



# Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН



## Большие вычислительные задачи ИВМиМГ СО РАН и ЦКП Сибирский суперкомпьютерный центр СО РАН

Марченко М.А., Черных И.Г., Глинский Б.М.

Суперкомпьютерные дни в России

Москва

26.09.2022

# Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН



Вычислительный Центр СО АН СССР – ныне **ИВМиМГ СО РАН** – основан академиком **Гурием Ивановичем Марчуком** в 1963 году.

## **Основные научные направления:**

- вычислительная математика
- математическое моделирование и прикладная математика
- параллельные и распределенные вычисления
- информационные системы

## **Компетенции:**

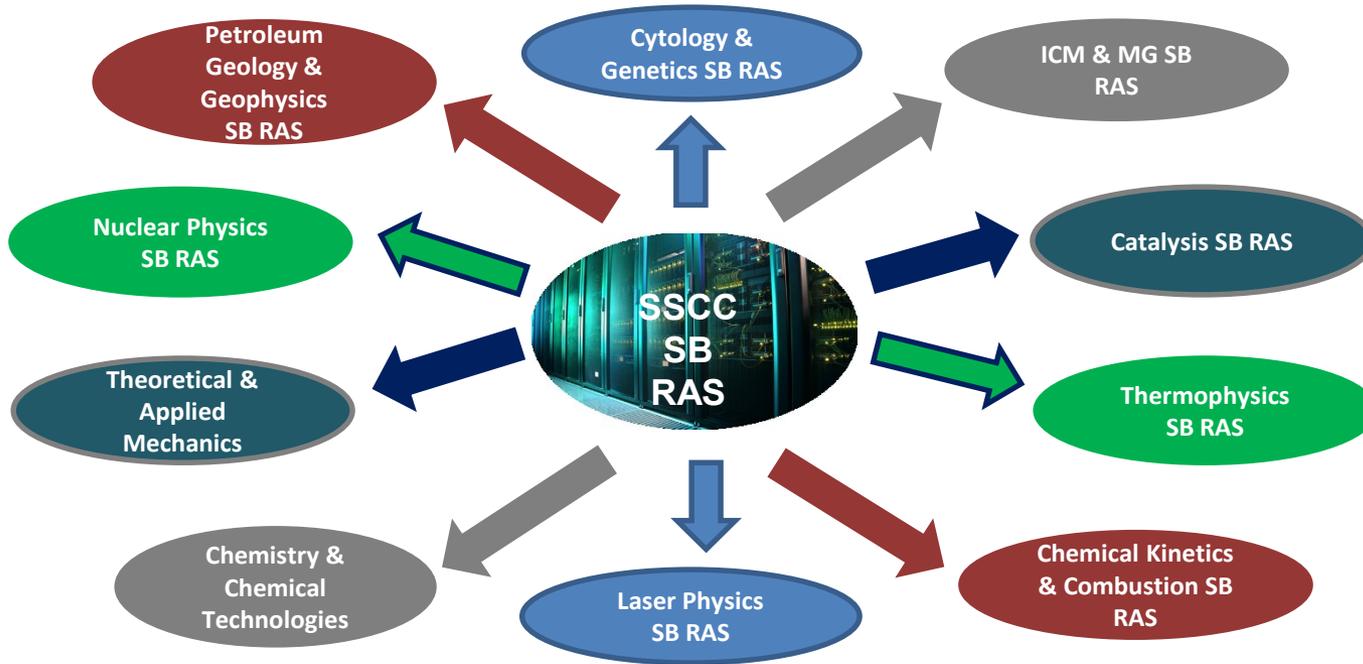
- разработка, обоснование и применение численных методов для решения прямых и обратных задач естествознания с использованием суперкомпьютеров

## **Области применения результатов исследований:**

- решение задач природоохранного прогнозирования и экологической безопасности, рационального природопользования, поиска месторождений нефти и газа, предсказания природных и техногенных катастроф с оценкой их последствий и др.
- оптимизация сетей различного назначения
- разработка методов информационной безопасности
- разработка прикладного программного обеспечения для суперкомпьютеров и цифровых двойников



