

Семь дней из жизни суперкомпьютера

*Воеводин Вл.В., Антонов А.С., Жуматий С.А.,
Никитенко Д.А., Стефанов К.С.*

voevodin@parallel.ru

23 октября 2013 г., Softool, Москва

Суперкомпьютер “Ломоносов”: День Рождения



Peak Performance	1.7 Pflops
Linpack Performance	901.9 Tflops
Efficiency	53 %
Intel compute nodes	5 104
GPU compute nodes	1 065
PowerXCell compute nodes	30
Intel Xeon processors (X5570/X5670)	12 346
GPU processors (NVIDIA X2070)	2 130
x86 cores	52 168
GPU cores	954 240
RAM	92 TBytes
Interconnect	QDR 4x Infiniband / 10 GE
Data Storage	1.75 Pbytes, Lustre, NFS, ...
Operating System	Clustrx T-Platforms Edition
Total Area (supercomputer)	252 m ²
Power Consumption (supercomputer)	2.8 MW

День 1.

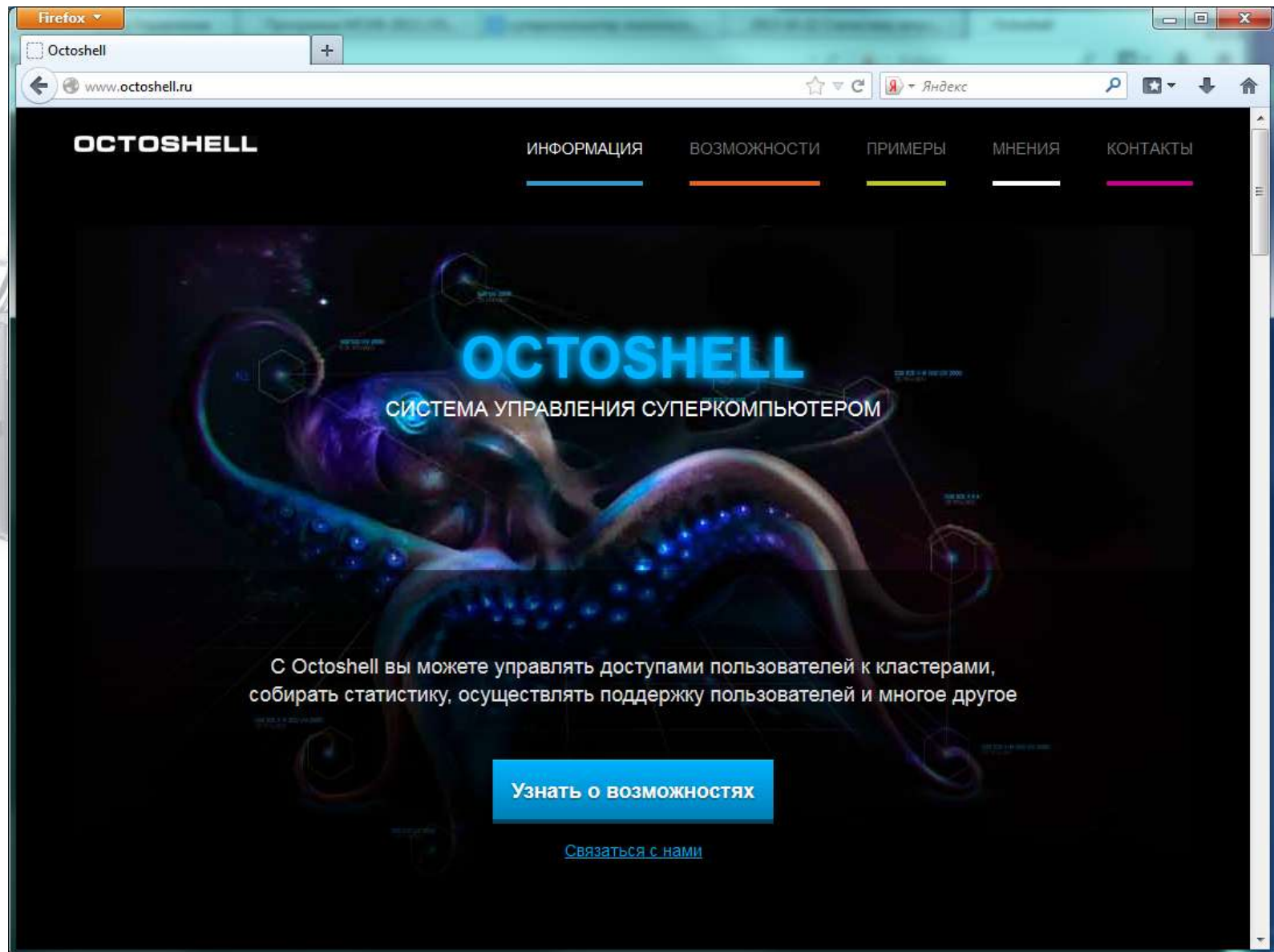
День административный
(пользователи, организации, проекты...)



	2009	2010	2011	2012
Пользователи, всего:	241	369	545	610
в том числе:				
из подразделений МГУ:	155	241	359	406
из институтов РАН:	53	77	110	121
из других организаций:	33	51	76	83
 Подразделения МГУ:	15	21	24	24
Институты РАН:	20	28	35	39
Другие:	19	24	34	39

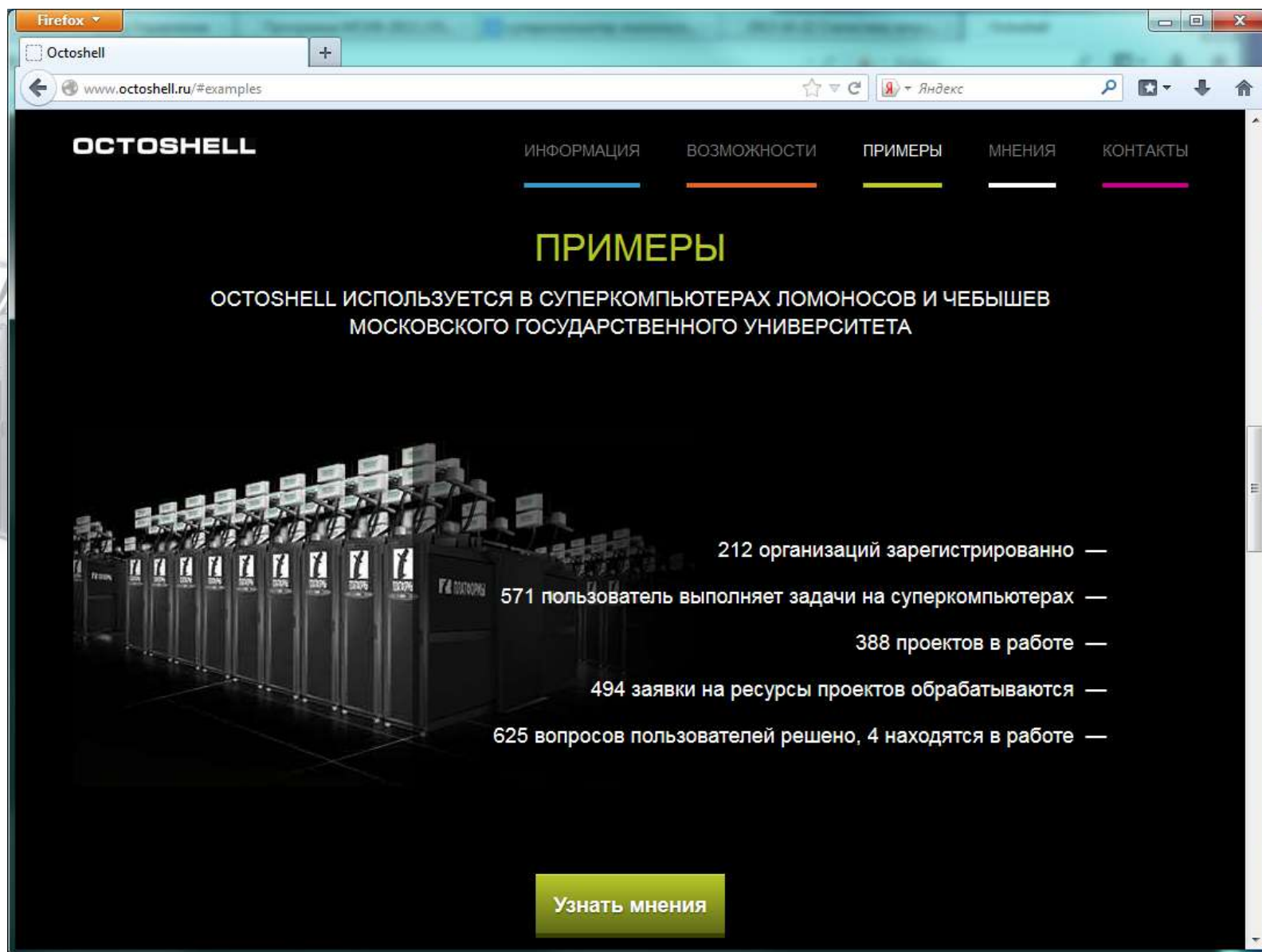
День 1.

День административный



День 1.

День административный



День 2.

День контроля за качеством
(эффективность работы суперкомпьютерного центра)



Суперкомпьютерный
центр

День 2.

День контроля за качеством (эффективность работы суперкомпьютерного центра)

Пользователи



Пользователи, Руководство, Сисадмины: работают на разных уровнях, имеют разные права, принимают разные решения.

День 2.

