

ИНФРАСТРУКТУРА ВЫСОКОПРОИЗВОДИТЕЛЬНЫХ ВЫЧИСЛЕНИЙ В ННЦ СО РАН

Ю.И. Шокин, М.П. Федорук,
Д.Л. Чубаров, А.В. Юрченко

ИВТ СО РАН

Для обеспечения доступности вычислительных ресурсов создаются вычислительные центры и сети связи, объединяющие эти центры и их пользователей



*Автострада Вильнюс-Каунас
Антанас Суткус. Советское Фото, № 12 за 1976 г.*

- Вычислительные центры
 - Вычислительные ресурсы СО РАН
 - Информационно-вычислительный центр НГУ
- Сети связи
 - Высокоскоростной сегмент СПД СО РАН
- Организационные структуры
- Характеристики решаемых прикладных задач

В истории наблюдались и всплески, и спады интереса к высокопроизводительным вычислениям

За:

- Иной масштаб решаемых задач позволяет осуществить качественный переход
- Высокая надежность
- Эластичность предложения
- Сокращение накладных расходов за счет централизации
- Мировая тенденция

Против:

- Очереди
- Необходимость защиты информации
- Дороговизна
- Зависимость от сетей и прочей инфраструктуры
- Отсутствие индивидуального подхода



**Высокопроизводительные вычисления
и вычислительные центры**

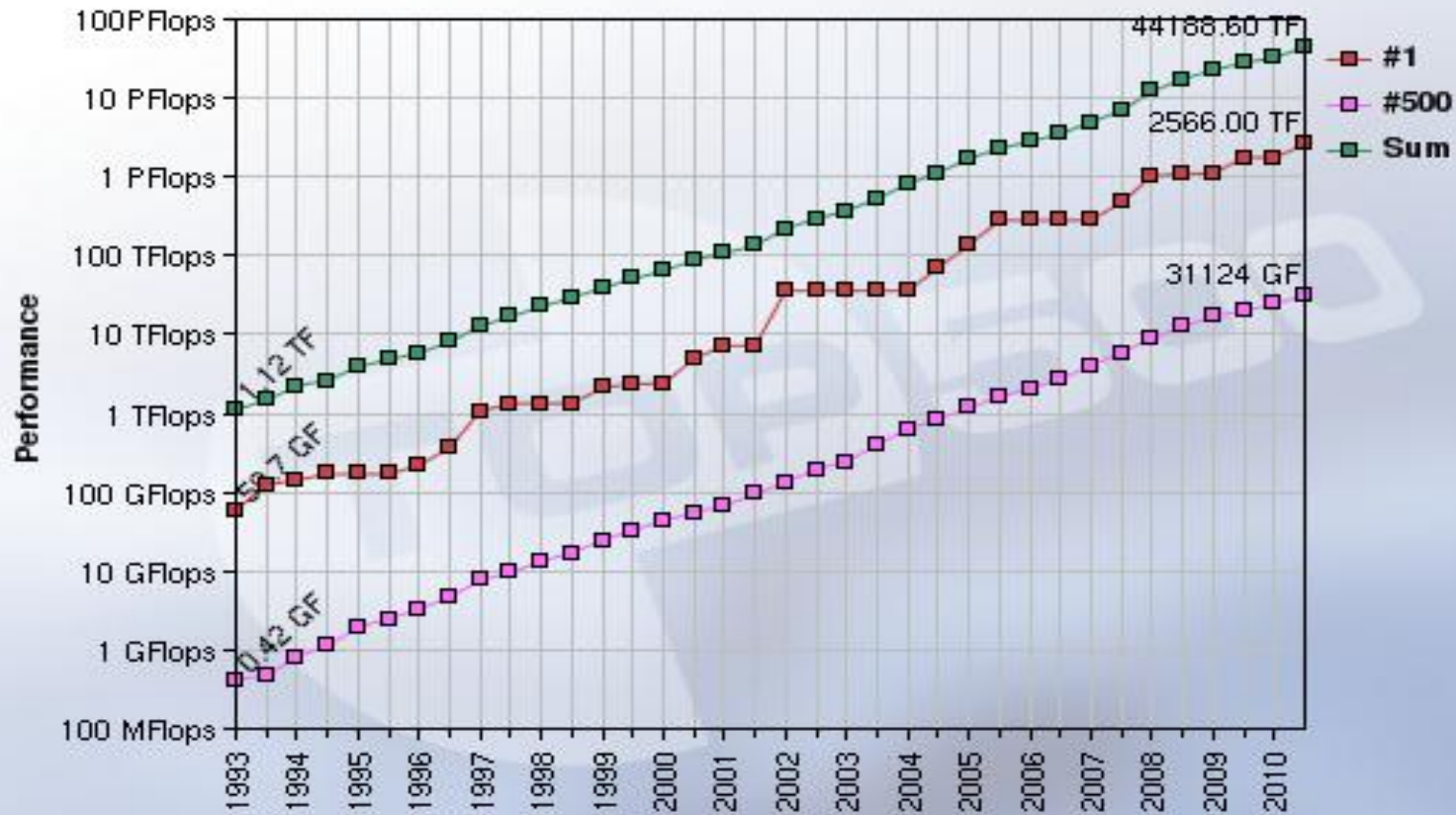
- Развитие процессорных архитектур и компиляторов
- Построение вычислительных кластеров на основе открытых стандартов
- Возникновение глобальных вычислительных сетей
- Доступные ускорители вычислений

“Хронология” HPC

- 1976: Cray-1
- 1980: Ethernet
- 1985: DNS
- 1987: T8 Transputer
- 1991: Linux
- 1994: NASA Beowulf
- 1996: MPI-2
- 1997: OpenMP 1.0
- 1998: Intel Xeon
- 2000: InfiniBand
- 2003: AMD64
- 2005: InfiniBand DDR
- 2007: CUDA
- 2008: InfiniBand QDR



Тенденции в развитии
высокопроизводительных вычислений



12/11/2010

<http://www.top500.org/>

Вычислительные центры:

- Национальные лаборатории
- Вычислительные центры в университетах
- вычислительные центры общего назначения
- Специализированные вычислительные центры

Сети связи

- Сеть GEANT объединяет более 20 национальных академических сетей стран ЕС
- Internet2 объединяет более 60,000 университетов и исследовательских организаций в США

Организационные структуры:

- TeraGrid, OpenScienceGrid (США)
- DEISA, HPCEuropa, EGEE (ЕС)



**Региональные инфраструктуры
высокопроизводительных вычислений**

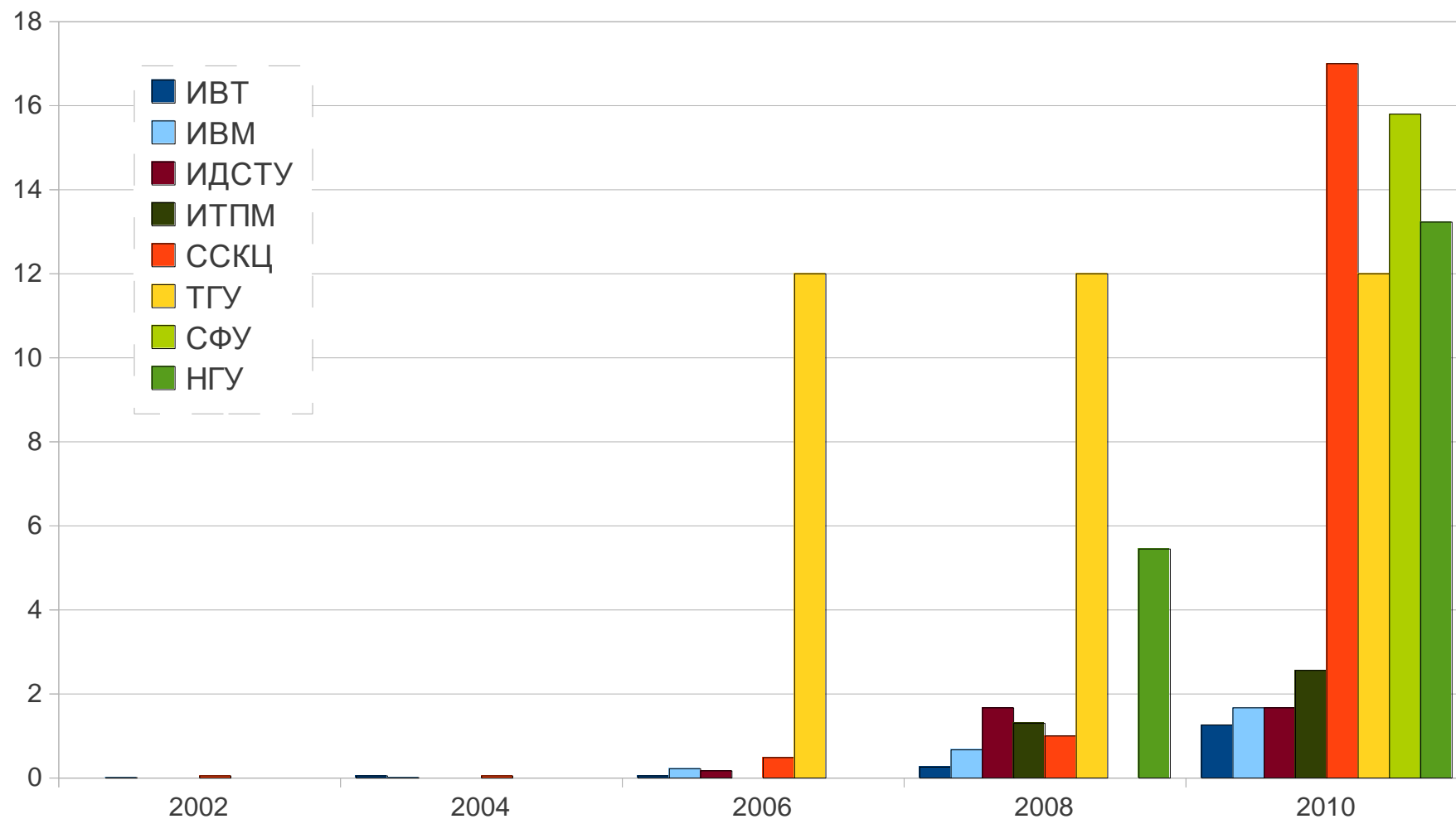


*Earth at Night
C. Mayhew & R. Simmon (NASA/GSFC), NOAA/ NGDC,
DMSP Digital Archive*



