**Отчёт - 2012**

**Важнейший результат**

Система мультиагентного моделирования параллельных высокопроизводительных вычислений на суперЭВМ экзафлопсной производительности (совместно с лаб. Моделирования в информационных сетях, и лаб. методов Монте-Карло). Глинский Б.М., д.т.н., Родионов А.С., д.т.н., Марченко М.А., к.ф.-м.н., Подкорытов Д.И., к.т.н.

**Некоторые результаты**

**Имитационное моделирование на основе AGNES**

Разработана система мультиагентного моделирования для оценки поведения алгоритмов при их масштабировании на большое количество ядер [1]. Система имитационного моделирования позволяет выявить узкие места в алгоритмах, понять, как их нужно модифицировать, какие параметры алгоритмов необходимо настраивать при масштабировании. Система базируется на пакете AGNES, разработанном в лаборатории Моделирования в информационных сетях и установленном в ЦКП ССКЦ СО РАН. Исследовано поведение двух типов алгоритмов: распределенного статистического моделирования и численного моделирования 3D сейсмических полей. Для распределенного статистического моделирования исходные данные получены с использованием библиотеки PARMONC (лаборатория метод Монте-Карло), предназначенной для использования на современных суперкомпьютерах тера- и петафлопсного уровня, также установленной в ЦКП ССКЦ СО РАН. Для моделирования и расчетов на начальном участке масштабирования использовался кластер НКС-30+GPU.

Предложена и исследована теоретическая модель системы управления потоком поступающих параллельных заданий и доказана эффективность использования мультиагентного подхода для создания модели исследуемой системы. Для работы программ-агентов предложен набор алгоритмов планирования и сохранения отказоустойчивости. Программы-агенты реализованы в мультиагентной системе AGNES, разработанной в ИВМиМГ СО РАН, а также создана библиотека программных агентов, позволяющая использовать любую конфигурацию агентов и исследовать алгоритмы и методы, для поиска наиболее эффективного сочетания.

В отличие от существующих и разрабатываемых моделей таких систем, в предложенной модели моделируется процесс оперативного принятия решений (управления), что позволяет исследовать и впоследствии создать систему «живо» реагирующую на внешние и внутренние воздействия и способную в процессе эксплуатации обучаться.

Начаты работы по реализации на гибридных супер-ЭВМ алгоритмов решения прямых задач химической кинетики большой размерности.

**Вычислительные ресурсы ССКЦ КП СО РАН**

1). **Кластерный суперкомпьютер НКС-30Т**, изготовитель Hewlett – Packard, США  
Введён в эксплуатацию в апреле 2009 года, модернизировался в 2010 и 2011 годах. Гибридное расширение на GPU NVIDIA Tesla M2090 введено в эксплуатацию в феврале 2012 года. Пиковая производительность 115 ТФлопс, в том числе 79 ТФлопс на GPU NVIDIA Tesla M2090.

ТОП-50 СНГ: 16-место для расширения кластера на GPU (архитектура **GPGPU**) и 30 место для базового кластера на процессорах Intel Xeon (архитектура **МРР**) в 17-й редакции рейтинга от 18.09. 2012.  
Коммуникационная сеть – QDR Infiniband. Транспортная и сервисная сети – Gigabit Ethernet.  
Кластерная файловая система Ibrix, 32 GB полезной ёмкости.  
Полная информация: см. <http://www2.sscc.ru/HKC-30T/HKC-30T.htm>

2). **Сервер с общей памятью HP ProLiant DL980 G7** (архитектура **SMP)** с четырьмя 10-ядерными процессорами Intel Е7-4870 с тактовой частотой 2,4 ГГц, оперативной памятью 512 Гбайт и 8 SAS дисками по 300 Гбайт. Пиковая производительность сервера в текущей конфигурации составляет 384 Гфлопс. В апреле 2012 года сервер включён в кластер НКС-30Т как нестандартный вычислительный узел.

3). **Сервер с общей памятью hp ProLiant DL580 G5** (архитектура **SMP)** в составе четырех процессоров Intel Quad-Core Xeon X7350 (4 ядра) и 256 Гбайт оперативной памяти с дисковым массивом HP Storageworks SFS20, имеющим 9 Тбайт «сырой» дисковой памяти.

4). **Кластерный суперкомпьютер НКС-160** (архитектура **МMP)**, изготовитель Hewlett – Packard, США. Пиковая производительность НКС-160 составляет 1 ТФлопс. Выводится из эксплуатации как морально устаревший.