День контроля за качеством
(эффективность работы суперкомпьютерного центра)



Пользователи

Задания в очередях

Работающие приложения

HW/SW ресурсы

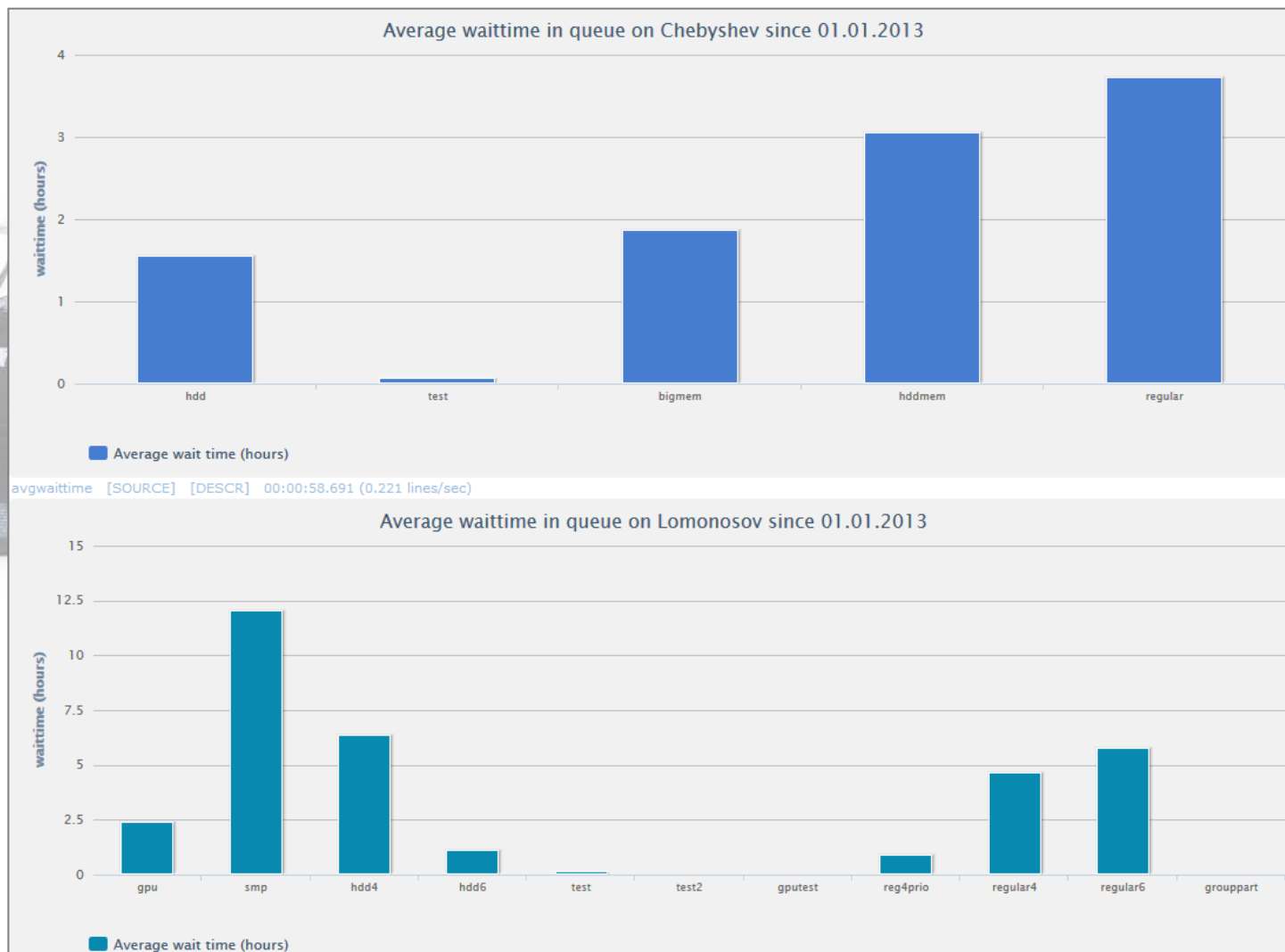
Пользователи – эффективность решения своих задач, иногда
эффективность приложений

Сисадмины – эффективность использования ресурсов

Руководство – эффективность работы суперкомпьютерного центра

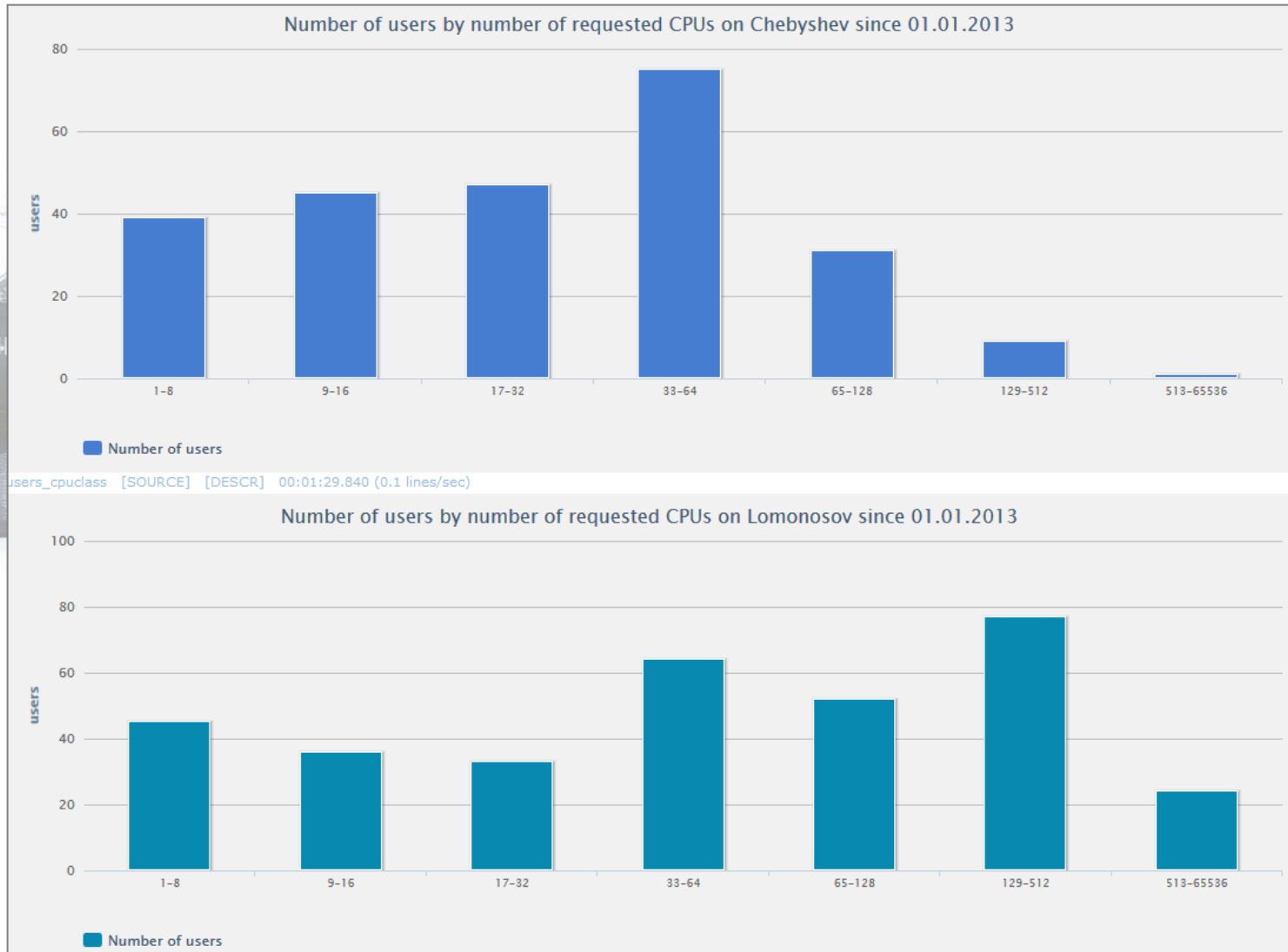
День 2.

День контроля за качеством (ежедневный отчет о структуре потока задач)



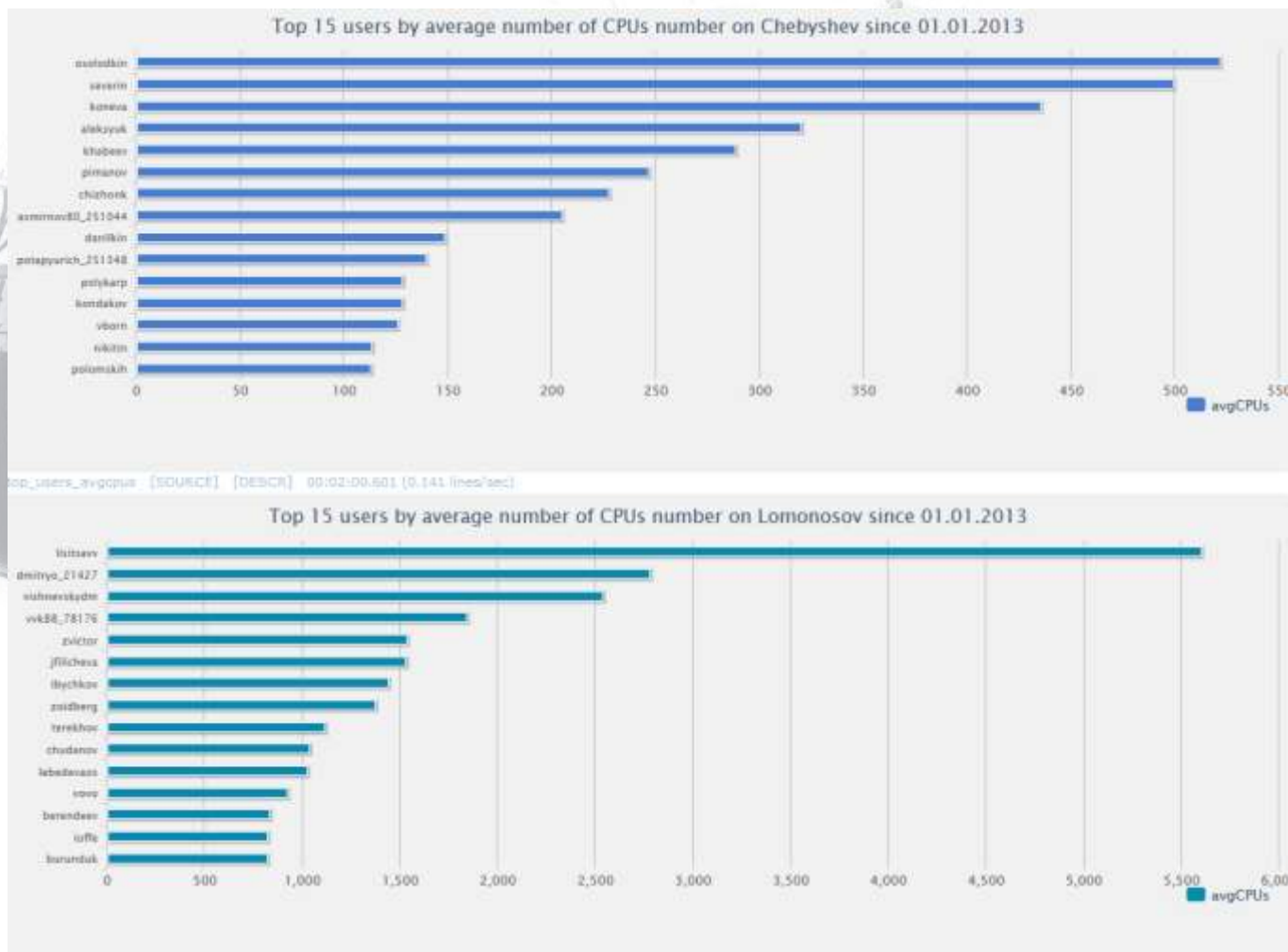
День 2.

