

5. ДЕЯТЕЛЬНОСТЬ НАУЧНЫХ СОВЕТОВ

О ДЕЯТЕЛЬНОСТИ СОВЕТА СО РАН ПО СУПЕРВЫЧИСЛЕНИЯМ

Совет по супервычислениям СО РАН 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 им. С.Л. Соболева 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

Центр обработки данных (ЦОД) ССКЦ занимает четыре помещения общей площадью 205 кв. м: машинный зал 1: площадь 66,7 кв. м; машинный зал 2: площадь 59,9 кв. м; узел электропитания: площадь 58,5 кв. м; помещение гидромодуля, 20 кв. м. Машинный зал 1 освобожден от работающей вычислительной техники; в нем планируется установка нового кластера.

ЦОД оборудован автоматической системой газового пожаротушения, пожарной и охранной сигнализацией, источниками бесперебойного питания и прецизионными кондиционерами, системой мониторинга температуры и влажности.

Дополнительную информацию см.

<http://www2.sccc.ru/Information/Infrastr/2012/Infrastr-2012.htm>

Общая мощность двух источников бесперебойного электропитания составляет 240 кВт, общая мощность прецизионных кондиционеров по холоду составляет 276 кВт. Общее потребление ЦКП ССКЦ составило: 2012 г. – 1250,248 тыс. кВтч., 2013 г. – 1253,346 тыс. кВтч., 2014 г. – 1010,395 тыс. кВтч., 2015 год – 1148,548 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

Введён в эксплуатацию в апреле 2009 года, модернизировался в 2010 и 2011 годах. Гибридное расширение на GPU NVIDIA Tesla M2090 введено в эксплуатацию в феврале 2012 года. Пиковая производительность 115 Тфлопс, в том числе 79 Тфлопс на GPU NVIDIA Tesla M2090.

ТОП-50 СНГ: 32-место для расширения кластера на GPU (архитектура **GPGPU**) в 23-й редакции рейтинга от 28.09. 2015; базовый кластер на процессорах Intel Xeon (архитектура **MPP**) не вошел в рейтинг.

Коммуникационная сеть – QDR Infiniband. Транспортная и сервисная сети – Gigabit Ethernet

Кластерная файловая система Ibrix, 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, использующаяся для обработки данных физических экспериментов в физике высоких энергий, осуществляемых в ИЯФ СО РАН. Обмен данными между ИЯФ СО РАН и ССКЦ осуществляется через суперкомпьютерную сеть ННЦ (10 Гбит/с).

3. Сервер с общей памятью HP ProLiant DL980 G7 (архитектура **SMP**). После расширения в сентябре 2013 года 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. Сервер включён в кластер НКС-30Т как нестандартный вычислительный узел.

4. Закупленный в 2014 году сервер **hp ProLiant DL580 G8** используется для работы с NVIDIA Kepler K40.

5. В 2014 году были установлены три дисковые полки **HP D2700** с дисками HP 1.2 TB 6G 10K SAS, более быстрыми и надежным. Одна полка **HP D2700** подключена к серверу **HP DL980**, а две к **IBRIX (BIOIFS)**. Версия **IBRIX 5.6** обновлена до **6.1**.

На основе работ, проведённых в 2014 г., а также закупке (ИЦиГ СО РАН) и установке в 2015 году ещё двух дисковых полок **HP D2700** с дисками

HP 1.2 TB 6G 10K., удалось отказаться от работы от неподдерживаемых гарантийным обслуживанием дисков SATA. При этом объём внешней памяти теперь составляет 2 x 47 Тбайт, размер сегментов IBRIX на новых дисках – 5,9 Тбайт.

Программное обеспечение/инструментальные средства разработки

1. В 2013 году закуплены лицензии на 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++ и Intel Fortran из состава Composer XE 2013 SP1, включающие библиотеки Intel MKL, Intel IPP и Intel TBB. Коммерческая поддержка программного обеспечения Intel заканчивается в сентябре 2016 года.

2. На кластере также установлены параллельные версии Gromacs, Quantum Espresso и Bioscope. Установленный в октябре 2013 года Gromacs 4.6.3 поддерживает параллельную работу как на ядрах CPU, так и на GPU NVIDIA M2090.

3. Установлен и эксплуатируется ANSYS CFD версии 14.5.7. с лицензиями НРС, обеспечивающими параллельное выполнение программ Fluent.

В 2014 году закуплена академическая лицензия на ANSYS CFD (без лицензий НРС); коммерческая поддержка по этой лицензии заканчивается 14.12.2015.

4. В январе 2014 года установлен коммерческий пакет Gaussian g09 Rev D.01 w/LINDA.

