

*Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова
Факультет Вычислительной математики и кибернетики*

СУПЕРКОМПЬЮТЕРЫ И ПАРАЛЛЕЛЬНАЯ ОБРАБОТКА ДАННЫХ

(часть 2)

Вл.В.Воеводин

*Зав.кафедрой Суперкомпьютеров и квантовой информатики ВМК МГУ,
Директор НИВЦ МГУ,
Директор Филиала МГУ в г.Сарове,
чл.-корр. РАН, д.ф.-м.н., профессор*

voevodin@parallel.ru

ВМК МГУ, 2024

Суперкомпьютеры... Зачем?

Неужели есть настолько **сложные задачи**, что для их решения хорошего сервера не хватает ?

Неужели есть настолько **важные задачи**, которые оправдывают крайне высокую стоимость суперкомпьютеров ?



А далеко ли вычислительно сложные задачи?

Задача о числе счастливых билетиков :

```
count = 0;
for ( i1 = 0; i1 < 10; i1++)
  for ( i2 = 0; i2 < 10; i2++)
    for ( i3 = 0; i3 < 10; i3++)
      for ( i4 = 0; i4 < 10; i4++)
        for ( i5 = 0; i5 < 10; i5++)
          for ( i6 = 0; i6 < 10; i6++)
            if ( i1+i2+i3+i4+i5+i6 < 10 )
              count++;
```

6 цифр → n цифр

Intel Core Duo 2.6 ГГц:

8 цифр – 0.1 с

10 цифр – 10 с

12 цифр – 1780 с



А далеко ли вычислительно сложные задачи?

Задача о числе счастливых билетиков :

- Поможет ли оптимизация программы?
- Поможет ли использование суперкомпьютера?

```
count = 0;
for ( i1 = 0; i1 < 10; ++i1)
    for ( i2 = 0; i2 < 10; ++i2)
        for ( i3 = 0; i3 < 10; ++i3)
            for ( i4 = 0; i4 < 10; ++i4)
                for ( i5 = 0; i5 < 10; ++i5)
                    for ( i6 = 0; i6 < 10; ++i6) {
                        if( i1+i2+i3 == i4+i5+i6 )
                            count = count+1;
                    }
}
```

6 цифр → n цифр

Intel Core Duo 2.6 ГГц:

8 цифр – 0.1 с

10 цифр – 10 с

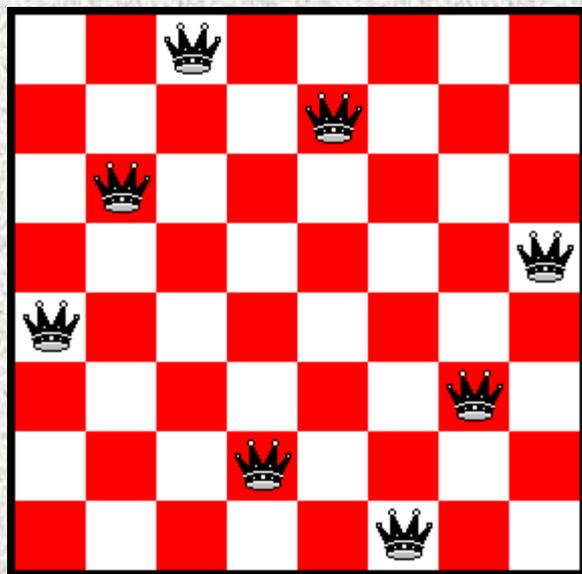
12 цифр – 1780 с



Вычислительная сложность – ~~10ⁿ~~ операций !

А далеко ли вычислительно сложные задачи?

*Как разместить 8 ферзей
на шахматной доске размером 8*8 ?*

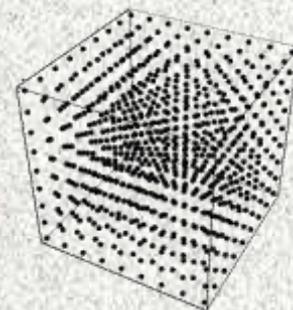


*Как разместить N ферзей
на шахматной доске размером $K*K$?*

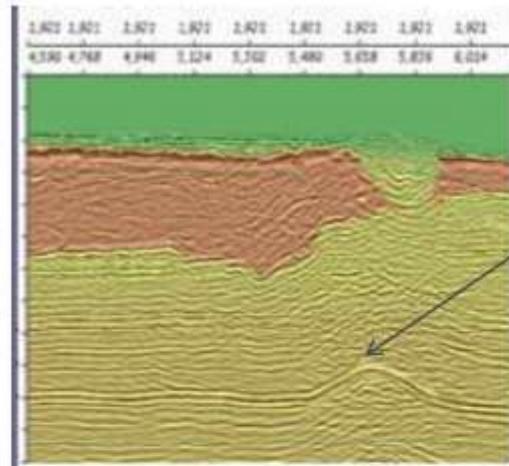
Сверхвысокая производительность - зачем?

Моделирование нефтяных резервуаров:

- нефтеносная область – $100*100*100$ точек
- в каждой точке вычисляется от 5 до 20 функций (скорость, давление, концентрация, температура, ...)
- 200-1000 операций для вычисления каждой функции в каждой точке
- 100-1000 шагов по времени
- Итого: 10^6 (точек сетки) * 10 (функций) *
* 500 (операций) * 500 (шагов) =
= 2500 млрд. операций



Суперкомпьютеры для добычи нефти и газа (Во ВСЕХ добывающих компаниях!)



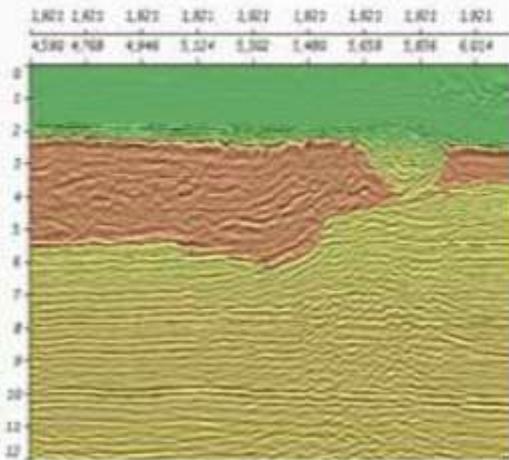
Seismic profiles of a region of the Gulf of Mexico.

The top image, in 2003 , on **64 processors**,
At the bottom right-hand side , a structure shaped like a bowler hat,
typical of a petroleum zone.

Based on this image, ready to install boring equipment on this site.

Fresh data analysis, on a **13 000 cores** supercomputer revealed
that the structure was an artefact.

Thanks to HPC, 80 M\$ saved

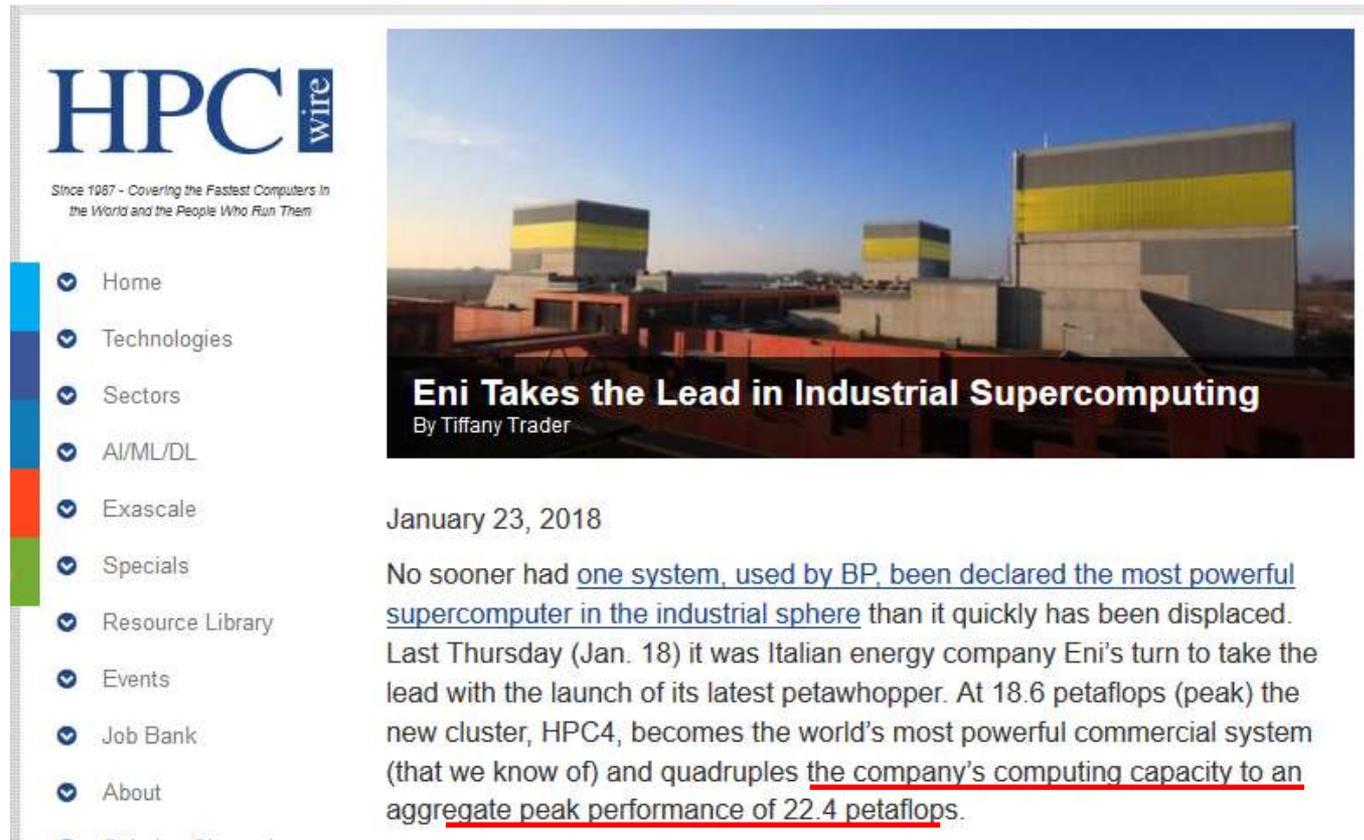


In the **mid-90's**, **only 40%** of deposits fulfilled their promises.
Numerical simulations that analyse data obtained by seismic
echography have radically changed the playing field. Armed with
the new supercomputer ... , the Total engineers are **now** hitting
the bull's eye **in 60-70% of cases.**"

Journal La Recherche, special HPC, July 2009,

Acknowledgements: H. Calandra, Ph. Ricoux (TOTAL)

Суперкомпьютеры для добычи нефти и газа (Во ВСЕХ добывающих компаниях!)



HPCwire
Since 1987 - Covering the Fastest Computers in the World and the People Who Run Them

- Home
- Technologies
- Sectors
- AI/ML/DL
- Exascale
- Specials
- Resource Library
- Events
- Job Bank
- About

Eni Takes the Lead in Industrial Supercomputing

By Tiffany Trader

January 23, 2018

No sooner had one system, used by BP, been declared the most powerful supercomputer in the industrial sphere than it quickly has been displaced. Last Thursday (Jan. 18) it was Italian energy company Eni's turn to take the lead with the launch of its latest petawhopper. At 18.6 petaflops (peak) the new cluster, HPC4, becomes the world's most powerful commercial system (that we know of) and quadruples the company's computing capacity to an aggregate peak performance of 22.4 petaflops.

#13 в Top500 (июнь 2018)	#6(!) в Top500 (июнь 2020)	#9 в Top500 (июнь 2021)	#12 в Top500 (июнь 2022)
18.6 Pflops			51.7 Pflops

Автомобилестроение

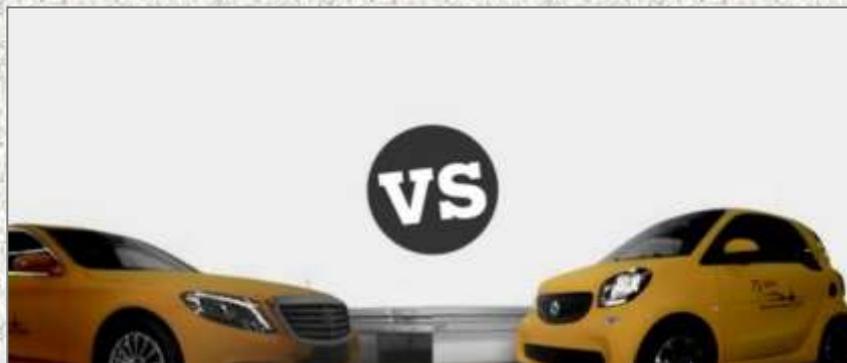
(BMW, Audi, Ford, Chevrolet, Renault,... – BCE!)



Автомобилестроение

(BMW, Audi, Ford, Chevrolet, Renault,... – BCE!)

Mercedes
E-class

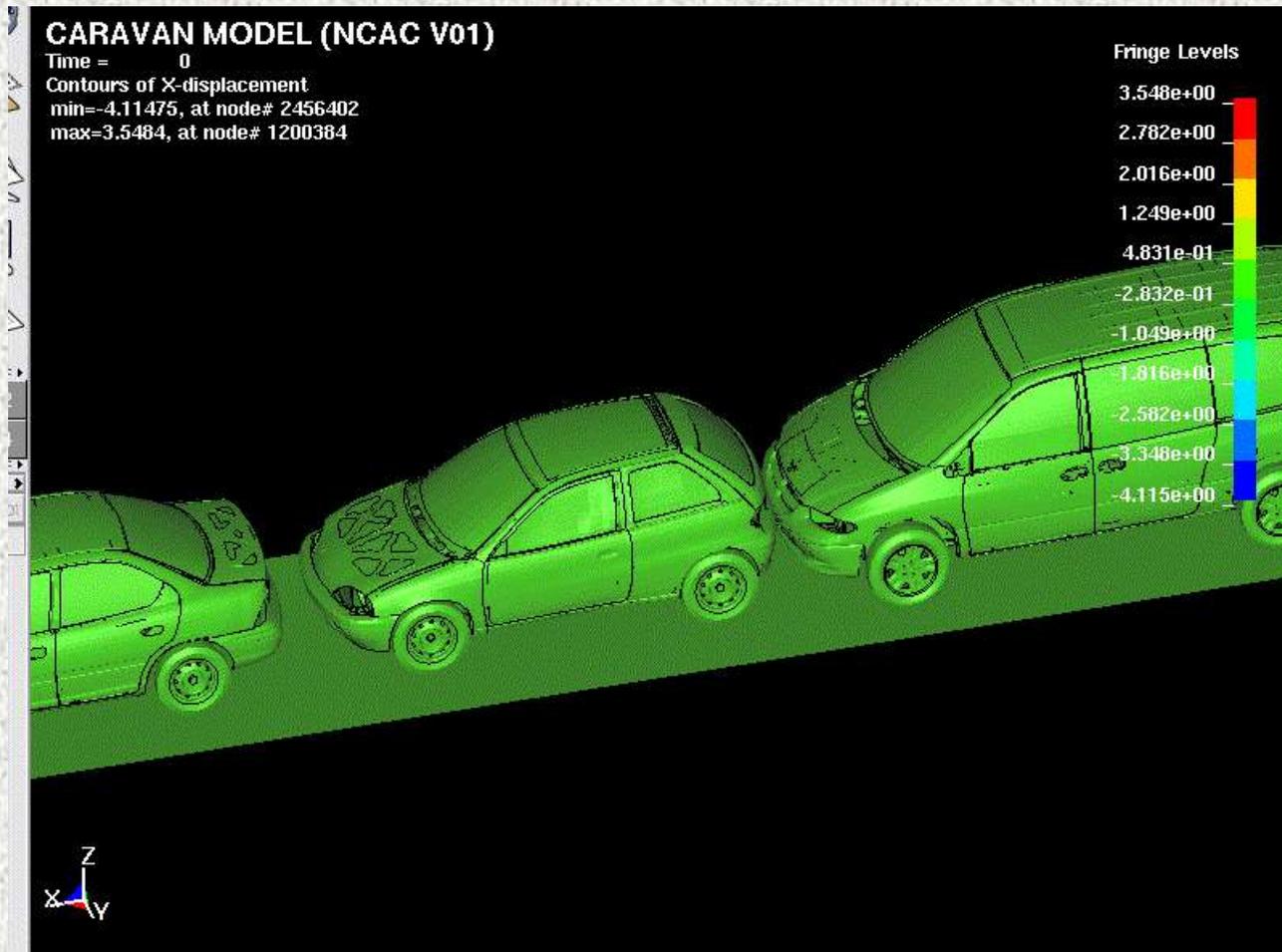


Smart

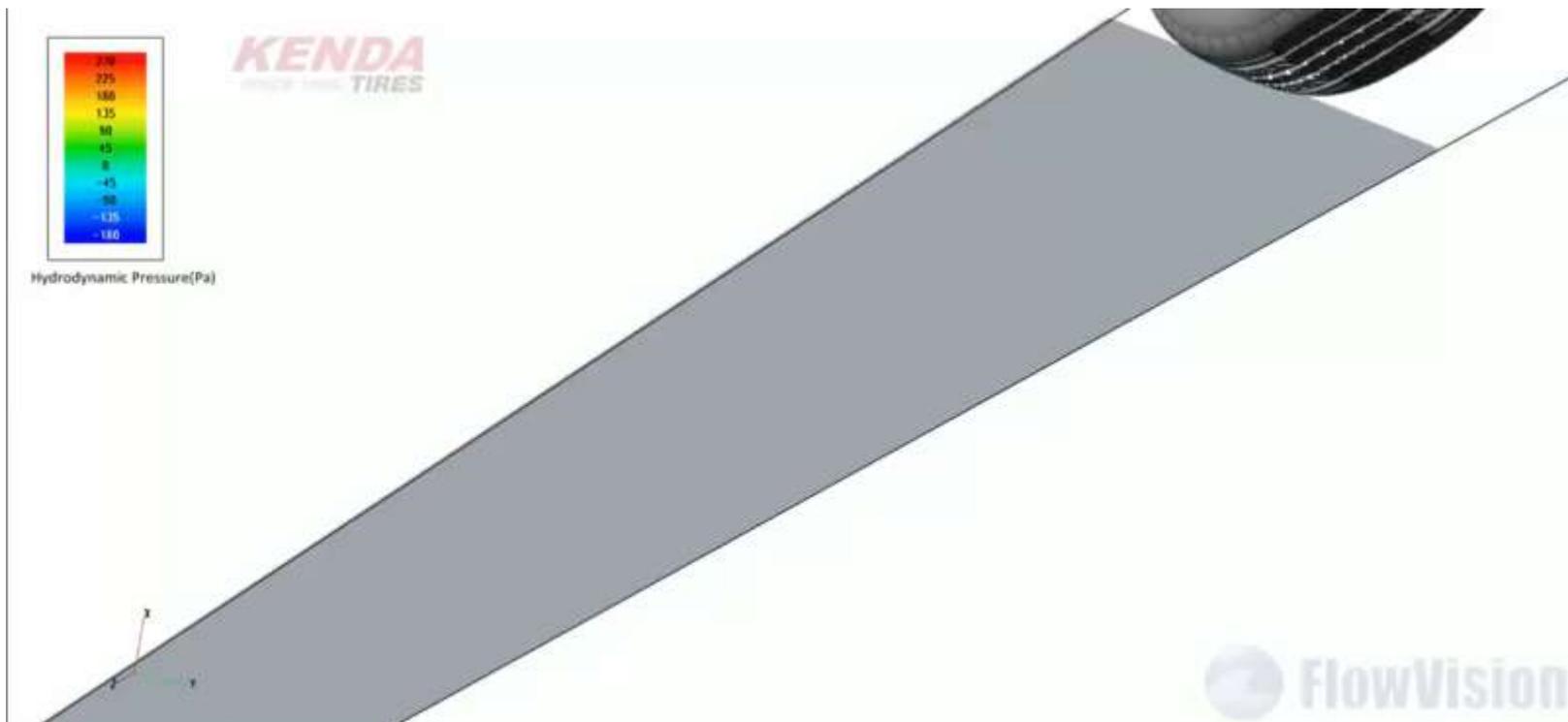


Автомобилестроение

(BMW, Audi, Ford, Chevrolet, Renault,... – BCE!)