# Центр коллективного пользования Сибирский суперкомпьютерный центр СО РАН



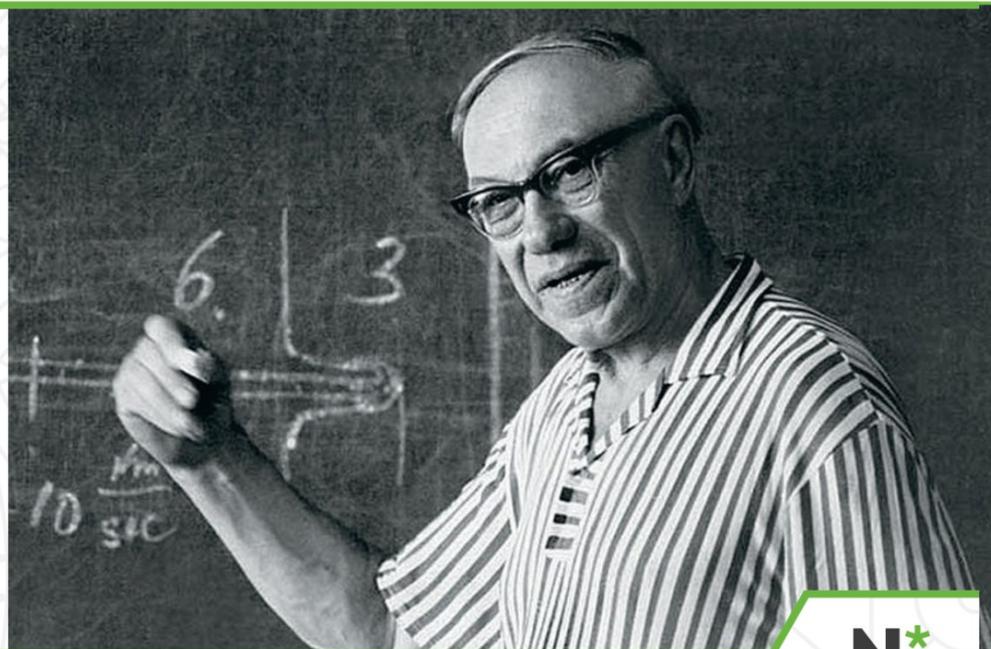
- Процессорная база Intel и Хуавей
- Более 200 пользователей из 24 организации, больше 200 пользователей
- С использованием оборудования ССКЦ в год выполняется более 100 НИР на общую сумму более 700 млн. рублей
- Текущая производительность 0,2 Петафлопс на процессорах Intel и 2.5 Петафлопс в FP16 на сервере Huawei ATLAS 9000



## ЧТО ПРЕДЛАГАЕТСЯ

Создание в Новосибирском Академгородке суперкомпьютерного центра «Лаврентьев» мирового уровня (номер 1 в России) и Центра компетенций по высокопроизводительным вычислениям и искусственному интеллекту.

Создание центра приведет к эффективному взаимодействию научно-образовательных организаций в области суперкомпьютерных вычислений и технологий искусственного интеллекта, а также стимулирует разработку отечественного программного обеспечения.



- Создается на базе НГУ в консорциуме научных организаций СО РАН
- Производительность 10-15 Петафлопс:
  - на CPU 70% - для задач математического моделирования
  - на GPU 30% - для задач искусственного интеллекта и обработки данных

# Сотрудничество ИВМиМГ с ЦКП «СКИФ» и Центром генетических технологий



- Автоматизация обработки больших экспериментальных данных
- Математическое моделирование на основе усвоения экспериментальных данных
- Создание цифровых сервисов
- Создание цифровых двойников установок и процессов



*Октябрь 2021 года: ЦКП СКИФ, НГУ и ИВМиМГ СО РАН объединят усилия для создания и эксплуатации центра обработки данных (ЦОД) экспериментальных станций ЦКП «СКИФ», совместной реализации образовательных программ.*

# ИВМиМГ – участник консорциума Центра компетенций НТИ по технологиям доверенного взаимодействия

## ЦК НТИ «Технологии доверенного взаимодействия»

ФОНД НТИ Фонд Национальной технологической инициативы

НАЦИОНАЛЬНЫЕ  
ПРОЕКТЫ  
РОССИИ

Цель центра: обеспечение трансфера технологий информационной безопасности и цифрового доверия в сектора экономики переживающие цифровую трансформацию.

### Технологии:

- Защита каналов связи.
- Авторизация и идентификация.
- Управление трафиком.
- Квантовое шифрование.
- Доверенные распределенные системы.
- Технологии распределенных реестров.
- Защита баз данных.
- Безопасность систем искусственного интеллекта.
- Безопасность АСУТП и IoT.

### Ядро Консорциума

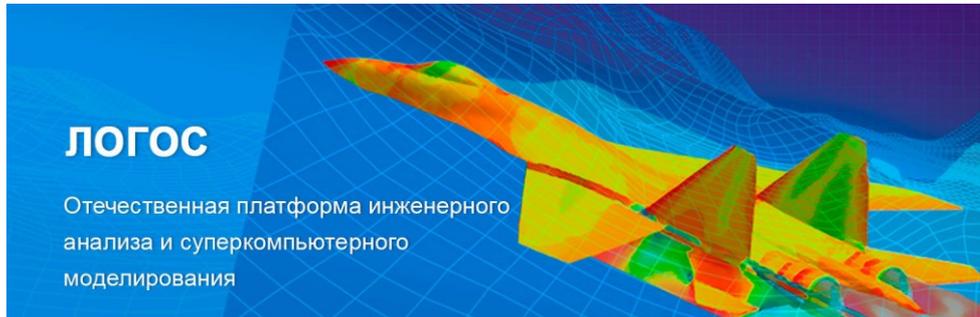


HEALTH NET  
Инфраструктурный центр



СибГУТИ

# Разработка в ИВМиМГ отечественного программного обеспечения



- Участие ИВМиМГ в консорциуме российских организаций (организатор - Росатом) по созданию и внедрению отечественных программных платформ для инженерного моделирования и проектирования
- Участие в разработке платформы ЛОГОС (РФЯЦ ВНИИЭФ): программные модули по различным направлениям
- Обучение, переобучение и консультирование пользователей