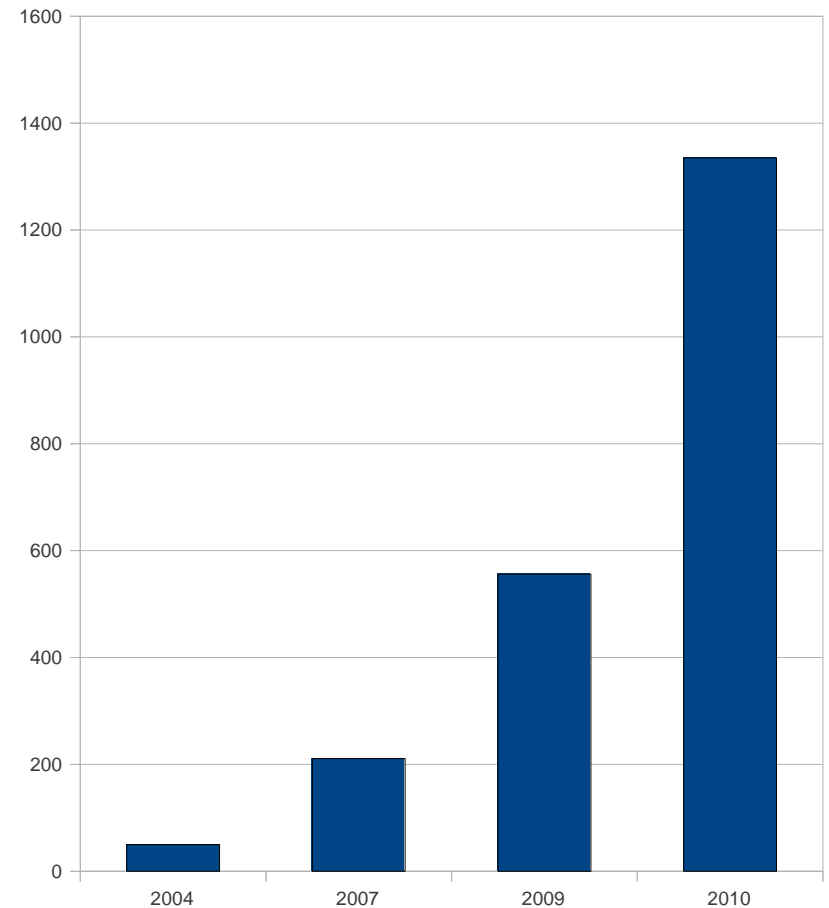
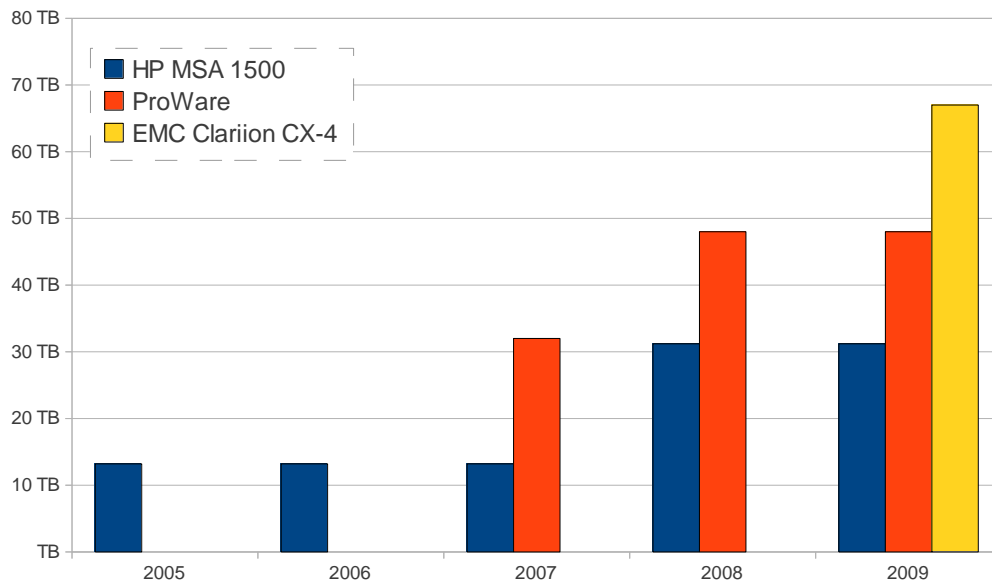
Инфраструктура в масштабе ННЦ

Вычислительные ресурсы и вычислительные центры



Динамика запуска вычислительных кластеров
в ВУЗах СФО и институтах СО РАН

- 1999: Кластер Pentium III/5
- 2004: Кластер Xeon/8
- 2007: Кластер Opteron/44
- 2009: Ускоритель вычислений Tesla S1070
- 2010: Кластер InfiniBand/96



Динамика мощности
вычислительных систем и емкости
систем хранения



Развитие вычислительных ресурсов
в ИВТ СО РАН



Кластер ИВЦ НГУ
<http://www.nusc.ru>



Высоконадежная система хранения в ИВТ СОРАН более 60 ТБ



Кластер НКС-30Т в
ССКЦ СОРАН



Вычислительные ресурсы ИИЦ



- Количество серверов 160
- Серверы HP BL460c, HP BL2x220G6
- Процессоры Intel X5355, E5540
- Количество ядер 1280
- Объем памяти 2560 ГБ
- Пиковая производительность 13,219 ТФлопс
- Параллельная файловая система SFS на технологии Lustre
- Объем дисковой системы 24 ТБ
- Интерконнект Infiniband QDR 4x
- 16-ядерный сервер HP DL580 с общей памятью 128 ГБ
- Система хранения на FC дисках HP EVA 4100, 4 ТБ
- 2 сервера доступа HP DL360
- Серверная комната для установки оборудования мощностью до 80 кВт

Проектирование и монтаж: компания Нонолет КиТ
Проектирование и запуск осуществлены при
поддержке ИВТ СО РАН



Серверная комната ИВЦ НГУ

- 2007 г. Инновационная образовательная программа НГУ поддержана в рамках НП «Образование»
- 2009 г. программа развития Национального исследовательского университета
- Март 2007 г. -- итоги конкурса программ
- Октябрь 2007 г. -- конкурс на поставку оборудования, монтаж, подготовку помещений
- Октябрь 2008-го года — открытие ИВЦ НГУ
- Март 2010-го года — запуск второй очереди комплекса



Развитие ресурсов в НГУ

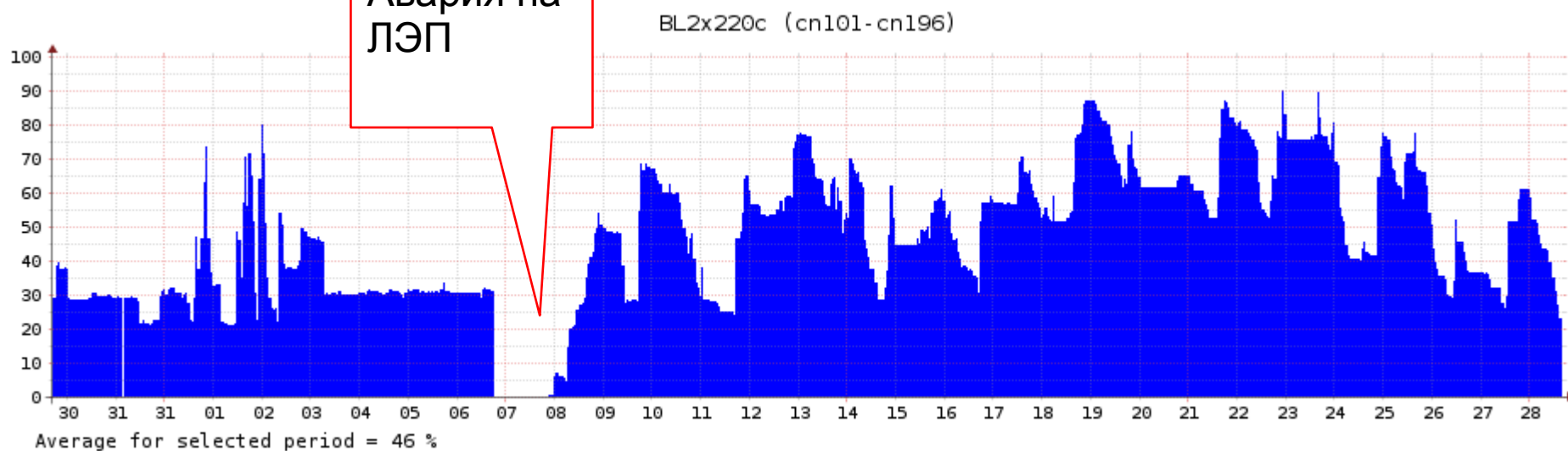
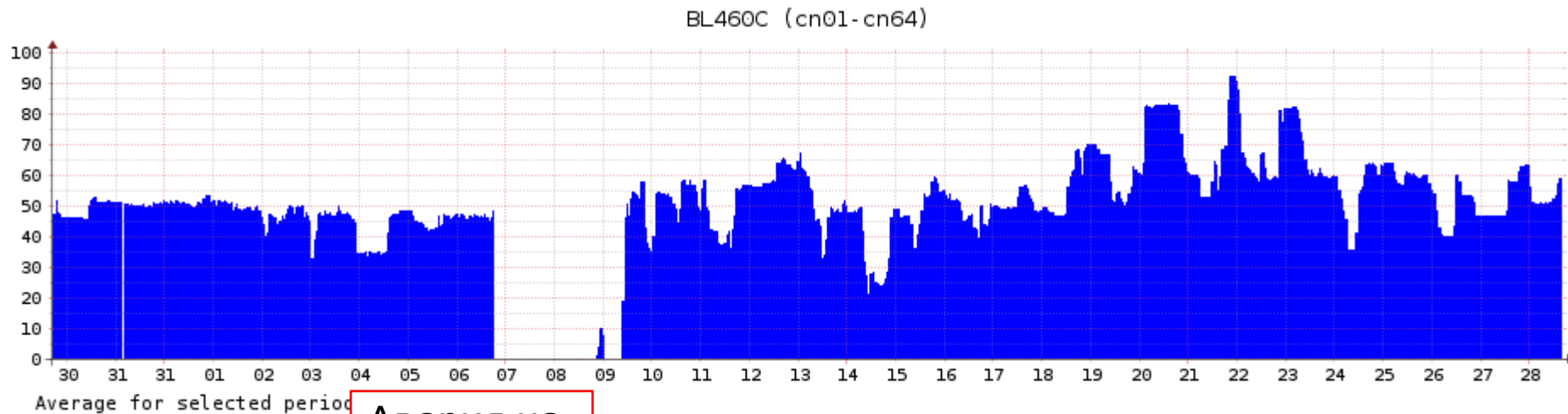
Пользователи ИВЦ НГУ

- НГУ
- Университеты:
 - НГТУ, СибГУТИ, КемГУ, МГТУ
- Институты и организации СО РАН:
 - Математика и информатика
 - Биологические науки
 - Физические науки
 - Науки о Земле
 - Химические науки
 - Нанотехнологии и ИКТ



Открытие ИВЦ НГУ
состоялось 10.10.2008 г.

