



НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
УНИВЕРСИТЕТ

Цифровой блок НИУ ВШЭ

СУПЕРКОМПЬЮТЕР «сHARISMA» 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

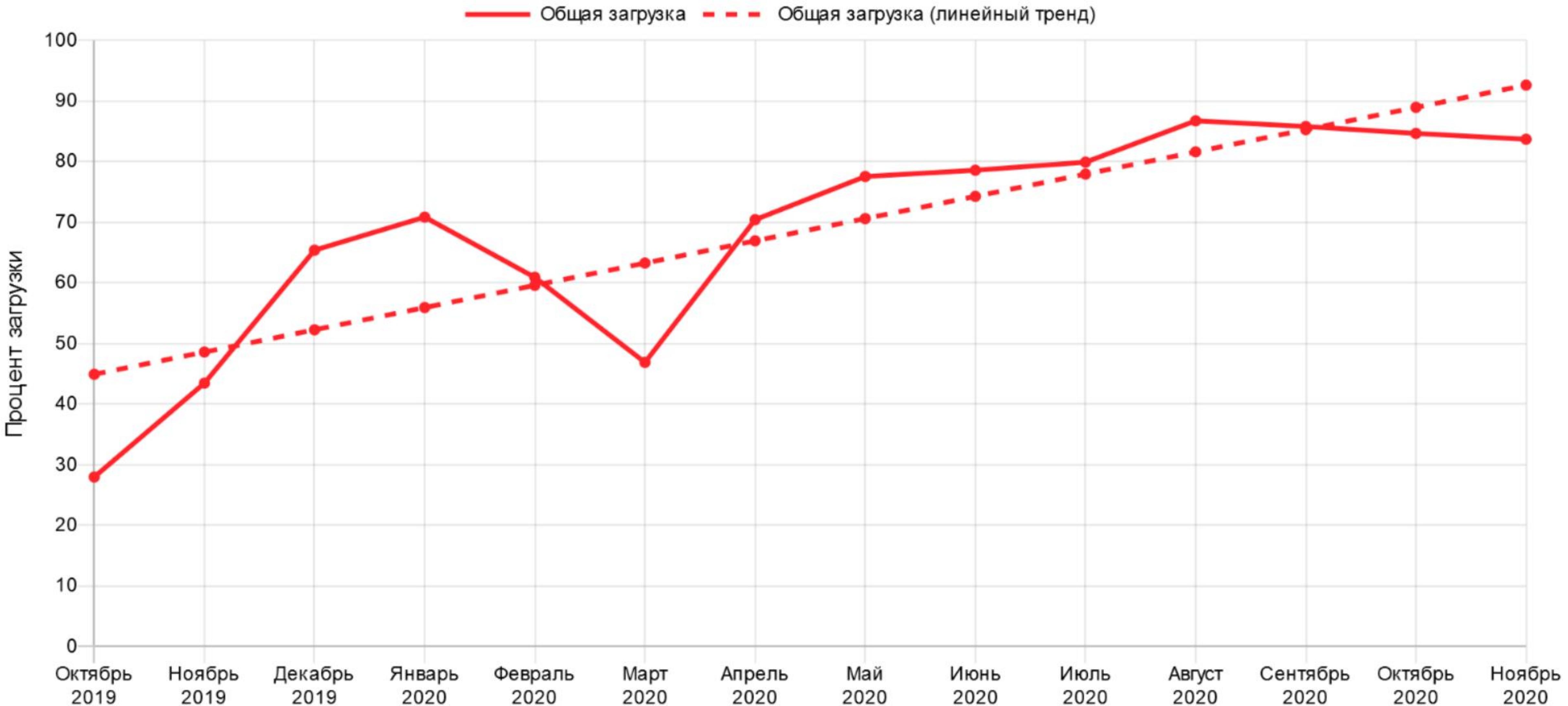
«сHARISMA» (COMPUTER OF HSE FOR ARTIFICIAL INTELLIGENCE AND SUPERCOMPUTER MODELLING)

