

УДК 621.315.592

## Формирование индивидуальной среды моделирования в гибридном высокопроизводительном вычислительном комплексе\*

© 2019 г. К. И. Волович<sup>1,§</sup>, С. А. Денисов<sup>1</sup>, С. И. Мальковский<sup>2</sup>

<sup>1</sup> *Федеральный исследовательский центр «Информатика и управление»  
Российской академии наук,  
ул. Вавилова, д. 44, корп. 2, Москва, 119333, Россия*

<sup>2</sup> *Вычислительный центр Дальневосточного отделения Российской академии наук,  
ул. Ким Ю Чена, д. 65, Хабаровск, 680000, Россия*

**Аннотация.** Статья посвящена проблеме решения научных задач в области материаловедения в среде высокопроизводительных вычислительных комплексов. Подходом к решению определенного рода задач в материаловедении является применение технологий математического моделирования, реализуемых специализированными системами моделирования. Наибольшую эффективность системы моделирования проявляют при развертывании в гибридных высокопроизводительных вычислительных комплексах (ГВБК), обладающих высокой производительностью и позволяющих решать задачи за приемлемое время с достаточной точностью. Однако существует ряд ограничений, влияющих на работу научного коллектива с системами моделирования в вычислительной среде ГВБК: необходимость доступа к графическим ускорителям на этапе разработки и отладки алгоритмов в системе моделирования, необходимость применения нескольких систем моделирования с целью получения наиболее оптимального варианта решения, необходимость динамического изменения настроек системы моделирования при решении задач. Решение проблемы вышеуказанных ограничений возлагается на индивидуальную среду моделирования, функционирующую в вычислительной среде ГВБК. Оптимальным решением для создания индивидуальной среды моделирования является технология виртуальной контейнеризации. Предлагается алгоритм формирования индивидуальной среды моделирования в гибридном высокопроизводительном вычислительном комплексе на основе системы виртуальной контейнеризации docker. Индивидуальная среда моделирования создается путем установки в базовый контейнер необходимого программного обеспечения, настройки переменных среды, установки пользовательского ПО и лицензий. Особенностью алгоритма является возможность формирования библиотечного образа из базового контейнера с настроенной индивидуальной средой моделирования. В заключении обозначены направления для проведения дальнейшей исследовательской работы. Представленный в статье алгоритм является независимым от реализации системы управления заданиями и может применяться для любого высокопроизводительного вычислительного комплекса.

**Ключевые слова:** алгоритм, базовый образ, высокопроизводительный вычислительный комплекс, гибридная архитектура, графический ускоритель, индивидуальная среда моделирования, контейнер

### Введение

Общепризнанным подходом к решению целого ряда задач в материаловедении является применение технологий математического моделирования [1, 2]. На сегодняшний день существуют ряд программных систем моделирования (Materials Studio, VASP), в том числе и с открытым кодом (GROMACS, Quantum ESPRESSO). Эти системы моделирования представляют собой среду разработки, которая предоставляет научному коллективу широкий спектр

инструментов для эффективного решения актуальных задач в области материаловедения.

Эффективность применения систем моделирования при решении задач в области материаловедения требует использование высокопроизводительных вычислительных систем [3—5]. В последнее время для решения задач моделирования применяются высокопроизводительные вычислительные комплексы с гибридной архитектурой в составе которых имеются специальные компоненты — ускорители (сопроцессоры) GPU [6—8].

**Волович Константин Иосифович**<sup>1,§</sup> — канд. техн. наук, старший научный сотрудник, e-mail: KVolovich@frccsc.ru; **Денисов Сергей Анатольевич**<sup>1</sup> — ведущий инженер, e-mail: SDenisov@frccsc.ru; **Мальковский Сергей Иванович**<sup>2</sup> — научный сотрудник, e-mail: sergey.malkovsky@ccfebras.ru

§ Автор для переписки

\* Статья подготовлена по материалам доклада, представленного на I-й международной конференции «Математическое моделирование в материаловедении электронных компонентов», Москва, 21—23 октября 2019 г.