Автомобилестроение: анализ возникновения аквапланирования

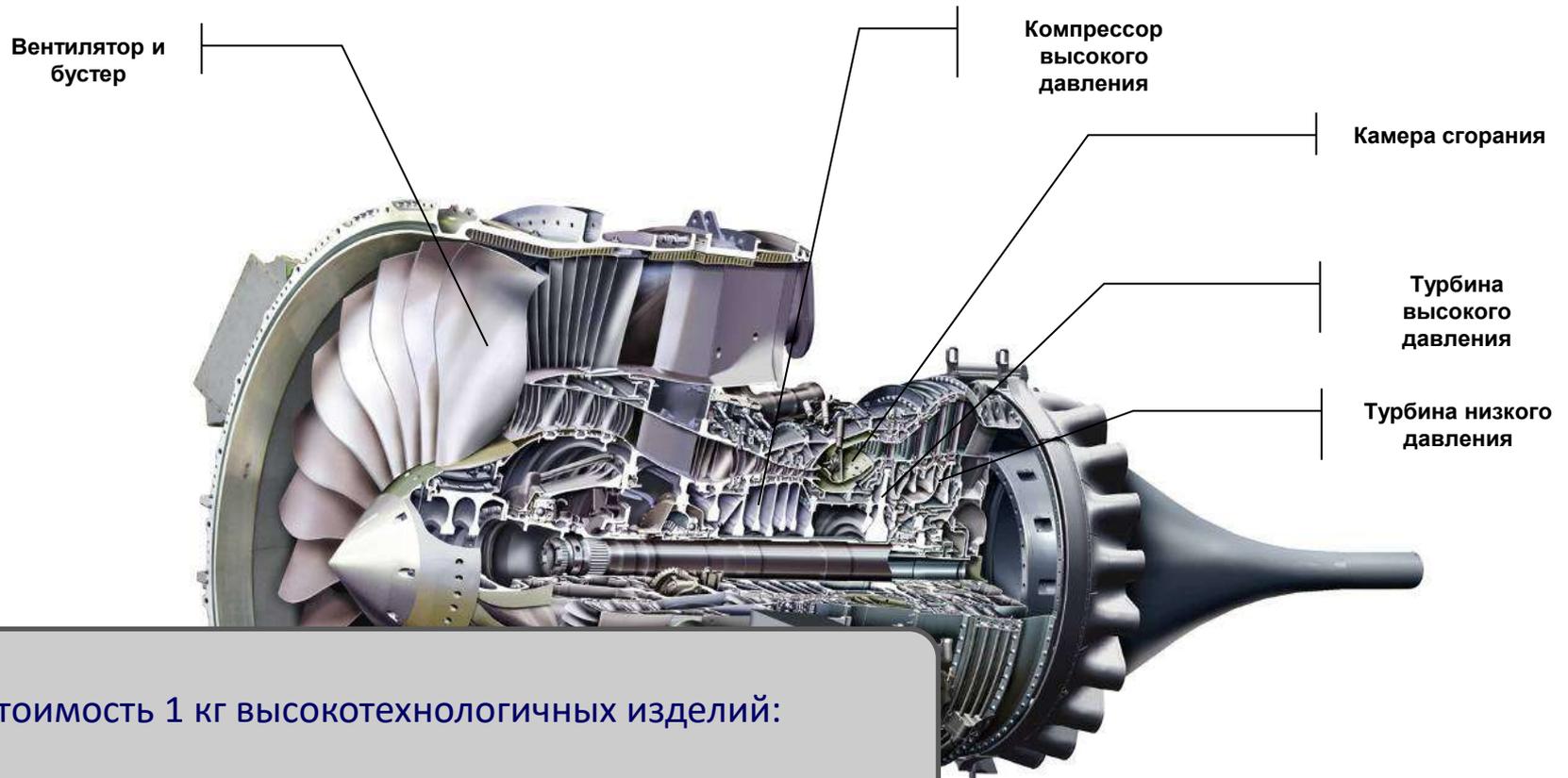


НПО "САТУРН"

(авиационные двигатели и газовые турбины)



Основные узлы ГТД



Стоимость 1 кг высокотехнологичных изделий:

Автомобиль: \$25

Истребитель пятого поколения: \$1000

Двигатель истребителя пятого поколения: \$5000

Суперкомпьютер: \$400-500

Объем расчетов

Стационарные режимы

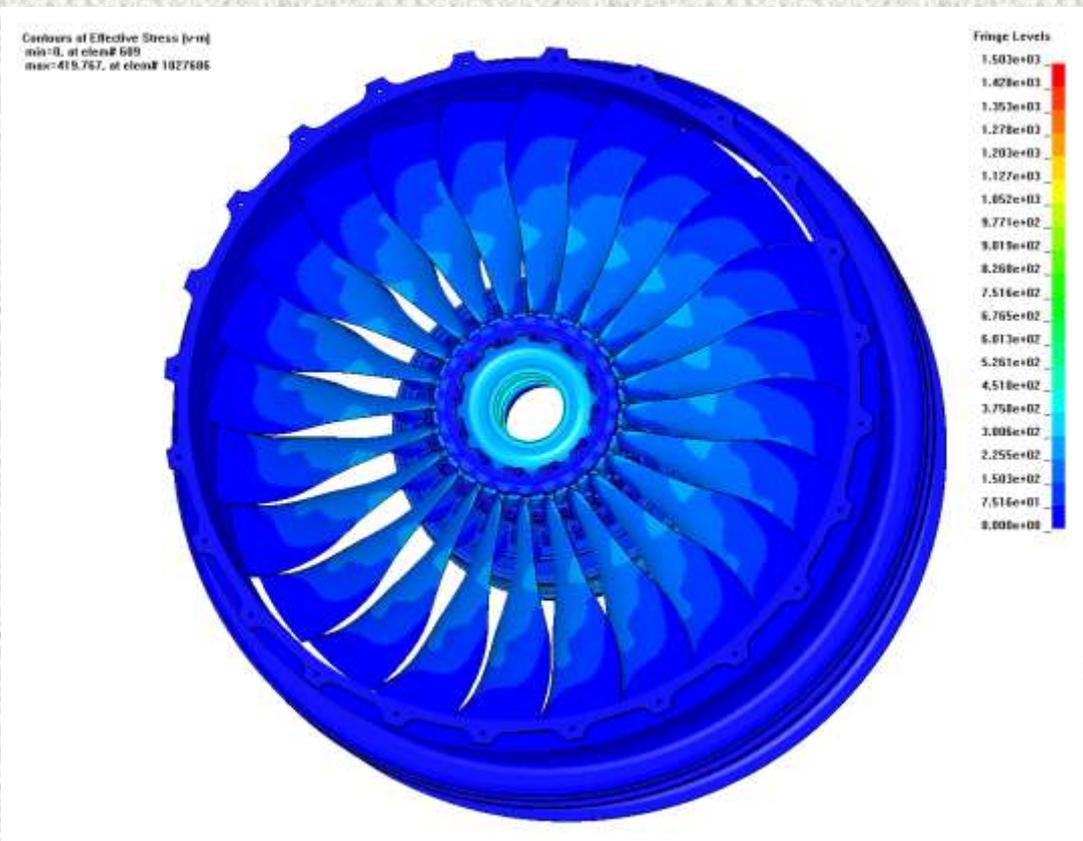
Узел	Размер задачи (млн. ячеек)	Кол-во операций с плавающей точкой для расчета узла
Вентилятор	10	$2,5 * 10^{16}$
Компрессор низкого давления	8	$1,5 * 10^{16}$
Компрессор высокого давления	10	$4,5 * 10^{16}$
Камера сгорания	20	$2,4 * 10^{17}$
Турбина высокого давления	8	$1,1 * 10^{17}$
Турбина низкого давления	8	$1,1 * 10^{16}$

10^{12} – Тера, 10^{15} – Пета, 10^{18} - Экса

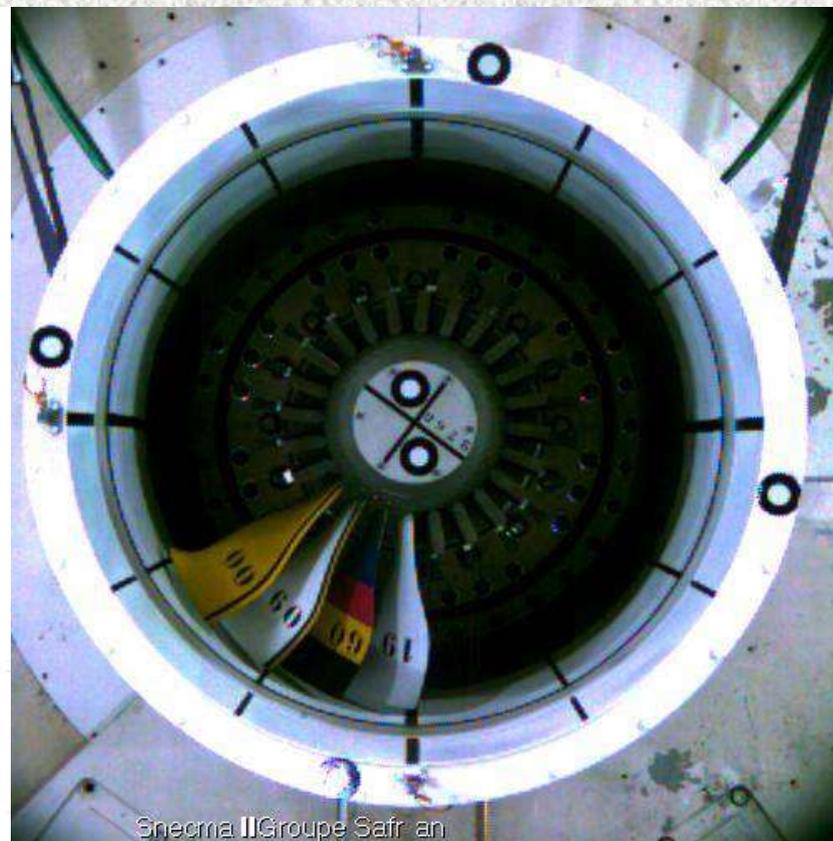
Для нестационарных режимов объем расчетов увеличивается в ~ 10 раз.

НПО "САТУРН"

(авиационные двигатели и газовые турбины)



Расчет



Эксперимент

BENCHMARKS AUTRES INDUSTRIES



Wing prototypes: 77

Boeing From 767 to 787

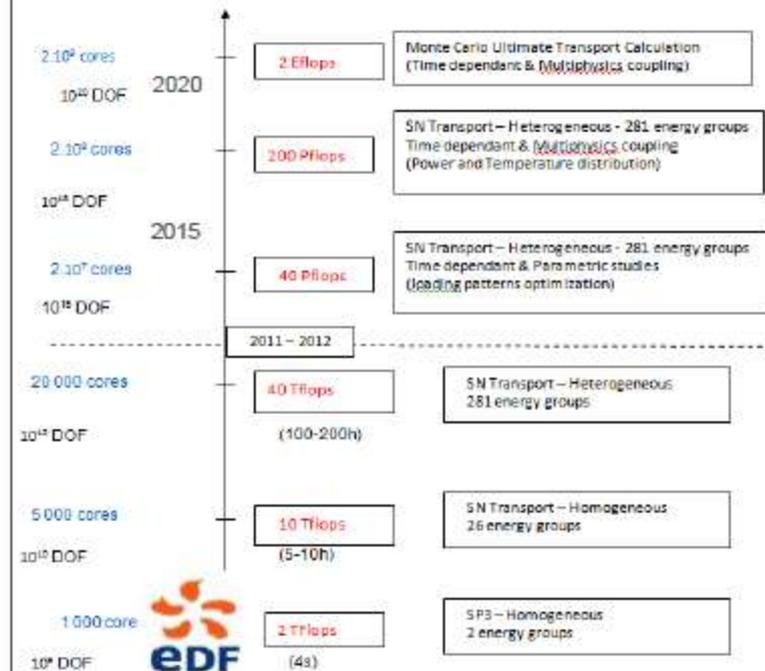
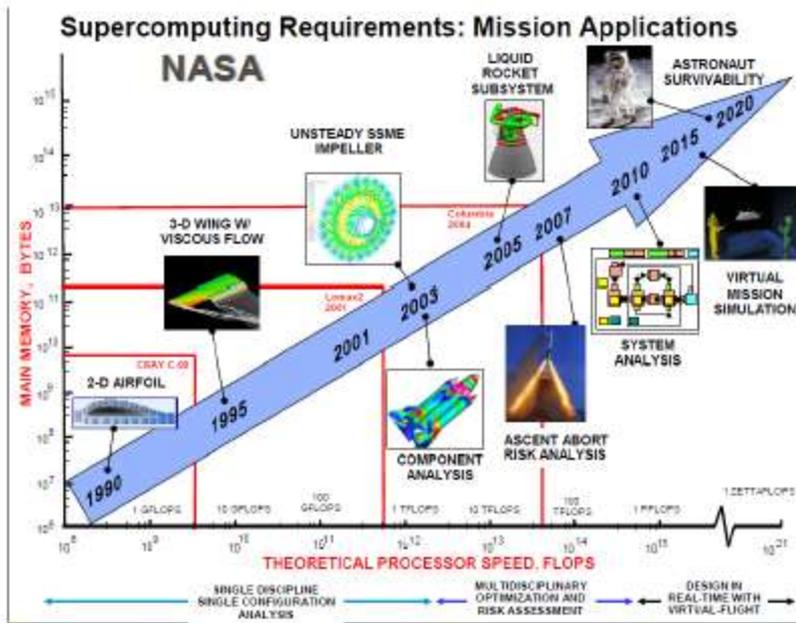
- 40% less wind-tunnel days
- 25% saving in aerodynamics development time
- 20% saving on wind-tunnel tests cost

Thanks to HPC-enabled CFD runs, especially in high-speed regime, even providing better representation of aerodynamics phenomenon turned into better design choices.

But ... Digital Aircraft will require at least 1 ZetaFlop !



Wing prototypes: 11 (2008)
→ 5 by new methods and HPC (2015)



Задачи аэродинамики и аэроакустики

Моделирование простых элементов летательного аппарата: крыло без механизации, отдельной области механизации или шасси, несущего винта вертолета, отсека вооружения и т.д.:

Сетка: около 50 млн.ячеек,

Трудоемкость на ячейку: 10-30 тыс.операций,

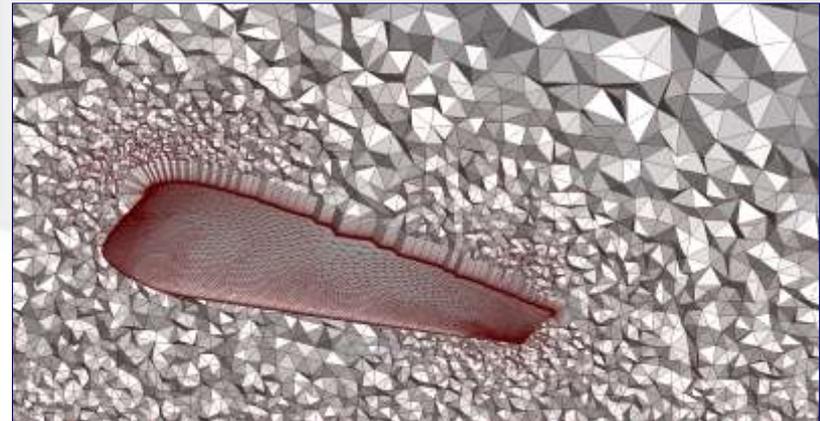
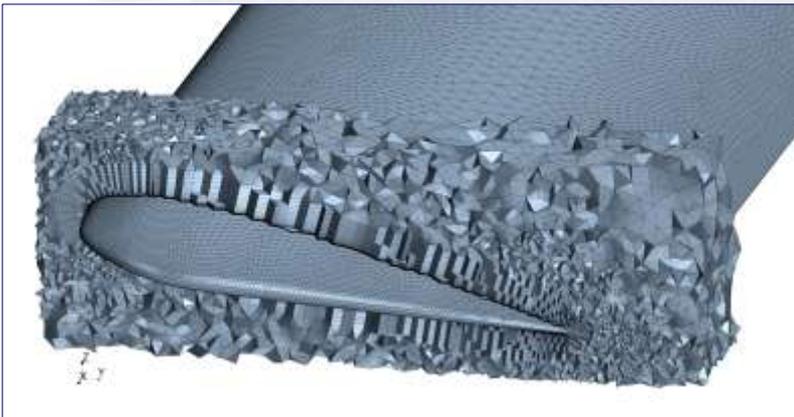
Шагов по времени: около 250 тыс.,

Итого: $50 \cdot 10^6 \cdot 20 \cdot 10^3 \cdot 250 \cdot 10^3 = 2.5 \cdot 10^{16}$ операций.

Несколько режимов: разные углы атаки, разная скорость потока, итого – 10^{17} операций.

Расчет сложных конфигураций: крыло с механизацией, крыло с двигателем, несущий винт с учетом фюзеляжа вертолета и т.д.:

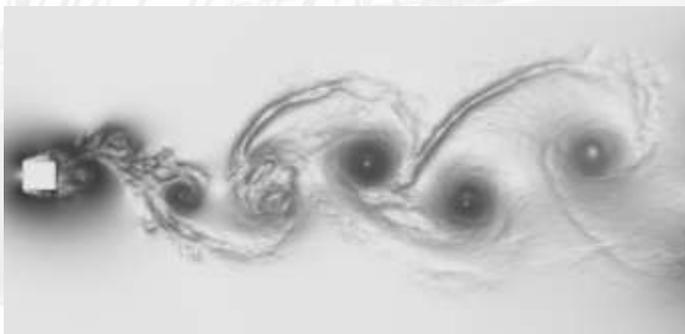
Минимальная сетка порядка 100-200 млн.ячеек, итого – 10^{18} операций.



