**Отчёт – 2012**

**Программа Президиума РАН № 14.** «Проблемы создания информационно-вычислительной среды на основе GRID-технологий, облачных вычислений и современных телекоммуникационных систем»

**Проект № 4.9.2.** Развитие интегрированной вычислительной среды (GRID сегмента) на базе вычислительных ресурсов ССКЦ
Руководитель - д.т.н. Глинский Б.М.

1. Наращивание вычислительных ресурсов

В ЦКП ССКЦ установлен и введён в эксплуатацию гибридный кластер с графическими акселераторами: 40 серверов HP SL390s G7 с тремя GPU Nvidia M2090 на каждом. Он занимает 16 место в 17 редакции списка Top 50 от 22.09.2012 г. Установлен и введён в эксплуатацию сервер с большой оперативной памятью HP DL980 G7. Гибридный кластер и сервер DL980 G7 включены в состав кластера НКС-30Т как его гетерогенное расширение. Их вычислительные ресурсы управляются единым менеджером заданий PBS Pro. Совместно с ИВТ СО РАН ведутся работы по использованию данного гетерогенного кластера в рамках создания GRID-сегмента ННЦ. Для доступа к суперкомпьютерной сети ННЦ установлен выделенный сервер – ГРИД-Шлюз.

2. Программное обеспечение

Куплен и установлен коммерческий пакет ANSYS CFD.

Для работы с GPU установлен пакет NVIDIA CUDA ToolKit. Кроме того, закуплен и установлен Portland Group PGI Accelerator, наряду с C++ поддерживающий CUDA Fortran и директивы OpenACC. PGI Accelerator упрощает пользователям ССКЦ использование мощных вычислительных ресурсов гибридного расширения кластера. Это особенно важно для пользователей, работающих на Fortran.

При возникновении необходимости, по требованию пользователей, для работы с GPU на кластере могут быть установлены дополнительные библиотеки и программы, в том числе с открытым исходным кодом (Open Source), такие как, MINT, MAGNA, AMBER, Gromacs, Quantum Espresso, OpenFoam.

При поддержке специалистов NVIDIA на вычислительных ресурсах ССКЦ в апреле 2012 года была организована трёхдневная школа по технологии NVIDIA CUDA, в которой прошли обучение 118 слушателей из институтов СО РАН, ВУЗов и фирм. Программа и учебные материалы школы размещены на странице http://www2.sscc.ru/Seminars/Nvidia%20Cuda-1.htm.

3. Отработка технологии использования суперкомпьютерной сети ННЦ СО РАН в интересах ЦКП «БИОИНФОРМАТИКА» и для обработки данных физических экспериментов, осуществляемых в ИЯФ СО РАН

Вычислительные ресурсы ССКЦ включены в ГРИД-сеть ННЦ СО РАН. Для этого установлен и настроен выделенный сервер – ГРИД-шлюз. Часть вычислительных узлов кластера НКС-30Т без графических ускорителей выделены для использования в виртуализованной суперкомпьютерной инфраструктуре ННЦ для обработки данных экспериментов по физике высоких энергий (ФВЭ), проводимых в ИЯФ СО РАН. В частности, экспериментов КЕДР и КМД-3. На них дополнительно установлено программное обеспечение для виртуализации. Начаты работы по моделированию и обработке данных экспериментов со Сферическим нейтральным детектором (СНД) на коллайдере ВЭПП-2000.

Таким образом, виртуализованная вычислительная ГРИД-среда, основанная на суперкомпьютерной сети ННЦ, включает вычислительные ресурсы ССКЦ, ИЯФ и НГУ. Имеется возможность запуска распределённых заданий на всей виртуализованной инфраструктуре через единую очередь заданий на метауровне.

Основные участники ЦКП «Биоинформатика» – институты ИЦиГ СО РАН, ИХБиФМ СО РАН и Томографический Центр подключены к суперкомпьютерной сети ННЦ СО РАН. В настоящее время идёт наращивание/модернизация внутренних локальных сетей этих институтов для обеспечения полноценного доступа к сети 10 Гбит/с. А также, отрабатываются варианты передачи больших объёмов (более 100 ГБ) для последующей обработки на кластерах ССКЦ и НГУ.

4. Отработка технологий высокопроизводительных параллельных вычислений на серверах SL390s G7 с тремя GPU M2090 на каждом.

Проведены ресурсоёмкие вычислительные эксперименты на серверах SL390s G7 с GPU, входящих в состав кластера НКС-30Т. В частности, они использовались для выполнения работ по контракту № 2011-1.4-514-026-006 «Исследования и разработка методов имитационного моделирования функционирования гибридных экзафлопсных вычислительных систем». А также, для решения задачи механики сплошной среды для газовой динамики в модели трёхмерной акустики.