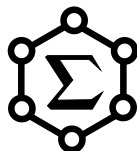


4. ДЕЯТЕЛЬНОСТЬ НАУЧНЫХ СОВЕТОВ

Научный совет СО РАН по супервычислениям



Научный совет 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.

В 2020 г. члены Совета принимали активное участие в формировании проекта создания Суперкомпьютерного центра «Лаврентьев» с Центром компетенции по высокопроизводительным вычислениям и искусственному интеллекту. Проект реализуется консорциумом НГУ и институтов СО РАН.

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, РСК, Россия, 91,24 Тфлопс (пиковая), место 50 в TOP50 СНГ (09.2020). Сети: OMNI-Path 100 Gb/s, GbE. ФС Lustre 150 ТБ.
- 2) Кластер НКС-30Т, НР, США. 115 Тфлопс (на 2012 г., 79 Тфлопс – Nvidia Tesla M2090). Сети: QDR Infiniband, GbE. ФС Ibrix 81 ТБ.

К декабрю 2020 года пиковая производительность НКС-30Т снизилась до 51,6 Тфлопс, ФС Ibrix 41 ТБ. См. <http://www.sccc.icmmg.nsc.ru/news.html>

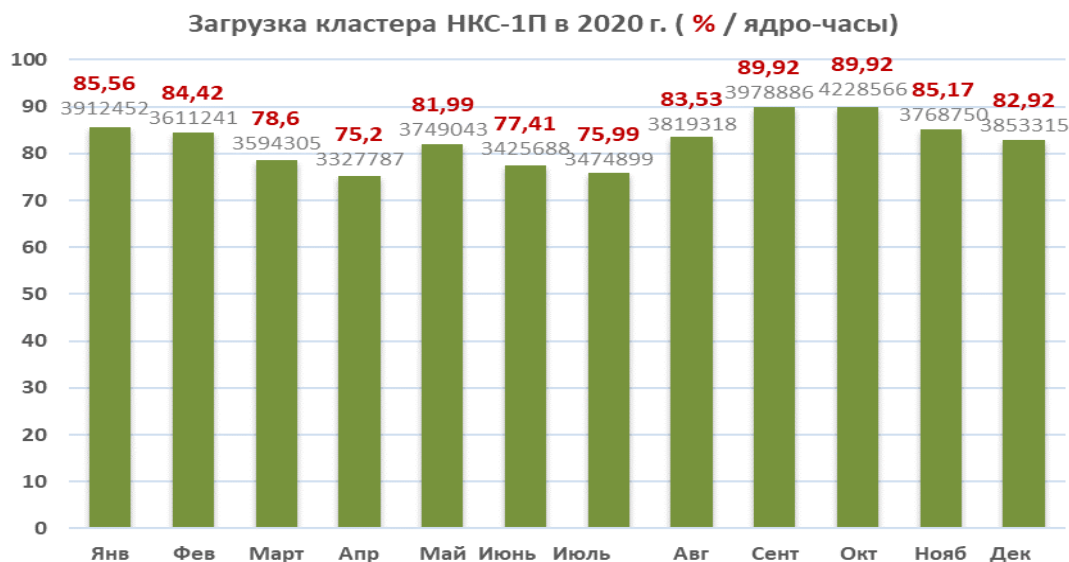
Гарантийная поддержка НКС-30Т давно закончилась.

- 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.