День контроля за качеством (структура потока задач)



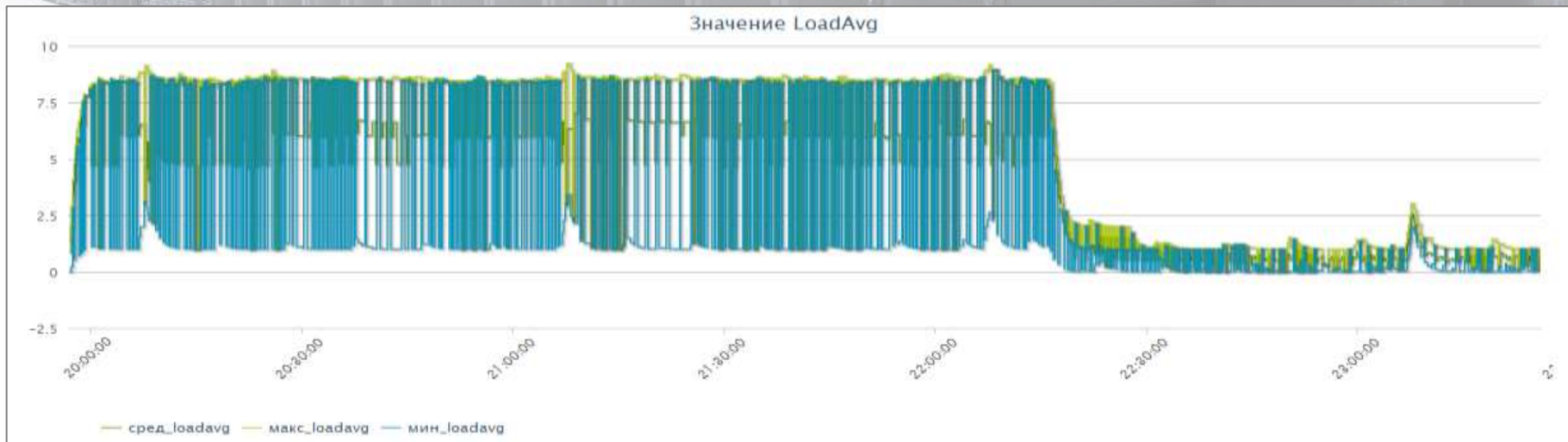
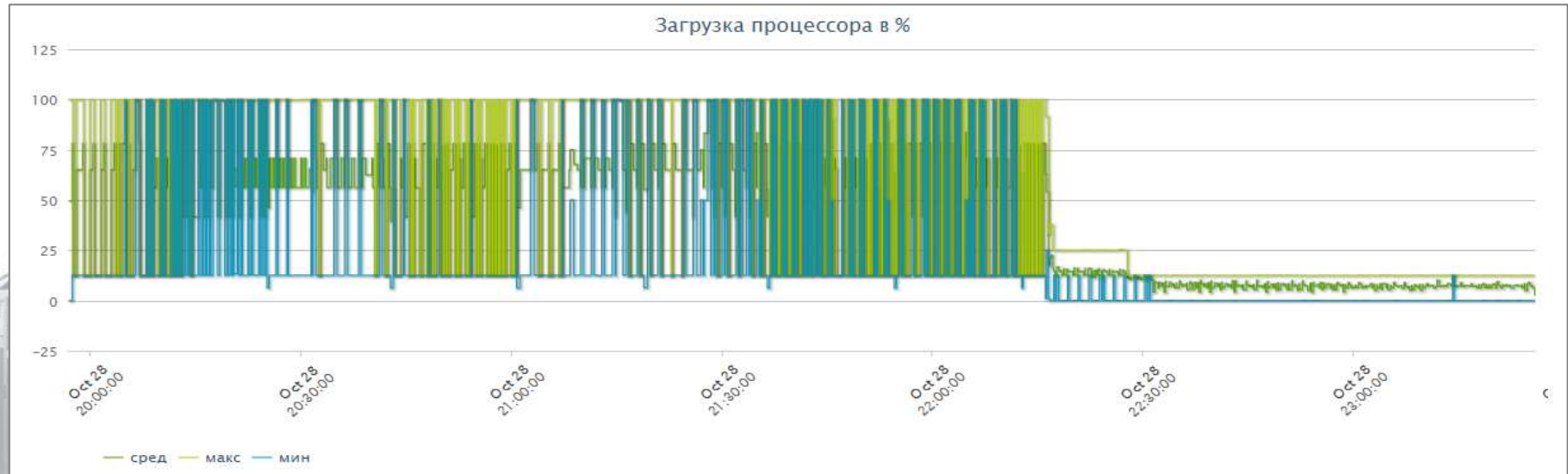
День 2.

День контроля за качеством (структура потока задач)



День 2.

День контроля за качеством (свойства отдельных приложений)



День 2.

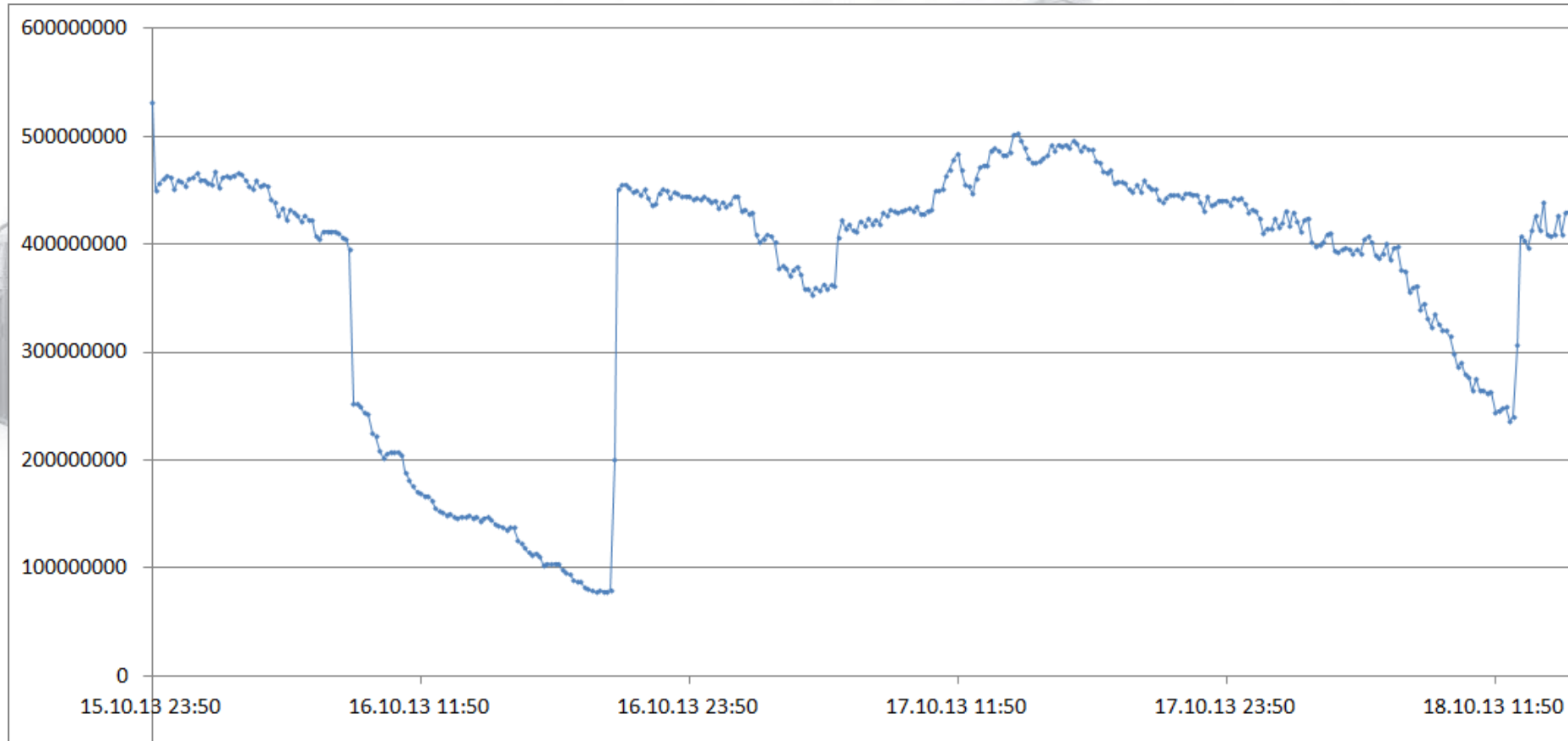
День контроля за качеством (эффективность работы суперкомпьютера в целом)



Средняя загрузка процессоров суперкомпьютера Чебышев за три дня

День 2.