5. Для программирования на GPU Nvidia установлен CUDA Toolkit 6.5 и PGI Accelerator версии 14.9.

6. Поскольку сервер с общей памятью HP ProLiant DL980 G7 включён в НКС-30Т, то на нём доступно программное обеспечение кластера.

Использование процессорного времени – 2015 г. (дни)

Месяц Институты	ИТОГО	ИТОГО %
ИК СО РАН	129366,14	20,32
ИВМиМГ СО РАН	66088,51	10,38
ИЯФ СО РАН	65839,79	10,34
ИХКГ СО РАН	53592,78	8,42
ИТПМ СО РАН	44511,53	6,99
ИТ СО РАН	39707,85	6,24
ИЦиГ СО РАН	35026,66	5,50
ИХТТМ СО РАН	33488,69	5,26
ИЛФ СО РАН	26779,43	4,21
ВГУ (г. Воронеж)	26210,12	4,12
ИХБФМ СО РАН	24401,95	3,83
ИНГГ СО РАН	22618,39	3,55
ИХХТ СО РАН (г. Красноярск)	22144,19	3,48
СФУ (г. Красноярск)	14690,94	2,31
ИНХ СО РАН	12044,82	1,89
НГУ	7428,71	1,17
ИГД СО РАН	3499,24	0,55
ИКЗ СО РАН (г. Тюмень)	3368,97	0,53
ИОГен (г. Москва)	2497,48	0,39
ИВТ СО РАН	1979,80	0,31
НИОХ СО РАН	514,27	0,08
Система	288,74	0,05
НГТУ	224,81	0,04
ИВЭП СО РАН (г. Барнаул)	200,48	0,03
ИГ СО РАН	186,21	0,03
КОТЕС	52,89	0,01
Другие	17,48	0,00
ИТОГО:	636770,87	100,00

Ниже приведена статистика по годам:

Статистика по кластерам НКС-30Т + НКС-160	2009	2010	2011	2012	2013	2014	2015
∑ производительность (тфлопс)	7,1	17,5	31	116	115	115	115
∑ CPU (дни)	80179,52	121201,46	209997,57	533324,55	713960,42	529708,63	636770,87
∑ количество заданий	38914	39750	35952	83797	103840	89059	142989
TOP50 (места)	26	34	32	16,0	21,36	28,45	32

Использование услуг ССКЦ в 2015 г.

По статистике	По отчётам пользователей	
<p>Всего пользователей – 167 Всего организаций – 28</p> <p>Академических организаций – 22 Университетов – 4 (НГУ, НГТУ, СФУ (Красноярск), ВГУ (Воронеж)) Другие организации – 2 (СибНИГМИ, Компания Котэс)</p>	<p>Всего грантов, программ, проектов, тем — 173</p> <p>Из них Российских — 168 Международных — 5</p> <p>Программ РАН – 12 Грантов РФФИ – 72 Грантов РНФ – 16 Проектов СО РАН – 35 Программ Минобрнауки – 23 Другие – 15</p>	<p>Всего публикаций – 181</p> <p>Российских – 89 Зарубежных – 92</p> <p>Доктор. диссерт. – 0, Кандидат. диссерт. – 6, Дипломы – 3, Патенты – 5.</p>

Направления решаемых задач - 2015 г.
(по отчётам пользователей)

**ПРИОРИТЕТНЫЕ НАПРАВЛЕНИЯ РАЗВИТИЯ
НАУКИ, ТЕХНОЛОГИЙ И ТЕХНИКИ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ**

Индустрия наносистем – ИВМиМГ СО РАН, ИК СО РАН, ИНХ СО РАН, ИТПМ СО РАН, ИФП СО РАН, ИХБФМ СО РАН, ИЦиГ СО РАН, ИЯФ СО РАН, НИОХ СО РАН, СФУ (г. Красноярск), ВГУ (г. Воронеж)

Информационно-телекоммуникационные системы - ИВМиМГ СО РАН, ИВТ СО РАН, ИК СО РАН, НГУ, ИВЭП СО РАН (г. Барнаул)

Энергоэффективность, энергосбережение, ядерная энергетика – ИВМиМГ СО РАН, ИК СО РАН, ИВТ СО РАН, ИТ СО РАН, ИТПМ СО РАН, ИХКГ СО РАН, НГУ

Науки о жизни – ИВМиМГ СО РАН, ИК СО РАН, ИНГГ СО РАН, ИХБФМ СО РАН, ИХКГ СО РАН, ИХТТМ СО РАН, ИЦиГ СО РАН, ИЯФ СО РАН, НГУ, ИКЗ СО РАН (г. Тюмень), ИОГен РАН (г. Москва)

Рациональное природопользование – ИВМиМГ СО РАН, ИГД СО РАН, ИНГГ СО РАН, СибНИГМИ, ИХХТ СО РАН (г. Красноярск), ИВЭП СО РАН (г. Барнаул), ИКЗ СО РАН (г. Тюмень), ИОА СО РАН (г. Томск)

Транспортные и космические системы – ИВМиМГ СО РАН, ИЛФ СО РАН, ИТПМ СО РАН

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 на Gaussian 09 курса «Введение в современные методы квантово-химических вычислений молекул и кристаллов», проводимого приглашённым профессором Энрико Бенасси из университета Пизы (Италия).

