



О сети суперкомпьютерных центров в Сибирском отделении РАН

ак. Валентин Николаевич Пармон
ак. Игорь Вячеславович Бычков

Президиум РАН, 16 февраля 2021 г.



Поручение В. В. Путина (апрель 2020г.)

Поручение Президента России Пр-647, п.1 з): представить предложения, направленные на увеличение мощности вычислительных ресурсов российских суперкомпьютерных центров, в том числе региональных, с учётом потребностей научных и образовательных организаций, расположенных на всей территории Российской Федерации, в проведении высокопроизводительных вычислений, установление порядка взаимодействия указанных суперкомпьютерных центров между собой, с научными и образовательными организациями на базе национальной исследовательской компьютерной сети нового поколения, увеличение её пропускной способности и территориальной доступности, предусмотрев включение соответствующих мероприятий в национальный проект «Наука» и национальную программу «Цифровая экономика Российской Федерации» и их финансовое обеспечение.



Сибирское отделение РАН



144
НИИ и ФИЦ

170
ВУЗов

> 11 тыс.
исследователе
й в НИИ

211
академиков и
чл.-корр. РАН

1957
год основания

36 млн.
человек

13 млн. кв.км.
территория



Предпосылки создания самосогласованной подсети суперкомпьютеров в Сибири

1. План комплексного развития СО РАН в свете приоритетов Стратегии НТР
2. Масштабные задачи для всей экономики, требующие супервычислений и больших баз данных:
 - Экология (Байкал, Енисей, Лена), мониторинг, прогноз, «черное небо»
 - Новая энергетика, ресурсы (в том числе разведка/томография, проект «Прорыв» – атомные реакторы на быстрых нейтронах, глубокая переработка угля/газификация, переход на парогазовый цикл...)
 - Геномика - здоровьесбережение, новое сельское хозяйство
3. Создаваемая научная и технологическая инфраструктура
 - Два центра геномных исследований Вектор, ИЦиГ (Новосибирске)
 - Математический центр (Новосибирск)
 - СКИФ (Новосибирск)
 - Национальный гелиогеофизический центр, комплексный мониторинг оз. Байкал (Иркутск)
 - КНТП «Информационные спутниковые системы» (Красноярск)

Необходимо создание новых и существенная модернизация существующих систем сбора, хранения и обработки данных!



Задачи для суперкомпьютерных вычислений ЦКП СКИФ

**Комплексное моделирование установок,
зданий и сооружений:**

- Моделирование физических процессов в ускорительном контуре и пользовательских станциях,
- Моделирование для оценки требований к оборудованию и строительству, сочетание с BIM-моделью,
- Безопасность процессов и режимов работы,
- Информационные потоки и процессы, информационная безопасность.
- Процессы обслуживания.





Задачи для суперкомпьютерных вычислений

Национальный гелиогеофизический комплекс РАН

- Обработка больших массивов данных,
- Моделирование структуры верхних слоев атмосферы Земли,
- Моделирование физических процессов на солнце.



