



НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
УНИВЕРСИТЕТ

Цифровой блок НИУ ВШЭ

СУПЕРКОМПЬЮТЕР «CHARISMA» НИУ ВШЭ: О ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫХ ЗАДАЧАХ, АДМИНИСТРИРОВАНИИ, РАЗВИТИИ И РАСШИРЕНИИ

Начальник отдела суперкомпьютерного моделирования:
Костенецкий Павел Сергеевич, к.ф.-м.н., доцент.

Москва, 01.12.2020

Семинар НИУ ВШЭ по высокопроизводительным вычислениям



ХАРАКТЕРИСТИКИ СУПЕРКОМПЬЮТЕРА НИУ ВШЭ

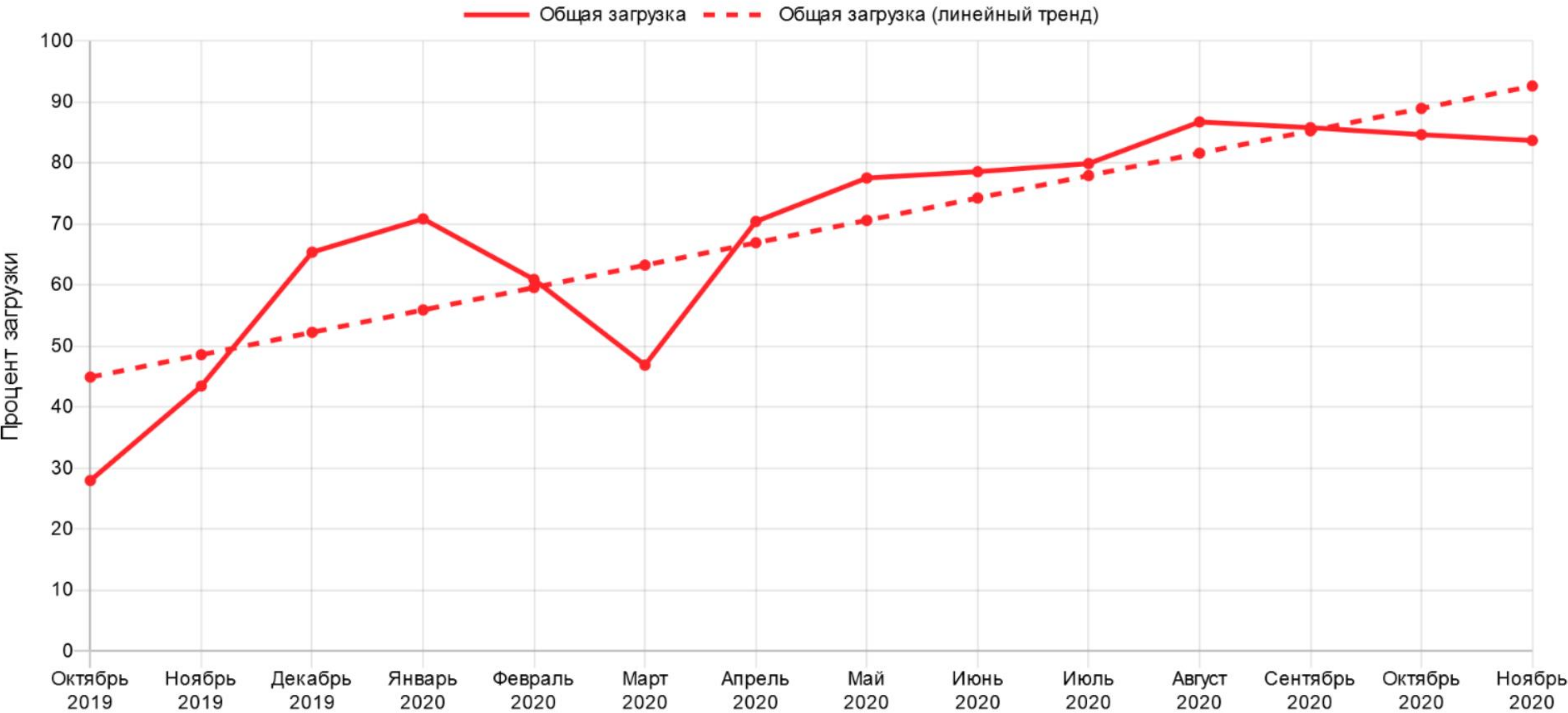
«CHARISMA» (COMPUTER OF HSE FOR ARTIFICIAL INTELLIGENCE AND SUPERCOMPUTER MODELLING)

- **7 место в ТОП 50 СНГ**
- Пиковая производительность (с двойной точностью): **912.4 Терафлопс**
- LINPACK-производительность: **568.5 Терафлопс**
- **26** вычислительных узлов
 - 10 узлов с **1,5 ТБ ОЗУ**
 - 16 узлов с **768 ГБ ОЗУ**
- **2** управляющих узла
- **104** графических процессора **NVIDIA Tesla V100 32 ГБ**
- **56** центральных процессоров **Intel Xeon Gold 6152**
- Оперативная память: **27.7 ТБ**
- Дисковая память: **885 ТБ**
 - параллельная СХД на базе Lustre: **840 ТБ**
 - SSD в узлах: **2x240 ГБ** в RAID1
 - SAS HDD в управляющих узлах: **20x1,7 ТБ**
- Коммуникационная сеть: **2 x InfiniBand EDR**
(**2x100 Гбит/с**, топология **Fat Tree**)



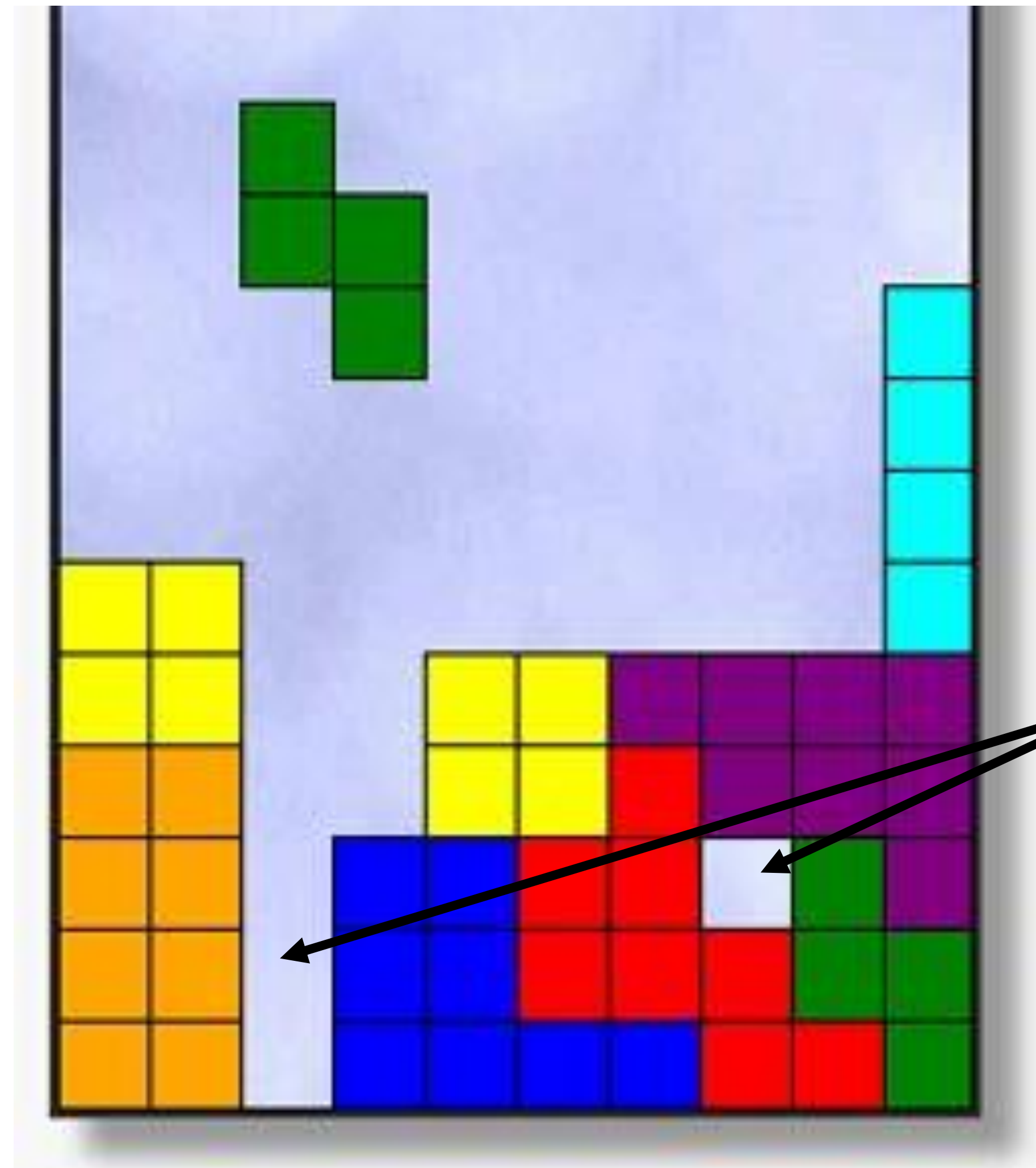


ЗАГРУЗКА СУПЕРКОМПЬЮТЕРА





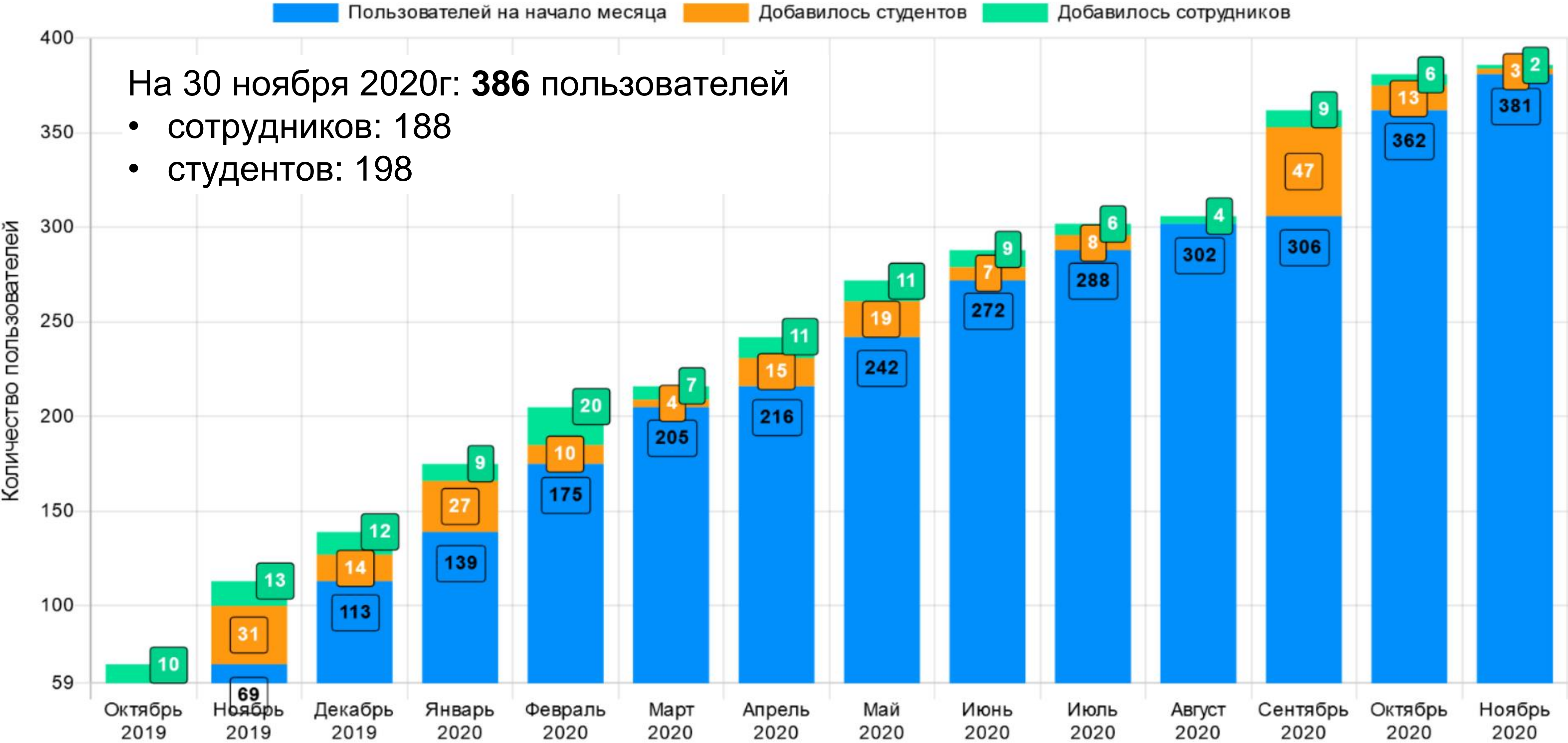
О НЕДОСТИЖИМОСТИ 100% ЗАГРУЗКИ



«Вычислительный ресурс», который не получится занять при текущем «потоке задач».