<http://www.htt.nsu.ru/?p=1469>

<http://www.nsu.ru/8f7a4f74a00ee8cd0a9dcd708389042f>

Как результат – рост числа пользователей, в том числе и новых, желающих работать на 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 семинаров размещаются на страничке <http://www2.sccc.ru/Seminars/NEW/Seminars.htm>

4. В ИВМиМГ СО РАН проведены Зимняя (2-6 февраля 2015 г.) и международная XXV Летняя (29 июня – 10 июля 2015 г.) школы по параллельному программированию совместно с Новосибирским государственным университетом и Новосибирским государственным техническим университетом. В работе летней школы участвовали студенты НГУ, НГТУ, Казахского национального университета им. Аль-Фараби, г. Алма-Ата, лицея Lycée Saint Joseph - La Salle de Lorient, г. Lorient (Лорьян), Франция.

5. ИВМиМГ СО РАН совместно с НГУ, НГТУ, Институтом прикладных математических исследований Карельского научного центра РАН и Петрозаводским государственным университетом провели международную научную конференцию 13th International conference on Parallel Computing Technologies, 31 августа — 4 сентября 2015 г., и молодежную научную школу-конференцию «Перспективные технологии и модели вычислений», 29 августа – 1 сентября 2015 г., в г. Петрозаводске. Труды конференции изданы в серии Lecture Notes in Computer Science издательства Springer:

Parallel Computing Technologies. 13th International Conference, PaCT 2015, Petrozavodsk, Russia, August 31-September 4, 2015, Proceedings. LNCS Vol. 9251, Springer, 2015.

Основные итоги 2015 года

1. Подключение двух дисковых полок HP D2700 Disk Enclosure For IBRIX, 50 дисков, 47 Тбайт емкости. Три года гарантийной поддержки. На эти диски перенесены/скопированы без переустановки:

- Intel(R) Composer XE 2013 SP1 Update 4 for Linux*
- Intel(R) MPI Library, Development Kit 4.1 Update 3 (049) for Linux*
- PGI Accelerator 14.9

- ANSYS 14.5 с параллельными лицензиями HPC
 - Свободно распространяемое программное обеспечение, установленное в директорию /ifs/apps: напр. библиотека КРЫЛОВ и т.д.

Замена двумя дисковыми полками HP D2700 2 дисковых полок HP MSA 2312sa DC с 2 дисковыми полками расширения HP MSA 2000 DC, гарантийная поддержка которых закончилась.

2. Поддержка практических занятий на Gaussian 09 курса «Введение в современные методы квантово-химических вычислений молекул и кристаллов», проводимого приглашённым профессором Энрико Бенасси из университета Пизы (Италия).

<http://www.htt.nsu.ru/?p=1469>

<http://www.nsu.ru/8f7a4f74a00ee8cd0a9dcd708389042f>

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

3. Подбор для пользователей ИНГГ СО РАН конфигурации из разнородных серверов под задачу: сервер с большой оперативной памятью (1 Тбайт) HP DL980 G7 и до 30 серверов SL390s G7 с 96 Гбайт памяти на каждом.

4. Проведение международной научной конференции 13th International conference on Parallel Computing Technologies, 31 августа – 4 сентября 2015 г. в г. Петрозаводске. Труды: Parallel Computing Technologies. 13th International Conference, PaCT 2015, Petrozavodsk, Russia, August 31-September 4, 2015, Proceedings. LNCS Vol. 9251, Springer, 2015.

Планы на 2016 год

1. Оказание вычислительных и консалтинговых услуг пользователям ЦКП ССКЦ СО РАН.

2. Продление лицензий на ANSYS CFD (включая закупку HPC лицензий) и очередное продление коммерческой поддержки PGI Accelerator.

3. Эксплуатация НКС-30Т; поскольку сроки гарантийного обслуживания закончились, то ремонты и закупки запасных частей и комплектующих будут за счёт финансирования ССКЦ ИВМиМГ СО РАН.

