

«УТВЕРЖДАЮ»

Директор Научного Парка

Лосев А.Е,

«__» 2025 г.

Информация для пользователей ресурсного центра «Вычислительного центра СПбГУ» Научного центра СПбГУ

1. Общая информация

Пользователям Ресурсного центра «Вычислительный центр СПбГУ» Научного Парка СПбГУ предоставляется возможность выполнять исследования в подготовленной виртуальной вычислительной среде с использованием более 20 научных пакетов программ (приложений) по направлениям физика, математика, химия и других, с предоставлением высокопроизводительных ресурсов (кластерных или мощных серверных систем с большой общей памятью - SMP). Обычно, исследования (расчеты) выполняются в порядке общей очереди, когда динамически выделяются кластерные узлы или процессорные ядра. Возможно, также выполнение расчетов на заранее зарезервированных узлах, т.н. статических ресурсах с обязательной загрузкой CPU или RAM более 80%.

Для начала работы на оборудовании РЦ ВЦ Научного Парка СПбГУ нужно оформить проект (заявку) в системе приема заявок RIMS: <https://rims.spbu.ru/>. После согласования проекта, пользователи подают заявку на исследование в RIMS (на конкретные ресурсы) для выполнения проекта.

2. Сервисы и ресурсы

Виртуальная машина (ВМ) используется как полноценный компьютер: она имеет виртуальный многоядерный процессор, оперативную память, виртуальный сетевой интерфейс. Компьютерная сеть вычислительного комплекса является локальной сетью СПбГУ и в целях информационной безопасности имеет ограниченную связь с сетью интернет. Для доступа к ресурсам ВМ вне сети СПбГУ нужно использовать OpenVPN. Созданная виртуальная среда РЦ ВЦ НП объединяет все имеющиеся вычислительные ресурсы, настроенные на оптимальное использование сопровождаемых приложений и уменьшение времени ожидания результатов. Пользователю доступны данные результатов расчетов и контроль выполнения заданий в любое время. Обработка результатов расчетов может выполняться на ВМ, что позволяет не выгружать данные расчетов на рабочий компьютер пользователя и сократить рабочее время. Регулярное резервное копирование ВМ позволяет восстанавливать данные в случае необходимости. Во время выполнения проекта, домашняя директория ВМ содержит начальные данные для расчетов, результаты вычислений со всех вычислителей и установленные программы пользователя. Долговременное хранение данных в РЦ ВЦ НП не предусмотрено.

2.1. ВМ общего назначения (шаблон 81)

- Количество ядер CPU: 6 ядер (архитектура x86_64)
- Объем оперативной памяти: 32 Гб
- Объем жесткого диска: 200 Гб
- Операционная система: Rocky-9 (Linux)

2.2. ВМ расширенной конфигурации (шаблон 81)

- Количество ядер CPU: до 24 ядер (архитектура x86_64)
- Объем оперативной памяти: до 128 Гб
- Объем жесткого диска: до 4000 Гб
- Операционная система: Rocky-9 (Linux)

2.3. Специализированная ВМ для работы с Material Studio - Win7-x64-MS7 (шаблон 79)

- Количество ядер CPU: 6 ядра (архитектура x86_64)
- Объем оперативной памяти: 4 Гб
- Объем жесткого диска: 200 Гб
- Операционная система: Windows 7 SP1 Enterprise
- Программное обеспечение: Material Studio 7.0

3. Кластерные вычислительные узлы, доступные для расчетов в РЦ ВЦ НП

Вычислительная среда РЦ ВЦ НП, имея общую пиковую производительность более **483 ТФлопс**, включает в себя:

№	Название	Кол.	Состав	GPU	Прим.	R_{peak} , TFlops (FP32)
1.	Huawei RH2288H V3	9	2 x Intel Xeon E5-2690 v4 2.60 ГГц (2*14 ядер), RAM 256 Гб	NVIDIA TESLA P100, 16 ГБ	avx2, p100	178.78
2.	Huawei RH2288H V3	3	2 x Intel Xeon E5-2690 v4 2.60 ГГц (2*14 ядер), RAM 256 Гб	-	avx2	3.49
3.	Depo Storm 3450A2RU	18	2 x Intel Xeon Gold 6258R 2.70 ГГц (2*28 ядер), RAM 512 Гб	-	avx512	87.09
4.	Depo Storm 3450k4	2	2 x Intel Xeon Gold 6258R 2.70 ГГц (2*28 ядер), RAM 128 Гб	NVIDIA RTX A6000, 48ГБ	avx512, a6000	87.08
5.	Huawei Tecal RH5885 V3	2	4 x Intel Xeon CPU E7-8860 v4 2.20 ГГц (4*15 ядер), RAM 1000 Гб	-	avx	2.11
6.	Huawei RH8100 V3	2	8 x Intel Xeon CPU E7-8860 v4 2.20 ГГц (8*18 ядер), RAM 4000 Гб	-	avx2	10.14
7.	Huawei RH2288H V3	20	2 x Intel Xeon E5-2680 v3 2.50 ГГц (2*12 ядер), RAM 128 Гб	-	avx2	19.20
8.	Huawei RH2288H V3	10	2 x Intel Xeon E5-2680 v3 2.50 ГГц (2*12 ядер), RAM 128 Гб	2 x NVIDIA TESLA K40M, 12 ГБ	avx2, k40m	95.40

4. Программное обеспечение

Основные направления проводимых в РЦ ВЦ исследований	Используемые программные пакеты
Физика	ANSYS, COMSOL Multiphysics, OpenFOAM, Vorpal, Firefly, DL_POLY
Химия	ADF, ABINIT, Materials Studio, Crystal, CP2K, GROMACS, HyperChem, Gaussian, Quantum Espresso, WIEN2k, LAMMPS, ORCA, Firefly, DL_POLY
Математика, информатика и науки о системах	MATLAB DCS, Maple, Mathematica
Среды программирования	Intel ® Cluster Studio, Intel ® Parallel Studio XE, NAG Fortran Compiler, PGI Compiler, Python, Conda
Специализированные программные библиотеки	Blas, cblas, clapack, elpa, fftw, gsl, lapack, lapacke, libxc, scalapack, plumed, netcdf, scafacos, quip, latte, libinit, kim, adios

Полное описание научных пакетов программ (приложений) представлено на странице сайта:
<https://researchpark.spbu.ru/index.php/cc-supppo-rus>

5. Доступ и аутентификация

Аутентификация происходит по единой учетной записи СПбГУ. Для доступа к ресурсам вычислительного центра используйте свои учетные данные СПбГУ.

Подключение к виртуальной машине (ВМ):

Способы подключения:

- **RDP:** Машины ВЦ настроены на работу с графическим интерфейсом. Для удобства рекомендуется использовать RDP-клиент
- **SSH:** При необходимости работы в режиме командной строки, для подключения к ВМ также можно использовать SSH-клиент

ВМ имеют ip-адреса локальной сети СПбГУ

Из сети Internet для доступа к ресурсам СПбГУ нужно использовать VPN

6. Настройка окружения и запуск задач

В этом разделе подробно рассматриваются инструменты **Lmod** и **SLURM**, необходимые для настройки программного окружения и управления вычислительными задачами.

6.1. Lmod: настройка программного окружения

Lmod — это система управления модулями, которая позволяет гибко настраивать программное окружение для работы с различным программным обеспечением.

Основные команды:

- **module avail** — показать список доступных модулей
- **module load <имя_модуля>** — загрузить модуль
- **module list** — показать загруженные модули
- **module unload <имя_модуля>** — выгрузить модуль
- **module purge** — выгрузить все модули

Рекомендации:

- Загрузка нужных модулей должна выполняться перед запуском задач
- Для автоматизации можно добавлять команды **module load** в конфигурационные файлы (например, bashrc)

6.2. SLURM: управление очередями задач

SLURM используется для управления задачами и распределения нагрузки на узлы кластера. В Вычислительном центре СПбГУ созданы несколько разделов, охватывающий все узлы. Узлы отличаются по характеристикам, которые указываются с помощью специальных меток (features).

