

### 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, ИВМ<sub>и</sub>МГ СО РАН

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

#### Вычислительные ресурсы

1) Кластер НКС-1П, изготовитель РСК, Россия, 75,34 Тфлопс (пиковая), место 34 в TOP50 СНГ (09.2017). Сети: OMNI-Path 100 Gb/s, GbE. ФС Lustre 150 ТБ.

2) Кластер НКС-30Т, HP, США. 115 Тфлопс (79 Тфлопс – Nvidia Tesla 2090). Место 49 в TOP 50 СНГ (09.2017). Сети: QDR Infiniband, GbE. ФС Ibrix 81 ТБ.

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	2014, %	2015, %	2016, %	2017, %	Организация	2014, %	2015, %	2016, %	2017, %
ИК	11	21	26	15	ВГУ (Воронеж)	0	4	2	0
ИХТТМ	0	5	15	7	ИХБФМ	2	4	2	1
ИХКГ	12	9	8	9	ИЦиГ	11	6	1	1
ИТ	3	6	8	12	ИНГГ	6	4	1	13
ИОА (Томск)	0	0	8	1	СФУ (Красноярск)	6	2	1	0
ИВМиМГ	13	11	7	14	НГУ	4	0	1	2
ИХХТ (Красноярск)	3	4	6	4	НИОХ	0	0	1	3
ИЯФ	2	11	5	3	АГТУ (Барнаул)				1
ИНХ	6	2	5	8	ИГД				1
ИТПМ	2	7	3	4	Другие	<1	<1	<1	<1
ИЛФ	19	4	2	1					

### Направления решаемых задач по отчётам пользователей

<b>ПРИОРИТЕТНЫЕ НАПРАВЛЕНИЯ РАЗВИТИЯ НАУКИ, ТЕХНОЛОГИЙ И ТЕХНИКИ РФ</b>
<b>Индустрия наносистем</b> – ИВМиМГ, ИК, ИНХ, ИТПМ, ИФП, ИХБФМ, ИЦиГ, ИЯФ, НИОХ, СФУ (Красноярск), ВГУ (Воронеж).
<b>Информационно-телекоммуникационные системы</b> - ИВМиМГ, ИВТ, ИК, НГУ, ИВЭП (Барнаул).
<b>Энергоэффективность, энергосбережение, ядерная энергетика</b> – ИВМиМГ, ИК, ИВТ, ИТ, ИТПМ, ИХКГ, НГУ.
<b>Науки о жизни</b> - ИВМиМГ, ИК, ИНГГ, ИХБиФМ, ИХКГ, ИХТТМ, ИЦиГ, ИЯФ, НГУ, ИКЗ (Тюмень), ИОГен РАН (Москва)
<b>Рациональное природопользование</b> - ИВМиМГ, ИГД, ИНГГ, СибНИГМИ, ИХХТ (Красноярск), ИВЭП (Барнаул), ИКЗ (Тюмень), ИОА (Томск)
<b>Транспортные и космические системы</b> – 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: 1,8 млн руб.

Общее потребление электроэнергии ЦКП ССКЦ составило:  
1010,984 кВтч.

### **Подготовка кадров, образовательные и научные мероприятия**

1) Подготовка специалистов на кафедрах НГУ: Математических методов геофизики (зав. каф. чл.-корр. РАН С.И. Кабанихин); Параллельных вычислений (проф. В.Э. Малышкин); Вычислительных систем (проф. Б.М. Глинский); 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](http://www.sccc.icmmg.nsc.ru/seminar.html).

3) Зимняя школа (30.01-3.02.2017) и Международная Летняя школа-конференция (3-14.07.2017) по параллельному программированию, Новосибирск, организаторы: ИВМиМГ, НГУ, НГТУ, <http://ssd.sccc.ru/ru/school>

4) 14-я международная конференция Parallel Computing Technologies, 4-8 сентября 2017 г., Нижний Новгород (<http://ssd.sccc.ru/conference/pact2017/>), труды: <https://link.springer.com/book/10.1007/978-3-319-62932-2>

### **Основные итоги 2017 года**

1) На субсидию ФАНО России (60 млн руб. на модернизацию ССКЦ) закуплен и установлен кластер НКС-1П, 75,34 Тфлопс, с водяным охлаждением.

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

### **Планы на 2018 год**

1) Поддержка пользователей ЦКП; 2) Сопровождение программного обеспечения НКС-30Т + НКС-1П; 3) Объединение НКС-30Т + НКС-1П сетью 10 Гбит/с; 4) Включение 7 вычислительных модулей ИГиЛ СО РАН в состав НКС-1П.

