

ОПАСНОЕ ОТСТАВАНИЕ В СУПЕРКОМПЬЮТЕРНЫХ ТЕХНОЛОГИЯХ НЕОБХОДИМО ПРЕОДОЛЕТЬ ОБСУЖДЕНИЕ НАУЧНОГО СООБЩЕНИЯ

© 2021 г. С. С. Попов (составитель)

Журнал “Вестник Российской академии наук”, Москва, Россия

E-mail: ssp1950@mail.ru

Поступила в редакцию 01.09.2021 г.

После доработки 10.09.2021 г.

Принята к публикации 20.09.2021 г.

Высокопроизводительные вычисления на суперЭВМ – одна из наиболее интенсивно развивающихся областей научных исследований, имеющих важные практические приложения. К сожалению, в сфере создания и использования суперкомпьютеров Россия в настоящее время значительно отстает от передовых стран. Реально ли преодолеть многолетнее отставание? В статье представлены материалы обсуждения этой проблемы на одном из заседаний президиума РАН. Оно было приурочено к 110-годовщине со дня рождения выдающегося советского учёного и организатора науки академика М.В. Келдыша, много сделавшего для развития вычислительной математики и её инструментария в Советском Союзе. Участники обсуждения подробно рассказали о больших возможностях, которые открывают вычислители высокой производительности в фундаментальных и прикладных научных исследованиях, многих отраслях промышленности и социальной сферы, представили своё видение путей преодоления отставания в критически важной для страны области.

Ключевые слова: суперЭВМ, микроэлектроника, элементная база, программное обеспечение, компьютерное моделирование, суперкомпьютеры петафлопсной и эксафлопсной производительности.

DOI: 10.31857/S0869587321120100

Заседание президиума РАН, на котором обсуждалась проблема высокопроизводительных вычислений, было приурочено к 110-летию со дня рождения выдающегося учёного, президента АН СССР с 1961 по 1975 г., основателя и первого директора Института прикладной математики АН СССР Мстислава Всеволодовича Келдыша.

Открывая обсуждение, президент РАН А.М. Сергеев отметил несколько важных моментов. За годы научной деятельности академика М.В. Келдыша произошли качественные изменения инструментария научного познания. Численный эксперимент, до конца 1970-х годов лишь дополнявший лабораторный, в последние десятилетия становится во многих областях знания ведущим, численное моделирование теперь очень часто предшествует лабораторному опыту. И эти кардинальные изменения произошли на глазах всего одного поколения учёных. Келдыш был тем человеком, который не только жил в эпоху быстрых перемен – он очень много сделал для того, чтобы эти перемены произошли. Мы живём в цифровую эпоху, и она наглядно демонстриру-

ет, что компьютеров слишком высокой производительности не бывает. Чем она выше, тем успешнее мы познаём мир, тем быстрее научные результаты материализуются в экономике.

После научного сообщения академика РАН **Б.Н. Четверушкина** и его ответов на вопросы аудитории (о них позднее) слово было предоставлено директору Института прикладной математики им. М.В. Келдыша РАН члену-корреспонденту РАН **А.И. Аптекареву**. Он рассказал об основных вехах биографии М.В. Келдыша, его роли в атомном и космическом проектах, в становлении отечественной вычислительной математики и техники.

В 1946 г. Келдыш, работавший тогда в ЦАГИ и по совместительству в Математическом институте им. В.А. Стеклова АН СССР, возглавил группу учёных, взявшую на себя все математические расчёты по атомной тематике. В 1950–1954 гг. при решении вопроса, какая конструкция термоядерного заряда – “слойка” или “труба” – более перспективна, именно группа Келдыша показала, что режим детонации в “трубе” находится на гра-

нице существования с возможностью его затухания. По записке Ю.Б. Харитона и Я.Б. Зельдовича для повышения эффективности расчётов было принято решение перейти от ручных клавишных машин “Мерседес” к машинам электрическим. За это отвечала группа Келдыша, а затем коллектив Института прикладной математики АН СССР, организованного по инициативе Мстислава Всеволодовича. Объединёнными усилиями трёх организаций профильного министерства была разработана ЭВМ “Стрела”. Одновременно Институт точной механики и вычислительной техники АН СССР в 1952 г. была создана первая в стране Быстродействующая электронно-счётная машина (БЭСМ), ставшая родоначальницей целого семейства вычислительных машин.