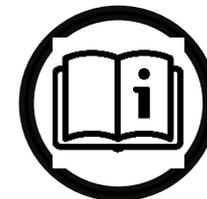
# Задел по созданию математических библиотек в Новосибирском Академгородке



**Математические библиотеки увеличивают эффективность применения суперкомпьютеров в математическом моделировании более чем на 50%\***

**Новосибирский Академгородок один из 2-х мировых центров по производству математических библиотек**

- Компетенция накапливается уже более 50 лет,
- От 20 до 50 человек постоянно работающих специалистов,
- Более 200 специалистов подготовлено и работает в крупнейших мировых компаниях и университетах,
- Известность и репутация на мировой арене



Разработка математической библиотеки уровня функционального блока ANSYS может быть осуществлена в срок 3-7 лет, с предоставлением первоначальных результатов уже к концу 2023 на базе кооперации между ИВМиМГ, НГУ и РФЯЦ ВНИИЭФ с использованием ресурсов Сибирского суперкомпьютерного центра СО РАН и СКЦ НГУ.



Разработка математической библиотеки является необходимым шагом для импортозамещения высокопроизводительного математического программного обеспечения западного производства, активно использующегося в CAD/CAE системах для ускорения вычислений: Intel MKL, NVIDIA Cu\* и прочих.

# HPC Community Cloud: платформа для создания предметно ориентированных сред управления расчетами на высокопроизводительных вычислительных системах (ВВС)

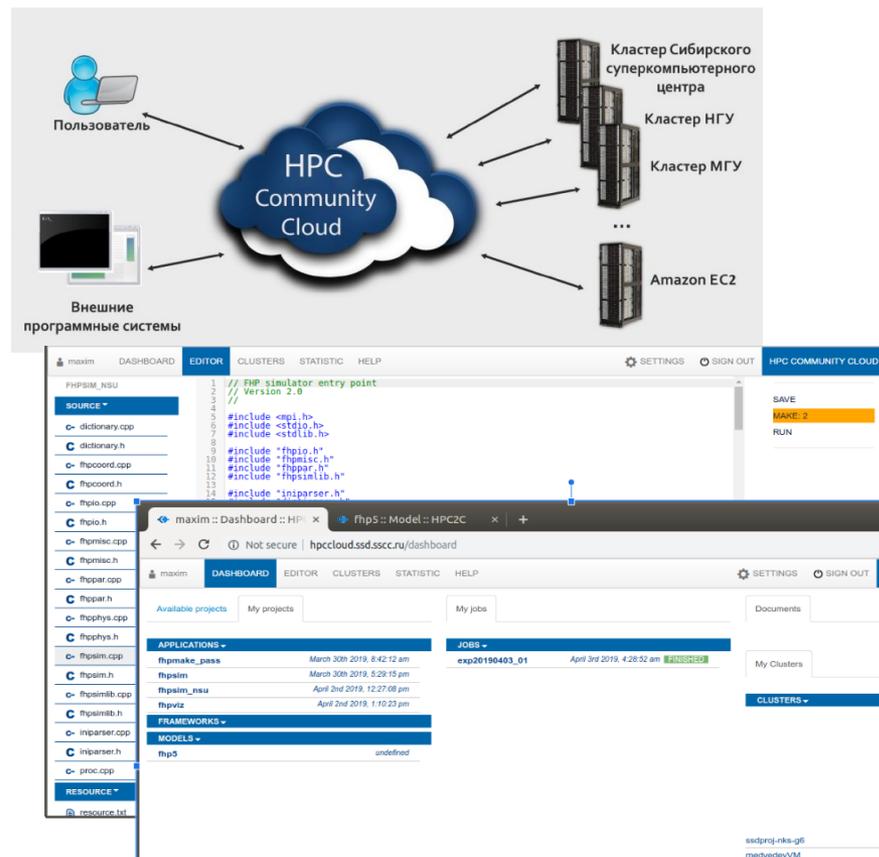
## Цель проекта:

- повышение эффективности труда пользователей ВВС,
- повышение эффективности использования ВВС

Принципы: устранение рутины, автоматизация накопления и переиспользования хороших решений, работа в терминах предметной области, высокоуровневый интерфейс, объединение ВВС за единым интерфейсом

## Платформа включает

- базовые интерфейсные средства:
  - унифицированный пользовательский веб-интерфейс для управления расчетными заданиями на различных высокопроизводительных вычислительных системах и их объединениях (см. проект **NumGrid** далее)
  - онлайн-среда разработки программ (IDE)
  - унифицированный программный интерфейс (API) для управления расчетными заданиями
- инструмент **Aka** для разработки предметно ориентированных сред управления расчетами на основе формализации знаний о вычислениях в форме вычислительных моделей



The diagram illustrates the HPC Community Cloud architecture. A central cloud labeled 'HPC Community Cloud' is connected to various components: 'Пользователь' (User) and 'Внешние программные системы' (External software systems) on the left; and 'Кластер Сибирского суперкомпьютерного центра' (Siberian supercomputer center cluster), 'Кластер НГУ' (Novosibirsk State University cluster), 'Кластер МГУ' (Moscow State University cluster), and 'Amazon EC2' on the right.