В тоже время существует ряд ограничений, влияющих на работу научного коллектива с системами моделирования в вычислительной среде гибридных высокопроизводительных вычислительных комплексов (ГВВК) [9, 10].

Во-первых, для создания эффективной модели необходимо, чтобы на этапе ее разработки и тестирования система моделирования имела доступ к графическим ускорителям ГВВК. Создание среды разработки вне вычислительной системы ГВВК является трудной задачей. На практике среда интерактивной разработки системы моделирования интегрируется в вычислительную среду ГВВК.

Во-вторых, научный коллектив в процессе исследований может решать одни и те же задачи на разных системах моделирования с целью получения наиболее оптимального варианта решения. Одновременное наличие нескольких систем моделирования в одной вычислительной среде ГВВК требует разрешение конфликтов, возникающих при их интеграции с операционной системой, управляющей вычислительными ресурсами ГВВК.

В-третьих, работа с системами моделирования при решении задач предполагает динамическое изменение настроек системы моделирования, включая выполнение операций, требующих прав администратора ГВВК, например, установка дополнительного системного программного обеспечения и программных библиотек.

Выполнение такого рода операций, требующих внесения изменений в вычислительную среду ГВВК, возможно только администратором ГВВК по предварительному согласованию (в соответствии с принятой политикой информационной безопасности). Это создает дискретность в исследовательской работе научного коллектива.

Поэтому задача создания для научного коллектива индивидуальной среды моделирования является актуальной. Индивидуальная среда моделирования должна функционировать в вычислительной среде ГВВК и решать проблему ограничений для научного коллектива.

Оптимальным решением для создания полнофункциональных индивидуальных сред моделирования является технология виртуальной контейнеризации [11, 12]. Существует несколько систем контейнеризации. В ГВВК система контейнеризации используется для создания индивидуальных сред небольшого числа пользователей. Для этих целей подходит широко известная система docker [13].

### Создание индивидуальной среды моделирования

Основными программными компонентами индивидуальной среды моделирования являются:

- базовая операционная система;

- специализированное программное обеспечение, включая драйверы и библиотеки для работы с устройствами вычислительных узлов ГВВК, включая GPU (например, Nvidia CUDA Toolkit) [14];

- интерфейсные библиотеки программных компонентов для обмена данными между процессами при выполнении параллельных вычислений (например, OpenMPI) [15];

- среда разработки и исполнения программ, включая компиляторы;

- система моделирования, включая специализированные программные пакеты для научных исследований [16].

Предлагается следующий алгоритм создания индивидуальной среды моделирования.

На первом шаге определяется необходимый базовый образ контейнера для загрузки его из репозитория. Репозиторий может быть расположен как в самом ГВВК, так и в сети Интернет.

На втором шаге принимается решения о способе формирования контейнера с индивидуальной средой моделирования: пакетном или интерактивном.

Пакетное исполнение является предпочтительным, поскольку это основной режим выполнения заданий, обеспечивающий эффективную загрузку вычислительных ресурсов ГВВК [17].

В случае пакетного исполнения индивидуальная среда моделирования создается путем формирования и запуска на выполнения в вычислительной среде ГВВК пользовательского задания (под пользователем будем понимать, как индивида, так и научный коллектив). Входными данными для задания является базовый контейнер и файл-сценарий, создаваемый пользователем. В файле-сценарии содержится программный код, выполнение которого приводит к загрузке, установке и настройке в базовом контейнере всех программных средств, необходимых пользователю для решения задачи моделирования.

В случае интерактивного исполнения базовый контейнер загружается в вычислительную среду ГВВК и остается активным неопределенно долгое время. При этом пользователь получает интерактивный доступ к базовому контейнеру по протоколу SSH. Внутри контейнера пользователь имеет возможность последовательно производить действия по установке/компиляции, отладки любых программных средств, необходимых пользователю для решения задачи моделирования.

