

## ЗАДАЧИ И ФУНКЦИИ СИБИРСКОГО СУПЕРКОМПЬЮТЕРНОГО ЦЕНТРА КОЛЛЕКТИВНОГО ПОЛЬЗОВАНИЯ СО РАН

Б.М. Глинский, С.П. Котелевский, Н.В. Кучин

Сибирский Суперкомпьютерный Центр коллективного пользования (ССКЦ КП) создан на базе ИВМиМГ СО РАН. Работа ССКЦ и других суперкомпьютерных центров СО РАН (Томск, Красноярск, Иркутск) курируется Советом по Супервычислениям при Президиуме СО РАН. Одной из задач Центра является внедрение высокопроизводительных вычислений в науку, промышленность и образование. Вычислительные ресурсы ССКЦ используют сотрудники 22 институтов СО РАН, 3-х университетов, а также ФГУН ГНЦ ВБ "Вектор", СибНИА им. Чаплыгина, Новосибирского отделения фирмы Шлюмберже, фирма УниПро. По отчетам 2009 года вычислительные мощности ССКЦ использовались для работы по 75 грантам, программам и проектам.

Основными задачами ССКЦ являются:

1. Обеспечение работ институтов СО РАН и университетов Сибири по математическому моделированию в фундаментальных и прикладных исследованиях;
2. Координация работ по развитию суперкомпьютерных центров Сибири, осуществляемая Советом по супервычислениям при Президиуме СО РАН;
3. Организация обучения специалистов СО РАН и студентов университетов (ММФ и ФИТ НГУ, НГТУ) методам параллельных вычислений на суперкомпьютерах (поддержка ежегодных зимних и летних школ по параллельному программированию для студентов);
4. Сотрудничество с INTEL, HP и промышленными организациями, тестирование новых процессоров;
5. Сетевое взаимодействие с другими Суперкомпьютерными центрами СО РАН, Москвы и других городов России, а также зарубежных стран, совместная разработка технологий распределенных вычислений.

### **Технические средства и программное обеспечение**

1. Кластерный суперкомпьютер НКС-30Т в составе 25 серверов сверхплотной упаковки (двойные «лезвия») hp ProLiant BL2x220c G5 (64 вычислительных модулей по два 4-х ядерных процессора Intel Quad-Core Xeon E5450 и 16 Гбайт оперативной памяти). Пиковая производительность НКС-30Т составляет 6.1 ТФлопс, производительность на тесте HPL (A Portable Implementation of the High-Performance Linpack Benchmark for Distributed-Memory Computers) – 4.419 TFlops. Параллельная файловая система Lustre в составе двух серверов hp DL380G5 и двух дисковых массивов hp Storaegeworks SFS20 имеет объём 6 Тбайт “сырой” дисковой памяти. НКС-30Т занимает 32 место в 12 списке Top 50 в редакции от 30.03.2010 по СНГ.
2. Сервер с общей памятью hp ProLiant DL580 G5 в составе 4-х процессоров Intel Quad-Core Xeon X7350 (4 ядра) и 256 Гбайт оперативной памяти с дисковым массивом HP Storaegeworks SFS20, имеющим 9 Тбайт “сырой” дисковой памяти.
3. Кластерный суперкомпьютер НКС-160 в составе 84 вычислительных модуля hp Integrity rx1620 (два процессора Intel Itanium2, 4 Гбайт оперативной памяти). Пиковая производительность НКС-160 составляет 1075 ГФлопс, производительность на тесте HPL (A Portable Implementation of the High-Performance Linpack Benchmark for Distributed-Memory Computers) – 828.7 GFlops.
4. Сервер с общей памятью hp Integrity rx4640-8 в составе 4-х процессоров Intel Itanium2 и 64 Гбайт оперативной памяти.

### **Инструментальные средства разработки**

Кластера ориентированы для решения параллельных задач с использованием Message Passing Interface (MPI), а многопроцессорные сервера с общей памятью Symmetric MultiProcessor (SMP) на решение задач, прежде всего 3-D, требующих большой оперативной памяти, а также параллельных задач с использованием OpenMP. При таком подходе поддерживаются две современных парадигмы параллельных вычислений – MPI для систем с распределенной памятью (кластеров) и OpenMP для систем с общей памятью. Гибридная схема предусматривает запуск на каждый вычислительный узел кластера по одному MPI-процессу, который запускает внутри каждого вычислительного модуля несколько потоков с помощью OpenMP.

На кластере НКС-160 установлена версия MPI mvapich 1.2.6, компиляторы Intel C++ и Intel Fortran for Linux версии 10.1 и библиотека Intel MKL 10.0.