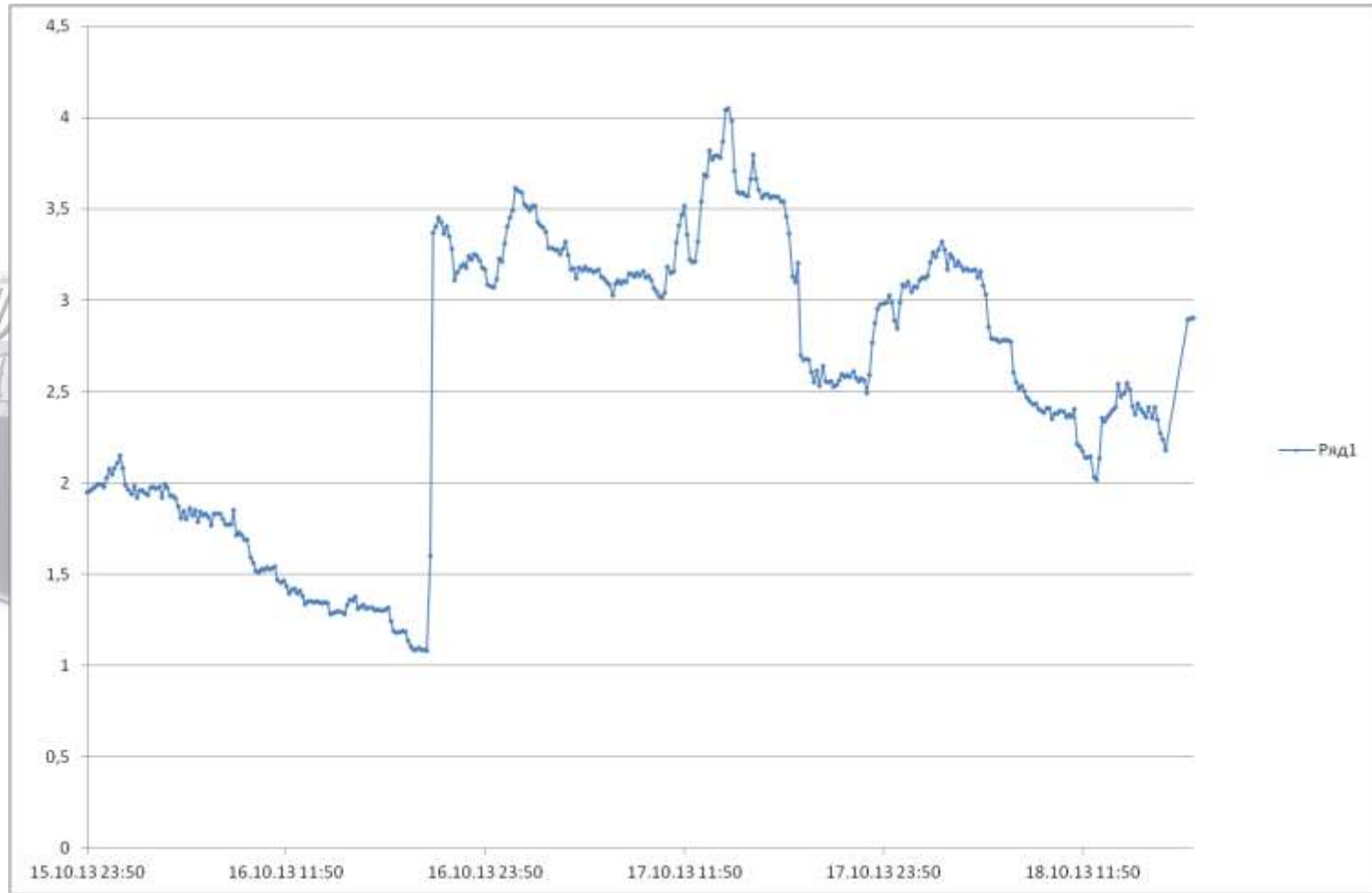
День контроля за качеством (эффективность работы суперкомпьютера в целом)



Средняя реальная производительность работы процессоров
суперкомпьютера Чебышев за три дня

День 2.

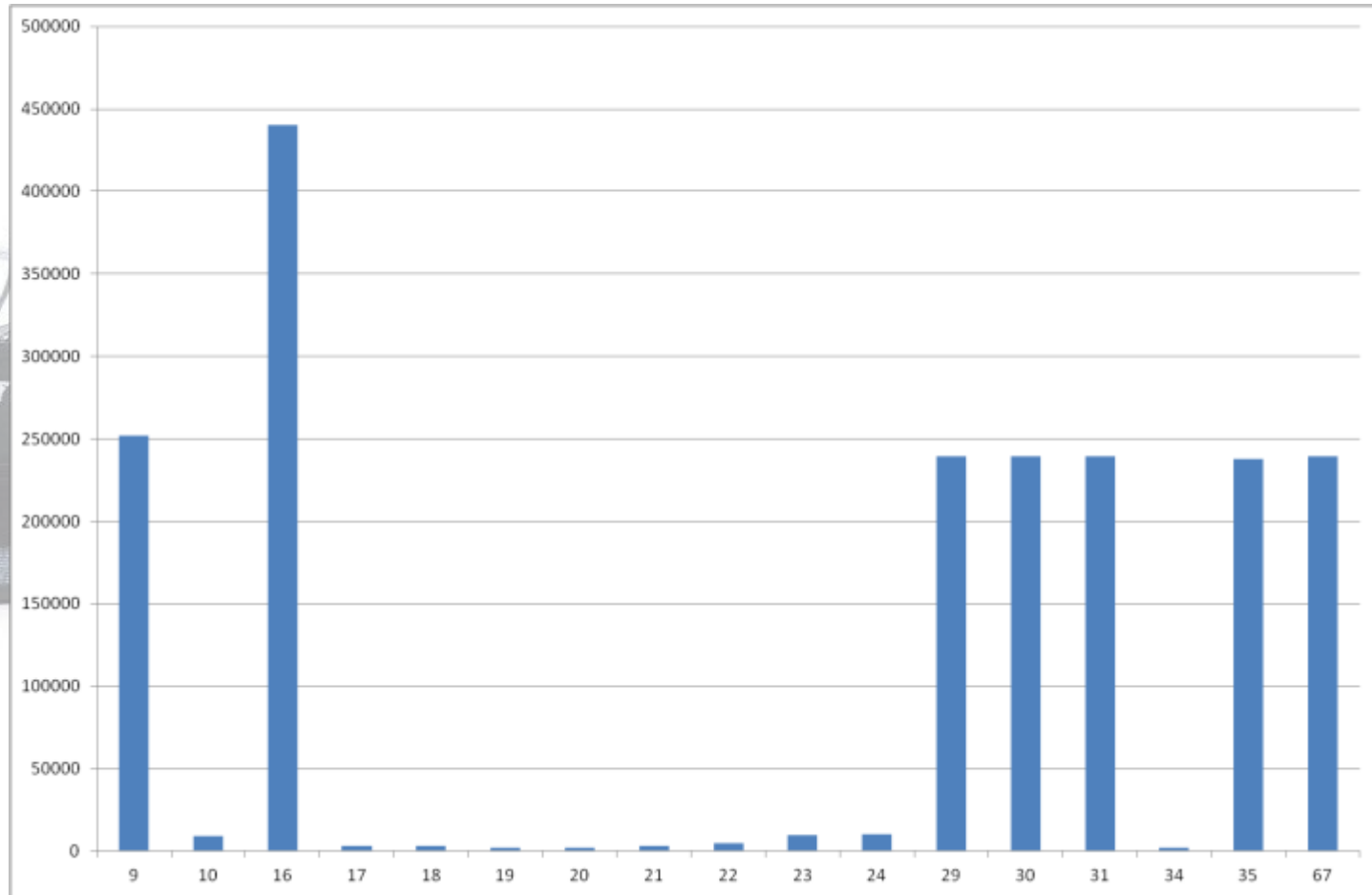
День контроля за качеством (эффективность работы суперкомпьютера в целом)



Среднее значение LoadAVG по узлам суперкомпьютера Чебышев за три дня

День 2.

День контроля за качеством (эффективность работы суперкомпьютера в целом)



Распределение больших значений LoadAVG за три дня

День 3.

День восстановления и обслуживания

Суперкомпьютер “Ломоносов”:

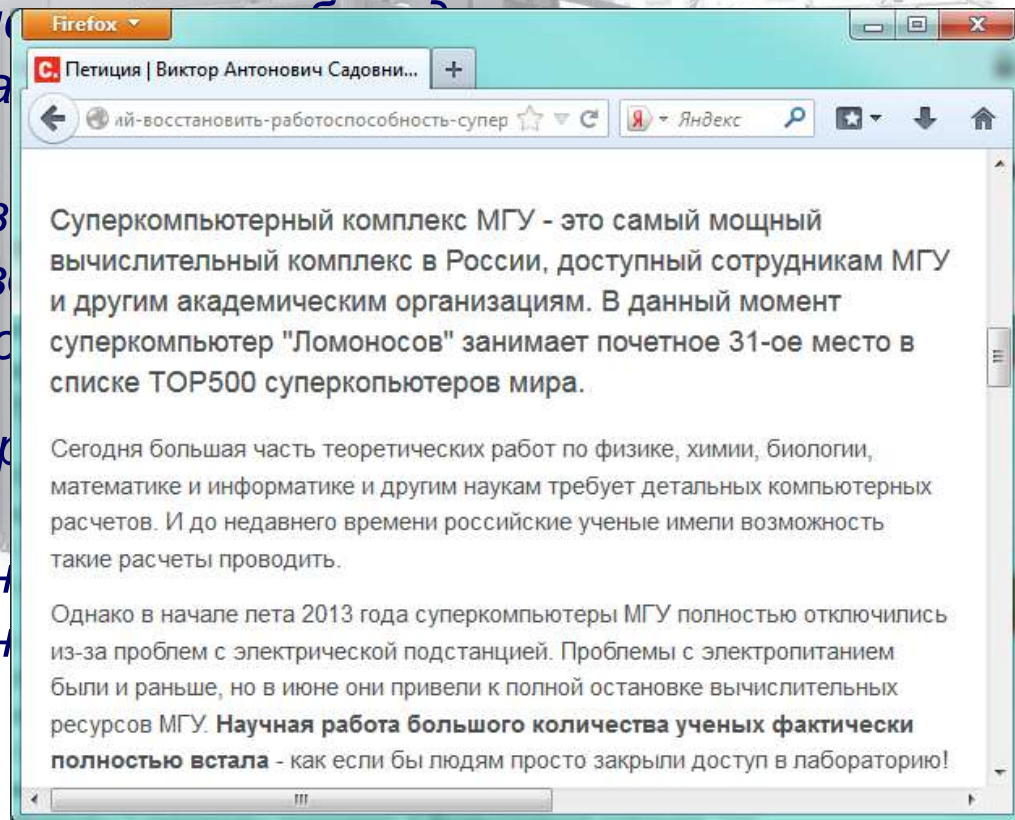
Техническая поддержка – более **10000** компонентов:

- мониторинг работоспособности оборудования,
- отключение и сдача неиспользуемого оборудования,
- гарантийное / постгарантийное обслуживание,
- планирование бюджета,
- отслеживание срока эксплуатации,
- прием, тестирование, ввод в эксплуатацию,
- статистика параметров работы.