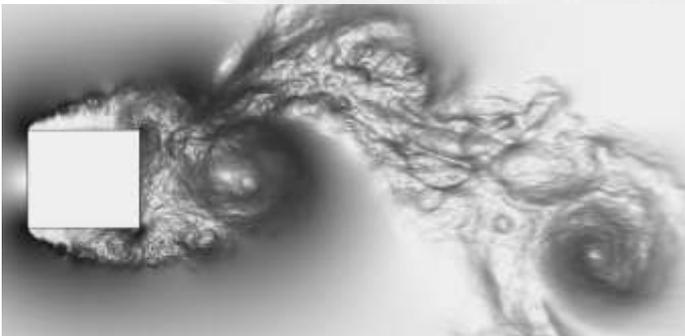
Моделирование течения вокруг лопасти несущего винта вертолета

Расчет турбулентных течений методом прямого численного моделирования (DNS)

Течение вокруг бесконечного цилиндра квадратного сечения
Сетка 300 млн. ячеек, схема 4-го порядка
0.7 млн. шагов по времени
Стоимость расчета: около 10^{18} операций.



Турбулентный след за цилиндром (дорожка Кармана)



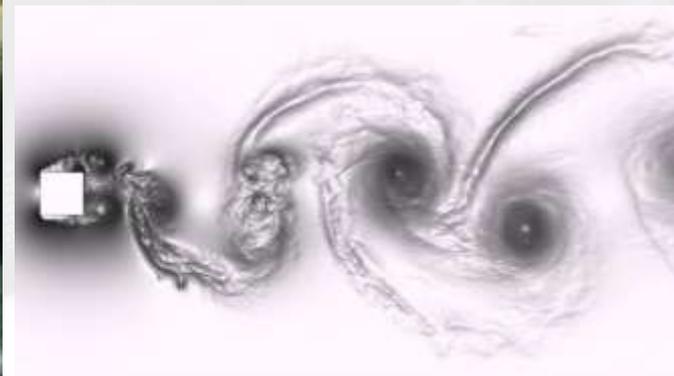
Увеличение в области препятствия. Развитие неустойчивости Кельвина–Гельмгольца (тонкие вихревые дорожки от передних углов цилиндра)



Вихревая дорожка за вулканом в атмосфере



Ламинарное (на переднем плане) и турбулентное течение вокруг подлодки

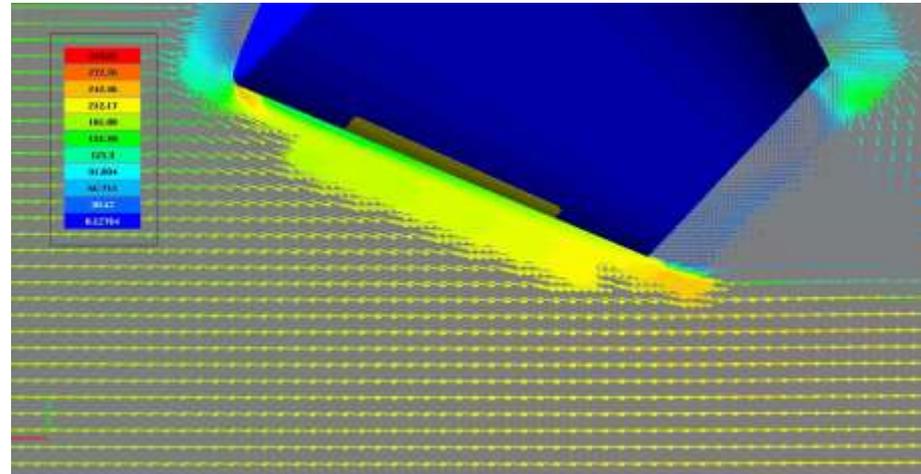
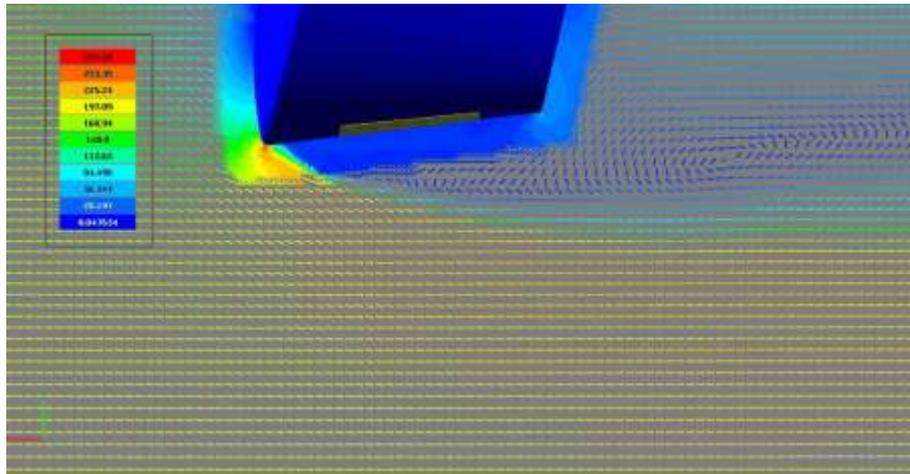


Использование суперкомпьютера “Ломоносов” в проектировании космической техники

Задача: найти минимальный импульс отстрела крышки парашютного отсека пиропатронами, при котором крышка не ударит по корпусу корабля при отстреле.



**Эта задача не может быть отработана экспериментально.
Только численное моделирование!**

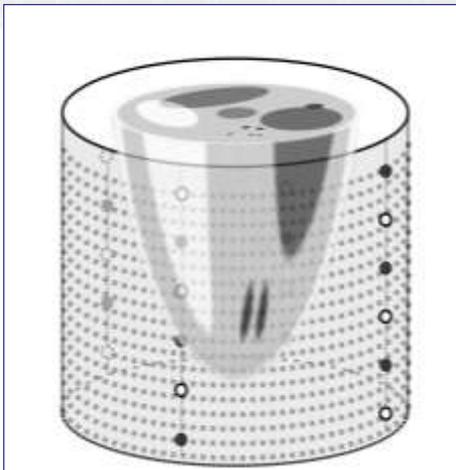


3D ультразвуковая томография в медицине

Одно из основных приложений — диагностика онкологических заболеваний на ранних стадиях.

- Сетка: $500*500*500$ точек.
- Количество источников ультразвука: около 100.
- Количество положений приёмников: около 10000.
- Обратная задача восстановления внутренней структуры 3D объекта является нелинейной и решается с помощью итерационного процесса. Количество итераций — около 100.
- В каждой точке сетки необходимо выполнить порядка 100 операций.
- Количество шагов по времени — 1000.

Итого: $2.5*10^8$ точек сетки * 10^2 операций * 10^3 шагов * 10^2 источников * 10^2 итераций = **$2.5*10^{17}$ операций.**



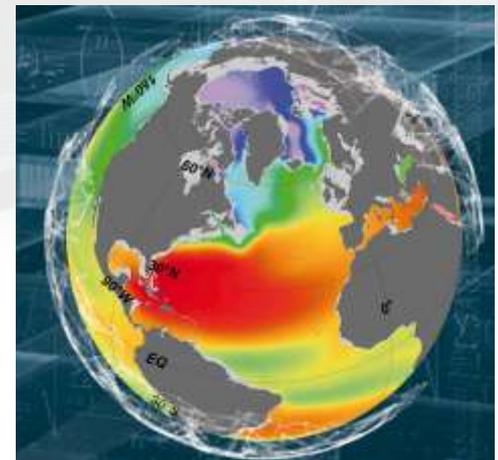
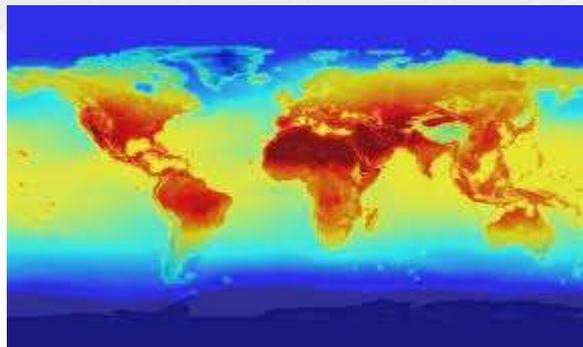
Современные модели климата

Воспроизведение субмезомасштабных вихрей в океане: вихри с размерами от нескольких сотен метров до нескольких километров.

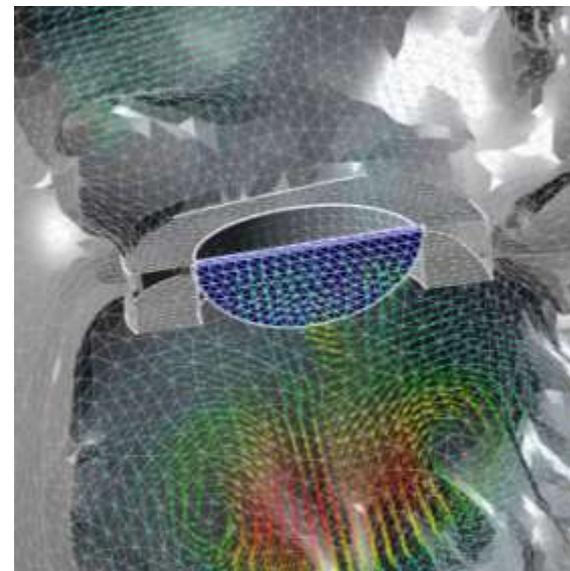
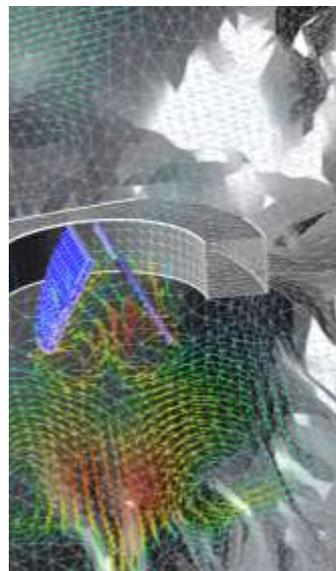
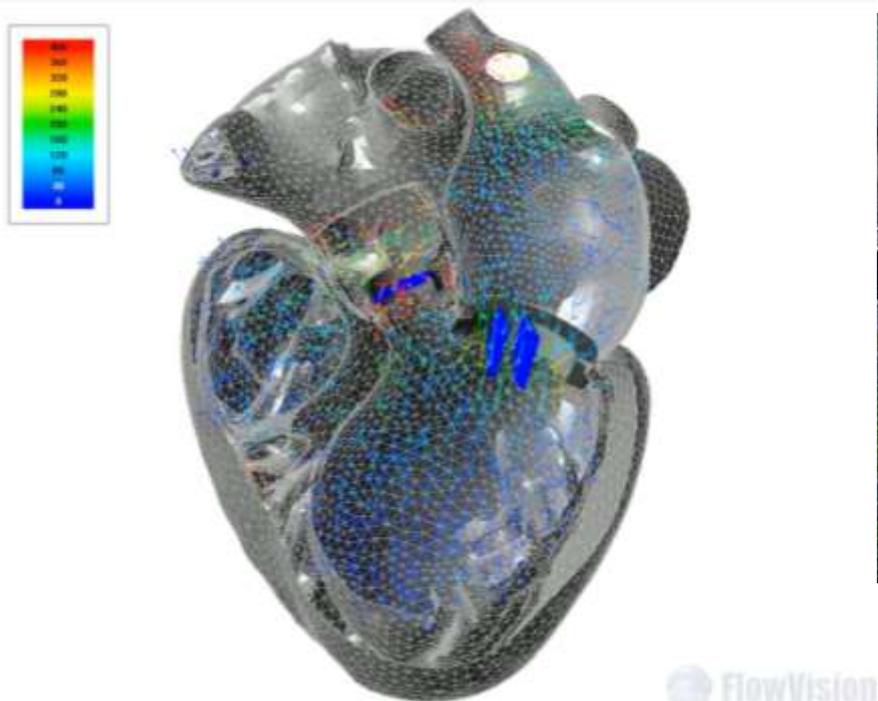
- Сетка: $2000 \times 1000 \times 50$ точек.
- Несколько десятков прогностических переменных (три компоненты скорости, температура, соленость в океане, переменные описывающие взаимодействие химических веществ...).
- Порядка 100 операций на каждую переменную.
- Для расчета одного года — 10^5 шагов по времени.
- Климатические расчеты выполняются на сотни лет.

Итого: 10^8 точек сетки * 10 переменных * 10^2 операций * 10^5 шагов * 10^2 лет расчета = 10^{18} операций.

- Близкие оценки для моделей атмосферной циркуляции.



Расчет работы сердца с искусственным клапаном



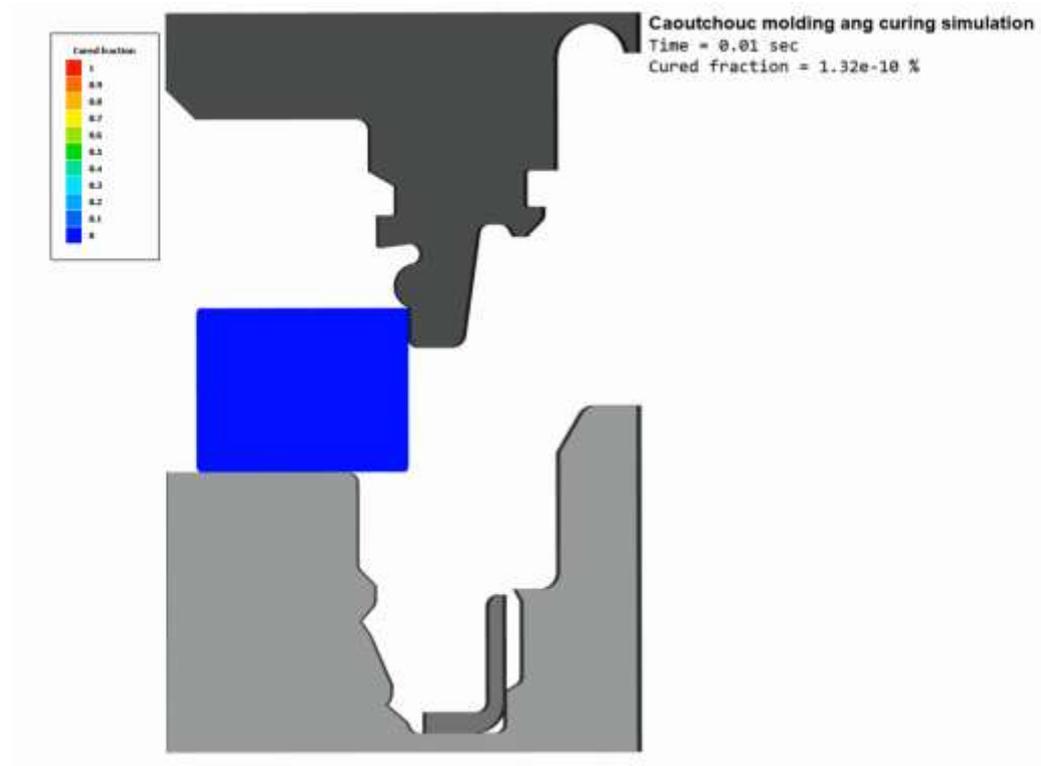
Можно проверить работу
искусственного клапана на
виртуальном сердце

Образование вулканизированной резины в процессе формования

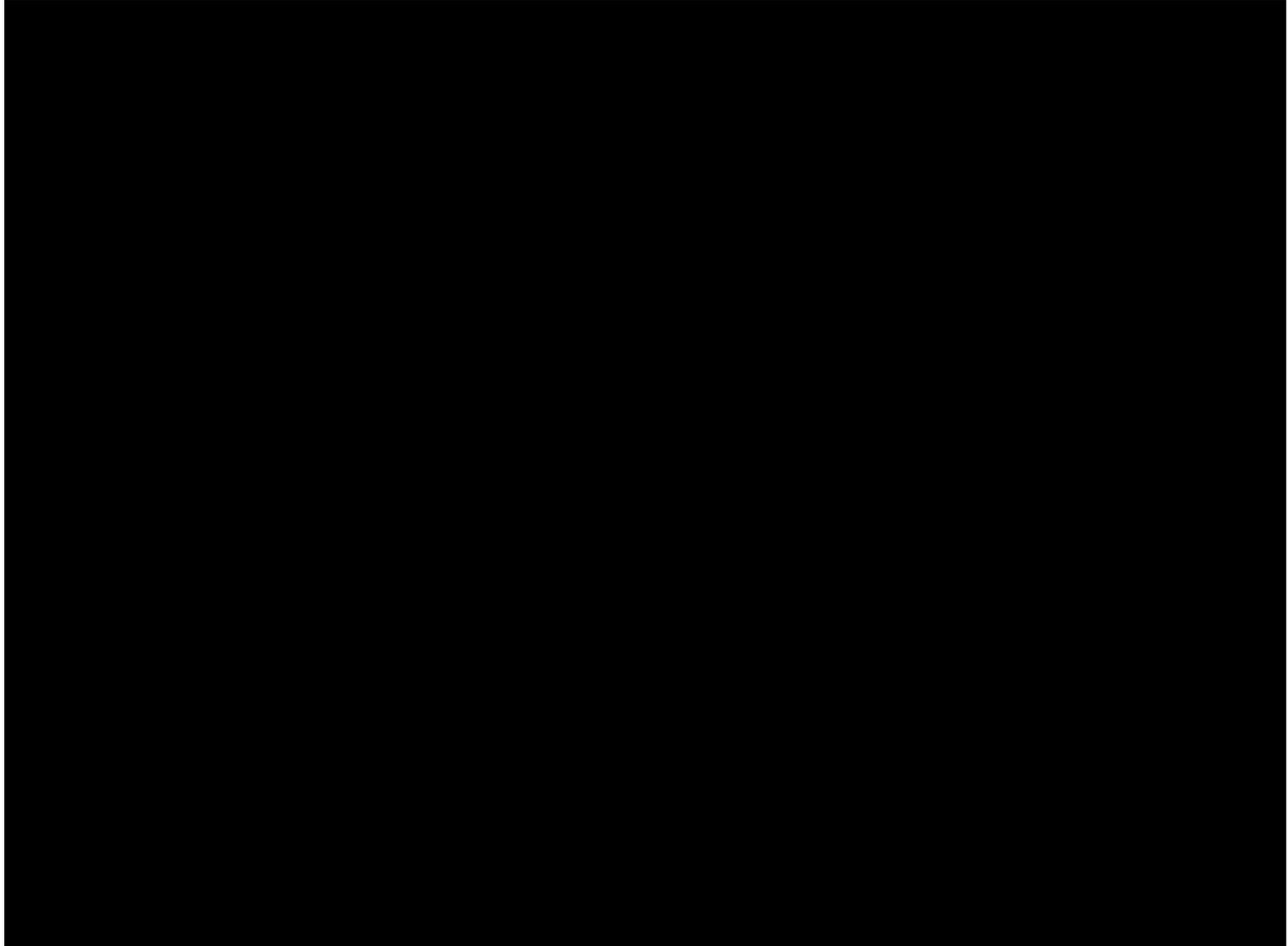
Решаются уравнения:

- Навье-Стокса,
- энергии,
- массопереноса (с измененной правой частью).