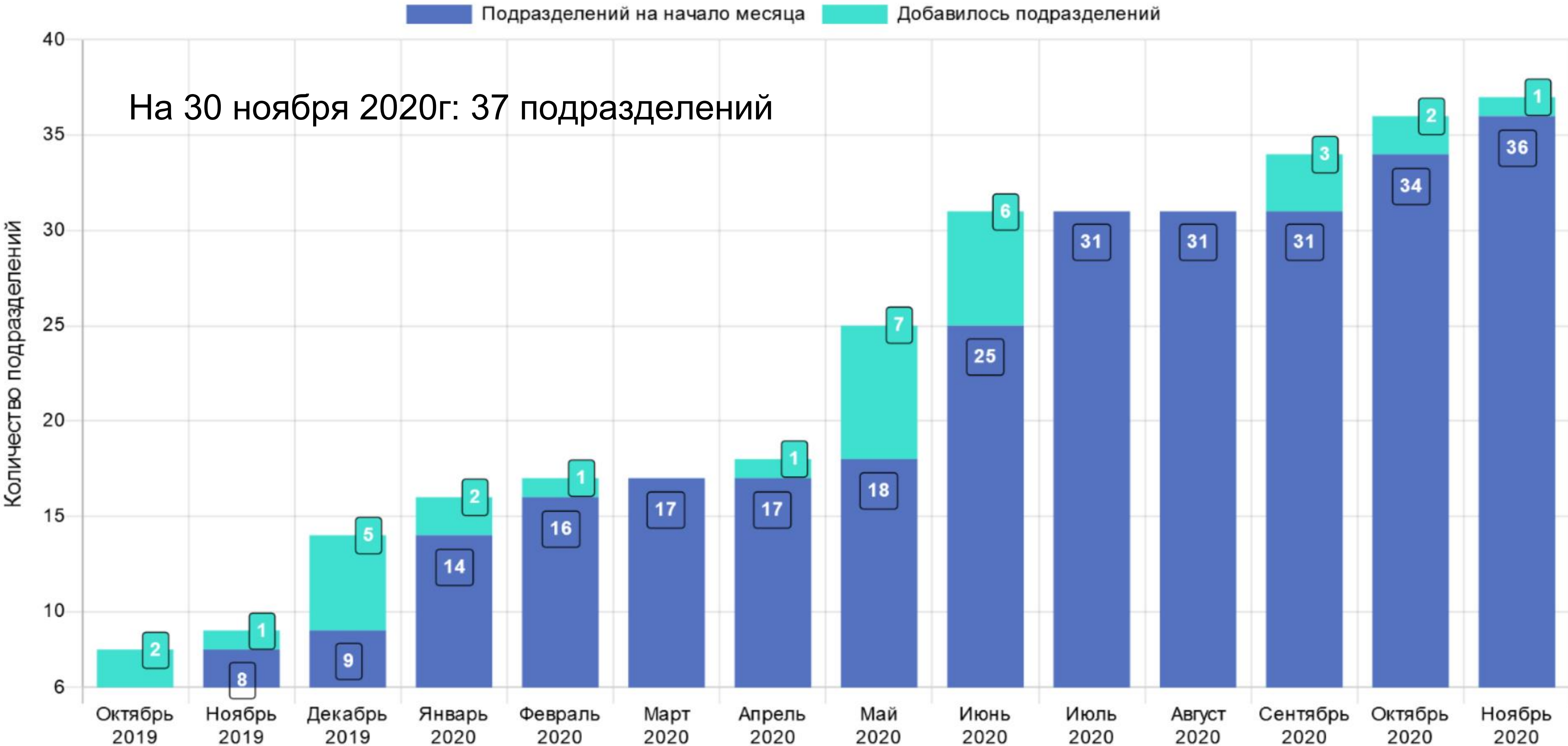


ПРИРОСТ КОЛИЧЕСТВА ПОЛЬЗОВАТЕЛЕЙ



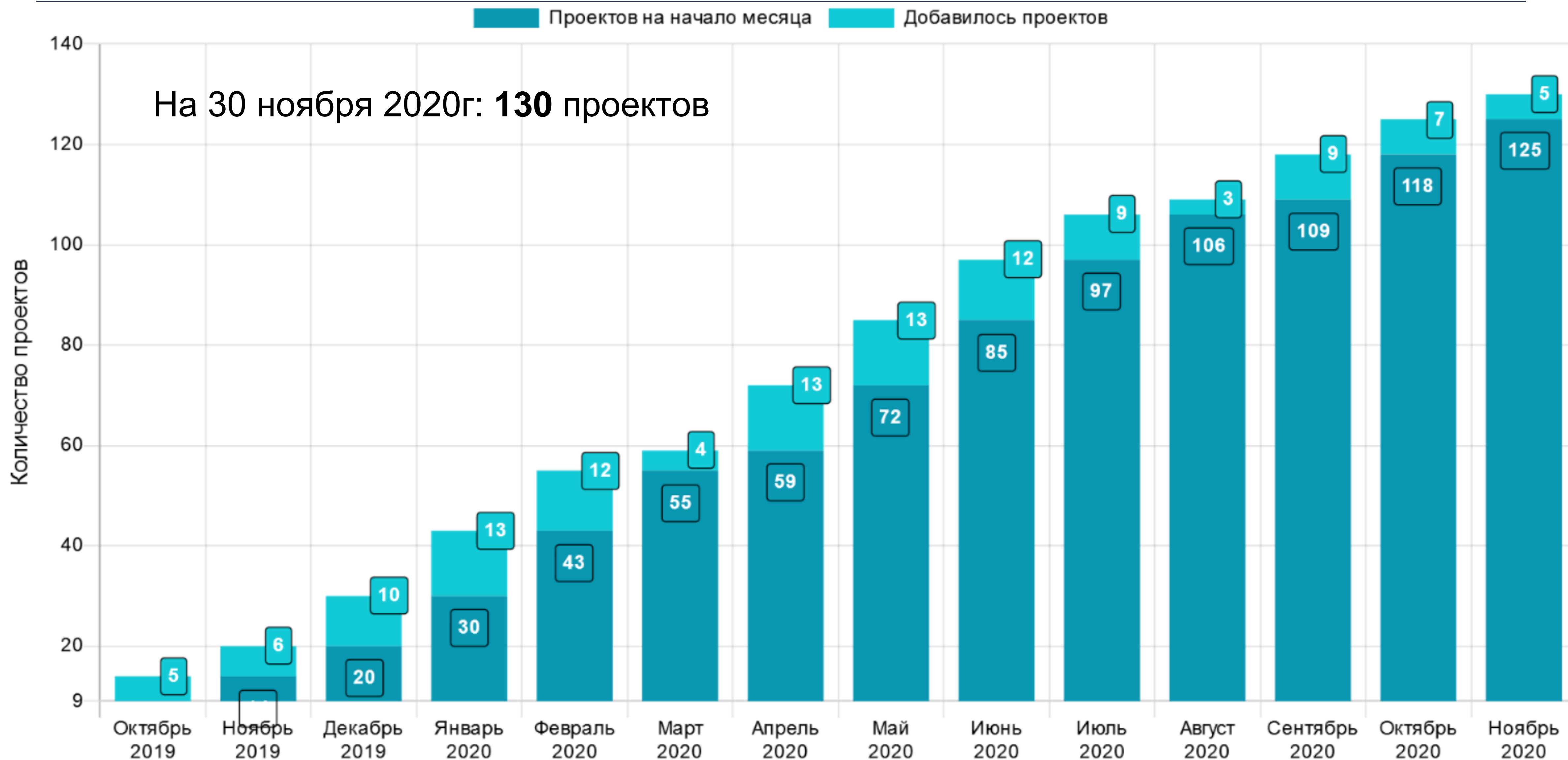


ПРИРОСТ КОЛИЧЕСТВА ПОДРАЗДЕЛЕНИЙ

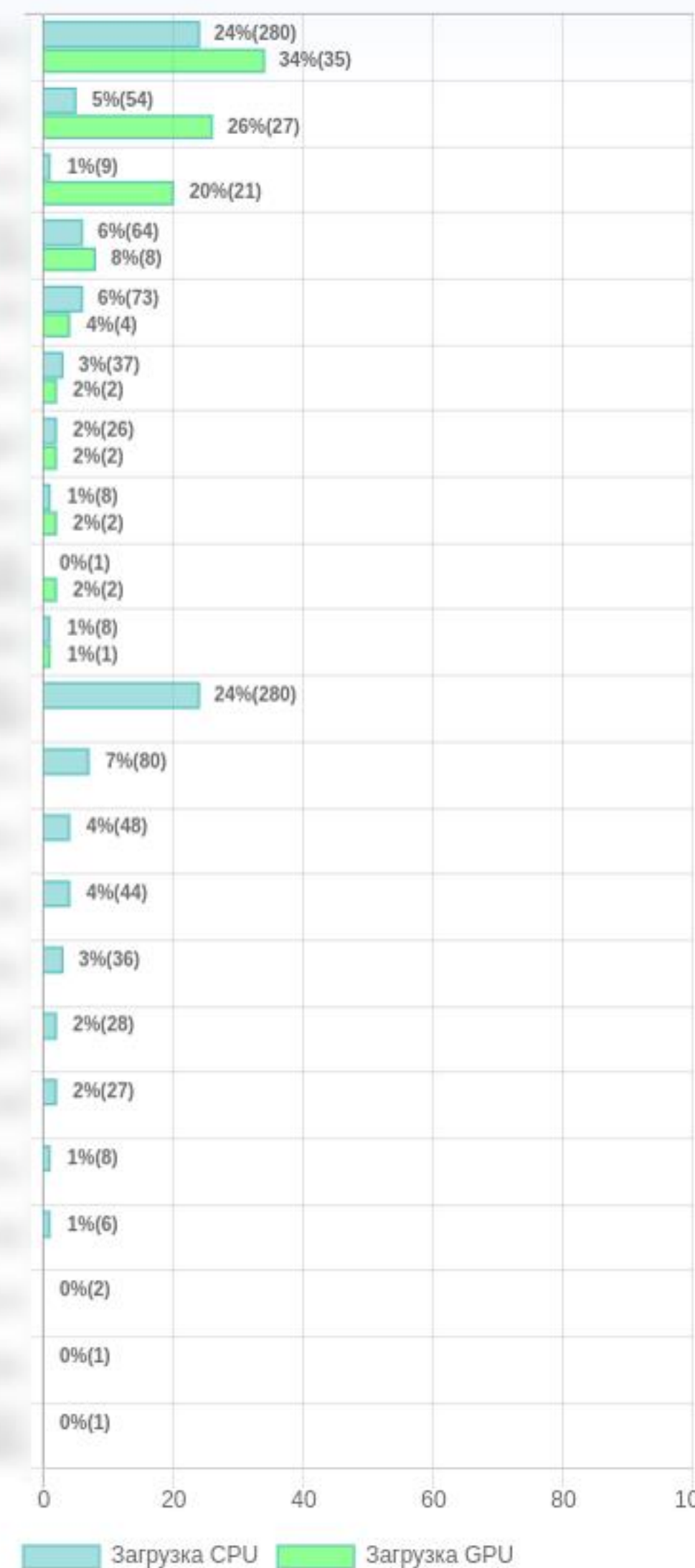
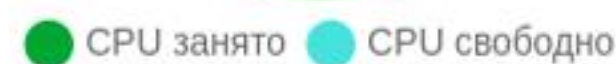




ПРИРОСТ КОЛИЧЕСТВА НАУЧНЫХ ГРУПП (ПРОЕКТОВ)



Загрузка суперкомпьютерного комплекса НИУ ВШЭ





УСТАНОВЛЕНО СИСТЕМНОЕ ПО

- Операционная система: CentOS 7.6.1810
- ПО для администрирования: OpenHPC 1.3.6, Warewulf 3.8.1
- Менеджер сети InfiniBand: OpenSM 5.3.0
- Компиляторы:
 - Intel Parallel Studio 2020 Update 1 & Update 4,
 - GNU Compilers Collection (версии: 10.1.0; 9.3.0; 8.3.0; 7.3.0; 5.4.0)
- Библиотеки для параллельных вычислений: Intel MPI 2019, Open MPI 3,4, MVAPICH 2.3, MPICH 3.2
- Система управления заданиями: Slurm 20.02
- Программное обеспечение для мониторинга: Nagios 4.4.3, Ganglia 3.7.2, самостоятельно разработанное
- Управление пользовательским окружением: Lmod 7.8.1, Singularity 3.2.0 (2.6.0)
- Поддержка GPU: драйверы Nvidia 450.51.06, CUDA 10/11
- Библиотеки: OpenBLAS 0.3.7, GraphicsMagick 1.3.34, fftw 3.3.8, gsl 2.6, cnpv 1.0 и др.
- Поддержка языков программирования: Python 3 (Anaconda v10.2019), R (v3.6.1 и 4.0.2), Java 8 JDK



УСТАНОВЛЕНО ПРИКЛАДНОЕ ПО

По запросам подразделений НИУ ВШЭ, установлено:


- Решение инженерных и научных задач: MATLAB
- Математические вычисления: GNU Octave
- Молекулярная динамика: GROMACS
- Филогенетический анализ: BEAST, BEAST2, BEAGLE, IQ-TREE
- Обработка фрагментов ДНК: GSL, SAMtools, ANGSD, HTSlib
- Анализ байесовских иерархических моделей: OpenBUGS, JAGS
- Вычисление дискретных преобразований Фурье: FFTW
- Распознавание позы человека на фото и видео: OpenPose
- Множество пакетов для Python и R для машинного обучения, компьютерного зрения, математических вычислений и др.



ЗАПУЩЕН SERVICE DESK ДЛЯ ПОДДЕРЖКИ ПОЛЬЗОВАТЕЛЕЙ СУПЕРКОМПЬЮТЕРА


Отдел суперкомпьютерного моделирования НИУ ВШЭ

<https://hpc.hse.ru/support>

HIGHER SCHOOL OF ECONOMICS
NATIONAL RESEARCH UNIVERSITY

Добавить объявление

Запросы



Центр поддержки

Суперкомпьютер


На сайте Отдела суперкомпьютерного моделирования НИУ ВШЭ: <https://hpc.hse.ru> Вы можете изучить характеристики вычислительного кластера, правила доступа, форму регистрации, инструкции и список установленного программного обеспечения.

Создайте запрос в техническую поддержку, мы постараемся его выполнить в кратчайшие сроки.


В чем требуется помощь?

Q


Поиск по справке




Сложности с подключением к суперкомпьютеру
Если Вы получаете ошибки при подключении или авторизации, создайте запрос.




Консультация по запуску задачи
Если у Вас есть сложности с запуском задачи на суперкомпьютере, создайте запрос.




Установка нового программного обеспечения на суперкомпьютер
Если у Вашей научной группы есть сложности с установкой какого-либо программного обеспечения на суперкомпьютер или если Вы считаете, что какое-либо ПО должно быть установлено централизованно и быть доступным для всех пользователей, создайте запрос. Заявки на приобретение коммерческого ПО здесь не рассматриваются.



Обнаружена неисправность
Если Вы столкнулись с проблемой, которая может свидетельствовать о неисправности суперкомпьютера, создайте запрос.



Общие вопросы
Создайте запрос по общим вопросам, связанным с суперкомпьютером и не попадающим под остальные категории.

Powered by  Jira Service Desk



РАЗРАБОТАНЫ ИНСТРУКЦИИ ДЛЯ ПОЛЬЗОВАТЕЛЕЙ

- Базовая инструкция для пользователей.
- Использование очереди задач SLURM.
- Использование системы модулей.
- Компиляция программ с использованием GCC и Intel Parallel Studio.
- Подключение и передаче файлов из ОС Windows, Linux, Mac OS.
- Подключение кластера к облачным хранилищам Вышка.Диск и Google Drive.
- Запуск Jupyter Notebook на вычислительных узлах.
- Использование Anaconda для создания виртуальных окружений Python.
- Выполнение расчётов на суперкомпьютере с использованием программных пакетов
 - GROMACS,
 - GNU Octave,
 - BEAST/BEAST2,
 - IQ-TREE,
 - MATLAB,
 - OpenPose,
 - R.



НАПОЛНЕН САЙТ ОСМ [HPC.HSE.RU](https://hpc.hse.ru)



ЦИФРОВЫЕ АССИСТЕНТЫ ОСМ

С июля 2020 г. в Отделе суперкомпьютерного моделирования работают 2 студента по программе «Цифровой ассистент».

Выполненные задачи:

- Изучения особенностей программного обеспечения.
- Упрощение инструкций для пользователей и перевод на английский язык.
- Разработка адаптивной верстки сайта системы мониторинга суперкомпьютера.
- Разработка дополнительной подсистемы безопасности суперкомпьютера.

С октября 2020 г. новый набор ЦА работает в следующих направлениях:

- Разработка системы для оценки эффективности использования ресурсов задачами пользователей.
- Тестирование и интеграция ПО JupyterHub с планировщиком задач SLURM.



ПРОФИЛАКТИЧЕСКИЕ РАБОТЫ

В последний рабочий день месяца выполняются те работы, которые невозможно провести без отключения кластера. Благодаря профилактике, обеспечивается стабильная работа суперкомпьютера в течение всего следующего месяца.

Во время профилактических работ выполнены большие задачи, такие как:

- Оптимизация настроек и обновления планировщика SLURM.
- Внедрение система авторизации LDAP.
- Настройка правил безопасности (запрет использования вычислительных узлов в обход планировщика и т.п.).
- Обновление драйверов на вычислительных узлах.
- Разработка и внедрение системы мониторинга вычислительного и вспомогательного оборудования.
- Установка и обновление системного программного обеспечения.
- Настройка и обновление встроенного программного обеспечения на сетевом и вычислительном оборудовании.



ОПТИМИЗАЦИЯ СИСТЕМЫ ОХЛАЖДЕНИЯ

Проведена оптимизация системы охлаждения вычислительных узлов

- Вычислительные узлы разнесены по разным стойкам и позициям.
- Разработан интерфейс управления охлаждением.
- Определены оптимальные параметры скорости вращения вентиляторов
- Задана пониженная целевая температура на выходе из узла и запрещено понижение скорости вращения вентиляторов ниже 50%.

Результат: процессоры и GPU-ускорители работают на максимальной скорости.

Установки	Узел	CPU		GPU				Температура воздуха		FAN	Электропотребление Вт*ч
Скорость вращения вентиляторов: <div>50 %</div>	имя	1	2	1	2	3	4	вход	выход	PWN	Σ 19 786
Максимальная t на выходе: <div>40 °</div>	cn-001	51	61	34	34	34	34	16	36	60%	676
АРС ИБП Заряд батарей: 100% Время на батареях: 134 мин. Напряжение на входе: 393 В Нагрузка: 36620 Вт (22%)	cn-002	59	62	31	31	31	31	16	38	62%	806
	cn-003	58	60	31	31	31	31	17	38	68%	832
	cn-004	57	63	25	25	25	25	16	38	64%	806
	cn-005	54	53	31	31	31	31	18	38	61%	624
	cn-006	50	62	30	30	30	30	18	37	61%	676



НОВАЯ СИСТЕМА ОЧЕРЕДЕЙ ЗАДАЧ

На суперкомпьютере установлена новейшая система очередей задач SLURM

Что позволяет v20.02.4:

1. Возможность планирования GPU-ресурсов подобно ядрам CPU.
2. Возможность учитывать архитектурные особенности вычислительных узлов.
3. Возможность движения в сторону выделения процессов на GPU (а не целиком).
4. Возможность корректного запуска нескольких задач из разных разделов очереди на 1 узле.

Особенности использования

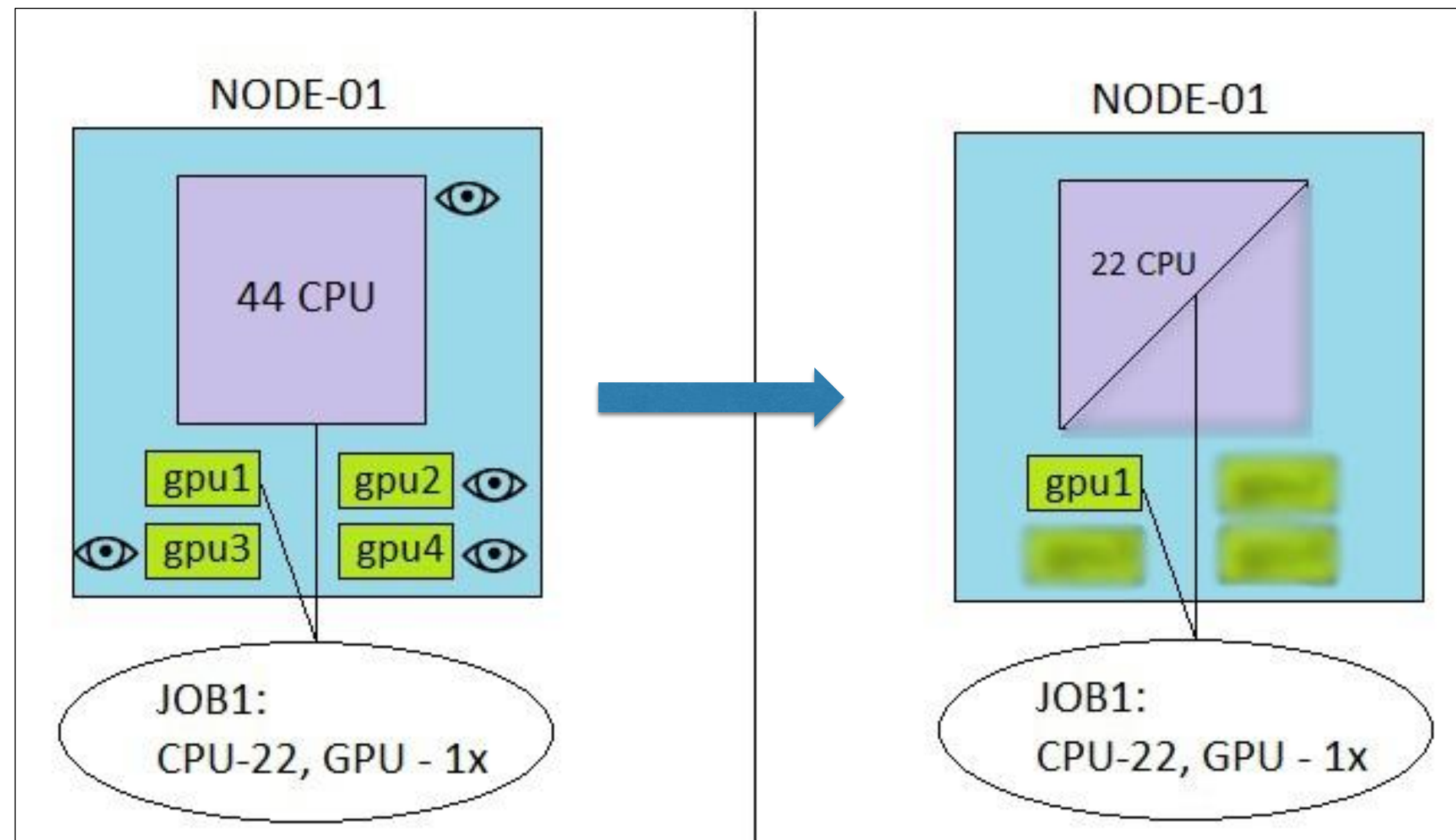
1. Больше нет необходимости в обязательном порядке указывать флаг `--gres`;
2. Новые флаги для постановки задач:
 - `--gres` (или `-G`) – количество GPU для задачи;
 - `--gres-per-node` – количество GPU на каждый выделяемый узел;
 - `--gres-per-task` – количество GPU на каждый процесс;
 - `--cpus-per-gpu` – количество CPU на каждый выделенный GPU;
3. Использование флага «-s» или «--oversubscribe» больше не рекомендуется.
4. Для прозрачности удалены все очереди кроме `normal`. Запрос GPU производится в обычной очереди.



