

# Свободный доступ к суперкомпьютерам для решения исследовательских задач

Владимир Руцкий,  
гр. 6057/2

# Вычислительный комплекс НИВЦ МГУ

- Возможно бесплатное использование в целях фундаментальных научных исследований и обучения
  - «Ломоносов», СКИФ-МГУ «Чебышёв», «ГрафИТ!»
- Порядок использования:
  - регистрация, получение доступа
  - копирование исходных кодов и сборка программы на компьютере кластера
  - запуск программы
  - получение результатов

# Регистрация

1. Организация отправляет официальное письмо с запросом на имя ректора МГУ
  - Для студенческой группы необходимо предварительное согласование с Вл.В.Воеводиным
2. Организация генерирует ключ для доступа и регистрирует его на сайте кластера
  - Правила использования:
    - индивидуальное использование
    - использование только в заранее обговоренных целях
    - обязательна ссылка на НИВЦ МГУ в публикуемых статьях
    - регулярная отчетность
    - ответственное и уважительное использование ресурсов

# Кластер с точки зрения пользователя

- Кластер - одна головная машина (front-end) + множество узлов кластера
- Пользователю предоставляется удалённый доступ по SSH на головную машину
- Пользователь
  - 1) копирует на головную машину исходные коды,
  - 2) компилирует,
  - 3) ставит программу в очередь на запуск
- Программа запускается на узлах кластера
  - программы, запущенные на разных узлах, могут взаимодействовать друг с другом посредством пересылки сообщений
  - у всех узлов логически общая домашняя директория

# Сборка программ и библиотеки

- Доступные компиляторы:
  - **Intel Fortran/C++ Compiler 11**
  - **GNU Compiler Collection 4.1.2** (C, C++, Fortran)
  - **Portland Group Inc. Compilers 7.2-3** (C, C++, Fortran)
  - **PathScale Compiler Suite 3.2** (C, C++, Fortran)
- Параллелизация:
  - **MPI** - mvarich (реализация mpich для коммуникационной сети InfiniBand)
  - **OpenMP**
- Доступные библиотеки:
  - **Intel Math Kernel Library** - модули линейной алгебры (BLAS, Sparse BLAS, LAPACK, Sparse Solvers), функции быстрых преобразований Фурье, векторные математические функции, генераторы случайных чисел; **SCALAPACK**, **Intel TBB**, **Firefly (PC-GAMESS)**, **Abinit**

# Запуск программ

- Используется система управления заданиями Cleo
  - планирование запуска задач
  - сборка статистики, состояния системы и публикация онлайн
- Запуск программы с MPI в Cleo
  - `mpirun -np N [-maxtime T] program <параметры программы>`
  - Вывод при работе программы помещается в файл в домашнем каталоге

# Очередь задач ВКС

## СУПЕРКОМПЬЮТЕР СКИФ МГУ "ЧЕБЫШЕВ"

Очередь regular, количество пользователей: 25

всего задач	56	всего процессоров	4152
работает	51	занято	3800
ожидает	5	свободно	0
в т.ч. заблокировано	2	заблокировано	352

id	задача	пользователь	процессоров	состояние	время работы и предельное время
272724	RedOctoberRW_IL.out	tiurina	1	выполняется, приоритет 10	разрешено до 4 октября (вторник) 03:57
272725	RedOctoberRW_IL.out	tiurina	1	выполняется, приоритет 10	разрешено до 4 октября (вторник) 03:57
272785	a.out	ilyushin	1	выполняется, приоритет 10	разрешено до 4 октября (вторник) 05:14
272786	a.out	ilyushin	1	выполняется, приоритет 10	разрешено до 4 октября (вторник) 05:15
272787	a.out	ilyushin	1	выполняется, приоритет 10	разрешено до 4 октября (вторник) 05:14
272788	a.out	ilyushin	1	выполняется, приоритет 10	разрешено до 4 октября (вторник) 05:15
272789	a.out	ilyushin	1	выполняется, приоритет 10	разрешено до 4 октября (вторник) 05:14
272790	a.out	ilyushin	1	выполняется, приоритет 10	разрешено до 4 октября (вторник) 05:15
272791	a.out	ilyushin	1	выполняется, приоритет 10	разрешено до 4 октября (вторник) 05:14
272792	a.out	ilyushin	1	выполняется, приоритет 10	разрешено до 4 октября (вторник) 05:14
272793	a.out	ilyushin	1	выполняется, приоритет 10	разрешено до 4 октября (вторник) 05:15
272794	a.out	ilyushin	1	выполняется, приоритет 10	разрешено до 4 октября (вторник) 05:15
272803	RedOctoberRW_IL.out	tiurina	1	выполняется, приоритет 10	разрешено до 4 октября (вторник) 05:16
272963	vasp	eliseevaa	32	выполняется, приоритет 10	разрешено до 4 октября (вторник) 09:44
272967	vasp	eliseevaa	32	выполняется, приоритет 10	разрешено до 4 октября (вторник) 09:47
273039	pb8restart.bat	aleshin	1	выполняется, приоритет 10	разрешено до 4 октября (вторник) 09:47
273298	solver1	korik	1	выполняется, приоритет 10	разрешено до 3 октября (понедельник) 23:05
273578	DragReduction1	vodois	16	выполняется, приоритет 10	разрешено до 5 октября (среда) 02:33

# Распределение задач по узлам

СУПЕРКОМПЬЮТЕР СКИФ МГУ "ЧЕБЫШЕВ"

Состояние узлов в очереди regular: всего процессоров 4152; занято 3800; свободно 0; заблокировано 352