Режим расчета: «очень вязкое течение».



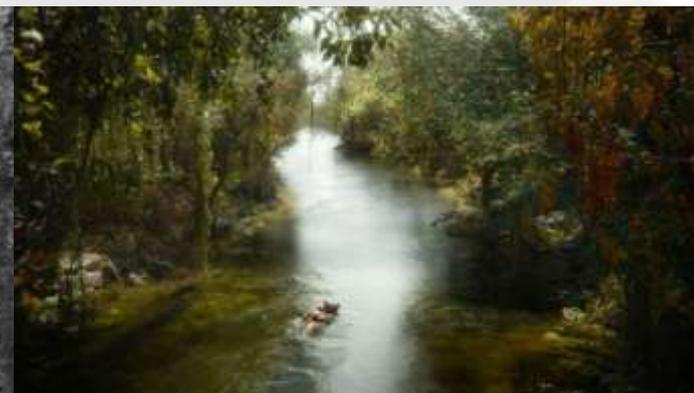
Суперкомпьютеры в спорте





Суперкомпьютеры и анимация (“Книга Джунглей”, 2016 год)

- 24 кадра в секунду,
 - более 152 000 кадров в фильме,
 - кадр обрабатывается одним процессором,
 - в среднем 19 часов на рендеринг одного кадра,
 - всего: 30 млн. процессорочасов
(потребовалось бы 3400 лет работы одного процессора).
- Бюджет: \$175 млн. Сборы в мире: \$966 млн.



Суперкомпьютеры в кинематографе



Использование суперкомпьютера МГУ “Ломоносов-2”: спецэффекты для фильма “Время первых”.

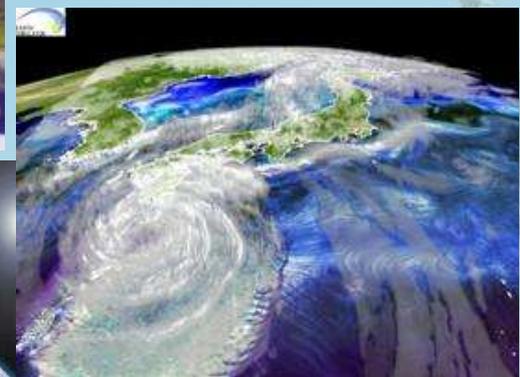
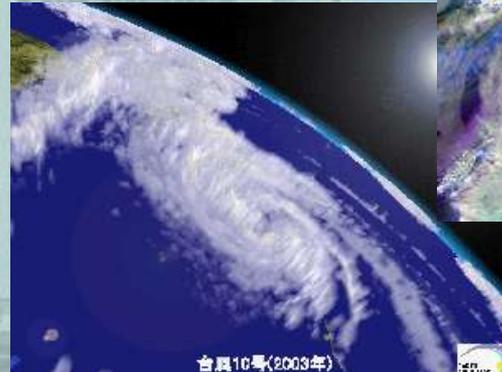
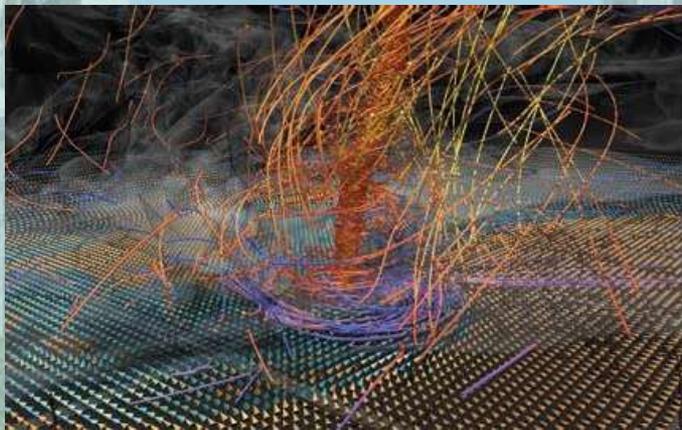
Выступление компании Whirlpool на научной конференции



Суперкомпьютерные технологии и наука

Наука:

- теоретическая
- экспериментальная
- **вычислительная**



От моделирования к полному воспроизведению ...



Вычислительная аэродинамика мельчайших насекомых

Полилов А.А.¹, Фарисенков С.Э.¹, Лапина Н.А.¹, Коломенский Д.С.²

1) МГУ имени М.В.Ломоносова

2) Сколковский Институт науки и технологий

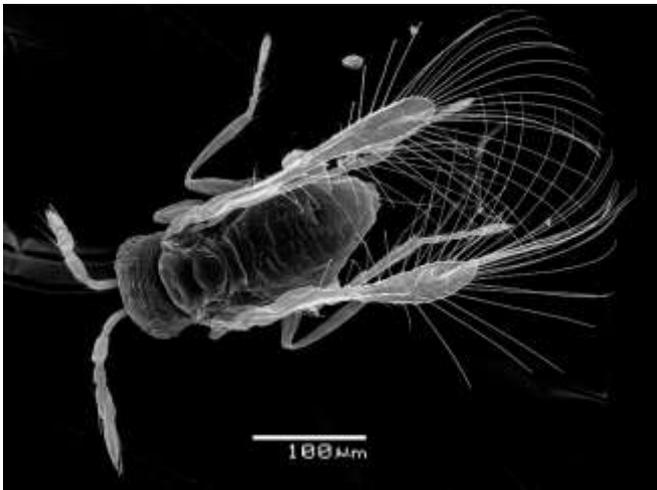
ЗАДАЧА. Расчёт аэродинамических сил, действующих в полёте на миниатюрных насекомых с длиной тела менее 0,5 мм.

СТРАТЕГИЯ. Численное решение уравнений Навье-Стокса методом конечных разностей с динамической адаптацией сетки и использованием трехмерных гоометрических моделей полученных на основе микрофотографий со сканирующего электронного микроскопа.

ЦЕЛЬ. Анализ аэродинамических свойств перистых крыльев мельчайших насекомых.

ЭФФЕКТ. Объяснение механизмов полета мельчайших насекомых.

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ. Энтомология, Зоология, Эволюция, Биомеханика, Аэрогидромеханика.



Многомасштабное моделирование нанодисперсных полимерных и супрамолекулярных систем

Комаров П.В., Халатур П.Г., Малышев М.Д.
МГУ имени М.В.Ломоносова

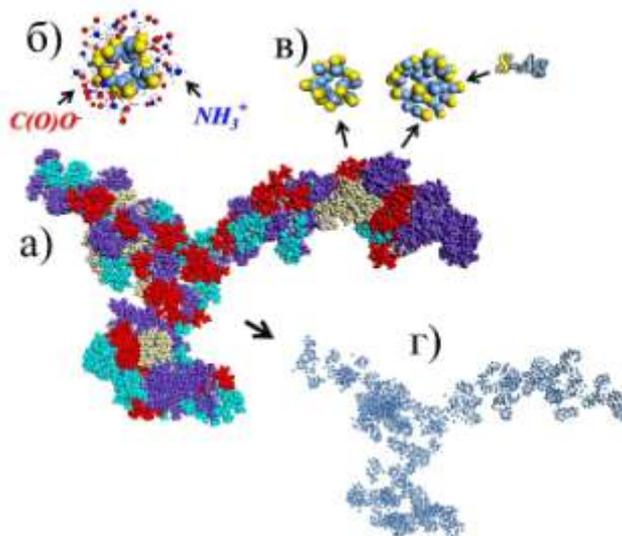
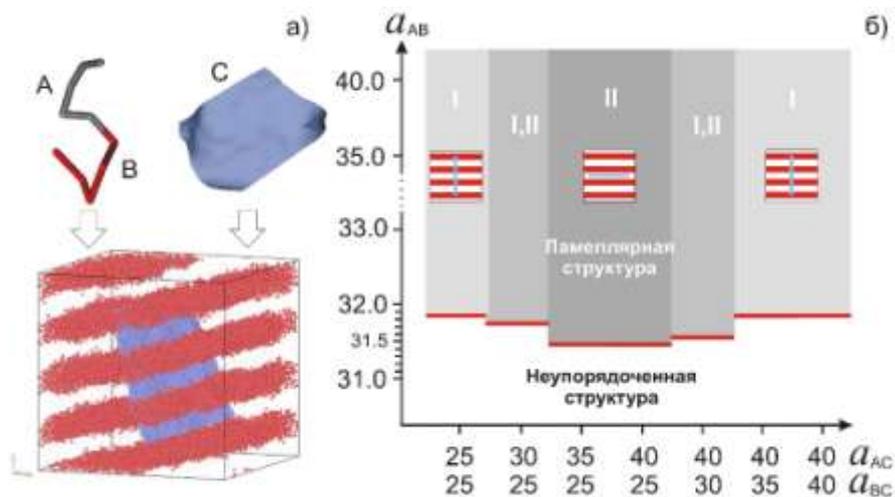
ЗАДАЧА. Изучение, характеристика и разработка новых функциональных материалов на основе методологии многомасштабного моделирования.

СТРАТЕГИЯ. В данном проекте делается акцент на методы атомистического и мезоскопического компьютерного моделирования такие как атомистическая молекулярная динамика и диссипативная динамика частиц.

ЦЕЛЬ. Теоретическая разработка новых подходов к созданию функциональных наноструктурированных материалов.

ЭФФЕКТ. Новые функциональные материалы и методы их создания.

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ. Новые методологии разработки, наноматериалы.



Моделирование поведения разветвленных молекул, микрогелей и многокомпонентных полимерных систем в растворах и расплавах

Гумеров Р.А.

МГУ имени М.В.Ломоносова

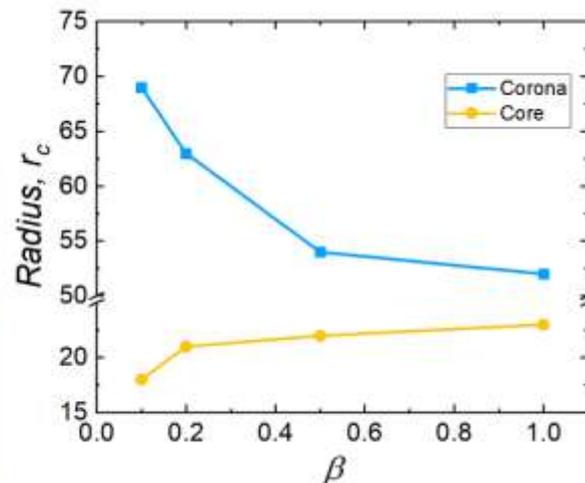
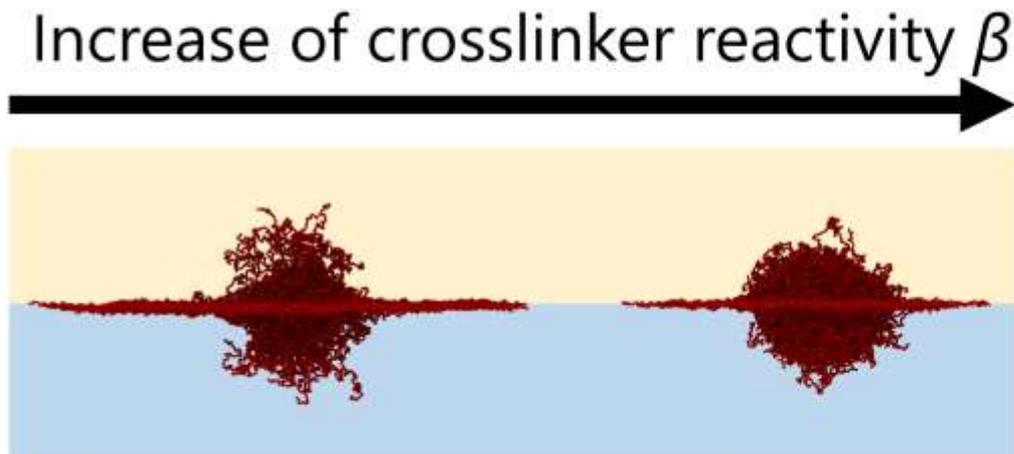
ЗАДАЧА. Изучить адсорбционные свойства древовидных молекул, микрогелей на поверхностях, и изменения структурных характеристик пленок блок-сополимеров и нанокомпозитов при набухании.

СТРАТЕГИЯ. Помещение нескольких молекул в растворитель, наблюдение за их поведением. Поведение моделируется методом диссипативной динамики частиц.

ЦЕЛЬ. Добиться стабильных эмульсий и высокоструктурированных пленок. При этом морфология молекул и пленок должна соответствовать определенным ожиданиям.

ЭФФЕКТ. Микрогели и древовидные молекулы способны покрывать большую площадь межфазной границы по сравнению с линейными полимерами или ПАВами. Набухшие тонкие пленки блок-сополимеров имеют неоднородное распределение растворителя вдоль доменов.

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ. Высокие адсорбционные свойства применяются для получения стабильных микро- и наноэмульсий, Тонкие пленки могут быть применены в качестве наноасосов.



Воздействие космической среды на наноструктуры и наноматериалы

Хлебников С.А., Воронина Е.Н., Чирская Н.П.
НИИЯФ МГУ имени М.В.Ломоносова

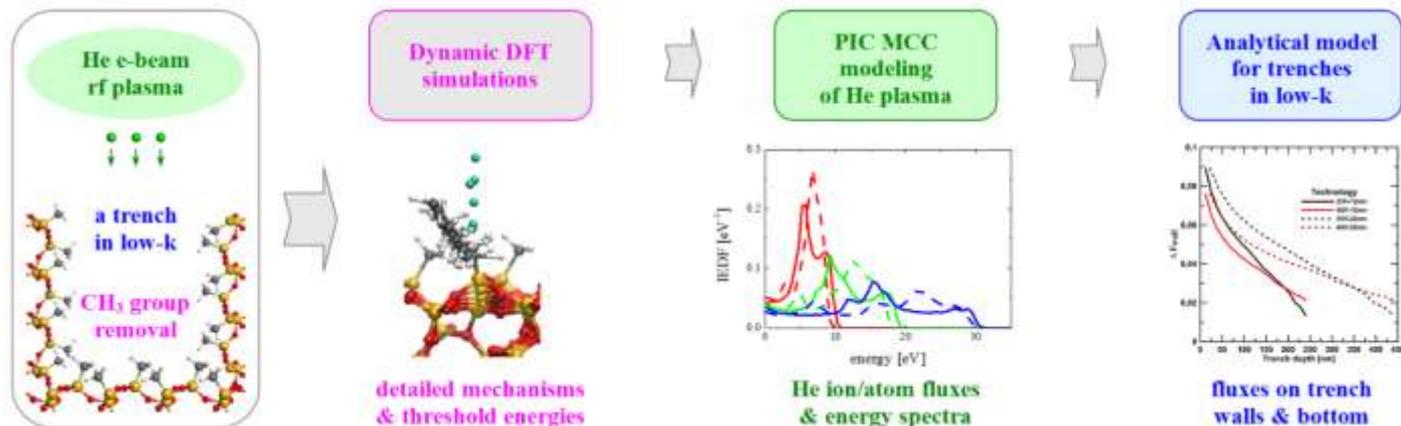
ЗАДАЧА. Разработка новых материалов и элементов оборудования космических аппаратов, стойких к воздействию космической среды.

СТРАТЕГИЯ. Моделирование изменения свойств наноструктур и наноматериалов под воздействием космической среды методами многомасштабного моделирования.

ЦЕЛЬ. Исследование воздействия факторов космического пространства – частиц холодной и горячей магнитосферной плазмы, космической радиации и других – на наноструктуры и наноматериалы на их основе. Использование принципов многомасштабного моделирования к описанию воздействия факторов космического пространства на наноматериалы, выбор набора методов моделирования, подходящих для моделирования воздействия конкретных факторов, а также их сочетаний.

ЭФФЕКТ. Прогнозирование поведения наноструктур и наноматериалов в экстремальных условиях космоса. Повышение стойкости материалов космической техники. Выдача рекомендаций по созданию новых материалов, стойких к воздействию космической среды.

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ. Космическая отрасль, нанотехнологии.



Рациональное создание ферментов на основе иммуноглобулинов

Головин А.В.

МГУ имени М.В.Ломоносова

ЗАДАЧА. Создание новых ферментов на основе иммуноглобулинов с использованием методов молекулярного моделирования.

СТРАТЕГИЯ. Полное исследование пространства мутаций иммуноглобулинов в активном центре и перенос активного из известных ферментов для достижения уровня ферментативной активности сравнимого с природными ферментами.

ЦЕЛЬ. Создание вычислительных подходов с использованием методов молекулярной механики, квантовой химии и их гибридов для создания новых ферментов на основе иммуноглобулинов.

ЭФФЕКТ. Иммуноглобулины играют важную роль в современной биофармацевтике, придание им каталитических свойств увеличит их эффективность во много раз.

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ. Медицина, Фармакология, Фундаментальные исследования.



Новые стратегии многокомпонентного ингибирования митотического веретена для остановки деления опухолевых клеток

Гудимчук Н.Б.^{1,2}, Александрова В.В.^{1,3}, Ельцов И.А.^{1,3}, Лопанская Ю.Н.^{1,2}, Федоров В.А.^{1,2}, Анисимов М.Н.^{1,2}

1) МГУ имени М.В.Ломоносова

2) Центр теоретических проблем физико-химической фармакологии РАН

3) Московский физико-технический институт

ЗАДАЧА. Разработка альтернативных противоопухолевых препаратов, которые позволили бы преодолевать устойчивость организма к существующим на данный момент лекарствам, а также их побочные эффекты.

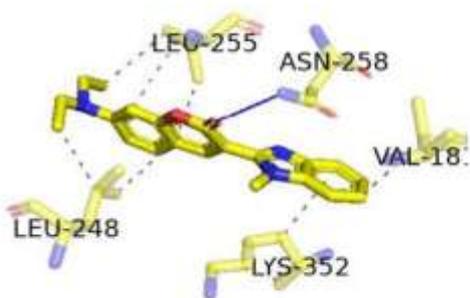
СТРАТЕГИЯ. Поиск новых ингибиторов алгоритмом COMPARE по корреляции профилей активности на панели клеток NCI-60.

