



## РАБОТЫ, ВЫПОЛНЕННЫЕ ПО ПРОГРАММЕ СО РАН “СУПЕРКОМПЬЮТЕР”

В рамках реализации целевой программы “Суперкомпьютер СО РАН” в 2009 году Институтом динамики систем и теории управления СО РАН проведен комплекс мероприятий, связанных с техническим обслуживанием вычислительных кластеров СКЦ (MBC-1000/16 и Blackford), плановой заменой оборудования, выработавшего свой ресурс, поддержкой пользователей (консультации, настройка пользовательского программного обеспечения, семинары).

В направлении развития материально-технической базы СКЦ сформировано техническое задание на создание в ИДСТУ СО РАН суперкомпьютера следующего поколения. При участии компаний “Т-Платформы” (российский разработчик суперкомпьютеров семейства СКИФ) и “Niagara Computers” подготовлены предложения по поставке в 2010 году кластерного вычислительного комплекса (КВК) со стартовой пиковой производительностью 10 TFlops. Выполнена реконструкция помещения на первом этаже блока ЭВМ для размещения КВК.

В направлении освоения перспективных параллельных архитектур составлено техническое задание и проведен конкурс на поставку вычислительного сервера **Supermicro SuperServer 7046GT-TRF** (рис. 9) на базе четырех графических процессоров **NVIDIA TESLA C1060** (960 процессорных ядер) общей пиковой производительностью **3,73 TFlops** (для операций с одинарной точностью) и **312 GFlops** (для операций с двойной точностью) с предустановленными средствами разработки (CUDA 2.2 Toolkit, SDK, MS Visual Studio Pro 2008) и программным обеспечением для выполнения математических расчетов (пакет Mathworks MATLAB, графический “движок” Jacket, позволяющий запускать стандартный код Matlab на графическом процессоре).



## Спецификация вычислительного сервера

№№	Наименование оборудования	Кол-во (шт.)
1.	Платформа SuperServer SYS-7046GT-TRF-TC4	1
2.	CPU Nehalem 4C X5570 2.93G 8M 6.4GT 95W	2
3.	RAM 2GB DDR3-1333 ECC REG RoHS	12
4.	HDD SEAGATE 500GB SATA 3.0Gb/s 7200 RPM 32MB 3.5"	8
5.	GPU NVIDIA ESLE C1060/RET 900-20607-2201-000 Memory 4096 MB Memory clock 800 MHz GPU Streaming Processor Core Qty 240 GPU Core Frequency 1.3 GHz Single Precision floating point performance (peak) 933 GFlops Double Precision floating point performance (peak) 78 GFlops Floating Point Precision IEEE 754 single & double	4
6.	Монитор HP KD911A4 LP2475w 24 inch LCD Monitor	1
7.	Программное обеспечение Windows server standart 2008	1
8.	Программное обеспечение Mathworks MATLAB International AcademicEdition conc.	1
9.	Программное обеспечение Jacket Academic + Jacket MGO Upgrade for 4 total GPUs Individual / Commercial	1
10.	Программное обеспечение Microsoft Visual Studio Professional 2008 Russian AcademicEdition	1



Рис. 9. Вычислительный сервер Supermicro SuperServer 7046GT-TRF

### Использование вычислительных мощностей СКЦ

В 2009 г. вычислительные ресурсы суперкомпьютерного центра использовались для решения задач по направлениям

- Молекулярная биология, филогенетика, биоинформатика.



- Физика высоких энергий, теория поля при конечной температуре.
- Физика твердого тела, квантовая химия.
- Дискретная математика, теория булевых функций, криптоанализ.
- Теория управления, оптимальное управление динамическими системами

### Примеры решаемых задач:

1. Анализ ДНК последовательностей динофлагеллят (групп микроорганизмов, которые составляют существенную часть сообществ морских и пресноводных одноклеточных) с помощью программного комплекса Parallel MrBayes-3.1.2. (Н. В. Анненкова, С. И. Беликов, ЛИИ СО РАН).

