модуль памяти Kingston ValueRAM < KVR18R13D4 / 16 > DDR-III DIMM 16Gb < PC3-15000 > ECC Registered with Parity CL13	шт.	16
Жесткий диск Toshiba SAS 2Tb MG03SCA200 (7200rpm) 64Mb 3.5" TOSHIBA MG03SCA200	шт.	2
Ключ RKSAS8R5	шт.	1

Организован доступ по гигабитной сети к большому кластеру ТГУ. Проведены подготовительные работы по переходу на скорости доступа к кластеру ТГУ со скоростями 10G. Со стороны Томского научного центра поставлено оборудование, позволяющее принимать потоки данных на скоростях 10G, ТГУ расширил емкость оптоволоконной линии связи до кластера.

Программное обеспечение

- 1) ПО MathWorks.
- 2) Cuda Toolkit версии 4.0, CUDA SDK.
- 3) Intel Parallel Studio XE Cluster Edition for Linux - Floating Academic (ESD).

Пользователи, загрузка кластеров, инфраструктура

Вычислительные ресурсы, развивающиеся в ТНЦ СО РАН, в основном используются для разработки и отладки программных модулей. Основной счет проводятся на кластерах ТГУ и МГУ.

Деятельность 2016 г.

Решаемые задачи

Вычислительные ресурсы использовались для решения задач, относящихся к следующим научным областям: физика твердого тела; физика высоких энергий и пучков заряженных частиц; физика плазмы, численное моделирование на основе мезомасштабной модели получить результаты моделирование атмосферного пограничного слоя и качества воздуха над урбанизированными территориями.

Продолжена разработка построенной на локальных весовых сплайнах разностной схемы для аппроксимации конвективных членов уравнения переноса, развитие и апробация параллельных алгоритмов, основанных на двумерной декомпозиции сеточной области, для численного решения уравнений пространственной прогностической модели переноса примеси с учетом химических реакций. В работе представлена численная схема решения системы конвективно-диффузионно-кинетических уравнений математической модели переноса малых составляющих примеси с учетом их химических взаимодействий в атмосферном пограничном слое.

Подготовка кадров и повышение квалификации

В рамках специализации сотрудниками ИСЭ СО РАН читаются курсы магистрантам ТПУ, в частности “Математическое моделирование”.

В течение отчетного периода сотрудники ТСКЦ прошли обучение на курсах повышения квалификации:

Intel© Parallel Programming Professional (Intel© Compilers, Intel© Math Kernel Library);

“Программирование вычислительных систем с архитектурой CUDA”;

Русско-Немецкая школа параллельных вычислений.

ОМСКИЙ РЕГИОНАЛЬНЫЙ СУПЕРКОМПЬЮТЕРНЫЙ ЦЕНТР КОЛЛЕКТИВНОГО ПОЛЬЗОВАНИЯ (ОСКЦ ОНЦ СО РАН)

Состав технических средств

- СуперЭВМ МВС-1000/128.
- СуперЭВМ НКС-160.
- Кластер Tesla на базе вычислителей NVIDIA Tesla.

В 2016 г. была проведена модернизация кластера путём установки коммутационной сети InfiniBand и замены устаревшего системного ПО на более современное.

Характеристики вычислителей, установленных на узлах кластера:

4 * Tesla K20, 2 * Tesla C2075, 2 * Tesla C2050.

Текущая конфигурация кластера: общее число узлов – 4, общее число вычислителей – 8, общий объём ОЗУ – 48ГБ, общий объём ОЗУ на вычислителях – 38ГБ.

Вычислительная производительность кластера: 6740 Gflops в вычислениях с двойной точностью.

С помощью специализированного оборудования осуществляется мониторинг температуры и влажности в помещении. В случае обнаружения проблем (выход температуры либо влажности за допустимые пределы) административно-технический персонал кластера немедленно (в автоматическом режиме) оповещается о возникшей ситуации посредством SMS.