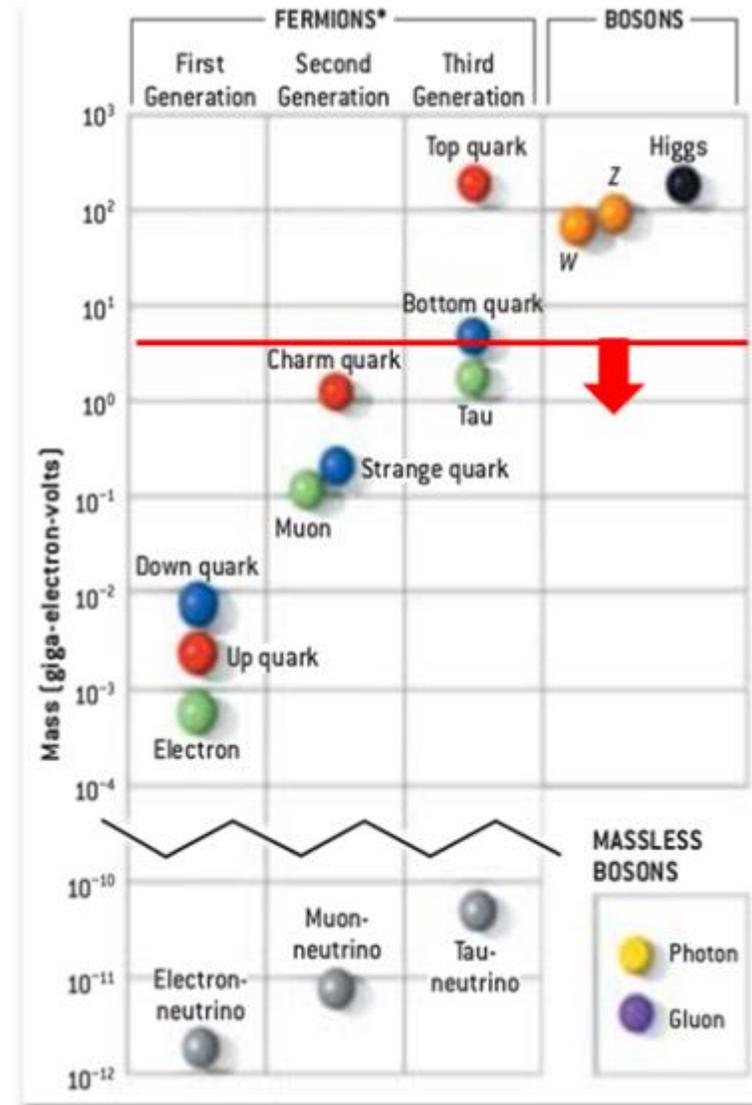


Задачи для суперкомпьютерных вычислений

Институт ядерной физики СО РАН

Проект С-Тау фабрика:

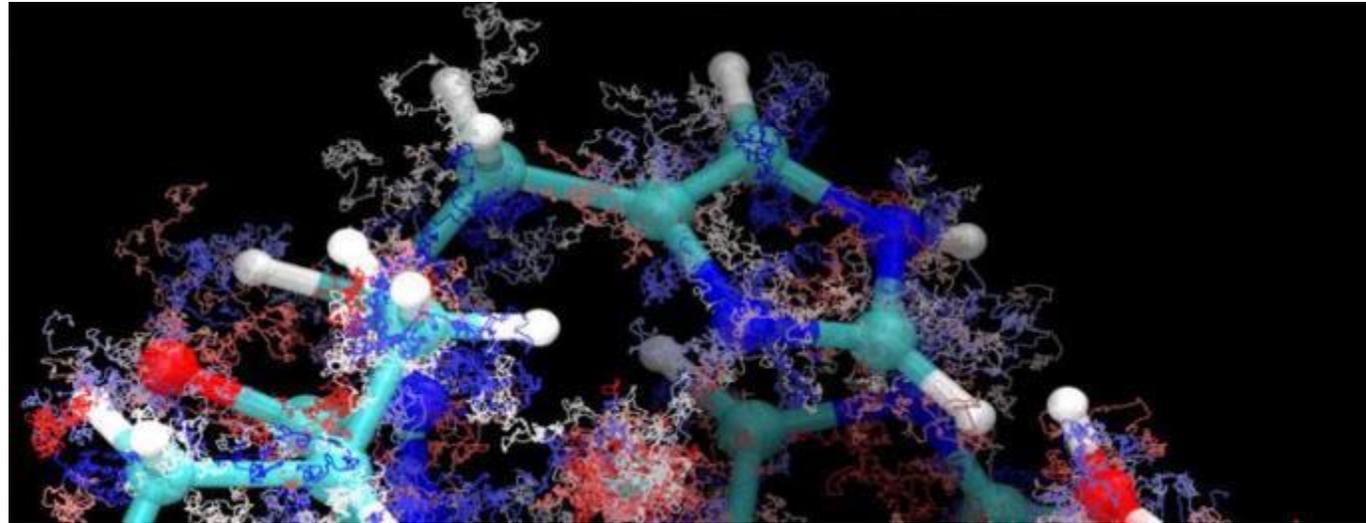
- Моделирование детекторов,
- Полное численное моделирования функционирования установки,
- Имитационное моделирование с целью выявления узких мест установки,
- Расчет необходимой конфигурации вычислительного оборудования для обработки данных экспериментов.
- Оценка потребности:
 - 1 Петафлопс
 - 200-300 Пбайт





Задачи для суперкомпьютерных вычислений ФИЦ Институт катализа СО РАН

- Квантово-химическое моделирование взаимодействия веществ с целью решения задач глубокой переработки углеводородов.
- Численное моделирование химических реакторов для создания экспериментальных реакторных установок.