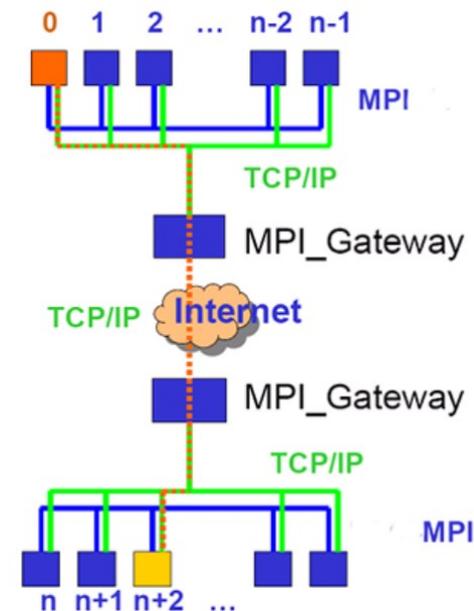
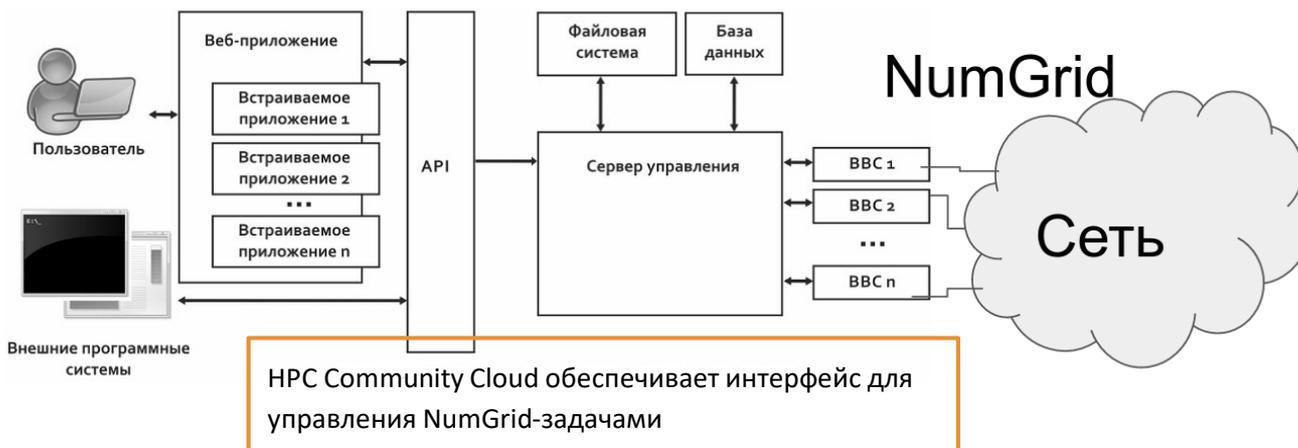
The screenshot shows the HPC Community Cloud web interface. The top navigation bar includes 'DASHBOARD', 'EDITOR', 'CLUSTERS', 'STATISTIC', and 'HELP'. The main content area displays a code editor with a C++ source file for 'fhp5\_simulator'. The code includes headers like 'fhp5.h', 'fhp5lib.h', and 'iniparser.h'. On the right side of the editor, there are buttons for 'SAVE', 'MAKE', and 'RUN'. Below the editor, there is a 'DASHBOARD' view showing a table of applications and jobs. The 'APPLICATIONS' table lists 'fhpmake\_pass', 'fhp5sim', 'fhp5sim\_nsu', and 'fhp5viz'. The 'JOBS' table shows a job 'exp20190403\_01' with a status of 'SUCCESS'. The bottom right corner of the dashboard displays 'ssdproj-nks-g6 medvedevVM'.

# HPC Community Cloud: NumGrid – инструмент для выполнения параллельных расчетов на объединении вычислительных кластеров

## Цели объединения:

- решение задач, которые из-за своего размера не могут быть решены на отдельных кластерах,
- повышение эффективности использования совокупности ресурсов за счет общего планирования задач,
- продление срока службы старых вычислительных комплексов за счет объединения с новыми,
- использование специализации кластеров в многокомпонентных задачах.