4. Окончательный выбор конфигурации технических и программных средств нового высокопроизводительного кластера, включая параллельную файловую систему. Кластер должен включать вычислительные модули

общего назначения, вычислительные модули с сопроцессорами Intel Xeon Phi и графическими ускорителями NVIDIA Kepler K40, а также один или несколько серверов с большой оперативной памятью (более 2 Тбайт) и локальными дисковыми массивами ёмкостью не менее 10 Тбайт для работы с Big Data (прежде всего задач биоинформатики, например, сборки генома). В качестве параллельной файловой системы (объём 50 –100 Тбайт) предварительно ориентируемся на решения Panasas.

Окончательное решение зависит от дополнительного финансирования как на закупку вычислительной техники и программного обеспечения, так и на развитие инфраструктуры, прежде всего по энергопотреблению и охлаждению.

Основные проблемы

1. Моральное устаревание кластера, выход из строя вычислительных узлов. Самые новые вычислительные модули введены в эксплуатацию в феврале 2012 года.

2. Устаревание программного обеспечения. Red Hat 5.4 (2010 г.) не поддерживает установку Intel MPI 5.0 и новее.

3. Решение с одним управляющим модулем подходит для относительно небольшого вычислительного кластера. При увеличении числа вычислительных модулей, нужно функции управляющего модуля разнести на несколько модулей: на одном (Head node) - управляющее ПО – очередь заданий, СМУ сервера лицензий. Другой или другие (Login node) будут служить для захода пользователей на кластер, компиляции программ, постановки их в очередь на выполнение, обмена данными.

4. Из-за выхода кондиционера *DeLonghi ACCURATE AL 60* из строя в жаркие дни приходится переходить на ручное управление кластером и уменьшать его загрузку, чтобы избежать перегрева вычислительных узлов.

ИРКУТСКИЙ СУПЕРКОМПЬЮТЕРНЫЙ ЦЕНТР (ИСКЦ) НА БАЗЕ ИДСТУ СО РАН

<http://hpc.icc.ru>

Основной вычислительный ресурс коллективного пользования

Вычислительный кластер «Академик В.М. Матросов» (2012 г.)

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 регистровой памяти DDR3-1600 на каждое ядро процессора; общий объем памяти в узле – 64 ГБ.

4. Узел с графическими процессорами NVidia C2070 Fermi с увеличенным объемом памяти (256 ГБ).
5. Коммуникационная сеть - QDR Infiniband.
6. Транспортная и сервисная сети – Gigabit Ethernet.
7. Система хранения данных Panasas ActiveStor 12 40 TB 1,5 GB/s.
8. Системное программное обеспечение и средства разработки: CentOS Linux, PBS/Torque, Intel Cluster Toolkit, NVidia CUDA Toolkit, GNU C++, Fortran, GDB, Perl, Python и др.
9. Суммарная пиковая производительность кластера – 33,7 TFlops.
10. Максимальная достигнутая производительность на тестах HPL (x86) – 25,12 TFlops.
11. Наивысшее место в TOP-50 России и СНГ – 26 (в 16-й редакции рейтинга от 27.03.2012).

Мероприятия, проведенные в 2015 году

- Подготовка документов по запросам ФАНО России, касающихся оценки состояния, поддержки и развития ЦКП ИСКЦ, включая разработку планов модернизации оборудования ИСКЦ на период 2016-2018 гг.
- Регистрация ЦКП ИСКЦ на портале ckp-rf.ru.
- Организация сервисного обслуживания и ремонта вычислительной и инженерной инфраструктуры ИСКЦ.
- Обновление системного программного обеспечения вычислительных систем коллективного пользования ИСКЦ (ядер операционных систем, системных утилит, средств разработки и т.д.).
- 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.
- Обновление содержания сайта ИСКЦ <http://hpc.icc.ru>.
- Разработка технического задания для государственных торгов на закупку комплектующих и расходных материалов для ИСКЦ.
- Подготовка заявок на конкурс Приборной комиссии СО РАН на закупку комплекта оборудования для дооснащения инженерной инфраструктуры вычислительного кластера «Академик В.М. Матросов».
- Проведение экскурсий по ИСКЦ.
- Научно-популярные доклады о деятельности ИСКЦ для школьников и студентов, приуроченные ко Дню российской науки.
- Цикл семинаров для молодых ученых «Введение в технологии параллельного программирования».

Использование вычислительных ресурсов ИСКЦ в 2015 году

В настоящее время в ИСКЦ зарегистрировано более 150 пользователей из 12 учреждений, в том числе иногородних: Институт ядерной физики им. Г.И. Будкера СО РАН (г. Новосибирск), ИАПУ ДВО РАН (г. Владивосток), Кемеровский филиал ИВТ СО РАН.