- 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)**



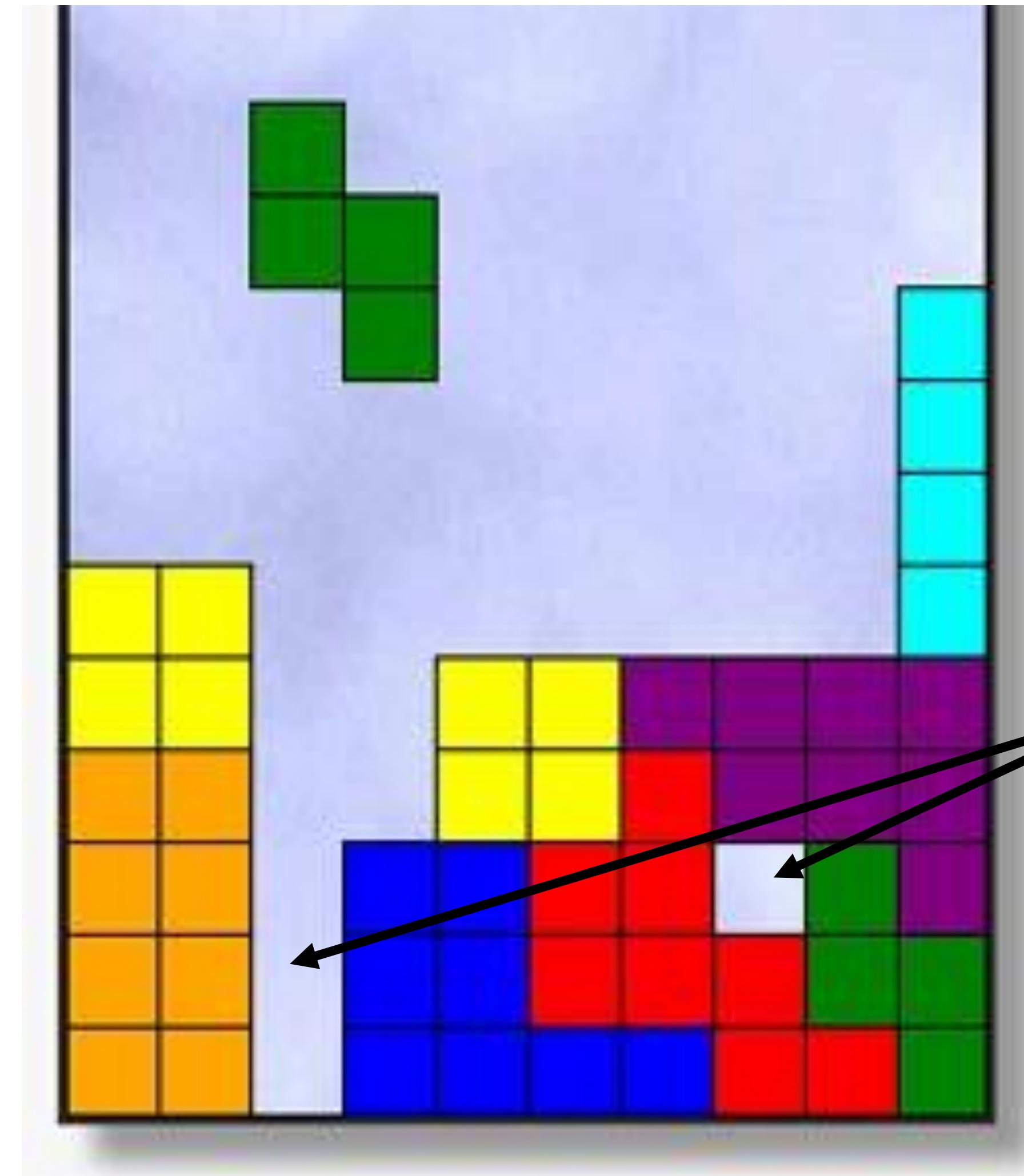


ЗАГРУЗКА СУПЕРКОМПЬЮТЕРА





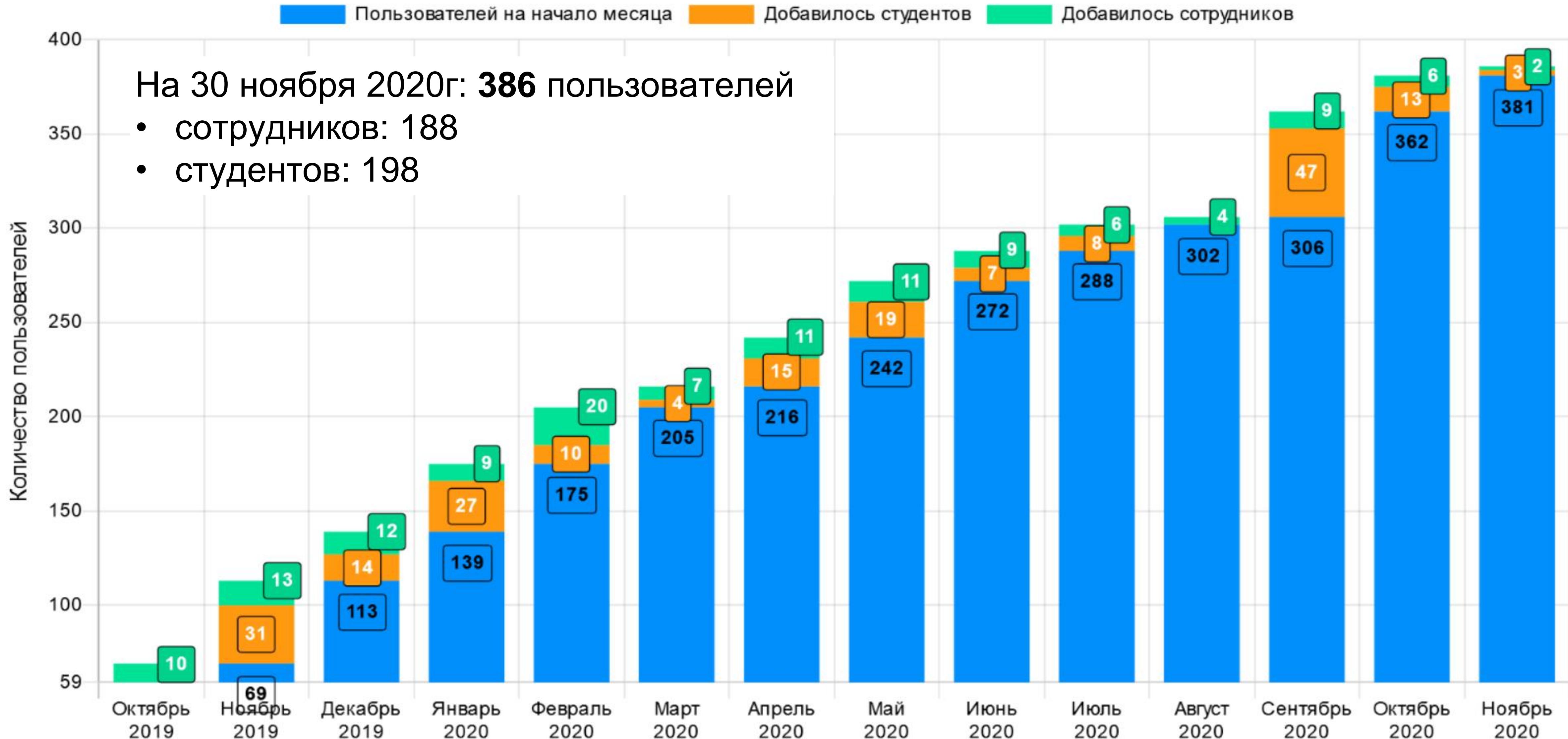
О НЕДОСТИЖИМОСТИ 100% ЗАГРУЗКИ



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

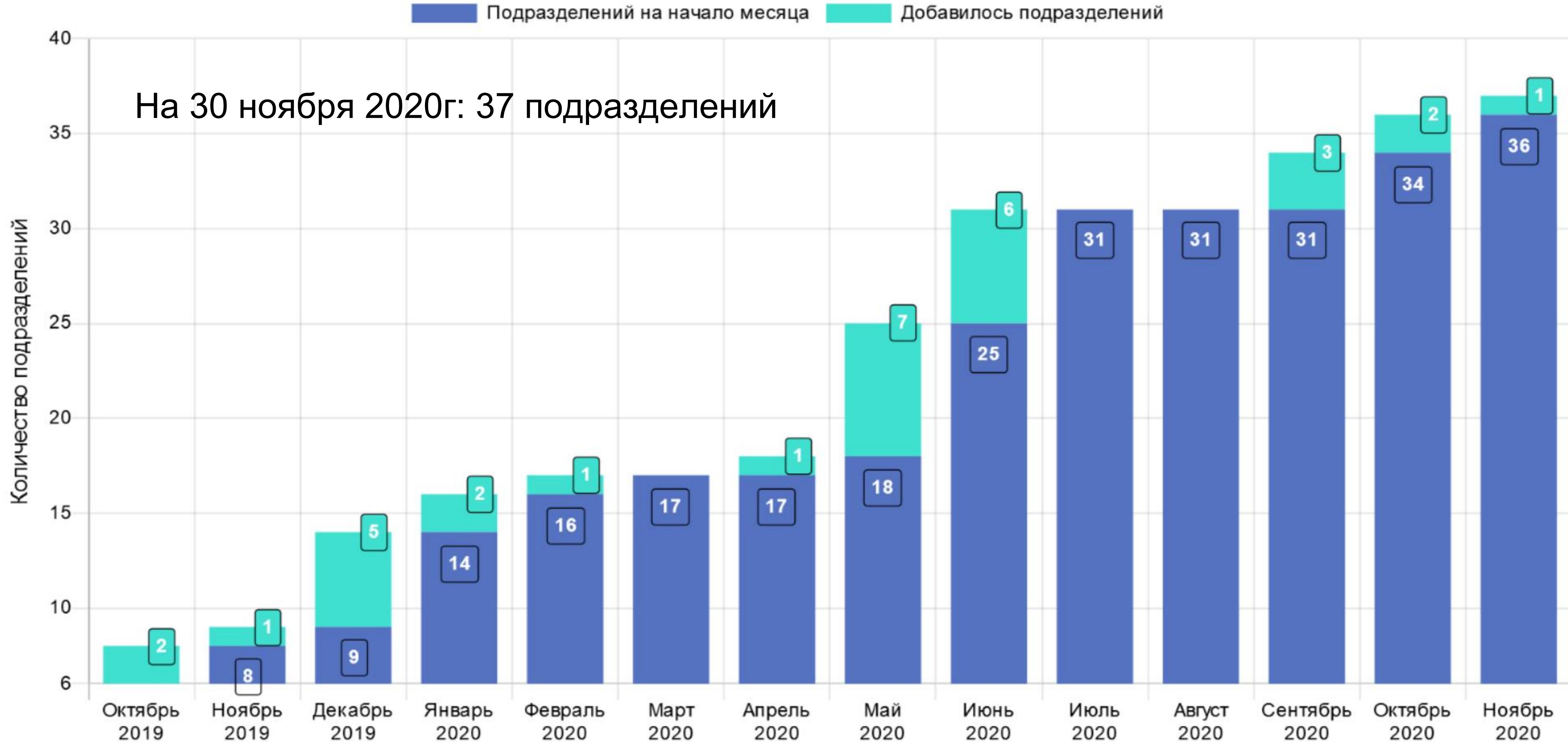


ПРИРОСТ КОЛИЧЕСТВА ПОЛЬЗОВАТЕЛЕЙ





ПРИРОСТ КОЛИЧЕСТВА ПОДРАЗДЕЛЕНИЙ



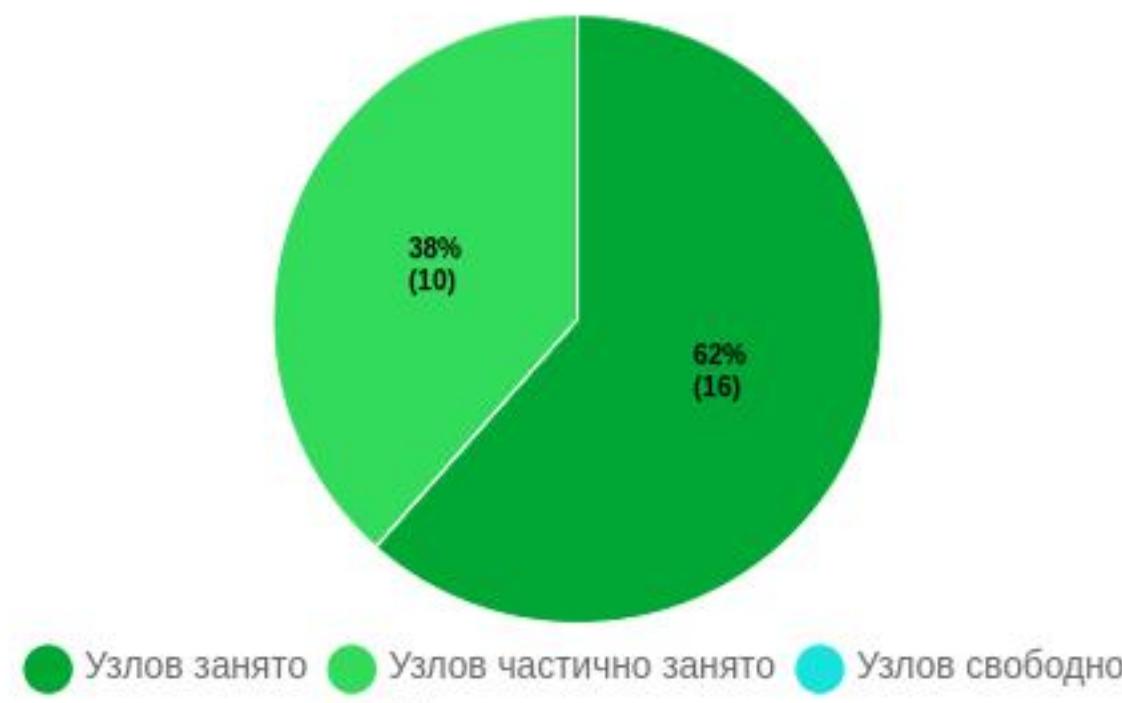
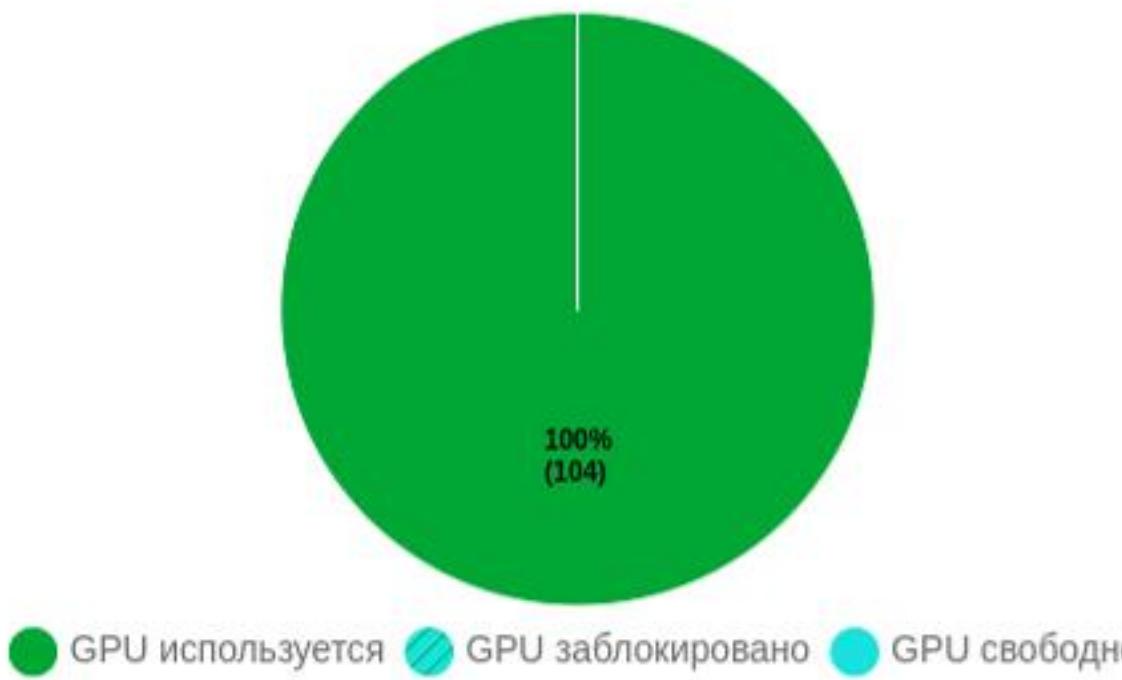
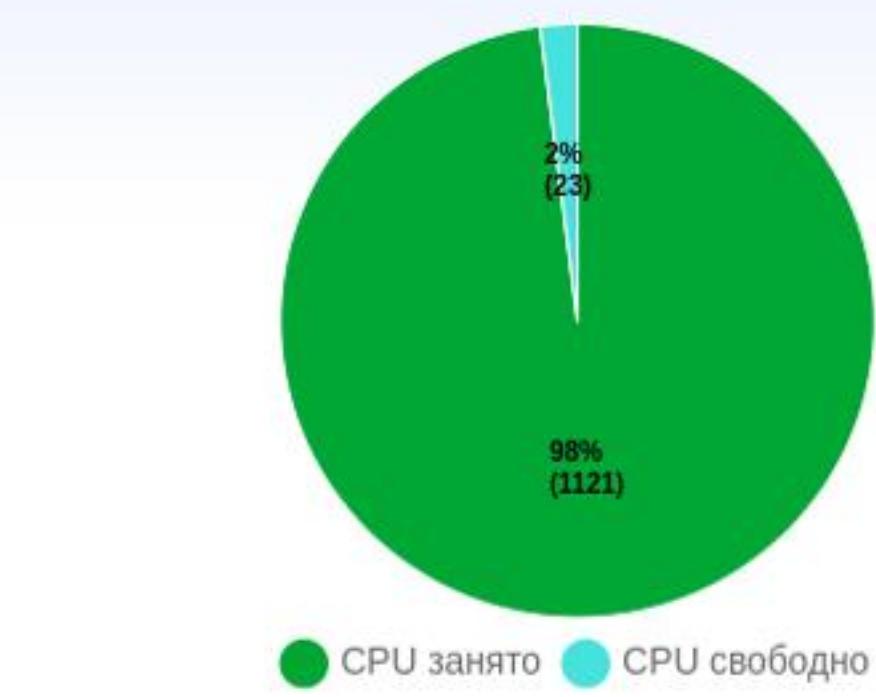


ПРИРОСТ КОЛИЧЕСТВА НАУЧНЫХ ГРУПП (ПРОЕКТОВ)



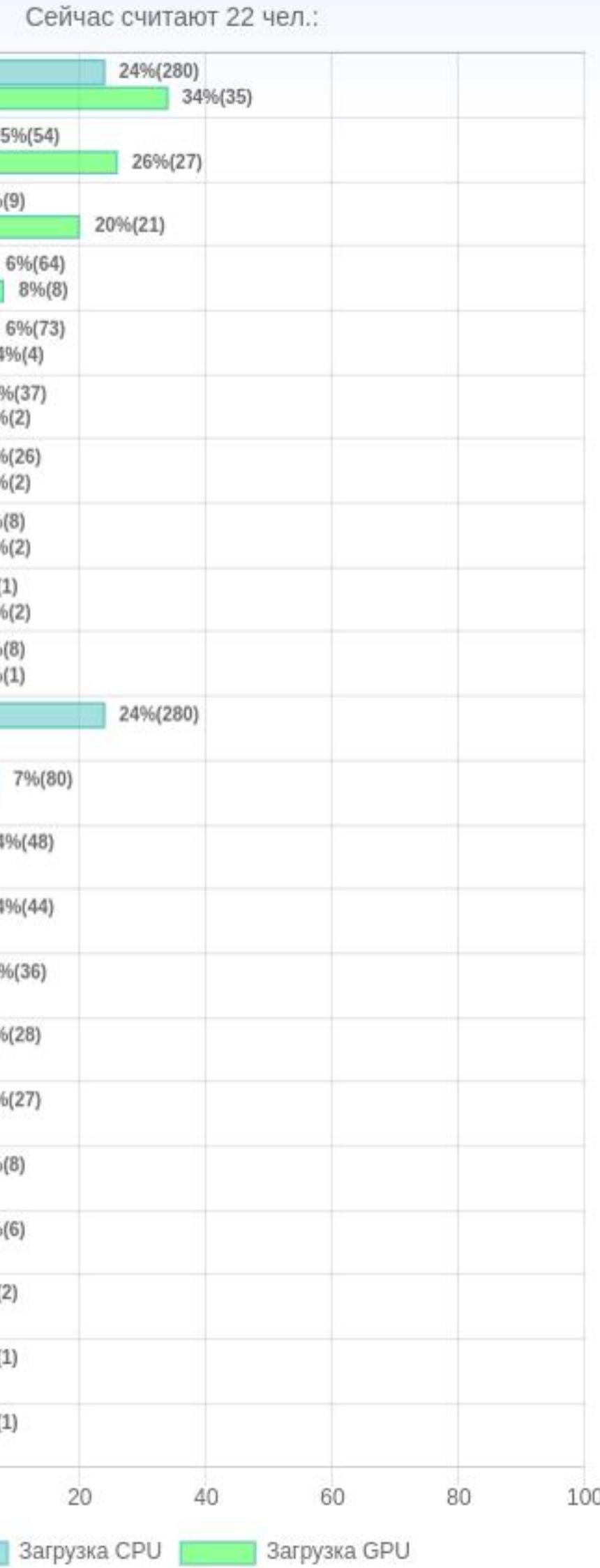
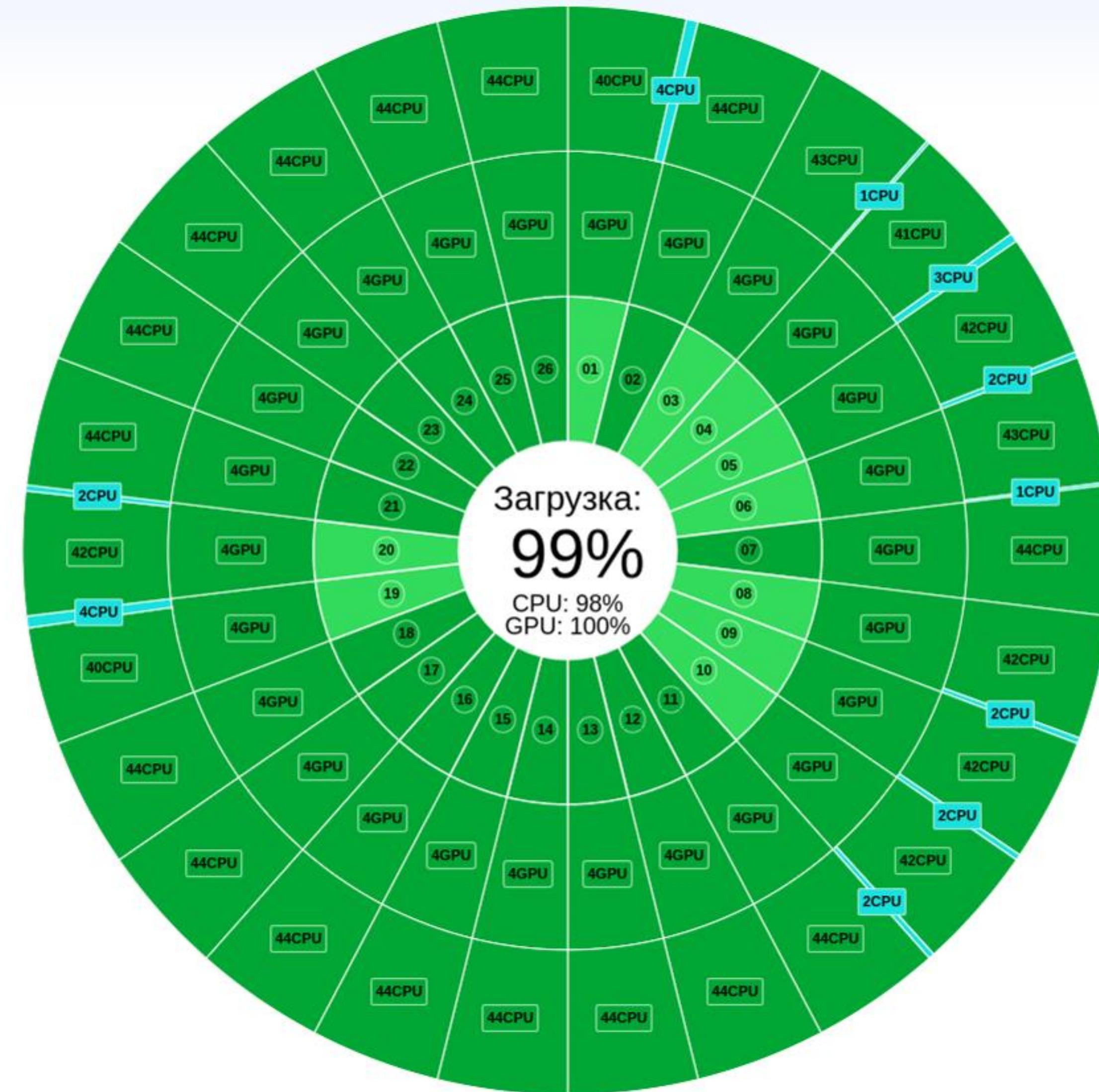


РАЗРАБОТАНА СОБСТВЕННАЯ СИСТЕМА МОНИТОРИНГА



Загрузка суперкомпьютерного комплекса НИУ ВШЭ

🕒 🔒 ⚛️ 🌃 📈 🌐 💡 11:07:11





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, cnpuy 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 научный задач: MATLAB
- Математические вычисления: GNU Octave
- Молекулярная динамика: GROMACS
- Филогенетический анализ: BEAST, BEAST2, BEAGLE, IQ-TREE
- Обработка фрагментов ДНК: GSL, SAMtools, ANGSD, HTSlip
- 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

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

The screenshot shows the homepage of the HSE Supercomputer Support Service Desk. At the top, there is a blue header bar with the HSE logo and navigation links for 'Добавить объявление' (Create announcement), 'Запросы' (Requests), and a user profile icon. Below the header, a large white central area contains the following text:

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.