NumGrid обеспечивает общую коммуникационную среду для процессов MPI-программ, распределенных между вычислительными узлами объединенных кластеров, скрывая сложность устройства сети



# Язык и система LuNA автоматического конструирования распределённых параллельных программ численного моделирования (LuNA — Language for Numeric Algorithms)

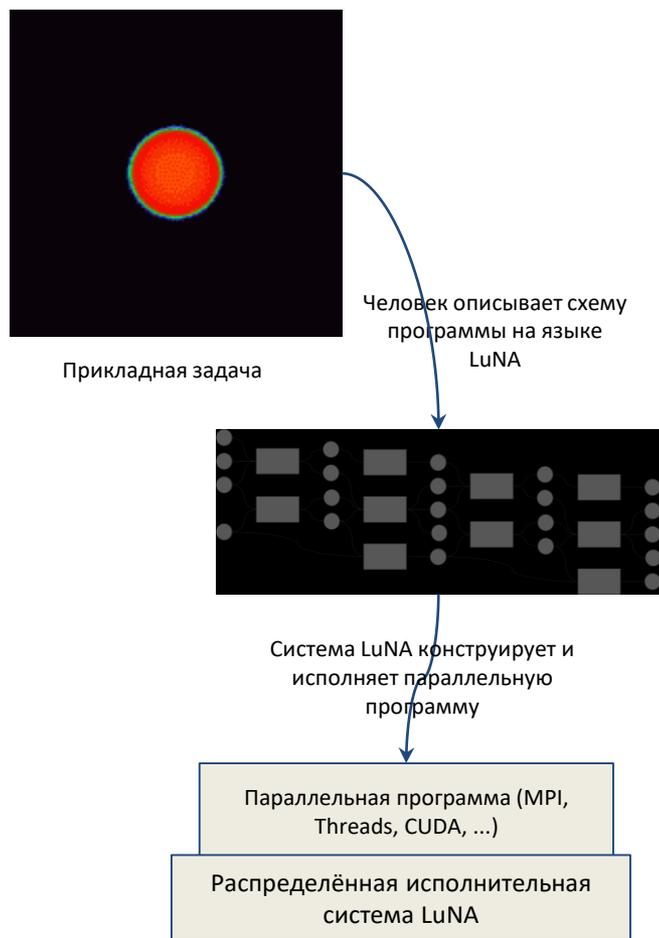
**Цель** разработки LuNA— обеспечить возможность создания качественных программ для неоднородных распределённых вычислителей специалистам в своих предметных областях — не «параллельным» программистам.

Для этого создан «язык LuNA» для сборки параллельных программ из последовательных частей, на основе которого параллельная программа конструируется и исполняется автоматически.

## Система LuNA (транслятор и исполнительная система):

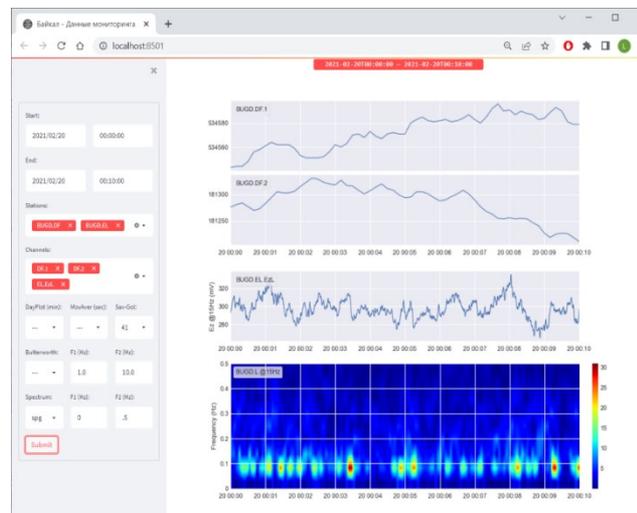
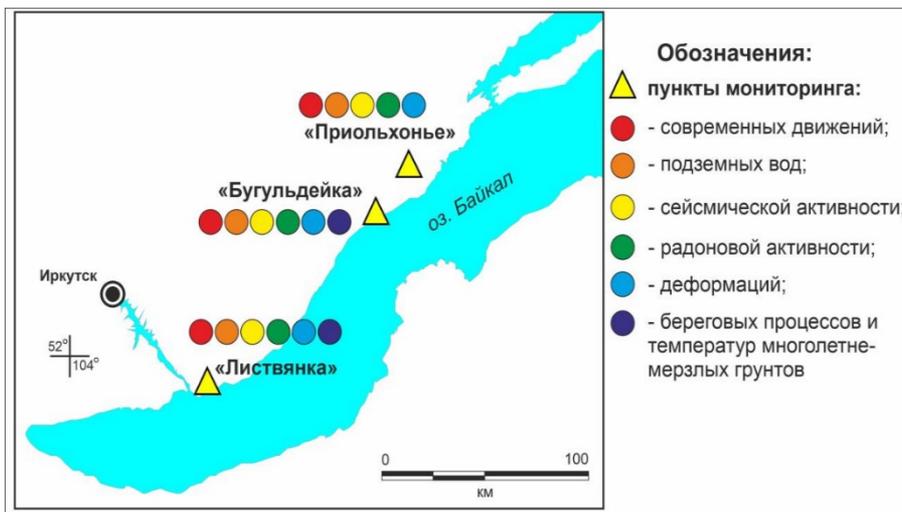
- Автоматизирует коммуникации, управление ресурсами, динамическую балансировку нагрузки, сборку мусора
- Даёт возможности ручного и автоматического управления исполнением
- Накапливает специализированные алгоритмы для качества в разных ПО
- Не требует отладки параллельного кода
- Рассчитана на поддержку GPU (если предоставлена соответствующая процедура для GPU)