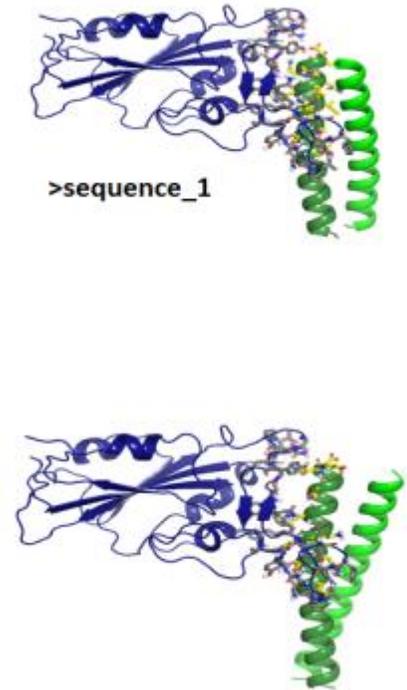
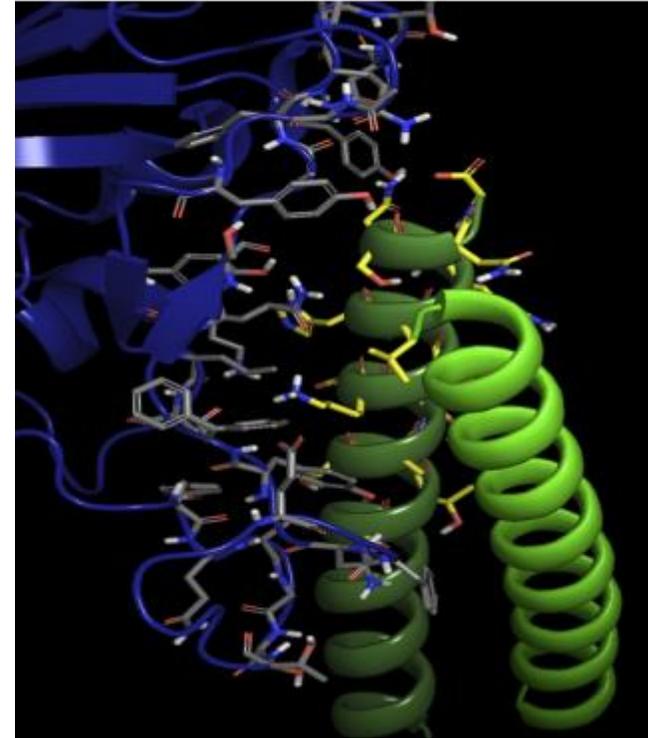




Задачи для суперкомпьютерных вычислений

ФИЦ Институт цитологии и генетики СО РАН

- Системная компьютерная биология, геномика,
- Исследования вирусов и вирусных инфекций на клеточном уровне и в организме в целом,
- Моделирования динамики эпидемического процесса, оценка вероятности мутаций,
- Разработка новых лекарств,
- Персонализированная медицина.