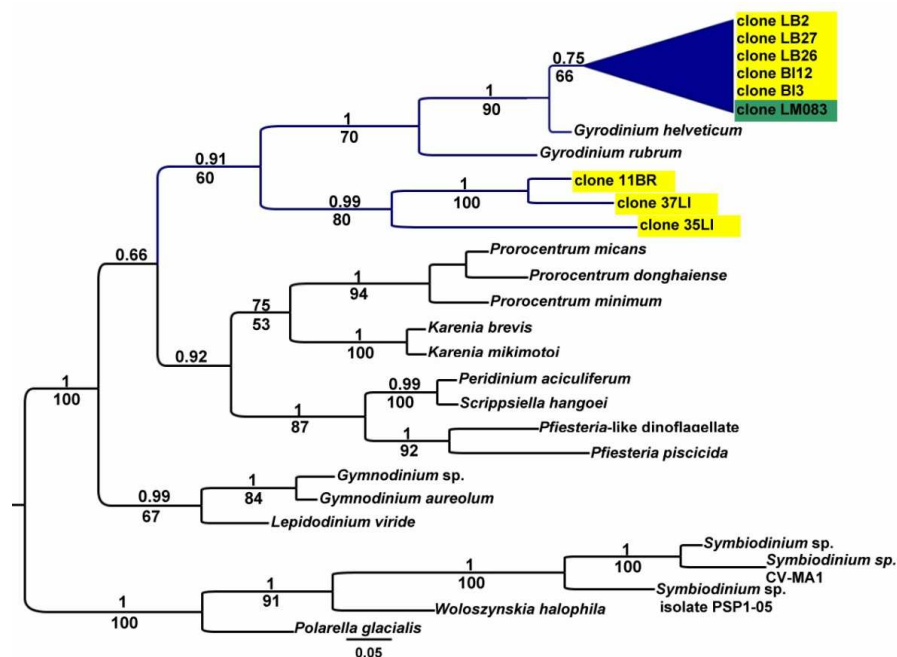


Рис. 10. Пример филогенетического дерева, построенного в результате анализа ДНК

2. Исследование популяционной структуры байкальских сиговых путем анализа полиморфизма микросателлитных локусов с использованием пакетов MIGRATE и LAMARC. Исследовались демографические параметры популяций, такие как эффективная численность, время дивергенции и миграционные потоки. (С.В. Курильчик, Л.В. Суханова, Т.В. Беломестных, ЛИИ СО РАН).



3. Анализ метагеномных данных методом таксономической классификации нуклеотидных последовательностей с помощью пакета TACOА. Поиск сходств исследуемой нуклеотидной или аминокислотной последовательности с известными генами методом BLAST-анализа. В качестве исходного набора данных был использован препарат метагеномной ДНК, полученный при пиросеквенировании микробного сообщества, ассоциированного с байкальской диатомовой водорослью *Synedra Acus*. (Ю.П. Галачьяни, ЛИН СО РАН).

4. Исследование в рамках кварковой модели уравнения состояния сильно-взаимодействующей материи при конечной температуре (рис.3). Для расчетов использовалась нелокальная модель типа Намбу - Иона-Лазинио. Вычислены  $1/N_c$  поправки к кварковому конденсату, массе и константе слабого распада пиона, а также проверены известные низкоэнергетические теоремы. (А.Е. Раджабов, ИДСТУ СО РАН).