В 2015 году вычислительные ресурсы ИСКЦ использовались для решения задач, относящихся к следующим научным областям: фундаментальные основы химии, биоинформатика, филогенетика, микробиология, геномика, компьютерное моделирование наноматериалов, криптография, математическая оптимизация и исследования операций, энергетическая безопасность, экология и рациональное природопользование, ядерная энергетика и др.

Распределение машинного времени по учреждениям пользователей ИСКЦ:

1. ИрИХ СО РАН ~30%
2. ЛИН СО РАН ~25%
3. ИДСТУ СО РАН ~15%
4. ИГХ СО РАН ~10%
5. ИСЗФ СО РАН ~5%
6. остальные ~15%.

Перечень задач (выборочно):

1. Исследование фотоэлектронных спектров фтор- и этоксисилатрана. Исследование структуры анион-радикалов силатранов (на примере фенилсилатрана и *пара*-, *мета*- и *орто*-изомеров нитрофеноксисилатрана). Е.Ф. Белоголова и др. (ИрИХ СО РАН)

2. Анализ гиперчувствительности химического сдвига ЯМР ^{29}Si соединений пентакоординированного атома кремния к влиянию температуры. Е.П. Доронина и др. (ИрИХ СО РАН)

3. Разработка оригинального программного обеспечения для моделирования формирования кремнистых створок диатомовых водорослей с учётом современных гипотез на основе молекулярно-динамического подхода и метода Монте-Карло. В.В. Анненков и др. (ЛИН СО РАН).

4. Исследование микробных сообществ эндемичных губок озера Байкал с целью изучения причин экологической катастрофы, связанной с массовой гибелью губок в период 2014-2015 гг. О.И. Белых и др. (ЛИН СО РАН).

5. Анализ данных последовательностей ДНК планктонных динофлагеллят озера Байкал. Н.В. Анненкова (ЛИН СО РАН).

6. Разработка параллельных алгоритмов поиска решений в задаче о медиане большой размерности и ее одном нелинейном обобщении. А.В. Ушаков и др. (ИДСТУ СО РАН).

7. Исследование вклада сильных взаимодействий в аномальный магнитный момент мюона. А.Е. Раджабов и др. (ИДСТУ СО РАН).

8. Анализ последовательностей полных митохондриальных геномов эндемичных байкальских амфипод. Е.В. Романова и др. (ЛИН СО РАН).

9. Аннотация ядерного генома диатомовой водоросли *Synedra acus*. Ю.П. Галачьянц и др. (ЛИН СО РАН).

10. Разработка методов автоматизированного определения ионной и электронной температур ионосферной плазмы по данным Иркутского радара некогерентного рассеяния. В.П. Ташлыков (ИСЗФ СО РАН).

11. Исследование режимов пучково-плазменного взаимодействия с повышенной эмиссией электромагнитных волн. И.В. Тимофеев и др. (ИЯФ СО РАН).

12. Исследование электронной структуры дефектов в щелочноземельных фторидных кристаллах. Н.В. Попов (ИРНИТУ), А.С. Мысовский и др. (ИГХ СО РАН).

13. Расчеты оптических переходов РС и РС+ центров в кристалле $\text{CaF}_2:\text{Lu}^{3+}$. А.С. Мясникова и др. (ИГХ СО РАН)

14. Моделирование гетероструктуры Si/нанокристаллиты_b-FeSi2/Si. С.А. Балаган (ИАПУ ДВО РАН).

15. Анализ крупномасштабных сетей с использованием высокопроизводительных вычислений на примере сети ВКонтакте. Н.А. Кинаш (ИРНИТУ).

План модернизации оборудования ИСКЦ на 2016 г.

На 2016 год была запланирована модернизация инженерной инфраструктуры вычислительного кластера «Академик В.М. Матросов», включая:

– Масштабирование системы бесперебойного питания на базе ИБП APC Symmetra PX (приобретение и установка дополнительных силовых модулей и батарей).

– Масштабирование климатической системы (приобретение и установка дополнительных кондиционеров APC InRow).

Однако в связи с тем, что соответствующие заявки ИДСТУ СО РАН не получили необходимой поддержки на конкурсе Приборной комиссии СО РАН, реализация плана модернизации откладывается.

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

Состав технических средств

В связи с отсутствием целевого финансирования в 2015 году остались прежние основные технические средства.

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

2. Сервер 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 (2200MHz, LGA2011, L3 20480Kb, 8 core), 2 сопроцессора Intel Xeon Phi 5110P (8GB, 1.053 GHz, 60 core), оперативная память –128 ГБ, HDD: 2000 TB). Пиковая производительность сервера составляет около 2.3 Тфлопс. В отличие от специализированных программ для GPU на нем возможно выполнение x86 совместимых программ.

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.

В 2015 году введено в эксплуатацию сетевое хранилище данных Synology RackStation RS3412RPxs объемом 30 TB, 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.