Ниже приведена таблица роста вычислительных ресурсов ЦКП ССКЦ.

|  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- |
| **Статистика по кластерам   (НКС-30Т + НКС-160)** | **2009** | **2010** | **2011** | **2012** |
| **∑ производительность  (Tфлопс)** | 7,1 | 17,5 | 31,0 | 116 |
| **∑ CPU (час)** | 1 924 308,38 | 2 908 834,93 | 5 021 778,55 | 12 799 789,11 |
| **∑ количество  заданий** | 38 914 | 39 750 | 35 952 | 83 797 |

**Инфраструктура машинного зала ССКЦ**

Центр обработки данных (ЦОД) ССКЦ занимает четыре помещения общей площадью  
205 кв. м: машинный зал 1: площадь 66,7 кв. м; машинный зал 2: площадь 59,9 кв. м; узел электропитания: площадь 58,5 кв. м; помещение гидромодуля, 20 кв.м.

ЦОД оборудован автоматической системой газового пожаротушения, пожарной и охранной сигнализацией, источниками бесперебойного питания и прецизионными кондиционерами, системой мониторинга температуры и влажности.

Дополнительную информацию см. <http://www2.sscc.ru/Information/Infrastr/2012/Infrastr-2012.htm>

Общая мощность двух источников бесперебойного электропитания составляет  
240 кВт, общая мощность прецизионных кондиционеров по холоду составляет 276 кВт

В 2012 году общее потребление ЦКП ССКЦ составило **1250248 КВт/час.**

Вычислительная техника работает в круглосуточном режиме.

ЦКП ССКЦ подключен по выделенному каналу (1 Гбит/с) к сети Новосибирского научного центра и дополнительно по скоростному каналу (10 Гбит/с) к суперкомпьютерной сети ННЦ.

**Программное обеспечение/инструментальные средства разработки**

На кластере НКС-30Т установлен Intel MPI 4, компиляторы Intel C++ и Intel Fortran Composer XE for Linux Version 2011 Update 5, включающие библиотеки Intel MKL, Intel IPP и Intel TBB. На кластере также установлены параллельные версии Gromacs, Quantum Espresso и Bioscope. Для программирования на GPU Nvidia установлен CUDA Toolkit 5.0.

В 2012 году закуплены компиляторы PGI Accelerator (годовая лицензия) для работы на GPU, коммерческие пакеты ANSYS CFD (годовая поддержка) и Gaussian 09. В декабре 2012 года ANSYS CFD обновлён до версии 14.5, в январе 2013 PGI Accelerator обновлён до версии 13.1 (release 13.1, updated January 28, 2013).

Поскольку сервер с общей памятью HP ProLiant DL980 G7 включён в НКС-30Т, то на нём доступно программное обеспечение кластера. На многопроцессорном сервере с общей памятью ProLiant DL580 G5 также установлены компиляторы Intel C++ и Intel Fortran Com­poser XE for Linux. Одинаковый комплект базового программного обеспечения на кластерах и серверах упрощает работу пользователей.

**Некоторая статистика**

Использование услуг ССКЦ в 2012 г.  
(по отчётам пользователей)

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| Всего пользователей – > 160  Всего организаций – 25    Академ. организаций – 19,  Университетов – 3 (НГУ, НГТУ, ИАТЭ НИЯУ МИФИ (Обнинск))  Другие организации – 3 | Проекты по организациям:   ИВМиМГ – 49 ИЦиГ – 30 ИК – 11 ИТПМ – 9 ИТ – 7 ИЯФ – 6 НГУ – 6 ИГ – 5 ИХКиГ – 5 НГТУ – 4 ИКЗ (Тюмень) – 3 ИХБиФМ – 3 ИНГиГ – 3 ИВТ – 2 ИХиХТ (Красноярск) – 2 ОНЦ (Омск) – 2 ИМ – 1 ИНХ – 1 ИФП – 1 ОАО "НИЦЭВТ" (Москва) – 1 СГА – 1 | Доктор. диссерт. – 1   Кандидат. диссерт. – 8  Дипломы – 19   Патенты – 11 |
| Всего грантов, программ, проектов, тем — 152  Из них Российских — 150, Международных — 2.  Грантов РФФИ – 54  Программ РАН – 16  Проектов СО РАН – 37  Программ Минобразнауки – 23  Другие – 22 | Всего публикаций – 142  Российских – 89  Зарубежных – 53 |

Использование процессорного времени ССКЦ в 2012 г. (час.)