Текущая загрузка системы (ноябрь 2010)



Авария на
ЛЭП



Загрузка системы

Мониторинг инженерной инфраструктуры APC
InfrastruXure

Мониторинг оборудования HP

Мониторинг приложений

Учет использования ресурсов,
статистика и мониторинг загрузки системы



Мониторинг и статистика

Биоинформатика:

Accelrys Discovery Studio, BLAST, MAFFT, MUSCLE, T-Coffee

Дискретная математика:

GAMS, ILOG CPLEX, GAP

Геофизика:

SPECFEM3D

Механика:

MSC.NASTRAN, MSC.Marc, ANSYS CFD, ANSYS Mechanical

Строение вещества:

CPMD, SIESTA, Quantum Espresso

Электромагнетизм:

ANSOFT High Frequency, ANSYS

Средства разработки:

GNU Compiler Collection, Intel Cluster Toolkit CE, Intel VTune

Средства визуализации:

ParaView, Tecplot 360



Совместными усилиями специалистов НГУ и ИВТ СО РАН

- осуществляется мониторинг инженерной инфраструктуры ЦОД и серверного оборудования, в т.ч. разработана подсистема останова всех подсистем в случае форс-мажорных обстоятельств (например, отключения электроснабжения);
- создана специализированная подсистема и осуществляется мониторинг приложений, учет использования ресурсов, статистика и мониторинг загрузки вычислительных подсистем;
- осуществляется поддержка пользователей как по вопросам освоения системы, так и по частным проблемам создания эффективных параллельных вычислительных кодов.



Самый мощный сервер HP в линейке седьмого поколения - ProLiant DL980 G7

Процессор Intel Xeon X7560 8Core 2.26ГГц 24МБ – 8 шт.

Количество ядер – 64

Производительность - 581,12 Гфлоп/с

Память 128 x 16ГБ DDR3 – 2048 ГБ

Диски 300ГБ 6G SAS 10K – 8 шт.

Блоки питания 1200Вт Platinum PSK – 8 шт.

Infiniband адаптер 4X QDR Dual Port HCA

SUSE Linux Enterprise Server

Altair PBS Pro

HP Cluster management utility

HP Insight Control



Технические характеристики

Сетевая инфраструктура для высокопроизводительных вычислений



СПД СО РАН — арендуемые каналы связи пропускной способностью 10 Мбит/с, свободные от Интернет-трафика



Вычислительные сети в Сибири

**Проект программы «Проблемы создания национальной научной
распределенной информационно-вычислительной среды на основе развития
GRID технологий и современных телекоммуникационных сетей»
Распределенная информационно-вычислительная среда СО РАН**

Целью проекта является обеспечение доступа к общим вычислительным и информационным ресурсам Сибирского отделения РАН.

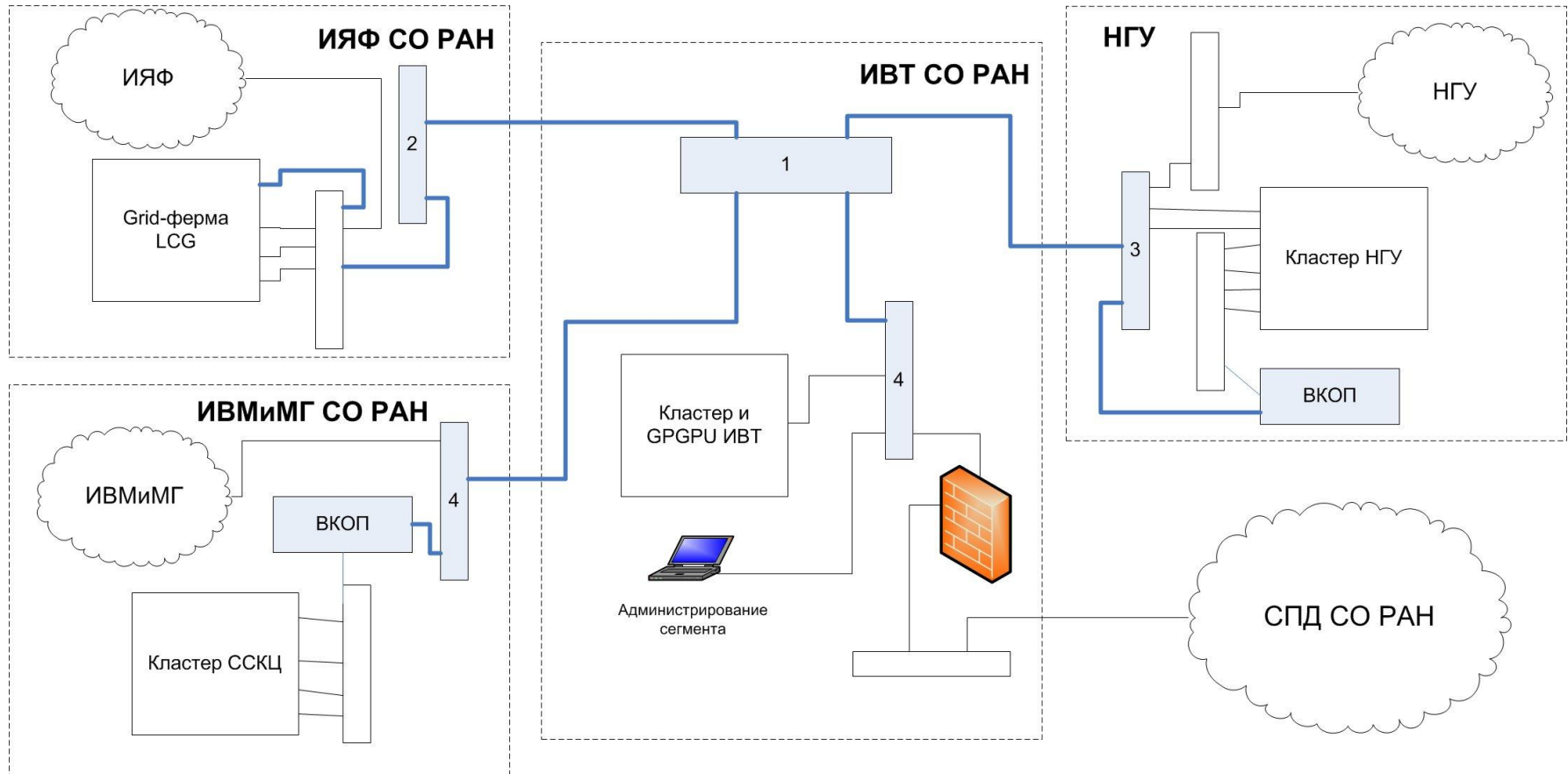
Задачи проекта:

- создание и обеспечение функционирования высокоскоростных сетей передачи данных
- разработка унифицированных процедур предоставления доступа к вычислительным и информационным ресурсам
- отработка механизмов предоставления распределенных вычислительных ресурсов
- обеспечение контроля доступа, мониторинг и учет использования ресурсов

О ПРОЕКТЕ 1.1: 10Г сегмент

В рамках создания высокоскоростных сетей передачи данных

В ННЦ СО РАН создан 10Гбит сегмент,
объединяющий, в настоящее время, 4 площадки



Высокоскоростной сегмент СПД СО РАН

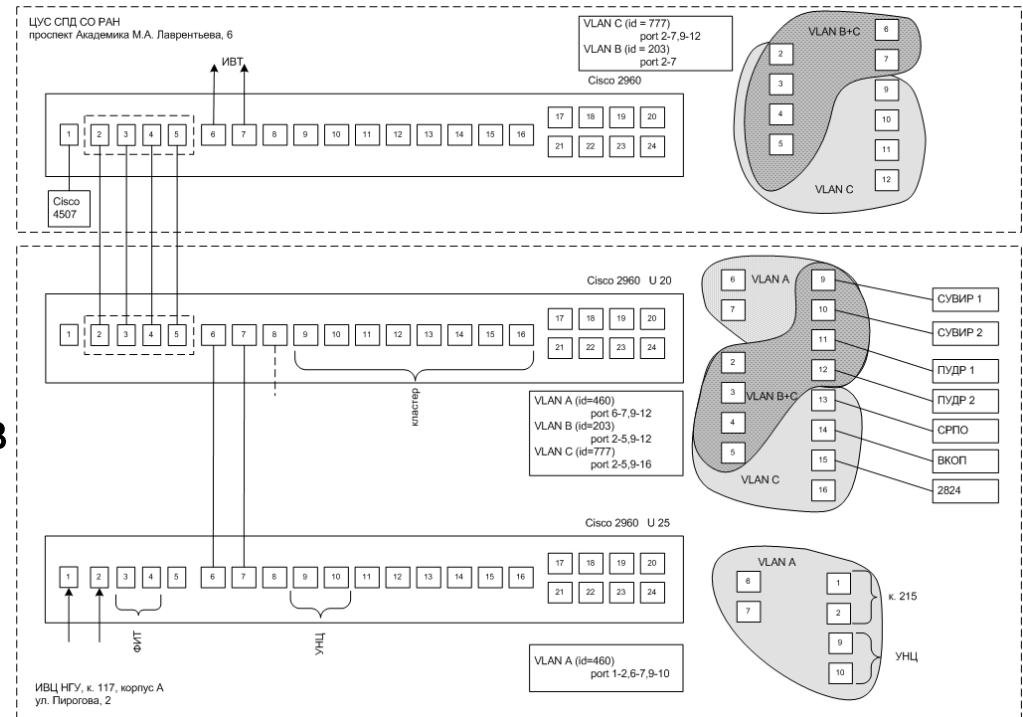
О ПРОЕКТЕ 1.1: ИВТ - НГУ

Первая «ласточка» 10Гбит сегмента:

создание высокоскоростного соединения между ИВТ и НГУ.

