# Анализируем программный стек в HPC

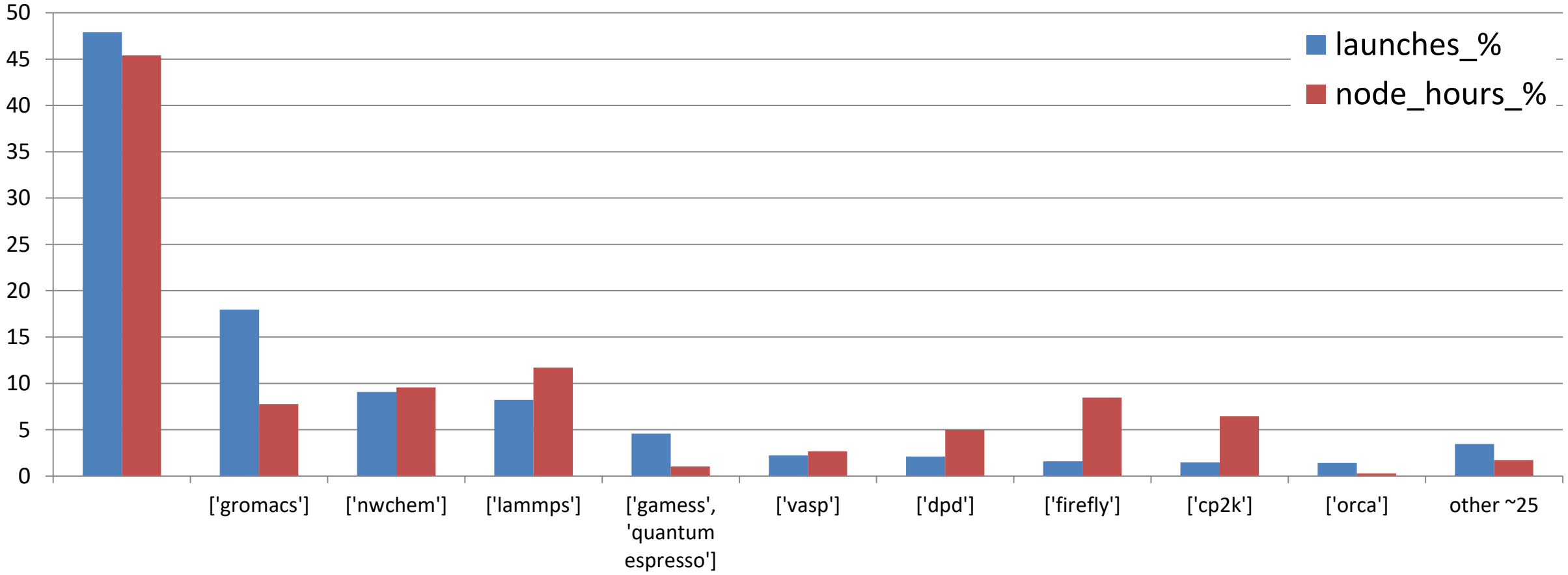
*Никитенко Дмитрий Александрович*
*Воеводин Вадим Владимирович, Паокин Андрей Викторович*

НИВЦ МГУ имени М.В. Ломоносова

**RSCD’25: «Инструменты и технологии обеспечения эффективной работы суперкомпьютерных центров»**
**г. Москва, 29 сентября 2025 г.**