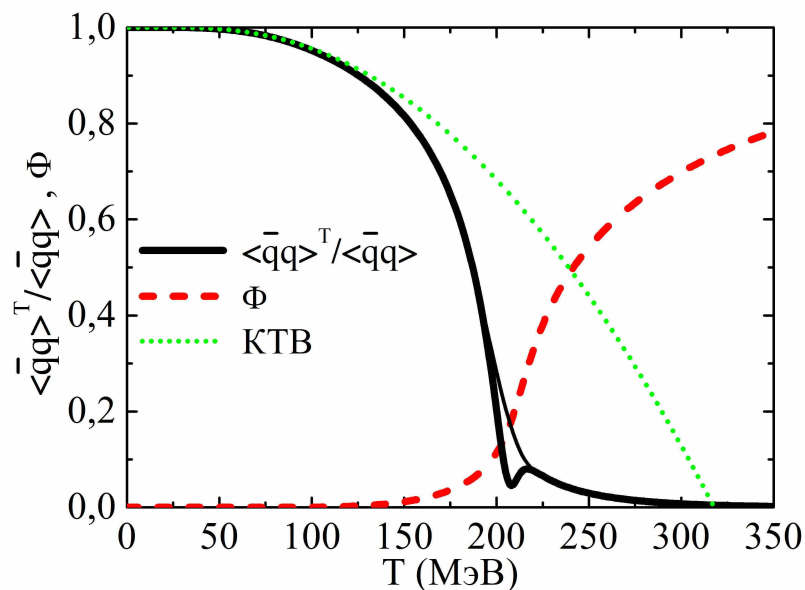


Рис. 11. Поведение кваркового конденсата нормированного на его вакуумное значение (сплошная черная линия) и вакуумного ожидания Поляковской петли (красная пунктирная линия) как функции температуры. Тонкая сплошная линия соответствует интерполяции между областями применимости модели при малых и больших температурах. Зеленая точечная линия – предсказания киральной теории возмущений.



5. Исследование точечных дефектов в кристаллах щелочных и щелочно-земельных фторидов методами квантовой химии: изучение сцинтилляционных свойств кристаллов щелочно-земельных фторидов с примесями Се и Cd, выяснение оптических и электронных характеристик примесных центров; моделирование переходов с переносом заряда в тех же кристаллах с примесями Eu, Yb и других редких земель; установление пространственных конфигураций, оптических и магниторезонансных свойства фотохромных центров в тех же кристаллах с примесями Y, La и Lu; проверка существования слабо-нецентральных конфигураций автолокализованных экситонов в кристаллах  $\text{CaF}_2$ ,  $\text{SrF}_2$ ,  $\text{BaF}_2$ , уточнение конфигураций околопримесных экситонов и механизмов их образования и распада; серия расчетов кислородсодержащих центров в кристалле  $\text{CaF}_2$  (рис.4); исследование роли примесного иона  $\text{Cu}^+$  в процессах запасания энергии ионизирующих излучений и термостимулированной люминесценции в кристаллах фторида лития. Расчеты, относящиеся к спектроскопии колебательно-вращательных состояний молекул: исследование спин-селективной адсорбции молекул воды на поверхности кристалла  $\text{MgO}$ , расчет адиабатического потенциала взаимодействия в комплексе йодистого водорода и ксенона (рис.5). Расчеты межзеренных границ в кристаллах кремния с целью выявления связи между пространственным строением границы и ее электронными свойствами, а также ее влиянием на транспортные свойства кристалла. (Е.А. Раджабов, А.С. Мысовский, А.С. Мясникова, В.Ю. Лазебных, А.С. Паклин, ИГХ СО РАН).

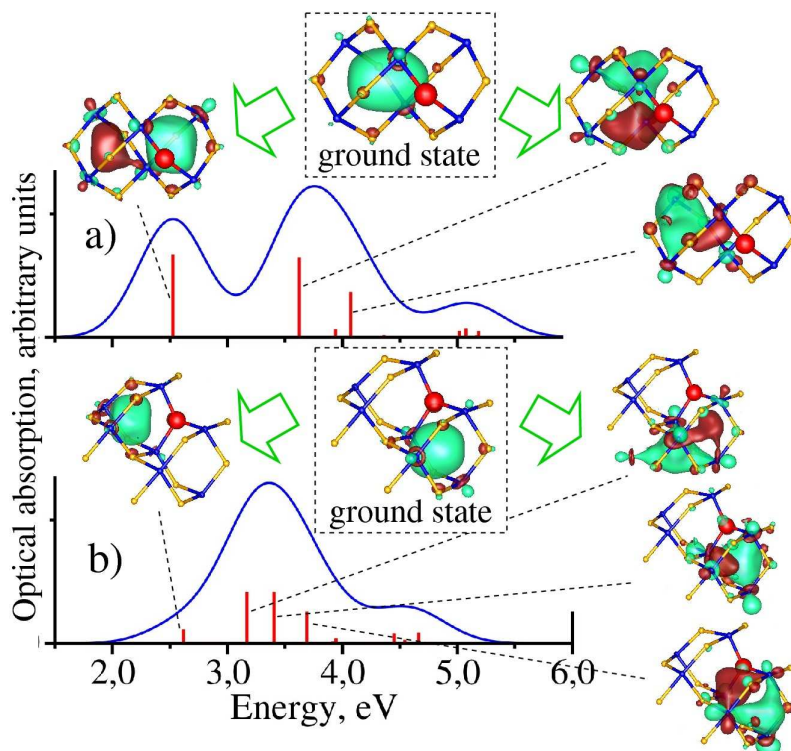


Рис. 12. Рассчитанный спектр оптического поглощения  $F_{2A}^+(O^{2-})$ -центра в кристалле  $CaF_2$