ЦЕЛЬ. Разработка альтернативных противоопухолевых препаратов и создание нового метода работы в данной области.

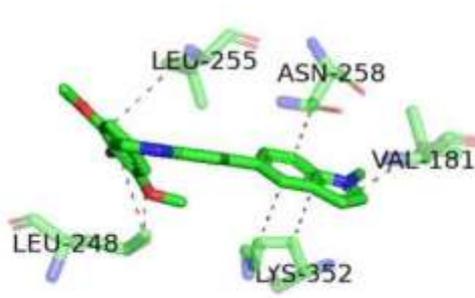
ЭФФЕКТ. Научный: создание эффективного метода разработки лекарств внесет вклад в область исследования взаимодействия белков и низкомолекулярных соединений.

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ. 1) медицина 2) фармакология 3) область науки, занимающаяся взаимодействием белков и низкомолекулярных соединений.

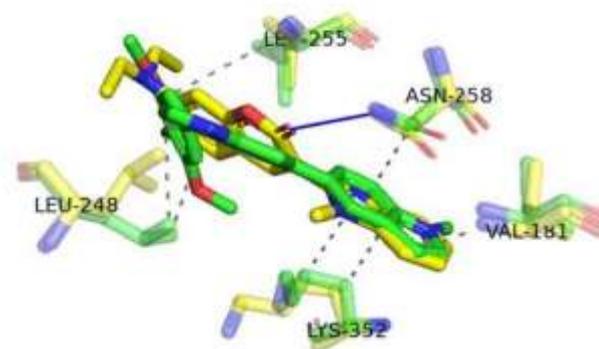
a) Coumarin-30



b) PDB id: 6LSN



c) Overlay



Моделирование сложных турбулентных течений на неструктурированных сетках

Дубень А.П., Абалакин И.В., Бахвалов П.А., Бобков В.Г.,
Горобец А.В., Жданова Н.С., Козубская Т.К., Родионов П.В.
ИПМ им. М.В. Келдыша РАН

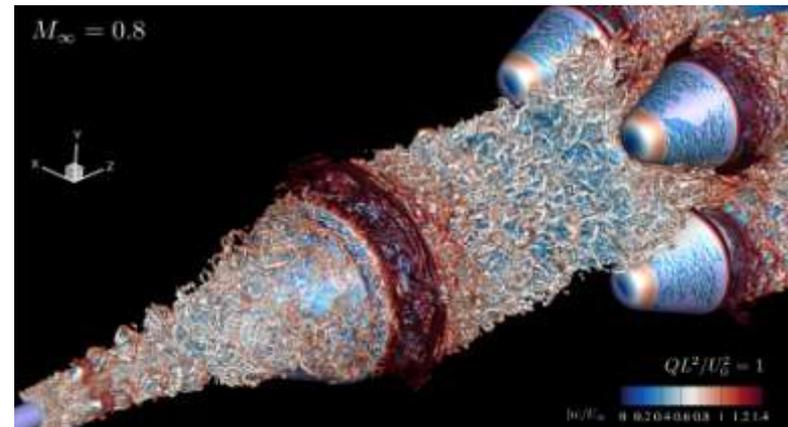
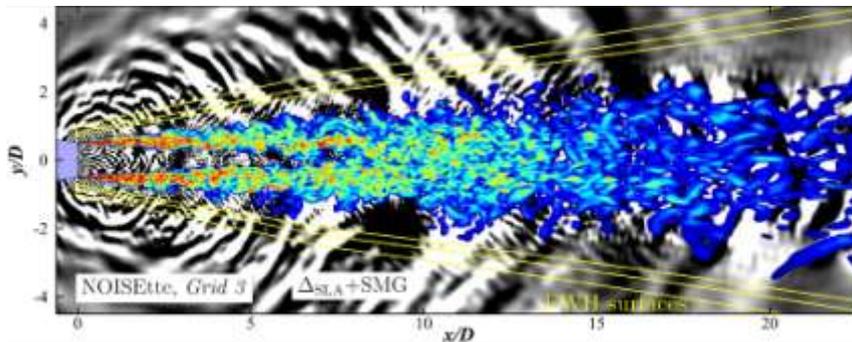
ЗАДАЧА. Численное исследование аэродинамических и акустических характеристик плохообтекаемых элементов летательных аппаратов и сложных турбулентных течений.

СТРАТЕГИЯ. Проведение численных экспериментов для различных конфигураций, сравнение с экспериментальными данными, выявление оптимальных конфигураций.

ЦЕЛЬ. Изучение и улучшение аэродинамических и аэроакустических характеристик элементов летательных аппаратов и сложных турбулентных течений.

ЭФФЕКТ. Улучшение аэродинамических свойств летательных аппаратов.

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ. Авиационная промышленность; вычислительная математика; информатика.



Теоретическое моделирование электронных и магнитных свойств эндоэдральных фуллеренов и их производных

Иоффе И.Н., Луконина Н.С., Мазалева О.Н., Сударькова С.М., Пыхова А.Д., Хиневич В.Э.
МГУ имени М.В.Ломоносова

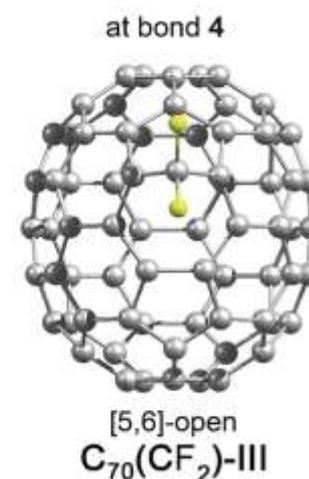
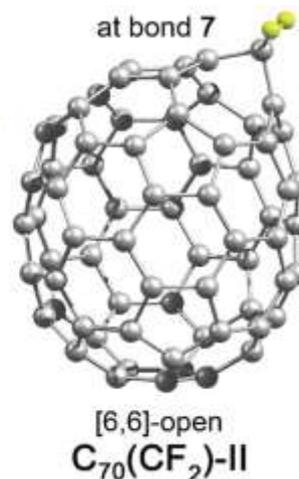
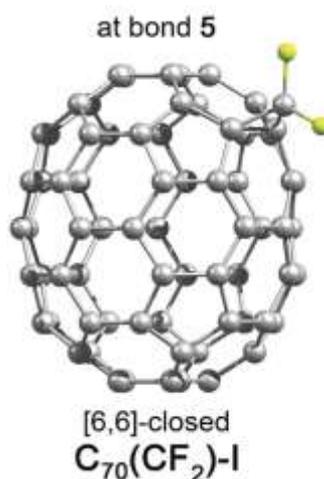
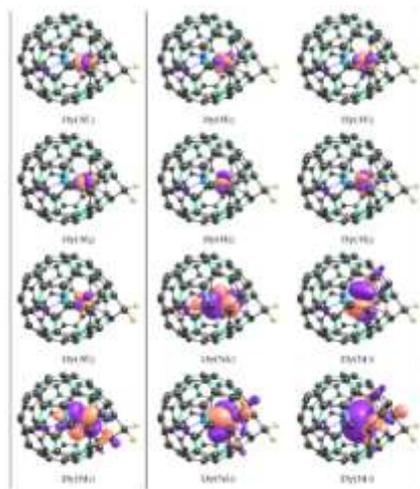
ЗАДАЧА. Данный проект посвящен поиску перспективных молекулярных магнетиков на основе эндоэдральных металлофуллеренов и отработке теоретических подходов к их описанию.

СТРАТЕГИЯ. Изучение основных состояний - динамики эндоэдральных атомов внутри углеродного каркаса и ее взаимосвязи с мотивами внешнесферной функционализации.

ЦЕЛЬ. Выяснение особенностей динамики эндоэдральных кластеров внутри различных углеродных каркасов и связи ее с региохимическими особенностями внешнесферной функционализации.

ЭФФЕКТ. Проект позволит лучше понять фундаментальные аспекты электронных и магнитных свойств эндоэдральных фуллеренов, а также предложить такие эндоэдральные соединения, которые могут найти применение в новых перспективных материалах для спинтроники и хранения информации.

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ. Фундаментальное и прикладное материаловедение.



Молекулярное моделирование биохимических и биофизических процессов в холинэстеразах и разработка лекарственных препаратов, взаимодействующих с ними

Лущекина С.В., Новичкова Д.А., Капуста Д.П., Коц Е.Д., Бойко К.М.

Институт биохимической физики им. Н.М. Эмануэля РАН

МГУ имени М.В. Ломоносова

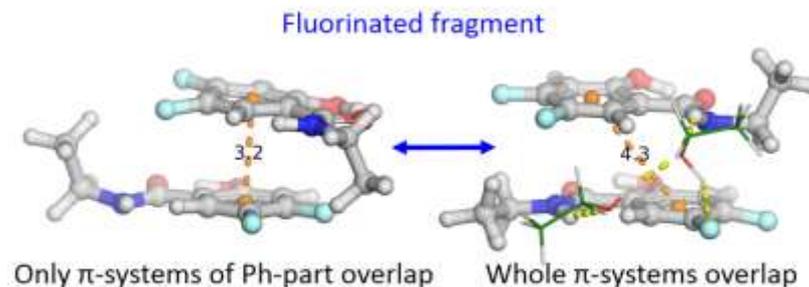
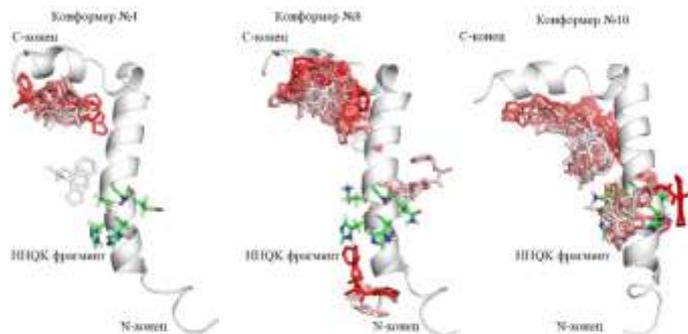
ЗАДАЧА. Холинэстеразы играют ключевую роль в функционировании человеческого организма. Исследование их биохимических и биофизических свойств необходимо для более глубокого понимания физиологии человека. Холинэстеразы вовлечены в развитие различных серьезных заболеваний (болезнь Альцгеймера, миастения), и являются мишенями для лекарственной терапии этих заболеваний. Также они являются мишенями отравляющих веществ, и исследование механизмов их функционирования необходимо для разработки защитных средств.

СТРАТЕГИЯ. Молекулярное моделирование динамики, конформационных переходов в белковых молекулах ферментов, исследование энергетических профилей реакций ферментов с ингибиторами и субстратами с использованием методов молекулярного докинга, молекулярной динамики, квантовой механики, комбинированного метода квантовой механики и молекулярной механики, комбинированного метода квантовой механики и молекулярной динамики.

ЦЕЛЬ. Получение информации о процессах, протекающих в биологических системах и об их взаимодействии с различными химическими соединениями -- отравляющими веществами и лекарственными препаратами. Разработка новых лекарственных препаратов и защитных средств.

ЭФФЕКТ. Расширение фундаментальной базы биохимических и биомедицинских исследований. Разработка и внедрение новых лекарственных препаратов.

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ. Фармакология, медицина. Препараты для терапии болезни Альцгеймера, миастении, защитных средств для авиации (пассажиры, команда, наземный персонал) от аэротоксического синдрома.



Структурные и динамические свойства полимерных нанокомпозитных материалов

Люлин С.В., Гуртовенко А.А., Ларин С.В., Фалькович С.Г.,
Назарычев В.М., Волгин И.В., Глова А.Д.
Институт высокомолекулярных соединений РАН

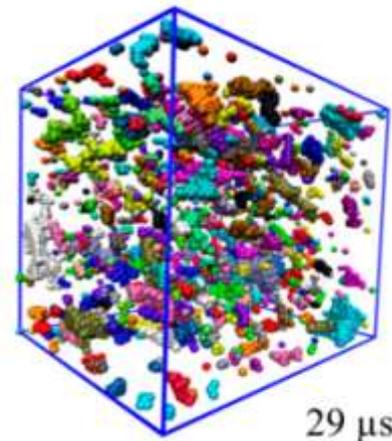
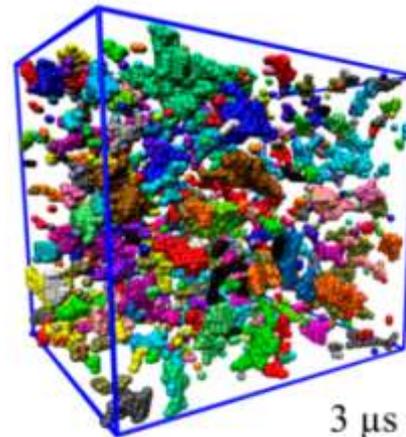
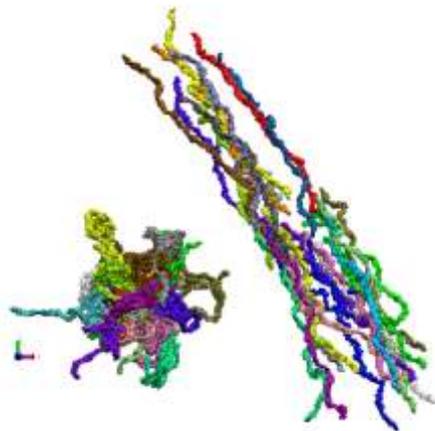
ЗАДАЧА. Изучение и прогнозирование структурных и динамических свойств полимерных композиционных материалов с наноразмерным наполнителем.

СТРАТЕГИЯ. Разработка моделей и компьютерное моделирование композиционных материалов с использованием методов квантовой химии и методов молекулярной динамики.

ЦЕЛЬ. Разработать модель для описания композиционных материалов, позволяющую с высокой степенью достоверности определять структурные и динамические свойства полимерных композиционных материалов в процессе компьютерного моделирования. Изучить влияние на свойства материалов структуры полимера, образующего матрицу, а также типа, формы и размеров наполнителя.

ЭФФЕКТ. Метод расчета и прогнозирования свойств полимерных композиционных материалов.

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ. Разработка и создание новых полимерных композиционных материалов с наноразмерным наполнителем.



Фундаментальные исследования процессов горения и детонации применительно к развитию основ энерготехнологий

Левин В.А., Мануйлович И.С., Журавская Т.А., Сутырин О.Г.
МГУ имени М.В.Ломоносова

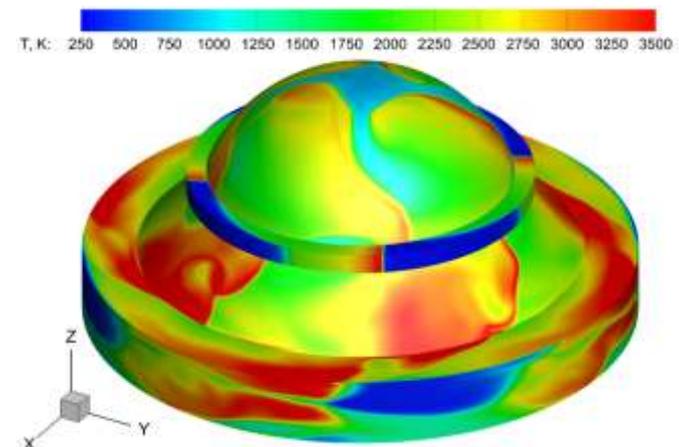
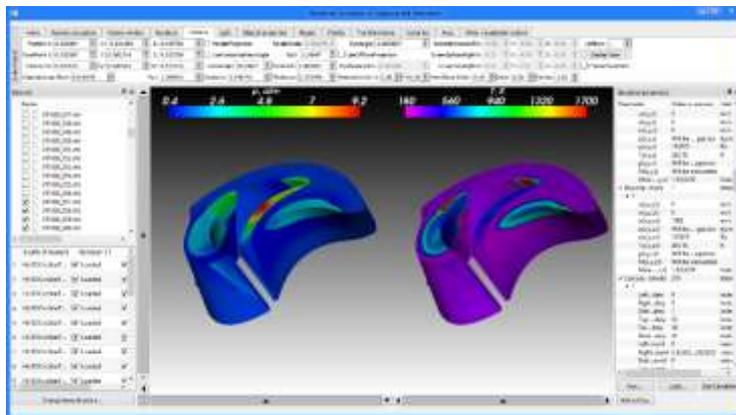
ЗАДАЧА. Изучение динамики и структуры волн детонации в неоднородных смесях в каналах сложной геометрии и камерах сгорания на основе разработанных математических моделей и оригинального программного комплекса.

СТРАТЕГИЯ. Быстрые параллельные расчеты течений реагирующих многокомпонентных газовых смесей в областях сложной геометрии.

ЦЕЛЬ. Создание оригинального программного комплекса, предназначенного для моделирования 1D-, 2D- и 3D-течений.

ЭФФЕКТ. Быстрое и простое моделирование сложных 1D-, 2D- и 3D-течений многокомпонентных реагирующих газовых смесей с горением и детонацией.

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ. Разработка новых типов двигателей, решение проблем, связанных с взрывобезопасностью на различных объектах.



Суперкомпьютерное моделирование биомолекулярных систем на основе квантово-химических и молекулярно-динамических методов: от ферментативного катализа до оптогенетики

Немухин А.В.

МГУ имени М.В.Ломоносова

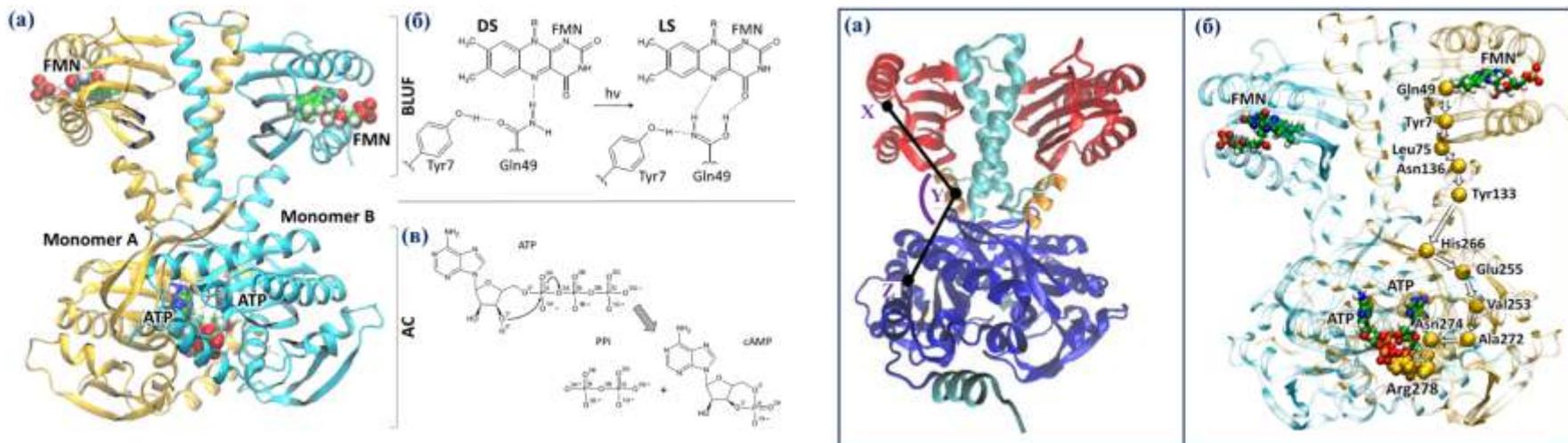
ЗАДАЧА. Развитие и применение методов моделирования строения и свойств биомолекулярных систем.