Особенности:

- Использование виртуальных сетей
- Использование гигабитных каналов для резервирования 10Гбит соединения

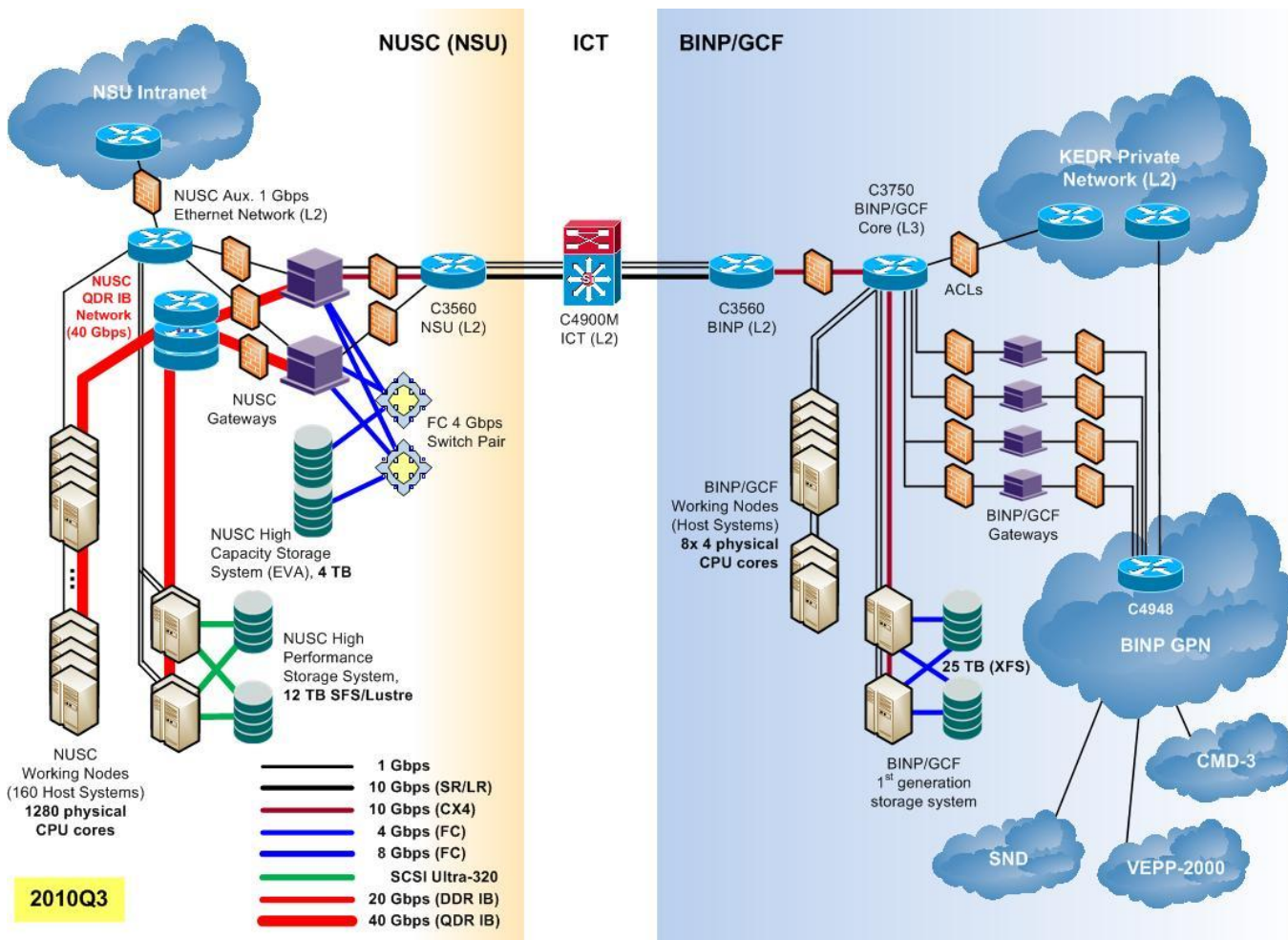


Наличие канала связи СПД СО РАН – НГУ позволило удовлетворить потребности сотрудников СО РАН и ВУЗов региона в доступе к вычислительным ресурсам НГУ



Высокоскоростной сегмент СПД СО РАН

О ПРОЕКТЕ 1.1: НГУ – ИЯФ (через ИВТ)



Сеть построена для обеспечения использования вычислительных мощностей кластера НГУ для обработки экспериментальных данных, накопленных в ИЯФ СО РАН

В перспективе сеть может быть использована для участия в обработке результатов экспериментов ЛНС

Подробнее на с. 52



Высокоскоростной сегмент СП Д СО РАН

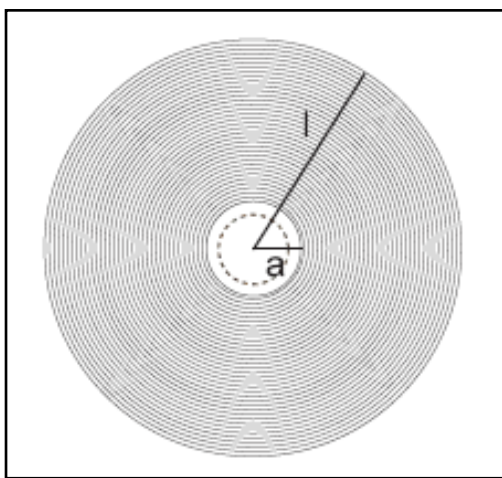
Организационные структуры

Вопросы развития инфраструктуры высокопроизводительных вычислений в ННЦ и в СО РАН в целом обсуждаются

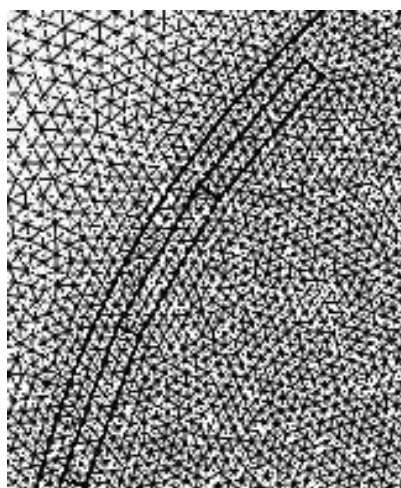
- Советом Сети передачи данных СО РАН
- На рабочих совещаниях специалистов СО РАН
- Специализированными советами

При этом каждый центр независимо формирует круг пользователей в соответствии с имеющимися ресурсами, потребностями организаций, управляющих центрами

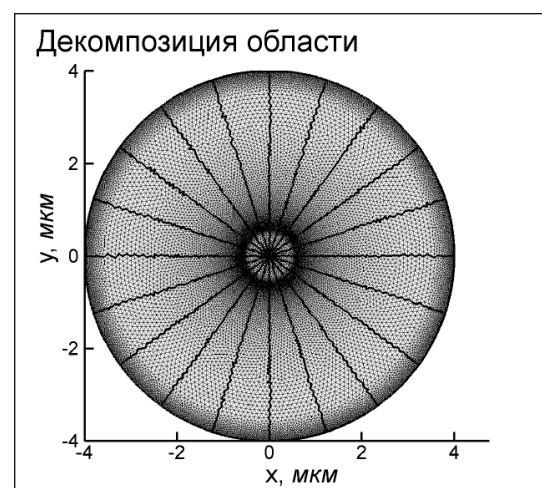
Некоторые приложения



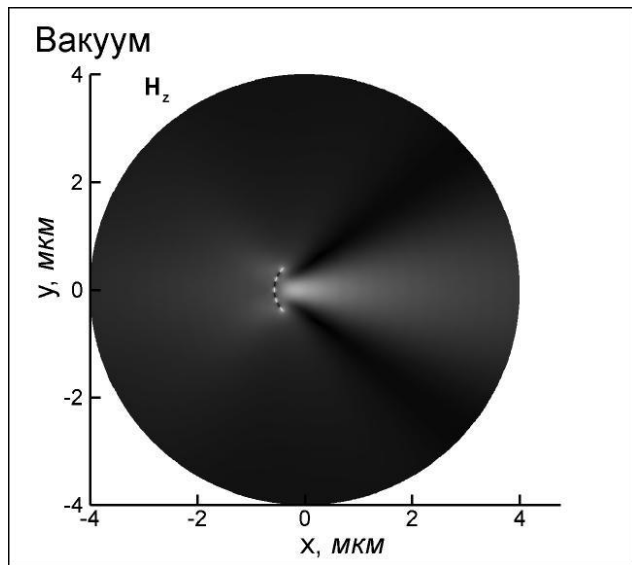
Гиперлинза: $a=600$ нм $l=3$ мкм
 $b=610$ нм



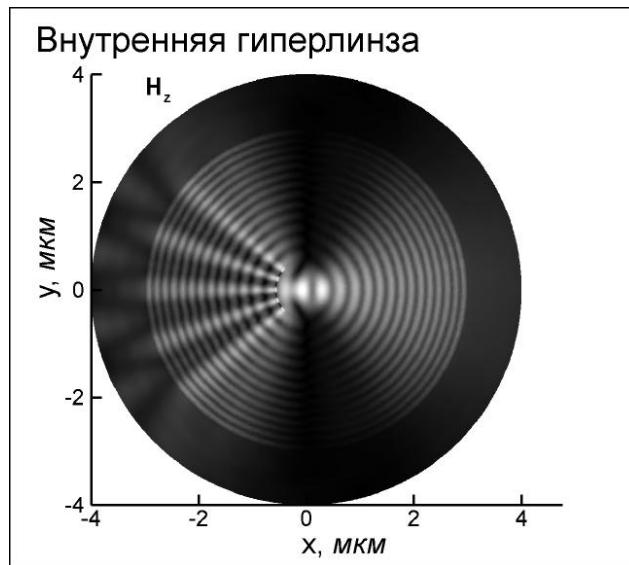
Источники: $\rho=a-30$ нм; $\lambda=632$ нм; ТМ волна