На кластере НКС-30Т установлен Intel MPI 4.0 и Intel TraceAnalyzer / Collector, компиляторы Intel C++ и Intel Fortran Professional Edition for Linux версии 11.1, включающие в себя библиотеки Intel MKL, Intel IPP и Intel TBB.

На многопроцессорных серверах с общей памятью также установлены компиляторы Intel C++ и Intel Fortran Professional Edition for Linux версии 11.1, включающие в себя библиотеки Intel MKL, Intel IPP и Intel TBB. Компиляторы Intel поддерживают многопоточность и OpenMP. Одинаковый комплект базового программного обеспечения на кластерах и серверах упрощает работу пользователей. На НКС-160 установлены коммерческие пакеты Fluent 6.3 и Gaussian 03 и свободно распространяемые (с открытым исходным кодом)

LAMMPS Molecular Dynamics Simulator, Gromacs и Quantum Espresso. На НКС-30Т установлены параллельные версии Gromacs и Quantum Espresso. Совместно с УниПро ведутся работы по установке разрабатываемого в УниПро пакета UGENE.

#### **Решение больших задач**

Для развития многих современных технологий очень важным является детальный анализ различных физических процессов, описываемых сложными математическими моделями. Изучение этих процессов невозможно без использования методов численного моделирования. К настоящему времени развитие вычислительной техники позволяет с высокой точностью моделировать сложные трехмерные явления, поэтому разработка параллельных алгоритмов решения больших задач является весьма актуальной. Ниже приведены некоторые задачи, решаемые на вычислительных ресурсах ССКЦ КП СО РАН.

1. Разработка трехмерных моделей, параллельных алгоритмов и программ для исследования динамики самогравитирующего газового облака и пылевого диска (работа ведется совместно с Институтом астрономии РАН, г. Москва).
2. Трехмерное компьютерное моделирование взаимодействия встречных электрон-позитронных пучков. Численная модель создана на основе метода частиц в ячейках (работа ведется совместно с Институтом ядерной физики СО РАН, г. Новосибирск).
3. Разработка трехмерных моделей, параллельных алгоритмов и программ для моделирования развития аномальной теплопроводности при нагреве плазмы электронным пучком в установках УТС (работа ведется совместно с Институтом ядерной физики СО РАН, г. Новосибирск).
4. Математическое моделирование физических основ космического плазменного двигателя (Работа ведется совместно с Институтом ядерной физики СО РАН, г. Новосибирск).
5. Разработка параллельных алгоритмов и программ для моделирования динамики магматического расплава в вулканах с учетом его фазовых превращений (работа ведется совместно с Институтом гидродинамики СО РАН, г. Новосибирск).
6. Разработка параллельных алгоритмов, основанных на различных модификациях метода «крупных частиц» для моделирования геологических течений с сильно изменяющимися реологическими и транспортными свойствами, такими как вязкость, теплопроводность и т.п. (работа ведется совместно с Институтом геологии и минералогии СО РАН, г. Новосибирск).
7. Разработка параллельных алгоритмов и программ для решения задач механики сплошных сред, допускающих получение результатов с гарантированной точностью (работа ведется совместно с Институтом математики СО РАН, г. Новосибирск).

На кластере НКС-30Т проведены крупномасштабные вычислительные эксперименты, в том числе:

1. полномасштабное численное моделирование процесса образования и генерации рассеянных волн на карбонатных коллекторах;
2. моделирование аномальной теплопроводности в высокотемпературной плазме.

Характерной особенностью этих экспериментов является большой объем ввода/вывода. Использование параллельной файловой системы Lustre увеличило скорость работы моделирования аномальной теплопроводности в 2-3 раза, а моделирования процесса образования и генерации рассеянных волн в десятки раз. Последний факт объясняется тем, что в программном комплексе для ускорения работы с большими файлами, которые не помещаются в оперативную память вычислительных узлов, использовались функции параллельного ввода/вывода стандарта MPI-2. Скорость их работы резко падает при использовании на вычислительных узлах протокола NFS.

Среди активных пользователей ССКЦ КП институты СО РАН:

1. 1) Институт Вычислительных Технологий «Построение параллельных вычислительных алгоритмов для автоматического проектирования форм аэрогидродинамических установок».
2. 2) Институт Теоретической и Прикладной Механики «Аэротермодинамика гиперзвукового полета перспективных летательных аппаратов».
3. 3) Институт Катализа «Теоретическое исследование формирования структуры, спектральных проявлений и каталитической активности окисленных и частично-восстановленных наночастиц металлов в высококремнистых цеолитах», «Происхождение и эволюция биосферы».
4. 4) Институт теплофизики. «Вихри, организованные структуры и турбулентность в одно- и многофазных потоках».
5. 5) Институт нефтегазовой геологии и геофизики. «Геодинамические модели взаимодействия литосферы и мантии Центральной Азии и их геолого-геофизическое тестирование», «Трехмерное моделирование конвективных процессов в мантии Земли».
6. 6) Институт Вычислительной Математики и Математической Геофизики. «Численное моделирование сейсмических волновых полей в неоднородных разномасштабных средах».
7. 7) Институт Цитологии и Генетики «Теоретическое исследование особенностей эволюции белков, обусловленных координированными заменами аминокислотных остатков».
8. 8) Институт Ядерной Физики «Суперкомпьютерное моделирование эффектов встречи ультрарелятивистских пучков заряженных частиц в суперколлайдерах».

