### Отчет по этапам работ, завершенным в 2015 г.

### в соответствии с планом НИР института

**Проект НИР I.4.1.3. «Развитие суперкомпьютерных технологий и методов моделирования архитектур и алгоритмов для пета- и эксафлопсных супер-ЭВМ»**.

Номер государственной регистрации НИР 01201370232.

Руководители: д.т.н. Б.М. Глинский, д.т.н. А.С. Родионов

В рамках данного проекта в лаборатории продолжалась работа по использованию суперкомпьютерных технологий ЦКП ССКЦ для решения широкого круга фундаментальных задач институтами Сибирского отделения в различных направлениях: астрофизика, аэротермодинамика, биоинформатика, биология, вычислительная математика, вычислительная гидродинамика, вычислительная техника, геология, геофизика, глобальные климатические изменения, квантовая химия, комплексное освоение и сохранение недр Земли, математика, параллельные вычислительные технологии, системы виртуальной реальности, структура и свойства полимеров, физика, физика высоких энергий (ФВЭ), химия.

Ниже приведена таблица использования услуг ЦКП ССКЦ в 2015 году, составленная по отчетам пользователей и статистике работы центра.

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

В 2015 г. проведено подключение двух дисковых полок HP D2700 Disk Enclosure For IBRIX, 50 дисков, 47 Тбайт емкости. Три года гарантийной поддержки.

Продолжались работы по исследованию имитационной модели системы управления потоком заданий для центров коллективного пользования (ЦКП) на основе мультиагентного подхода. Проведена следующая работа: модификация и оптимизация алгоритмов анализа статистики (экспертные оценки и основанные на знаниях системы); изменение алгоритмов резервирования вычислительных узлов (функционирование системы со структурной избыточностью); внедрение и оптимизация методов аппаратного резервирования узлов (нагруженный «горячий» резерв, облегченный «теплый» резерв, ненагруженый «холодный» резерв); алгоритмы составления расписаний – внедрен учет трендов физических параметров; модификация и отладка алгоритмов работы коммутатора.

Модифицированная система управления была апробирована на статистике работы ССКЦ в 2011-2015 гг.



Как видно из приведенного выше графика, использование обновленных алгоритмов планирования и балансировки нагрузки позволяет уменьшить среднее время ожидания выполнения задания (за месяц) за 2014-2015 гг. до 11%.

Начаты работы по созданию технологии решения прямых задач химической кинетики для численного моделирования космологических задач с применением Intel Xeon Phi.

По мнению многих известных ученых в области суперкомпьютеров экзафлопсный компьютер будет гибридным (Джек Донгарра, Томас Стерлинг). Чрезвычайно интересной с этой точки зрения была апробация технологии решения уравнения Гельмгольца на неоднородной архитектуре кластера НКС-30Т, в состав которого входят однородные вычислительные узлы, образующие МРР – архитектуру и вычислительный узел с SMP – архитектурой. Работа выполнена совместно с сотрудниками ИНГГ СО РАН. Предложен алгоритм решения систем линейных алгебраических уравнений (СЛАУ), основанный на методе исключения Гаусса и предназначенный для решения уравнения Гельмгольца в трехмерных неоднородных средах.

Для решения задачи использовался неоднородный набор узлов кластера НКС-30Т (ЦКП ССКЦ), состоящего из одного узла с SMP – архитектурой (8 десятиядерных процессоров Intel Xeon CPU [E7-4870@2.40GHz](mailto:E7-4870@2.40GHz), 1000GB RAM) и узлы с МРР – архитектурой, состоящие из 4-х узлов (узел включает два 6-ядерныых процессора Intel Xeon CPU [X5675@3.07GHz](mailto:X5675@3.07GHz), 96 GB RAM). Динамический параллелизм алгоритма позволяет эффективно перераспределять имеющиеся ресурсы для самой затратной процедуры факторизации. Данный подход позволил использовать более чем в 3 раз меньше памяти по сравнению с однородной архитектурой и решить СЛАУ с 50 млн. неизвестных.

Начаты работы по созданию технологии решения прямых задач химической кинетики для численного моделирования космологических задач с применением Intel Xeon Phi. Для этих целей создается библиотека вычислительных модулей для численного решения прямых задач химической кинетики, разрабатываемых в рамках концепции со-дизайна. Библиотека будет ориентирована на численное моделирование прямых задач химической кинетики (модификация для космологических задач) с использованием ускорителей вычислений Intel Xeon Phi. На данный момент создан интерфейс взаимодействия с программным пакетом ChemPAK, который позволяет создать численную модель исследуемых химических процессов в рамках космологической задачи. Ведется разработка программных модулей неявных методов решения жестких систем ОДУ, ориентированных на использование ускорителей Intel Xeon Phi. По результатам тестов с использованием разработок других проектов лаборатории, показан рост производительности решателей на 10-12% относительно стандартных библиотек Intel.