### **ИРКУТСКИЙ СУПЕРКОМПЬЮТЕРНЫЙ ЦЕНТР СО РАН,**

#### **ИДСТУ СО РАН**

<http://hpc.icc.ru>

### **Основной вычислительный ресурс ЦКП ИСКЦ**

Кластер «Академик В.М. Матросов». Ввод в эксплуатацию 2012 г., модернизация 2017 г., 90,24 Tflops (пиковая). Место 26 в Top50 СНГ (04.2017):

1. 60 вычислительных узлов T-Blade V205S: 2 x AMD Opteron 6276, ОЗУ 64 GB;
2. 60 узлов (Supermicro SBI-7228R-T2F): 2 x Intel Xeon E5-2695 v4, ОЗУ 128 GB;
3. сервер с графическими процессорами NVidia Tesla C2070 «Fermi»;
4. 2 управляющих узла, 2 узла доступа; система хранения Panasas ActiveStor 40 TB; коммуникационная сеть QDR Infiniband, транспортная и сервисная сети.

### Деятельность ЦКП ИСКЦ в 2017 году

1. Разработка и поддержание в актуальном состоянии документов, регламентирующих деятельность ЦКП ИСКЦ (в соответствии с Постановлением Правительства РФ от 17 мая 2016 года № 429).
2. Административная, техническая, информационно-методическая поддержка пользователей ЦКП ИСКЦ: см. материалы на сайте <http://hpc.icc.ru>.
3. Мониторинг состояния оборудования ЦКП ИСКЦ, сопровождение встроенного и системного программного обеспечения оборудования.
4. Техническое обслуживание, текущий и капитальный ремонта оборудования.
5. Модернизации оборудования за счет субсидии ФАНО, полученной в 2016 г.
6. Подготовка отчетов, участие в отчетных мероприятиях ФАНО России.
7. Участие в работе Комиссии по развитию научной инфраструктуры организаций, подведомственных ФАНО России, Комиссии по информатизации ФАНО России по вопросам, связанным с развитием суперкомпьютерных ЦКП.
8. Лекции и экскурсии для научных делегаций (в т.ч. зарубежных), представителей научных, образовательных учреждений, студентов, школьников.

### Использование вычислительных ресурсов ЦКП ИСКЦ

Пользователей: 167 из 15 науч. учреждений и вузов (Сибирь, Дальний Восток).

Научные области: органическая, элементоорганическая химия, химия высокомолекулярных соединений, химическая кинетика, разработка новых вакцин, лекарственных препаратов, эволюционная генетика и геномика, микробиология и вирусология, гидробиология, ихтиология, астрофизика, физика Солнца, элементарных частиц, твердого тела, материаловедение, композитные наноструктуры, дискретная математика, математическая кибернетика, машинное обучение, исследование операций, криптография, криптоанализ, теория управления, подводная акустика, транспортные, космические системы, энергобезопасность.

### Распределение использования процессорного времени по организациям

Организации	2015, %	2016, %	2017, %
ИДСТУ СО РАН	15	20	15
ИрИХ СО РАН	30	15	15
ЛИН СО РАН	25	20	20
ИСЗФ СО РАН	5	10	10
ИГХ СО РАН	10	15	15
другие	15	20	25

## КРАСНОЯРСКИЙ СУПЕРКОМПЬЮТЕРНЫЙ ЦЕНТР, ИВМ СО РАН

### Состав технических средств

1. Основной кластер: MBC-1000/ИВМ, 4.3 Тфлопс (пиковая), система хранения на базе NAS PROMISE Vess R2600iD ёмкостью 64 ТБ.

В рамках программы развития ФГБНУ «Федеральный исследовательский центр «Красноярский научный центр Сибирского отделения Российской академии наук» (далее – ФИЦ КНЦ) приобретены 2 узла (2 x Intel Xeon E5-2698v4, ОЗУ 256 ГБ), 2.8 Тфлопс (пиковая), что позволило в 2 раза увеличить производительность кластера с учетом вывода из эксплуатации устаревших узлов.

2. Вычислительный комплекс Flagman RX240T8.2, 2 x Intel Xeon X5670, 8 x GPU Nvidia Tesla C2050, 4.12 Тфлопс (двойная точность, пиковая).

3. Вычислительный сервер 2 x Intel Xeon E5-2660, 2 x Intel Xeon Phi 5110P, ОЗУ 128 ГБ, HDD 2000 ТБ, 2.3 Тфлопс (пиковая).

4. Малый кластер СФУ (28 x Intel Xeon Quad-Core E5345), 1.04 Тфлопс (пиковая), размещен в ИВМ СО РАН, для научно-образовательной деятельности.

5. Сетевое хранилище Synology RackStation RS3412RPxs, 30 ТБ.

В 2017 году за счет собственных средств было обновлено оборудование корпоративной оптоволоконной сети ФИЦ КНЦ, что позволило увеличить скорость доступа пользователей к внутренним вычислительным ресурсам до 10 Гбит/с.

### Программное обеспечение

Вычислительные ресурсы работают под управлением 64-битных версий Linux. Средства разработки: GNU C/C++ и GNU Fortran, Intel C/C++ и Intel Fortran, MPICH1, MPICH2, LAM, система параллельного программирования DVM, вычислительные пакеты. В 2017 г. производилось текущее обновление ПО.