Программное обеспечение

Все вычислительные ресурсы центра работают под управлением 64-битных версий свободно распространяемой операционной системы Linux. Прикладное ПО составляют:

1. компиляторы GNU C/C++ и GNU Fortran,
2. компиляторы Intel C/C++ и Intel Fortran,
3. коммуникационные среды – реализации MPI (MPICH1, MPICH2, LAM),

4. система параллельного программирования DVM,
5. специализированные пользовательские вычислительные пакеты.

В 2015 г. производилось текущее обновление компиляторов и системного ПО.

На сервере Flagman с GPU установлено специализированное программное обеспечение MathWorks: MATLAB, Simulink и Parallel Computing Toolbox с поддержкой графических вычислений. Производилось обновление CUDA до актуальной версии.

На вычислительном сервере для многоядерной архитектуры Intel Xeon Phi установлен и настроен 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, 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 Мбит/с.

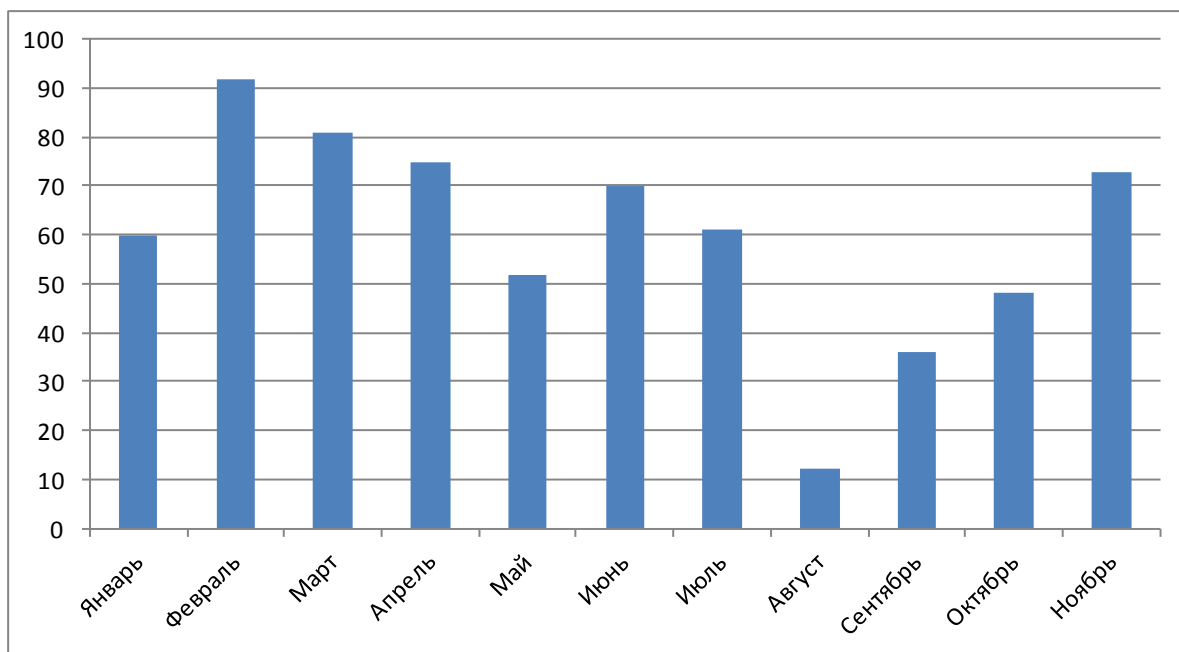


Рис.1. Загрузка MVS-1000/ИВМ по месяцам

Средняя загрузка кластеров по данным собираемой статистики составляет 60% (от 15% до 90% в разные периоды). Из общего объема около 62% загрузки дают задачи пользователей Института физики СО РАН, 35% – Институт химии и химической технологии СО РАН, 3% – Институт вычислительного моделирования СО РАН.

Загрузка кластера (рис. 1) в отдельные месяцы достигает 92% и сохраняется примерно на уровне 2014 года. Часть пользователей ИВМ СО РАН используют 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

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

Табл. 1

Направление исследований	Количество запусков задач	Организация	Вклад в загрузку (%)
Молекулярная динамика	682	ИФ СО РАН	62
Квантовая химия	995	ИХХТ СО РАН	35
Газовая динамика	387	ИВМ СО РАН	2
Прочее	30	ИВМ СО РАН, СибГТУ и др.	1
ВСЕГО			100

Общее количество запусков задач осталось на уровне 2014 года (около 2100), большинство запусков являются 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.