В зависимости от сложности действий пользователя и поведения вычислительной среды контейнера в интерактивном режиме возможно либо зафиксировать последовательность действий пользователя в виде файла-сценария, либо нет.

Если есть возможность зафиксировать последовательность действий пользователя в виде файла-сценария, то далее его можно применять в

пакетном режиме при формировании контейнера с индивидуальной средой моделирования.

Возможен вариант, при котором нельзя зафиксировать последовательность действий пользователя в виде файла–сценария. Это может быть связано со сложностью или невозможностью детально описать действия пользователя, установкой и активацией лицензии на программное средство, не предусматривающей множественную установку и другими причинами.

На третьем шаге принимается решение о создании из контейнера с индивидуальной средой моделирования библиотечного образа и загрузки его в репозиторий ГВБК. Библиотечный образ, не требующий дополнительной настройки, в дальнейшем по примеру базового образа может использоваться пользователем для формирования индивидуальной среды моделирования.

Отметим, что решение о создании библиотечного образа принимается на основе таких факторов как объем устанавливаемых программных средств и время, необходимое для подготовки контейнера с индивидуальной средой моделирования.

Для принятия решения необходимо сопоставлять время подготовки индивидуальной среды моделирования и время выполнения расчетной задачи моделирования. В случае, если время выполнения расчетной задачи значительно превышает время формирования контейнера с индивидуальной средой моделирования и объем данных, передаваемый из репозитория невелик, имеет смысл принять решение каждый раз формировать индивидуальную среду исполнения заново на основании файла–сценария. Если объем передаваемых данных велик или время формирования контейнера с индивидуальной средой моделирования сопоставимо со временем выполнения расчетной задачи, имеет смысл принять решение о сохранении контейнера с индивидуальной средой моделирования как библиотечного образа.

Также предлагаемый алгоритм позволяет вносить в базовый и библиотечный образы дополнительные изменения, путем добавления в файл–сценарий соответствующих блоков программного кода. Таким образом можно создать целую серию динамически формируемых контейнеров с индивидуальной средой моделирования на базе одного образа, незначительно отличающихся составом программного обеспечения для решения похожих задач одной предметной области, но требующих дополнительной настройки среды моделирования.

Необходимо отметить, что проблема передачи большого объема данных из сети Интернет при установке программного обеспечения может быть решена перенесением необходимых данных в локальный репозиторий. В этом случае решение о сохранении или динамическом формировании контейнера будет

приниматься только на основании соотношения времени формирования контейнера с индивидуальной средой моделирования и выполнения расчетной задачи.

### Заключение

Представленные в статье решения по созданию индивидуальной среды моделирования апробированы на ГВБК, функционирующим в составе центра коллективного пользования «Высокопроизводительные вычисления и большие данные» ФИЦ ИУ РАН (ЦКП «Информатика») [18, 19].

В состав ГВБК входит:

– IBM Power System AC922: 2 CPU Power 9 2.87 GHz, 20 ядер, 1 Tb ОЗУ, 4 GPU NVidia Tesla V–100 16 Gb RAM — 2 узла

– Huawei G560 V5: 2 CPU Intel Xeon Platinum 2.1 GHz, 24 ядра и 1.5 Tb ОЗУ, 4 и 8 GPU NVidia Tesla V–100 SXM2 32 Gb RAM — 2 узла;

ГВБК использует вычислительные сети InfiniBand EDR 100G, Ethernet 10G и интернет цифровой платформы ФИЦ ИУ РАН, а также корпоративную систему хранения данных, объемом 1 Pb.

На начальном этапе формирования индивидуальной среды моделирования задачи принятия решений не автоматизированы. Решение принимается администратором по согласованию с пользователем. Очевидно, что данные задачи являются автоматизируемыми. Дальнейшая исследовательская работа будет направлена на поиск возможных путей и разработку сценариев по автоматизации задач принятия решений.