Below this text is a search bar with the placeholder 'В чем требуется помочь?' and a magnifying glass icon. To the right of the search bar is a link 'Поиск по справке'.

The main content area is divided into five sections, each with an icon and a title:

- ⚠ 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.

At the bottom of the page, there is a small note: '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

[HSE University](#) → Supercomputer Modeling Unit

RU EN

Supercomputer Modeling Unit

The HSE University Supercomputer Simulation Unit was created on October 14, 2019.

The main tasks of the unit:

- Methodological support for the use of supercomputer computing by the HSE University departments.
- Managing user roles and access to computing resources.
- Administration of the information systems and resources for high-performance computing.
- Managing documentation regarding the functioning of systems and resources of high-performance computing; compiling user and administrator manuals

Support

- User Registration
- Basic User's Guide
- Running Jobs Guide
- Application Software
- ServiceDesk

About us

- About our unit
- HPC Cluster
- Cluster Software

Customer Support

News

Name the HSE Supercomputer: the Final Stage of Voting Kicks Off

Have you spotted a **typo**?
Highlight it, click Ctrl+Enter and send us a message. Thank you for your help!



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 системы 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
		имя		1	2	1	2	3	4		
Скорость вращения вентиляторов: 50 %	cn-001	51		61	34	34	34	34	16	36	60%
Максимальная t на выходе: 40 °	cn-002	59		62	31	31	31	31	16	38	62%
АРС ИБП Заряд батарей: 100% Время на батареях: 134 мин. Напряжение на входе: 393 В Нагрузка: 36620 Вт (22%)	cn-003	58		60	31	31	31	31	17	38	68%
	cn-004	57		63	25	25	25	25	16	38	64%
	cn-005	54		53	31	31	31	31	18	38	61%
	cn-006	50		62	30	30	30	30	18	37	61%



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:
 - --gpus (или -G) – количество GPU для задачи;
 - --gpus-per-node – количество GPU на каждый выделяемый узел;
 - --gpus-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.

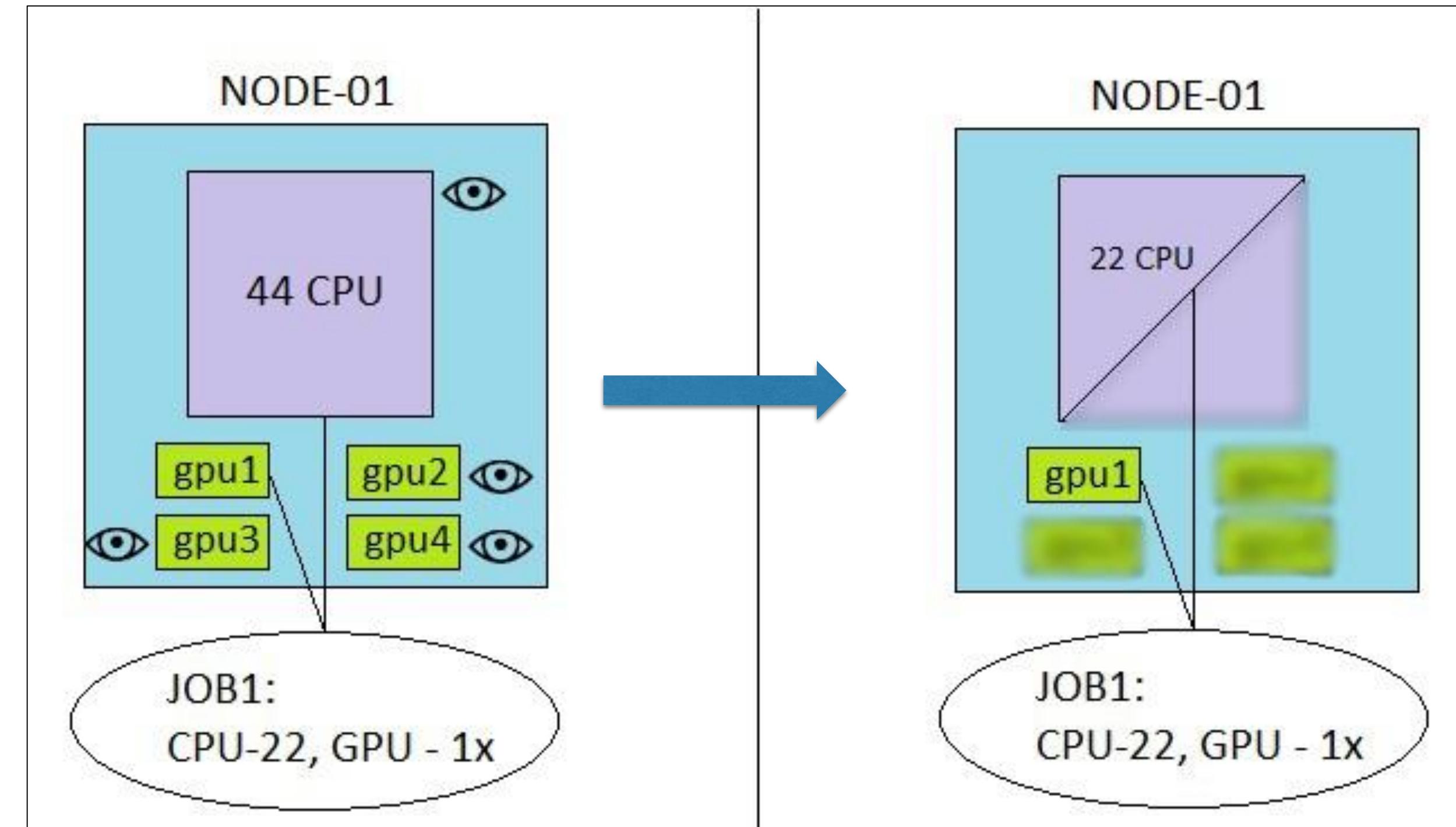




ОПТИМИЗАЦИЯ СИСТЕМЫ ОЧЕРЕДЕЙ

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.

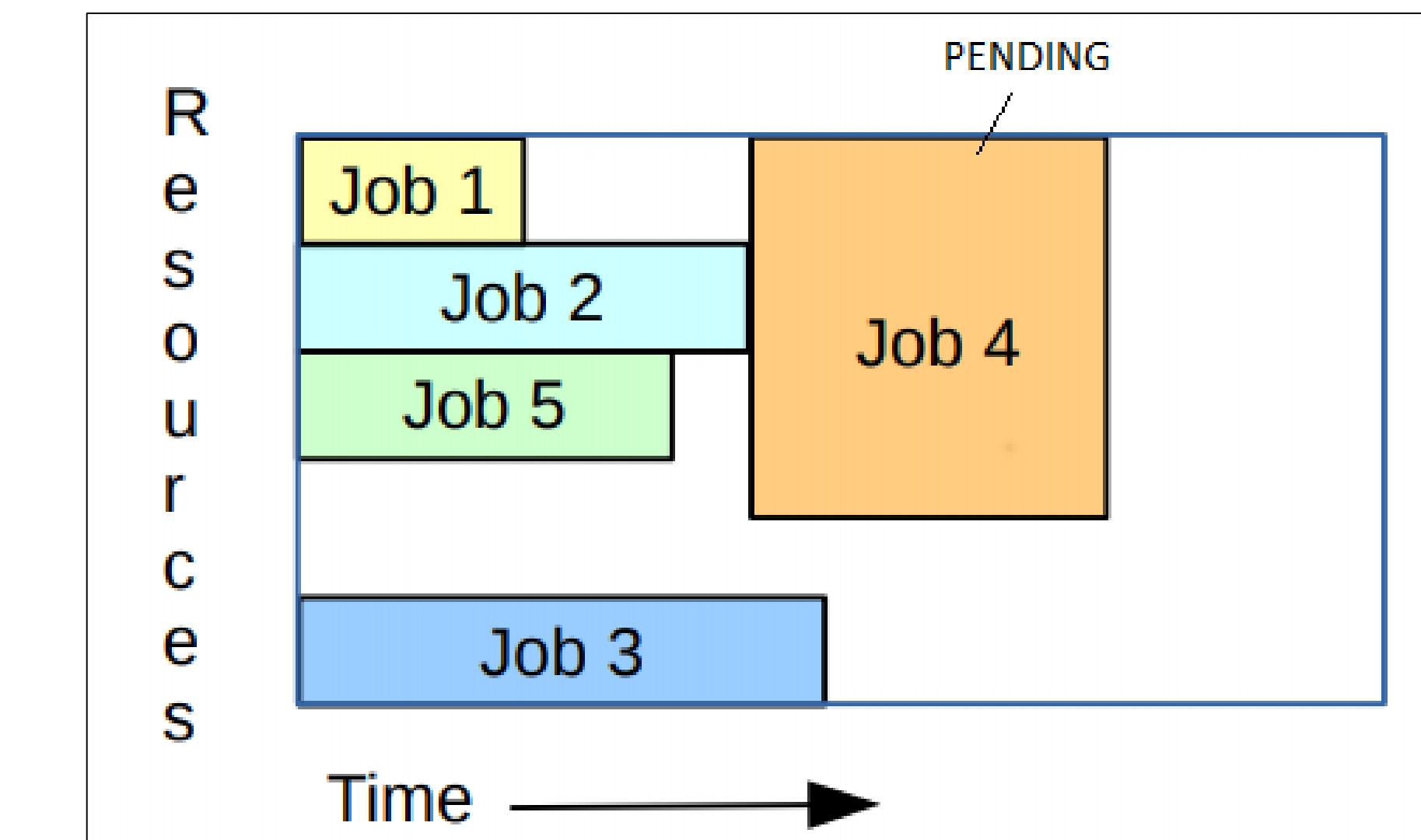
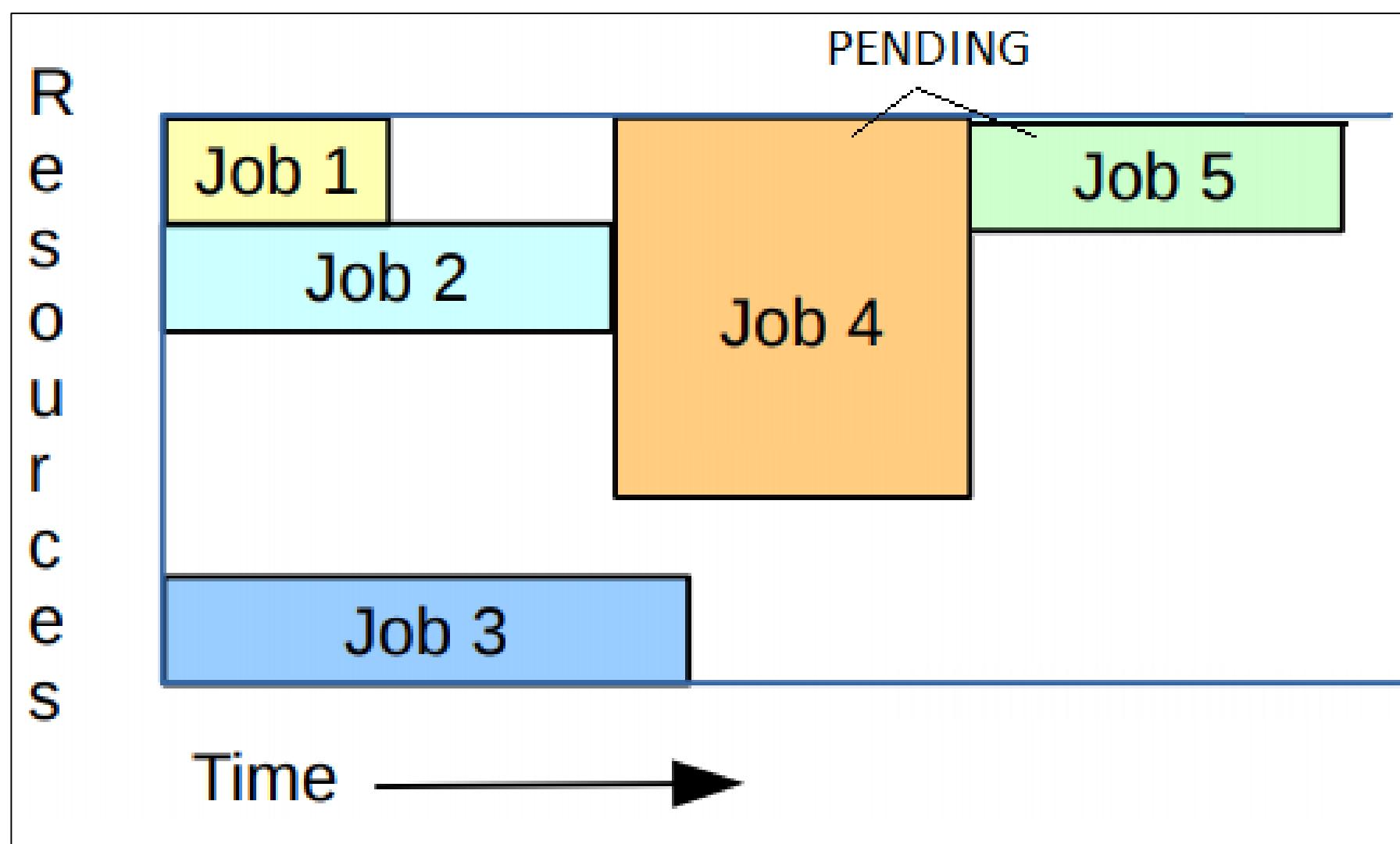




ОПТИМИЗАЦИЯ СИСТЕМЫ ОЧЕРЕДЕЙ

2. Приоритеты задач: priority/multifactor

- *проблема:* по умолчанию, приоритеты формируются по типу *FIFO*, что не позволяет честно распределить 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.



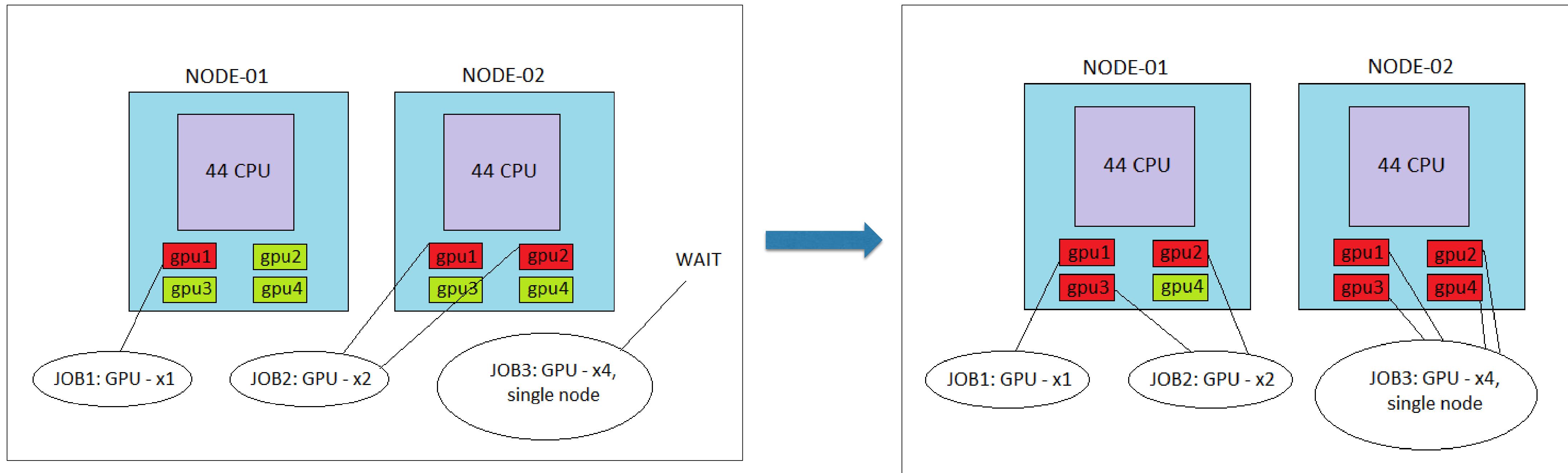
- User1: job1, job2, job3, job4
- User2: job5



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.