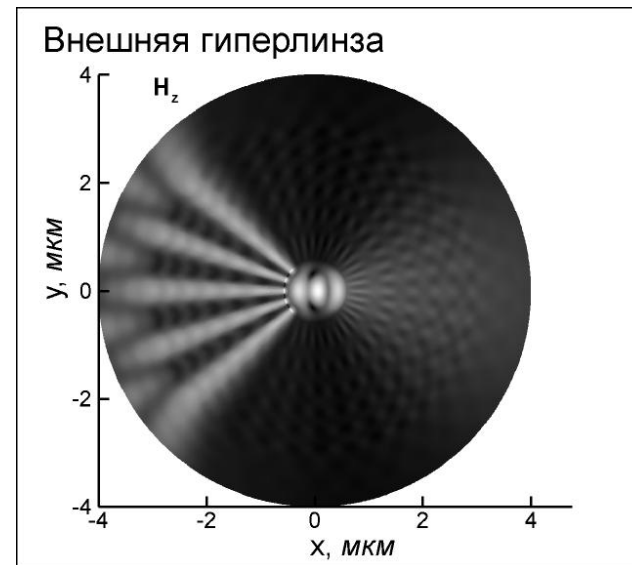
Декомпозиция области



Вакуум



Внутренняя гиперлинза



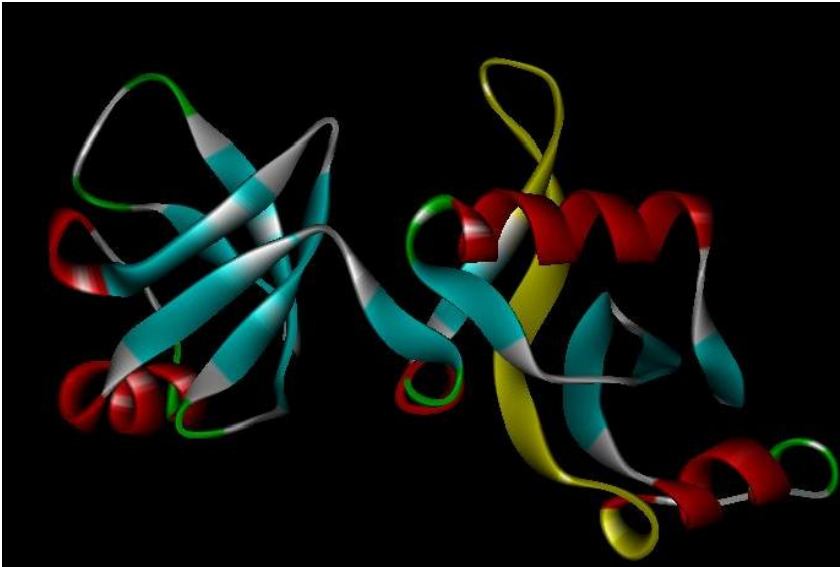
Внешняя гиперлинза

$$\epsilon_\rho(\rho) = (r\tau)/\rho, \quad \epsilon_\phi(\rho) = (\rho/\tau)/(b/l),$$

$$\epsilon_\rho(\rho) = (r\tau)/\rho, \quad \epsilon_\phi(\rho) = \rho/\tau,$$



Моделирование гиперлинзы

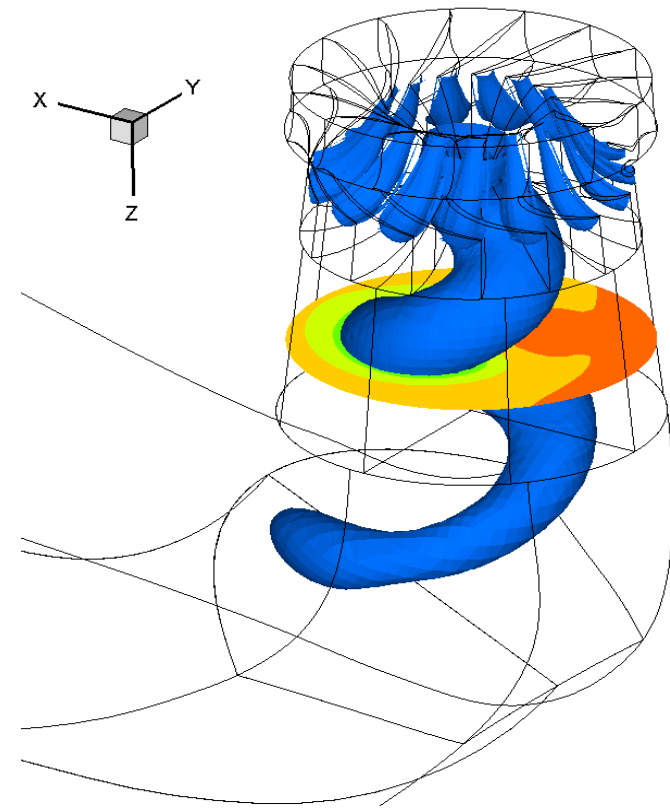
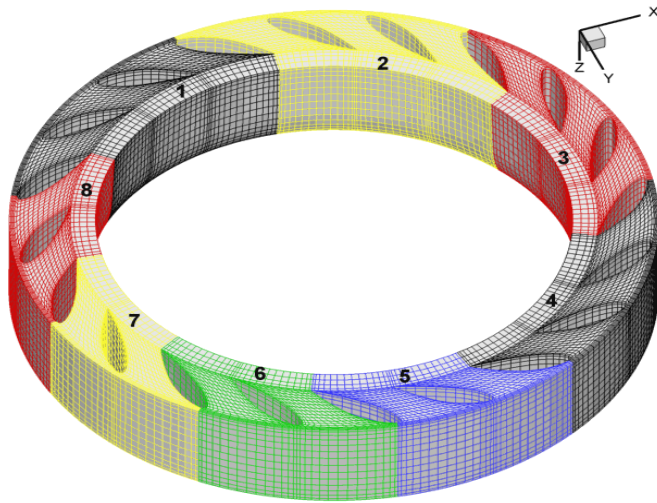


**Д.А. Афонников, К.В. Гунбин и др.
ИЦИГ СО РАН, ФЕН НГУ**

Модель пространственной структуры белка Nip7 *Pyrococcus abyssi*. Красным цветом выделены альфа-спирали, голубым — бета нити, зеленым повороты полипептидной цепи. Желтым цветом отмечен участок, имеющий наибольшие флуктуации конформации полипептидной цепи при воздействии давлений, сравнимых с давлениями на глубине Марианской впадины (11 км, около 1000 атм).



Компьютерный анализ влияния высоких давлений
на структуру белка и функции микроорганизмов

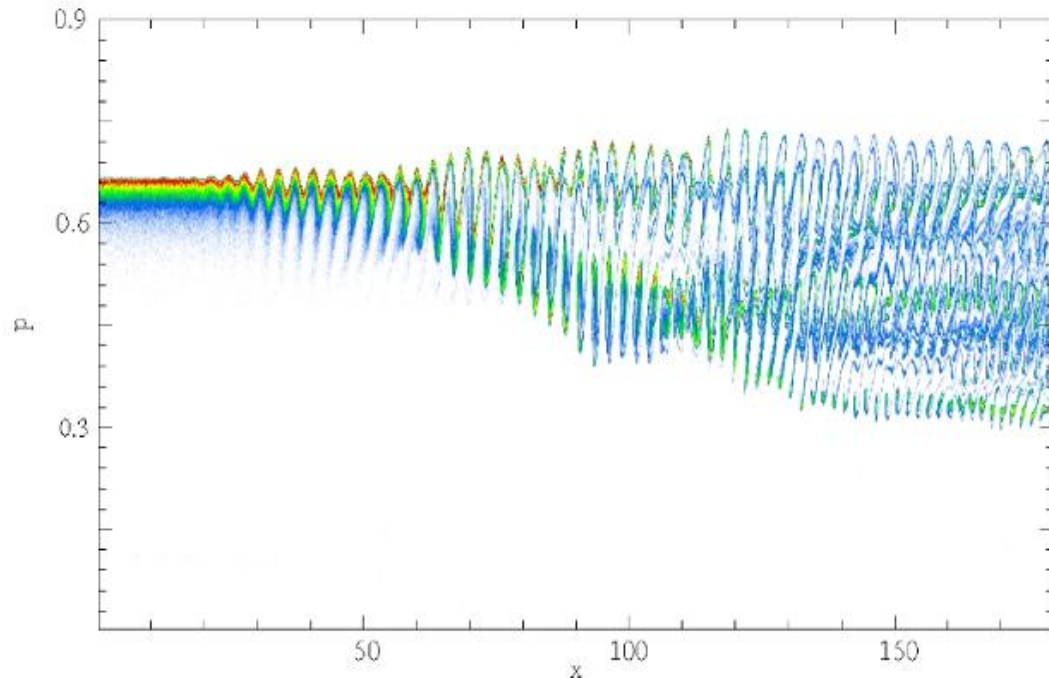


- С.Г. Черный,
Д.В. Чирков,
Д.В. Банников и др.
- ИВТ СО РАН,
ММФ НГУ

Вихревой жгут в конусе
отсасывающей трубы СШГЭС



Численное моделирование нестационарных
течений в гидротурбине на
многопроцессорных системах

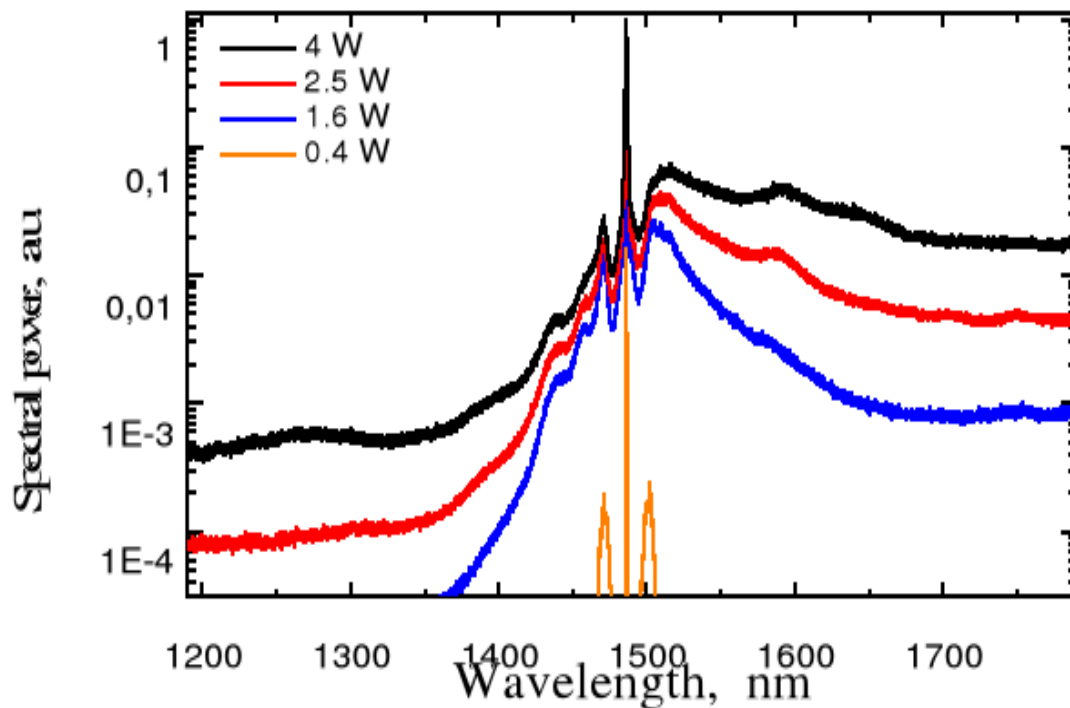


- И.В. Тимофеев,
А.В. Терехов и др.
- ИЯФ СО РАН,
ИВМиМГ СО РАН

Фазовая плоскость пучка при инъекции в плазменное полупространство. Показан момент времени после установления развитой турбулентности. Наблюдается режим, когда нелинейные процессы в плазме не способны разрушить корреляционные эффекты, связанные с захватом пучка.