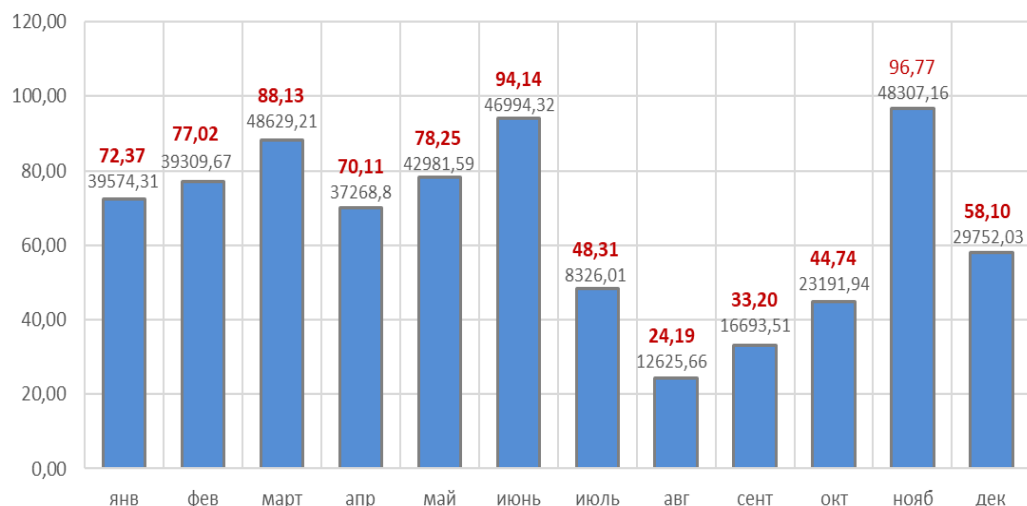
Программное обеспечение/инструментальные средства разработки

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

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.



Загрузка кластера НКС-30Т в 2020 г. (% / CPU-дни)



В июле - августе 2020 г., чтобы избежать перегрева кластера НКС-30Т в связи с аварийной ситуацией на кондиционере, нагрузка на кластере была снижена.

Работоспособность аварийного кондиционера восстановлена в конце августа заменой компрессора (примерно 270 тыс. руб).

Распределение использования процессорного времени по организациям

Организация	2017 %	2018 %	2019 %	2020 %	Организация	2017 %	2018 %	2019 %	2020 %
АГТУ (Барнаул)	1	<1			ИСЭМ (Иркутск)				<1
ВГУ (Воронеж)			<1	<1	ИГ	12	4		<1
ЗИН (С-Питерб.)			<1	<1	ИТПМ	4	1	<1	<1
ИАиЭ				<1	ИФП		1	3	1
ИАТЭ (Обнинск)		<1			ИХБФМ	1	<1	<1	<1
ИБРАЭ (Москва)	<1				ИХКГ	9	1	4	2
ИВМиМГ	14	16	18	13	ИХТТМ	7	3	4	5
ИВЭП (Барнаул)	<1				ИХХТ (Красн.)	4	7	10	7
ИГД	1	<1			ИЦиГ	1	<1	<1	1
ИГиЛ	<1	1	5	4	ИЯФ	3	1	<1	<1
ИГМ		<1	<1		МГУ (Москва)		1	<1	<1
ИК	15	46	25	30	МТЦ			<1	<1
ИКЗ (Тюмень)	<1	<1	<1	<1	НГТУ			<1	<1
ИЛФ	1	1	<1	<1	НГУ	2	<1	7	13
ИМ			<1	<1	НИОХ	3	1	1	<1
ИНГТ	13	1	9	8	ОИВТ (Москва)			<1	<1
ИНХ	8	1	6	7	СибНИГМИ			<1	
ИНЭОС (Москва)	<1	7	3	5	СФУ (Красн.)		<1		
ИОА (Томск)	1	<1	<1	<1	ЮУрГУ (Челяб.)		<1	<1	
ИОГен (Москва)		<1							

Статистика по отчётам пользователей ЦКП ССКЦ в 2020 г.

Количество организаций – 29, количество пользователей – 122, НИР – 119, публикаций – 148 (науч. статей – 131, тезисов – 15, монографий -1, другое - 1) Диссертаций - 5 (д.н. – 1, магистр. – 1, спец. – 1, бакалавр – 2), РИД - 2