Также отметим, что интеграция пакетного способа формирования контейнера с индивидуальной средой моделирования с последующим его запуском на исполнение системой управления заданиями является отдельной прикладной задачей и зависит от конкретной модели системы управления. В ЦКП «Информатика» данная интеграция проведена с использованием системы управления заданиями IBM Spectrum LSF [20]. При этом LSF осуществляет управление ресурсами вычислительной системы, выделяемые для виртуальной среды (графическими ускорителями, оперативной памятью, каталогами разделяемой файловой системы).

В созданный контейнер производится установка необходимого программного обеспечения, настройка переменных среды, установка пользовательского ПО и лицензий, после чего осуществляется запуск приложения, осуществляющего вычисления.

LSF настроена таким образом, чтобы созданный и настроенный контейнер по завершении работы пользовательского приложения был удален. Результаты расчета при этом сохраняются в разделяемой файловой системе и остаются доступными после завершения работы контейнера. Таким об-

разом решается проблема «сборки мусора» и обеспечивается экономия дискового пространства. Это особенно важно с учетом того, что временные данные контейнеров хранятся на локальных дисковых системах вычислительных узлов (из соображений производительности), а их объем является весьма ограниченным ресурсом по сравнению с системой хранения данных.

В случае, когда создание и компоновка контейнера при каждом запуске пользовательского приложения неприемлема, система управления позволяет создать образ настроенного контейнера и поместить его в библиотеку образов. Также средствами системы управления обеспечивается доступность этих образов на всех вычислительных узлах выбранной архитектуры.

Другие системы управления заданиями используют иные подходы, однако в любом случае имеется возможность сформировать задание, подразумевающее создание контейнера из базового образа и передачу в него файла-сценария для настройки с последующим запуском.

Таким образом, представленный алгоритм является независимым от реализации системы управления заданиями и может применяться для любого высокопроизводительного вычислительного комплекса.