ОПТИМИЗАЦИЯ СИСТЕМЫ ОЧЕРЕДЕЙ

1. Защита ресурсов от неправомерного/случайного использования: **cgroup**

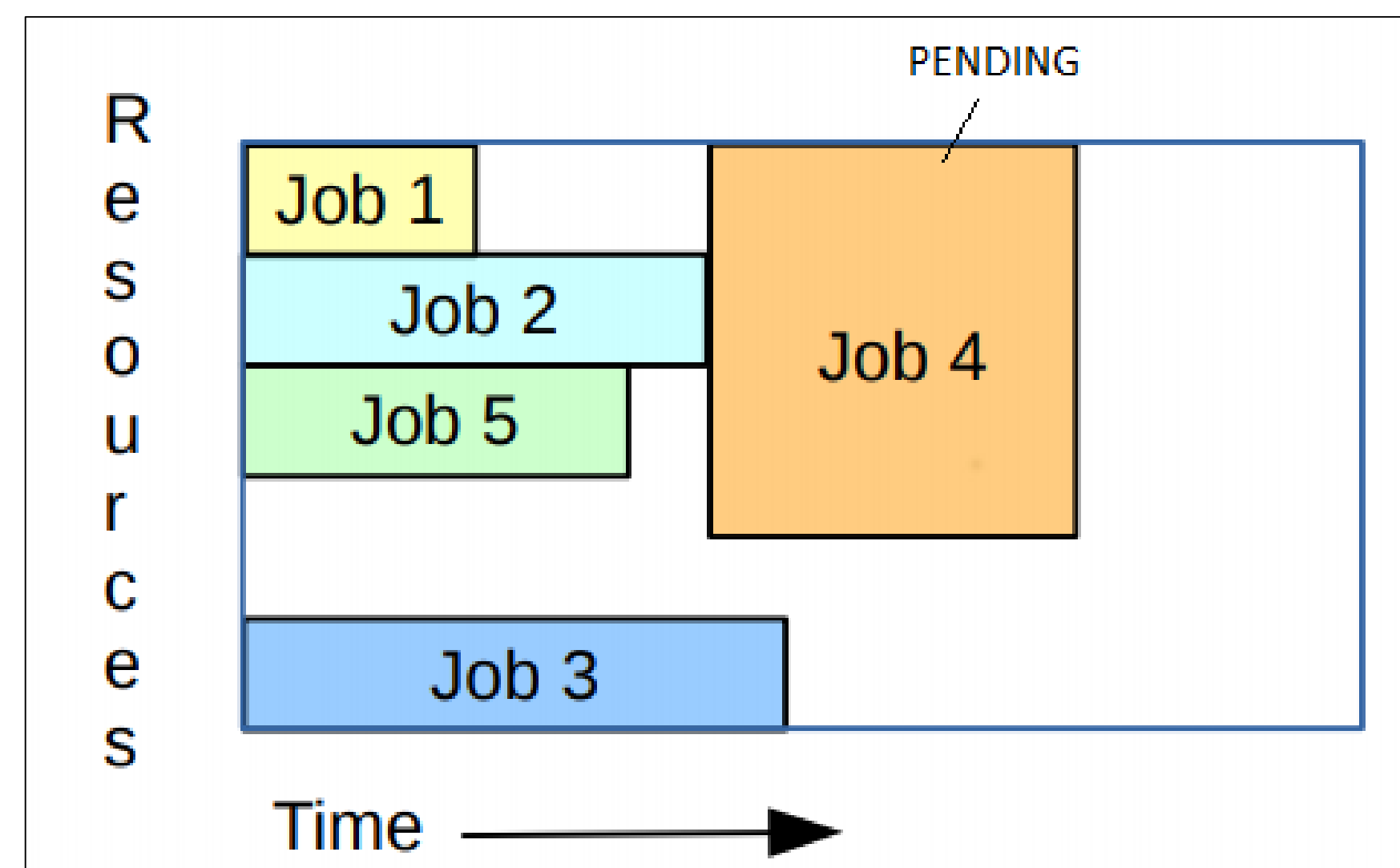
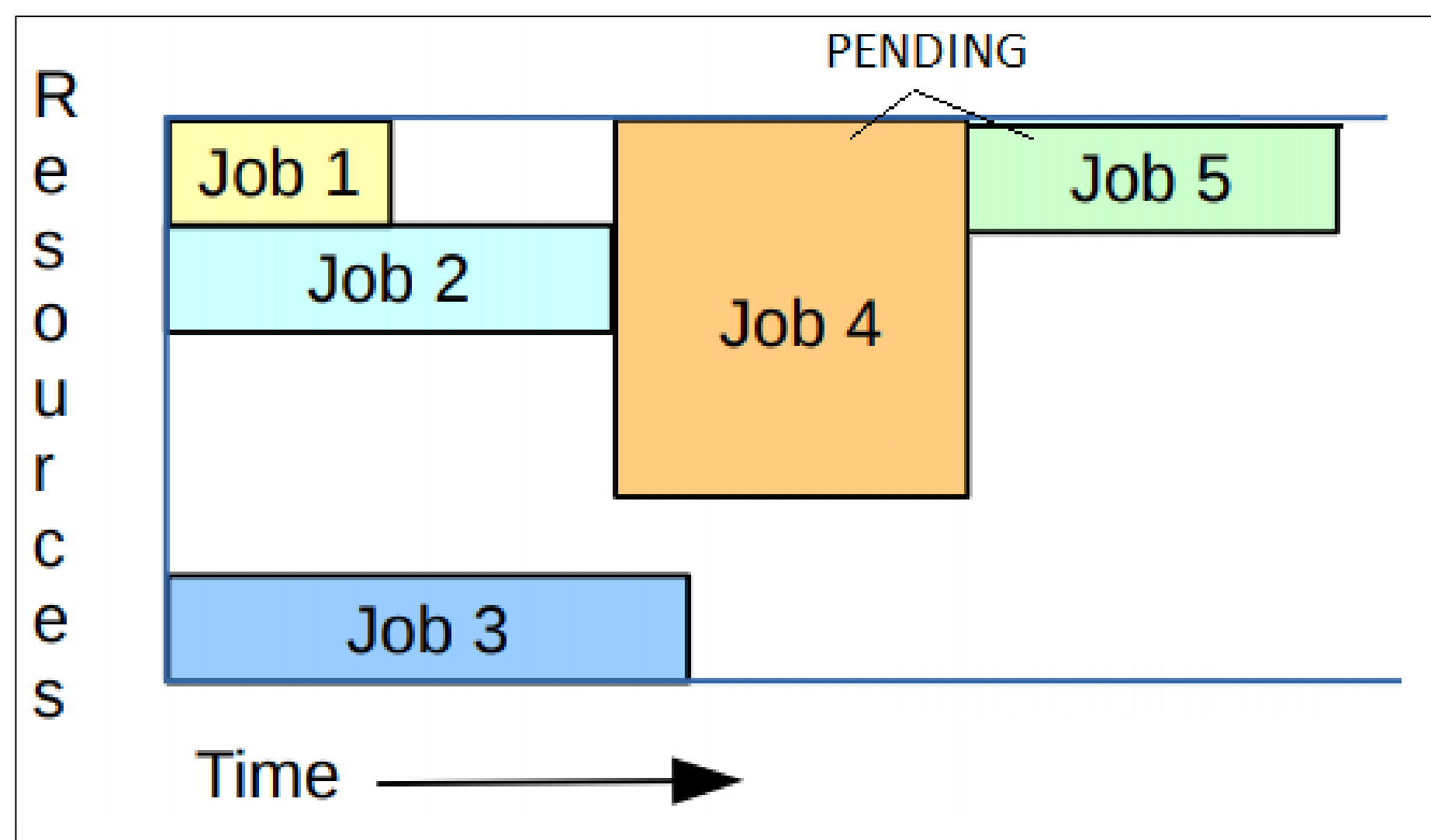
- *проблема*: по умолчанию, запрошенные ресурсы ограничиваются лишь переменными окружения, которые можно модифицировать и задействовать «чужие» ресурсы;
- Результат: только выделенные ресурсы могут быть задействованы, остальные «физически» не видны.



ОПТИМИЗАЦИЯ СИСТЕМЫ ОЧЕРЕДЕЙ

2. Приоритеты задач: **priority/multifactor**

- *проблема*: по умолчанию, приоритеты формируются по типу *FIFO*, что не позволяет честно распределять ресурсы между пользователями, в случае *multifactor* учитывается: размер задачи, требуемое время, время ожидания, QOS, текущее использование и т.п.;
- Результат: большее количество пользователей могут выполнять расчеты одновременно.

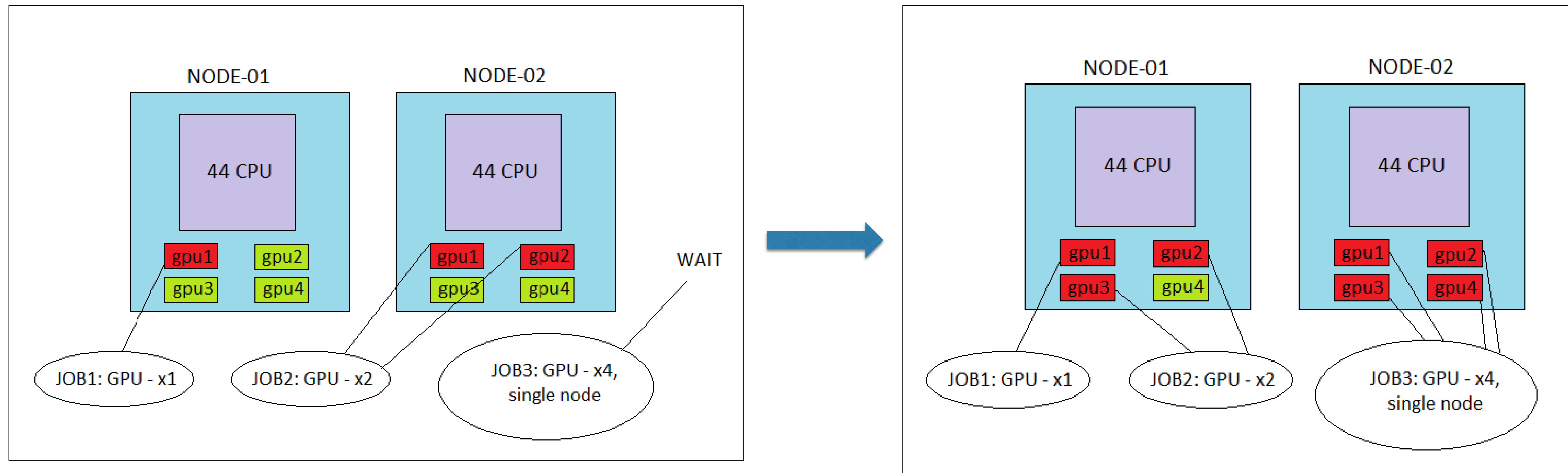


- User1: job1, job2, job3, job4
- User2: job5

ОПТИМИЗАЦИЯ СИСТЕМЫ ОЧЕРЕДЕЙ

3. Группировка задач на ресурсах: **sched/backfill** + **pack_serial_at_end**

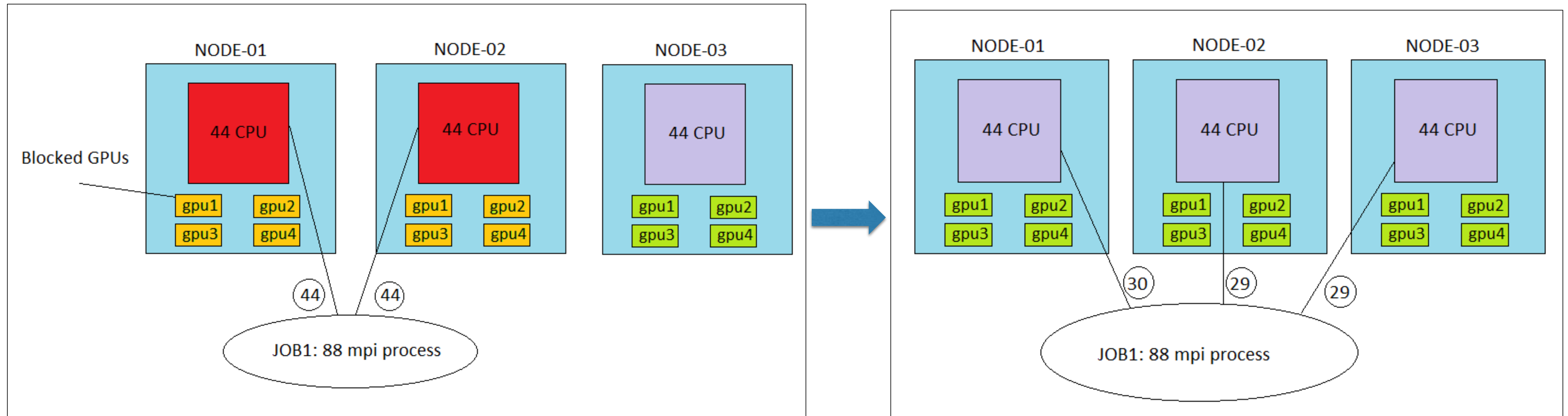
- *проблема*: высокая фрагментация задач увеличивает время ожидания больших задач и создает простой ресурсов;
- Результат: улучшенная группировка задач.



ОПТИМИЗАЦИЯ СИСТЕМЫ ОЧЕРЕДЕЙ

4. Реализация собственного плагина

- *проблема*: задачи, занимающие все CPU-узлов, блокируют GPU;
- Результат: уменьшение количества ситуаций блокировки GPU.



При появлении задачи, которая может заблокировать GPU на узле, плагин меняет параметры запрошенных ресурсов, чтобы избежать блокировки.



РАЗРАБОТАНА СИСТЕМА УПРАВЛЕНИЯ ДОСТУПОМ К СУПЕРКОМПЬЮТЕРНОМУ КОМПЛЕКСУ НИУ ВШЭ

Доступ через Единый личный кабинет

- Создание проектов (научные, прикладные, образовательные);
- Утверждение проектов;
- Экспертиза отчетов по проектам;
- Регистрация нового пользователя
- Приглашение в проект;
- Регистрация группы студентов

Все проекты

Все отчёты

СИСТЕМА РЕГИСТРАЦИИ

МОИ ПРОЕКТЫ

Поиск

Обновить

PROJECT ID	НАИМЕНОВАНИЕ ПРОЕКТА	СТАТУС	ССЫЛКА
431548	Моделирование параллельных систем баз данных	Согласовано	Открыть
431587	Тест DMM	Согласование администратором	Открыть

<< < 1 > >>

ПРОЕКТЫ С МОИМ УЧАСТИЕМ

Поиск

Обновить

PROJECT ID	НАИМЕНОВАНИЕ ПРОЕКТА	СТАТУС	ССЫЛКА
431592	Тест 1234	Согласование администратором	Открыть
431588	Тест 1234	Согласовано	Открыть

<< < 1 > >>

Создать новый проект

Создать новый проект за другого пользователя

Заккрыть

Регистрация учетной записи

Создание учетной записи в LDAP ✓

Добавление пользователя в SLURM ✓

Информация о заявке

ЗАЯВКА НА РЕГИСТРАЦИЮ НОВОГО ПРОЕКТА

Руководитель проекта

Костенецкий Павел Сергеевич

Организация

НИУ ВШЭ - Москва

Подразделение *

Отдел суперкомпьютерного моделирования

Должность *

Начальник отдела

Рабочий номер телефона *

28030

Мобильный номер телефона

Выберите код

Укажите мобильный номер телефона

Электронный адрес

pkostenetskiy@hse.ru

Название проекта *

Название проекта

Тип проекта *

Цель проекта *

Не более 500 символов

Краткое описание проекта *

До 500 символов, желателен научно-популярный стиль

Web-страница проекта

URL (если есть)

Планируемые результаты проекта на год: публикации SCOPUS и WoS *

	Q1	Q2	Q3	Q4
SCOPUS				
WoS				

ОТЧЁТ РУКОВОДИТЕЛЯ ПРОЕКТА

Руководитель проекта

Костенецкий Павел Сергеевич

Организация

НИУ ВШЭ - Москва

Подразделение *

Отдел суперкомпьютерного моделирования

Должность *

Начальник отдела

Рабочий номер телефона *

28030

Мобильный номер телефона

Выберите код

+7 (912) 896-25-84

Электронный адрес

pkostenetskiy@hse.ru

Выбор проекта *

431548 - Моделирование параллельных систем баз данных

СЛАЙД-ОТЧЕТ НА РУССКОМ ЯЗЫКЕ

Добавить файл

Удалить файл

СЛАЙД-ОТЧЁТ

Дождитесь открытия окна или нажмите для прикрепления файла

СЛАЙД-ОТЧЕТ НА АНГЛИЙСКОМ ЯЗЫКЕ

Добавить файл

Удалить файл

СЛАЙД-ОТЧЁТ

No items to display.

ПЛАНОВЫЕ ПОКАЗАТЕЛИ

Запланированные результаты

тестирование

SCOPUS и WoS

	Q1	Q2	Q3	Q4
SCOPUS	0	0	0	1
WoS	0	0	0	1

Система запущена в эксплуатацию: <https://hpc.hse.ru/users/registration>
В начале года будет выполняться перерегистрация всех проектов через данную систему.

СИСТЕМА УПРАВЛЕНИЯ ДОСТУПОМ К СУПЕРКОМПЬЮТЕРНОМУ КОМПЛЕКСУ НИУ ВШЭ

- 1) Реализована интеграция с ЕЛК
- 2) Интеграция с LDAP и SLURM;
- 3) Оповещение руководителей проектов пользователей;
- 4) Экспертиза результатов проекта;
- 5) и др.

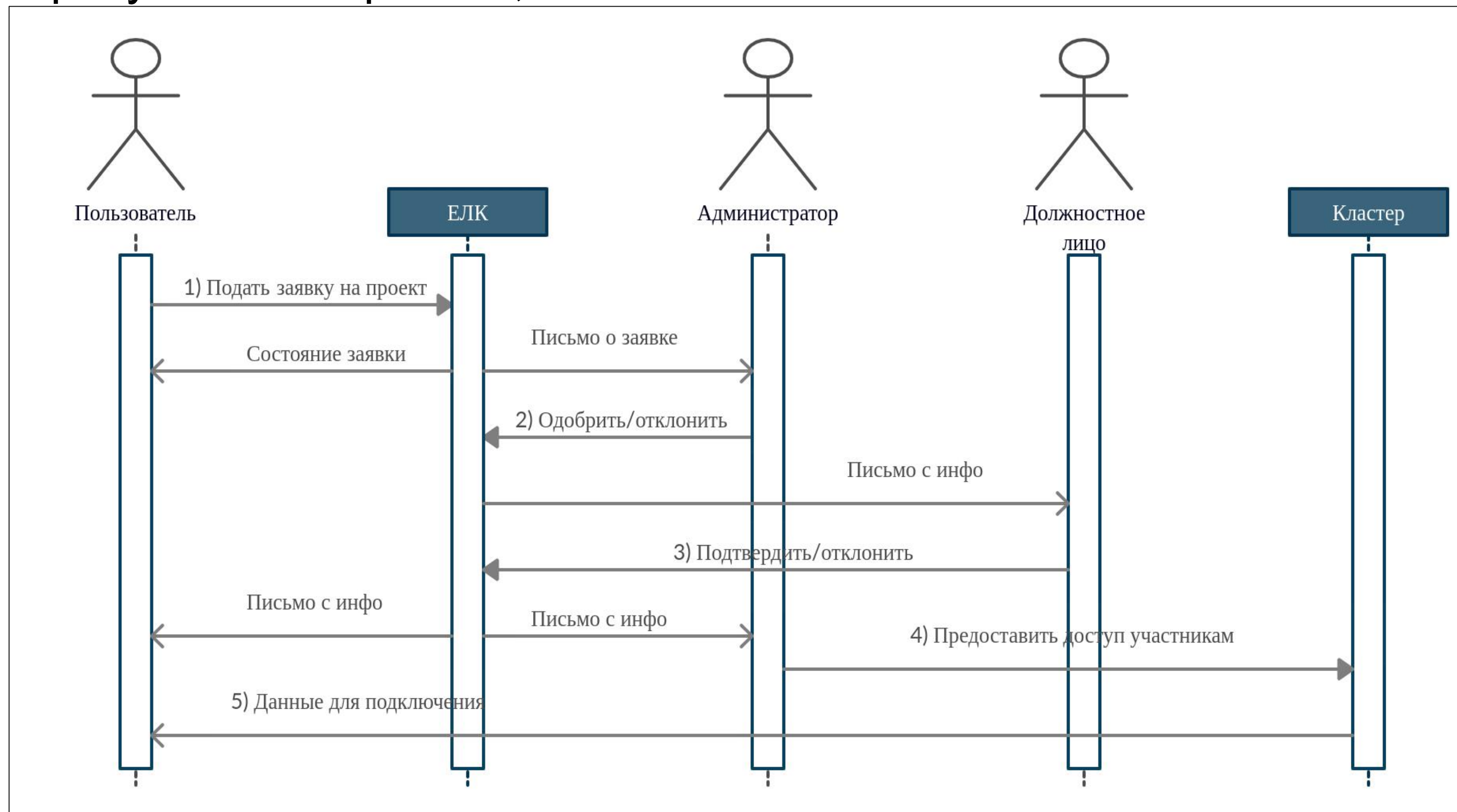


Рис.1 Диаграмма последовательности UML 2 (упрощенная)



СИСТЕМА УПРАВЛЕНИЯ ДОСТУПОМ К СУПЕРКОМПЬЮТЕРНОМУ КОМПЛЕКСУ НИУ ВШЭ : BACKEND

Система регистрации и учета квот на проекты и пользователей.