Публикации

A.E. Ershov, A.P. Gavrilyuk, S.V. Karpov. Plasmonic Nanoparticle Aggregates in High-Intensity Laser Fields: Effect of Pulse Duration. Plasmonics. DOI: 10.1007/s11468-015-0054-8

А.Е. Ершов. Оптодинамические эффекты в системах связанных плазмонных наночастиц и их проявление в спектрах плазмонного поглощения // Молодой учёный. 2015. Т. 11. С. 39–45.

Подготовка кадров и повышение квалификации

На базовой кафедре вычислительных и информационных технологий Института математики и фундаментальной информатики СФУ (заведующий кафедрой член-корр. РАН В.В. Шайдуров) 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. Всего: 35 бакалавров и 29 магистров.

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

Сотрудники ИВМ СО РАН принимали участия в тематических конференциях по высокопроизводительным вычислениям:

- VIII Сибирская конференция по параллельным и высокопроизводительным вычислениям,
- Мастер-класс от Intel «Техники векторизации реальных приложений»,
- Международная конференция «Актуальные проблемы вычислительной и прикладной математики 2015».

В 2015 г. велись текущие работы по консультированию пользователей вычислительных ресурсов по возникающим проблемам.

Планы на 2016 год

В 2016 году планируются работы по поддержке и развитию имеющихся вычислительных систем, в том числе гибридных систем на основе вычислительных сопроцессоров и графических ускорителей; приобретение и установка специализированного программного обеспечения в рамках выделяемого на центр финансирования.

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:

- параллельные среды openmpi, mpich;

- компиляторы GNU, используются языки программирования C/C++/Fortran;

- менеджер ресурсов Torque;

- система мониторинга Ganglia.

Удаленный доступ к вычислительной системе осуществляется посредством безопасного протокола SSH2 (Secure Shell). Передача файлов между пользователями и вычислительной системой происходит по протоколам SCP (Secure Copy Protocol) и SFTP (SSH File Transfer Protocol).

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.

Вычислитель – Nvidia Tesla C1060 представляет собой вычислительную систему на основе графического процессора (GPU) с поддержкой

архитектуры CUDA. По своим возможностям сопоставим по скорости с небольшим вычислительным кластером, содержит 240 вычислительных ядер. Пиковая производительность C1060 составляет примерно 1 TFLOPS на операциях с плавающей запятой с одинарной точностью.

Архитектура Nvidia Fermi оптимизирована для выполнения научных приложений благодаря ключевым возможностям, включающим аппаратную поддержку вычислений с плавающей запятой с двойной точностью производительностью более 500 GFLOPS, L1 и L2 КЭШ (первого и второго уровня), защиту памяти ECC, управляемый пользователем локальный дата-КЭШ в виде разделяемой памяти на GPU, совместный доступ к памяти и др.

В 2013-2014 годах развернуты четыре узла Intel Xeon E5 2GHz 64 Gb ОЗУ с сопроцессорами Intel Xeon Phi 7120. Семейство сопроцессоров Intel® Xeon Phi 7120 имеет наибольшее количество функциональных возможностей, самую высокую производительность и максимальный объем памяти среди семейства продукции Intel Xeon Phi. Использование высокопроизводительных ресурсов на базе данных сопроцессоров и большой оперативной памятью позволит значительно ускорить разработку программ математического моделирования.

Новые вычислительные узлы гибридного кластера собраны с использованием аппаратного обеспечения:

1. 2 процессоров Intel Xeon E5-2650 8-core, с тактовой частотой 2.0 GHz, 2+50Mb встроенного кэша на сокетe 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:

	Серверная платформа INTEL P4308IP4LHKC 1600W	шт.	1
1.	Процессор CPU Intel Xeon E5-2680 V2 2.8 GHz / 10core / 2.5+25Mb / 115W / 8 GT / s LGA2011	шт.	2
2.	Модуль памяти Kingston ValueRAM < KVR18R13D4 / 16 > DDR-III DIMM 16Gb < PC3-15000 > ECC Registered with Parity CL13	шт.	16
3.	Жесткий диск Toshiba SAS 2Tb MG03SCA200 (7200rpm) 64Mb 3.5" TOSHIBA MG03SCA200	шт.	2
4.	Ключ RKSAS8R5	шт.	1

Доступ к высокопроизводительному вычислительному кластеру ТГУ

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

Закуплены и установлен на высокопроизводительный компьютер ряд расширений MathWorks.

Для работы гибридной системы используется программное обеспечение – набор средств разработки Cuda Toolkit версии 4.0, CUDA SDK. Тип доступа и способ авторизации пользователей ssh2.

В 2015 году дополнительно для узлов с Intel® Xeon Phi архитектурой закуплено ПО Intel Parallel Studio XE Cluster Edition for Linux - Floating Academic (ESD).