Направления решаемых задач по отчётам пользователей

ПРИОРИТЕТНЫЕ НАПРАВЛЕНИЯ РАЗВИТИЯ НАУКИ, ТЕХНОЛОГИЙ И ТЕХНИКИ РФ
Индустрия наносистем – ВГУ (Воронеж), ИВМиМГ, ИК, ИНХ, ИНЭОС (Москва), ИТПМ, ИФП, ИХКГ, ИХТТМ, ИХХТ (Красноярск), ИЯФ, МГУ, НГУ, НИОХ.
Информационно-телекоммуникационные системы - ИВМиМГ, ИКЗ (Тюмень), ИМ, МГУ, НГУ.
Науки о жизни – ИВМиМГ, ИКЗ (Тюмень), ИМ, ИНХ, ИОА (Томск), ИХБФМ, ИХТТМ, ИЦиГ, НГУ, НИОХ.
Рациональное природопользование – ИВМиМГ, ИГиЛ, ИКЗ (Тюмень), ИНГГ, ИОА (Томск), НГТУ.
Транспортные и космические системы – ИКЗ (Тюмень), ИЛФ, ИТПМ, .
Энергоэффективность, энергосбережение, ядерная энергетика – ИВМиМГ, ИК, ИНХ, ИСЭМ (Иркутск), ИТ, ИХКГ, ИХТТМ.
Другие направления: Вычислительная математика, Математическое моделирование, Суперкомпьютерное моделирование, Параллельные высокопроизводительные вычисления, Вычислительный катализ, Науки о Земле, Сейсмические волновые поля, Долгопериодические изменения климата, Физика плазмы, Астрофизика, Молекулярная биология, Физико-химическая биология, Геофизика, Кристаллохимия, Компьютерное моделирование наноматериалов, наноустройств и нанотехнологий, Химия, Неорганическая химия, Химия твердого тела, Механохимия, Квантовая химия, Моделирование атомной и электронной структуры диэлектриков, Генетика, Геномика, Эволюционная биоинформатика и др.

Объём финансирования

Собственные средства: 4,8 млн. руб.

Общее потребление электроэнергии ЦКП ССКЦ за год: 960 тыс. кВт·ч.

Подготовка кадров, образовательные и научные мероприятия

- 1) Подготовка специалистов на кафедрах НГУ: Математических методов геофизики (зав. каф. чл.-корр. 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.
- 3) Летняя международная XXXV молодежная Школа-конференция по параллельному программированию, 6-17.07.2020 г., Новосибирск,

<http://ssd.sccc.ru/ru/school/2020s>; Зимняя XXXIV школа по параллельному программированию 27-31.01.2020, г. Новосибирск, <http://ssd.sccc.ru/ru/school/2020>. Ресурсы ССКЦ используются в рамках учебных курсов НГУ, НГТУ.

Основные итоги 2020 года

- 1) Закупка и ввод вычислительного узла TDN511 в состав НКС-1П.
- 2) Оказание вычислительных услуг пользователям для выполнения работ по гос. заданиям, грантам, программам, проектам.
- 3) Использование связи НКС-30Т + НКС-1П по сети 10 Гбит/с, что позволило использовать НКС-1П для восстановления директорий ФС Ibrix .
- 4) Часть узлов НКС-30Т выделена под обработку данных физических экспериментов в физике высоких энергий, проводимых в ИЯФ СО РАН.

Планы на 2021 год

- 1) Поддержка пользователей ЦКП;
- 2) Сопровождение программного обеспечения НКС-30Т + НКС-1П;
- 3) Наращивание вычислительных ресурсов НКС-1П (при наличии финансирования);
- 4) Выявление сбойных вычислительных узлов НКС-30Т и вывод из работы;
- 5) На НКС-30Т поддержка виртуализованной вычислительной среды для обработки данных физических экспериментов в физике высоких энергий, проводимых в ИЯФ СО РАН.

**ЦЕНТР КОЛЛЕКТИВНОГО ПОЛЬЗОВАНИЯ
«ИРКУТСКИЙ СУПЕРКОМПЬЮТЕРНЫЙ ЦЕНТР СО РАН»
(ЦКП ИСКЦ)
<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: **39-е** в 33-й редакции рейтинга от 21.09.2020 г.