Предсказанные ингибиторы взаимодействия ACE2-RBD

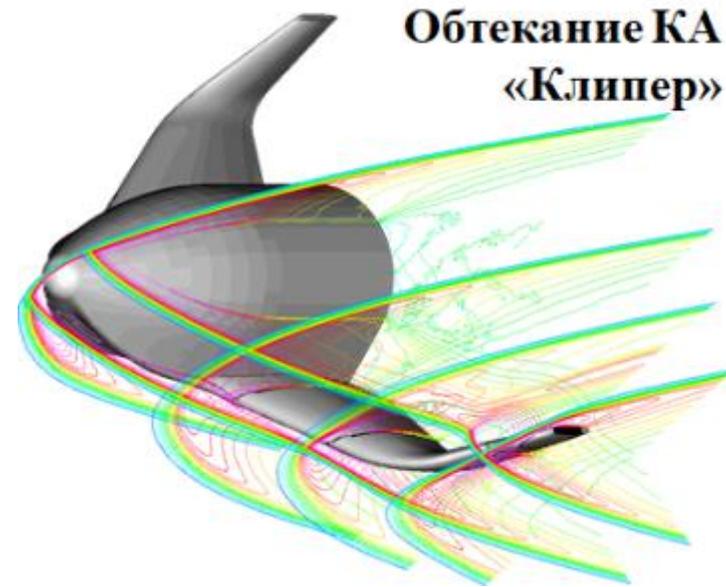




Задачи для суперкомпьютерных вычислений

Институт теоретической и прикладной механики СО РАН

- Численное моделирование газодинамических процессов летательных аппаратов,
- Сверхзвуковой полет,
- КА «Клипер»,
- КА «Федерация»



Пакеты расчета сверхзвукового полета ИТПМ СО РАН.

Пользователи: РКК «Энергия», Европейское космическое агентство, ГРЦ им. ак. Макеева, КБМ и т.д.

Потребность – тысячи GPU

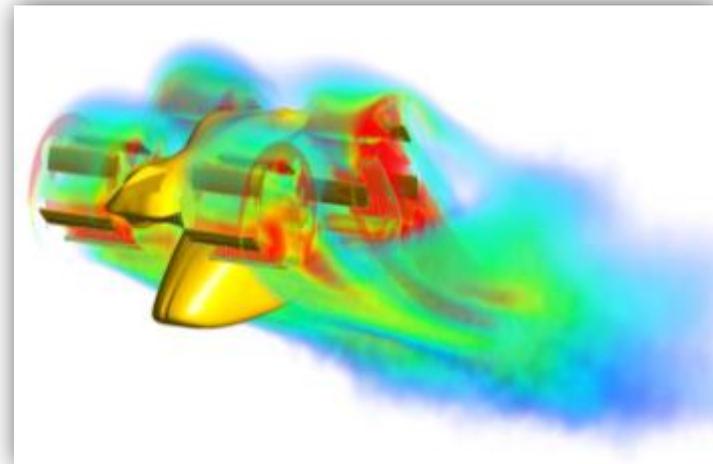
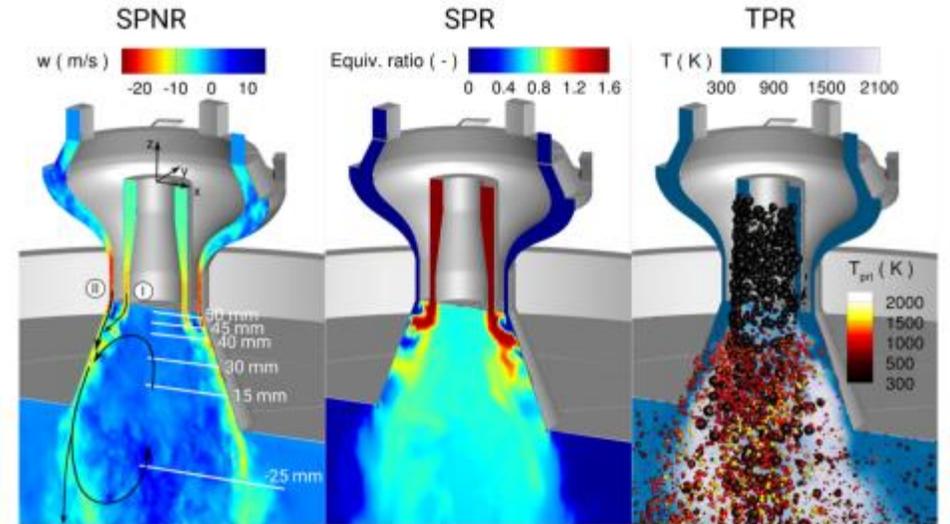




Задачи для суперкомпьютерных вычислений

Институт теплофизики СО РАН

- Численное моделирование процессов тепломассопереноса в перспективных энергетических системах;
- Коды для безопасной эксплуатации атомных электростанций, в т.ч. расчет гидродинамики реакторов, ТВЭЛ,
- Разработка цифровых двойников энергетического оборудования и авиадвигателей,
- Вихреразрешающее моделирование камер сгорания авиадвигателей ПД-14, ПД-35, ряда других
- Моделирование аэродинамики летательных аппаратов.