Ключевые понятия:

- Job — задача, отправляемая пользователем для выполнения
- Partition — логическая группа узлов, которая может быть организована по различным критериям (например, по назначению, доступу, производительности). Для просмотра информации про раздел(-ы), используйте команду **scontrol show partitions**
- QoS (Quality of Service) — политика, задающая приоритет и ограничения для задач. Для просмотра информации про QoS, используйте команду **sacctmgr show qos**

Основные команды:

- **sinfo** — показать доступные разделы, их состояние и доступность
- **sbatch <скрипт>** — отправить задачу для выполнения
- **squeue** — проверить статус задач
- **scancel <ID>** — отменить задачу
- **salloc** — запросить ресурсы для интерактивной сессии

Характеристики разделов:

Раздел	Количество узлов	Ядра на узел	Общее количество ядер	GPU	Память на ядро (МБ)	Время по умолчанию (часов)
basic	30	24	720	-	5300	48
extended1 (ds-cpu)	12	28	336	-	8900	48
extended2 (ds)	18	56	1008	-	8900	48
K40	10	24	240	2 x NVidia Tesla K40m	5300	48
P100	9	28	252	1 x NVidia Tesla P100	8900	48
A6000	2	56	112	1 x NVidia RTX A6000	2053	48
smp	5	144, 72, 60	472	-	15000	48

Примечания:

- Раздел **basic** имеет максимальное время выполнения задачи – 14 дней. Данный раздел является разделом по умолчанию
- Раздел **smp** включает узлы с различным количеством ядер: 1 узел по 144 ядра, 2 узла по 72 ядра и 2 узла по 60 ядер

Характеристика QoS:

Максимальное кол-во одновременно считаемых задач на один **аккаунт** – **5** (Run),
Максимальное общее кол-во задач – **7** (Run+Queue).

Рекомендации:

- Перед запуском задач используйте **sinfo** или **scontrol show node**, чтобы убедиться, что подходящие узлы доступны
- Указывайте реалистичное время выполнения задач, чтобы не занимать ресурсы дольше необходимого
- Проверяйте статус задач с помощью **sqeueue**
- Изучите доступные QoS и разделы ресурсов, чтобы оптимально планировать расчёты
- Указывайте только те **features**, которые действительно нужны для выполнения задачи. Это поможет избежать длинных очередей
- Для задач с GPU: убедитесь, что используемое ПО оптимизировано для выбранного графического процессора

Совет: Воспользуйтесь командой **man** (например, **man sbatch**) для изучения всех возможностей SLURM.

7. Поддержка пользователей

При возникновении необходимости обратиться к сотрудникам РЦ ВЦ НП с вопросом или консультации нужно воспользоваться формами RIMS:

- «обращение пользователя»
- «заявка на консультацию»

8. Правила завершение работ в РЦ ВЦ НП

- За 2 недели до окончания проекта автоматически высыпается предупреждение руководителю и исполнителям
- В день завершения проекта автоматически высыпается предупреждение руководителю и исполнителям
- На следующий день после завершения проекта осуществляется блокировка выделенных ресурсов
- По истечению срока 3 месяца после завершения проекта, ВМ утилизируются сотрудником РЦ ВЦ Научного Парка.

9. Контактная информация и полезные ссылки

- Адрес: 198504, Санкт-Петербург, Старый Петергоф, ул. Ульяновская, д. 1, к. К
- Поддержка: <https://rims.spbu.ru/>
- Официальный сайт РЦ ВЦ: <https://researchpark.spbu.ru/index.php/cc-rus>

Директор ресурсного центра ВЦ Научного Парка

/ Золотарев В.И./