Конфигурация кластера (не изменилась): <http://hpc.icc.ru/hardware/>

Программное обеспечение: средства разработки (Intel Cluster Studio и др.), пакеты прикладных программ различного назначения <http://hpc.icc.ru/software/packages.php>.

Деятельность ЦКП ИСКЦ в 2020 году

- Обеспечение непрерывного функционирования оборудования ЦКП ИСКЦ: организация и проведение сервисного (технического) обслуживания и текущего ремонта оборудования вычислительной и инженерной инфраструктуры ЦКП ИСКЦ.

- Сопровождение встроенного и системного программного обеспечения.

- Работа с пользователями ЦКП ИСКЦ: регистрация и инструктаж новых пользователей, информационно-методическая и техническая поддержка, установка и настройка пользовательского программного обеспечения, предоставление машинного времени.

- Разработка планов и проектов модернизации оборудования ЦКП ИСКЦ.

- Подготовка отчетов по запросам СО РАН и Минобрнауки России.

Использование вычислительных ресурсов ЦКП ИСКЦ

В 2020 году ресурсами ЦКП ИСКЦ воспользовались более 80 пользователей из 17 научных и образовательных учреждений Сибири и Дальнего Востока. С применением вычислительного кластера ЦКП ИСКЦ проведены научные исследования по 27-и государственным заданиям, а также грантам РФФИ/РНФ. В 2020 году пользователями ЦКП ИСКЦ опубликовано более 60 научных работ со ссылками на ЦКП ИСКЦ, из них – более 30 в журналах, входящих в квартили Q1-Q2 Web of Science, в т.ч.:

1. Sidorkin V.F., et al. “Outlaw” Dipole-Bound Anions of Intra-Molecular Complexes // Journal of the American Chemical Society, 2020. Vol. 142, № 4. Pp. 2001-2011. <https://doi.org/10.1021/jacs.9b11694> (WoS Q1, IF 14.612).
2. Tretyakov E.V., et al. Ferromagnetically Coupled S=1 Chains in Crystals of Verdazyl Nitronyl Nitroxide Diradicals // Angewandte Chemie International Edition, 2020. Vol. 59, № 46. Pp. 20704-20710. <https://doi.org/10.1002/anie.202010041> (WoS Q1, IF 12.959).
3. Begunovich L.V., et al. Triple VTe₂/graphene/VTe₂ heterostructures as perspective magnetic tunnel junctions // Applied Surface Science, 2020. Vol. 510. 145315. <https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2020.145315> (WoS Q1, IF 6.182).
4. Puskarevsky N.A., et al. Bis(2,1,3-benzotelluradiazolidyl)2,1,3-benzotelluradiazole: a pair of radical anions coupled by Te...N chalcogen bonding // Chemical Communications, 2020. Vol. 56, № 7. Pp. 1113-1116 <https://doi.org/10.1039/C9CC08110K> (WoS Q1, IF 5.996).
5. Kaneva E., Bogdanov A., Shendrik R. Structural and vibrational properties of agrellite // Scientific Reports, 2020. Vol. 10. 15569. <https://doi.org/10.1038/s41598-020-72631-1> (WoS Q1, IF 3.998).
6. Kuklin A.V., et al. CrI₃ magnetic nanotubes: A comparative DFT and DFT+U study, and strain effect // Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures, 2020. Vol. 123. 114205. <https://doi.org/10.1016/j.physe.2020.114205> (WoS Q2, IF 3.57).
7. Romanova E.V., et al. Hidden cases of tRNA gene duplication and remolding in mitochondrial genomes of amphipods // Molecular Phylogenetics and Evolution, 2020. Vol. 144. 106710. <https://doi.org/10.1016/j.ympev.2019.106710> (WoS, Q2, IF 3.496)
8. Kuklin A.V., Agren H., Avramov P.V. Structural stability of single-layer PdSe₂ with pentagonal puckered morphology and its nanotubes // Physical Chemistry Chemical Physics, 2020. Vol. 22, № 16. Pp. 8289–8295. <https://doi.org/10.1039/D0CP00979B> (WoS Q1, IF 3.43).
9. Myasnikova A., Shendrik R., Bogdanov A. Optical properties of SrF₂ and SrF₂: Ce³⁺ crystals codoped with In³⁺ // RSC Advances, 2020. Vol. 10, № 24. Pp. 13992-13997. <https://doi.org/10.1039/D0RA00865F> (WoS Q2, IF 3.119)
10. Lotov K.V., Minakov V.A. Proton beam self-modulation seeded by electron bunch in plasma with density ramp // Plasma Physics and Controlled Fusion, 2020. Vol. 62, №11. 115025. <https://doi.org/10.1088/1361-6587/abba42> (WoS Q2, IF 2.829).