#### Библиографический список

1. Сеченых П. А., Абгарян К. К. Математическое моделирование кристаллической структуры оксидов металлов // В сб.: Математическое моделирование в материаловедении электронных компонентов. Материалы I международной конференции. М., 2019. С. 74—76.
2. Абгарян К. К. Многомасштабное моделирование работы многоуровневых элементов памяти, применяемых для создания нейроморфных сетей // В сб.: Математическое моделирование в материаловедении электронных компонентов. Материалы I международной конференции. М., 2019. С. 53—56.
3. Суперкомпьютерные технологии в науке, образовании и промышленности // Под ред.: акад. В. А. Садовниченко, акад. Г. И. Савина, чл.-корр. РАН Вл. В. Воеводина. М.: Изд-во МГУ, 2012. С. 42—49.
4. Горчаков А. Ю., Малкова В. У. Сравнение процессоров Intel Core-i7, Intel Xeon, Intel Xeon Phi и IBM Power 8 на примере задачи восстановления начальных данных // International Journal of Open Information Technologies. 2018. Т. 6, № 4. С. 12—17.
5. Горчаков А. Ю., Посыпкин М. А. Сравнение вариантов многопоточной реализации метода ветвей и границ для ядерных систем // Современные информационные технологии и ИТ-образование. 2018. Т. 14, № 1. С. 138—148. DOI: 10.25559/SITITO.14.201801.138-148
6. Абрамов С. М. Анализ суперкомпьютерных киберинфраструктур ведущих стран мира // Суперкомпьютерные технологии (СКТ-2018). Материалы 5-й Всероссийской научно-технической конференции. Ростов-на-Дону, 2018. С. 11—18.
7. Sobolev S., Antonov A., Shvets P., Nikitenko D., Stefanov K., Voevodin V., Voevodin V. I., Zhumatiy S.: Evaluation of the octotron system on the Lomonosov-2 supercomputer // Conference materials parallel computing technologies. Rostov-on-Don, 2018.
8. Парфенов А. В., Чудинов С. М. Тенденции развития технологии вычислительной техники // Научные ведомости Белгородского государственного университета. Серия: Экономика. Информатика. 2016. Т. 39, № 16. С. 98—106.
9. Телегин П. Н., Шабанов Б. М. Связь моделей программирования и архитектуры параллельных вычислительных систем // Программные продукты и системы. 2007. № 2. С. 5—8.
10. Волович К. И. Некоторые системотехнические вопросы предоставления вычислительных ресурсов для научных исследований в гибридной высокопроизводительной облачной среде // Системы и средства информатики. 2018. Т. 28, № 4. С. 97—108.
11. Zatsarinny A. A., Gorshenin A. K., Kondrashev V. A., Volovich K. I., Denisov S. A. Toward high performance solutions as services of research digital platform // Procedia Computer Science. 2019. V. 150. P. 622—627. DOI: 10.1016/j.procs.2019.02.078
12. Кондрашев В. А., Волович К. И. Управление сервисами цифровой платформы на примере услуги высокопроизводительных вычислений // Материалы Международной научной конференции. Воронеж, 2018.
13. Савин Г. И., Телегин П. Н., Баранов А. В., Шитик А. С. Способы и средства представления пользовательских суперкомпьютерных заданий в виде контейнеров Docker // Труды научно-исследовательского института системных исследований Российской академии наук. 2018. Т. 8, № 6. С. 84—93. DOI: 10.25682/niisi.2018.6.0012
14. Afanasyev I., Voevodin V. The comparison of large-scale graph processing algorithms implementation methods for Intel KNL and NVIDIA GPU // Communications in Computer and Information Science. 2017. Т. 793. С. 80—94. DOI: 10.1007/978-3-319-71255-0\_7
15. Горчаков А. Ю. Использование OPENMP для реализации многопоточного метода неравномерных покрытий // Перспективные информационные технологии (ПИТ 2018). Тр. Международной научно-технической конференции. Самара: Изд-во Самарского научного центра РАН, 2018. С. 613—616.
16. Карцев А., Мальковский С. И., Волович К. И., Сорокин А. А. Исследование производительности и масштабируемости пакета Quantum ESPRESSO при изучении низкоразмерных систем на гибридных вычислительных системах // Материалы I международной конференции «Математическое моделирование в материаловедении электронных компонентов. МММЭК-2019». М.: МАКС Пресс, 2019. С. 18—21.
17. Nikitenko D. A., Voevodin V. I., Teplov A. M., Zhumatiy S. A., Voevodin V. V., Stefanov K. S., Shvets P. A.: Supercomputer application integral characteristics analysis for the whole queued job collection of large-scale hpc systems // Parallel computing technologies (PaVT'2016): proceedings of the international scientific conference. Chelyabinsk, 2016. P. 20—30.
18. Положение о ЦКП «Информатика». URL: <http://www.frcsc.ru/ckp> (дата обращения 02.12.2019).
19. Зацаринный А. А., Абгарян К. К. Факторы, определяющие актуальность создания исследовательской инфраструктуры для синтеза новых материалов в рамках реализации приоритетов научно-технологического развития России // В сб.: Математическое моделирование в материаловедении электронных компонентов. Материалы I международной конференции. М., 2019. С. 8—11.
20. IBM Spectrum LSF Suites. URL: <https://www.ibm.com/ru-ru/marketplace/hpc-workload-management> (дата обращения: 02.12.2019).

Работа выполнена при частичной поддержке РФФИ (проекты №№ 18-29-03100, 18-07-00669).

Статья поступила в редакцию 26 декабря 2019 г.