Техническое обслуживание: срочные и плановые профилактические работы.

Мониторинг функционирования оборудования.

Мониторинг функционирования оборудования.



День 4.

День знаний

(студенты, академия, школы, тренинги, HPC Days at MSU...)

Суперкомпьютерный консорциум университетов России
МГУ имени М.В.Ломоносова

Летняя Суперкомпьютерная Академия

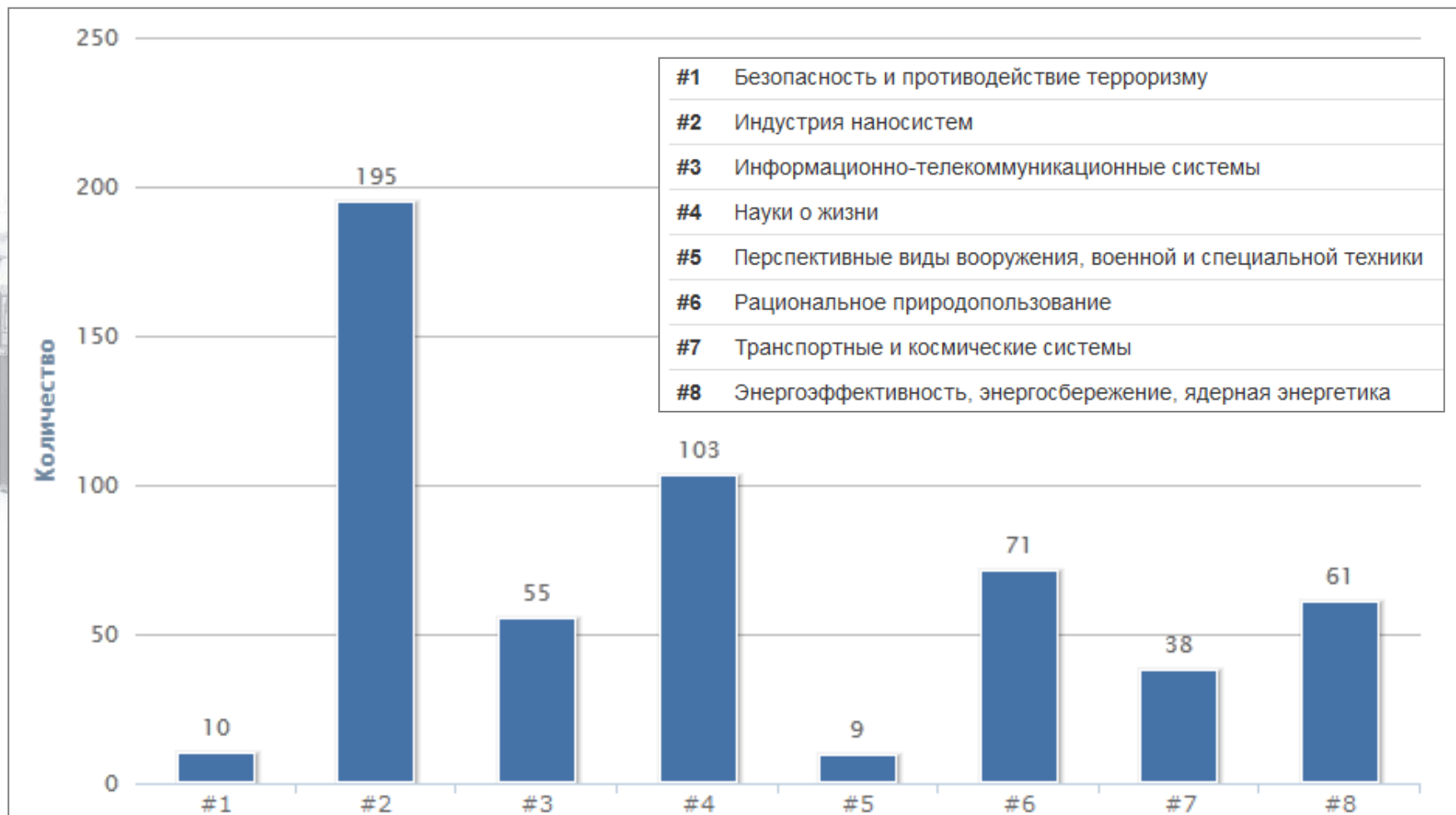
24 июня – 6 июля, 2013

- пленарные лекции ведущих зарубежных ученых и специалистов,
- 6 параллельных учебных треков,
- система тренингов по различным направлениям,
- слушатели: от студентов до профессоров.



День 5.

День подведения итогов (экспертиза отчетов, результаты)



*Распределение проектов по приоритетным направлениям
развития науки и технологий РФ*

День 5.

День подведения итогов (экспертиза отчетов, результаты)

Число опубликованных научных работ, в которых использованы данные, полученные на суперкомпьютерном комплексе МГУ

Число опубликованных статей по проекту за год	554
Число учебников и монографий	28
Число тезисов докладов	755
Всего	1337

Число конференций, на которых были представлены данные, полученные на суперкомпьютерном комплексе МГУ

Международные (за рубежом)	305
Международные (в России)	255
Российские	264
Всего	824

День 5.

День подведения итогов (экспертиза отчетов, результаты)

Число защищенных диссертаций, в которых использованы данные, полученные на суперкомпьютерном комплексе МГУ

Докторских	6
Кандидатских	38
Всего	44

Число учащихся, ведущих научную работу с использованием суперкомпьютерного комплекса МГУ

Студентов	188
Аспирантов	270
Всего	458

День 5.

День подведения итогов
(экспертиза отчетов, результаты)

ПРОЕКТЫ
ПРОЕКТЫ
ПРОЕКТЫ...



Моделирование быстропротекающих процессов в механике деформируемого твердого тела

Моссаковский П.А., Антонов Ф.К, Костырева Л.А., Инюхин А.В.: НИИ Механики МГУ имени М.В.Ломоносова

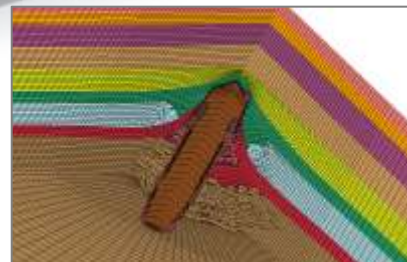
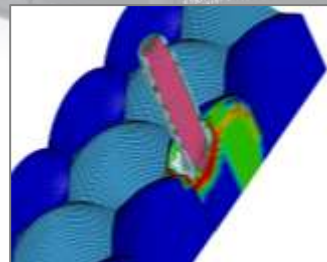
AREA Моделирование существенно нелинейных динамических процессов DRIVER . Задачи, связанные с быстропротекающими динамическими процессами (удар, пробивание, взрыв)

STRATEGY Для решения существенно нелинейных динамических задач применяется экспериментально-вычислительный подход, основанный на итерационной процедуре верификационного моделирования.

OBJECTIVE Разработка экспериментально-вычислительной методики моделирования существенно нелинейных динамических процессов, позволяющих получать решение с контролируемой точностью.

IMPACT . Возможность точного решения сложных задач, связанных с существенно нелинейными динамическим процессами.

USAGE Решение конкретных задач, связанных с моделированием различных аварийных ситуаций, которые могут приводить к катастрофическим последствиям.



Формирование квантовых наноструктур пониженной размерности на поверхности полупроводников

Музыченко Д.А.: физический факультет МГУ имени М.В. Ломоносова

AREA - поверхность твердого тела и физика наносистем

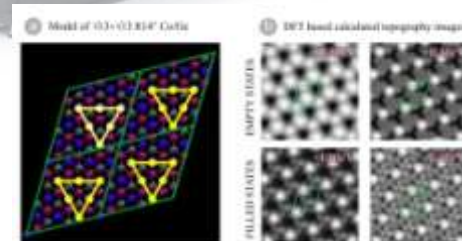
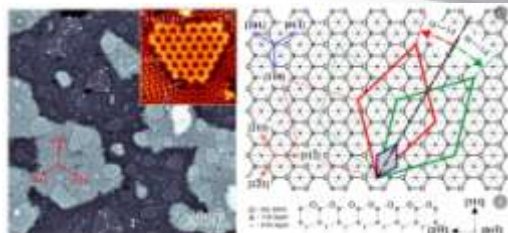
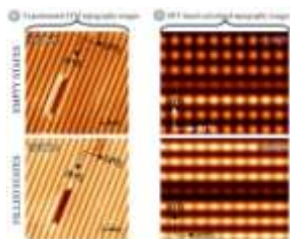
DRIVER - разработка перспективных устройств спинтроники и нанoeлектроники

STRATEGY - проект основан на уникальном сочетании взаимодополняющих экспериментальных и теоретических методах: низкотемпературной сканирующей туннельной микроскопии/спектроскопии и расчетах "из первых принципов" на основе теории функционала плотности

OBJECTIVE - создание на поверхности твердого тела новых квантовых спин-детерминированных систем атомных масштабов, детальное экспериментальное и теоретическое исследование их электронных и спиновых свойств

IMPACT - накопление фундаментальных знаний о формировании и свойствах квантовых низкоразмерных наносистемах, которые в перспективе могут использоваться в качестве логических элементов устройствах нанoeлектроники

USAGE - перспективно использование результатов проекта в устройствах спинтроники и в реализации квантовых вычислительных алгоритмов.



Исследование границы гелиосферы

Измоденов В.В., Проворникова Е.А., Д.В.Алексашов, Ю.Г.Малама: механико-математический факультет МГУ имени М.В.Ломоносова, Институт космических исследований РАН, Институт проблем механики им. А.Ю.Ишлинского РАН.

AREA численные методы в космической газовой динамике.