СТРАТЕГИЯ. Практическая реализация комбинированного метода квантовой механики/молекулярной механики (КМ/ММ) позволяет выйти на качественно новый уровень в компьютерном моделировании свойств биомолекулярных систем.

ЦЕЛЬ. Решение конкретных задач моделирования биомолекул с использованием методов квантовой химии, КМ/ММ и МД, ориентированных на суперкомпьютерные расчеты.

ЭФФЕКТ. Будут исследованы молекулярные механизмы действия биомолекулярных систем, необходимые для разработки способов управления процессами в этих системах.

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ. Биомедицина, биотехнология.



Постгеномные исследования

Кутов Д.К., Ильин И.С., Тащилова А.С., Сулимов В.Б., Сулимов А.В.
МГУ имени М.В.Ломоносова

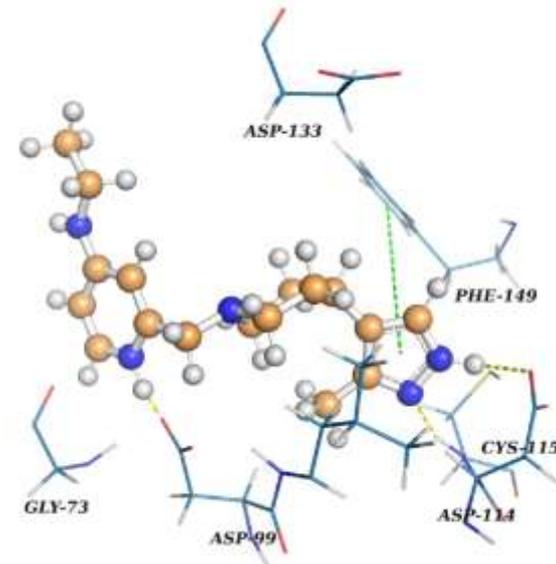
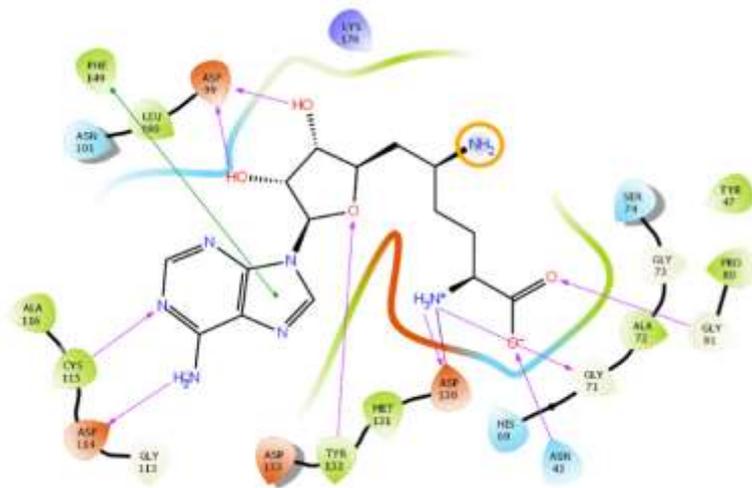
ЗАДАЧА. Разработка новых ингибиторов урокиназы, методами молекулярного моделирования.

СТРАТЕГИЯ. Виртуальный скрининг баз данных лигандов методами докинга, квантовой химии и молекулярной динамики для оценки энергий взаимодействия белок-лиганд.

ЦЕЛЬ. Создание методика, основанной на молекулярном моделировании с высокой точностью расчетов, позволяющей эффективно предсказывать ингибиторы белков, в частности ингибиторы урокиназы.

ЭФФЕКТ. Эффективная, быстрая и недорогая компьютерная методика разработки новых лекарств, а также новые ингибиторы урокиназы.

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ. Разработанные методы позволят предсказывать новые ингибиторы для заданных белков-мишеней, в частности, для урокиназы, а новые ингибиторы урокиназы могут стать основой для новых лекарств.



Моделирование динамики хроматина

Армеев Г.А., Косарим Н.А., Горковец Т.К., Новоселецкий В.Н.,
Поспелова Ю., Андреева Е., Князева А., Шайтан А.К.
МГУ имени М.В.Ломоносова

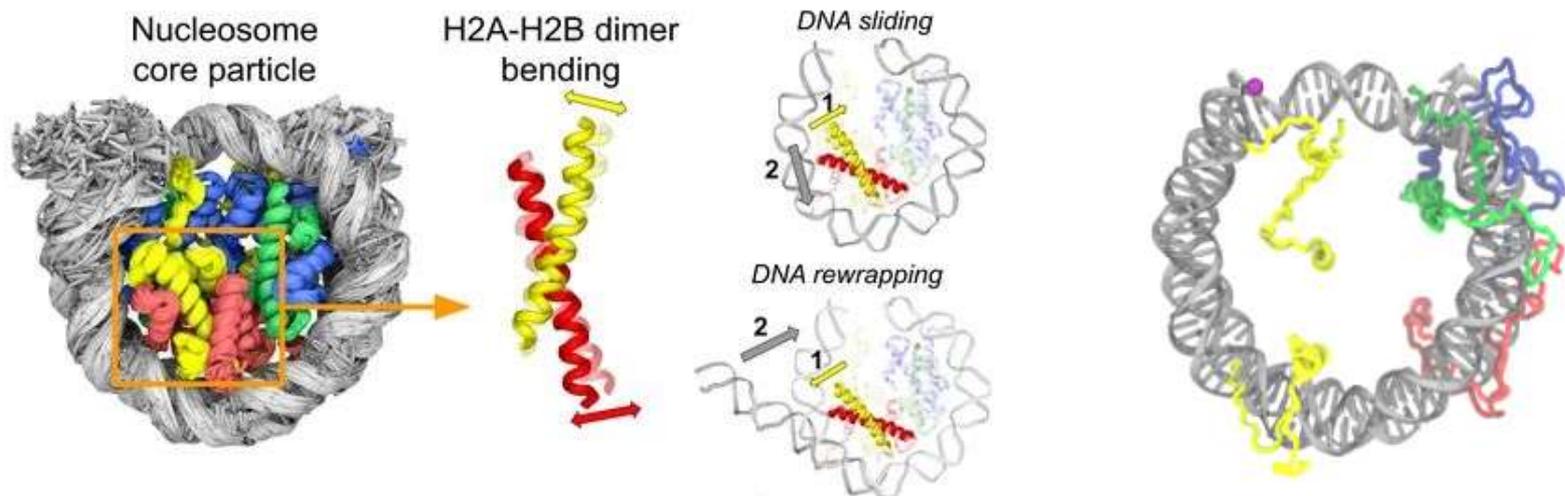
ЗАДАЧА. Понимание организации и динамики белок-белковых и ДНК-белковых взаимодействий в ядре эукариотической клетки.

СТРАТЕГИЯ. Молекулярное моделирование (молекулярная динамика, белок-белковый докинг, решение уравнение Пуассона-Больцмана) взаимодействий белков и ДНК в хроматине.

ЦЕЛЬ. Осуществить комплексное рассмотрение основных взаимодействий белков и ДНК на уровне элементарных частиц хроматина - нуклеосом. Выявить влияние различных взаимодействий и модификаций на стабильность и конформацию нуклеосом, и, как следствие, на регуляцию функционирования живых организмов.

ЭФФЕКТ. Выявление новых целей для разработки лекарств.

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ. Медицина, биология, биотехнология, эпигенетика.



Молекулярное моделирование биокаталитических процессов

Балдин С.М., Копылов К.Е., Дробот В.В., Бочкова А.А.,
Кирилин Е.М., Подшивалов Д.Д., Швядас В.К.
МГУ имени М.В.Ломоносова

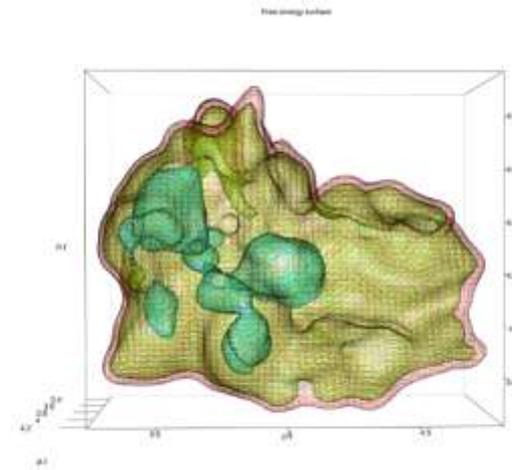
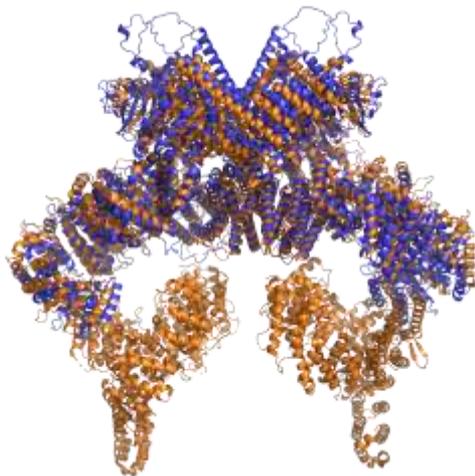
ЗАДАЧА. Получение детальной информации о химическом механизме работы ферментов.

СТРАТЕГИЯ. Использование оригинальной комплексной методологии молекулярного моделирования с применением молекулярного докинга, классической молекулярной динамики, метадинамики и гибридных квантово-механических / молекулярно-механических подходов (QM / MM).

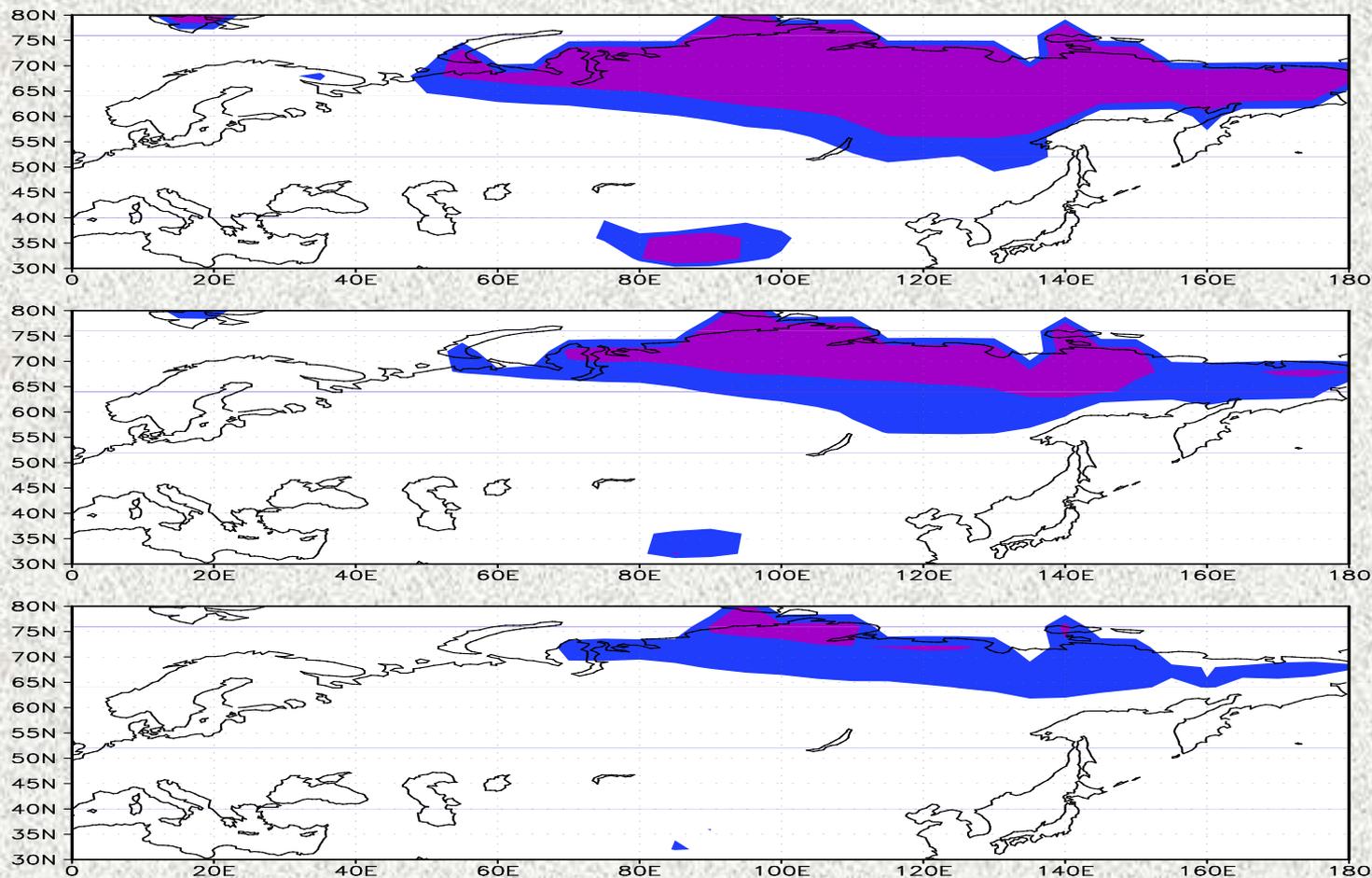
ЦЕЛЬ. Изучение механизмов действия ферментов, возможностей модификации их физико-химических свойств и ингибирования.

ЭФФЕКТ. Улучшение понимания химического механизма функционирования ферментов, динамики каталитического процесса в активных центрах и её связи с функцией.

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ. Биохимия, биоинженерия, энзимология, физическая химия.



Суперкомпьютеры – инструмент моделирования климатических изменений



Верхняя картинка – распределение вечной мерзлоты на территории России.

Средняя и нижняя картинки – прогноз распределения вечной мерзлоты на будущее при двух сценариях воздействия человека на климат.

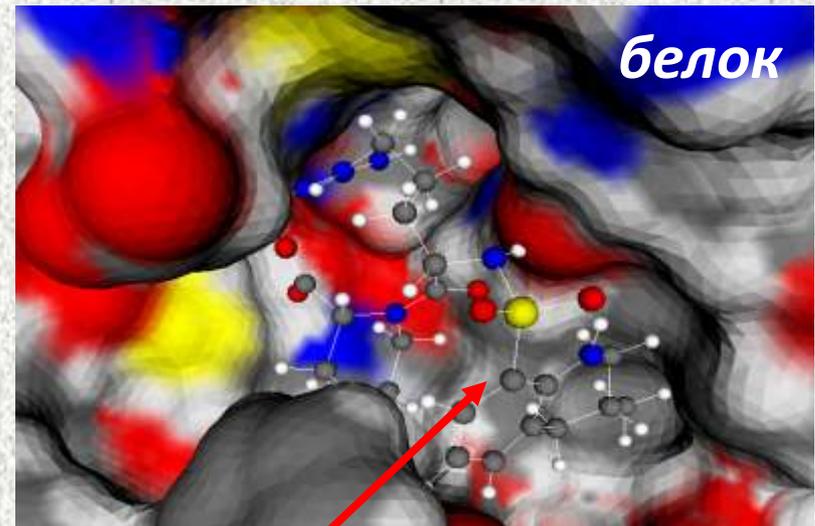
Компьютерный дизайн лекарств

Разработка нового лекарства требует 10-15 лет и до \$500 млн.

Действие лекарства:

блокировка ингибитором
активного центра белка,
пораженного болезнью.

Поиск ингибиторов – это ключевой
этап разработки.



ингибитор

Суперкомпьютеры и грид-технологии позволяют ускорить разработку
лекарств в несколько раз и удешевить в сотни раз.

Теоретико-числовые задачи, ориентированные на криптографические приложения

Факторизация больших целых чисел требует решения огромных разреженных систем линейных уравнений над конечными полями и компьютеров с петафлопсной производительностью.

Факторизация: $N = p q$, где p и q – простые числа.

RSA232=12301866845301177551304949583849627207728535695953347921973
224521517264005072636575187452021997864693899564749427740638459251
925573263034537315482685079170261221429134616704292143116022212404
79274737794080665351419597459856902143413

p=33478071698956898786044169848212690817704794983713768568912431388
982883793878002287614711652531743087737814467999489

q=36746043666799590428244633799627952632279158164343087642676032283
815739666511279233373417143396810270092798736308917

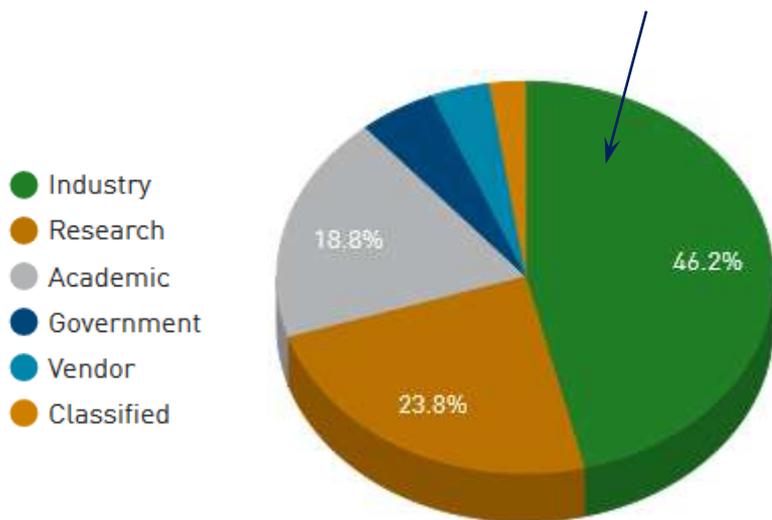
Этап просеивания: 2 года на 800 компьютерах.

Размерность системы уравнений: $1.9 \cdot 10^9$. Вычислительная сложность: 10^{20} операций.