*Izvestiya vuzov. Materialy elektronnoy tekhniki = Materials of Electronics Engineering*. 2019, vol. 22, no. 3, pp. 197—201.  
DOI: 10.17073/1609-3577-2019-3-197-201

## Creating of an individual modeling environment in a hybrid high–performance computing system

K. I. Volovich<sup>1,§</sup>, S. A. Denisov<sup>1</sup>, S. I. Malkovsky<sup>2</sup>

<sup>1</sup> *Federal Research Centre “Information and Control” of the Russian Academy of Sciences,  
44 Vavilov Str., Moscow 119333, Russia*

<sup>2</sup> *Computing Center of the Far Eastern Branch of the Russian Academy of Sciences,  
65 Kim Yu Chen Str., Khabarovsk 680000, Russia*

**Abstract.** The article is devoted to the problem of solving scientific problems in the field of high–performance computing systems. An approach to solving a certain kind of problems in materials science is the use of mathematical modeling technologies implemented by specialized modeling systems. The greatest efficiency of the modeling system is shown when deployed in hybrid high–performance computing systems (HHPC), which have high performance and allow solving problems in an acceptable time with sufficient accuracy. However, there are a number of limitations that affect the work of the research team with modeling systems in the HHPC computing environment: the need to access graphics accelerators at the stage of development and debugging of algorithms in the modeling system, the need to use several modeling systems in order to obtain the most optimal solution, the need to dynamically change settings modeling systems for solving problems. The solution to the problem of the above limitations is assigned to an individual modeling environment functioning in the HHPC computing environment. The optimal solution for creating an individual modeling environment is the technology of virtual containerization. An algorithm for the formation of an individual modeling environment in a hybrid high–performance computing complex based on the «docker» virtual containerization system is proposed. An individual modeling environment is created by installing the necessary software in the base container, setting environment variables, installing custom software and licenses. A feature of the algorithm is the ability to form a library image from a base container with a customized individual modeling environment. In conclusion, the direction for further research work is indicated. The algorithm presented in the article is independent of the implementation of the job management system and can be used for any high–performance computing system.

**Keywords:** algorithm, basic image, high–performance computing system, hybrid architecture, graphics accelerator, individual modeling environment, container