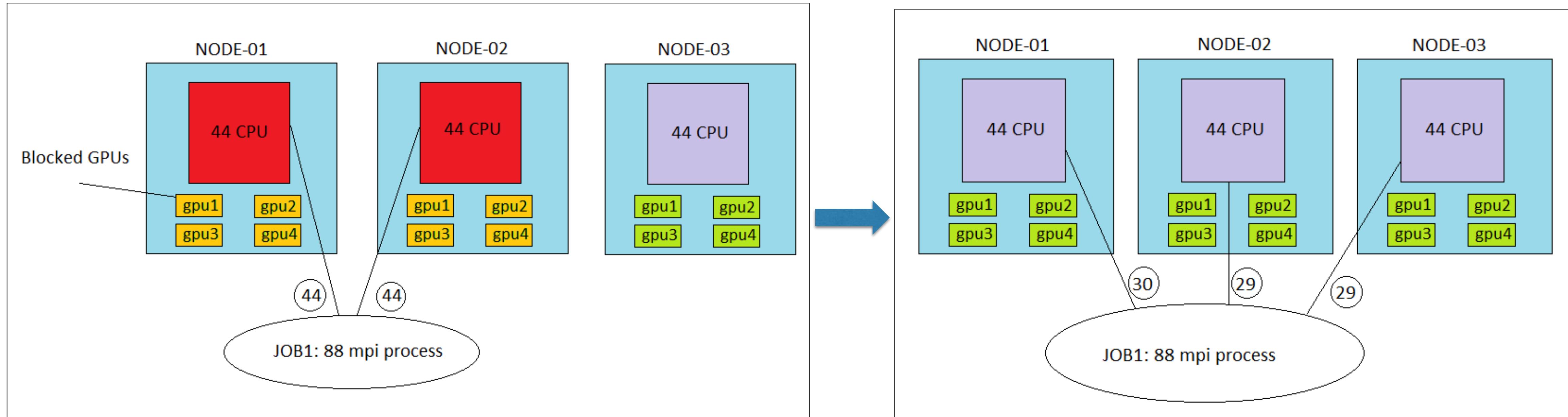




ОПТИМИЗАЦИЯ СИСТЕМЫ ОЧЕРЕДЕЙ

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

СИСТЕМА РЕГИСТРАЦИИ

ЗАЯВКА НА РЕГИСТРАЦИЮ НОВОГО ПРОЕКТА

ОТЧЁТ РУКОВОДИТЕЛЯ ПРОЕКТА

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.

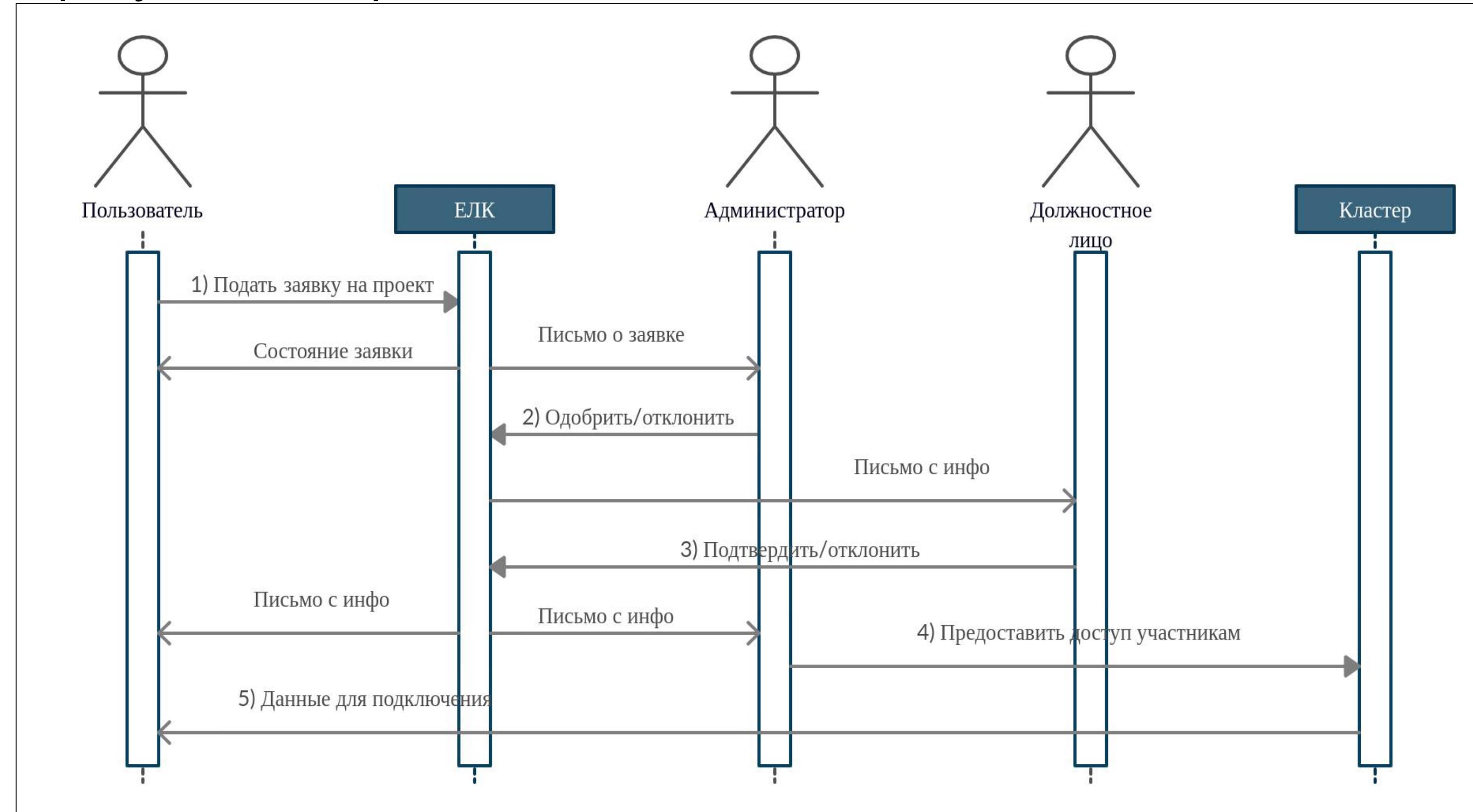


Рис.1 Диаграмма последовательности UML 2 (упрощенная)



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: 94T / 848T (12%); файлы: 124M / 869M (15%)]

Ожидает регистрации:

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

Зарегистрированные пользователи:

<input type="checkbox"/> Имя	Логин	Доступная квота	Использование квоты	Последняя авторизация	Сроки доступа	Статус	Действия
		Объем: 1 TB - 1.33 TB Файлы: 10 M - 14 M	нет нет	-	27.01.2020 01.03.2020	×	✎
		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	×	✎
		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	✓	✎
		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	✓	✎
		Объем: 1 TB - 1.33 TB Файлы: 10 M - 14 M	1.99 MB 168	11/12/19 18:21:19	28.11.2019 -	✉	✎



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:

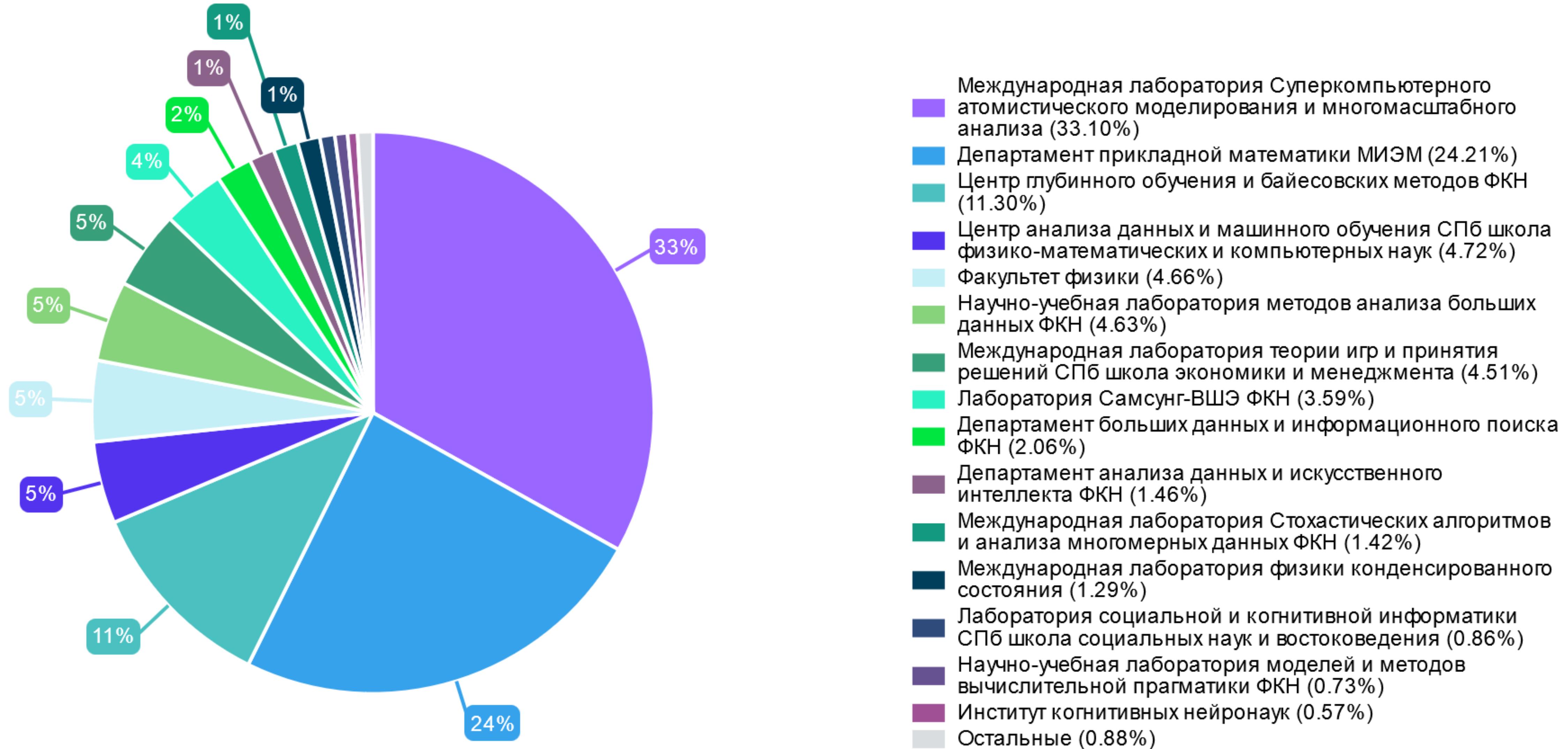
Характеристики суперкомпьютера: <https://hpc.hse.ru/hardware/hpc-cluster>
Пожалуйста, ознакомьтесь с [инструкциями для пользователей](#) суперкомпьютера и [руководством пользователя](#).

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

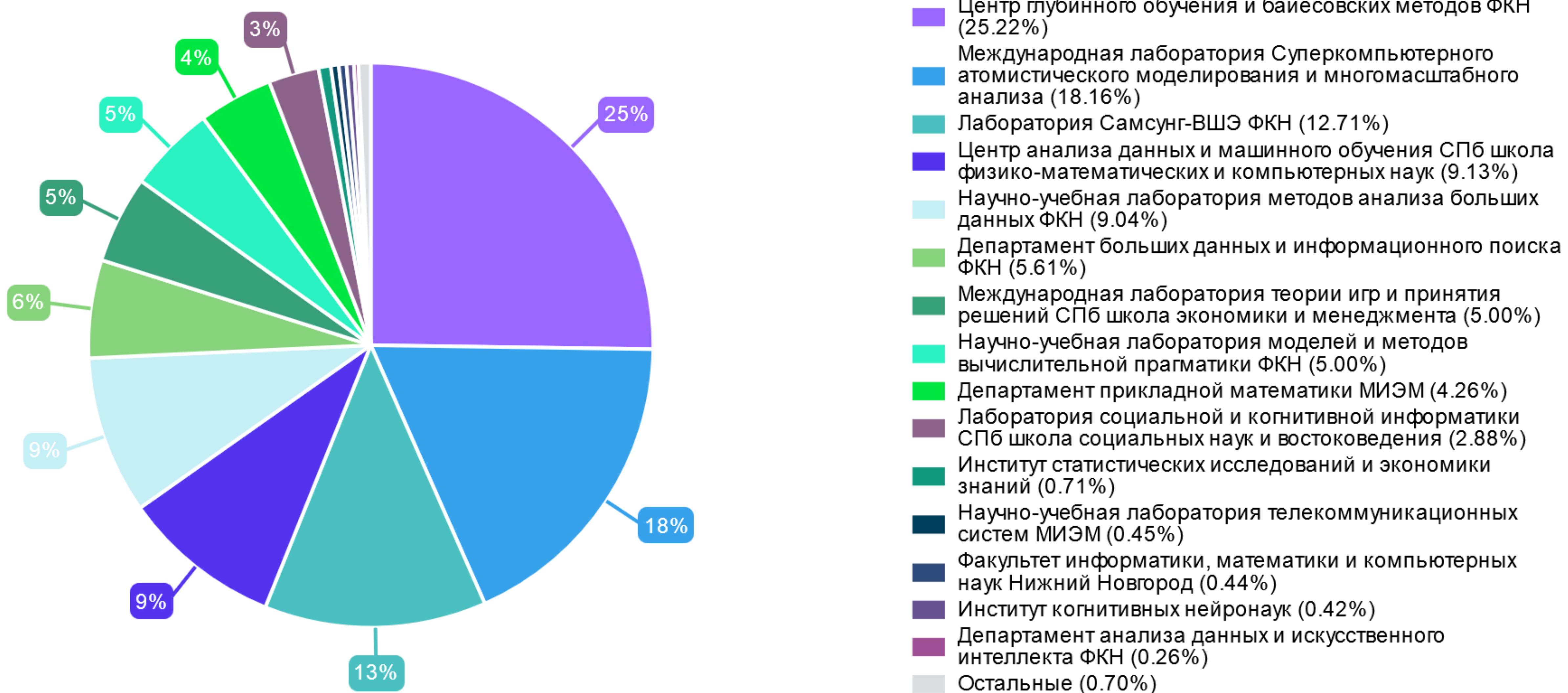
ИСПОЛЬЗОВАНИЕ СРУ ПОДРАЗДЕЛЕНИЯМИ (ТОР-15)



Период: октябрь 2019 - ноябрь 2020 г.