Комплекс Flagman – установлено специальное ПО MathWorks: MATLAB, Simulink и Parallel Computing Toolbox с поддержкой графических вычислений.

Сервер с сопроцессором Intel Xeon Phi – ПО Intel Cluster Studio XE.

### Пользователи, загрузка кластеров, инфраструктура

К ресурсам поддерживается доступ из научно-образовательной сети г. Красноярска на скорости 1 Гбит/с, а из сетей общего пользования – 60–100 Мбит/с.

98% загрузки кластера – задачи пользователей ИХХТ СО РАН, 1% – ИФ СО РАН, 1% – ИВМ СО РАН.

### Решаемые задачи

Направление исследований	Количество запусков задач	Институт	Вклад в загрузку (%)
Квантовая химия	1996	ИХХТ СО РАН	98
Молекулярная динамика	4	ИФ СО РАН	1
Механика	431	ИВМ СО РАН	1
ВСЕГО			100

Другие направления: моделирования процессов горения и газовой динамики (КрФ ИТ СО РАН), моделирования потоков людей и численности популяций.

### Основные публикации

– Ershov A. E., Gerasimov V. S., Gavrilyuk A. P., Karpov S. V. Surface plasmon resonances in liquid metal nanoparticles // Applied physics b-lasers and optics. – 2017. – V. 123(6). – P. 182. – DOI: 10.1007/s00340-017-6755-2.

– Sadovskii V.M., Sadovskaya O.V., Lukyanov A.A. Modeling of wave processes in blocky media with porous and fluid-saturated interlayers // Journal of Computational Physics. – 2017. – V. 345. – P. 834–855. DOI: 10.1016/j.jcp.2017.06.001.

– Смолехо И.В., Садовская О.В., Садовский В.М. Численное моделирование акустических волн в жидком кристалле с использованием технологии CUDA // Вычислительные технологии. – 2017. – Т. 22, Спец. вып. 1. – С. 87–98.

– Shaydurov V., Shchepanovskaya G., Yakubovich M. A Mathematical Model and a Numerical Algorithm for an Asteroid-Comet Body in the Earth's Atmosphere // LNCS. – 2017. – V. 10187. – P. 119-131. – DOI: 10.1007/978-3-319-57099-0\_11.

### Подготовка кадров и повышение квалификации

На базовой кафедре вычислительных и информационных технологий Института математики и фундаментальной информатики СФУ (заведующий кафедрой чл.-корр. РАН В.В. Шайдуров) читаются курсы по методам решения задач на высокопроизводительных вычислительных системах. Ведутся работы по консультированию пользователей по возникающим проблемам.

### Объем финансирования в 2017 году

В 2017 г. ИВМ СО РАН затратил на поддержку и развитие КСКЦ около 3 млн руб. собственных средств, в том числе: оплата труда инженерно-технического персонала и налоги – 400 тыс. руб., электроэнергия – 300 тыс. руб., приобретение оборудования за счет программы развития ФИЦ КИЦ – 2300 тыс. руб.

## Планы на 2018 год

Планируется подготовка проекта реконструкции помещения машинного зала ИВМ СО РАН для размещения вычислительных ресурсов Центра, обновление вычислительных ресурсов за счет поступающих внебюджетных средств.

## ТОМСКИЙ СУПЕРКОМПЬЮТЕРНЫЙ ЦЕНТР, ИСЭ СО РАН

### Состав технических средств

1. Кластер Itanium: 6 узлов – 2 x Intel Itanium2 Madison, ОЗУ 4 ГБ, HDD 40 ГБ; сети: Mellanox SDR Infiniband, GbE. ПО: GNU/Linux Debian, Open MPI, MPICH, GNU C/C++/Fortran, СУБД Torque, мониторинг: Ganglia.

2. 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 проводится 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 ИСЭ СО РАН читаются курсы магистрантам ТПУ, в частности «Математическое моделирование».

## 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.

Действует система мониторинга температуры и влажности в помещении. Отремонтирован за счет средств ОФ ИМ СО РАН кондиционер Uniflair, проведено его техническое обслуживание. Вышел из строя ИБП APC Galaxy 3500. Ремонт в настоящее время не возможен в связи с 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, СУБД Torque). Используется только бесплатное, свободно распространяемое программное обеспечение.

### Пользователи, загрузка кластеров, инфраструктура

В связи с выходом из строя ИБП, эксплуатировать кластер Tesla в круглосуточном режиме невозможно. 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**

Собственных средств

133642,0 руб.

**Планы на 2018 год**

Поддержка и модернизация кластера Tesla за счет приобретения новых вычислительных узлов. Ремонт либо замена ИБП APC Galaxy 3500.

План научных работ – задачи почти всех плановых работ ОФ ИМ: 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.

В связи с продолжающимся отсутствием финансирования, планы по развитию кластера, план научных работ в настоящее время остаются под угрозой.