### Центр компетенции СО РАН – Intel

В июне 2008 года на базе ССКЦ официально открыт Центр компетенции (ЦК) по высокопроизводительным вычислениям. В его задачи входит:

1. Обучение современным НРС на базе разработок фирмы Intel организаций науки, добывающих отраслей, промышленности и ВУЗов;
2. Оказание консультаций по НРС и вычислительных услуг на базе кластеров, имеющихся в ССКЦ (платформы Intel Itanium2, Quad-Core Intel® Xeon® E5450 в перспективе Nehalem / Westmere / Sandy Bridge);
3. Проведение сравнительной оценки производительности новых разработок фирмы Intel в области технических и программных средств на реальных прикладных задачах, решаемых в ССКЦ.
4. За время работы ЦК:
5. Проведена серия совместных семинаров ССКЦ, Novo Intel, НГУ для пользователей ССКЦ, студентов, аспирантов (19 семинаров, 610+ участников);
6. Поддержаны четыре студенческие летние школы 2007 & 2008 гг. и четыре зимние школы 2008 & 2009 гг. Прошли обучение более 150 студентов;
7. Специалисты ССКЦ и ВНТК «ПАРАЛЛЕЛЬ» оказали более 110 консультаций пользователям ССКЦ;
8. Проведены два выездных семинара / воркшопа «Высокопроизводительные вычисления для решения задач нефтегазовой геологии и геофизики» в ИНГГиГ СО РАН и «Высокопроизводительные вычисления для решения задач биоинформатики» в ИЦИГ СО РАН.

Пользователи и их задачи это главное в работе ССКЦ КП СО РАН. Практика показывает, что наращивание вычислительных мощностей влечет за собой появление новых пользователей и новых задач. В стратегию развития мы закладываем в 2010 году объединение основных вычислительных ресурсов ССКЦ и Центра «Биоинформационных технологий», формируемого на базе ИЦИГ СО РАН, в этом варианте пиковая производительность расширенного кластера НКС-30Т составит **16 ТФлоп/с**.

Следующий шаг это создание на базе ССКЦ СО РАН регионального Суперкомпьютерного Центра.

### ЛИТЕРАТУРА:

1. А.С. Алексеев, Б.М. Глинский, С.П. Котелевский, Н.В. Кучин, В.Э. Малышкин, А.В. Селихов. История развития Сибирского Суперкомпьютерного Центра, его текущее состояние и перспективы развития //Сиб. Журн. Вычисл. Математики РАН. Сиб. Отделение – Новосибирск, 2005г., Т. 8, № 3, с.179-187
2. А.С. Алексеев, Б.М. Глинский Сибирский Суперкомпьютерный Центр в проблемах науки, образования и информационно-вычислительной поддержки наукоемкой промышленности. // Вестник СибГУТИ №1, изд. «ВЕДИ», Новосибирск, 2007г., с.12-17
3. Б. М. Глинский, Н. В. Кучин, Ю. Г. Медведев, С. П. Котелевский Сибирский суперкомпьютерный центр СО РАН: опыт проектирования, построения и сопровождения программно-аппаратной среды. // Труды конференции «Научный сервис в сети Интернет», Многоядерный компьютерный мир, Новороссийск, 24-29 сентября 2007г., М.: Изд-во МГУ, с.12-19
4. Б.М. Глинский, Н.В. Кучин, (ССКЦ, Новосибирск), А.В. Авдеев, В.В. Самофалов (Интел, Москва). Совместный Центр Компетенции СО РАН – Intel по высокопроизводительным вычислениям. // Тезисы докладов Международной конференции, посвященной 100-летию со дня рождения С.Л. Соболева, Новосибирск, 5-12 октября 2008г., С.469
5. Б.М.Глинский, Н.В. Кучин, Д.А. Афонников, А.Ю. Бакулина, В.В. Самофалов, В.А. Чеверда Центр компетенции СО РАН-INTEL: цели, задачи и некоторые результаты //Тр. Между. конференции «Параллельные вычислительные технологии 2008», г Санкт-Петербург, 28 января-1 февраля 2008, с. 80-90