- 1) автоматически формируются записи в LDAP и SLURM;
- 2) управляет квотами;
- 3) генерируется письмо для отправки пользователю.

Supercomputer Account Manager [объем: 94Т / 848Т (12%); файлы: 124М / 869М (15%)]

Ожидают регистрации:

<input type="checkbox"/>	Имя	Логин	Почта	Окончание доступа	Действие
<input type="checkbox"/>	Иванов Федор Ильич	testuser2	testuser2@hse.ru	31 июля 2021 г.	<div>✉ Отправить письмо</div>
<input type="checkbox"/>	Петров Петр Иванович	testuser1	testuser1@hse.ru	27 ноября 2020 г.	<div>➕ Зарегистрировать</div>

Зарегистрированные пользователи:

<input type="checkbox"/>	Имя	Логин	Доступная квота	Использование квоты	Последняя авторизация	Сроки доступа	Статус	Действия
<input type="checkbox"/>			Объем: 1 TB - 1.33 TB Файлы: 10 M - 14 M	нет нет	-	27.01.2020 01.03.2020	<div>📅</div>	<div>✎</div>
<input type="checkbox"/>			Объем: 1 TB - 1.33 TB Файлы: 10 M - 14 M	48 kB 12	12/05/20 22:45:57	12.05.2020 01.06.2020	<div>📅</div>	<div>✎</div>
<input type="checkbox"/>			Объем: 1 TB - 1.33 TB Файлы: 10 M - 14 M	48 kB 12	13/12/19 17:52:47	13.12.2019 01.01.2021	<div>✅</div>	<div>✎</div>
<input type="checkbox"/>			Объем: 1 TB - 1.33 TB Файлы: 10 M - 14 M	305.51 MB 317	26/10/20 09:40:09	02.12.2019 31.01.2021	<div>✅</div>	<div>✎</div>
<input type="checkbox"/>			Объем: 1 TB - 1.33 TB Файлы: 10 M - 14 M	1.99 MB 168	11/12/19 18:21:19	28.11.2019 -	<div>📅</div>	<div>✎</div>

✓

Регистрация учетной записи

Создание учетной записи в LDAP ✓
Добавление пользователя в SLURM ✓

Отправка письма пользователю

Шаблон:

Регистрация

 Подпись:

Общая

Здравствуйте, Имя Фамилия!

Вы зарегистрированы на суперкомпьютере НИУ ВШЭ.

Для подключения используйте следующие данные:
Логин: {login}
Пароль: {password}
Адрес суперкомпьютера:
Тип подключения: SSH
Порт:

Характеристики суперкомпьютера: <https://hpc.hse.ru/hardware/hpc-cluster>
Пожалуйста, ознакомьтесь с [инструкциями для пользователей суперкомпьютера](#) и [руководством пользователя](#).

По всем вопросам, связанным с использованием суперкомпьютера НИУ ВШЭ, обращайтесь к сотрудникам отдела суперкомпьютерного моделирования, оставив заявку на портале ServiceDesk: <https://hpc.hse.ru/support>

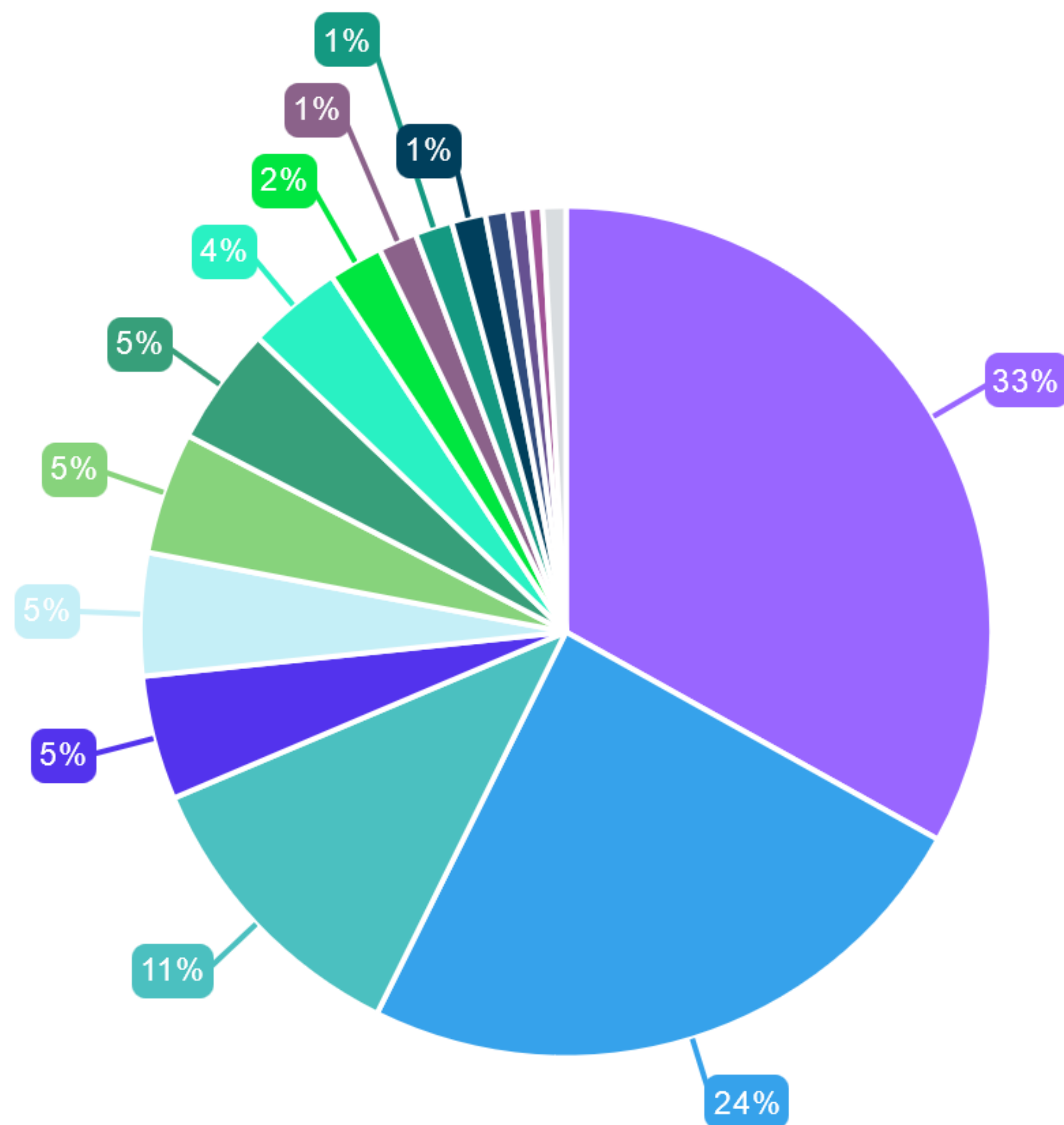
С уважением, команда отдела суперкомпьютерного моделирования.

Отправить

Позднее



ИСПОЛЬЗОВАНИЕ CPU ПОДРАЗДЕЛЕНИЯМИ (ТОР-15)

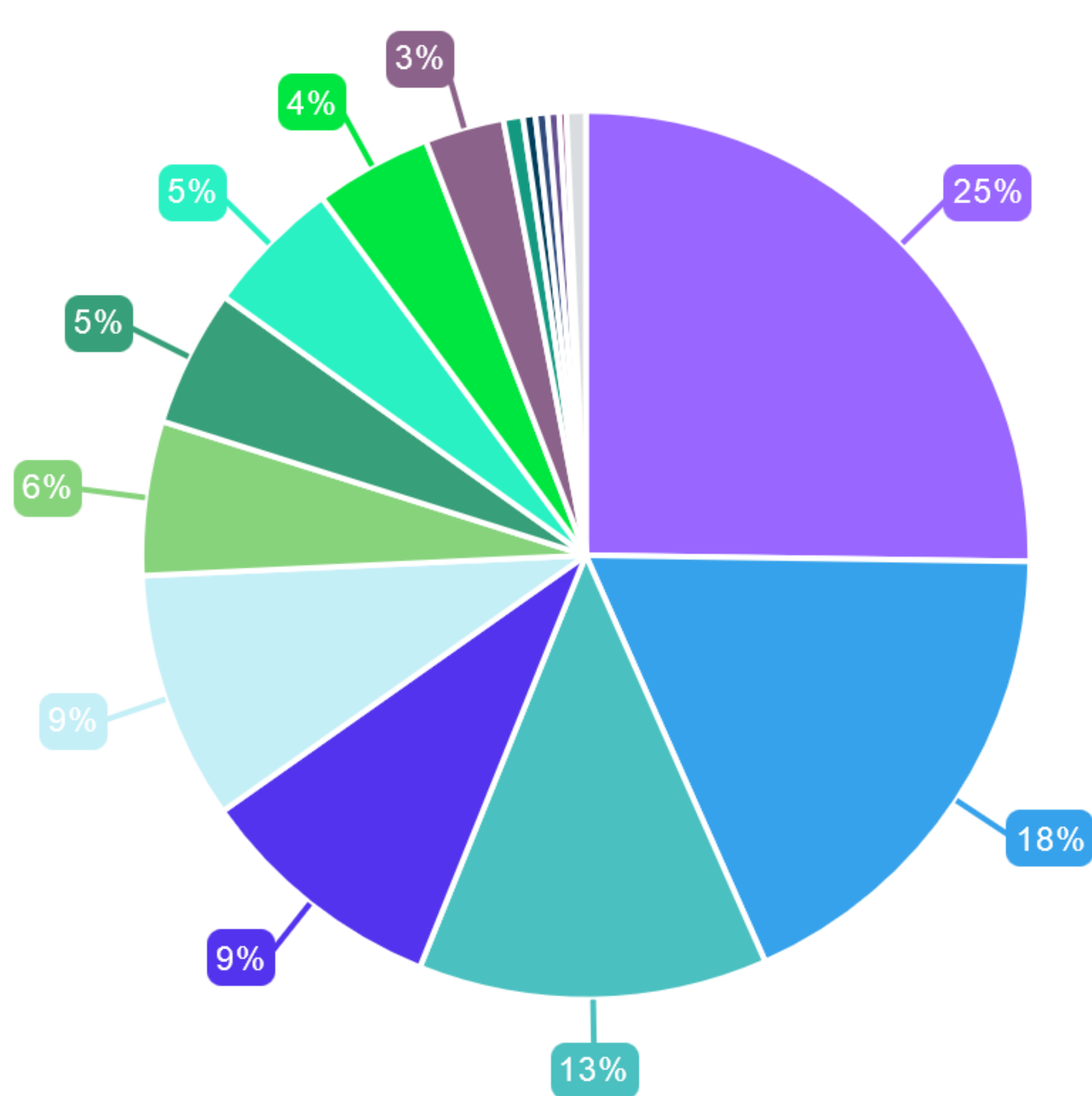


- Международная лаборатория Суперкомпьютерного атомистического моделирования и многомасштабного анализа (33.10%)
- Департамент прикладной математики МИЭМ (24.21%)
- Центр глубинного обучения и байесовских методов ФКН (11.30%)
- Центр анализа данных и машинного обучения СПб школа физико-математических и компьютерных наук (4.72%)
- Факультет физики (4.66%)
- Научно-учебная лаборатория методов анализа больших данных ФКН (4.63%)
- Международная лаборатория теории игр и принятия решений СПб школа экономики и менеджмента (4.51%)
- Лаборатория Самсунг-ВШЭ ФКН (3.59%)
- Департамент больших данных и информационного поиска ФКН (2.06%)
- Департамент анализа данных и искусственного интеллекта ФКН (1.46%)
- Международная лаборатория Стохастических алгоритмов и анализа многомерных данных ФКН (1.42%)
- Международная лаборатория физики конденсированного состояния (1.29%)
- Лаборатория социальной и когнитивной информатики СПб школа социальных наук и востоковедения (0.86%)
- Научно-учебная лаборатория моделей и методов вычислительной прагматики ФКН (0.73%)
- Институт когнитивных нейронаук (0.57%)
- Остальные (0.88%)

Период: октябрь 2019 - ноябрь 2020 г.



ИСПОЛЬЗОВАНИЕ GPU ПОДРАЗДЕЛЕНИЯМИ (TOP-15)

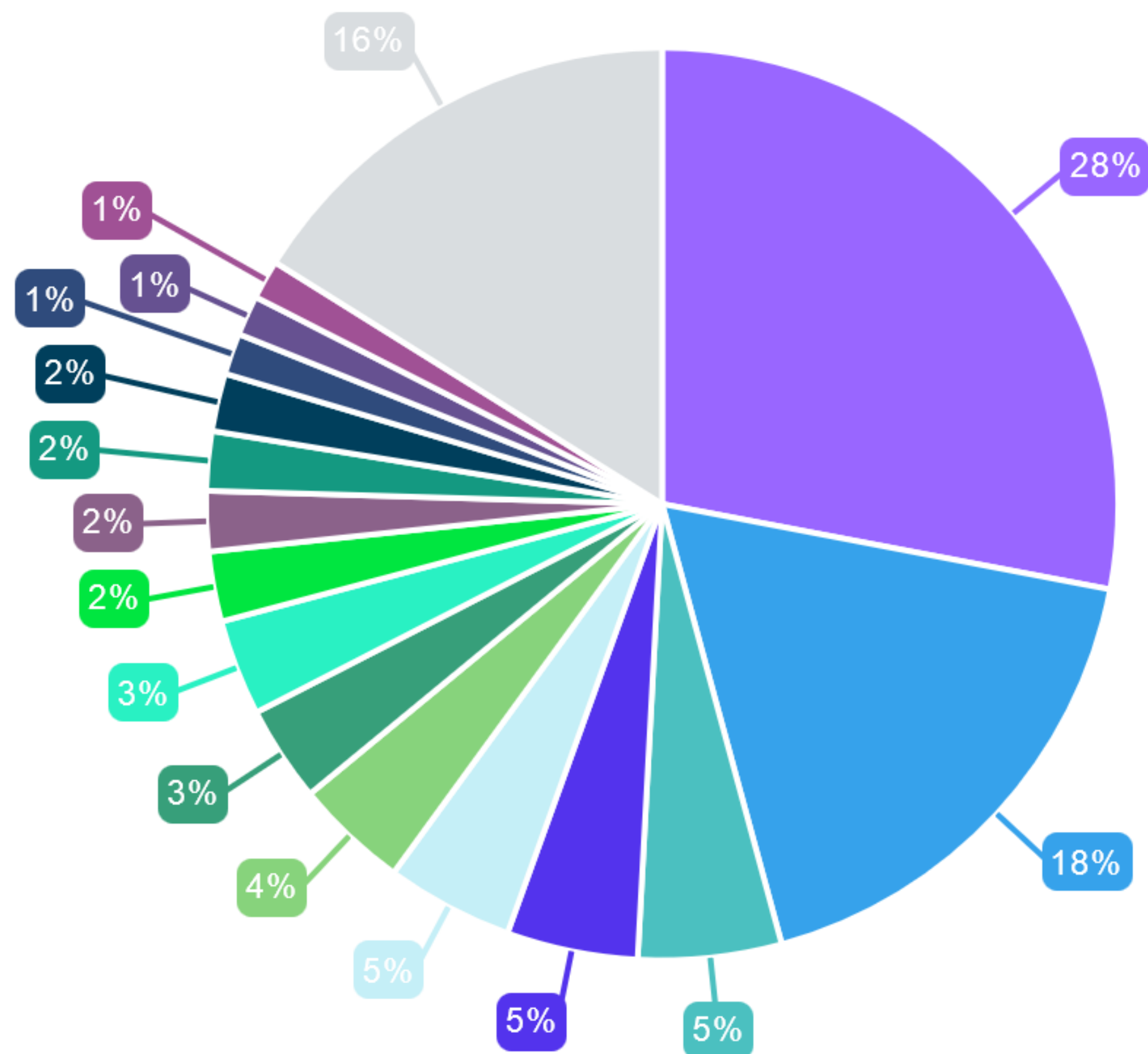


- Центр глубинного обучения и байесовских методов ФКН (25.22%)
- Международная лаборатория Суперкомпьютерного атомистического моделирования и многомасштабного анализа (18.16%)
- Лаборатория Самсунг-ВШЭ ФКН (12.71%)
- Центр анализа данных и машинного обучения СПб школа физико-математических и компьютерных наук (9.13%)
- Научно-учебная лаборатория методов анализа больших данных ФКН (9.04%)
- Департамент больших данных и информационного поиска ФКН (5.61%)
- Международная лаборатория теории игр и принятия решений СПб школа экономики и менеджмента (5.00%)
- Научно-учебная лаборатория моделей и методов вычислительной прагматики ФКН (5.00%)
- Департамент прикладной математики МИЭМ (4.26%)
- Лаборатория социальной и когнитивной информатики СПб школа социальных наук и востоковедения (2.88%)
- Институт статистических исследований и экономики знаний (0.71%)
- Научно-учебная лаборатория телекоммуникационных систем МИЭМ (0.45%)
- Факультет информатики, математики и компьютерных наук Нижний Новгород (0.44%)
- Институт когнитивных нейронаук (0.42%)
- Департамент анализа данных и искусственного интеллекта ФКН (0.26%)
- Остальные (0.70%)

Период: октябрь 2019 - ноябрь 2020 г.