Вычислительные ресурсы ЦКП ИСКЦ использовались для решения задач, относящихся преимущественно к следующим научным областям: органическая и элементоорганическая химия, химия комплексных соединений, квантовая химия твердого тела, криптоанализ, геномика, транскриптомика, эволюционная генетика, экология биосистем, микробиология, гамма-астрономия, математическая геофизика, солнечная физика, физика плазмы, энергетическая безопасность.

Распределение использования процессорного времени между организациями-пользователями в 2020 г.:

Организации	%
ИрИХ СО РАН	32
ИДСТУ СО РАН	21
ИЯФ СО РАН	11
ИАПУ ДВО РАН	7
ИМ ХНЦ ДВО РАН	5
ИГХ СО РАН	5
ЛИН СО РАН	5
ИХКГ СО РАН	5
СФУ	3
остальные (<3%)	6

Финансирование и планы развития

Финансовое обеспечение функционирования ЦКП ИСКЦ осуществлялось за счет собственных средств ИДСТУ СО РАН в минимально необходимом объеме. В связи с отсутствием целевого финансирования планы развития материально-технической базы ЦКП ИСКЦ остаются нереализованными.

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

Состав технических средств

В 2020 году модернизация технических средств центра не производилась из-за отсутствия целевого финансирования. На конец года вычислительные средства центра состоят из следующих единиц.

1. Основной универсальный суперкомпьютер – кластер архитектуры x-64 (MBC-1000/ИВМ). Суммарно имеется 400 вычислительных ядер и 2560 ГБ оперативной памяти, что обеспечивает пиковую производительность 14 Тфлопс вычислений с двойной точностью. Используется система хранения емкостью 64 ТБ.

2. Вычислительный комплекс 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 cores), оперативная память –128 ГБ, HDD – 2000 ТБ. Пиковая производительность 2.3 Тфлопс.

4. Сетевое хранилище данных объемом 30 ТБ, используемое для резервного копирования систем и пользовательских данных.

Программное обеспечение

Все вычислительные ресурсы центра работают под управлением ОС Linux. Прикладное программное обеспечение составляют: компиляторы GNU C/C++ и GNU Fortran, а также Intel C/C++ и Intel Fortran; коммуникационные среды – реализации MPI; специализированные пользовательские вычислительные пакеты; коммерческие продукты MathWorks (MATLAB, Simulink и Parallel Computing Toolbox). В 2020 году за счет средств Красноярского математического центра, финансируемого Минобрнауки России в рамках мероприятий по созданию и развитию региональных НОМЦ (Соглашение № 075-02-2020-1631), приобретено обновление программного пакета Intel Cluster Studio XE.