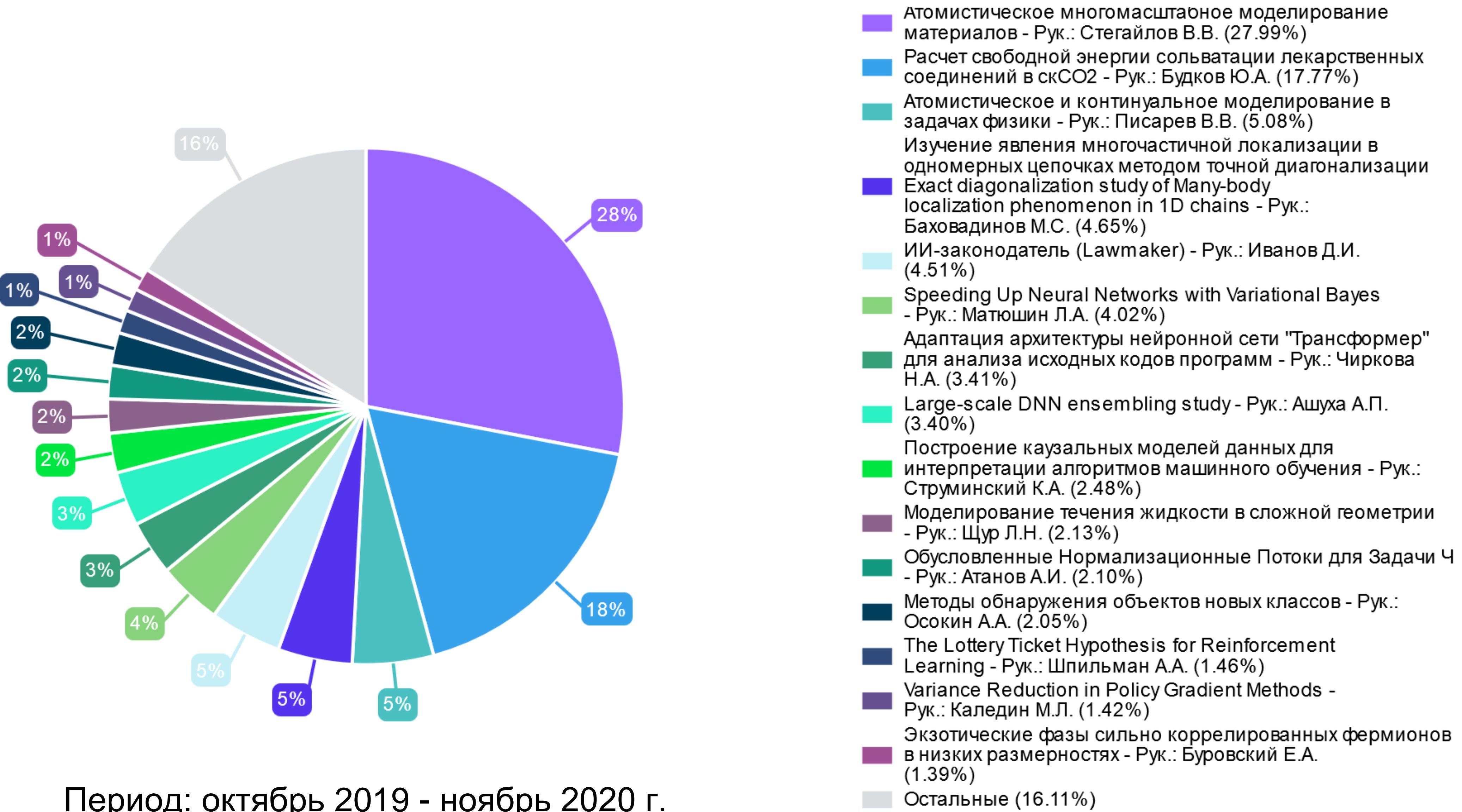
ИСПОЛЬЗОВАНИЕ GPU ПОДРАЗДЕЛЕНИЯМИ (ТОР-15)



Период: октябрь 2019 - ноябрь 2020 г.

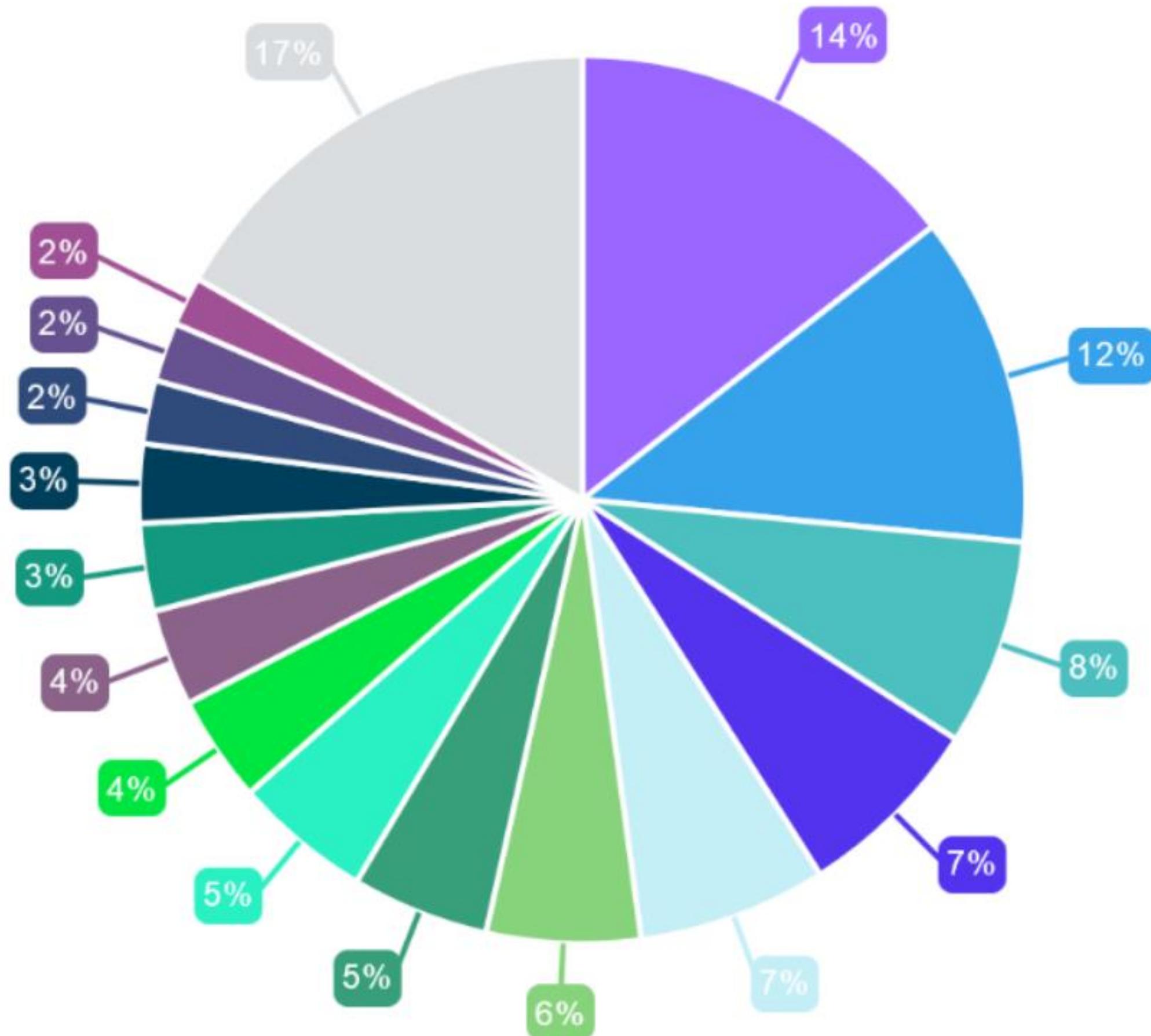


ИСПОЛЬЗОВАНИЕ СРУ ПРОЕКТАМИ (ТОР-15)





ИСПОЛЬЗОВАНИЕ GPU ПРОЕКТАМИ (ТОР-15)



Период: октябрь 2019 - ноябрь 2020 г.

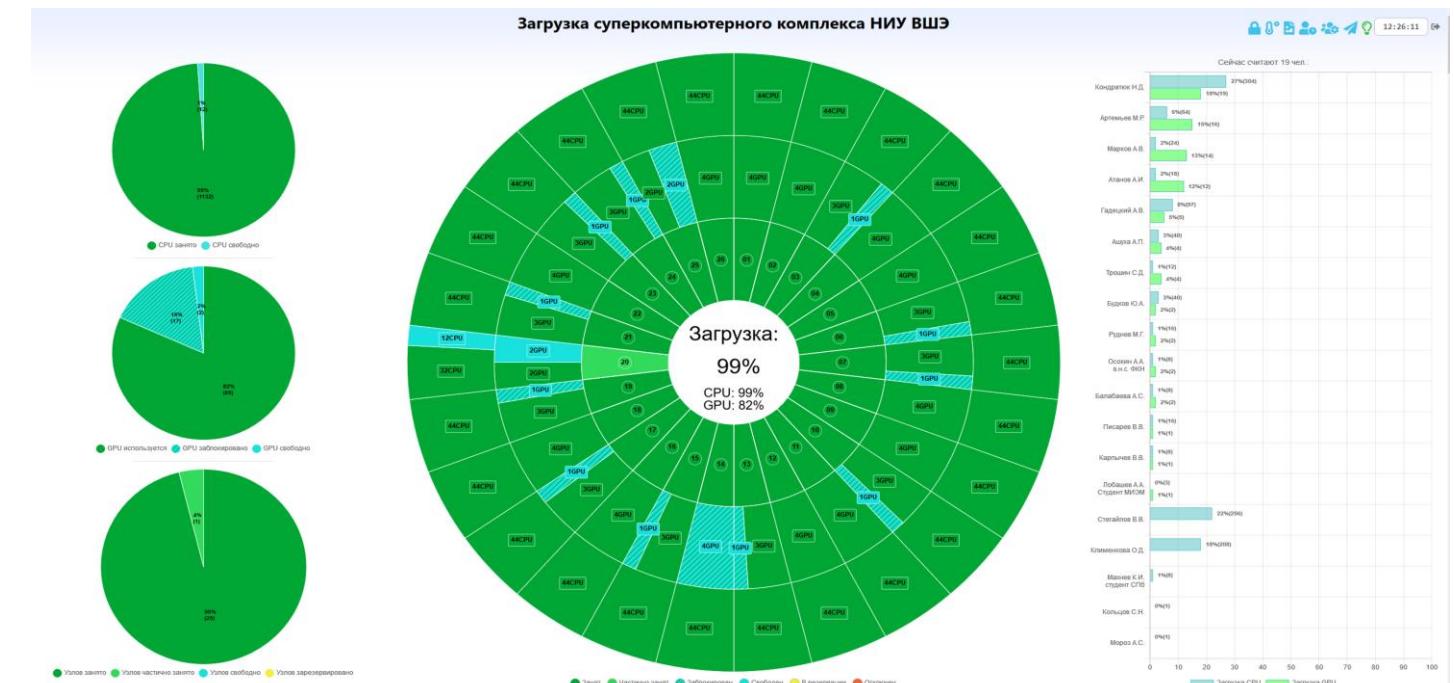
- Атомистическое многомасштабное моделирование материалов - Рук.: Стегайлов В.В. (14.50%)
- Адаптация архитектуры нейронной сети "Трансформер" для анализа исходных кодов программ - Рук.: Чиркова Н.А. (12.10%)
- Speeding Up Neural Networks with Variational Bayes - Рук.: Матюшин Л.А. (7.56%)
- Методы обнаружения объектов новых классов - Рук.: Осокин А.А. (6.94%)
- Обусловленные Нормализационные Потоки 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:

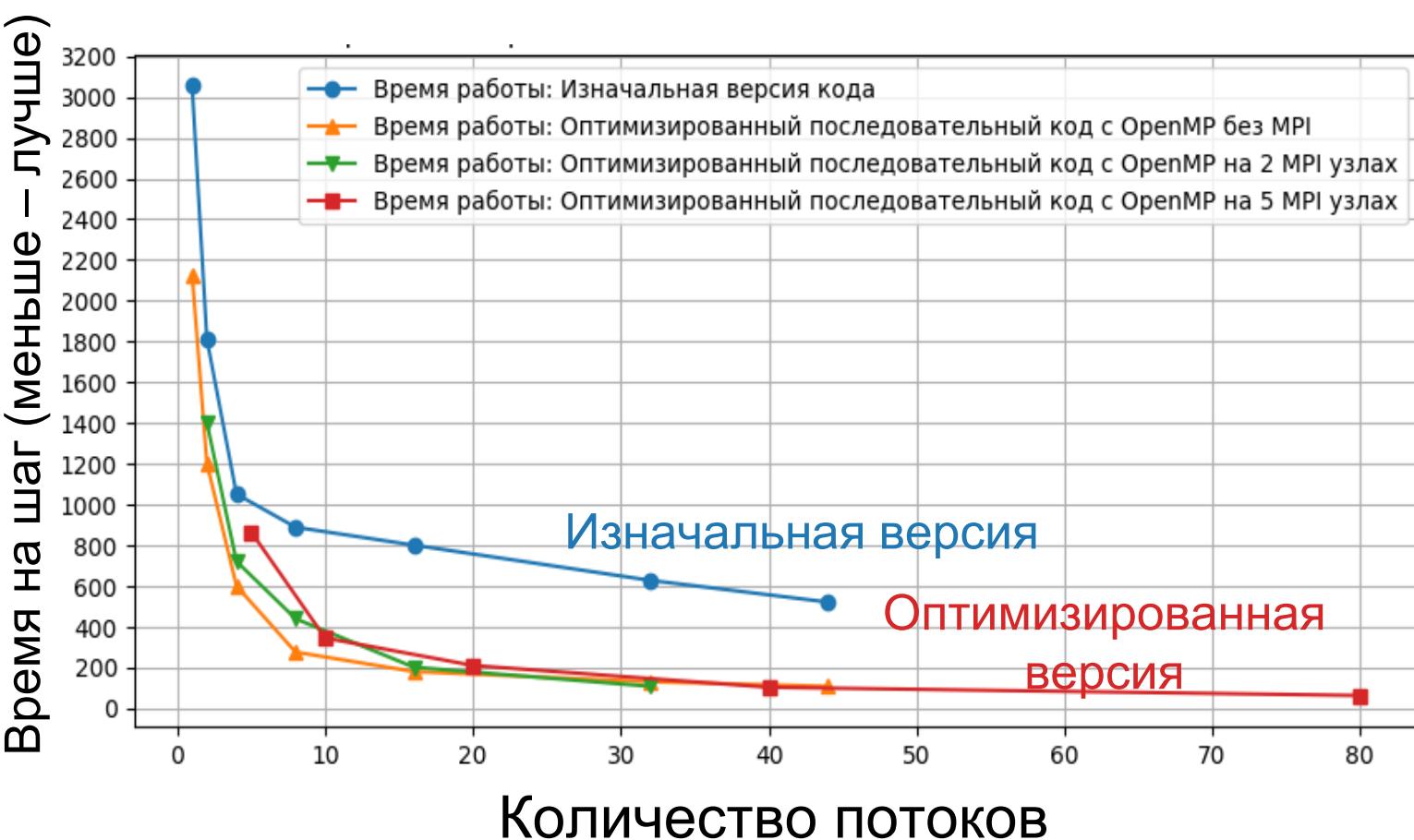
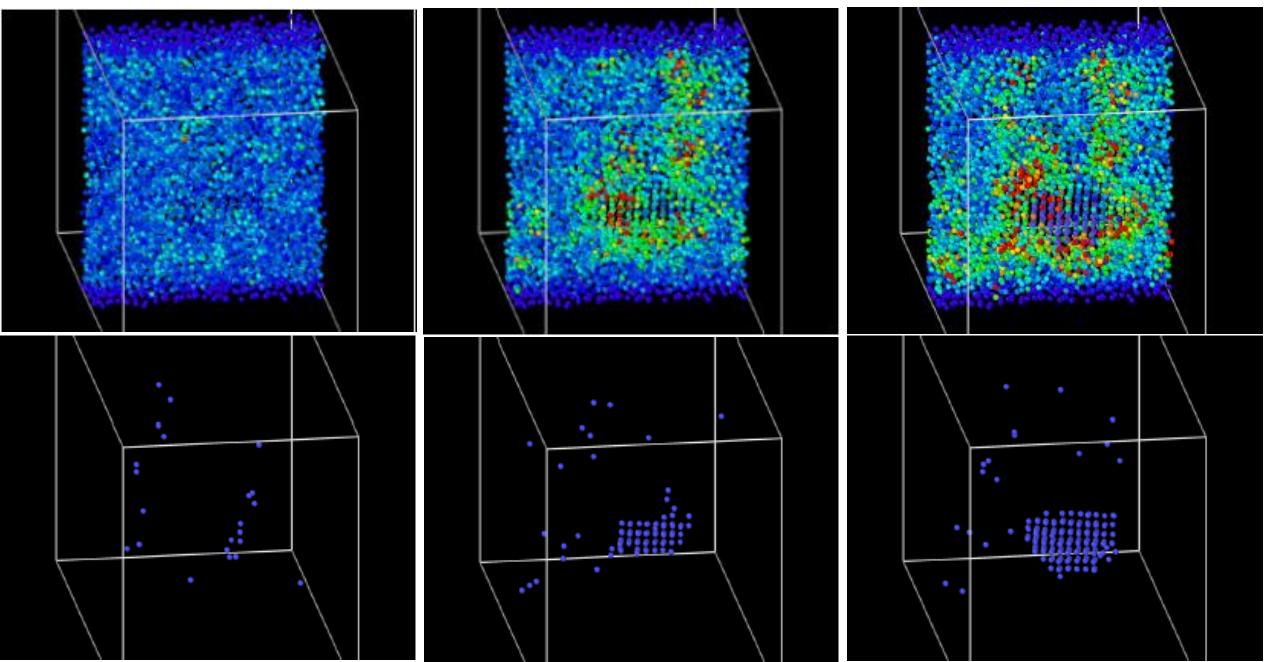
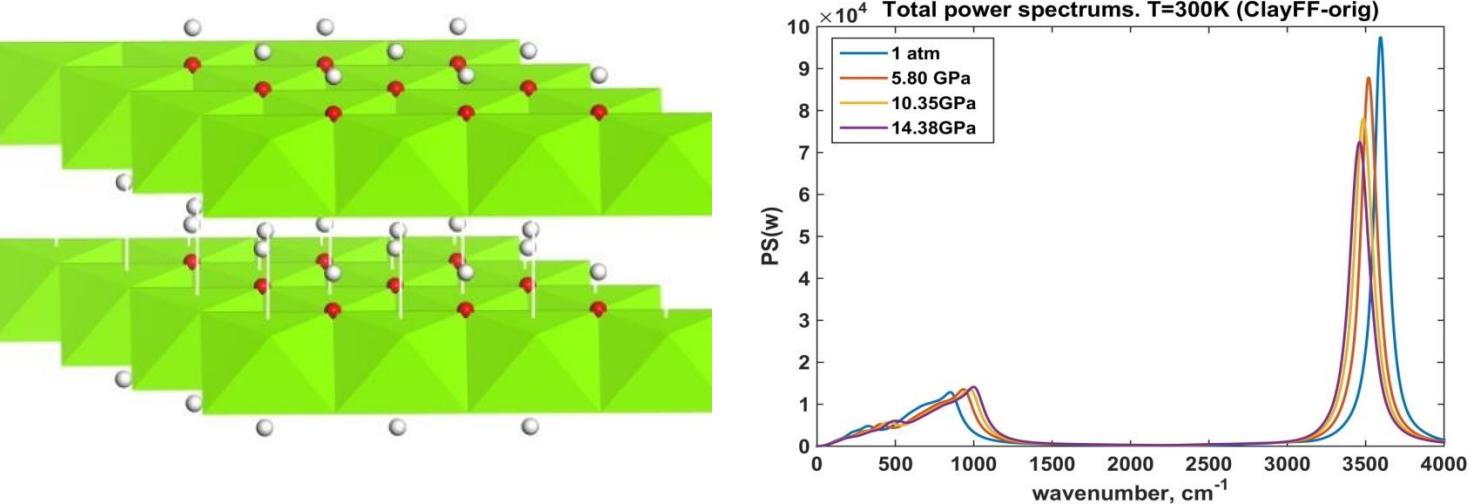
Исследование свойств материалов методами суперкомпьютерного моделирования, разработка вычислительных методов и их оптимизация под архитектуру СК ВШЭ

Результат:

- 1) Методом МД рассчитаны свойства материалов – уравнение состояния и свойства брусита $Mg(OH)_2$ при высоких давлениях, коэффициенты переноса углеводородных флюидов, механизмы кристаллизации жидкometаллических 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 нано-капсулах.

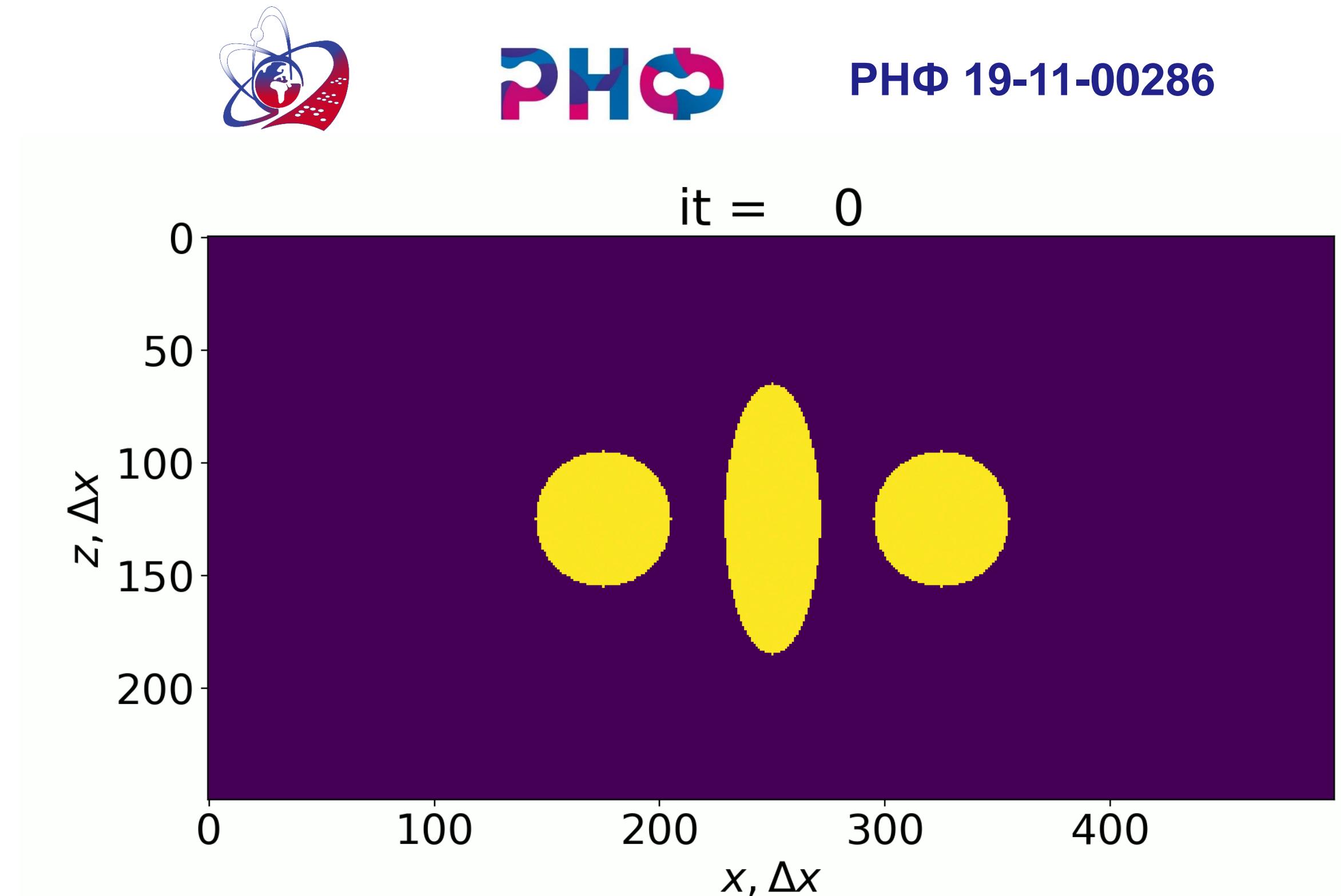
Результат:

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**).





Расчет свободной энергии сольватации лекарственных соединений в скСО₂

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 скСО₂
методами классического функционала плотности и молекулярной динамики.

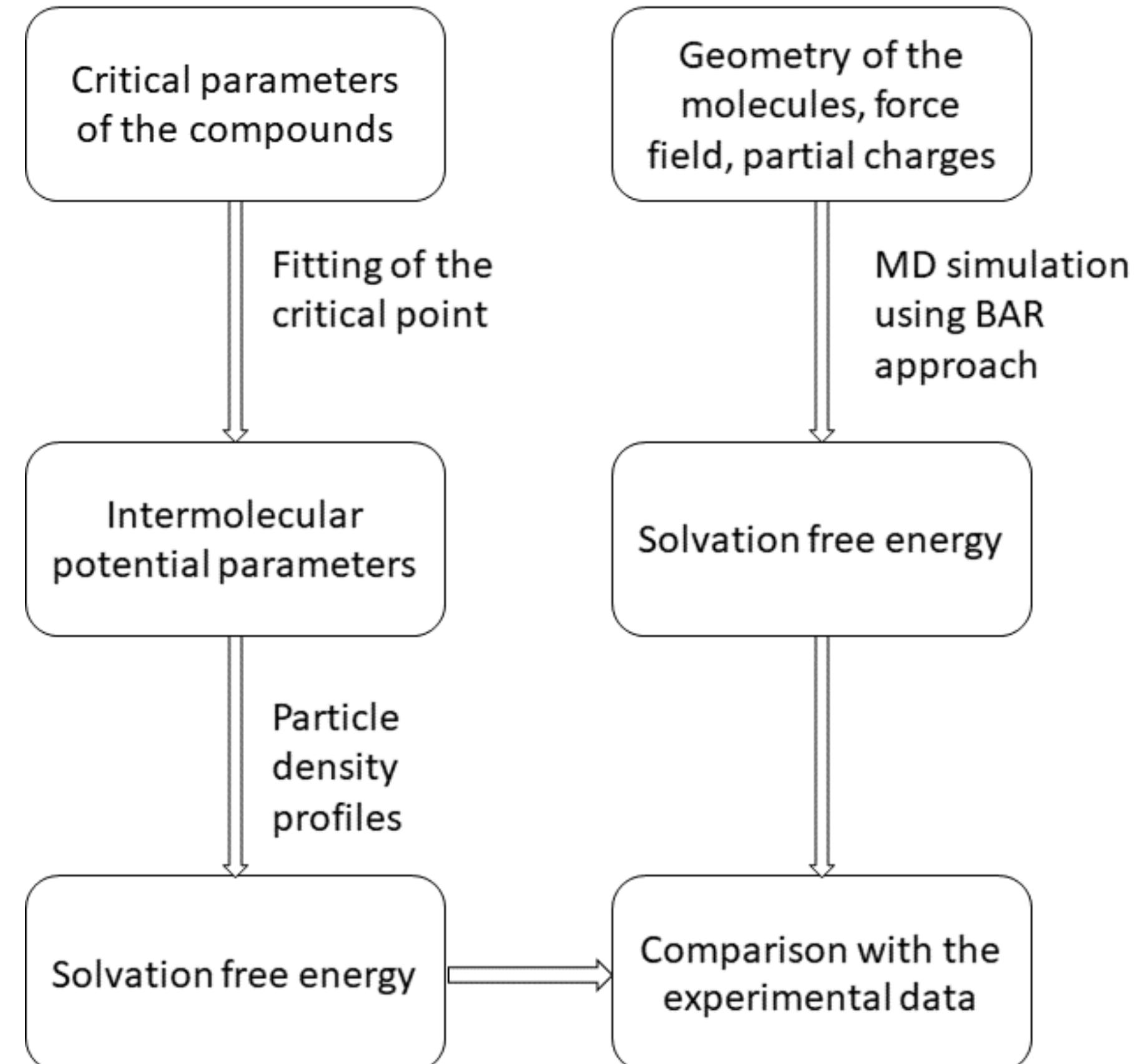
Результат:

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:
ибuprofen, карbamазепин, 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 CO₂: 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

SAMSUNG
Research


Цель исследования:

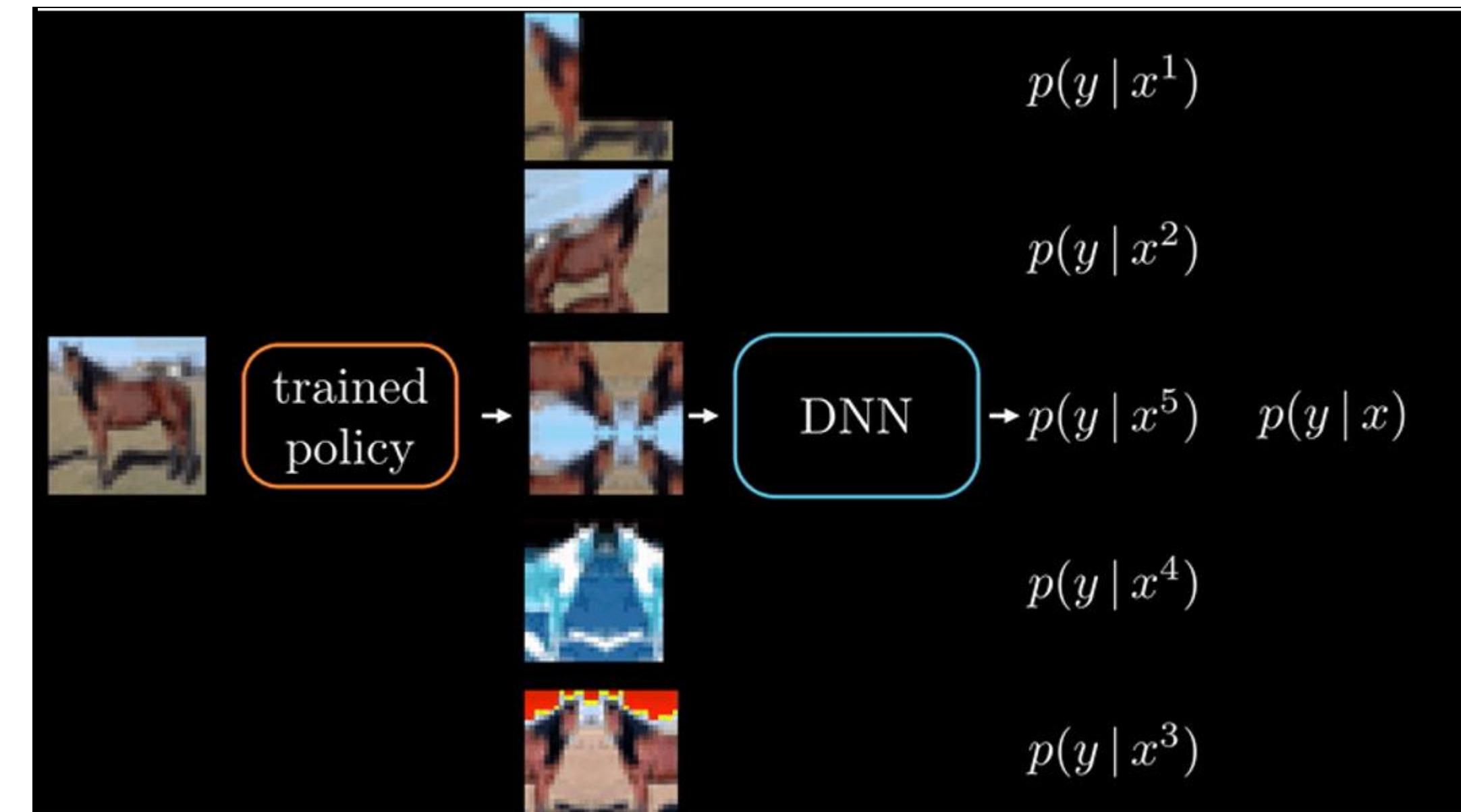
Изучение и усовершенствование современных методов ансамблирования нейронных сетей.