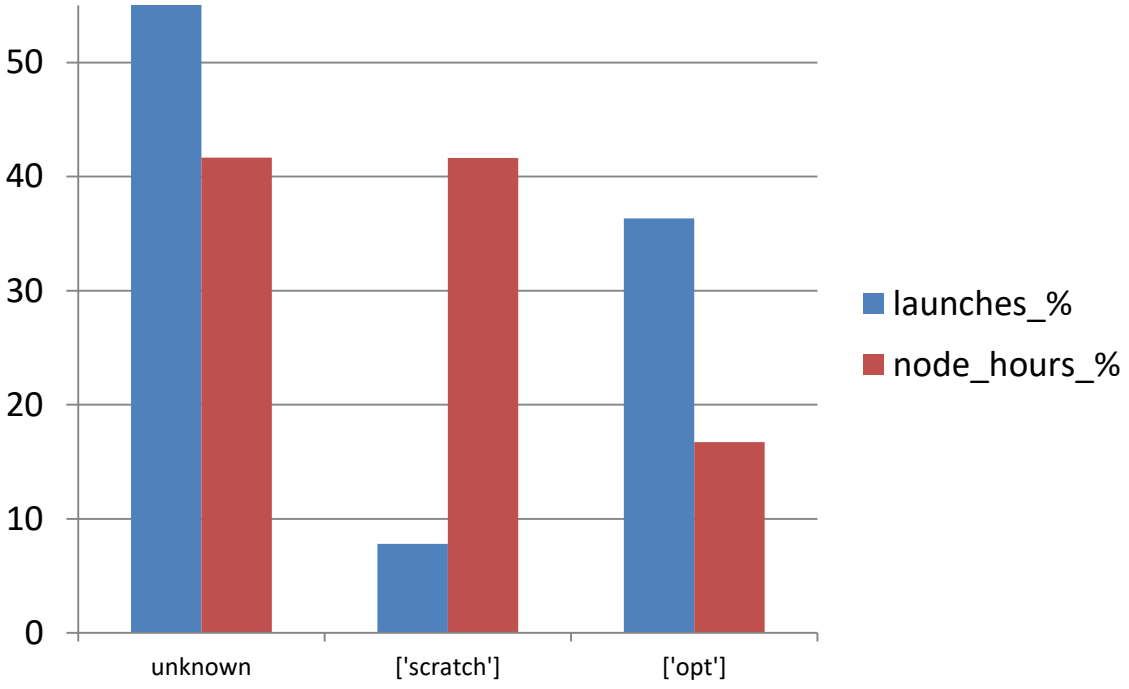
# Доля “самописного” и пакетов

Суммарный вклад «стандартных» прикладных пакетов >50%
На чем концентрировать усилия по оптимизации?

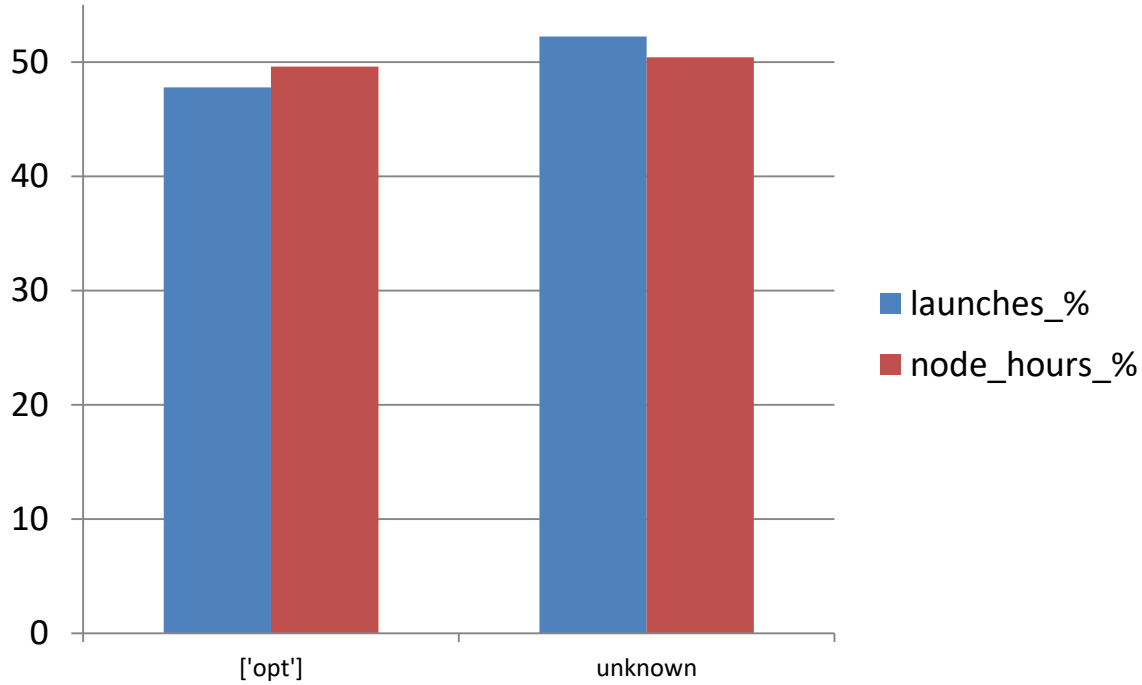


# Индивидуальные установки пакетов и библиотек vs централизованных

Откуда и зачем собственные сборки?
Необходимость настройки под себя?
Лицензии?

