**Проект НИР I.4.1.** "Математическое моделирование с использованием параллельных и распределенных вычислений".

**I.4.1.3.**  "Развитие суперкомпьютерных технологий и методов моделирования архитектур и алгоритмов для пета-и эксафлопсных супер-ЭВМ".

Номер государственной регистрации НИР 01201370232.

Руководитель – д.т.н. Глинский Б. М.

Создана мультиагентная модель функционирования системы управления потоком параллельных задач, поступающих на разнородные вычислительные ресурсы ЦКП. Данная модель позволяет оценить эффективность алгоритмов планирования очереди заданий, обеспечения отказоустойчивости и обеспечения экономии электроэнергии ЦКП. Для этой модели проведена апробация нескольких популярных и перспективных алгоритмов планирования, исследование эффективности которых позволит, в дальнейшем, создать набор оптимальных алгоритмов для управления ЦКП ССКЦ СО РАН. Апробация алгоритмов производилась на основе статистики работы ЦКП ССКЦ СО РАН   
за 2011- 2013 гг., система управления PBS Pro.

Реализован метод двухдиагонализации матриц для решения прямой задачи химической кинетики на примере биохимической модели Шефера (Hires) с использованием GPU. Реализация данного метода будет использована для имитационного моделирования с целью анализа масштабируемости при исполнении больших параллельных программ на суперЭВМ. Для решения системы ОДУ используется ФДН-метод. В рамках работ была создана и протестирована параллельная реализация ФДН метода решения систем обыкновенных дифференциальных уравнений (ОДУ). Для параллельной реализации на GPU все матричные операции метода двухдиагонализации, выполняемые на CPU, были заменены на матричные операции, выполняемы на GPU. Апробация решателя была проведена на задачах пиролиза пропана. Результаты тестов показали хорошее совпадение с результатами других решателей, включенных в ChemPAK .

Наращивались программные и аппаратурные компоненты основного кластера центра НКС-30Т+GPU: Закуплены новые версии программного обеспечения Intel Cluster Studio XE 2013 и Intel Parallel Studio XE 2013, которые включают Intel MPI 4.1, Intel TraceAnalyzer/Collector, компиляторы Intel C++ и Intel Fortran из состава Composer XE 2013 SP1. На год продлена техническая поддержка компиляторов PGI Accelerator, которая предусматривает возможность обновления версий этого программного обеспечения. PGI Accelerator позволяет на языках Fortran и C++ использовать вычислительные мощности GPU NVIDIA Tesla М2090.

HP ProLiant DL980 G7 (архитектура SMP) входит в состав кластера НКС-30Т как отдельный вычислительный узел. После расширения в этом году DL980 содержит 1Тбайт оперативной памяти и восемь процессоров Intel Е7-4870.

В рейтинге TOP-50 по СНГ кластер НКС-30Т: 21-место для расширения кластера на GPU (архитектура GPGPU) и 36 место для базового кластера на процессорах Intel Xeon (архитектура МРР) в 19-й редакции рейтинга от 24.09.2013. Деятельность ЦКП ССКЦ за 2013 год представлена на приведенных ниже слайдах.