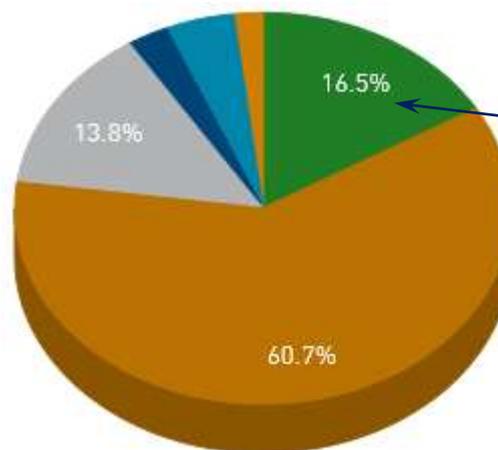


Top500 самых мощных суперкомпьютеров мира. Распределение по областям применения (июнь, 2023)

Свидетельство целесообразности использования суперкомпьютерных технологий для развития экономики государств: около половины (46,2%) самых мощных суперкомпьютеров мира **установлены в промышленности.**



По числу суперкомпьютеров в списке Top500



По суммарной производительности суперкомпьютеров

Свидетельство экономической обоснованности использования суперкомпьютерных технологий в промышленности.

Файл Правка Вид Журнал Закладки Инструменты Справка

Council on Competitiveness x +

www.compete.org Поиск

COUNCIL ON COMPETITIVENESS
www.compete.org

Member Login Donate

Compete.
Council on Competitiveness

About the Council Initiatives Publications News Events Membership Contact Us

educate next-generation innovators
deepen science and engineering skills
explore knowledge intersections
equip workers for change
support collaborative creativity
energize entrepreneurship
reward long-term strategy
build world-class infrastructure
invest in frontier research
attract global talent
create high-wage jobs

INNOVATE AMERICA

COMPETITIVENESS IS INNOVATION

Innovation occurs at the intersection of invention, insight, and investment that leads to the creation of social and economic value—it is

More →

ate of Technology

“If we want to out compete, we have to out compute”

Парадигмы и технологии решения задач (современные тенденции)

● Математическое моделирование

- Решение систем уравнений с начальными и граничными условиями,
- Традиционный способ численного анализа и предсказательного моделирования,
- Требуются вычисления с двойной точностью.

● Технологии больших данных

- Получили значительное развитие в связи с доступностью больших массивов данных,
- Позволяют находить скрытые факты и закономерности, используя методы анализа данных,
- Формат представления данных меняется от целых до двойной точности.

● Технологии искусственного интеллекта

- Что способствовало появлению технологий:
 - доступные мощные суперкомпьютерные ресурсы,
 - доступные массивы больших данных,
 - технологии глубокого обучения.
- Используют большие массивы данных и серьезные компьютерные ресурсы для обучения нейронных сетей,
- Необходимы технологии быстрого вычисления сверток, тензорных вычислений,
- Не требуется высокая разрядность вычислений для вещественных и целых чисел.

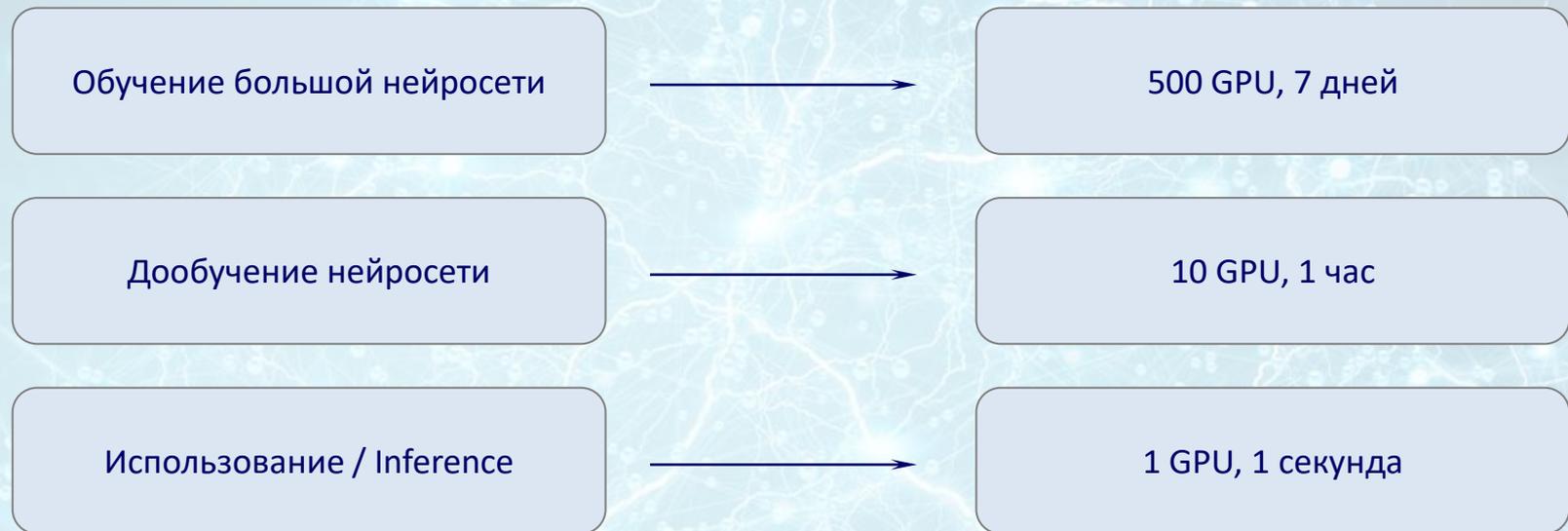
ANN models	Application	Computation for training
AlexNet	Image classification	4.7×10^{17} (470PFLOPs)
VGG16	Image classification	8.5×10^{18} (8.5EFLOPs)
YOLOv3	Image target detection	5.1×10^{19} (51EFLOPs)
Transformer	Natural language processing	7.4×10^{18} (7.4EFLOPs)
GPT-3	Natural language processing	3.1×10^{23} (310ZFLOPs)

https://docs.google.com/spreadsheets/d/1AAlebjNsnJj_uKALHbXNfn3_YsT6sHXtCU0q7OIPuc4

Важно:

- Все три подхода сегодня сосуществуют вместе, не заменяя, а дополняя друг друга.
- В основе всех трех подходов лежат суперкомпьютерные технологии и высокопроизводительная вычислительная инфраструктура.

Суперкомпьютеры и искусственный интеллект



GPT-3 – нейросеть (модель) для обработки естественного языка, 175 миллиардов параметров, 355 GPU-лет на обучение.

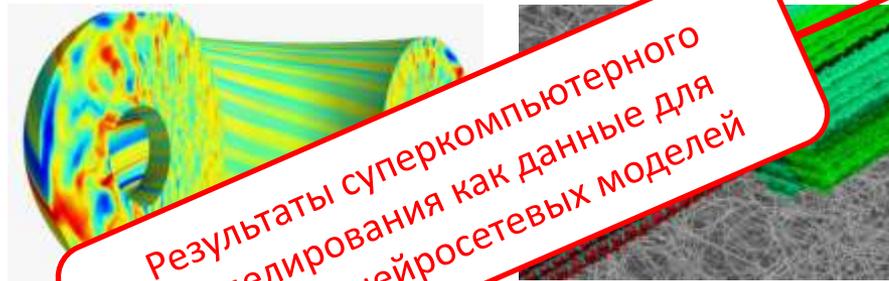
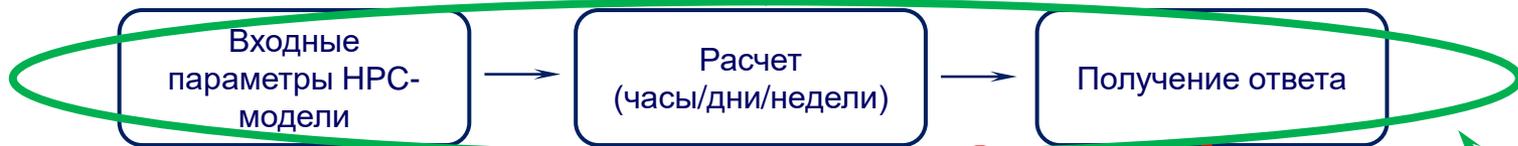


ANN models	Application	Computation for training
AlexNet	Image classification	4.7×10^{17} (470PFLOPs)
VGG16	Image classification	8.5×10^{18} (8.5EFLOPs)
YOLOv3	Image target detection	5.1×10^{19} (51EFLOPs)
Transformer	Natural language processing	7.4×10^{18} (7.4EFLOPs)
GPT-3	Natural language processing	3.1×10^{23} (310ZFLOPs)

https://docs.google.com/spreadsheets/d/1AAIejNsnJj_uKALHbXNfn3_YsT6sHXtCU0q7OIPuc4

Изменение парадигмы вычислительных наук

Традиционное использование высокопроизводительных вычислений (HPC)



Цикл научного исследования

Высокопроизводительные вычисления, дополненные технологиями ИИ



Строительство больших центров для поддержки технологий ИИ

[../3DNews](#)

[~/](#)

</spool/news>

</usr/share/articles>

</lib/tags>

servernews

Все самое свежее из мира больших мощностей

«ИИ-гигафабрика» xAI разместится в гигантском дата-центре в Теннесси

07.06.2024 [15:42], Руслан Авдеев

ИИ-стартап xAI, курируемый Илоном Маском (Elon Musk), намерен построить гигантский дата-центр с самым производительным в мире ИИ-суперкомпьютером. По [данным](#) Datacenter Dynamics, ЦОД разместится в окрестностях Мемфиса (штат Теннесси), а пока ожидает одобрения властей.

В обозримом будущем компания должна получить сотни тысяч ускорителей для обучения новых моделей, в частности, чат-бота Grok, предлагаемого, например, по подписке в социальной сети X (Twitter). Ранее в Сеть утекла информация, что NVIDIA [передаст xAI чипы](#), изначально предназначавшиеся для Tesla — Маск весьма вольно распоряжается активами подконтрольных ему бизнесов, часто вызывая недовольство инвесторов.

Пока проект ожидает окончательного разрешения от местного бизнес-инкубатора Memphis Shelby County Economic Development Growth Engine (EDGE), а также муниципальных и федеральных властей. Впрочем, гораздо важнее дождаться одобрения энергетической компании Tennessee Valley Authority (TVA). Реализация проекта сулит появление высокооплачиваемых рабочих мест и увеличение доходов штата, что поможет поддерживать и модернизировать местную инфраструктуру.

[b200](#)

[h100](#)

[hardware](#)

[hpc](#)

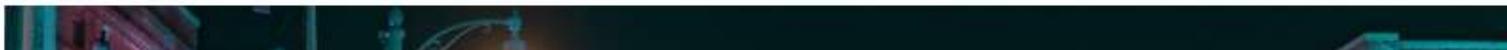
[nvidia](#)

[xai](#)

[ии](#)

[суперкомпьютер](#)

[сша](#)



Суперкомпьютеры... Зачем?

И в промышленности, и в науке есть большое число задач, для решения которых необходимы именно суперкомпьютеры.



*Почему суперкомпьютеры имеют столь
высокую производительность ?*

*Прогресс в элементной базе ?
Архитектура суперкомпьютеров ?*

Увеличение производительности компьютеров: за счет чего?

EDSAC, 1949 год

такт: $2 \cdot 10^{-6}$ с

произв.: 10^2 оп/с

Увеличение производительности компьютеров: за счет чего?

EDSAC, 1949 год

*такт: $2 * 10^{-6}$ с*

произв.: 10^2 оп/с

Cray Titan, #1, 2012

*$4.5 * 10^{-10}$ с (2.2 GHz)*

*$1.7 * 10^{16}$ оп/с*

Время такта = $1/(\text{тактовая частота})$

Увеличение производительности компьютеров: за счет чего?

EDSAC, 1949 год

Cray Titan, #1, 2012

изменение

такт: $2 \cdot 10^{-6}$ с

$\approx 4.4 \cdot 10^3$

$4.5 \cdot 10^{-10}$ с (2.2 GHz)

произв.: 10^2 оп/с

$\approx 1.7 \cdot 10^{14}$

$1.7 \cdot 10^{16}$ оп/с

Время такта = $1/(\text{такты́вая частота})$

Увеличение производительности компьютеров: за счет чего?

EDSAC, 1949 год

Fugaku, #1, 2022

изменение

*такт: $2 * 10^{-6}$ с*

*$\approx 4.4 * 10^3$*

*$4.5 * 10^{-10}$ с (2.2 GHz)*

произв.: 10^2 оп/с

*$\approx 4.1 * 10^{15}$ ↑*

*$4.1 * 10^{17}$ оп/с*

Время такта = $1/(\text{тактовая частота})$

Почему суперкомпьютеры имеют столь высокую производительность ?

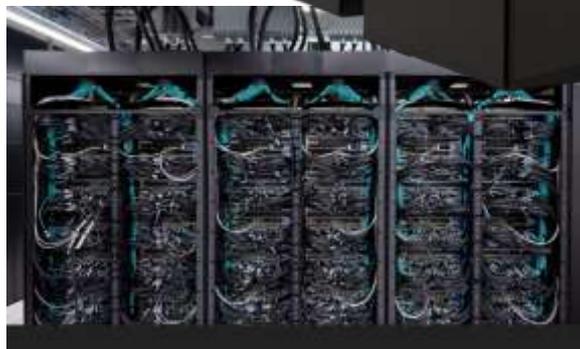
Два вывода.

- 1. Безусловно, без развития элементной базы не было бы такого прогресса в развитии компьютеров.*
- 2. Но основной вклад в увеличении производительности компьютеров – это развитие архитектуры, и прежде всего, за счет глубокого внедрения идей параллелизма.*

*Ожидаемый эффект от одновременной (параллельной) работы:
один сделает быстро, двое - быстрее, трое – еще быстрее...*

Суперкомпьютер Frontier, США

(#1 Top500 в 2022-2024 г.)



9 408 вычислительных узлов,
в каждом узле:
1 x CPUs (AMD "Trento", 64 ядра, 2GHz)
4 x GPU (AMD Radeon MI250X)
8 699 904 ядра

Производительность:
Пик (теория): **1.71 Eflop/s**
Тест Linpack: **1.2 Eflop/s** (70%)

Оперативная память = 9.2 PBytes
HDD = 716 PB (+37 PB на узлах)

22.7 MW (всего 29 MW) – 52.2 Gflops/Watt
(1 стойка – 62.68 Gflops/Watt)

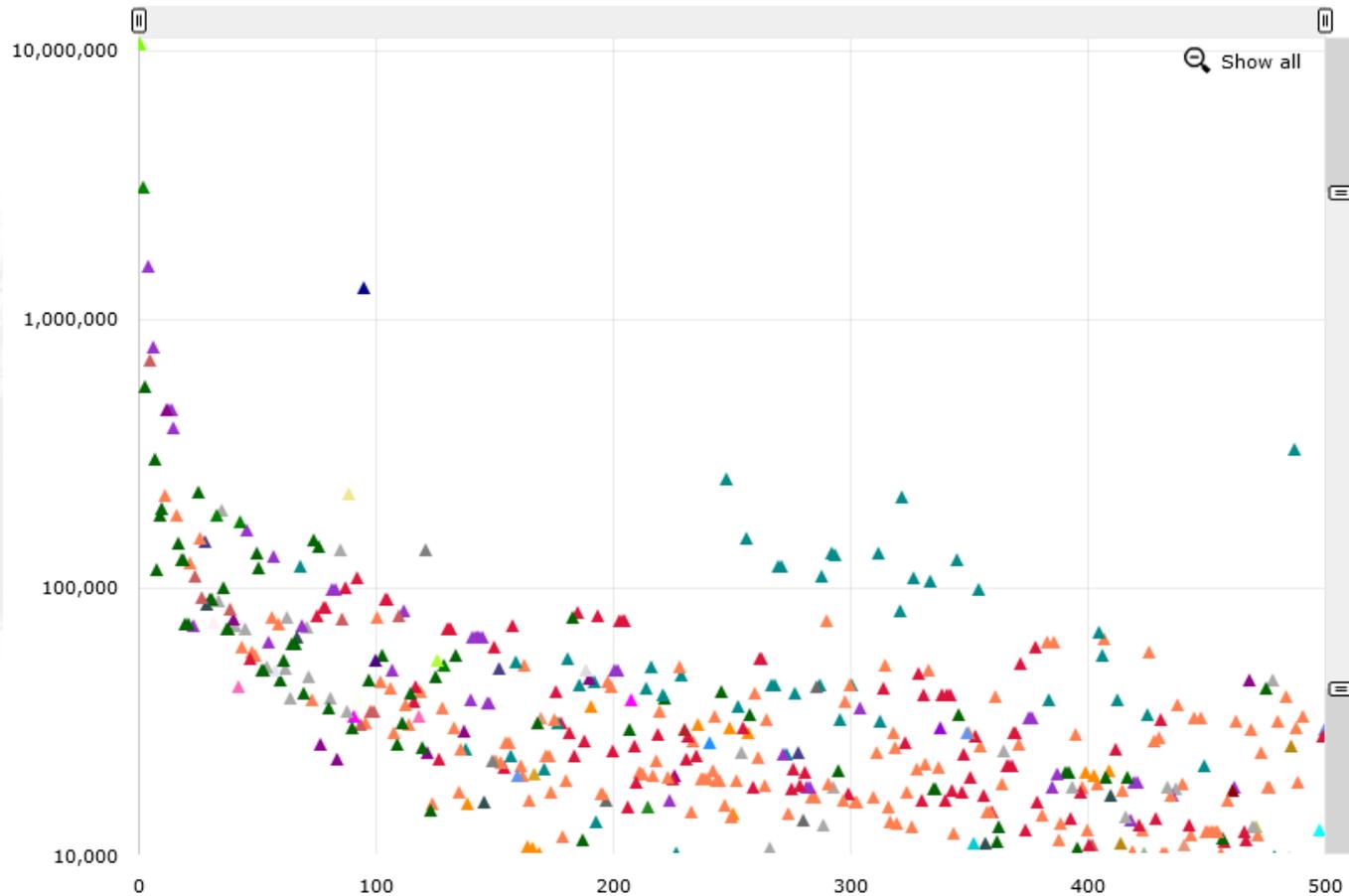
Годы, флопсы и степень параллелизма

(когда и как был достигнут очередной 'X'flops)

10^6	Mflops	1964 г.	CDC 6600	10 MHz	1 CPUs
10^9	Gflops	1985 г.	Cray 2	125 MHz	8 CPUs
10^{12}	Tflops	1997 г.	ASCI Red	200 MHz	9152 CPUs
10^{15}	Pflops	2008 г.	Roadrunner	3,2 GHz	122400 Cores
10^{18}	Eflops	2022 г.	Frontier	2,0 GHz	8699904 Cores