узел	задачи								узел	задачи				
node-01-01	polykarp-274011	polykarp-274011	polykarp-274011	polykarp-274011	polykarp-274011	polykarp-274011	polykarp-274011	polykarp-274011	node-06-01	awh-274148	awh-274148	awh-274148	awh-274148	awh-274148
node-01-02	blocked	blocked	blocked	blocked	blocked	blocked	blocked	blocked	node-06-02	awh-274148	awh-274148	awh-274148	awh-274148	awh-274148
node-01-03	nilov-274046	nilov-274046	nilov-274046	nilov-274046	nilov-274046	nilov-274046	nilov-274046	nilov-274046	node-06-03	awh-274082	awh-274082	awh-274082	awh-274082	awh-274082
node-01-04	awh-274148	awh-274148	awh-274148	awh-274148	awh-274148	awh-274148	awh-274148	awh-274148	node-06-04	vodois-273578	vodois-273578	vodois-273578	vodois-273578	vodois-273578
node-01-05	awh-274089	awh-274089	awh-274089	awh-274089	awh-274089	awh-274089	awh-274089	awh-274089	node-06-05	titarev-274091	titarev-274091	titarev-274091	titarev-274091	titarev-274091
node-01-06	severin-273585	severin-273585	severin-273585	severin-273585	severin-273585	severin-273585	severin-273585	severin-273585	node-06-06	awh-274089	awh-274089	awh-274089	awh-274089	awh-274089
node-01-07	awh-274089	awh-274089	awh-274089	awh-274089	awh-274089	awh-274089	awh-274089	awh-274089	node-06-07	awh-274148	awh-274148	awh-274148	awh-274148	awh-274148
node-01-08	awh-274148	awh-274148	awh-274148	awh-274148	awh-274148	awh-274148	awh-274148	awh-274148	node-06-08	awh-274082	awh-274082	awh-274082	awh-274082	awh-274082
node-01-09	awh-274082	awh-274082	awh-274082	awh-274082	awh-274082	awh-274082	awh-274082	awh-274082	node-06-09	kuzubovaa-274141	kuzubovaa-274141	kuzubovaa-274141	kuzubovaa-274141	kuzubovaa-274141
node-01-10	severin-274055	severin-274055	severin-274055	severin-274055	severin-274055	severin-274055	severin-274055	severin-274055	node-06-10	golovin-274133	golovin-274133	golovin-274133	golovin-274133	golovin-274133
node-02-01	kuzubovaa-274141	kuzubovaa-274141	kuzubovaa-274141	kuzubovaa-274141	kuzubovaa-274141	kuzubovaa-274141	kuzubovaa-274141	kuzubovaa-274141	node-07-01	awh-274089	awh-274089	awh-274089	awh-274089	awh-274089
node-02-02	awh-274148	awh-274148	awh-274148	awh-274148	awh-274148	awh-274148	awh-274148	awh-274148	node-07-02	awh-274082	awh-274082	awh-274082	awh-274082	awh-274082
node-02-03	polykarp-274011	polykarp-274011	polykarp-274011	polykarp-274011	polykarp-274011	polykarp-274011	polykarp-274011	polykarp-274011	node-07-03	severin-274055	severin-274055	severin-274055	severin-274055	severin-274055
node-02-04	blocked	blocked	blocked	blocked	blocked	blocked	blocked	blocked	node-07-04	nikitin-274161	nikitin-274161	nikitin-274161	nikitin-274161	nikitin-274161
node-02-05	awh-274082	awh-274082	awh-274082	awh-274082	awh-274082	awh-274082	awh-274082	awh-274082	node-07-05	awh-274148	awh-274148	awh-274148	awh-274148	awh-274148
node-02-06	awh-274148	awh-274148	awh-274148	awh-274148	awh-274148	awh-274148	awh-274148	awh-274148	node-07-06	prostova-274028	prostova-274028	prostova-274028	prostova-274028	prostova-274028
node-02-07	severin-273892	severin-273892	severin-273892	severin-273892	severin-273892	severin-273892	severin-273892	severin-273892	node-07-07	ztsv-274156	ztsv-274156	ztsv-274156	ztsv-274156	ztsv-274156
node-02-08	kuzubovaa-274141	kuzubovaa-274141	kuzubovaa-274141	kuzubovaa-274141	kuzubovaa-274141	kuzubovaa-274141	kuzubovaa-274141	kuzubovaa-274141	node-07-08	blocked	blocked	blocked	blocked	blocked
node-02-09	ztsv-274156	ztsv-274156	ztsv-274156	ztsv-274156	ztsv-274156	ztsv-274156	ztsv-274156	ztsv-274156	node-07-09	titarev-274127	titarev-274127	titarev-274127	titarev-274127	titarev-274127
node-02-10	blocked	blocked	blocked	blocked	blocked	blocked	blocked	blocked	node-07-10	kuzubovaa-274141	kuzubovaa-274141	kuzubovaa-274141	kuzubovaa-274141	kuzubovaa-274141



# Источники

- Суперкомпьютерный комплекс при НИВЦ МГУ:  
<http://parallel.ru/cluster/>
- Также должны быть доступны кластеры:
  - Кафедра «Математическое и программное обеспечение высокопроизводительных вычислений» ФМФ СПбГПУ  
<http://hpc.phmf.spbstu.ru/>
  - Центр коллективного пользования «Наукоёмкие компьютерные технологии для нужд науки, образования и промышленности на основе высокопроизводительных вычислительных систем» СПбГПУ  
<http://ckp.spbstu.ru/>