Пользователи, загрузка кластеров, инфраструктура

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

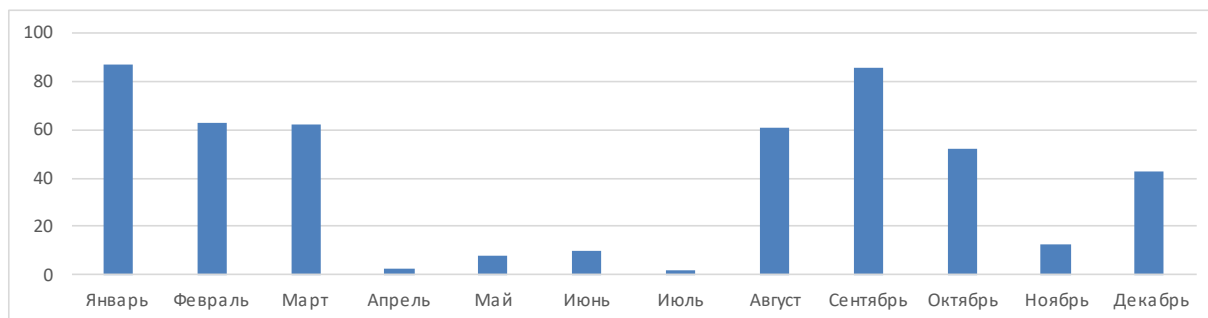


Рис. 1. Загрузка МВС-1000/ИВМ в 2020 году по месяцам

Средняя загрузка основного кластера (рис. 1) по данным собираемой статистики составляет 40%, что на 17% меньше, чем в 2019 году. Из общего объема загрузки около 48% составляют задачи пользователей Института химии и химической технологии СО РАН, 47% – Красноярского филиала Института теплофизики СО РАН, 5% – Института вычислительного моделирования СО РАН. 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. Lutoshkin A., Malyar Yu. Determination of Acid-Base and Complexing Parameters of Chlorine-Substituted Trifluorobenzoylacetone in Water Medium // Journal of Chemical and Engineering Data (2020), 65(7), pp.3696-3705. (WoS, Q3)
2. Sadovskii V.M., Guzev M.A., Sadovskaya O.V., Qi Ch. Modeling of Plastic Deformation Based on the Theory of an Orthotropic Cosserat Continuum // Physical Mesomechanics (2020), 23 (3), pp. 223-230. (WoS, Q3)

3. Ershov A.E., Gerasimov V.S., Bikbaev R.G., Polyutov S.P., Karpov S.V. Mode coupling in arrays of Al nanoparticles // Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer, 2020, V.248, art. no. 245411. (WoS, Q1)
4. Utyushev A.D., Isaev I.L., Gerasimov V.S., Ershov A.E., Zakomirnyi V.I., Rasskazov I.L., Polyutov S.P., Hans Ågren, Karpov S.V. Engineering novel tunable optical high-Q nanoparticle array filters for a wide range of wavelengths // Optics Express (2020), 28(2), pp. 1426-1438. (WoS, Q1)
5. Laletina S.S. et al. Spectroscopic Characteristics of the Methanol Decomposition Intermediates on a Platinum Nanocluster // Journal of Siberian Federal University. Chemistry (2020), 13(2), pp. 273-282. (WoS)
6. A. Gavrilov, Y. Ignatenko, O. Bocharov, R. Aragall, Turbulent Flow Simulation of Power-Law Fluid in Annular Channel // Proceedings of the International Conference on Offshore Mechanics and Arctic Engineering - OMAE, ASME 2020 , V.11, art. no. V011T11A074. (Scopus)

Объем финансирования в 2020 году

В 2020 году Институт вычислительного моделирования СО РАН потратил на поддержку и развитие высокопроизводительных вычислений около 765 тыс. руб. собственных средств (оплата труда – 400 тыс. руб., оплата электроэнергии – 250 тыс. руб., приобретение ПО – 115 тыс. руб.).

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 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.