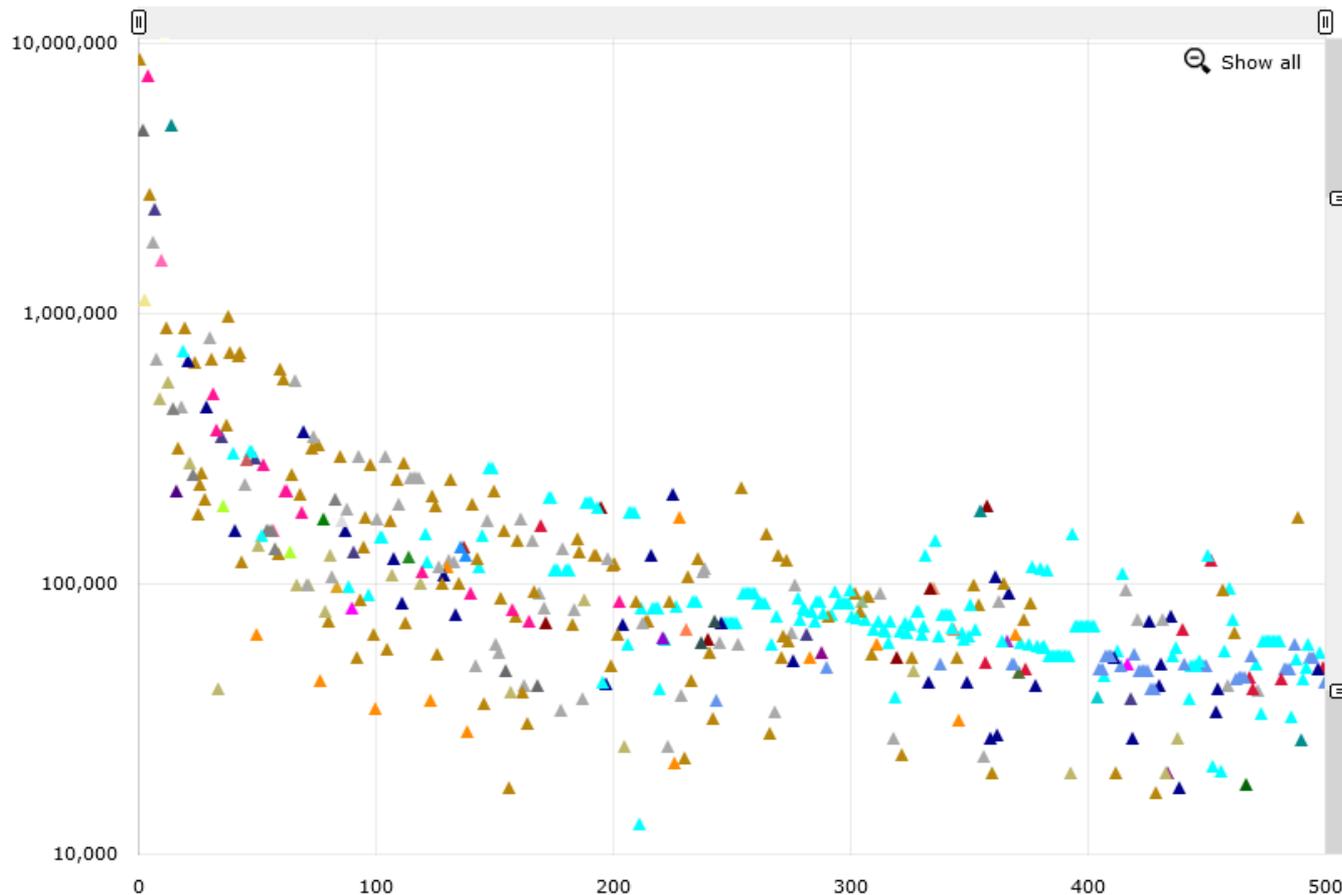
Число ядер в системах списка Top500

(<http://top500.org>, июнь, 2016 г.)



Позиция системы в списке Top500

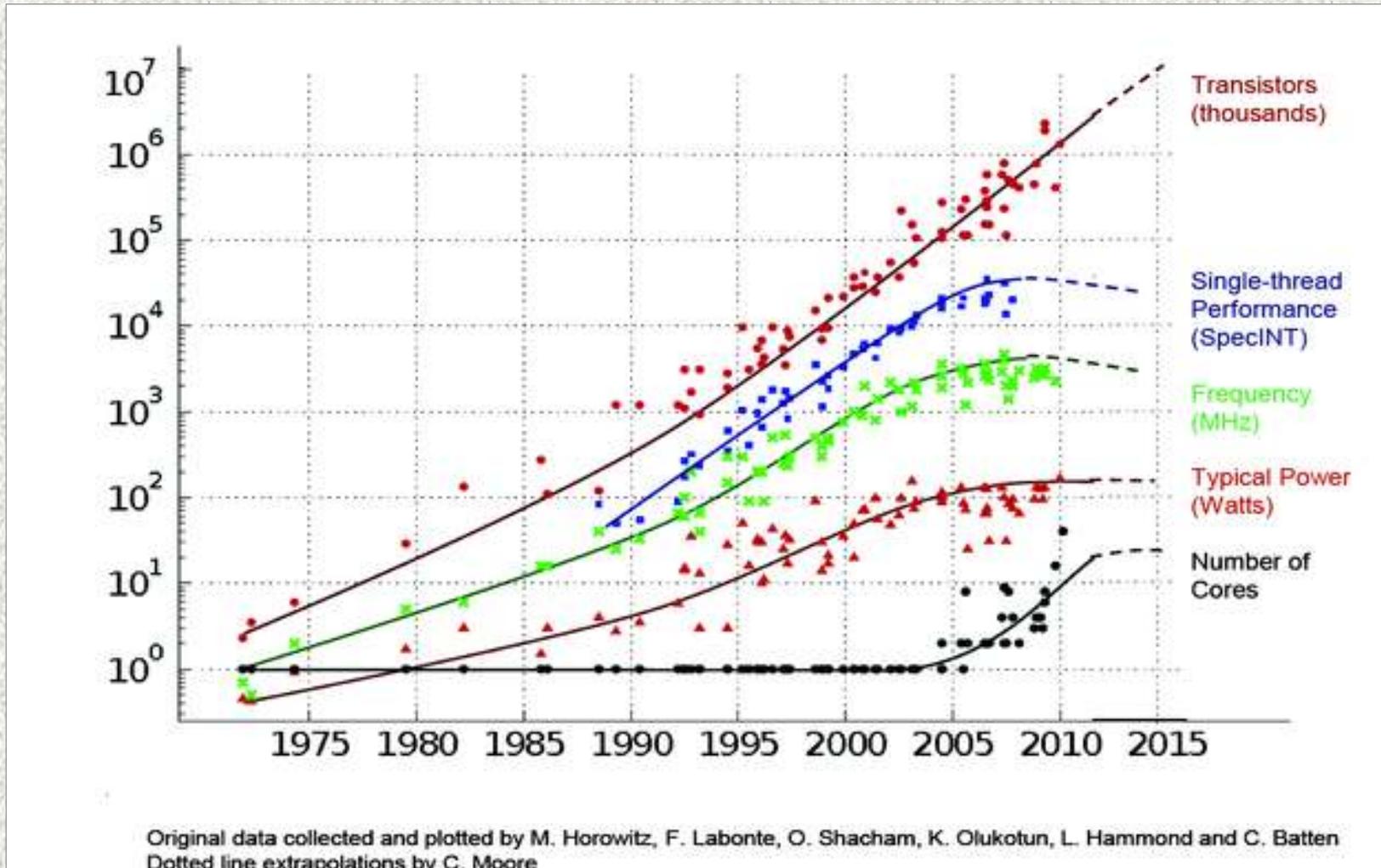
Число ядер в системах списка Top500 (<http://top500.org>, ноябрь, 2023 г.)



Позиция системы в списке Top500

Средняя степень параллельности в системах списка Top500 – 212 600 вычислительных ядер.

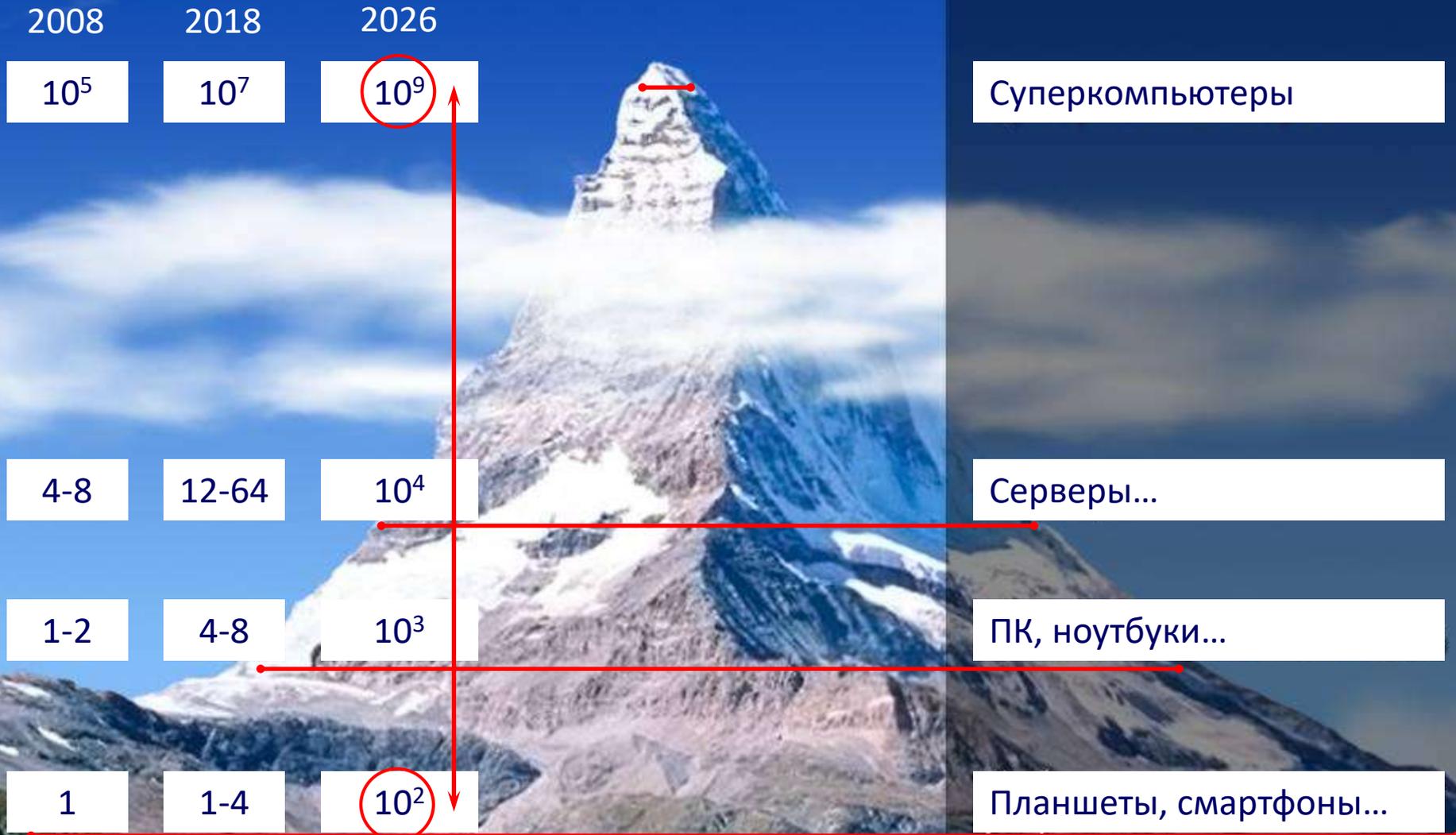
Изменение параметров микропроцессоров (остановка роста тактовой частоты)



Сегодня основной резерв для роста производительности процессоров – это увеличение числа ядер.

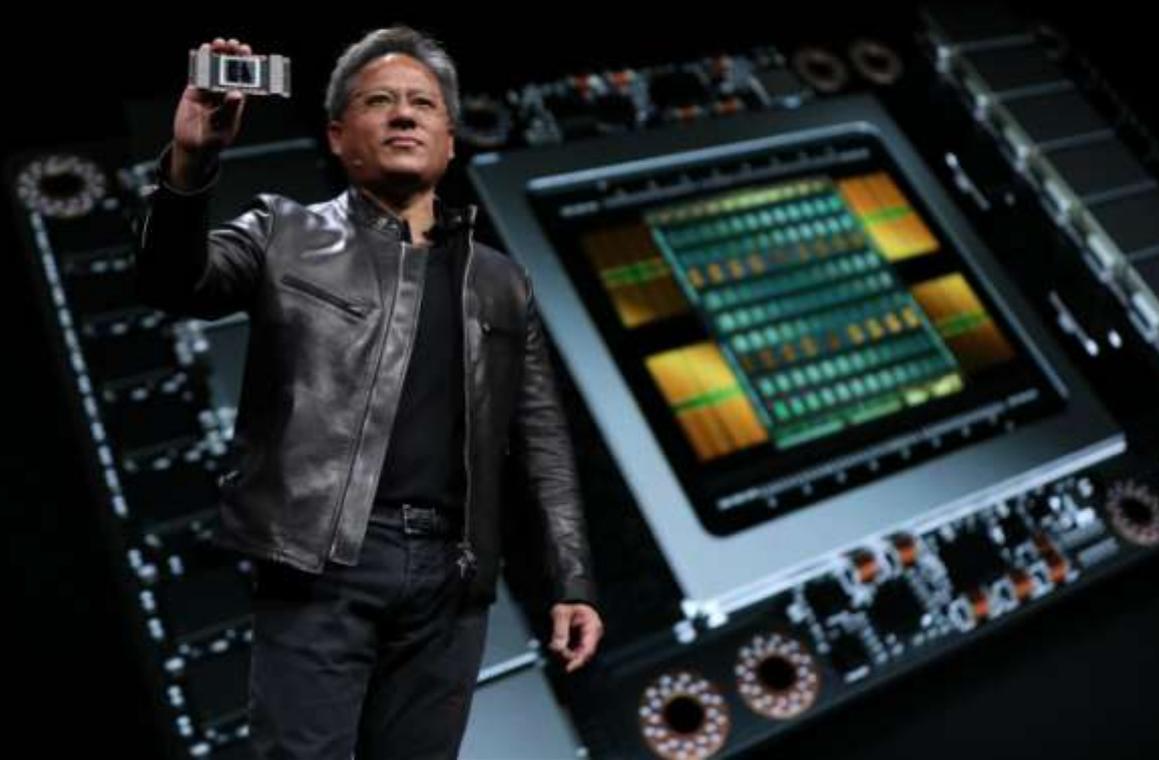
Параллельный компьютерный мир

Степень параллелизма



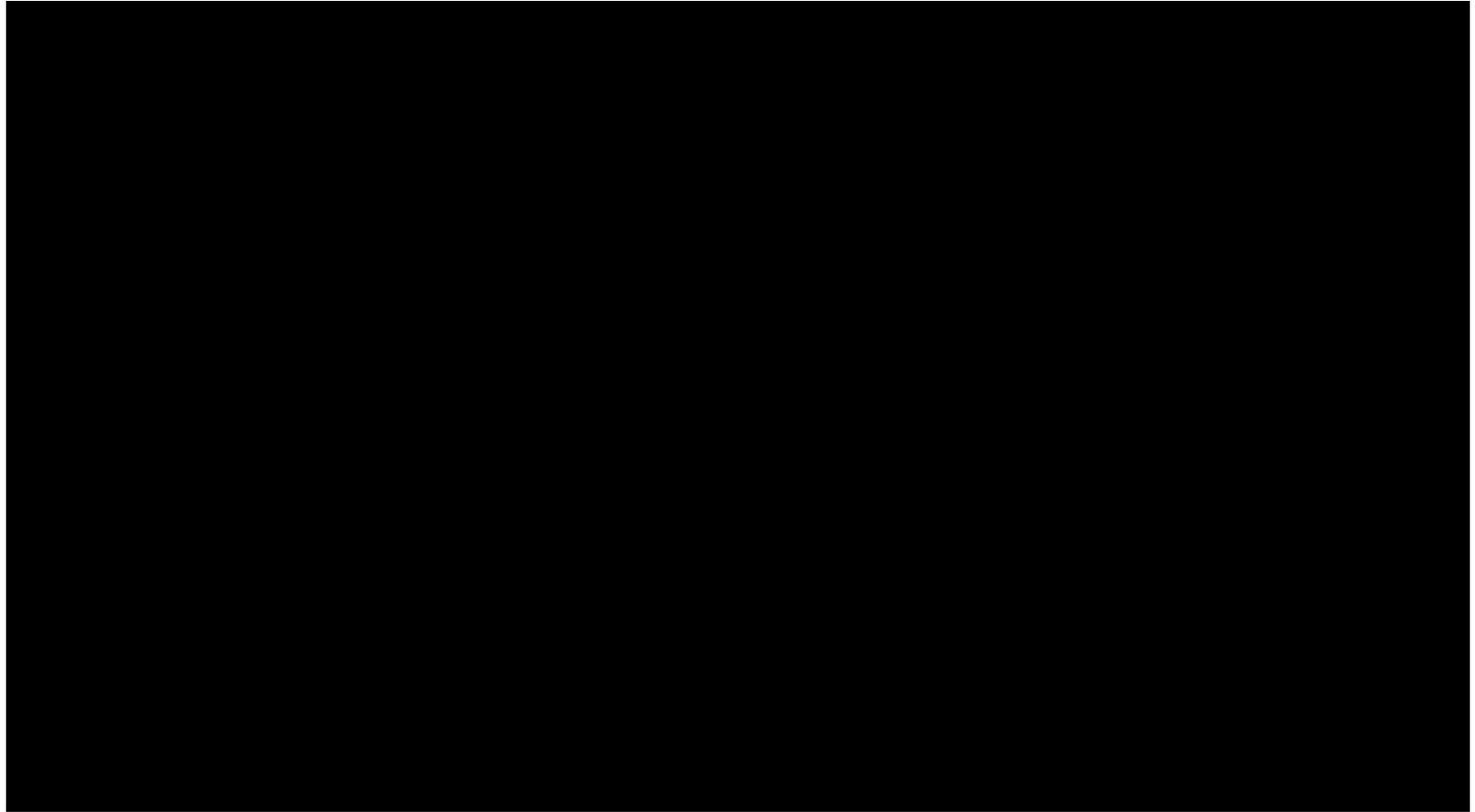
Доступный параллелизм: NVIDIA GPU

(Tesla V100, Volta)



- 5120 ядер,
- 7.5 Тфлопс на двойной точности,
- 15 Тфлопс на одинарной точности,
- 120 Тфлопс (tensor flops, FP16)

Последовательно vs Параллельно



*Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова
Факультет Вычислительной математики и кибернетики*

СУПЕРКОМПЬЮТЕРЫ И ПАРАЛЛЕЛЬНАЯ ОБРАБОТКА ДАННЫХ (часть 2)

Вл.В.Воеводин

***Зав.кафедрой Суперкомпьютеров и квантовой информатики ВМК МГУ,
Директор НИВЦ МГУ,
Директор Филиала МГУ в г.Сарове,
чл.-корр. РАН, д.ф.-м.н., профессор***

voevodin@parallel.ru

ВМК МГУ, 2024