Показательна записка, датированная 1966 г. и направленная М.В. Келдышем председателю Совета министров СССР А.И. Косыгину. К ней прилагалась справка о развитии электронной вычислительной техники в нашей стране и за рубежом. Из справки следовало, что Советский Союз отставал в техническом уровне и количестве ЭВМ, что сдерживало широкое использование вычислительной техники в народном хозяйстве. “Учитывая важность вопроса, Академия наук считала бы целесообразным заслушать на Совете министров СССР доклад министра о мерах по ускорению развития этой области”, отмечалось в записке. Её автор предлагал кардинально увеличить количество уже имеющихся хорошо зарекомендовавших себя машин типа БЭСМ-6, одновременно совершенствуя их, а также создать новый комплекс высоконадёжных ЭВМ на интегральных схемах с широким диапазоном быстродействия, совместимых по программированию, оснащённых современными внешними устройствами, а также развитой системой обеспечения. Далее следовали и другие важные предложения. По материалам записки были приняты соответствующие меры.

Эти факты биографии Мстислава Всеволодовича Келдыша, подчеркнул в заключение своего выступления А.И. Аптекарев, свидетельствуют о том, что “как бы ни казалось драматическим отставание, в нашей стране это часто бывает, нельзя оставлять усилий, чтобы переломить ситуацию”.

Возвращаясь к нынешним реалиям, охарактеризованным в научном сообщении академика Б.Н. Четверушкина, необходимо отметить, что приведённые им тревожные факты вызвали неподдельный интерес членов президиума РАН, о чём можно судить по заданным докладчику вопросам. Сколько суперкомпьютеров и какой производительности необходимо иметь нашей стране? Какова предположительная стоимость гипотетического их парка? Машины петафлопсного класса предполагается приобретать за границей

или создавать самим? Сколько времени на такую разработку потребуется и осуществима ли она в нынешних условиях? Отвечая на эти вопросы, научный руководитель ИПМ им. М.В. Келдыша РАН высказал мнение, что в настоящее время страна остро нуждается в линейке суперкомпьютеров, состоящей из 5–10 машин производительностью 30 петафлопс. Цена вопроса – примерно 100 млрд рублей, если соотнести стоимость такой линейки с аналогичной в Германии. Суперкомпьютерные центры необходимо рассредоточить по территории страны. При появлении в европейской части России, в Сибири и на Дальнем Востоке десятка машин петафлопсного класса потребуются координационный совет для обмена опытом, решения возникающих общих проблем, в том числе оперативного использования свободных мощностей. При переходе к машинам эксафлопсного класса неизбежно столкновение с проблемой отказоустойчивости этой сложнейшей техники, её также придётся решать. Но одна машина, как считает учёный, должна служить своего рода экспериментальным реактором, на котором будет вестись поиск новых решений и этот поиск Академия наук должна взять на себя.

На первом этапе, пока в нашей стране не налажено производство передовой элементной базы, придётся, по мнению академика Четверушкина, закупать импортную и на её основе наращивать вычислительные мощности для решения текущих задач, а их много и в промышленности, и в социальной сфере, и в различных областях фундаментальных и прикладных научных исследований. Другого пути нет, потому что, хотя государство недавно и решилось вложить многомиллиардные средства в развитие отечественной микроэлектроники, для постройки заводов, сегодня отсутствующих в России, выхода отрасли на мировой уровень потребуются годы и годы. К тому же создание собственной элементной базы должно в значительной мере опираться на использование методов математического моделирования. Без большого объёма вычислений, то есть без использования суперкомпьютеров, такое моделирование нереализуемо.