Сценарии турбулентного нагрева плазмы
мощным электронным пучком



**С.В. Смирнов,
С.М. Кобцев,
С.В. Кукарин и др.**

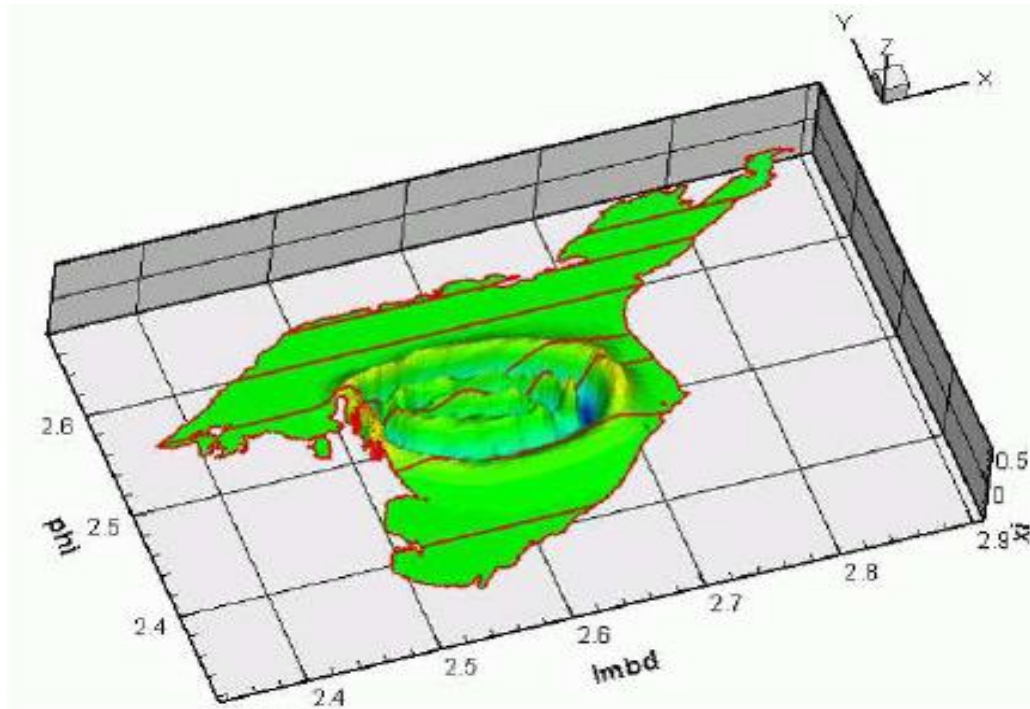
НИЧ НГУ

Общее время расчетов по проекту составило более 1 млн. CPU-часов

Спектры суперконтинуума, генерируемые в
высоконелинейном волокне при разных уровнях
МОЩНОСТИ



Исследование фундаментальных физических
процессов при генерации мощного суперконтинуума в
ОПТИЧЕСКИХ ВОЛОКНАХ



Г)

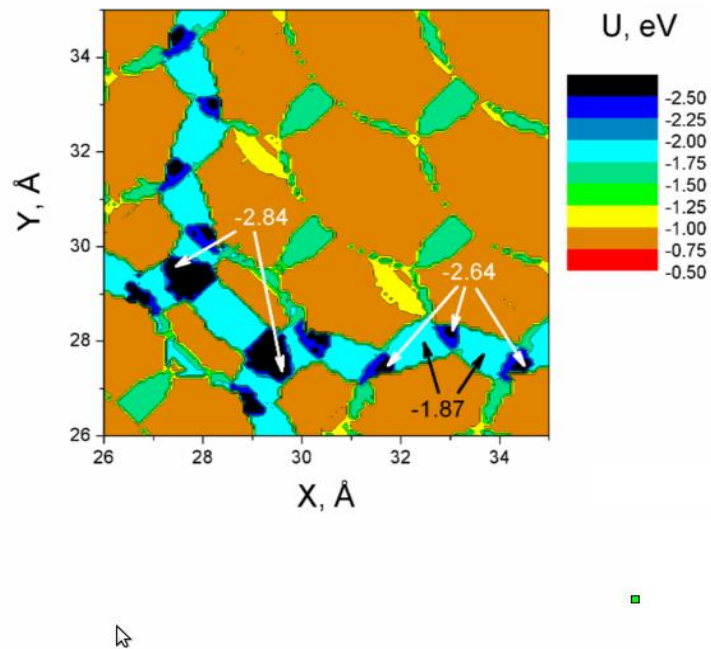
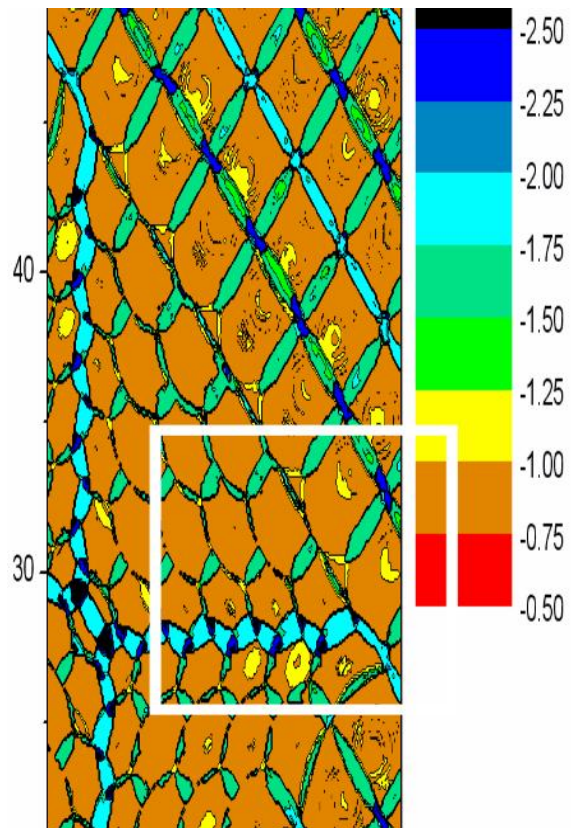
**Е.Д. Карпова,
Е.В. Дементьева**

**ИВМ СО РАН,
ИМ СФУ**

- Распространение начального возмущения в акватории Охотского моря



Анализ параллельных реализаций
МКЭ для уравнений мелкой воды



**П.Л. Новиков,
Ж.В. Смагина,
В.А. Зиновьев,
В.А. Армбристер**

ИФП СО РАН

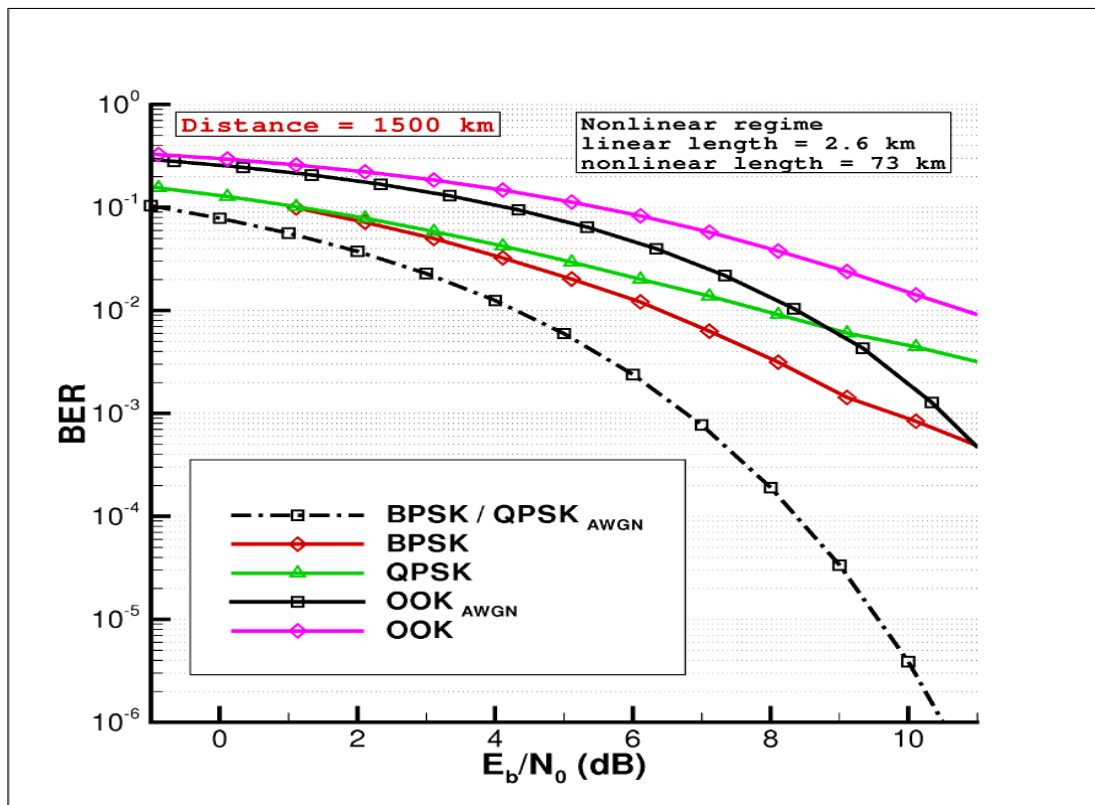
- Потенциальный рельеф для подложки Si(001)



Рост плотных пространственно-упорядоченных массивов квантовых точек Ge на структурированных подложках Si