Обеспечение температурных условий работы оборудования осуществляется прецизионным кондиционером Uniflair, который в настоящее время вышел из строя (по результатам обследования обслуживающей данное оборудование организацией – вышел из строя компрессор). Ремонт данного оборудования в настоящее время не может быть проведён в связи с отсутствием финансирования.

Программное обеспечение

В рамках работ по текущей эксплуатации вычислительного кластера MBC 1000/128 осуществлялась поддержка имеющегося набора программных средств:

- операционная система Debian Linux 5.0;
- набор клиент-серверных утилит для защищенного соединения с удаленным компьютером openssh;
- свободный компилятор языков C/C++ GNU gcc 4.6;
- средство поддержки параллельных программ OpenMPI;

На всех вычислительных узлах гибридного кластера Tesla произведены профилактические работы, установлены адаптеры InfiniBand.

Кроме того, произведено полное обновление ОС и системных программных средств (компилятор C/C++, CUDA, OpenMPI, Torque).

С целью минимизации стоимости эксплуатации кластера на нём применяется только бесплатное, свободно распространяемое ПО.

Пользователи, загрузка кластеров, инфраструктура 2016 г.

В связи с отсутствием финансирования центра и в связи с выходом из строя центрального кондиционера Uniflair, эксплуатировать суперкомпьютер в круглосуточном режиме в настоящее время не представляется возможным.

Ориентировочная стоимость ремонта с последующим запуском кондиционера в эксплуатацию (на январь 2017 года) составляет 200.000 руб.

До поломки кондиционера кластер Tesla загружался преимущественно сотрудниками ОФ ИМ СО РАН.

Кластеры МВС-1000/128 и НКС-160 получены на баланс ИМ СО РАН и установлены на предоставленных ОмГУ площадях для совместного использования.

Кластеры МВС 1000/128 и НКС-160 используются студентами ОмГУ при выполнении учебных заданий, курсовых и дипломных работ в соответствии с учебными планами. В связи с крайне невысокой (по современным меркам) вычислительной мощностью использовать данное оборудование для научных вычислений не имеет смысла. Но как учебные образцы высокопроизводительного вычислительного оборудования, кластеры прекрасно выполняют свои функции.

Решаемые задачи 2016 г.

Научные исследования в 2016 году с использованием кластера Tesla проводились в следующих направлениях: численное интегрирование специальных типов функций; 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; создание алгоритмов параллельного поиска путей на графах с ограниченными степенями связности вершин.

Вычислительные кластеры МВС 1000/128 и НКС-160 применялись в учебном процессе на Факультете компьютерных наук Омского государственного университета им. Ф.М. Достоевского.

Подготовка кадров и повышение квалификации

В соответствии с Соглашением о сотрудничестве между ОФ ИМ СО РАН и ОмГУ в области суперкомпьютерных технологий СуперЭВМ МВС 1000/128 и СуперЭВМ НКС-160 находятся на факультете компьютерных наук ОмГУ для обеспечения учебного процесса и освоения студентами технологий параллельных вычислений. В 2016 г. ОмГУ проводились работы по технической поддержке и обеспечению доступа пользователей к вычислительным ресурсам МВС-1000/128 и НКС-160.

В течение всего 2016 г. в ОФ ИМ в рабочем порядке проводились консультации существующих и новых пользователей кластера Tesla, как по вопросам его системной архитектуры, так и по приёмам и методам создания прикладных программ.

На семинарах в ОФ ИМ СО РАН в 2016 г. делались доклады по высокопроизводительным вычислениям.

Объём финансирования 2016 г.

Собственных средств

281911,3 руб.

Планы на 2017 г.

В 2017 г. планируются дальнейшие 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.

План научных работ на 2017 г. 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 полным отсутствием финансирования, как планы по развитию кластера, так и план научных работ в настоящее время находятся под угрозой. Совершенно необходимо в срочном порядке решить вопрос с финансированием центра.