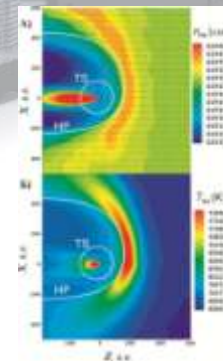
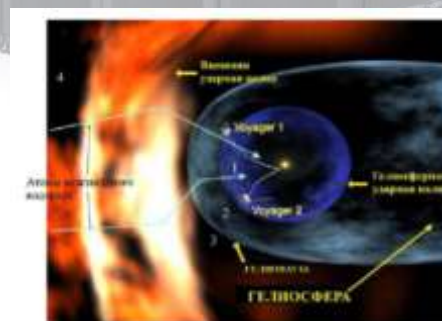
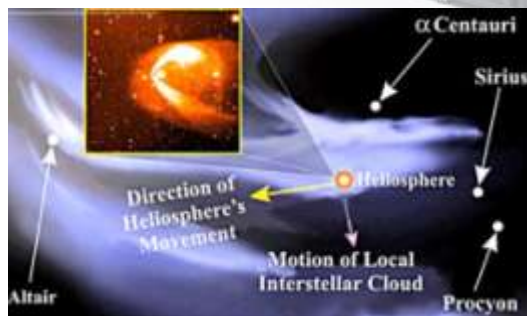
DRIVER Численное моделирование физических процессов на границе гелиосферы.

STRATEGY Разработка трехмерной самосогласованной кинетико-МГД модели гелиосферного ударного слоя.

OBJECTIVE Проект направлен на изучение фундаментальных свойств областей взаимодействия звездных ветров с межзвездной средой на примере взаимодействия солнечного ветра с локальной межзвездной средой.

IMPACT Эффективная модель, позволяющая подробно анализировать экспериментальные данные. Продвижение в области гелиосферных исследований.

USAGE интерпретация и предсказание новых экспериментальных данных.



Моделирование сезонных затоплений Волго-Ахтубинской поймы

Хоперсков А.В., Храпов С.С., Кузьмин Н.М., Писарев А.В., Кобелев И.А.,
Бутенко М.А., Дьяконова Т.А.: Волгоградский государственный университет

AREA Вычислительная гидродинамика

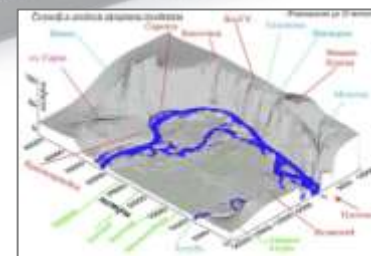
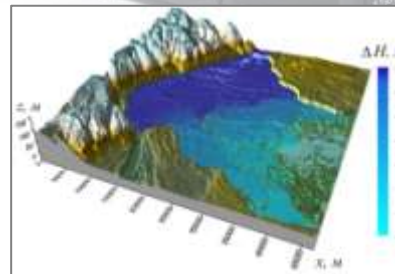
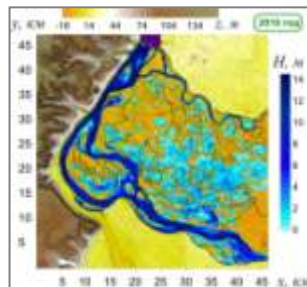
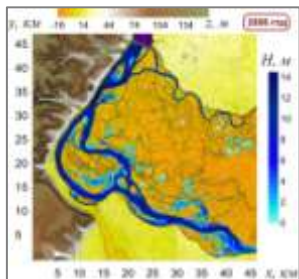
DRIVER Изучение сезонных затоплений на территории Волго-Ахтубинской поймы
и оптимизация работы гидросооружений

STRATEGY Построение численных моделей динамики поверхностных вод на
заданном рельефе местности

OBJECTIVE Многомерные нестационарные численные эксперименты позволяют
предсказывать состояние Волго-Ахтубинской поймы в зависимости от
метеорологических условий и вырабатывать оптимальный гидрологический
режим работы различных гидросооружений

IMPACT Построение оптимальных гидрографов позволит сохранить уникальный
природный ландшафт Волго-Ахтубинской поймы с учетом разумного баланса
экологических, природопользовательских и энергетических задач

USAGE Результаты расчетов должны использоваться федеральной комиссией по
формированию плановых весенних гидрографов для каскада ГЭС на Волге.



Компьютерное конструирование биоинспирированных функциональных наноструктур

Шайтан А.К., Халатур П.Г., Хохлов А.Р.: МГУ имени М.В. Ломоносова

AREA Нанотехнологии

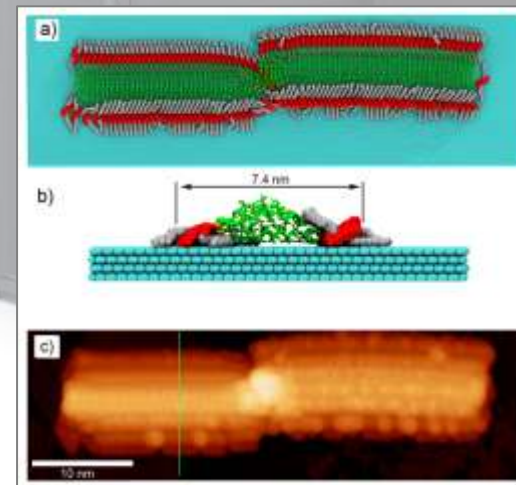
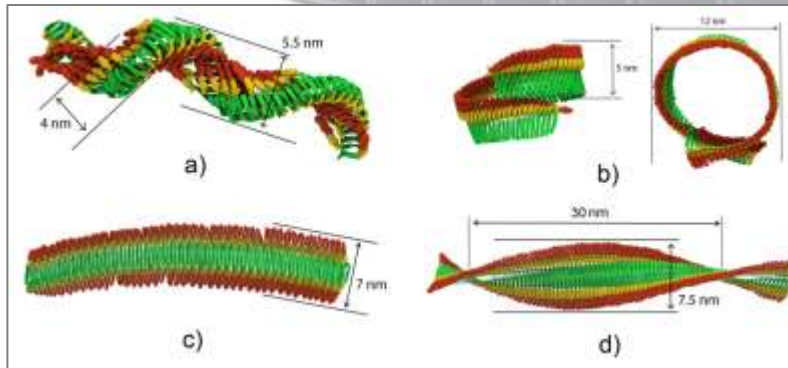
DRIVER Дизайн наноэлектронных устройств в области органической электроники

STRATEGY Моделирование методами молекулярной динамики и квантовой химии

OBJECTIVE Создание гибридных молекулярных соединений, которые могут самособираться в проводящие фибриллярные наноструктуры.

IMPACT Область органической электроники

USAGE Нанопровода для применений в области органической электроники



Численное моделирование ветроэнергетической установки при помощи FlowVision

Кузнецов К.В., Москалёв И.В.: ООО “ТЕСИС”

AREA Энергетика, возобновляемые источники энергии, вычислительная гидродинамика

DRIVER Определение характеристик ВЭУ путем численного моделирования и сравнение полученных результатов с экспериментальными данными

STRATEGY Моделирование течения и расчет характеристик ВЭУ с помощью программного комплекса вычислительной гидродинамики FlowVision с применением суперкомпьютеров МГУ.

OBJECTIVE Эффективное проектирование конкурентоспособных ветроэнергетических установок, позволяющее значительно сократить затраты на разработку аналогичных систем

IMPACT Быстрое развитие ветроэнергетики в труднодоступных районах страны, позволяющее значительно сократить затраты на их энергоснабжение

USAGE Уменьшение стоимости и повышение скорости и качества работ по проектированию ветроэнергетических систем



Исследование аэродинамических характеристик модели автомобиля с применением FlowVision

Аксенов А.А., Жлуктов С.В., Маркова Т.В., Москалев И.В.: ООО “ТЕСИС”

AREA Автомобилестроение и вычислительная гидродинамика

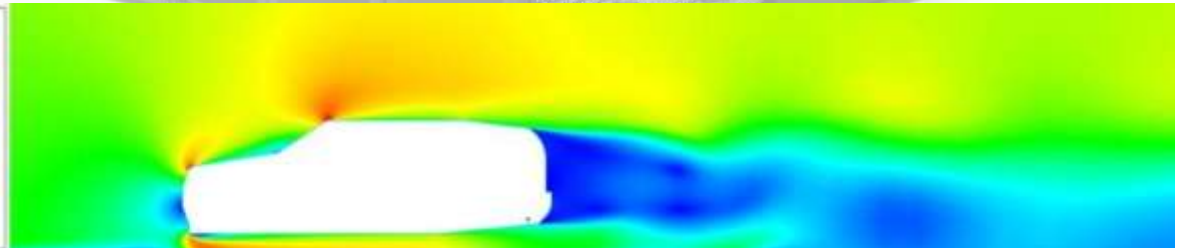
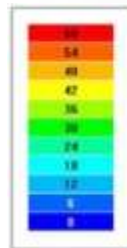
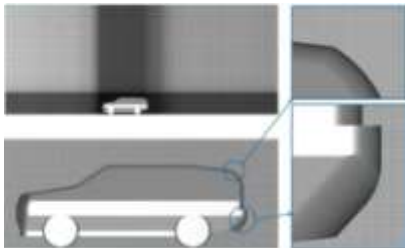
DRIVER Разработка методики расчета задач обтекания автомобиля.

STRATEGY Моделирование вихревого течения с помощью программного комплекса численной гидродинамики FlowVision с применением суперкомпьютеров МГУ.

OBJECTIVE Разработка оптимальной методики расчета задач обтекания автомобиля с целью получения достоверных аэродинамических характеристик.

IMPACT Данная методика позволит определять и улучшать аэродинамические характеристик автомобиля на стадии разработки и проектирования.

USAGE Уменьшение стоимости и времени на разработку и проектирование автомобиля. Улучшение аэродинамических характеристик автомобиля путем модернизация конструкции на стадии моделирования.