Основные публикации

1. Churuksaeva V., Starchenko A. Numerical modelling of pollution transport in Tom River //Вестн. Том. гос. ун-та. Математика и механика. 2020. № 64. P. 48-62. (Скопус, Q3)
2. Churuksaeva V., Starchenko A. Numerical Modeling of the Two-Phase Flow of Water with Ice in the Tom River. In: Krzhizhanovskaya V. et al. (eds) Computational Science – ICCS 2020. ICCS 2020. Lecture Notes in Computer Science, vol 12138. P.212-224. Springer, Cham. https://doi.org/10.1007/978-3-030-50417-5_16 (Скопус)
3. Starchenko A., Bart A., Kizhner L., Odintsov S., Semyonov E. Numerical Simulation of Local Atmospheric Processes above a City //Proceedings of SPIE - The International Society for Optical Engineering. 2019. Vol. 11208. P. 1-9. (Скопус, вышла в 2020 году)
4. Korostelev S.Yu., Slyadnikov E.E., Turchanovsky I.Yu. Simulation of a Nonequilibrium Melting Process of Copper Nanoparticles Using a Molecular Dynamics Method // AIP Conference Proceedings (2020) (Web of science)
5. Коростелев С.Ю., Слядников Е.Е., Турчановский И.Ю. Моделирование неравновесного процесса плавления наночастиц меди методом молекулярной динамики // Международная конференция "Физическая мезомеханика. Материалы с многоуровневой иерархически организованной структурой и интеллектуальные производственные технологии", посвященная 90-летию со дня рождения основателя и первого директора ИФПМ СО РАН академика Виктора Евгеньевича Панина в рамках Международного междисциплинарного симпозиума "Иерархические материалы:

разработка и приложения для новых технологий и надежных конструкций", 5-9 октября 2020 года, Томск, Россия: тезисы докладов. Томск, 2020. С. 173-174

Подготовка кадров и повышение квалификации

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

ОМСКИЙ СУПЕРКОМПЬЮТЕРНЫЙ ЦЕНТР (ОСКЦ) НА БАЗЕ ОМСКОГО ФИЛИАЛА ИНСТИТУТА МАТЕМАТИКИ СО РАН

Состав технических средств

1. СуперЭВМ EPYC: 2 ЦП AMD EPYC 7502 (суммарно 64 ядра), объем основного ОЗУ – 512 ГБ.
2. Гибридный кластер Tesla: управляющий узел + два вычислительных узла. Вычислительная производительность 65 Tflops в вычислениях с двойной точностью. Общий объем основного ОЗУ – 769 ГБ. Суммарно 8 вычислителей Tesla V100 (5,120 CUDA cores, 32GB HBM2 RAM, 8.2 Tflops double). Дисковый массив AXUS YOTTA 12HDD 3.5". Коммутационные сети Gigabit Ethernet и InfiniBand 65Гб/с. Система оперативного мониторинга с оповещением по SMS.

Программное обеспечение

1. операционная система Ubuntu Linux версий 18.04 и 20.04;
2. набор клиент-серверных утилит для защищенного соединения с удаленным компьютером openssh;
3. свободный компилятор языков C/C++ GNU;
4. средство поддержки параллельных программ OpenMPI;
5. система управления заданиями OpenPBS.

В связи с отсутствием средств коммерческое ПО не используется.

Основные направления исследований

Многопроцессорная ЭВМ AMD EPYC использовалась для вычислительных экспериментов с эволюционными алгоритмами на задачах псевдодобулевой оптимизации и для решения задач оптимизации с

использованием методов частично целочисленного линейного программирования.

Вычисления на NVIDIA Tesla использовались в экспериментах с эволюционными алгоритмами решения задач теории расписаний.

Публикации по результатам исследований

1. Borisovsky P. A., Kovalenko Yu. V. A Memetic Algorithm with Parallel Local Search for Flowshop Scheduling Problems. Bioinspired Optimization Methods and Their Applications (BIOMA 2020). International conference, November 19-20, 2020/ Edited by Filipic B., Minisci E., Vasile M. Lecture Notes in Computer Science, Springer, vol. 12438, p. 201-213. DOI: 10.1007/978-3-030-63710-1_16
2. D.-C. Dang, A. Eremeev, P. K. Lehre Escaping Local Optima with Non-Elitist Evolutionary Algorithms. To appear in Proceedings of AAAI Conference on Artificial Intelligence (AAAI-2021).

Финансирование

Финансовое обеспечение деятельности ОСКЦ в 2020 году осуществлялось за счет собственных средств ОФ ИМ СО РАН в минимально необходимом объеме.

Планы на 2021 год

Наращивание вычислительных ресурсов суперкомпьютера Tesla (при наличии финансирования)