Фундаментальные основы, методы и технологии цифрового мониторинга и прогнозирования экологической обстановки

Байкальской природной территории

Цель проекта: Создание фундаментальных основ, методов и технологий комплексного экологического мониторинга и прогнозирования на основе цифровых платформ, обеспечивающих сбор, хранение, обработку, анализ больших массивов разнородных пространственно-временных данных, а также комплекса математических и информационных моделей, сервисов и методов машинного обучения и их апробация для Байкальской природной территории.

Участники:

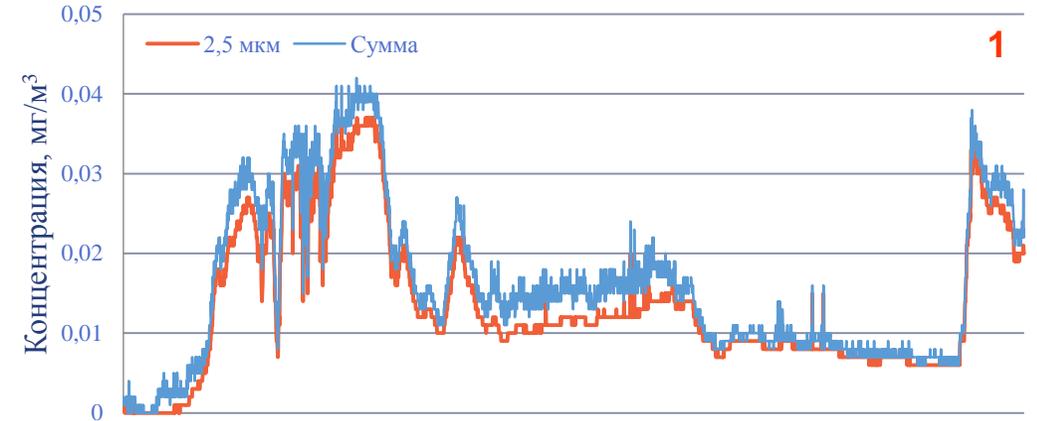
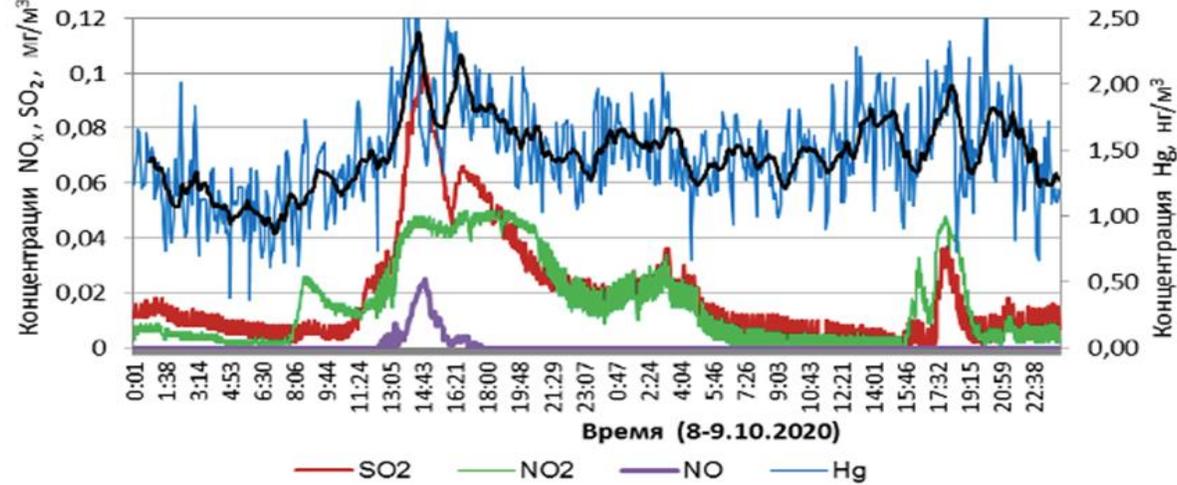
14 институтов СО РАН из 5 городов,
210 исследователей

1 – академик РАН, 2 – чл.-кор. РАН, 36 – докторов наук, 111 кандидатов наук, 44% - исследователи до 39 лет.