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.

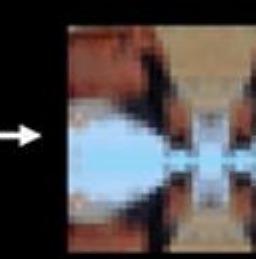


$$p(y|x^1)$$

$$p(y|x^2)$$

$$p(y|x^4)$$

$$p(y|x^3)$$



DNN

trained
policy



$p(y|x^5)$

$p(y|x)$



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.

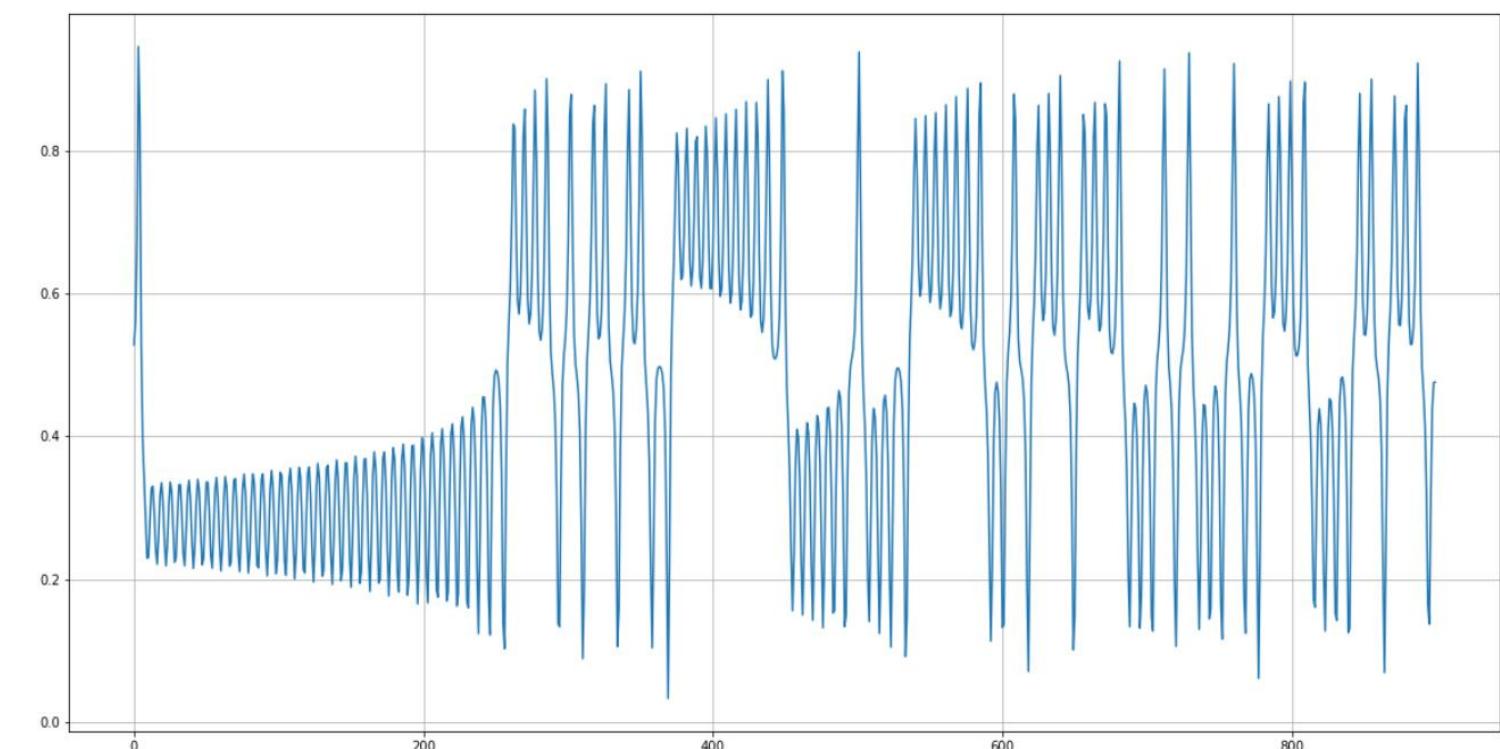
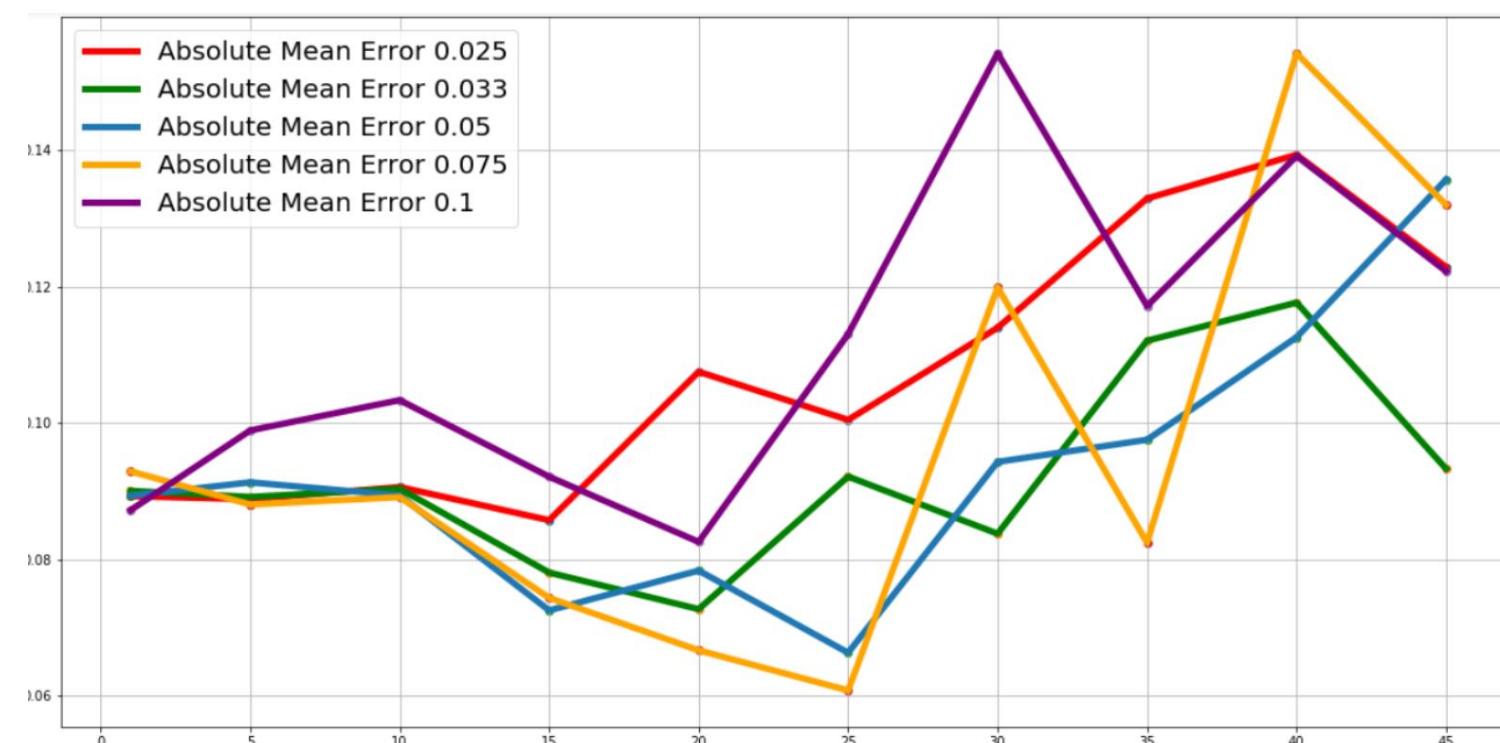
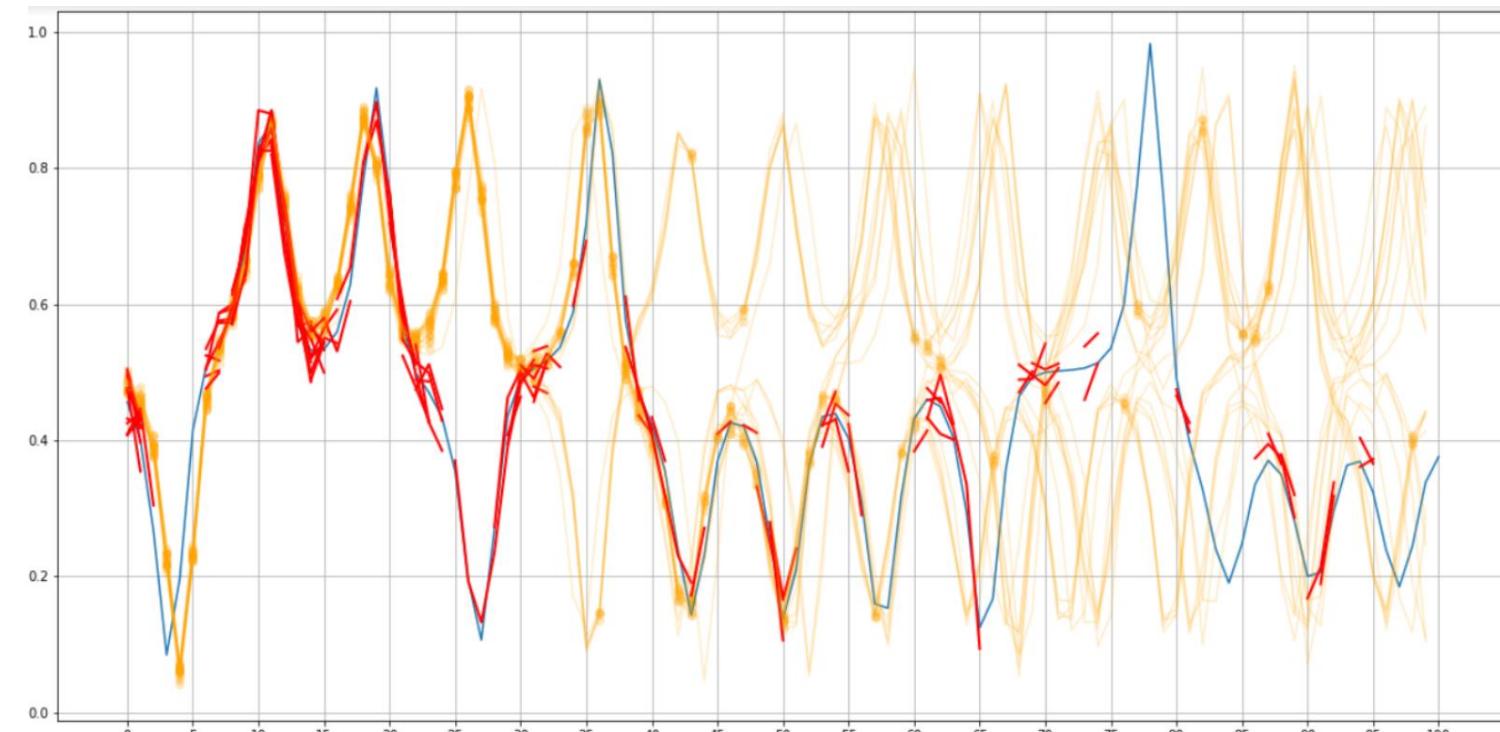
Статьи:

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 вперед, Вестник современных цифровых технологий





Интеграция высокопроизводительных вычислительных ресурсов для решения трудоемких задач оптимизации

Заказчики:

РФФИ, РНФ



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.