**A.A. Редюк,
S. Hunt**

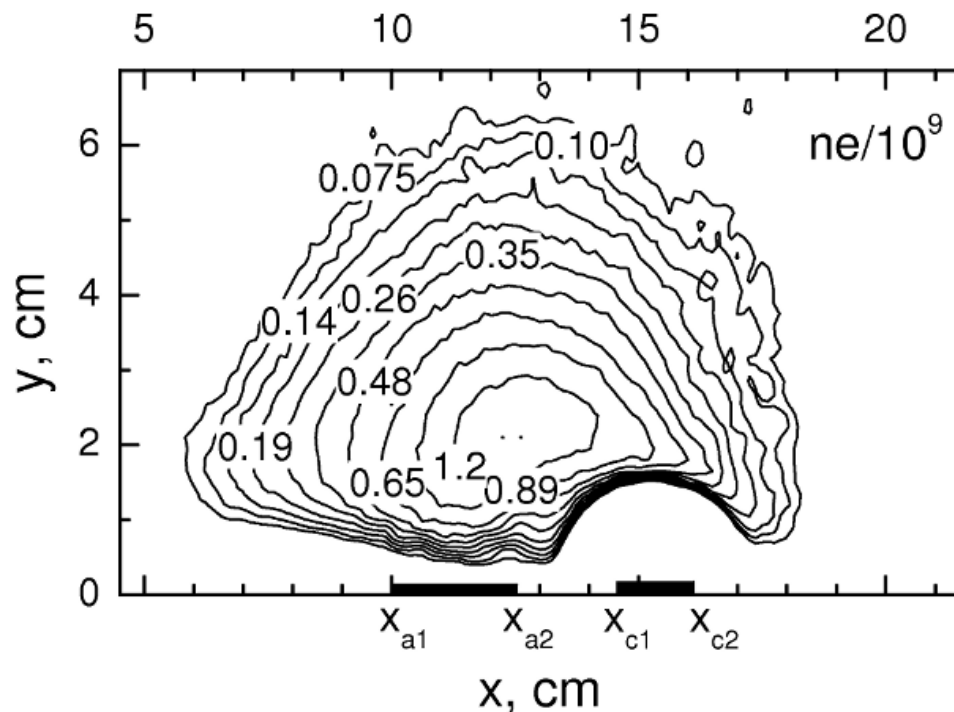
**ИВТ СО РАН,
Univ. Hertfordshire**



- Зависимость BER от отношения сигнал-шум после распространения оптического сигнала в нелинейном режиме



Использование спектрально эффективных методов модуляции сигнала и специальных методов помехоустойчивого кодирования для повышения пропускной способности волоконно-оптических линий связи.



**И.Б. Швейгерт,
А.Л. Александров,
Д.А. Арискин**

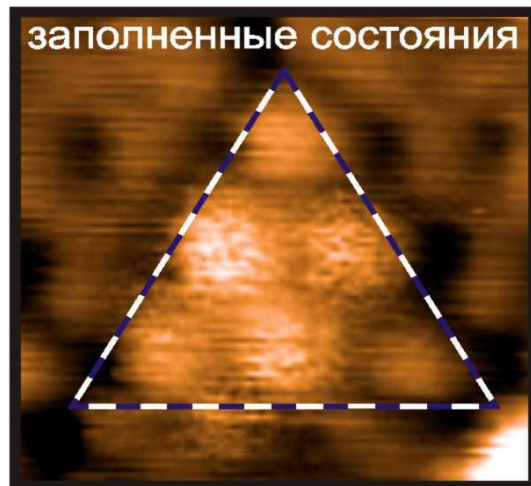
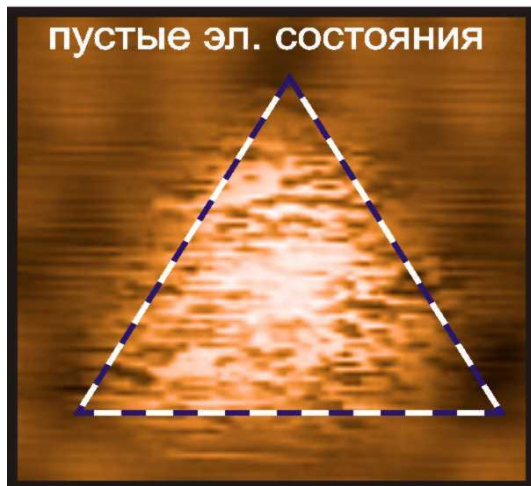
ИТПМ СО РАН

- Распределение концентрации электронов при давлении 100 мТорр
- Катод и анод показаны жирными линиями, поток газа направлен справа налево



Особенности горения тлеющего разряда
у поверхности в сверхзвуковом потоке газа
при низком давлении

эксперимент



моделирование



Р.А. Жачук,
С.А. Тийс

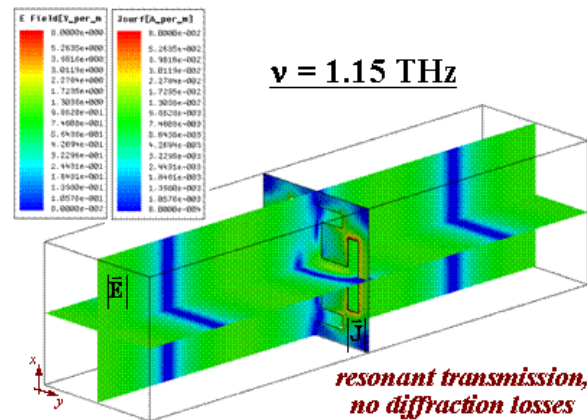
ИФП СО РАН

- СТМ изображения шумоподобных пятен в полуячейках 7×7 в пустых и заполненных электронных состояниях. Верхняя панель: экспериментальные изображения; нижняя панель: смоделированные изображения, при условии, что атом Sr находится неподвижно в заданном положении

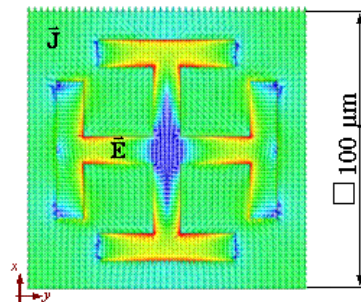
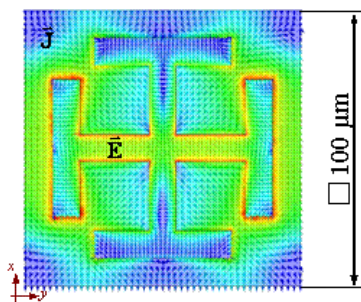
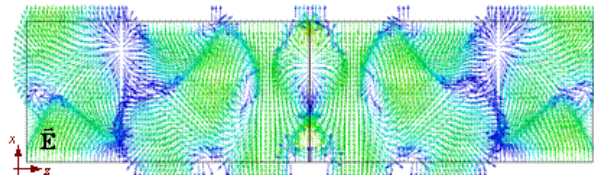
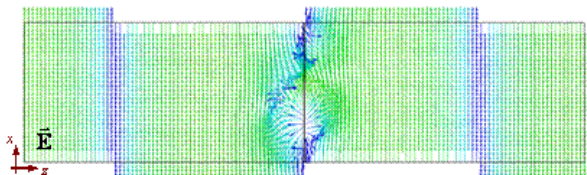
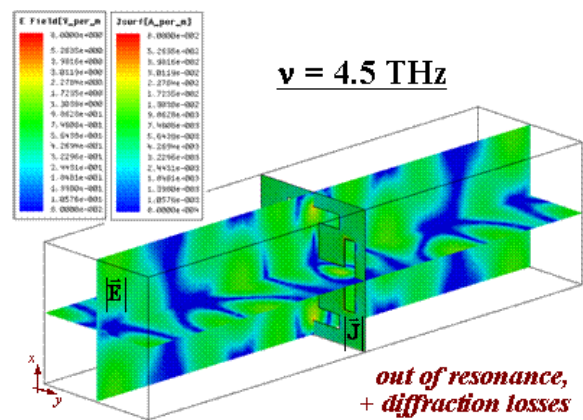
ИВТ

Диффузия атомов Sr по поверхности Si(111)- 7×7 :
данные сканирующей туннельной микроскопии и
моделирование

$\nu = 1.15$ THz



$\nu = 4.5$ THz



С.А. Кузнецов и др.

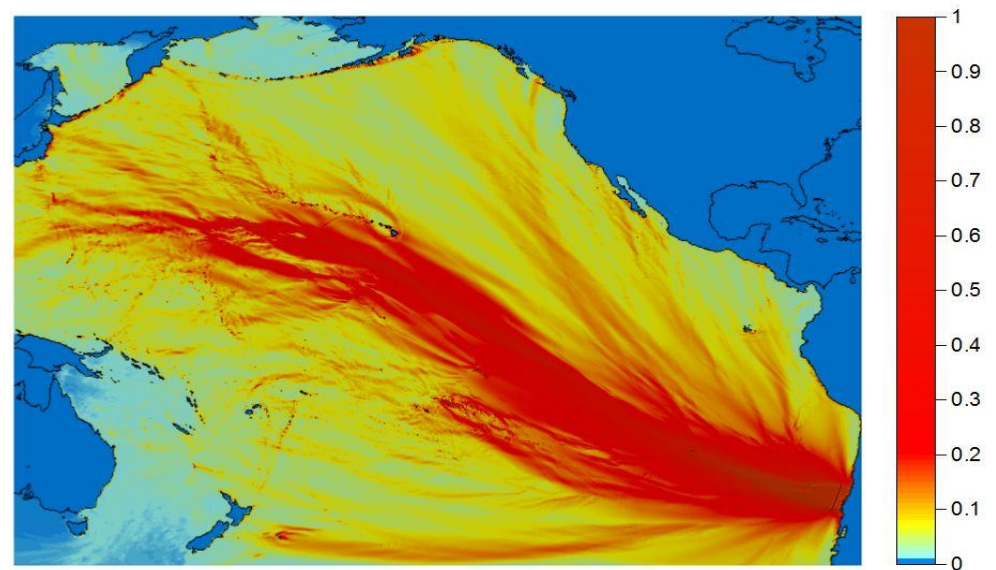
**НГУ, ИЯФ СО РАН,
КТИПМ СО РАН, Univ.
of Navarra**



**Разработка квазиоптических селективных
элементов терагерцового диапазона**

**Оценка цунами-рисков.
Определение максимальных
возвышений свободной
поверхности в акваториях
Охотского и Японского морей;**