### References

- Sechenykh P. A., Abgaryan K. K. Mathematical modeling of the crystal structure of metal oxides. In: *Mathematical modeling in materials science of electronic components. Materials of the I international conference*. Moscow, 2019, pp. 74—76. (In Russ.)
- Abgaryan K. K. Multiscale modeling of multilevel memory elements used to create neuromorphic networks. In: *Mathematical modeling in materials science of electronic components. Materials of the I international conference*. Moscow, 2019, pp. 53—56. (In Russ.)
- Supercomputer technology in science, education and industry. Moscow: Izdatel'stvo Moskovskogo gosudarstvennogo universiteta, 2012, pp. 42—49. (In Russ.)
- Gorchakov A. Yu., Malkova V. U. Comparison of Intel Core–i7, Intel Xeon, Intel Xeon Phi and IBM Power 8 processors using the example of initial data recovery. *International Journal of Open Information Technologies*, 2018, vol. 6, no. 4, pp. 12—17. (In Russ.)
- Gorchakov A. Yu., Posypkin M. A. Comparison of variants of multithreaded realization of method of branches and borders for multi–core systems. *Modern Information Technology and IT–education*, 2018, vol. 14, no. 1, pp. 138—148. DOI: 10.25559/SITITO.14.201801.138-148
- Abramov S. M. Analysis of supercomputer cyber infrastructures of the leading countries of the world. *Supercomputer technologies (SKT–2018). Materials of the 5th All–Russian Scientific and Technical Conference*. Rostov–on–Don, 2018, pp. 11—18. (In Russ.)
- Sobolev S., Antonov A., Shvets P., Nikitenko D., Stefanov K., Voevodin V., Voevodin V. I., Zhumatiy, S. Evaluation of the octotron system on the Lomonosov–2 supercomputer. *Conference materials parallel computing technologies*. Rostov–on–Don, 2018. (In Russ.)
- Parfenov A. V., Chudinov S. M. Trends in the development of computer technology. *Scientific Bulletin of the Belgorod State University. Series: Economics. Informatics*, 2016, vol. 39, no. 16, pp. 98—106. (In Russ.)
- Telegin P. N., Shabanov B. M. Communication models of programming and architecture of parallel computing systems. *Software products and systems*, 2007, no. 2, pp. 5—8. (In Russ.)
- Volovich K. I. Some system–technical issues of providing computing resources for scientific research in a hybrid high–performance cloud environment. *Systems and means of informatics*, 2018, vol. 28, no. 4, pp. 97—108. (In Russ.)
- Zatsarinny A. A., Gorshenin A. K., Kondrashev V. A., Volovich K. I., Denisov S. A. Toward high performance solutions as services of research digital platform. *Procedia Computer Science*, 2019, vol. 150, pp. 622—627. DOI: 10.1016/j.procs.2019.02.078
- Kondrashev V. A., Volovich K. I. Service management of a digital platform on the example of high–performance computing services. *Materials of the International scientific conference*. Voronezh, 2018. (In Russ.)
- Savin G. I., Telegin P. N., Baranov A. V., Shitik A. S. Methods and means of representing custom supercomputer tasks in the form of Docker containers. *Transactions of the Research Institute for System Research of the Russian Academy of Sciences*, 2018, vol. 8, no. 6, pp. 84—93. (In Russ.). DOI: 10.25682/niisi.2018.6.0012
- Afanasyev I., Voevodin V. The comparison of large–scale graph processing algorithms implementation methods for Intel KNL and NVIDIA GPU. In: *Communications in Computer and Information Science*, 2017, vol. 793, pp. 80—94. DOI: 10.1007/978-3-319-71255-0\_7
- Gorchakov A. Yu. Using OPENMP to implement the multi–threaded method of uneven coatings // *Advanced Information Technologies (PIT 2018). Proceedings of the International Scientific and Technical Conference*. Samara: Izdatel'stvo Samarskogo nauchnogo tsentra RAN, 2018. 613—616. (In Russ.)
- Kartsev A., Malkovsky S. I., Volovich K. I., Sorokin A. A. Research of the performance and scalability of the Quantum ESPRESSO package in the study of low–dimensional systems on hybrid computing systems. In: *Proc. of the I Intern. Conf. “Mathematical Modeling in Materials Science of Electronic Components. MMEK–2019”*. Moscow: MAKS–Press, 2019, pp. 18—21. (In Russ.)
- Nikitenko D. A., Voevodin V. I., Teplov A. M., Zhumatiy S. A., Voevodin V. V., Stefanov K. S., Shvets P. A.: Supercomputer application integral characteristics analysis for the whole queued job collection of large–scale hpc systems. *Parallel computing technologies (PaVT'2016): Proceedings of the international scientific conference*. Chelyabinsk, 2016, pp. 20—30.
- Regulations on the of the Center for Shared Use “Informatics”. URL: <http://www.frccsc.ru/ckp> (accessed: 02.12.2019). (In Russ.)
- Zatsarinny A. A., Abgaryan K. K. Factors determining the relevance of creating a research infrastructure for the synthesis of new materials in the framework of the implementation of the priorities of scientific and technological development of Russia. In: *Mathematical modeling in materials science of electronic components. Materials of the I international conference*. Moscow, 2019, pp. 8—11. (In Russ.)
- IBM Spectrum LSF Suites. URL: <https://www.ibm.com/ru-ru/marketplace/hpc-workload-management>

### Information about authors:

**Konstantin I. Volovich<sup>1,§</sup>**: Cand. Sci. (Eng.), Senior Researcher (kvolovich@frccsc.ru); **Sergey A. Denisov<sup>1</sup>**: Lead Engineer (sdenisov@frccsc.ru); **Sergey I. Malkovsky<sup>2</sup>**: Researcher (sergey.malkovsky@ccfebras.ru)

§ Corresponding author