Это снижает трудоёмкость и сложность разработки программ, снижает квалификационные требования к программисту, повышает доступность суперкомпьютеров для численного моделирования.



# Создание информационной системы комплексного геофизического мониторинга Байкала

- Крупный научный проект Минобрнауки России «**Фундаментальные основы, методы и технологии цифрового мониторинга и прогнозирования экологической обстановки Байкальской природной территории**», головная организация - ИДСТУ СО РАН
- Разрабатывается цифровая платформа геофизического мониторинга, обеспечивающая хранение, обработку, анализ больших массивов разнородных пространственно-временных данных комплексного геофизического мониторинга Байкальской природной территории



# IMDAF: Inverse Modeling & Data Assimilation Framework: Совместное использование моделей и данных наблюдений

Данные мониторинга различных типов



Алгоритмы усвоения  
данных и решения  
обратных задач (IMDAF)

Модели процессов переноса и  
трансформации примесей различной  
размерности и сложности

$$D_i \varphi_i - L \varphi_i + \rho (P_i(\varphi) \varphi_i - \Pi_i(\varphi) - f_{\varphi_i}) = 0$$

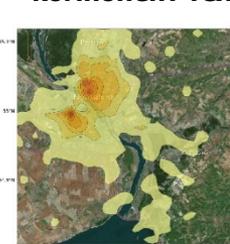
С учетом  
доступности  
вычислительных  
ресурсов



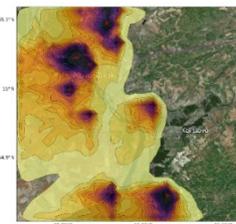
Усвоение данных (поточная обработка,  
компонент технологии цифровых двойников)



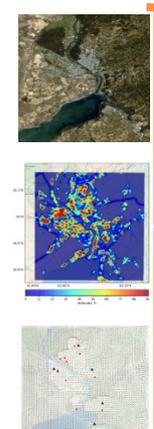
Идентификация  
источников  
(и других параметров)