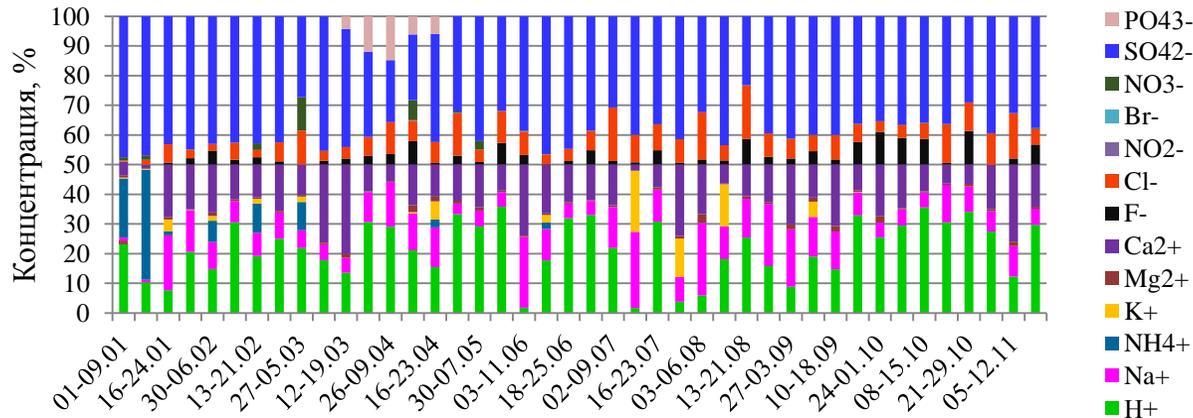
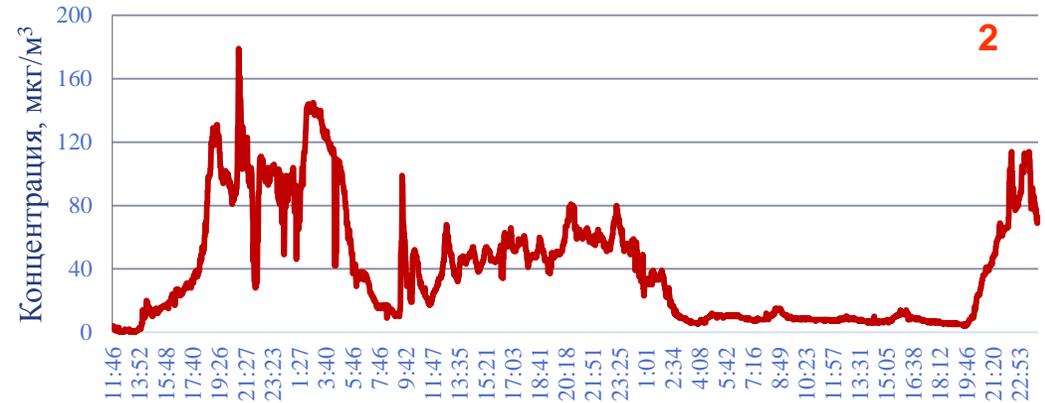




Результаты мониторинга малых газовых примесей, химического состава аэрозолей, атмосферных осадков на станции «Листвянка»



Пример цифровой регистрации антропогенных примесей над станцией «Листвянка» 08-09.10.2020 (газоанализаторы «ОПТЭК», С-Петербург, Россия)



Относительный состав концентраций ионов в аэрозоле на станции «Листвянка» в 2020 г., %



НИИПФ ИГУ

Гамма-обсерватория «TAIGA» (Tunka Advanced Instrument for cosmic ray physics and Gamma Astronomy)

«Кластер Байкал-GVD» Байкальского глубоководного нейтринного телескопа

Задачи:

- Численное моделирование экспериментов
- Обработка данных измерений

Оценка потребности:

- 1 Петафлопс
- 20-100 Пбайт

Целевые архитектуры: гибридные (CPU+GPU)
высокопроизводительные СХД





Задачи для суперкомпьютерных вычислений в СО РАН

- **ИНГГ СО РАН:** обработка больших данных сейсмических исследований; численное моделирование структур геологических пород с целью поиска новых месторождений углеводородов; построение цифровых двойников месторождений и кернов.
- **ИВМиМГ СО РАН:** создание информационно-экспертной системы прогнозирования развития экологической ситуации в Сибири и оценки рисков опасных природных и техногенных воздействий на экосистему, инфраструктуру и население региона.
- **ИМ СО РАН:** разработка методов искусственного интеллекта и машинного обучения.
- **ИГиЛ СО РАН:** разработка расчетных методов для моделирования процессов интенсификации нефтеотдачи, гемодинамики сосудов головного мозга и персонализированной медицины.