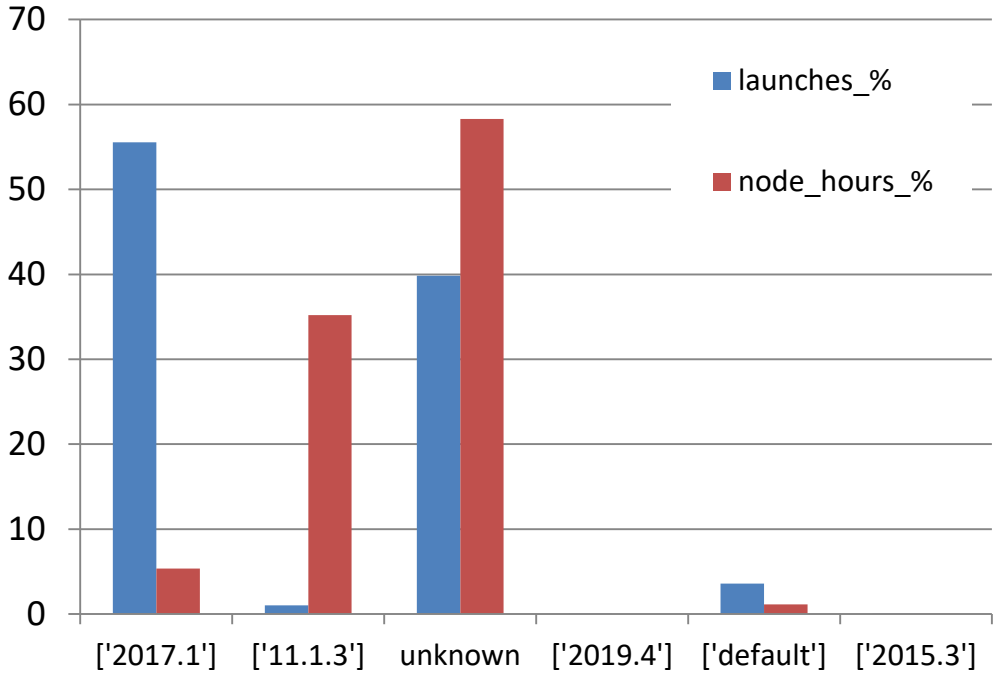



Gromacs

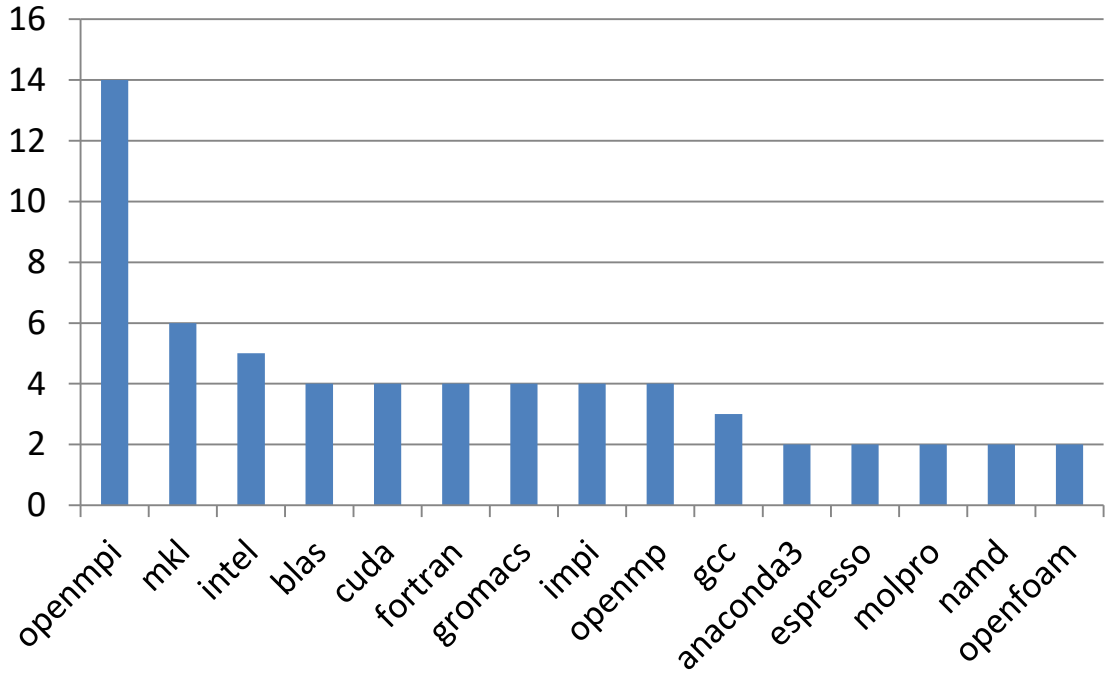



CP2K

# Версии ПО и лицензии




Версии MKL




Число !используемых! версий

# Структура стека и влияние уровней... на разное

- Области применения

- Прикладные пакеты:
  {{типовые}; самописное + невыявленное стандартное; ...}
- Компиляторы: {icc, gcc, …}
- Библиотеки: {MPI, MKL, ....}
- Языки программирования: {C, C++, Fortran, …}

- ОС и драйверы
- ФС: {Lustre, Panasas, NFS}

- Interconnect: {IB FDR, …}
- Архитектура: {x86, GPU, x86+GPU, NEC SX, …}

# Как изменится стек для ARM или RISC?

- Наиболее ожидаемое в системном ПО?
  - ARM + Lustre?
  - Драйверы IB?
  - Российские сборки Linux?

- Наиболее ожидаемое в прикладном ПО?
  - Какие пакеты и библиотеки?