Оценка чувствительности  
и анализ  
информативности данных



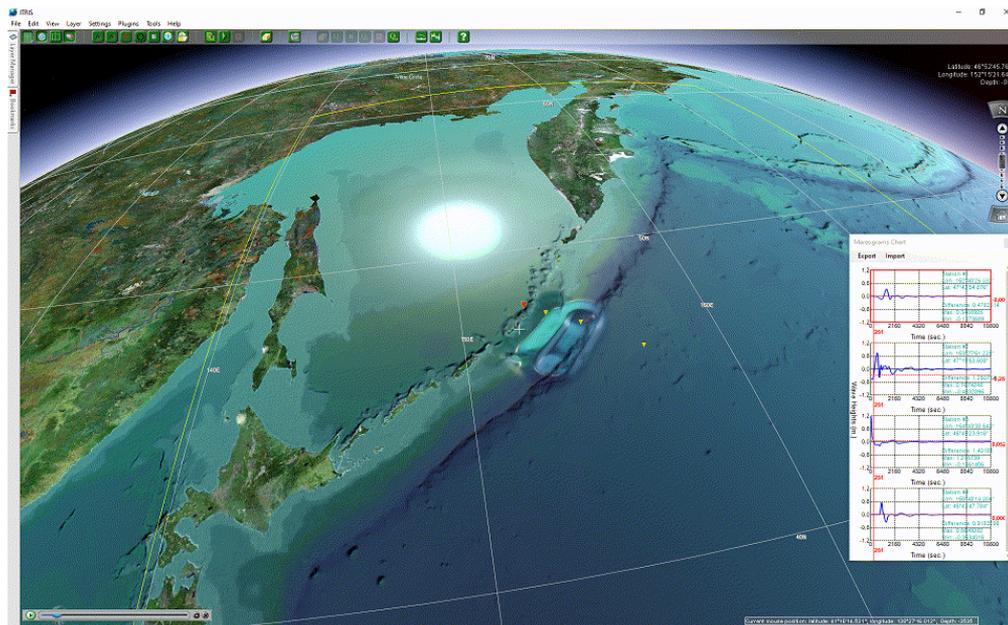
Расчет сценариев



Априорная  
информация

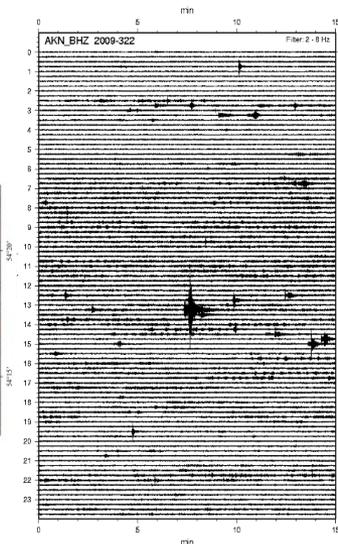
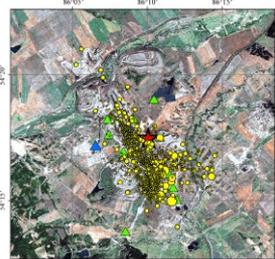
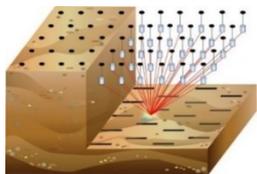
# Интегрированная система визуализации 3D-ГИС, работающая с реальными данными

- Комплексная система исследований и информации о цунами (ITRIS), разработанная ИВМиМГ СО РАН в целях снижения риска, связанного с природными и техногенными опасностями.
- Наша 3D-система ГИС-исследований и информации предназначена для моделирования реальных природных и техногенных опасностей, оценки их рисков и определения источника цунами путем решения обратной задачи.
- Эти цели достигаются путем совершенствования методов моделирования и оценки потерь в режиме реального времени, оценки масштабов будущих катастроф в сценарном режиме, расчета рисков, определения характера строительного фонда в городах, подверженных риску, и мониторинга на спутниковых снимках.
- Благодаря оптимизированным методам работы с системной и графической памятью устройств программный комплекс возможно использовать для визуализации результатов математического моделирования любых процессов на любых площадных пространствах.





# Лаборатория искусственного интеллекта и информационных технологий



## Задачи лаборатории:

- Создание и обоснование методов машинного обучения
- Решение с помощью технологий искусственного интеллекта актуальных задач фундаментальной науки и индустрии в области вычислительной химии, компьютерной биологии, геофизики и сейсмологии и др.
- Создание цифровых двойников научных и промышленных установок
- Проектирование и разработка платформ для сбора и хранения коллекций научных данных
- Создание методов информационной безопасности
- Создание стандарта доверенного взаимодействия цифровых систем, разработке технологий защиты систем ИИ от злонамеренных или случайных воздействий
- Разработка методов аналитической наукометрии

## Текущие проекты:

- Применение методов машинного обучения для анализа данных сейсмического мониторинга и выявления предвестников вулканических извержений
- Построение баз знаний в области геномики



# Базовые кафедры ИВМиМГ в университетах

Институт является базовым для шести кафедр:

- Новосибирского государственного университета
- Новосибирского государственного технического университета

## Новосибирский государственный университет



### Механико-математический факультет:

- Кафедра вычислительной математики
- Кафедра вычислительных систем
- Кафедра математических методов геофизики

### Факультет информационных технологий:

- Кафедра параллельных вычислений

## Новосибирский государственный технический университет

### Факультет прикладной математики и информатики:

- Кафедра параллельных вычислительных технологий

### Факультет автоматики и вычислительной техники:

- Кафедра сетевых информационных технологий



# Как мы в ИВМиМГ работаем со студентами

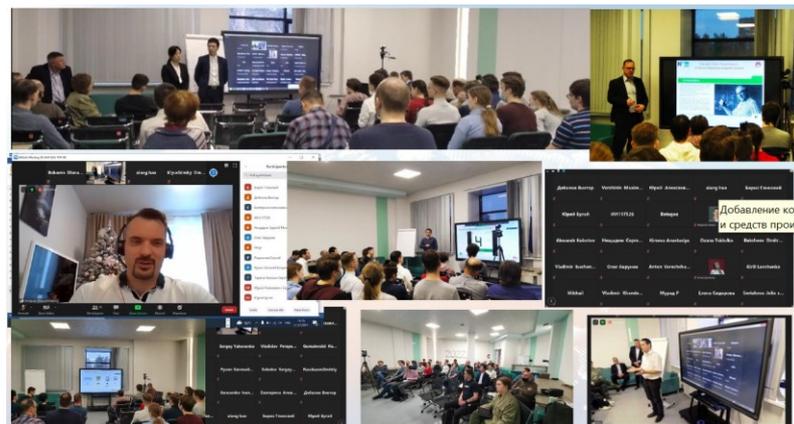


## Преподаем студентам:

- Теория численных методов для решения прикладных задач в области физики, химии, биологии, геологии, общественных и гуманитарных наук
- Параллельное программирование
- Архитектура вычислительных систем и сетей
- Методы искусственного интеллекта и теория нейросетей
- Методы оптимизации сетей
- Практическая работа на суперкомпьютерах различных производителей (Intel, Nvidia, Huawei)