Почему же представители властных структур, принимающие решения о выделении государственных средств на те или иные нужды, со скепсисом относятся к предложениям научного сообщества, полагая, что учёным новая техника нужна лишь для удовлетворения свойственного им природного любопытства, что в стране нет пока задач, требующих вычислительных мощностей высочайшей производительности? По словам Б.Н. Четверушкина, это заблуждение объясняется некомпетентностью, непониманием, а в результате игнорированием мировых тенденций. И такая некомпетентность дорого обходится стране. К примеру, авиационные конструкторы

сегодня не могут просчитать с достоверностью отказоустойчивость критически важных узлов проектируемого самолёта, условно говоря, взлетит он или нет, а если взлетит, то насколько велика вероятность аварии при отказе одного из узлов. Так что если рассматривать проблему высокопроизводительных вычислений шире, то речь идёт о безопасности нашей страны, о безопасности её граждан.

После ответов академика Б.Н. Четверушкина на вопросы аудитории и выступления члена-корреспондента РАН А.И. Аптекарева слово для первого из содокладов было предоставлено директору Института системного программирования им. В.П. Иванникова РАН академику РАН А.И. Аветисяну. Он поддержал предложения, содержащиеся в докладе академика Б.Н. Четверушкина. Хотя ИСП РАН специализируется на разработках в области операционных систем, компиляторных технологий, параллельных и распределённых вычислений, анализе и обработке больших объёмов данных, семантическом поиске, а математическим моделированием занимается в минимальной степени, его сотрудники, по словам Аветисяна, заинтересованы в повышении производительности вычислительных машин. Без установок, обладающих соответствующими мощностями, сегодня невозможно разрабатывать и развивать как системное программное обеспечение, так и пакеты масштабируемых и надёжных прикладных программ. В качестве доказательства оратор привёл пример из области медицинских исследований, которые ИСП РАН ведёт совместно с Первым Московским государственным медицинским университетом им. И.М. Сеченова. Объём данных ста миллионов исследований электрокардиограммы составляет примерно 20 терабайт (1 терабайт – 10^{12} байт), рентгенограммы – около 1.5 петабайт (1 петабайт – 10^{15} байт), магнитно-резонансной томографии – примерно 20 петабайт. При этом имеется в виду, что для корректного анализа только одной патологии необходимо иметь более 1 млн результатов медицинских исследований. Полученные данные нуждаются в хранении и обработке с применением инструментов искусственного интеллекта. При решении таких трудоёмких задач не обойтись без суперкомпьютера петафлопсной производительности, как не обойтись без машины подобного класса при разработке языковых моделей, анализе текстов с использованием искусственного интеллекта. Обучение нейронной сети требует вычислительных систем мощностью от 5 до 50 петафлопс. Нельзя забывать и о важности программного обеспечения, коммуникационной среды с максимальной степенью защиты данных. По мнению А.И. Аветисяна, импортозамещение в этой области, сопровождающееся переходом на отечественное системное программное обеспечение,

возможно и необходимо. Возглавляемый им институт участвует в этих работах.

Проблема снижения размерности сеточных аппроксимаций¹ – такова тема содоклада, который представили научный руководитель ФНЦ НИИ системных исследований РАН академик РАН В.Б. Бетелин и директор Сургутского филиала того же института доктор физико-математических наук В.А. Галкин. Продолжая тему, затронутую А.И. Аптекаревым, В.Б. Бетелин в самом начале своего выступления акцентировал внимание на том, что М.В. Келдыш постоянно занимался решением именно практических задач, его научные работы, в том числе и по высокопроизводительным вычислениям, связаны с их реализацией. Поэтому, по мнению академика Бетелина, так важно участие в подобных обсуждениях представителей промышленности.