Повышение эффективности нагрева мягких тканей при облучении ультразвуком

Хохлова В.А., Бобкова С.М., Ильин С.А., Юлдашев П.В.: МГУ имени М.В. Ломоносова

AREA Терапевтические применения ультразвука

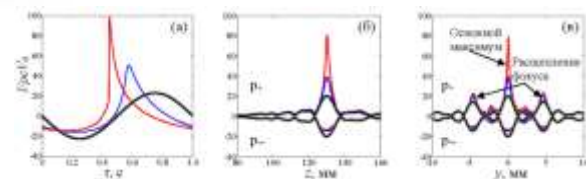
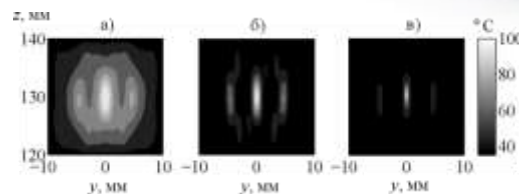
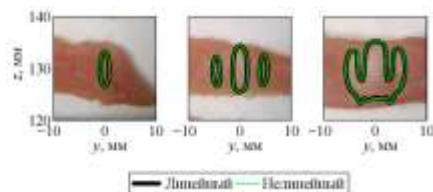
DRIVER Улучшение пространственной локализации и мощности теплового нагрева опухолевой ткани, находящейся за ребрами

STRATEGY Разработка методов создания специальных конфигураций работы многоэлементных терапевтических фазированных решеток и численное моделирование создаваемых ими полей для достижения требуемых результатов.

OBJECTIVE Разработка схемы отключения элементов решетки для проведения облучения через ребра. Моделирование нелинейных эффектов, связанных с распространением акустической волны за ребрами. Моделирование теплового поля с помощью решения уравнения теплопроводности и проведение оценки влияния нелинейных эффектов на эффективность нагрева целевой области

IMPACT Разработка новых методов эффективного облучения ультразвуком опухолевых тканей, находящихся за ребрами

USAGE Разрушение опухолевой ткани органов, находящихся за ребрами грудной клетки, без перегрева ребер.



Исследование акустики и аэродинамики авиавинтов

Титарев В.А.: ВЦ им. А.А. Дородницына РАН, Копьев В.Ф., Беляев И.В.: МК ЦАГИ

AREA вычислительная аэроакустика, вычислительная физика, высокопроизводительные вычисления

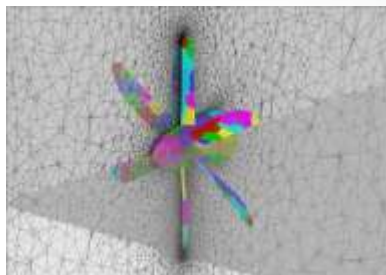
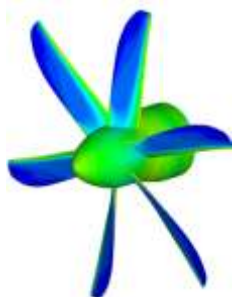
DRIVER Разработка новых конфигураций типа open rotor

STRATEGY Компьютерный эксперимент с использованием современных методов вычислительной физики и аэроакустики

OBJECTIVE Создание комплекса программ численного моделирования задач аэродинамики и акустики винтов, основанный на использовании схем типа Годунова во вращающейся системе координат и использовании современных суперкомпьютерных систем.

IMPACT Быстрое и аккуратное предсказание акустических свойств конфигураций типа open rotor на основе численного моделирования.

USAGE Создание и оценка эффективности новых двигателей



Разработка и применение новых методов в вычислительной аэродинамике и механике разреженных газов

Титарев В.А.: ВЦ им. А.А. Дородницына РАН

AREA вычислительная физика, высокопроизводительные вычисления

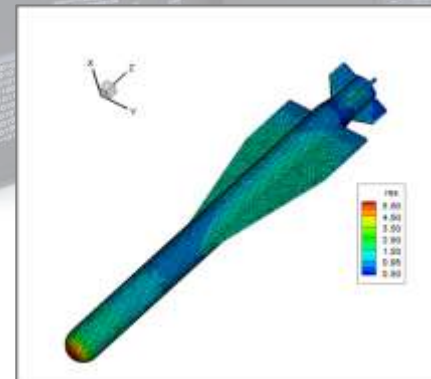
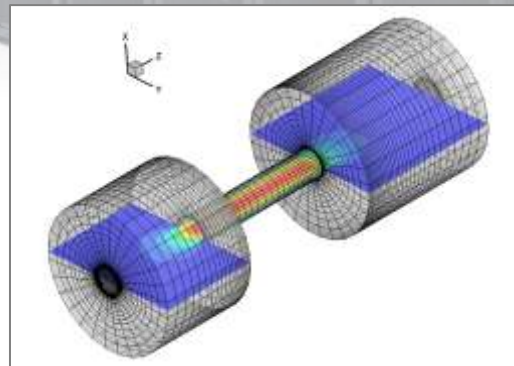
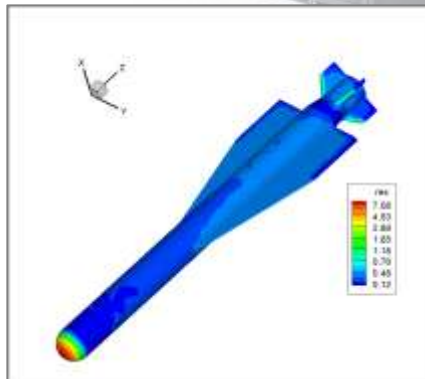
DRIVER Моделирование течений в микроустройствах и обтеканий спускаемых аппаратов

STRATEGY Компьютерный эксперимент с использованием современных методов вычислительной физики

OBJECTIVE Дальнейшее развитие комплекса программ численного моделирования задач механики разреженных газов, основанного на использовании оригинальных консервативных методов и современных суперкомпьютерных систем.

IMPACT Станет возможным быстрое и аккуратное моделирование течений разреженных газов в сложных геометриях.

USAGE Моделирование микро течений и обтекания космических аппаратов



Развитие мезомасштабной многопроцессорной атмосферной модели

Степаненко В.М.: НИВЦ МГУ, Географический ф-т МГУ

AREA - численное моделирование мезомасштабных атмосферных процессов

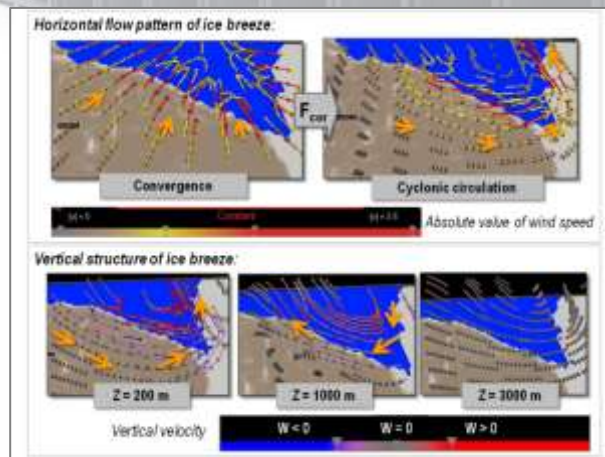
DRIVER - моделирование атмосферных циркуляций на многопроцессорных ЭВМ

STRATEGY - численное моделирование

OBJECTIVE - разработка параметризаций физических процессов, подсеточных для крупномасштабных моделей

IMPACT - повышение качества воспроизведения региональной специфики природно-климатических процессов в моделях прогноза погоды и климата

USAGE - использование новых параметризаций физических (подсеточных) процессов в моделях крупномасштабной динамики атмосферы и других мезометеорологических моделях



Разработка препаратов для терапии болезни Альцгеймера

Лущкина С.В., Махаева Г.Ф., Петров К.А., Резник В.С., Никольский Е.Е., Варфоломеев С.Д.: Институт биохимической физики им. Н.М. Эмануэля РАН
Институт физиологически активных веществ, РАН, Черноголовка
Институт органической и физической химии КазНЦ РАН, Казань

AREA - компьютерная разработка лекарственных препаратов

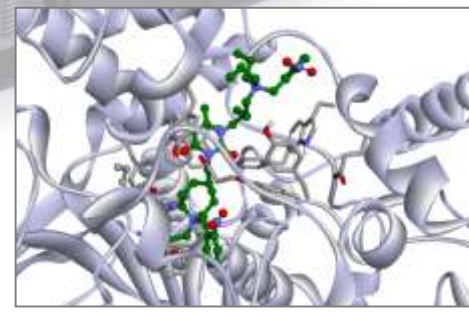
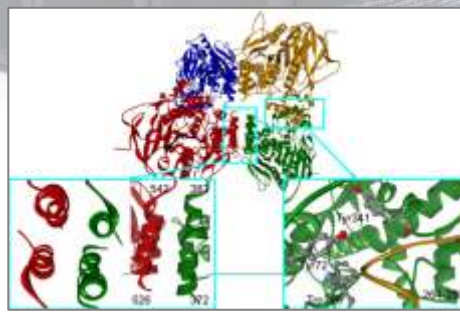
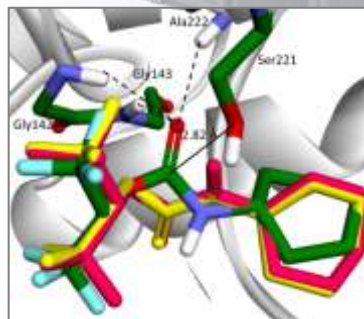
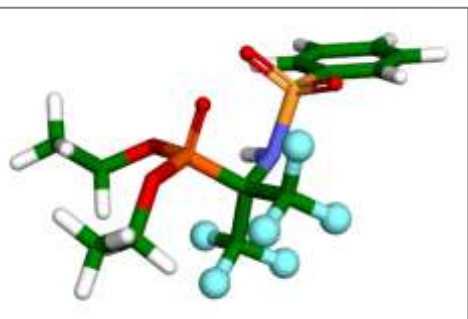
DRIVER - Исследование механизма действия существующих препаратов и разработка новых

STRATEGY - Исследование взаимодействия ингибиторов с холинэстеразами с использованием методов молекулярной динамики и молекулярного докинга

OBJECTIVE - Определение закономерностей действия существующих лекарственных препаратов терапии болезни Альцгеймера и разработка новых

IMPACT - разработка новых эффективных лекарственных препаратов с минимальными побочными эффектами

USAGE - терапия болезни Альцгеймера



Моделирование динамики белковой молекулы ферментов

Лущкина С.В., Peters J., Masson P.: Институт биохимической физики им. Н.М. Эмануэля РАН, Universite Joseph Fourier, Grenoble, France,
Institute of Structural Biology, Grenoble, France