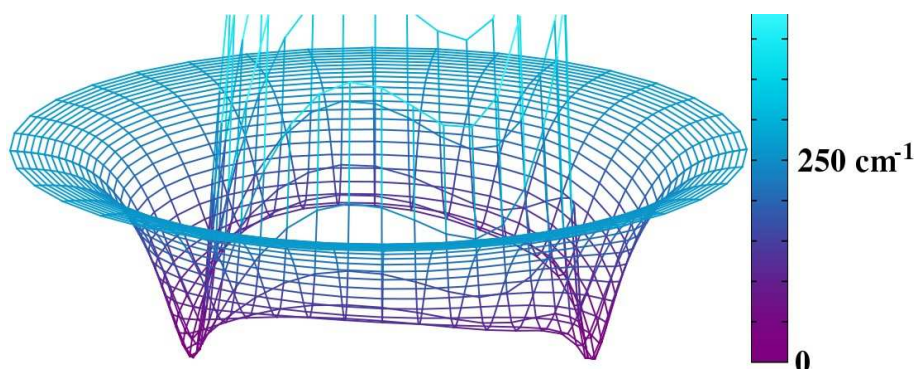


Рис. 13. Потенциал взаимодействия молекулы HI с атомом Хе

6. Разработка новых скоростных методов и параллельных алгоритмов (включая гибридные SAT+ROBDD) для решения задач обращения дискретных криптографических функций. Решение задачи криптоанализа известных систем поточного шифрования, в частности, генератора ключевого потока шифра А5/1. (А.А. Семенов, О.С. Заикин, Д.В. Беспалов, А.С. Игнатьев, ИДСТУ СО РАН).



7. Разработка методов и инструментальных средств автоматизации параллельного решения дискретных задач в булевых ограничениях, позволяющих в автоматическом режиме строить булеву модель, осуществлять ее декомпозицию на основе анализа структуры булевой функции с последующим параллельным вычислением остаточных функций на кластере. (Г.А., Опарин, В.Г. Богданова, Н.Г. Макеева, ИДСТУ СО РАН).

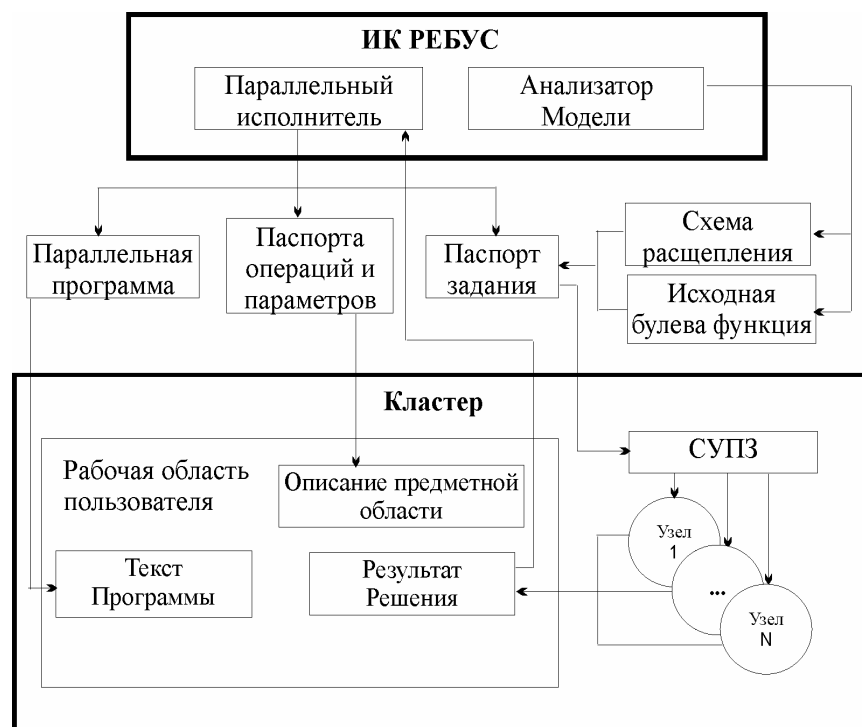


Рис. 14. Схема проведения параллельных вычислений с использованием инструментального комплекса РЕБУС.