ИСПОЛЬЗОВАНИЕ CPU ПРОЕКТАМИ (TOP-15)

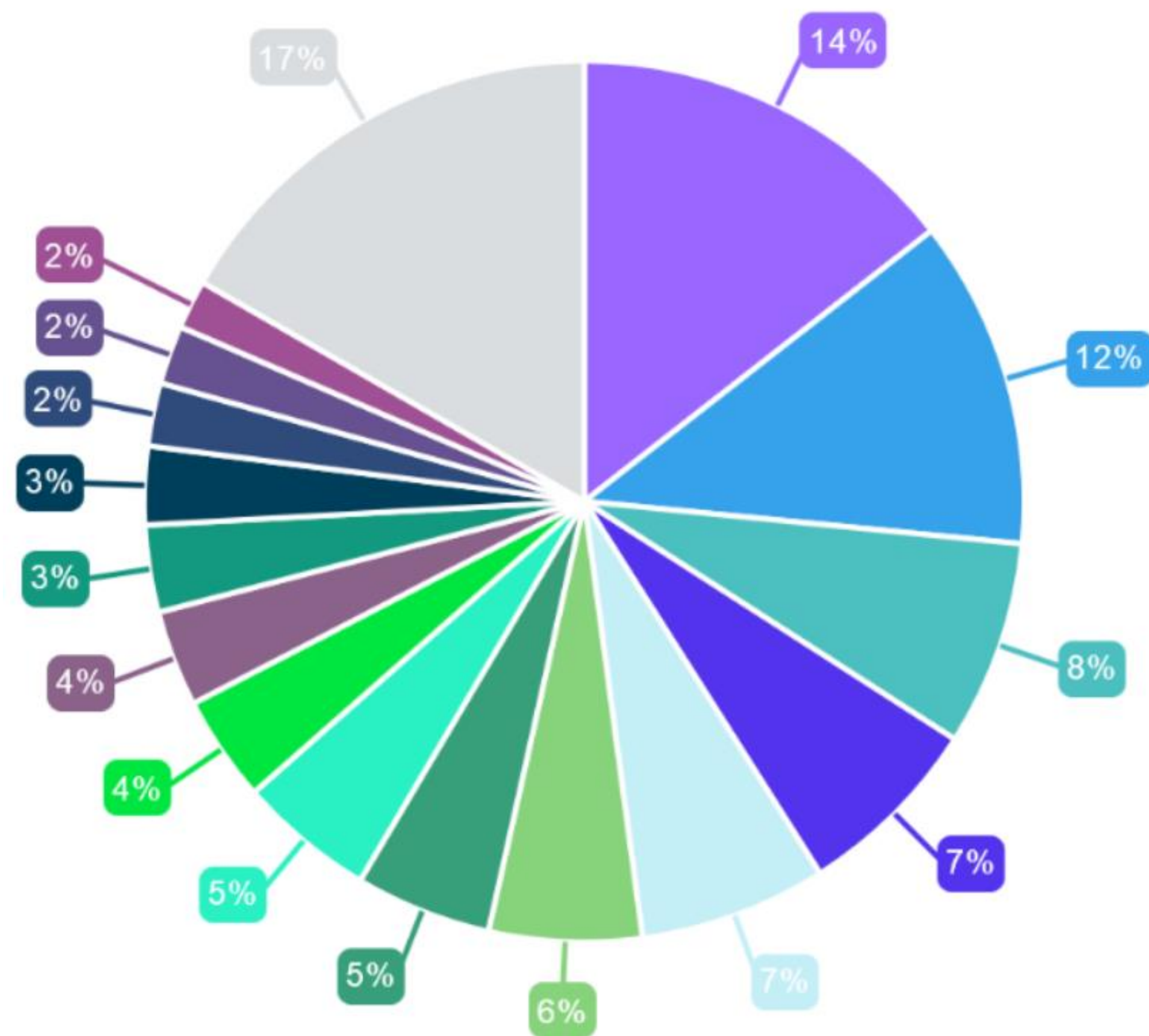


Период: октябрь 2019 - ноябрь 2020 г.

- Атомистическое многомасштабное моделирование материалов - Рук.: Стегайлов В.В. (27.99%)
- Расчет свободной энергии сольватации лекарственных соединений в скСО2 - Рук.: Будков Ю.А. (17.77%)
- Атомистическое и континуальное моделирование в задачах физики - Рук.: Писарев В.В. (5.08%)
- Изучение явления многочастичной локализации в одномерных цепочках методом точной диагонализации
- Exact diagonalization study of Many-body localization phenomenon in 1D chains - Рук.: Баховадинов М.С. (4.65%)
- ИИ-законодатель (Lawmaker) - Рук.: Иванов Д.И. (4.51%)
- Speeding Up Neural Networks with Variational Bayes - Рук.: Матюшин Л.А. (4.02%)
- Адаптация архитектуры нейронной сети "Трансформер" для анализа исходных кодов программ - Рук.: Чиркова Н.А. (3.41%)
- Large-scale DNN ensembling study - Рук.: Ашуха А.П. (3.40%)
- Построение каузальных моделей данных для интерпретации алгоритмов машинного обучения - Рук.: Струминский К.А. (2.48%)
- Моделирование течения жидкости в сложной геометрии - Рук.: Щур Л.Н. (2.13%)
- Обусловленные Нормализационные Поток для Задачи Ч - Рук.: Атанов А.И. (2.10%)
- Методы обнаружения объектов новых классов - Рук.: Осокин А.А. (2.05%)
- The Lottery Ticket Hypothesis for Reinforcement Learning - Рук.: Шпильман А.А. (1.46%)
- Variance Reduction in Policy Gradient Methods - Рук.: Каледин М.Л. (1.42%)
- Экзотические фазы сильно коррелированных фермионов в низких размерностях - Рук.: Буровский Е.А. (1.39%)
- Остальные (16.11%)



ИСПОЛЬЗОВАНИЕ GPU ПРОЕКТАМИ (TOP-15)



Период: октябрь 2019 - ноябрь 2020 г.

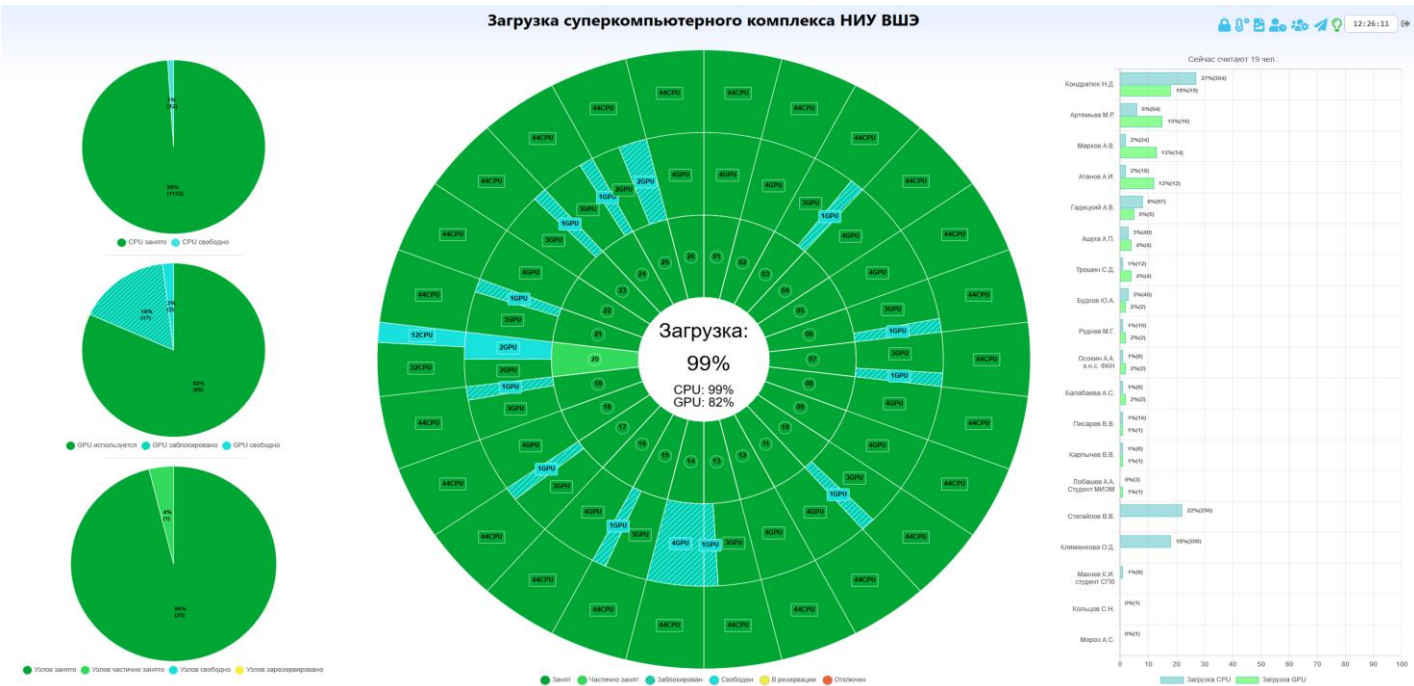
- Атомистическое многомасштабное моделирование материалов - Рук.: Стегайлов В.В. (14.50%)
- Адаптация архитектуры нейронной сети "Трансформер" для анализа исходных кодов программ - Рук.: Чиркова Н.А. (12.10%)
- Speeding Up Neural Networks with Variational Bayes - Рук.: Матюшин Л.А. (7.56%)
- Методы обнаружения объектов новых классов - Рук.: Осокин А.А. (6.94%)
- Обусловленные Нормализационные Потoki для Задачи Ч - Рук.: Атанов А.И. (6.90%)
- Large-scale DNN ensembling study - Рук.: Ашуха А.П. (5.63%)
- ИИ-законодатель (Lawmaker) - Рук.: Иванов Д.И. (5.02%)
- Разработка математических моделей и методов рекомендательных систем и автоматической обработки текстов - Рук.: Артемова Е.Л. (5.02%)
- The Lottery Ticket Hypothesis for Reinforcement Learning - Рук.: Шпильман А.А. (3.91%)
- Атомистическое и континуальное моделирование в задачах физики - Рук.: Писарев В.В. (3.54%)
- Методы глубинного обучения для семантического парсинга текста и синтеза программ - Рук.: Осокин А.А. (3.20%)
- Онлайн-коммуникация: когнитивные лимиты и методы автоматического анализа - Рук.: Терпиловский М.А. (2.88%)
- Расчет свободной энергии сольватации лекарственных соединений в скСО2 - Рук.: Будков Ю.А. (2.32%)
- Анализ и оптимизация свойств обновлённого калориметра эксперимента LHCb средствами машинного обучения - Рук.: Устюжанин А.Е. (2.16%)
- Embeddings for code diffs - Рук.: Брыксин Т.А. (1.80%)
- Остальные (16.76%)



АНАЛИЗ ТЕХНИЧЕСКОЙ ВОЗМОЖНОСТИ ДЛЯ РАСШИРЕНИЯ

В течение 2020 г. собиралась статистика использования оборудования, чтобы предложить оптимальный вариант комплекта расширения суперкомпьютера.

Выбраны показатели, на которых можно сэкономить.



Показатель	Значение
Место на СХД (при сохранении текущей тенденции) закончится к	2023 г.
Запас производительности СХД под расширение	Двукратный (+26 узлов с GPU)
Запас свободных портов сети InfiniBand (на уровне доступа)	44 порта (22/44 узла)
Вторая сетевая карта InfiniBand EDR на новых узлах	Необязательна
Адаптер 10 GE	Не требуется
Медианный размер ОЗУ, используемый на узлах во время высокой загрузки	200 ГБ
Сколько CPU нужно было для запуска задач в сентябре 2020 г	+100%
Сколько GPU нужно было для запуска задач в сентябре 2020 г	+30%

Основной вывод: без расширения инфраструктуры можно установить до 26 узлов.

КОМПЛЕКТ РАСШИРЕНИЯ 2020



**3 x Dell PowerEdge C4140M
(2 CPU Xeon Gold 6248R,
4 GPU V100 32G NV Link,
768 GB)**



**11 x Dell PowerEdge R640
(2 CPU Xeon Gold 6248R, 384 GB)**

Данное небольшое расширение возможно без переоборудования помещения, т.е. без длительного отключения.

Пиковая производительность после расширения: **1 Петафлопс.**



РЕШЕНИЯ НТС

Рекомендовать руководству НИУ ВШЭ проведение следующих мероприятий, выполнение которых необходимо для обеспечения работы СКК НИУ ВШЭ в 2020-2021 гг. в штатном режиме:

1. выполнить первый этап расширения суперкомпьютерного комплекса НИУ ВШЭ в 2020 г.;
2. выполнить в 2021 г. ремонт помещения суперкомпьютерного комплекса для обеспечения возможности реализации второго этапа расширения суперкомпьютера;
3. выполнить второй этап расширения суперкомпьютерного комплекса НИУ ВШЭ в 2021 г.;
4. продлить техническую поддержку (гарантию) на оборудование суперкомпьютерного комплекса с 19 ноября 2021 г. на 3 года.

Атомистическое и континуальное моделирование в задачах физики

Заказчики:

Программа фундаментальных исследований НИУ ВШЭ

Исполнитель:

Международная лаборатория суперкомпьютерного атомистического моделирования и многомасштабного анализа, НИУ ВШЭ

руководитель проекта: В.В. Писарев

Цель исследования:

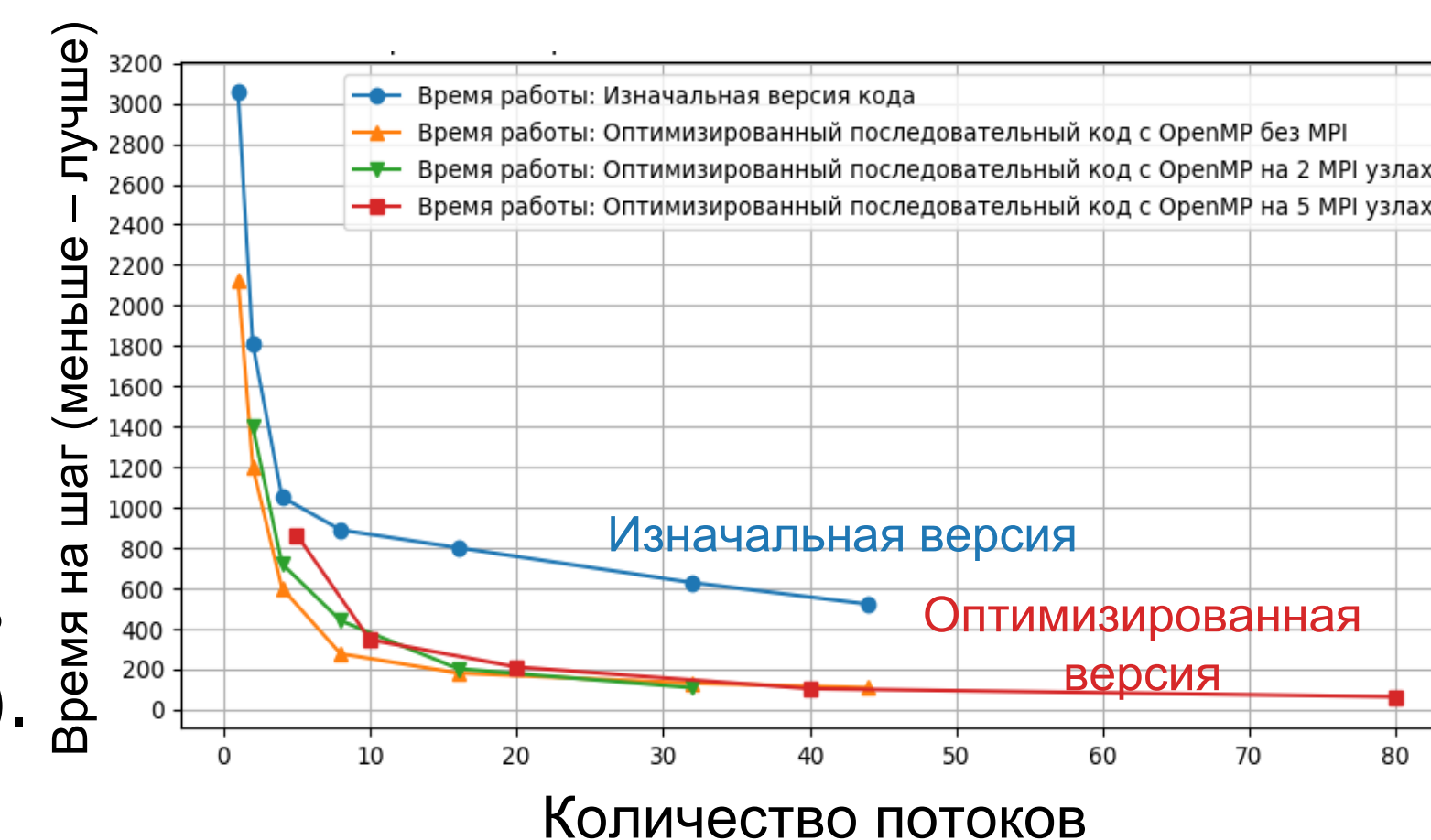
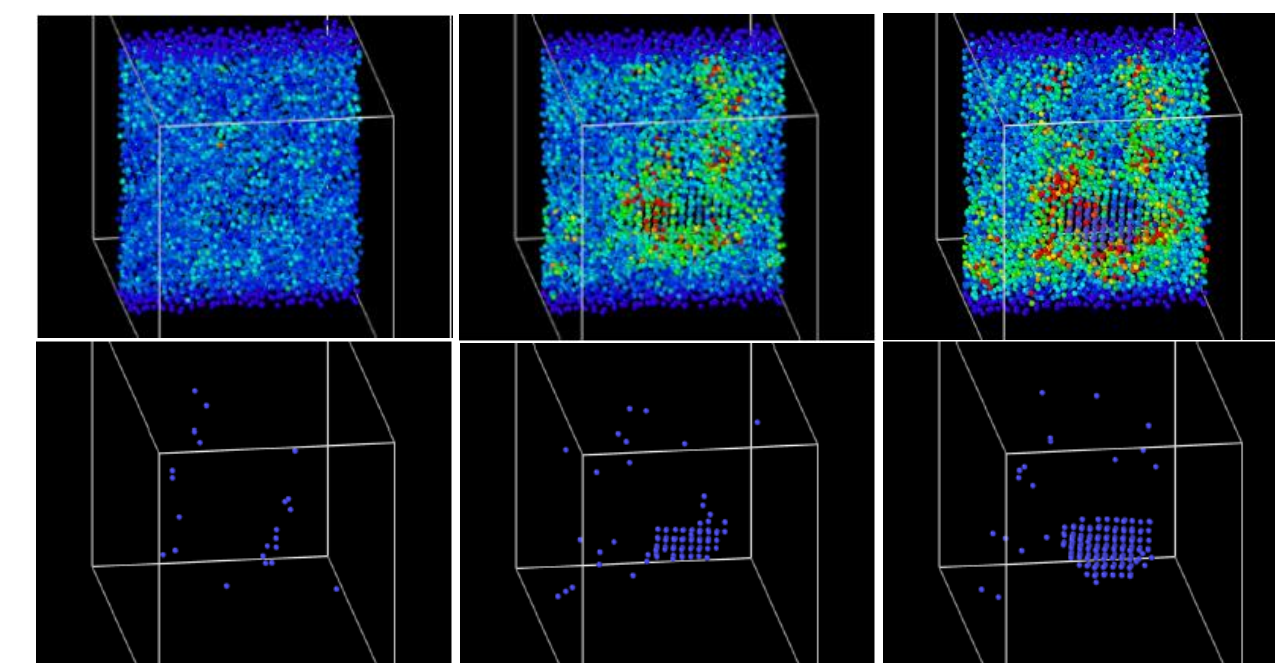
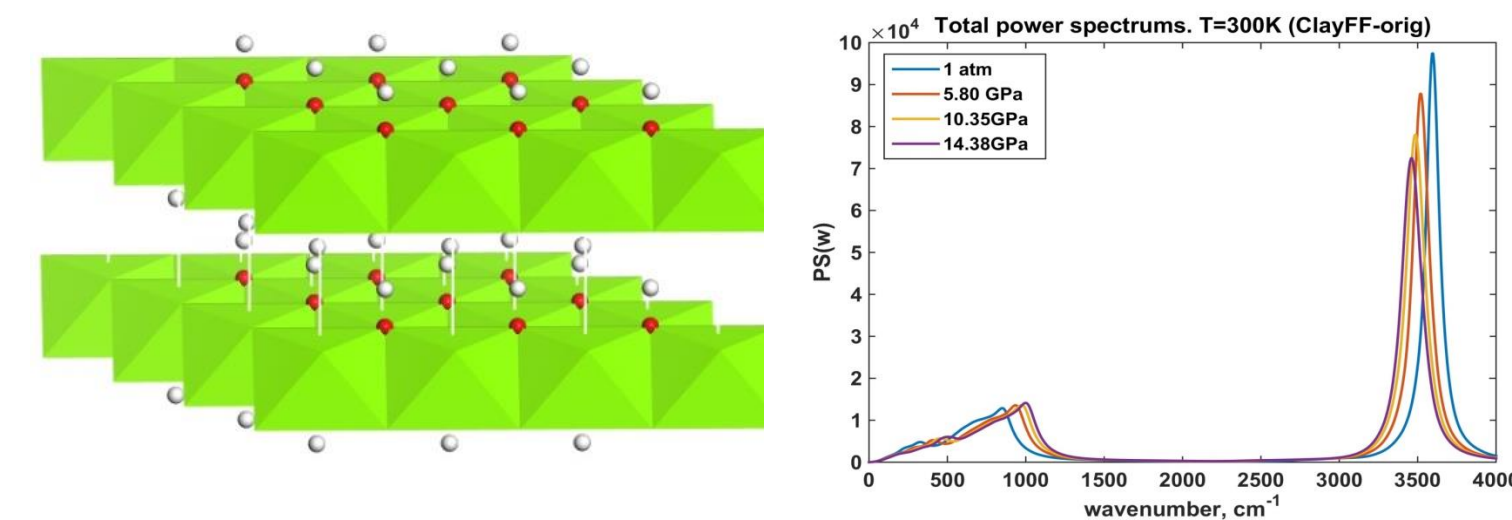
Исследование свойств материалов методами суперкомпьютерного моделирования, разработка вычислительных методов и их оптимизация под архитектуру СК ВШЭ

Результат:

- 1) Методом МД рассчитаны свойства материалов – уравнение состояния и свойства брусита $\text{Mg}(\text{OH})_2$ при высоких давлениях, коэффициенты переноса углеводородных флюидов, механизмы кристаллизации жидкометаллических пленок.
- 2) Программа для моделирования плазменного потока оптимизирована и распараллелена с использованием технологий OpenMP и MPI, что привело к ускорению расчёта в 48 раз. Исходные коды выложены в открытый доступ: <https://github.com/kolotinsky1998/Ionwake/tree/develop>

Статьи:

1. Kondratyuk N.D., Lenev D.Yu., Pisarev V.V. Transport coefficients of model lubricants up to 400 MPa from molecular dynamics // J. Chem. Phys. 2020, V. 152, P. 191104 (Q1).
2. Kirova E.M., Pisarev V.V. The morphological aspect of crystal nucleation in wall-confined supercooled metallic melt // J.Phys.: Condensed Matter (Q1).