AREA - компьютерное исследование биофизики макромолекул

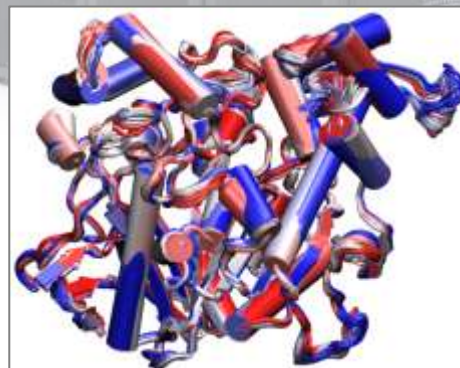
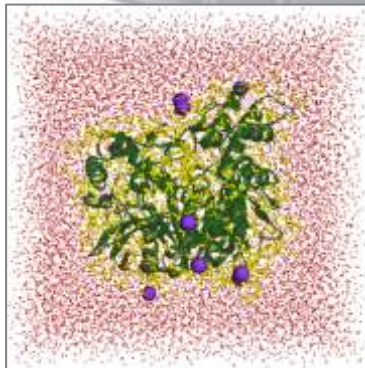
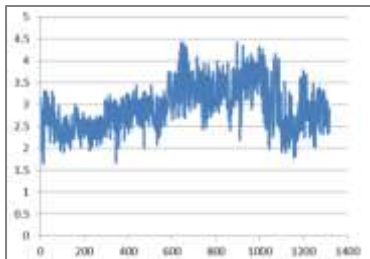
DRIVER - исследований особенностей конформационных изменений в белковых молекулах холинэстераз

STRATEGY - Молекулярно-динамическое исследование динамики белковых молекул холинэстераз

OBJECTIVE - изучение режима конформационных изменений в белковых молекулах холинэстераз и изменения радиуса канала, ведущего к активному центру

IMPACT - более глубокое понимание закономерностей функционирования холинэстераз

USAGE - использование при разработке препаратов для терапии болезни Альцгеймера



Турбулентная астрофизическая конвекция и магнито-конвекция в сжимаемых быстровращающихся сферических оболочках

Кузанын К.М., Обридко В.Н.: ИЗМИРАН

AREA - Трехмерное прямое численное моделирование астрофизической конвекции

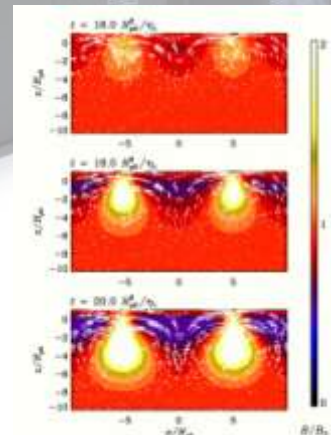
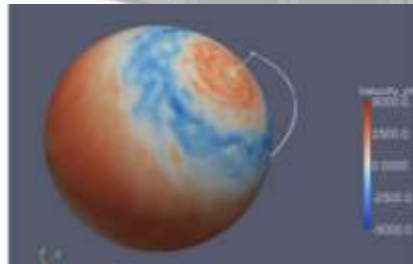
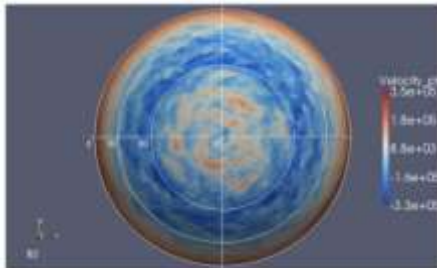
DRIVER - Моделирование турбулентной конвекции и магнито-конвекции и формирование структур в атмосферах гигантских планет и конвективных зонах Солнца и звезд

STRATEGY - Численное решение уравнений МГД, управляющих конвекцией и генерацией магнитного поля в быстровращающихся стратифицированных средах с разделением масштабов.

OBJECTIVE - понимание условий формирования структур в быстровращающихся турбулентных средах

IMPACT - Теоретическое понимание формирования спиральности солнечных магнитных полей

USAGE - Улучшение методов предсказания солнечной погоды



Изучение переноса ионов через биологические мембраны

Черепанов Д.А.: Институт физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина,
РАН, Мулкиджанян А.Я., Скулачев В.П.: ИФХБ МГУ имени М.В.Ломоносова

AREA использование суперкомпьютеров для разработки новых
фармакологических препаратов

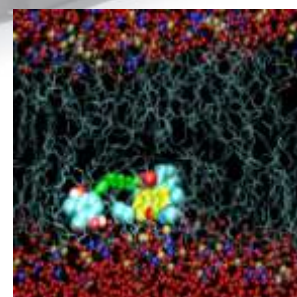
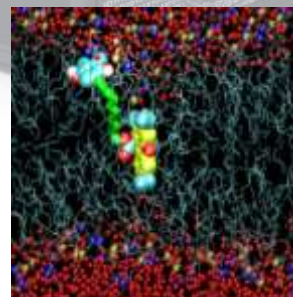
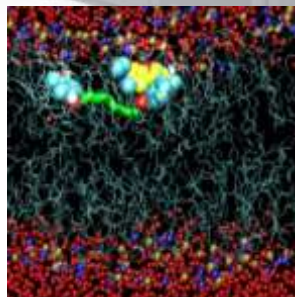
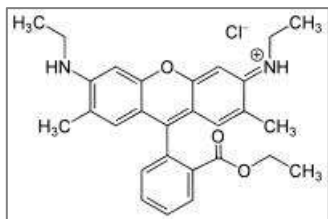
DRIVER изучение влияния химической природы проникающих ионов на механизм их
диффузионного переноса через липидную мембрану

STRATEGY применение потенциала средней силы в молекулярно-динамическом
моделировании

OBJECTIVE изучение механизма действия ионных антиоксидантов, способных
избирательно накапливаться во внутренних мембранах митохондрий и защищать
липиды этих мембран от перекисного окисления

IMPACT значительное сокращение стоимости экспериментальных исследований,
исследование молекулярного механизма действия фармакологического препарата.

USAGE разработка эффективных препаратов с направленным
фармакологическим действием



Суперкомпьютерное моделирование полиамфифилов

Халатур П.Г., ИНЭОС РАН, Хохлов А.Р., Иванов В.А.: МГУ имени М.В.Ломоносова,
Криксин Ю.А.: Институт прикладной математики РАН

AREA Науки о полимерах

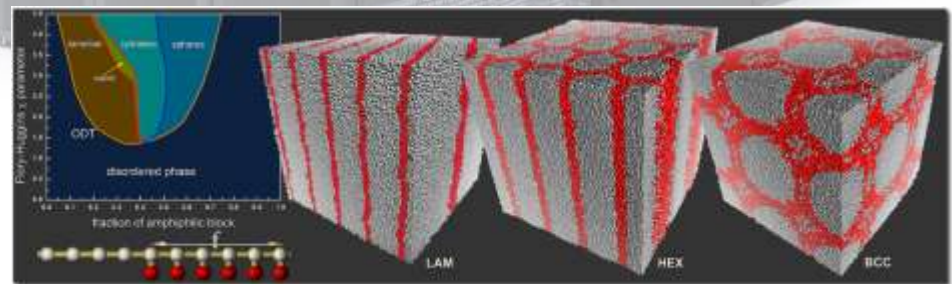
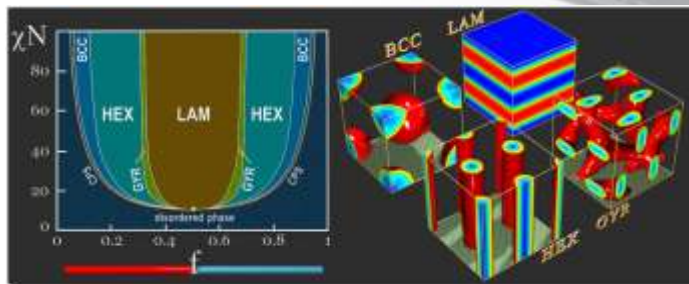
DRIVER Разработка новых наноматериалов на основе высокопроизводительных вычислений

STRATEGY Использование методов многомасштабного моделирования для изучения свойств самоорганизующихся умных полимеров

OBJECTIVE Фундаментальное понимание механизмов самоорганизации сополимеров

IMPACT Новые функциональные полимерные наноматериалы

USAGE Перспективные наноматериалы, солнечные батареи, плазменные и жидкокристаллические панели



Проектирование ультразвуковых томографов

Гончарский А.В., Овчинников С.Л., Романов С.Ю.: НИВЦ МГУ имени М.В.Ломоносова

AREA Ультразвуковая томография

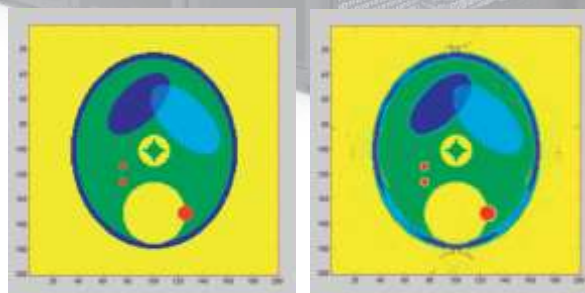
DRIVER Неразрушающие исследования внутренней структуры объекта.

STRATEGY Решение трехмерной нелинейной коэффициентной обратной задачи для волнового уравнения на суперкомпьютерах.

OBJECTIVE Изучение внутренней структуры объекта со сверхвысоким разрешением с помощью волнового зондирования.

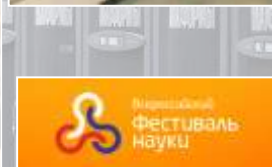
IMPACT Прорывные компьютерные технологии для неразрушающей диагностики с помощью волнового зондирования.

USAGE Ультразвуковая томография в медицине, волновое зондирование приповерхностных слоев Земли, промышленная томография.



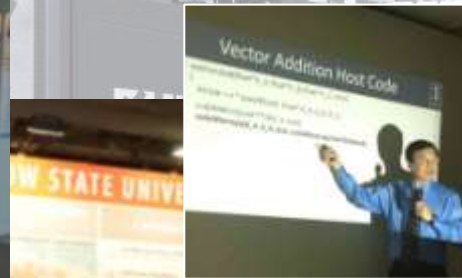
День 6.

День открытых дверей (экскурсии, публичные лекции, фестиваль науки...)



День 7.

День международный (интеграция с мировым суперкомпьютерным сообществом)



Семь дней из жизни суперкомпьютера

*Воеводин Вл.В., Антонов А.С., Жуматий С.А.,
Никитенко Д.А., Стефанов К.С.*

voevodin@parallel.ru

23 октября 2013 г., Softool, Москва