СКЦ «ЛАВРЕНТЬЕВ» с центром компетенций по высокопроизводительным вычислениям и искусственному интеллекту

Создание в Новосибирском Академгородке суперкомпьютерного центра «Лаврентьев» мирового уровня (**14 Петафлопс, номер 1 в России**) приведет к эффективному взаимодействию научно-образовательных организаций в области суперкомпьютерных вычислений и технологий искусственного интеллекта, а также **стимулирует разработку отечественного программного обеспечения.**

СКЦ «ЛАВРЕНТЬЕВ» позволит решить актуальные задачи мирового уровня:

- Достижение принципиально нового уровня персонализированной медицины на основе объединения передовых медицинских технологий и цифровых двойников (совместно с НМИЦ им. ак. Е.Н. Мешалкина).
- Быстрые разработка и конструирование малошумных и экономичных реактивных двигателей для авиации.
- Быстрые разработка и конструирование экономичных паровых и газовых турбин для крупных энергетических установок.
- Участие в проектировании новых многоцелевых космических аппаратов (совместно с РКК «Энергия»).

Опора на отечественные технологии создания суперкомпьютеров: система жидкостного охлаждения, коммуникационная система, системное ПО.



Существующая инфраструктура сети суперкомпьютерных центров в СО РАН

- Научные и образовательные организации СО РАН обладают 2% от общего объема текущих суперкомпьютерных мощностей Российской Федерации (по данным top50.supercomputers.ru);
- На территории присутствия Сибирского отделения находятся действующие суперкомпьютерные центры, входящие в мировые ТОП-500 - 0, в российские ТОП-50 – 4 единицы:
 - 26. НГУ,
 - 27. ТГУ,
 - 39. ИДСТУ СО РАН,
 - 50. ИВМиМГ СО РАН.



Предложения по развитию СК центров в СО РАН

1. Модернизировать мощности существующих суперкомпьютерных центров коллективного пользования в научных и образовательных организациях в городах: Новосибирск, Иркутск, Красноярск, Томск, – на суммарную вычислительную мощность не менее 23 Петафлопс.

Сроки по запуску дополнительных суперкомпьютерных мощностей

- **Новосибирск: 1 Пфлопс – к концу 2021 г., 13 Пфлопс – к концу 2024 г.**
- **Иркутск: 1 Пфлопс – к концу 2021 г., 3 Пфлопс – к концу 2022 г.**

2. Создать систему интеграции суперкомпьютерных ресурсов на основе GRID-технологий и высокоскоростных телекоммуникационных соединений между суперкомпьютерными центрами и их ключевыми пользователями к декабрю 2022 г.

3. Необходимо предусмотреть отдельные средства на реализацию системы интеграции ресурсов суперкомпьютерных центров.



Эскизный проект – технологическая архитектура



- Гибридные вычислительные ресурсы:
 - для традиционных вычислений
 - для вычислений на графических ускорителях
 - для обработки больших данных в памяти
 - для машинного обучения и ИИ
- СХД для быстрого обмена при параллельной обработке и генерации данных
- СХД для долговременного размещения данных – результатов обработки данных или моделирования



Сводная информация о проектах развития СКЦ в СО РАН

	Исследователей в регионе, тыс.ч.	Существующие мощности, ТФлопс	Проекты развития, ПФлопс	Оценка стоимости проектов, млрд. руб.
Новосибирск (НИУ НГУ, ФИЦ ИЦИГ СО РАН, ИВМиМГ СО РАН, проект СКИФ и др.)	30+	570	14+	10
Красноярск (ФИЦ КНЦ СО РАН, СФУ)	10+	24	3+	2
Иркутск (ИДСТУ СО РАН и др.)	10+	90	3+	2
Томск (НИУ ТГУ, ТПУ и др.)	10+	240	3+	2
Итого	60+	920	23+	16



Спасибо за внимание!

Игорь Вячеславович Бычков

академик РАН, директор ИДСТУ СО РАН

www.sbras.ru