Моделирование течения жидкости в сложной геометрии

Заказчики:

Институт теоретической физики им. Л.Д. Ландау РАН,
Российский научный фонд

Исполнитель:

Кафедра «Прикладные информационно-коммуникационные средства и системы», НИУ ВШЭ.

Руководитель проекта: Л.Н. Щур

Цель исследования:

Разработка методов моделирования сложных течений частиц в крови человека:

1. Распространение кластеров раковых клеток.
2. Адресная доставка лекарств в nano-капсулах.

Результат:

Отработана методика моделирования наведенных колебаний капель в жидкости.

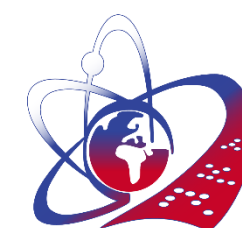
Метод реализован на платформе Palabos C++

50 шагов про времени с операциями I/O

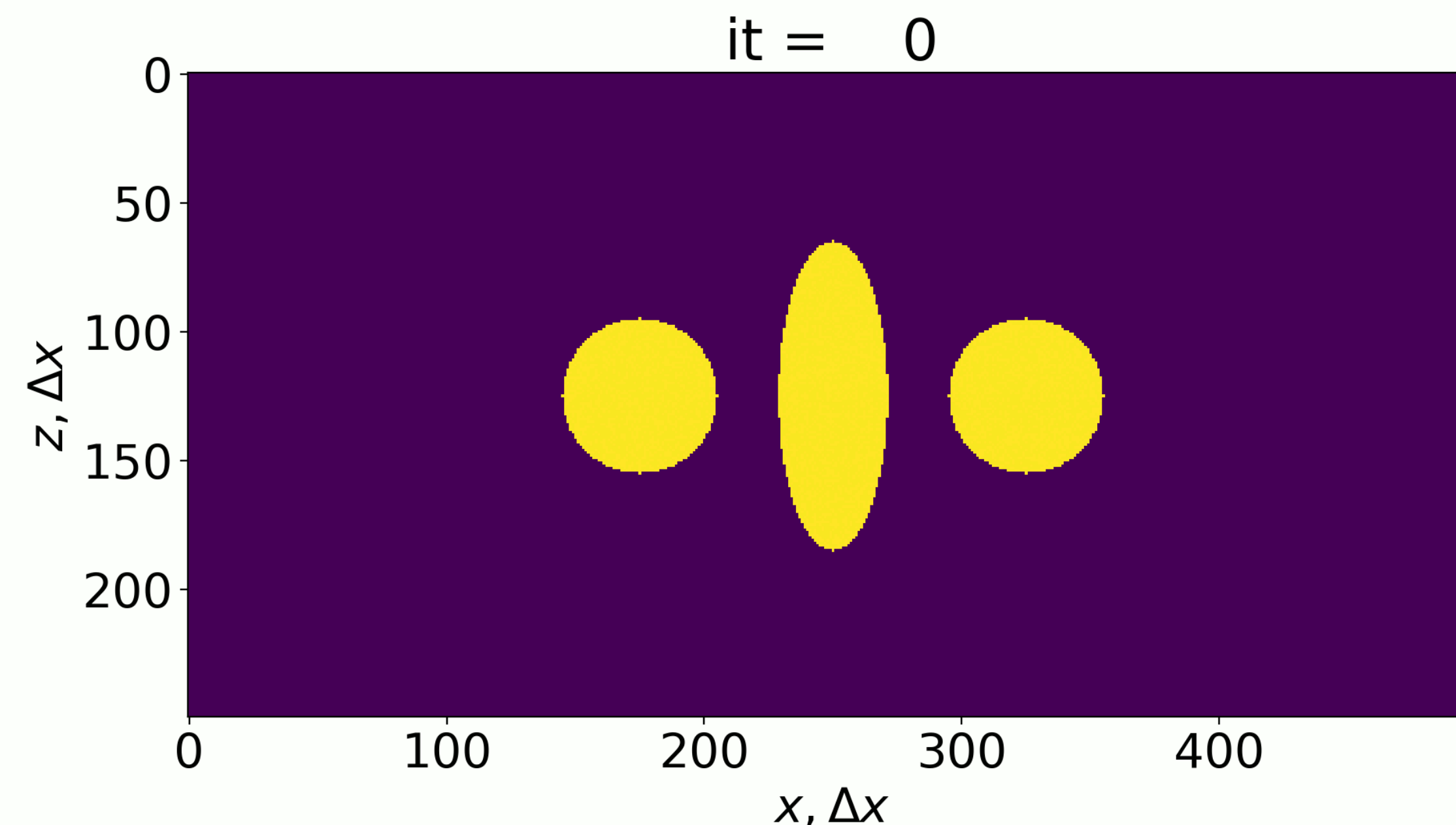
занимают 125 сек с 22 процессорных ядер.

Статьи:

1. Guskova M., Shchur V., Shchur L. *Simulation of drop oscillation using the lattice Boltzmann method*, Lobachevskii Journal of Mathematics. 2020. Vol. 41. No. 6. P. 992-995 (Q2).
2. Guskova M., Shchur L. *Drop oscillation modeling*, Proceedings Russian Supercomputer Days 2020 (Q3).



РНФ 19-11-00286





Расчет свободной энергии сольватации лекарственных соединений в scCO_2

Заказчики:

РФФИ, Научная лаборатория интернета вещей и киберфизических систем
НИУ ВШЭ

Исполнитель: МИЭМ НИУ ВШЭ

руководитель проекта: Ю.А. Будков

Цель исследования:

Оценка значений энергии сольватации лекарственных соединений в scCO_2 методами классического функционала плотности и молекулярной динамики.

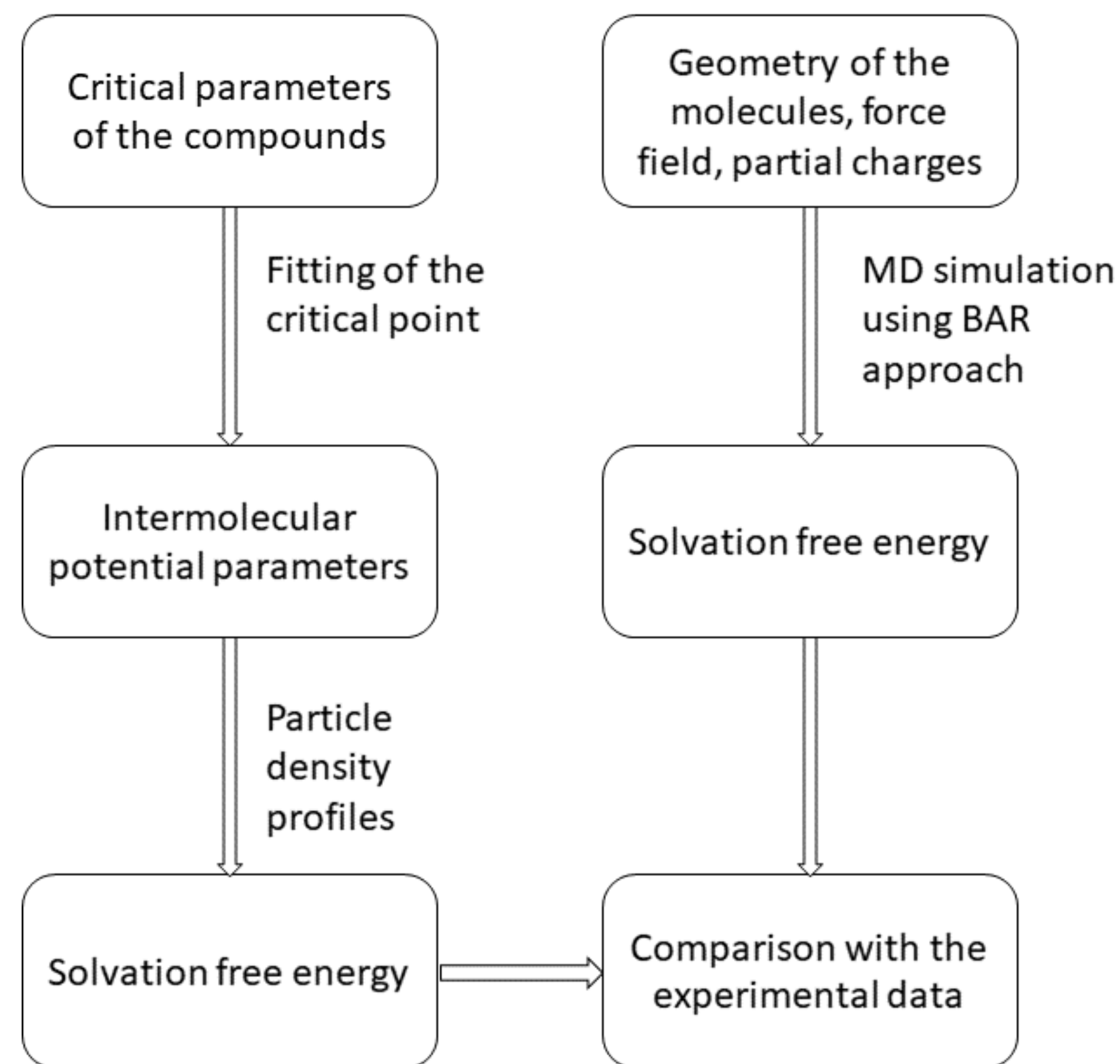
Результат:

Для реализации цели был разработан программный код для получения профилей плотности и написаны скрипты для упрощения процедуры запуска задач в пакете Gromacs. Подход применялся к следующим соединениям: ибупрофен, карбамазепин, аспирин, напроксен, кетопрофен и продемонстрировал разумное согласие с экспериментальными данными.

Статьи:

N.N.Kalikin, M.V.Kurskaya, D.V.Ivlev, M.A.Krestyaninov, R.D.Oparin, A.L.Kolesnikov, Y.A.Budkov, A.Idrissi, M.G.Kiselev. Carbamazepine solubility in supercritical CO_2 : a comprehensive study // Journal of Molecular Liquids, 2020, 311, 113104 (Q1).

D.L. Gurina, Y.A. Budkov, M.G. Kiselev. Impregnation of Poly(methyl methacrylate) with Carbamazepine in Supercritical Carbon Dioxide: Molecular Dynamics Simulation // The Journal of Physical Chemistry B



Изучение и усовершенствование современных методов ансамблирования нейронных сетей

Заказчики:

Samsung Research, Samsung Electronics

Исполнитель:

Центр глубинного обучения и байесовских методов,
лаборатория компании Самсунг, ФКН, НИУ ВШЭ
руководитель проекта А. П. Ашуха

Цель исследования:

Изучение и усовершенствование современных методов ансамблирования нейронных сетей.

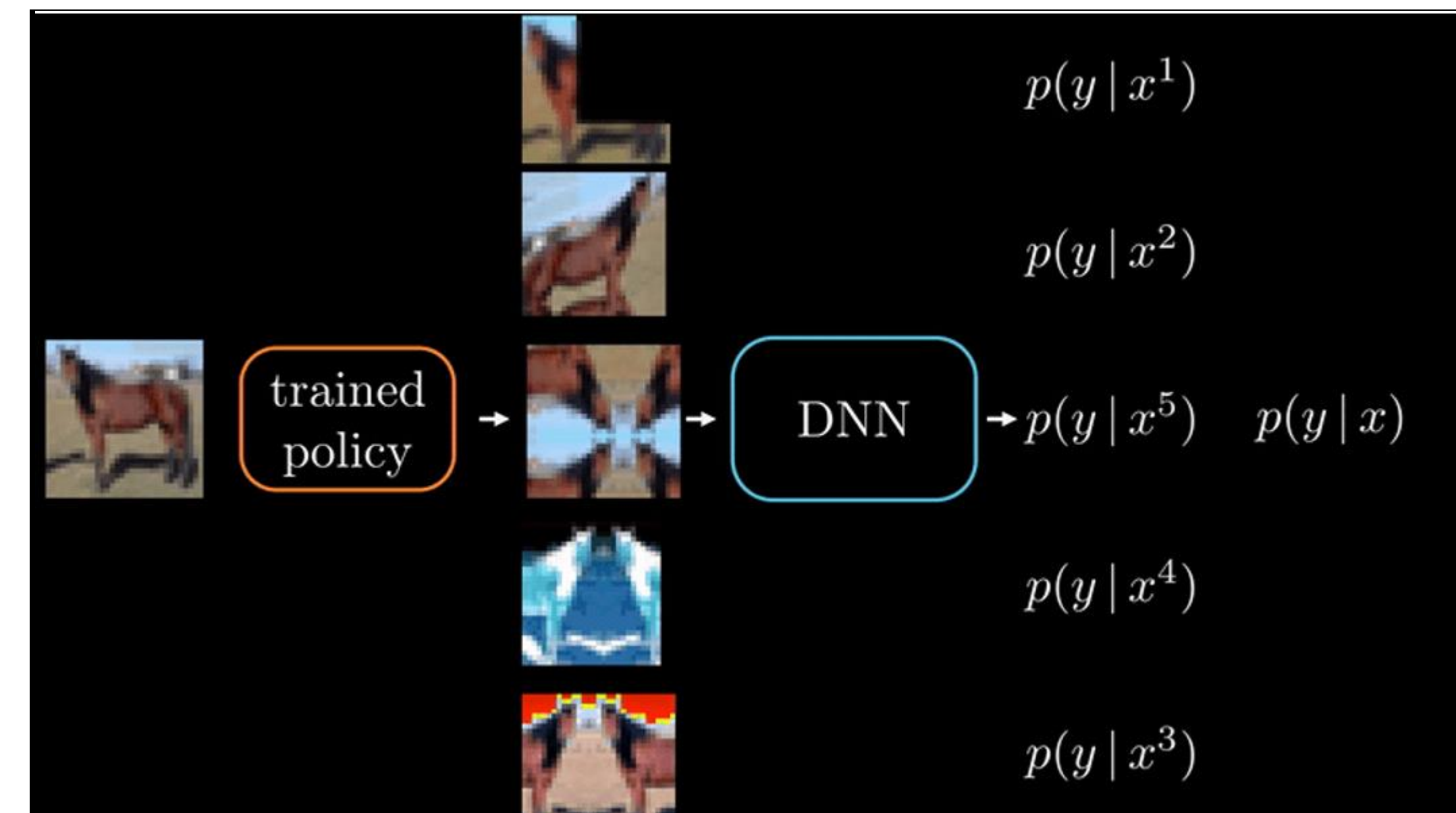
Результат:

- Проведено сравнение методов ансамблирования на реалистичных изображениях (CIFAR-10, CIFAR-100, ImageNet)
- Показана несостоятельность широко используемых метрик качества ансамблей, предложены метрики лишенные ряда недостатков;
- Предложены новые методы ансамблирования, которые могут быть скомбинированы с другими подходами

Статьи:

1. *Molchanov D., Lyzhov A., Molchanova Y., Ashukha A., Vetrov D.* Greedy Policy Search: A Simple Baseline for Learnable Test-Time Augmentation, Conference on Uncertainty in Artificial Intelligence 2020 (**A***)
2. *Ashukha A., Lyzhov A., Molchanov D., Vetrov D.* Pitfalls of In-Domain Uncertainty Estimation and Ensembling in Deep Learning, International Conference on Learning Representations 2020.

**SAMSUNG
Research**



Прогнозирование финансовых временных рядов на много шагов вперед

Исполнитель:

Лаборатория интеллектуальных систем и структурного анализа

Научный руководитель: д. ф.-м. н., проф., зам. рук. ДАДИИ ФКН, с.н.с. МНУЛ

ИССА ФКН Громов В. А.

Цель исследования:

Разработка новых методов прогнозирования хаотических (и, в частности, финансовых) временных рядов на много шагов вперед.

Результат:

Разработан метод прогнозирования хаотических временных рядов на много шагов вперед. Проверен на ряде Лоренца (классического бенчмарка в этой области) с линейным (вместо типичного экспоненциального) графика роста ошибок в зависимости от шага.

Развитие проекта:

Переход к работе с реальными финансовыми рядами.