## Вместе работаем:

- Выполнение грантов и проектов Минобрнауки и научных фондов
- Анализ и решение задач заказчиков с использованием суперкомпьютеров
- Формирование студенческих команд под управлением квалифицированных специалистов для решения задач заказчиков



# Потребности науки и промышленности России в суперкомпьютерах



К 2025-2030 годам суперкомпьютеры должны обладать следующей мощностью для решения задач:

- аэродинамического дизайна и оптимизации – 1 Эксафлопс;
- вычислительной космологии – 10 Эксафлопс;
- моделирования турбулентных процессов в физике – 30 Эксафлопс;
- предсказания погоды с высоким уровнем точности – 100 Эксафлопс;
- вычислительной химии – 1 Эксафлопс;
- моделирования работы мозга человека – 1 Эксафлопс.

## Задачи фундаментальной науки:

- определение очага цунами;
- моделирование тепловых процессов в литосфере Земли;
- моделирование импактных событий;
- моделирование взрывов сверхновых звезд;
- задачи взаимодействия солнечного ветра с магнитосферой Земли;
- моделирование МГД турбулентности и ламинарно-турбулентного перехода;
- изучение динамики многокомпонентной температурной плазмы; динамика пучков заряженных частиц в ускорителях;
- эволюция и взаимодействие галактик;
- динамика релятивистских струй;
- задачи образования и извержения вулканов;
- задачи движения заряженных частиц в тороидальной плазме;
- динамика пузырьковых сред;
- моделирование деформируемых сред;
- задачи горения и детонации;
- задачи квантовой химии;
- задачи дискретной математики.

## **Задачи развития сибирского и арктического регионов:**

- космический мониторинг ледяного покрова Арктики;
- задача циркуляции Арктика – Северная Атлантика;
- аэрозольные выпадения примесей;
- ГИС цифровая планета и ГИС цифровая Арктика;
- электромагнитные исследования Арктики;
- влияние солнечного ветра на арктические территории;
- оценка пресной воды в Северном Ледовитом океане;
- задачи сейсмической опасности;
- предсказательное моделирование аномальных температурных зон;
- анализ загрязнения снежного покрова;
- анализ сейсмических процессов в флюидонасыщенной среде.

## **Моделирование погоды, климата и охрана окружающей среды:**

- анализ химического состава атмосферы;
- определение очага цунами;
- перенос солнечного излучения;
- анализ изменения климата;
- оценка риска загрязнения окружающей среды от агрегированных источников.

## **Задачи атомной и термоядерной энергетики:**

- анализ кавернозных полостей подземных ядерных взрывов;
- определение источника и границ подземного ядерного взрыва;
- исследование сейсмостойкости заглубленных сооружений АЭС;
- оценка радиационной безопасности объектов ядерного наследия.

## **Моделирование разведки, добычи и транспортировки углеводородов:**

- сейсморазведка природных ископаемых;
- фильтрационное горение газов;
- моделирование процессов вытеснения нефти в скважину;
- задачи каротажного зондирования;
- импозийное и химическое воздействие на пористую среду нефтяного пласта.

## **Нано- и биотехнологии:**

- молекулярно-генетическое взаимодействия;
- моделирование акустического томографа;
- прямые и обратные задачи фармакокинетики и эпидемиологии;
- ударное сжатие нанокристаллов;
- моделирование работы мозговой деятельности.

## **Моделирование авиакосмической техники:**

- анализ движения стабилизированной по крену ракеты;
- анализ состояния теплоизолированной обшивки летательного аппарата;
- анализ аэродинамических и акустических характеристик винтов вертолета;
- анализ аэродинамических свойств крыльев самолета;
- задачи обледенения крыла;
- моделирование топливных систем самолета;
- задача спуска космического аппарата в океан;
- теплокомфорт человека в летательных аппаратах.

## **Задачи автомобильной и судостроительной промышленности:**

- моделирование электро-магнитных полей в различных устройствах;
- моделирование прочностных нагрузок на конструкции автомобилей и судов.

## **Задачи информационной безопасности:**

- анализ веб-страниц для выявления скрытой террористической угрозы; анализ видео изображений для отслеживания лиц, связанных с осуществлением террористической деятельности;
- анализ изображений и звуковых данных со скрытыми сообщениями; дистанционное зондирование Земли;
- система комплексной безопасности для защиты критически важных объектов Арктики от природных, техногенных и террористических угроз; анализ влияния атак на беспроводные сети передачи данных;
- оценка катастрофических природных процессов.

## **Аналитические центры для региональных органов управления:**

- моделирование социально-экономических процессов в сибирском и арктических регионах;
- анализ кинетики ансамбля автомобилей; оценка торговых стратегий;
- функционирование городской операционной системы.



**Приглашаем к сотрудничеству!**

**Контакты:**

<https://icmmg.nsc.ru/>

[director@sscc.ru](mailto:director@sscc.ru)

+ 7 (383) 330 83 53