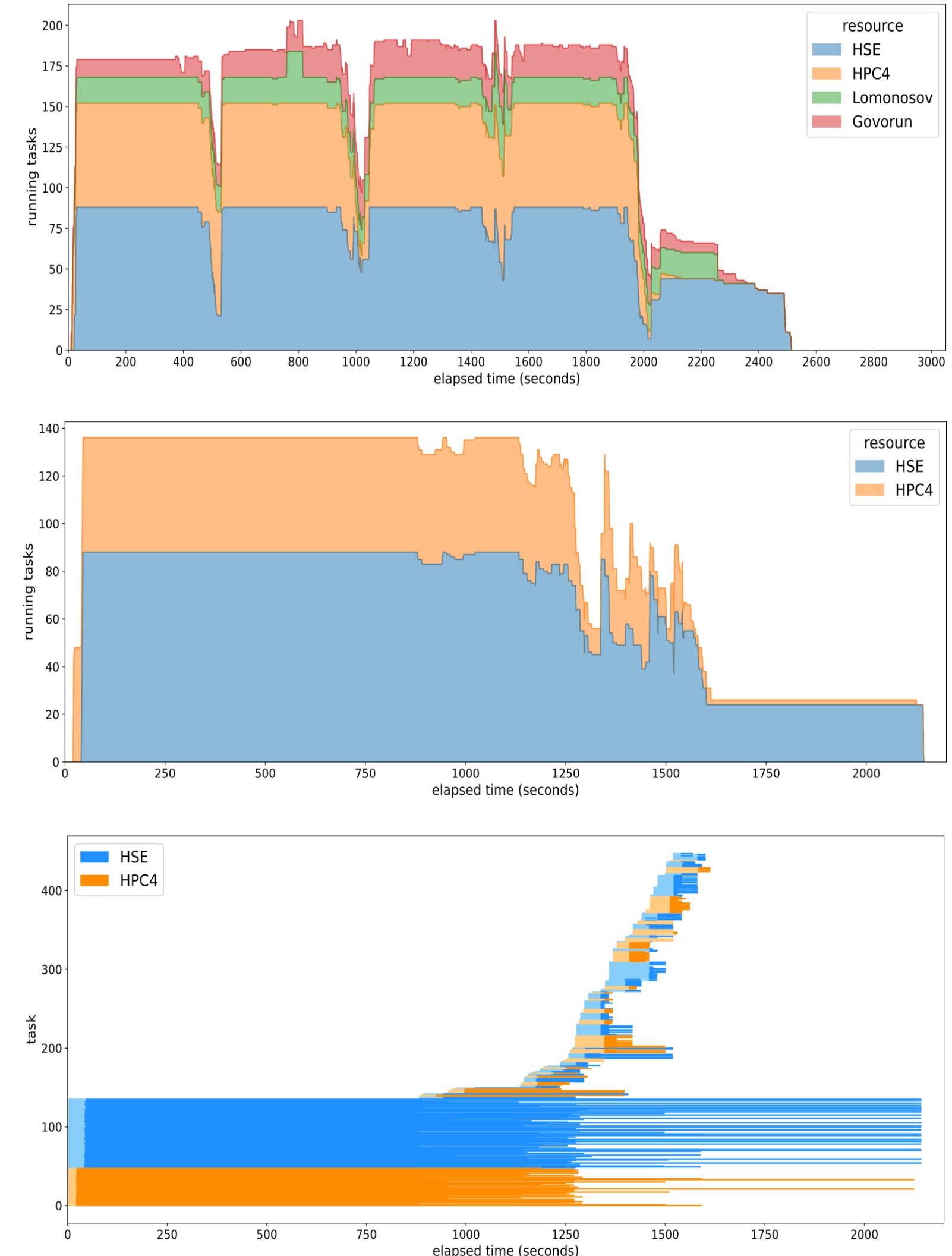
Результат:

Продемонстрирована возможность совместного использования ресурсов нескольких кластеров из Top50 (ВШЭ, МГУ, ОИЯИ, НИЦ КИ) для решения оптимационных 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

ABYY

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

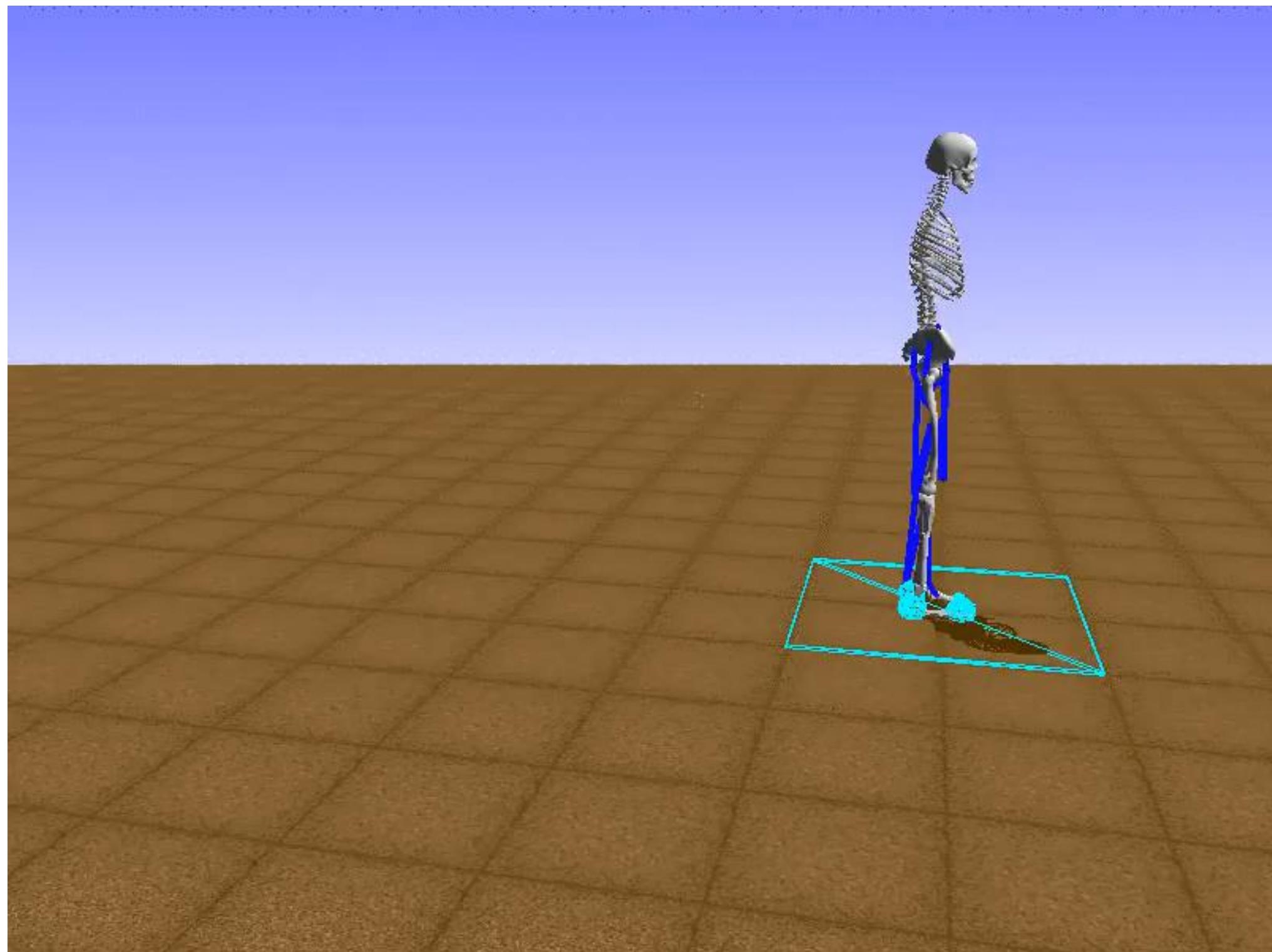
Цель исследования:

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:

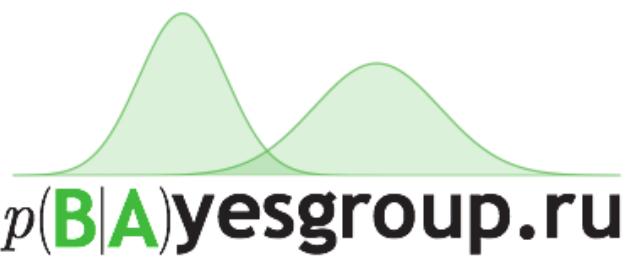
Samsung Research, Samsung Electronics,

Российский научный фонд

SAMSUNG
Research


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.

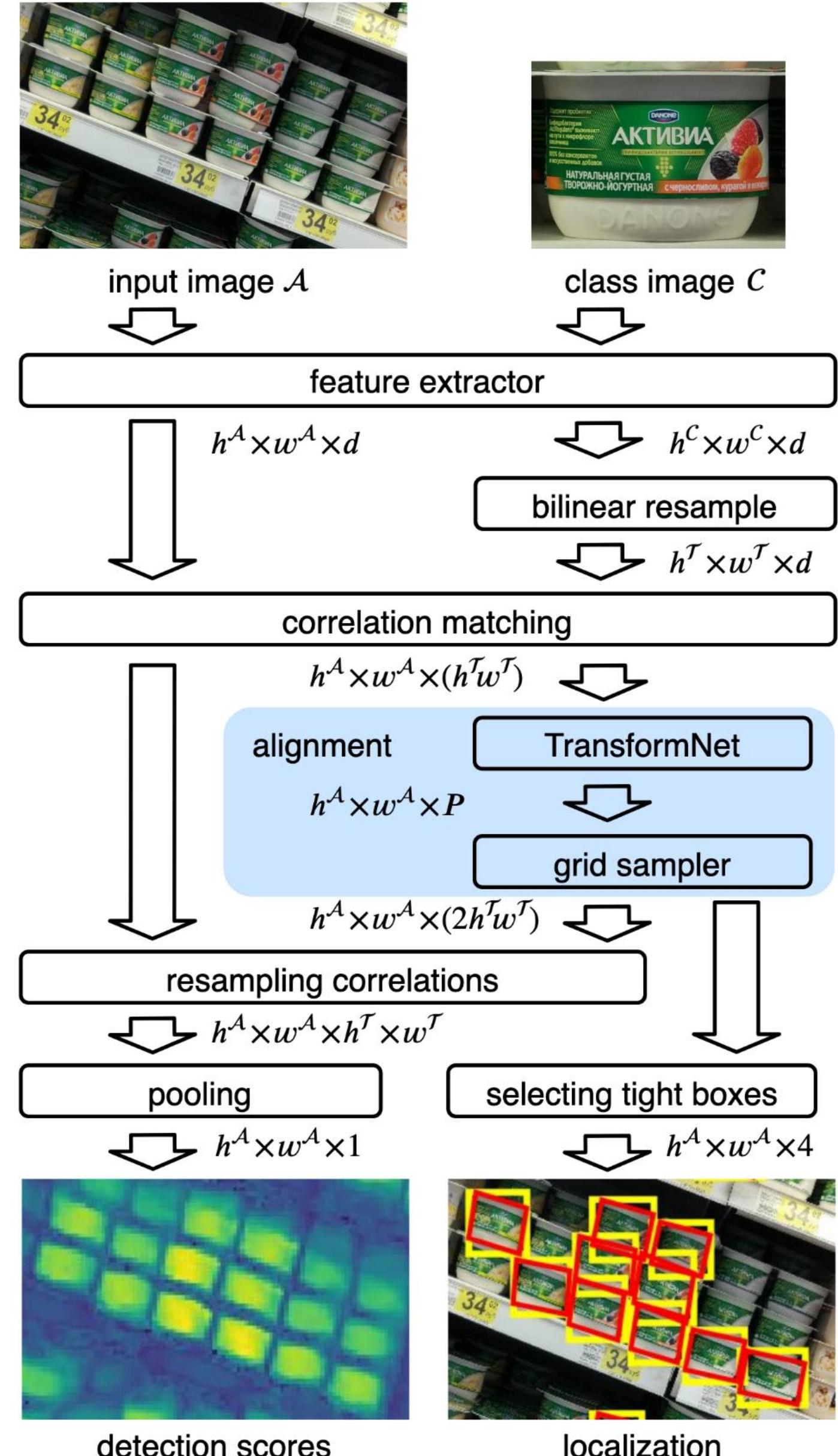
Результат:

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:

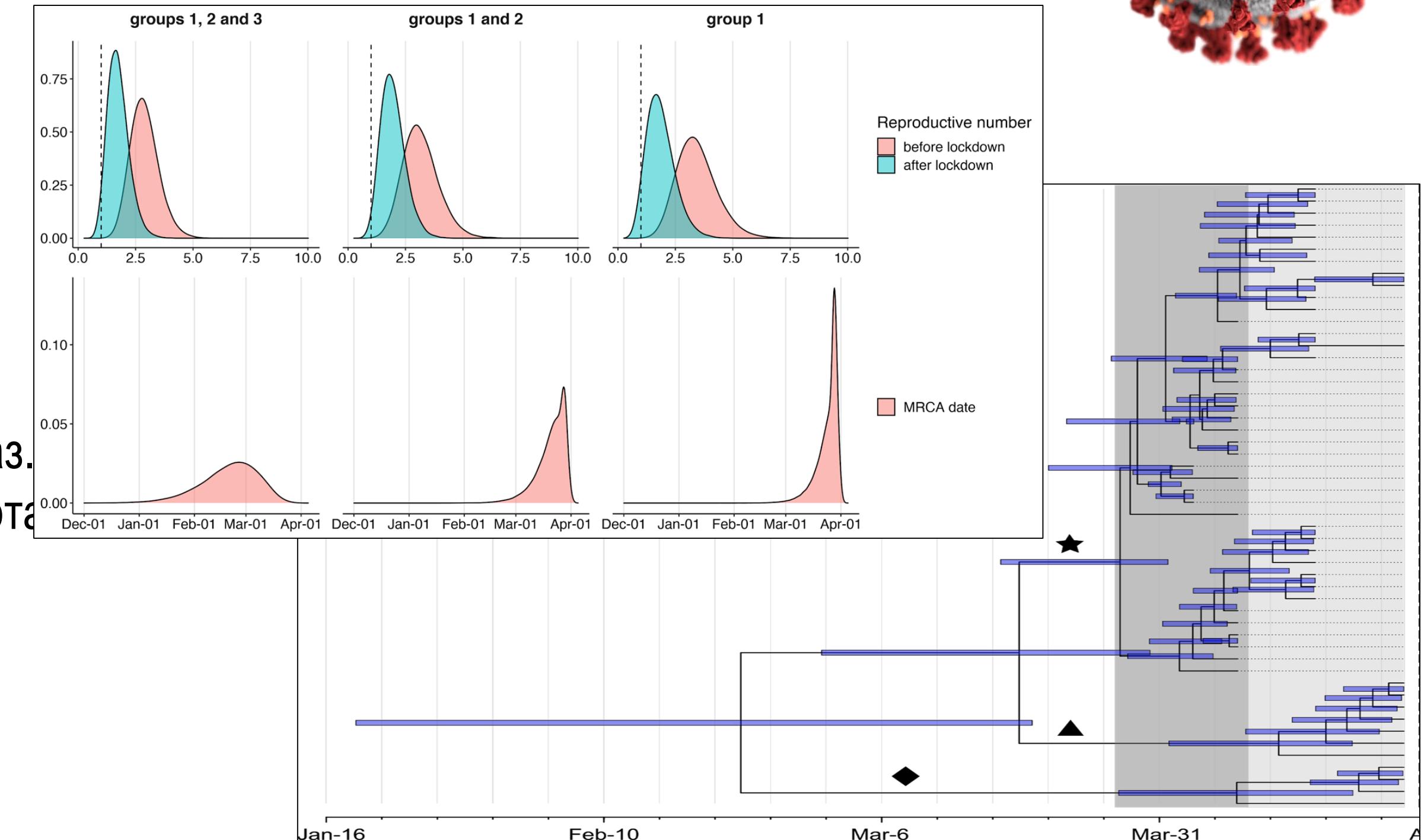
Анализ эпидемии коронавируса SARS-CoV-2 в России.

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 внутрипациенсткой 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:

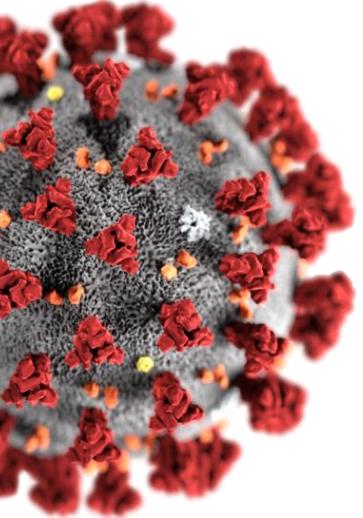
Komissarov et al. Genomic epidemiology of the early stages of SARS-CoV-2 outbreak in Russia. 2020, medRxiv

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, С244