Так как вычислительная система оснащена современными процессорами, помимо графических процессоров, существует возможность также проводить вычисления с использованием стандартов программирования MPI (Message Passing Interface), подразумевающего работу с распределенной памятью и OpenMP – работу с общей памятью. Есть возможность комбинировать модели программирования (гибридная модель, MPI+OpenMP).

Сервер управления используется для предоставления удаленного доступа к высокопроизводительным ресурсам, мониторинга различных параметров состояния вычислительной системы (загрузки CPU, температуры, занятости дисковых ресурсов, количества свободной оперативной памяти и т.д.), постановки вычислительных задач в очередь. Работа сервера осуществляется на платформе CentOS GNU/Linux 6.0.

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.

Решаемые задачи

В 2015 году 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 гидродинамической модели весеннего речного термобара в глубоком озере, позволяющей провести сравнение некоторых параметризации тепловых потоков, задаваемых на поверхности озера в комплексной негидростатической 2.5D модели, разрабатываемой в рамках проекта, и анализ их влияния на характер развития термобара в озерах Байкал и Камлупс (Канада).

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

1. СуперЭВМ МВС-1000/128.

2. Кластер Tesla на базе вычислителей NVIDIA Tesla. Характеристики вычислителей, установленных на узлах кластера:

4* Tesla K20 (2496 CUDA cores, 5GB GDDR3 RAM, 1170 Gflops double precision FP performance).

2* Tesla C2075 (448 CUDA cores, 6GB GDDR5 RAM, 515 Gflops double precision FP performance).

2* Tesla C2050 (448 CUDA cores, 3GB GDDR5 RAM, 515 Gflops double precision FP performance).

Текущая конфигурация кластера:

общее число узлов – 4,

общее число вычислителей – 8,

общий объём ОЗУ – 48ГБ,

общий объём ОЗУ на вычислителях – 38ГБ.

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

3. Система мониторинга серверной комнаты с SMS информированием об аварийных ситуациях.

Программное обеспечение

В рамках работы по модернизации вычислительного кластера МВС 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;

Программные средства вычислительного кластера Tesla:

- операционная система CentOS Linux 5.4;
- набор клиент-серверных утилит для защищенного соединения с удаленным компьютером openssh;

- свободный компилятор языков C\C++ GNU gcc;

- средство поддержки параллельных программ OpenMPI;

- средство поддержки многопоточности OpenMP;

- инструментарий nVidia CUDA;

- менеджер очередей Torque;

- алгебраический пакет CULAtools.

На всех вычислительных узлах гибридного кластера производились профилактические работы, в плановом порядке обновлялось системное ПО.

Пользователи, загрузка кластеров, инфраструктура

Средняя загрузка кластеров составляет около 70%. При этом, основную загрузку дают задачи пользователей ОФ ИМ а также ОмГУ (в основном, только МВС-1000/128), 10% – Президиум ОНЦ. Относительно небольшая загрузка вычислительных мощностей объясняется слабым ростом числа адаптированных под гибридные вычисления программ.

Решаемые задачи

Научные исследования в 2015 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 параллельного поиска путей на графах с ограниченными степенями связности вершин.

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 находится на факультете компьютерных наук ОмГУ для обеспечения учебного процесса и освоения студентами технологий параллельных вычислений. В 2015 году ОмГУ проводились работы по технической поддержке и обеспечению доступа пользователей к вычислительным ресурсам МВС-1000/128. Кроме того, силами сотрудников и студентов ОмГУ была проведена полная проверка всех узлов кластера, выявлены проблемные блоки.

На территории ОмГУ проводились экскурсии для учащихся г. Омска в ходе которых кластер МВС 1000/128 использовался для демонстрации параллельных вычислений.

В течение всего 2015 года в ОФ ИМ СО РАН в рабочем порядке проводились консультации существующих и новых пользователей кластера Tesla, как по вопросам его системной архитектуры, так и по приемам и методам создания прикладных программ.

Планы на 2016 год

В 2016 году планируются дальнейшие работы по поддержке и развитию имеющихся вычислительных систем на основе специализированных вычислителей Tesla. Планируется модернизация кластера Tesla за счет приобретения адаптеров InfiniBand и включения в работу имеющегося коммутатора InfiniBand. Это позволит радикально ускорить межузловые коммуникации, а также на порядок уменьшит латентность.

На данном этапе предполагается приобрести комплект адаптеров для установки на имеющиеся узлы кластера. Осуществление этих планов, однако, находится под вопросом в связи с отсутствием финансирования деятельности центра.

План научных работ на 2015 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 изучения динамики биологических и социальных сообществ.
- Решение оптимизационных задач на графах (преимущественно задач параллельного поиска путей).