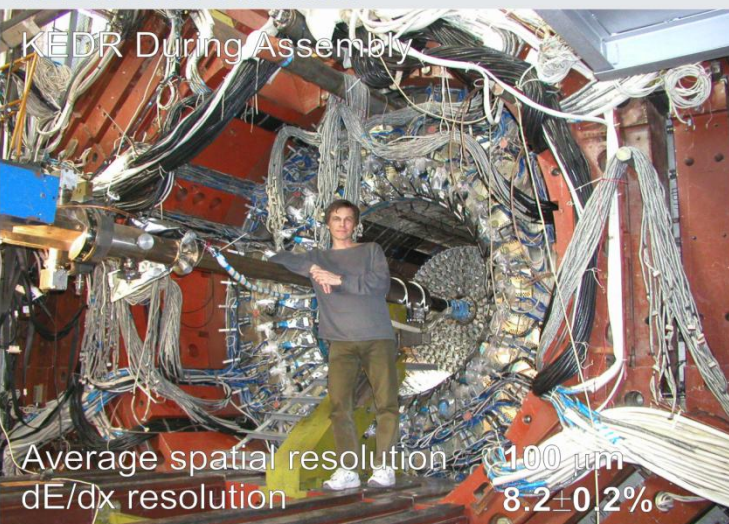
**Л.Б. Чубаров (ИВТ СО РАН)
С.А. Бейзель (ИВТ СО РАН)
В.К. Гусяков (ИВМиМГ СО РАН)**



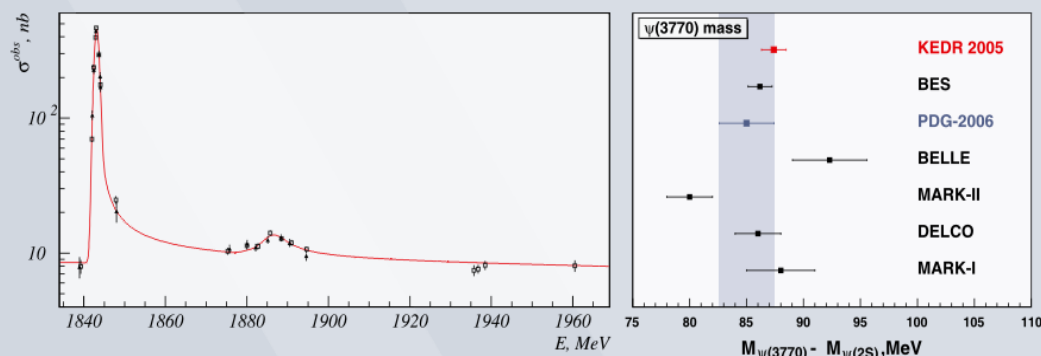
“...прогноз был готов еще до того, как волна достигла берегов Французской Полинезии...”

- Объем вычислений — около 40 тыс. CPU-часов
- Расчеты на основе последовательных программ выполняются для достаточно большого набора модельных источников
- При поступлении сообщения об угрозе цунами, прогноз быстро вычисляется на основе результатов расчетов для близких модельных источников

KEDR Drift Chamber



ψ'' Mass Measurement



$$M_{\psi(3770)}^{[KEDR]} = 3773.5 \pm 0.9 \pm 0.6 \text{ MeV}/c^2$$

Детектор КЕДР в процессе
монтажа

Е.М. Балдин

А.С. Зайцев и др.

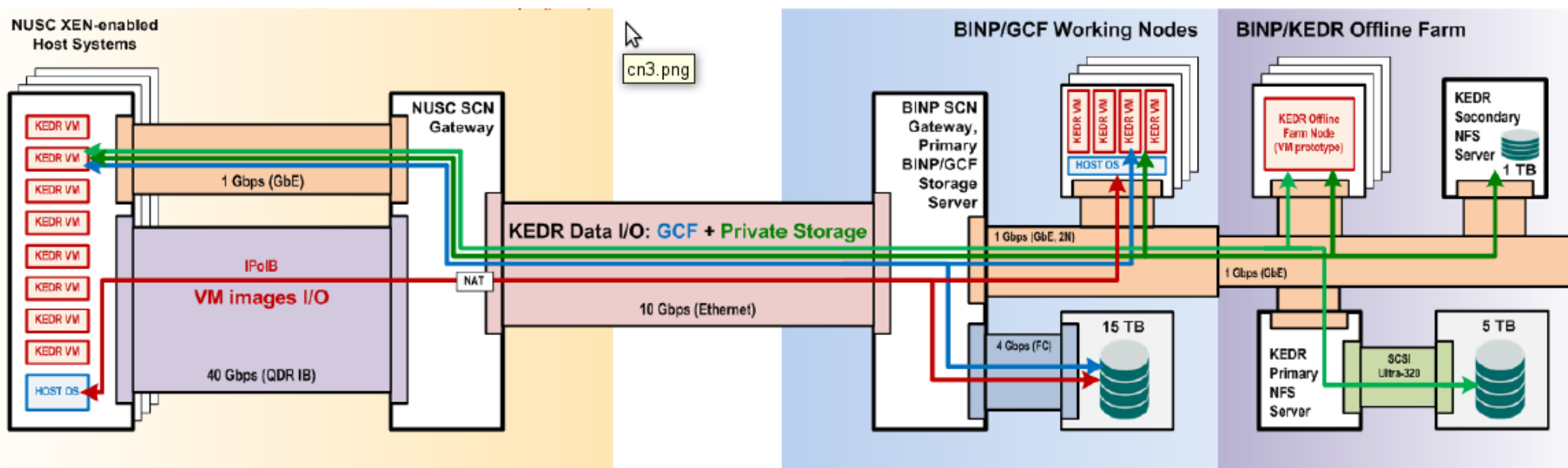
ИЯФ СО РАН

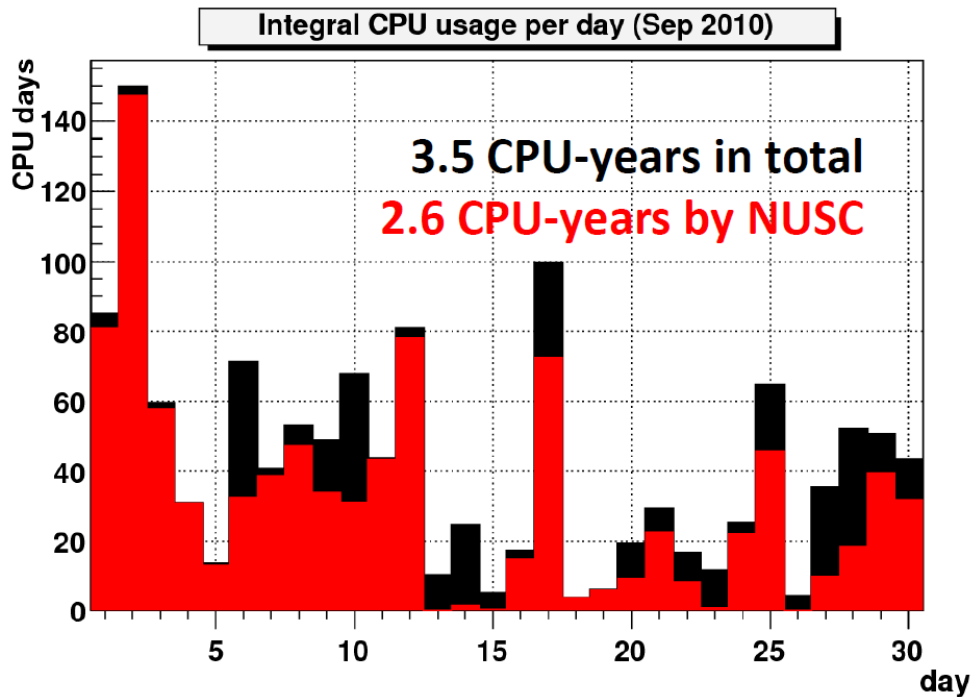
Результаты измерения массы
 ψ'' — мезона по сравнению с
результатами других групп



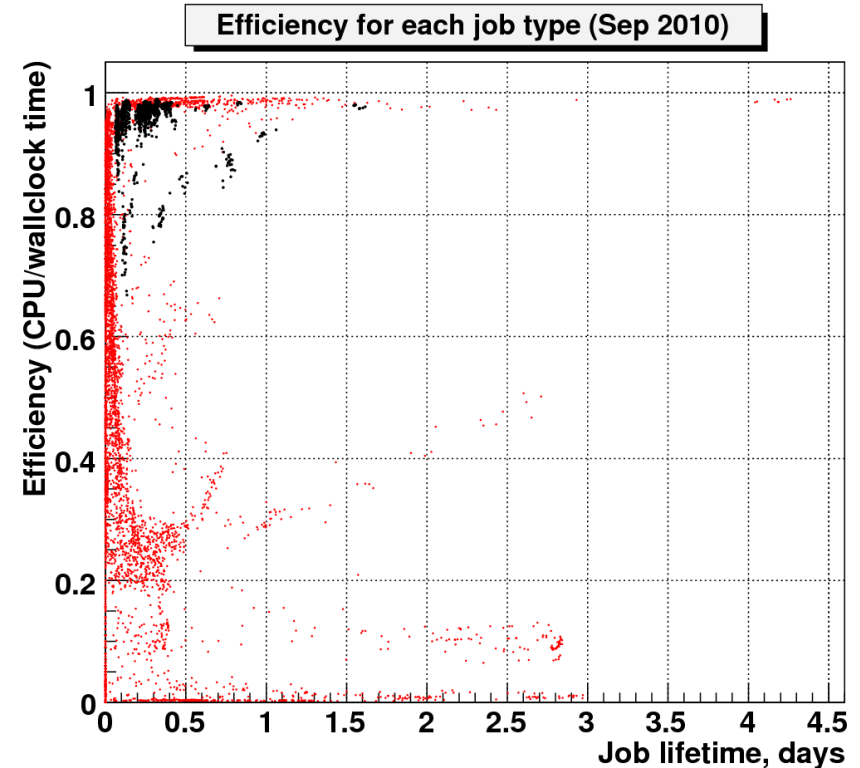
Обработка данных
эксперимента КЕДР

- Более 20 тыс. CPU-часов
- Запуск расчетов в виртуальных машинах.
- 128 виртуальных машин занято в обработке
- Данные хранятся на стороне ИЯФ, обработка — на стороне НГУ





Задачи обработки выполняются в виртуальных машинах. Были опробованы различные технологии виртуализации: VMWare, XEN, KVM. Выполнено сравнение эффективности



В настоящее время используется технология виртуализации KVM. Таким образом, задачи обработки выполняются на тех же узлах, что и другие задачи пользователей под управлением единой системы очередей



Использование кластера для предоставления как источник дополнительной вычислительной мощности

Использование кластера для предоставления как источник дополнительной вычислительной мощности по требованию

Это практический пример предоставления «облачных» услуг



(c) Alexander Zaytsev

VBI