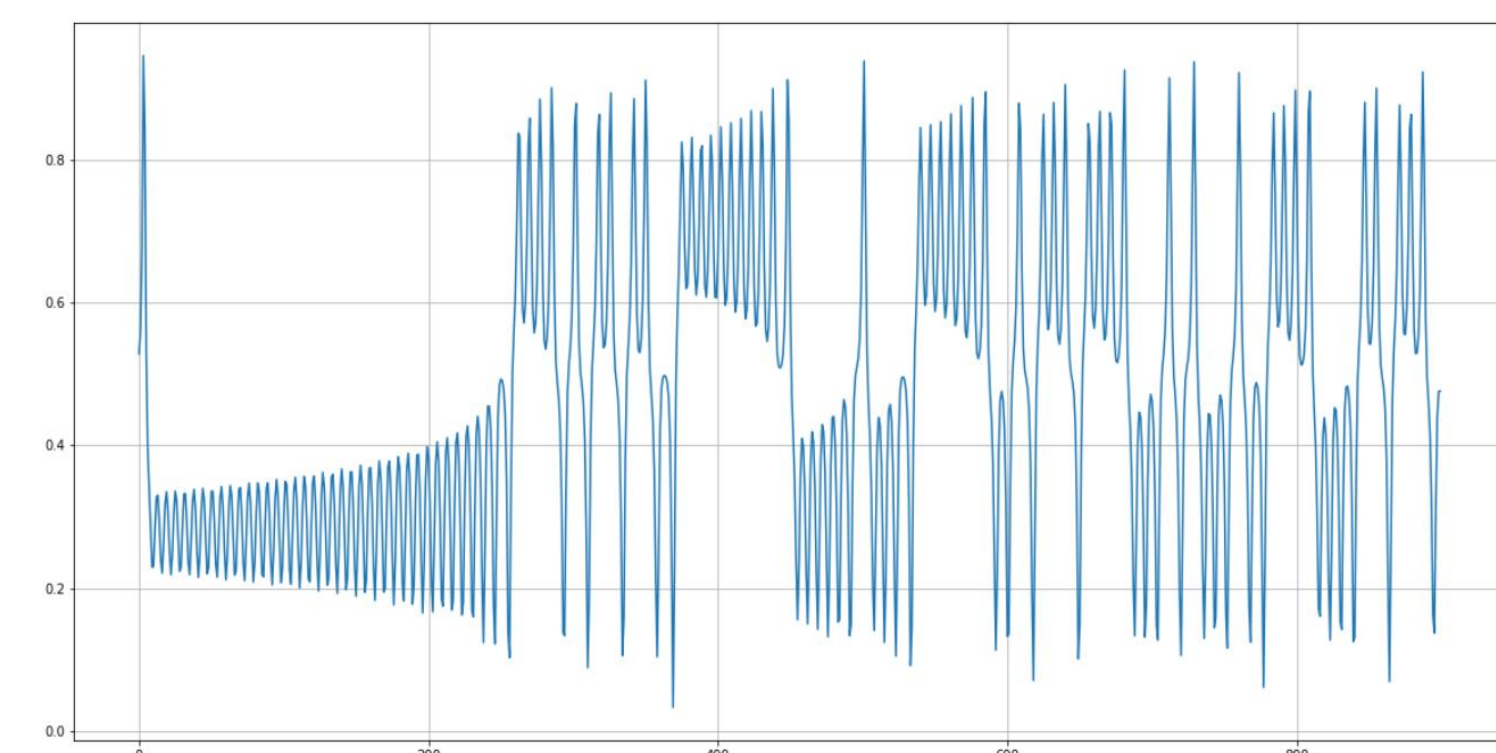
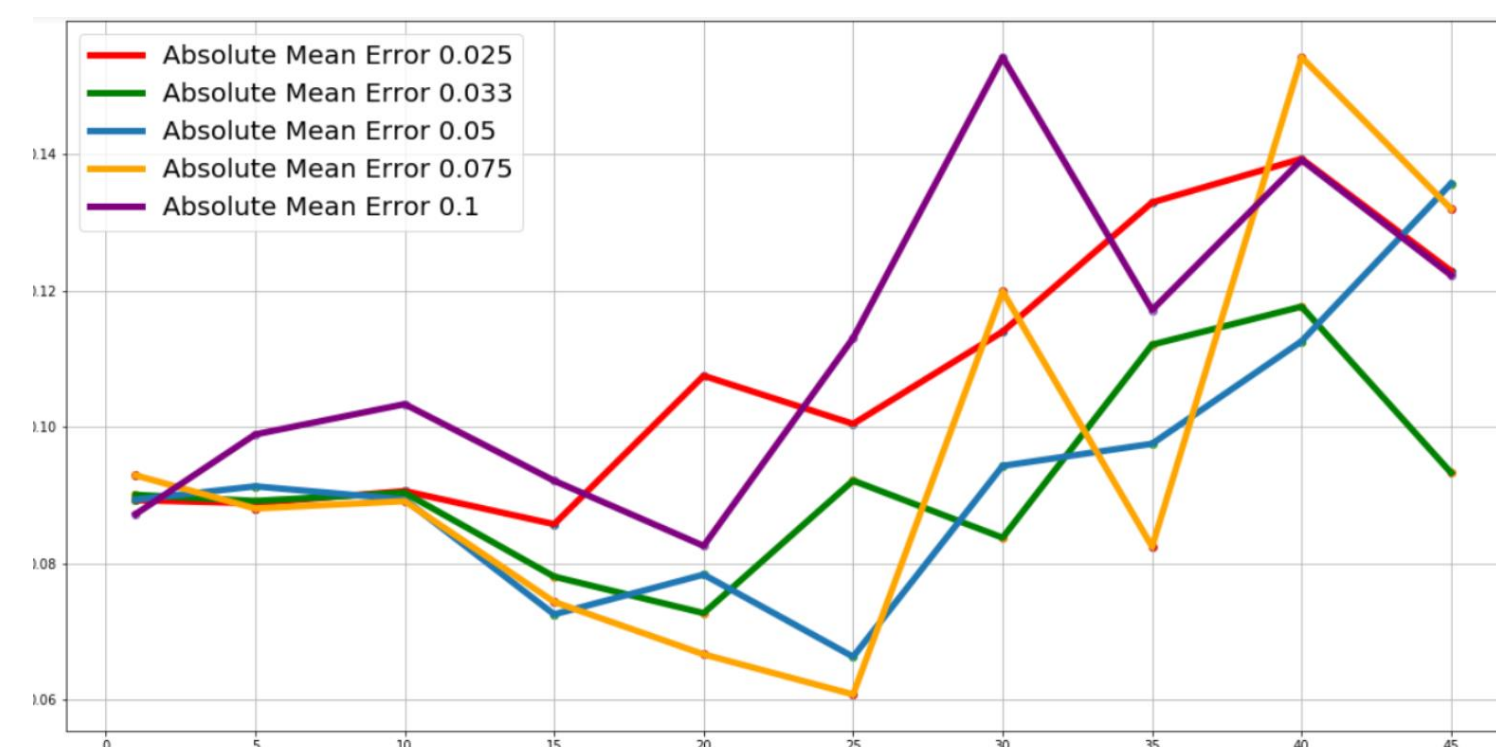
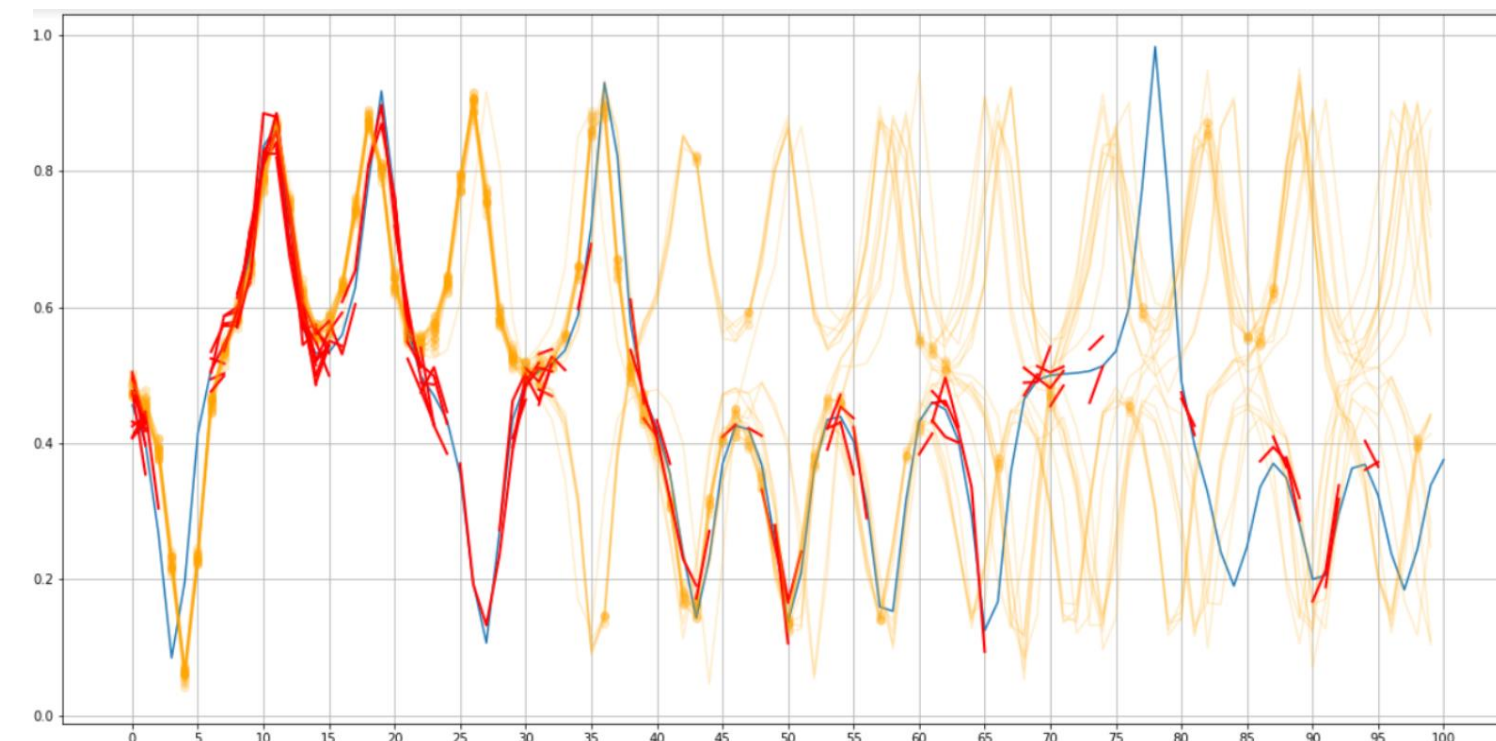
Статьи:

V.A. Gromov, Chaotic Time Series Prediction: Run for the Horizon // Proc. of Int. Conf. on Software Test, Machine Learning and Complex Process Analysis (TMPA-2019)

(Q3)

V.A. Gromov, P.S. Baranov, A.Yu. Tsybakin Prediction after a Horizon of Predictability: Non-Predictable Points and Partial Multi-Step Prediction for Chaotic Time Series, Neurocomputing

В.А. Громов, Ф.С. Баранов Прогнозирование хаотических временных рядов на много шагов вперёд, Вестник современных цифровых технологий





Интеграция высокопроизводительных вычислительных ресурсов для решения трудоемких задач оптимизации

Заказчики:

РФФИ, РФ



Исполнитель:

НИУ ВШЭ, ИППИ РАН

Руководитель проекта: О.В. Сухорослов



Цель исследования:

Разработка и апробация технологий интеграции распределенных вычислительных ресурсов для решения трудоемких задач глобальной оптимизации.

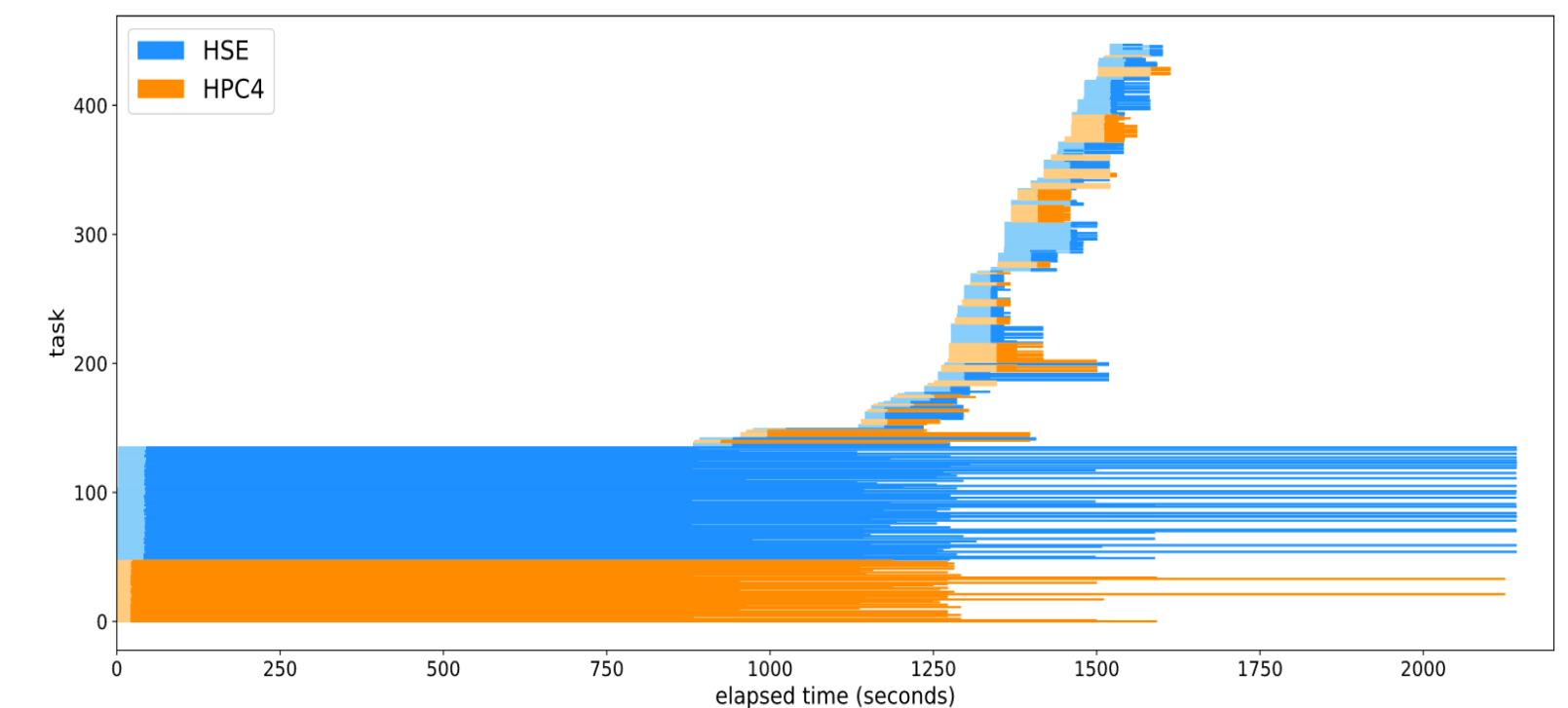
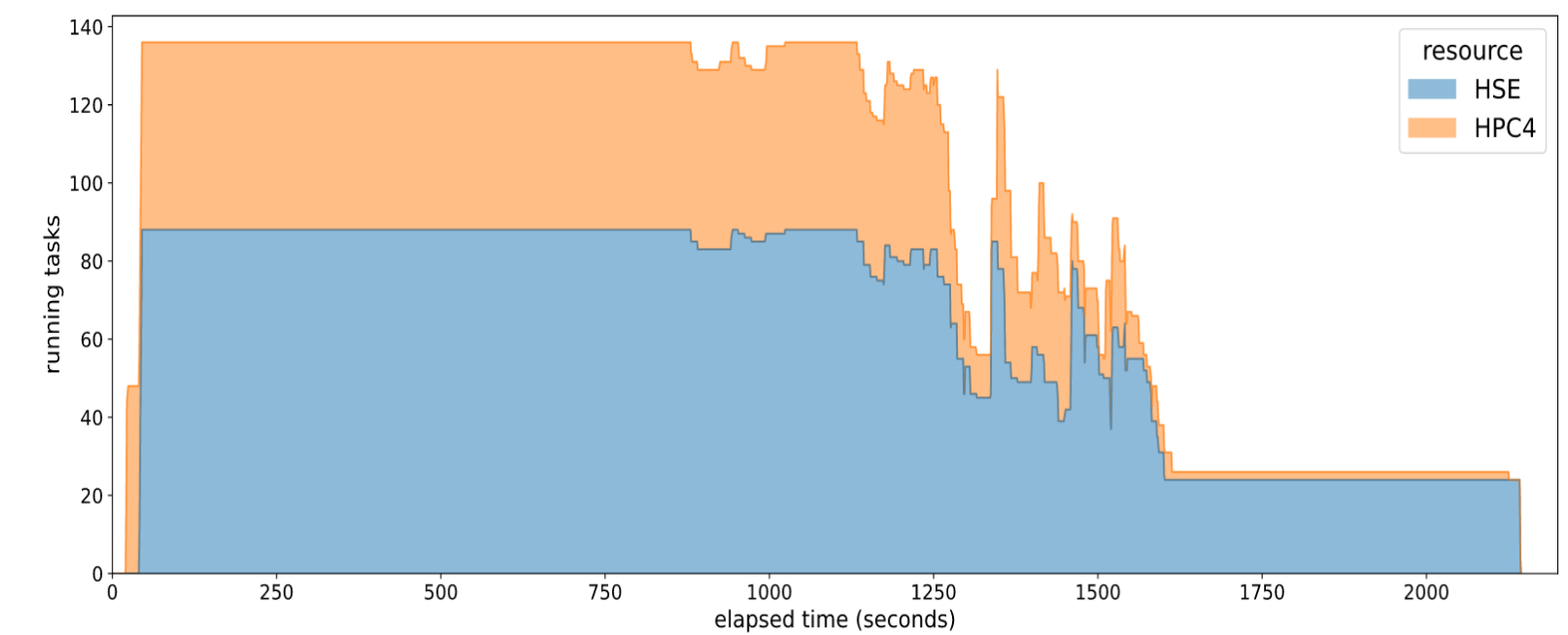
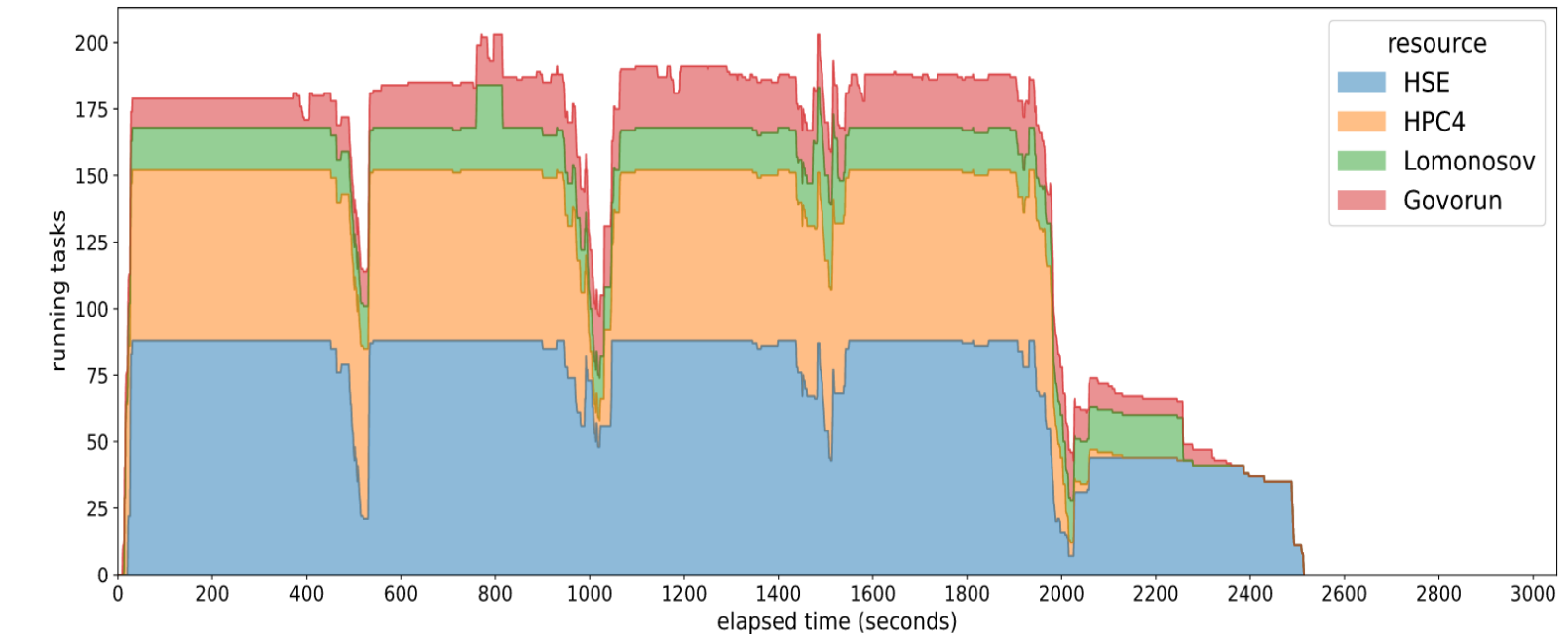
Результат:

Продemonстрирована возможность совместного использования ресурсов нескольких кластеров из Top50 (ВШЭ, МГУ, ОИЯИ, НИЦ КИ) для решения оптимизационных задач на базе платформы Everest, <http://everest.distcomp.org/>:

- DDBNB, для решения задач оптимизации методом ветвей-и-границ;
- SSOP, для реализации технологии SvF сбалансированной идентификации математических моделей, <https://arxiv.org/abs/1907.13444>

Статьи:

1. Sukhoroslov O., Voloshinov V. Running Many-Task Applications Across Multiple Resources with Everest Platform // RusSCDays-2020 (Q3).
2. Sokolov A., Sokolova L. Balanced Identification of the COVID-19 Dynamic Model: General Biological and Country Specific Social Features // ResearchGate, 2020, DOI:10.13140/RG.2.2.31644.92809.