Среднемесячная загрузка кластера Blackford, вошедшего 31.03.2009 в 10-ю редакцию списка 50 самых мощных компьютеров России и стран СНГ (ТОП-50), варьировалась в течение года в пределах от 70 до 95%.

### Публикации по результатам исследования

1. Анненкова Н. В., Беликов С. И., Белых О. И. Обнаружение динофлагеллят рода *Gyrodinium* в фитопланктоне и губках озера Байкал путём анализа нуклеотидных последовательностей // “Водоросли: проблемы таксономии, эко-



- логии и использование в мониторинге”. Изд-во: “Наука”, Екатеринбург, 2010. [подготовлена к печати]
2. Annenkova N. V., Lavrov D. V., Belikov S. I. Dinoflagellates associated with freshwater sponges from the ancient lake Baikal [подготовлена к печати в журнале Protist].
  3. Лазебных В. Ю., Мысовский А. С., Сеница Л. Н. Теоретическое исследование эффекта спин-селективной адсорбции молекул воды на поверхности MgO // Опт. и спектр., 2009, т. 107, No 4, с. 606–611.
  4. Mysovsky A., Radzhabov E. The refinement of self-trapped exciton structure in CaF<sub>2</sub> and SrF<sub>2</sub> crystals: an ab initio study // Book of abstracts of SCINT-2009, June 8-12, Jeju, Korea, p. 43.
  5. Myasnikova A., Radzhabov E., Mysovsky A. Anomalous emission and charge-transfer processes in MeF<sub>2</sub> (Me=Ca, Sr, Ba) doped by Eu and Yb impurities from ab initio calculations // Book of abstracts of SCINT-2009, June 8-12, Jeju, Korea, p. 148.
  6. Lazebnykh V. Yu., Mysovsky A.S. Quantum-chemical and quasiclassical calculation of spin-selective adsorption of water molecule on MgO surface // Book of abstracts of HighRus-2009 (XVIth symposium on High resolution molecular spectroscopy), July 5-10, Listvyanka, Irkutsk, Russia, p. 47.
  7. Mysovsky A.S., Kazakov K.V., Bulanin M.O. Calculation of rovibrational transition intensities in weakly bounded HI-Xe complex // Book of abstracts of HighRus-2009 (XVIth symposium on High resolution molecular spectroscopy), July 5-10, Listvyanka, Irkutsk, Russia, p. 82.
  8. Mysovsky A., Radzhabov E. The refinement of self-trapped excitons structure in CaF<sub>2</sub> and SrF<sub>2</sub> crystals: an ab initio study, IEEE Transactions on Nuclear Science (DOI 10.1109/TNS.2009.2036431) [принята в печать].
  9. Blaschke D., Buballa M., Radzhabov A.E., Volkov M.K. “Nonlocal quark model beyond mean field and QCD phase transition” // Proceedings of 3rd joint Interna-





tional HADRON STRUCTURE '09 Conference, Tatranská Štrba, Slovakia, August 30 - September 3, 2009, arXiv:0910.4314.

10. Игнатьев А.С., Семенов А.А., Беспалов Д.В. Двоичные диаграммы решений в параллельных алгоритмах обращения дискретных функций // Труды Международной научной конференции ПАВТ'09. Нижний Новгород, ННГУ, 2009. - С. 688-696.
11. Посыпкин М.А., Заикин О.С., Беспалов Д.В., Семенов А.А. Решение задач криптоанализа поточных шифров в распределенных вычислительных средах // Труды ИСА РАН, 2010, №46. [принята в печать]
12. Опарин Г.А., Богданова В.Г., Макеева Н.Г. Инструментальная среда параллельного решения систем булевых уравнений // Современные технологии. Системный анализ. Моделирование. ИрГУПС. – 2009. - №3. – С. 62-68.

### **Подготовка специалистов**

В 2009 году на базе ИДСТУ СО РАН открыта специализация “Параллельные и распределенные вычислительные системы” для студентов 3-5 курсов ИМЭИ ИГУ, обучающихся по специальности “Математическое обеспечение и администрирование информационных систем”. Сотрудниками СКЦ читаются курсы лекций: “Параллельные вычислительные системы”, “Программирование систем с распределенной памятью”, “Программирование систем с общей памятью” и др. Практические занятия проводятся с использованием кластера МВС-1000/16.