|  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- |
| **ОРГАНИЗАЦИИ** | **НКС-160** | **НКС-30** | **∑** | **%** |
| ИЦиГ |  | 4220891,76 | 4220891,76 | 32,98 |
| ИК | 33144,62 | 2506263,84 | 2539408,46 | 19,84 |
| ИВМиМГ | 12271,81 | 1992816,96 | 2005088,77 | 15,67 |
| НГУ |  | 1340082,96 | 1340082,96 | 10,47 |
| ИХКиГ | 23890,90 | 764479,92 | 788370,82 | 6,16 |
| ИХиХТ (Красноярск) | 27628,67 | 572862,72 | 600491,39 | 4,69 |
| ИТ |  | 370738,32 | 370738,32 | 2,90 |
| ИЯФ |  | 229974,48 | 229974,48 | 1,80 |
| ИВТ |  | 167934,48 | 167934,48 | 1,31 |
| ИНГиГ |  | 153338,16 | 153338,16 | 1,20 |
| ИАТЭ (Обнинск) |  | 127003,92 | 127003,92 | 0,99 |
| ИТПМ | 4074,11 | 97296,48 | 101370,59 | 0,79 |
| НГТУ |  | 44322,96 | 44322,96 | 0,35 |
| ИХБиФМ |  | 33961,44 | 33961,44 | 0,27 |
| ИКЗ (Тюмень) | 953,07 | 31831,92 | 32784,99 | 0,26 |
| СИСТЕМА |  | 13662,72 | 13662,72 | 0,11 |
| ИАО (Томск) |  | 13442,40 | 13442,40 | 0,11 |
| ИНХ | 96,00 | 5987,04 | 6083,04 | 0,05 |
| ИЛФ |  | 5855,04 | 5855,04 | 0,05 |
| ИФП |  | 2852,88 | 2852,88 | 0,02 |
| НИЦЭВТ (Москва) |  | 1155,60 | 1155,60 | 0,01 |
| ОФ ИМ (Омск) |  | 600,96 | 600,96 | 0,00 |
| ОФ ИФП (Омск) |  | 273,60 | 273,60 | 0,00 |
| NVIDIA |  | 92,64 | 92,64 | 0,00 |
| ИГ |  | 4,32 | 4,32 | 0,00 |
| СГА |  | 0,96 | 0,96 | 0,00 |
| Другие |  | 1,44 | 1,44 | 0,00 |
| **ИТОГО** | **102059,19** | **12697729,92** | **12799789,11** | 100,00 |

Области исследований задач, решаемых на ССКЦ в 2012 г.

|  |
| --- |
| **Приоритетные направления развития науки, технологий и техники** |
| **Индустрия наносистем** - ИВМиМГ, ИК, ИКЗ (Тюмень), ИТПМ, ИХиХТ (Красноярск), ИХКиГ, ИЯФ, ОНЦ (Омск), ИФП |
| **Информационно-телекоммуникационные системы** - ИВМиМГ, ИГ, ИНХ, НГУ, НГТУ, ИЦиГ, ИЯФ, ИВТ |
| **Энергоэффективность, энергосбережение, ядерная энергетика** - ИВТ, ИВМиМГ, ИГ, ИК, ИТ, ИХКиГ, ИЯФ, НГУ, НГТУ, ИНГиГ |
| **Науки о жизни -** ИГ, ИКЗ (Тюмень), ИХБиФМ, ИЦиГ, НГУ, ОФ ИМ (Омск) |
| **Рациональное природопользование -** ИВМиМГ, ИКЗ (Тюмень), ИНГиГ, ИТ, ИХиХТ (Красноярск), НГУ |
| **Транспортные и космические системы -** ИТПМ, НГТУ |
| **Другие направления** |
| Физика высоких энергий - ИЯФ |
| Астрофизика - ИК |
| Биоинформатика - ИЦиГ |
| Вычислительная математика - ИВМиМГ, НГУ |
| Вычислительная гидродинамика - ИК |
| Вычислительная техника - ОАО "НИЦЭВТ" (Москва) |
| Вычислительное моделирование – СГА, НГУ |
| Геологические науки - ИВМиМГ, ИНГиГ, НГУ |
| Оптика атмосферы и океана - ИВМиМГ |
| Механика - ИТ |

**Задачи обработки данных в физике высоких энергий**

На части кластера НКС-30Т развернута, основанная на KVM, виртуализованная вычислительная среда, использующаяся для обработки данных физических экспериментов в физике высоких энергий, осуществляемых в ИЯФ СО РАН. Обмен данными между ИЯФ СО РАН и ССКЦ осуществляется через суперкомпьютерную сеть ННЦ (10 Гбит/с).

**Эксперимент КЕДР**

Работа проводится на электрон-позитронном коллайдере ВЭПП-4М с детектором КЕДР. Эксперименты в области рождения ψ-резонансов (J/ψ, ψ(2S), ψ(3770)) и τ-лептона.

**Эксперимент ATLAS**

Работа проводится на Большом адронном коллайдере (БАК) (ЦЕРН, Швейцария).  
Анализ данных эксперимента ATLAS в рамках ATLAS Exotics Working Group.

**Эксперимент СНД**

Работа проводится на коллайдере ВЭПП-2000 со Сферическим нейтральным детектором (СНД). Изучение процессов электрон-позитронной аннигиляции в области энергии до 2 ГэВ в системе центра масс.