Извлечение сущностей и отношений для корпуса RuREBus

Цели исследования:

- Разметить сущности и отношения на корпусе документов стратегического планирования RuREBus
- Обучить модель для извлечения сущностей и отношений на данном корпусе.

Результат:

Представлен корпус с разметкой сущностей и отношений, на основе него проведено соревнование на конференции Диалог 2020. • На корпусе обучена и протестирована модель для извлечения сущностей и отношений.

Публикации:

- *Artemova E., Batura T., Golenkovskaya A., Ivanin V., Ivanov V., Sarkisyan V., Smurov I., Tutubalina E.* So what's the plan? Mining strategic planning documents. In Digital Transformation and Global Society: Proceedings of the 5th International Conference (DTGS 2020), St. Petersburg, Russia, 2020 (Q3).
- *Ivanin, V., Artemova, E., Batura, T., Ivanov, V., Sarkisyan, V., Tutubalina, E., Smurov, I.* Rurebus-2020 shared task: Russian relation extraction for business. In: Computational Linguistics and Intellectual Technologies: Proceedings of the International Conference "Dialog". Moscow, Russia, 2020.



Kazan Federal
UNIVERSITY

ABBYY



A.P. Ershov Institute of Informatics Systems
Russian Academy of Sciences
Siberian Branch

N* Novosibirsk
State
University
*THE REAL SCIENCE



Международные соревнования Learn to Move

Заказчик:

НИУ ВШЭ СПб

Исполнитель:

Центр анализа данных и машинного обучения,
НИУ ВШЭ СПб, руководитель проекта: А.А. Шпильман

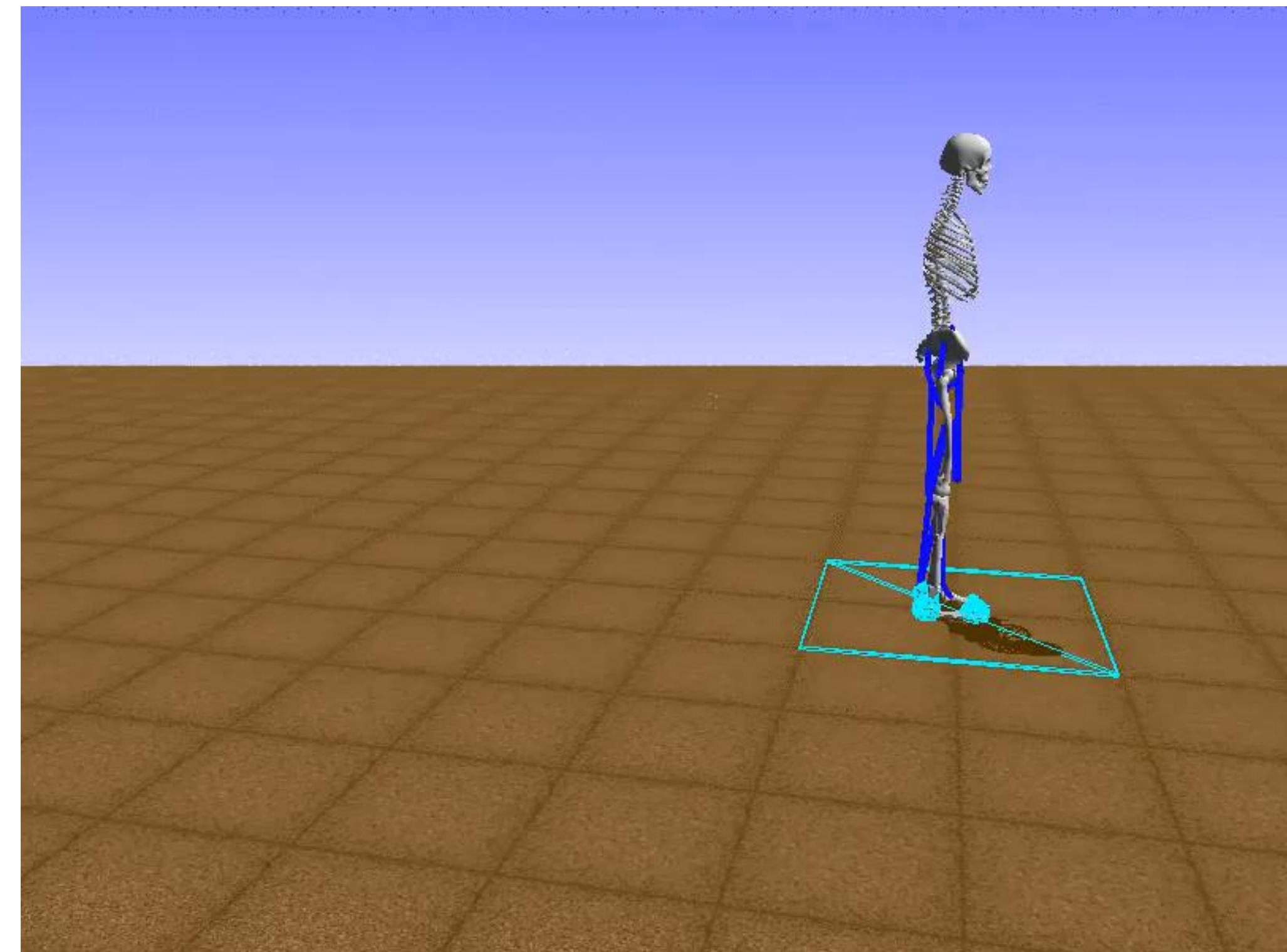
Цель исследования:

Разработка метода контроля модели двигательного аппарата человека.

Результат:

Разработана библиотека асинхронного симулирования/обучения для глубокого обучения с подкреплением. Библиотека позволяет обучать глубокую *нейронную сеть, которая получает на вход координаты, скорости и ускорения ключевых точек и выдает вектор мышечных напряжений.*

Полученная сеть позволила занять **7-е место** в международном соревновании Learn to Move: Walk Around на конференции NeurIPS2019.





Методы обнаружения объектов новых классов, определяемых одной демонстрацией

Заказчики:

Samsung Research, Samsung Electronics,
Российский научный фонд

Исполнитель:

Центр глубинного обучения и байесовских методов,
лаборатория компании Самсунг, ФКН, НИУ ВШЭ.

Руководитель проекта: А.А. Осокин

Цель исследования:

Разработка новых методов обнаружения объектов новых классов,
которые не были доступны на этапе обучения.

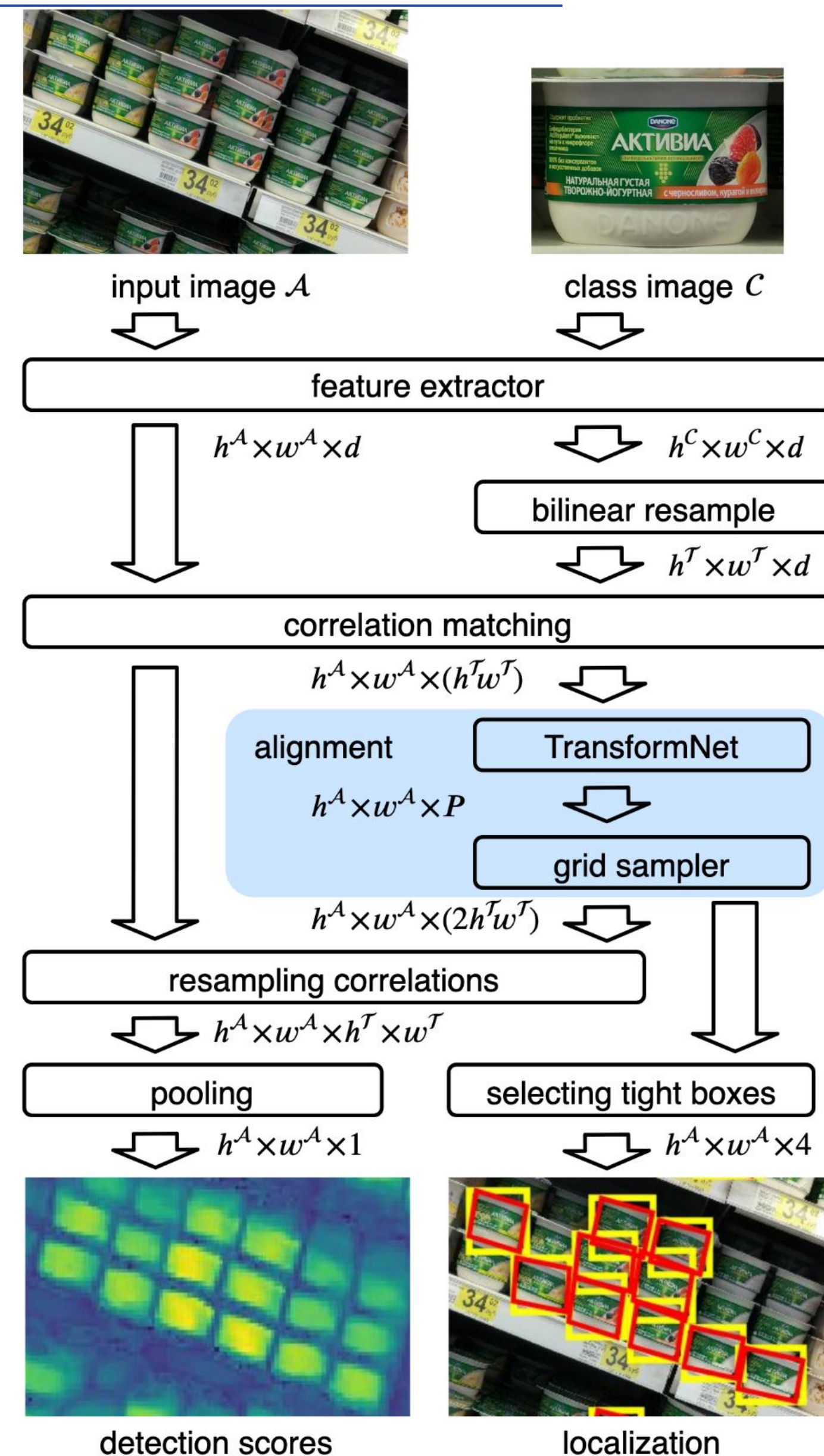
Результат:

Для решения задачи разработаны архитектура нейросети и алгоритм обучения. Метод протестирован на задачах обнаружения и распознавания товаров на полках магазинов, а также на задаче обнаружения трехмерных объектов.

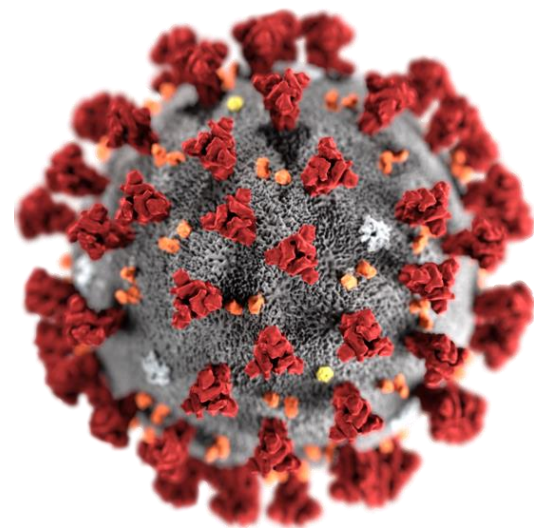
Метод реализован в рамках библиотеки pytorch, все исходные коды выложены в открытый доступ: <https://github.com/aosokin/os2d>

Статьи:

Osokin A., Sumin D., Lomakin V. OS2D: One-Stage One-Shot Object Detection by Matching Anchor Features // In proceedings of the European Conference on Computer Vision (ECCV), 2020



АНАЛИЗ ЭПИДЕМИИ КОРОНАВИРУСА В РОССИИ



Заказчик: консорциум CoRGI



Исполнитель:

Международная лаборатория статистической и вычислительной геномики

Партнёры:

Сколтех (Москва), НИИ гриппа (Санкт-Петербург), ИППИ (Москва).

Цель исследования:

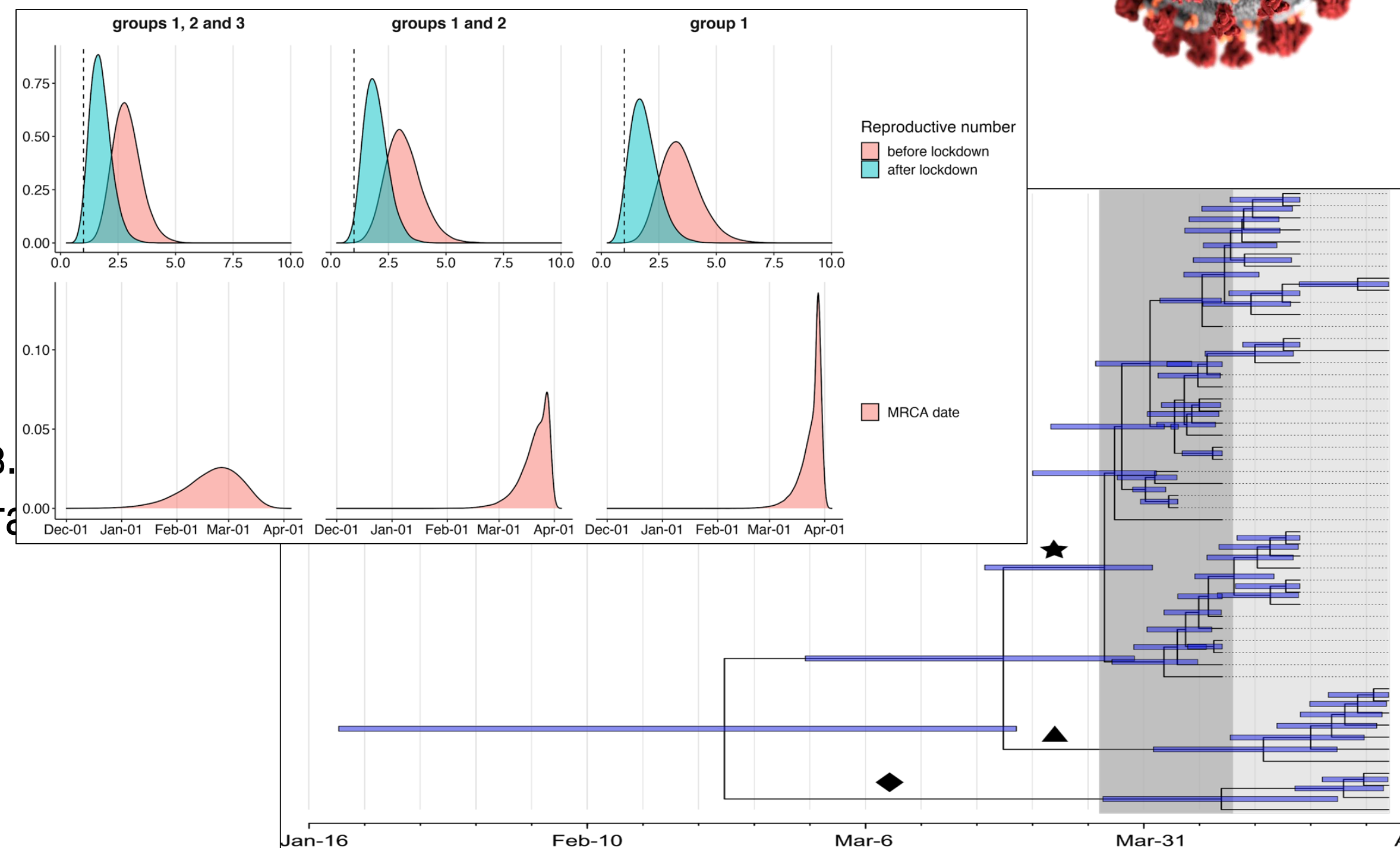
Анализ эпидемии коронавируса SARS-CoV-2 в России.

Результаты:

- Определено, что в Россию коронавирус завозился несколько десятков раз.
- Большинство завозов случились в конце февраля - первой половине марта из Европы.
- Вирус был завезен в Россию не менее 67 раз.
- Следов завозов инфекции из Китая нет.
- Выполнен байесовский анализ филодинамики вспышки Covid-19 в НИИ им.Вредена (Санкт Петербург) с использованием пакета BEAST2.
 - Определен эффект карантина,
 - Обнаружено от двух до трёх независимых заносов инфекции в больницу.

Перспективы:

- Изучение внутрипациентской изменчивости коронавируса SARS-CoV-2:
 - Разработка нового метода для определения вариантов вируса, циркулирующих в популяции,
 - Планируется разработка моделей, учитывающих передачу нескольких вариантов вируса между пациентами.



Статьи:

Komissarov et al. Genomic epidemiology of the early stages of SARS-CoV-2 outbreak in Russia. 2020, medRxiv

Упоминания в медиа:

<https://iq.hse.ru/news/381056189.html>

<https://www.kommersant.ru/doc/4441864>

<https://www.vesti.ru/nauka/article/2431960> и др.



НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
УНИВЕРСИТЕТ

<https://hpc.hse.ru>
pkostenetskiy@hse.ru

Телефон: +7(495)7729590 (28030)

Адрес: Москва, Покровский бульвар 11, S244