**Отчет по этапам НИР, завершенным в 2014 году  
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 суперЭВМ".

Номер государственной регистрации НИР № 01201370232.

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

Продолжалась работа по использованию суперкомпьютерных технологий 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 2014 году, составленная по отчетам пользователей.

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| Всего пользователей – **155**  Всего организаций – **29**  Академических организаций – **24**  Университетов – **3** (СФУ (Красноярск), НГУ, НГТУ)  Другие организации – **2** (СибНИА им. Чаплыгина, СибНИГМИ) | Всего грантов, программ, проектов, тем — **176**  Из них Российских — **171** Международных — **5**  Грантов РФФИ – **67**  Программ РАН – **22**  Проектов СО РАН – **30**  Программ Минобнауки – **18**  Другие – **34** | Всего публикаций – **158**  Российских – **88**  Зарубежных – **70** |
| Доктор. диссерт. – **1**, Кандидат. диссерт. – **5**,  Дипломы – **7**,  Патенты – **2**. |

Продолжалось наращивание технических и программных средств ЦКП:

* Закуплены (ИЦиГ СО РАН) 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).** При этом добавилось около **47** Тбайт внешней памяти, размер сегментов IBRIX на новых дисках составляет 5.9 Тбайт. Локальный дисковый массив на сервере HP DL980 позволяет частично снять нагрузку с файловой системы IBRIX. Эти решения позволили снять остроту проблемы.
* Закуплен сервер **hp ProLiant DL380 G8,** который будет использоваться для работы с NVIDIA Kepler K40.
* В 2014 году закуплена академическая лицензия на ANSYS CFD (без лицензий HPC); коммерческая поддержка по этой лицензии заканчивается 14.12.2015.
* Установлена версия IBRIX **6.1**, была **5.6.**
* В январе 2014 года установлен коммерческий пакет Gaussian g09 Rev D.01 w/LINDA.
* Для программирования на GPU Nvidia установлен CUDA Toolkit 6.5 и PGI Accelerator версии 14.9.

Для выбора пути развития архитектуры суперкомпьютеров ЦКП ССКЦ был использован программный код AstroPhi, разработанный в ИВМиМГ СО РАН. AstroPhi предназначен для численного моделирования астрофизических процессов на гибридных суперЭВМ, оснащенных ускорителями Intel Xeon Phi. Задачи динамики астрофизических объектов являются одними из наиболее требовательными к аппаратным ресурсам и могут быть использованы для тестов с целью определения вектора развития суперкомпьютерной техники на которой будут разрабатываться алгоритмы и программное обеспечение для пета- и эксафлопсных супер-ЭВМ.

Для тестовых запусков были использованы кластеры МСЦ СО РАН и инженерные версии суперкомпьютеров с архитектурой PetaStream ЗАО РСК. В рамках запуска на одном ускорителе вычислений Intel Xeon Phi было получено 27-кратное ускорение в offload режиме и 53-кратное ускорение в native режиме. При тестовых запусках на 32 ускорителях Intel Xeon Phi была получена 94-процентная эффективность масштабирования кода. Благодаря тестам была показана высокая эффективность сверхплотной архитектуры RSC PetaStream, основанной на использовании ускорителей вычислений Intel Xeon Phi для построения сверхмасштабируемых приложений.

По результатам проведенных исследований совместно с ЗАО «Российская суперкомпьютерная компания» разработана первая очередь расширения вычислительных мощностей ССКЦ. Разработаны технические предложения на создание нового кластера на современных компонентах (серверные процессоры Intel Xeon E5v3 (Haswell) и со-процессоры Intel Xeon Phi 7120D, оперативная память – 128 ГБайт DDR4) с водяным охлаждением. Производительность кластера составит 300 Tфлопс.

Разработана и исследуется имитационная модель системы управления потоком заданий для центров коллективного пользования (ЦКП) на основе мультиагентного подхода. Разработанная модель системы управления потоком задач включает в себя программные агенты, реализующие модели: внешних источников задач, распределителей и контроллеров ресурсов, вычислительных систем.

Исследование модели проводятся над реальными данными. Для этого использовались данные ЦКП ССКЦ СО РАН. Была воссоздана коммуникационная среда кластера НКС-30Т+GPU. На вход имитационной модели пускались задания, зарегистрированные системой управления кластера (PBS Pro) за 2011 - 2013 гг.

Для демонстрации работы имитационной модели системы управления потоками заданий и подобранных алгоритмов планирования на основе данных статистики были произведены 3 опыта:

1. моделирование загрузки ЦКП в случае, когда задания в очереди, по желанию пользователей, без использования генетического алгоритма формирования расписаний;
2. те же условия, но в работу включился генетический алгоритм;
3. те же условия, но модель системы самостоятельно распределяло задания по очередям.

Запуски модели с данными параметрами показали, что:

* принимаемые управленческие решения позволяют сократить среднее время ожидания начала выполнения задания на 1-10% (рис ниже).
* задания отправляются на менее загруженный из подходящих кластеров.
* задания располагаются в вычислительной системе более рационально, т.к. при постановке их на выполнение учитывается карта сети связи.



Результаты запуска модели ЦКП - изменение среднего времени ожидания в очереди заданий для различных опытов.

В результате тестирования реализованного на предыдущем этапе работ ФДН-метода была построена имитационная модель решателя. В результате анализа модели и обработки литературных данных принято решение об оптимизации решателя для задач, где жесткая система ОДУ низко связана. Благодаря разреженности матриц многие операции, такие как вычисление правых частиц, матриц Якоби, LU разложение и прямые/обратные подстановки могут быть выполнены параллельно. Также было принято решение развивать параллельно две версии решателям – для GPU и для ускорителей Intel Xeon Phi.

Доработка ФДН-метода с целью оптимизации вычислений на суперЭВМ сверхвысокой производительности касалась переноса кода на Intel Xeon Phi и проведения необходимых тестов с целью отладки решателя и оптимизации скорости работы. В качестве первого этапа был использован offload режим работы ускорителя вычислений Intel Xeon Phi. Показан трехкратный рост производительности на одном Intel Xeon Phi по сравнению с одним ускорителем NVIDIA Tesla 2090M.

Для реализации обратного метода решения кинетических задач была разработана спецификация входных/выходных данных решателей пакета ChemPAK. С учетом спецификации начата разработка метода на основе статьи Ilyin A I, Kabanikhin S I, Nurseitov D B, Nurseitova A T, Asmanova N A, Voronov D A, Bakytov D, Analysis of ill-posedness and numerical methods of solving a nonlinear inverse problem in pharmacokinetics for the two-compartmental model with extravascular drug administration, Journal of Inverse and Ill-Posed Problems, 20 (1): 3964, 2012. Начата работа по изменению интерфейса пакета ChemPAK с целью автоматизации итерационного решения прямых и обратных задач химической кинетики.