Переходя к заявленной теме, Владимир Борисович отметил, что технологии моделирования сложных физических процессов в значительной мере основываются на использовании не только суперЭВМ высокой производительности, но и, огульно говоря, сеточных аппроксимаций большой размерности. Например, гидродинамическое моделирование месторождения с 1000 скважин требует сетки, содержащей порядка 1.5 млрд ячеек, и суперЭВМ производительностью более 0.5 Пфлопс. Прогресс в этих технологиях в значительной степени определяется увеличением размерности сеточных аппроксимаций и, как следствие, ростом требований к производительности и стоимости суперЭВМ.

Производительность таких машин в настоящее время напрямую зависит от технологического уровня производства их основных микроэлектронных компонентов – микропроцессоров, памяти и т.д. По сути дела, прогресс в вычислительных технологиях на основе сеточных аппроксимаций большой размерности определяется прогрессом в области микроэлектронных технологий. Отставание в этой области влечёт за собой отставание в технологиях моделирования на упомянутой основе. Отсюда следует, что уменьшение размерности сеточных аппроксимаций обеспечит снижение как требований к технологическому уровню основных микроэлектронных компонентов суперЭВМ, так и к её стоимости. Иными словами, если научиться снижать размерные сетки тем или иным способом, то вполне реально вести расчёты на менее дорогих и менее производительных машинах, чем суперЭВМ нового поколения.

¹ Аппроксимация – метод вычислений, используемый в математике и заключающийся в том, что сложные математические объекты при расчётах и других исследованиях заменяются более простыми, но максимально похожими.

Решением этой проблемы занимается коллектив Сургутского филиала НИИ системных исследований. По словам академика Бетелина, в качестве возможной альтернативы сеточным аппроксимациям большой размерности здесь разрабатываются кинетический метод решения дифференциальных уравнений (он представляет собой оригинальные вариации метода Монте-Карло) и методы “склейки” точных решений на грубых сетках, впервые реализованные при расчётах, связанных с созданием термоядерного оружия в 1950-х годах. Показано, что на данном классе задач применение этих методов позволяет на 1–2 порядка сократить размерность расчётной сетки и требования к производительности суперЭВМ при сохранении точности вычислений.

Научный руководитель Центрального аэрогидродинамического института им. профессора Н.Е. Жуковского академик РАН **С.Л. Чернышёв**, посвятивший свой содоклад проблемам суперкомпьютерного моделирования в аэрокосмических приложениях, упомянул, что академик М.В. Келдыш полтора десятилетия, с 1931 по 1946 г., работал в ЦАГИ. Память о нём в институте чтят: на одном из зданий есть его барельеф, рабочий кабинет Мстислава Всеволодовича стал мемориальным.

Роль вычислительных технологий в разработке современной аэрокосмической техники постоянно повышается. Надёжные средства численного расчёта позволяют существенно снизить стоимость и продолжительность экспериментальных работ, в частности при проведении сертификационных испытаний, а также дополнить экспериментальные результаты более глубоким анализом физических процессов, включая протекающие в реактивных двигательных установках и при взаимодействии обтекаемого тела с потоком газа.

За последние 10 лет в развитии вычислительных методов происходит переход от использования отдельных оптимальных решений по дисциплинам (таким как аэродинамика, прочность, аэроакустика и др.) к оптимальным междисциплинарным решениям. Идёт постоянное усложнение применяемых моделей течений – от упрощённых потенциальных или невязких до описываемых полными уравнениями Навье–Стокса. Есть успешные примеры решения полных уравнений Навье–Стокса методом прямого численного моделирования. По мнению академика Чернышёва, эти сложнейшие задачи требуют колоссальных вычислительных ресурсов, которые сегодня в значительной степени ограничены мощностью ЭВМ.

К примеру, новые методы суперкомпьютерного моделирования при проектировании аэродинамической компоновки российского пассажирского самолёта МС-21 позволили достичь высо-

кого аэродинамического совершенства на толстом крыле большого удлинения – достигнут уровень качества $K = 18.2$, что является главным показателем конкурентоспособности нового отечественного авиалайнера по сравнению с самолётами аналогичного класса компаний Боинг и Аэрбас. Это потребовало многомесечных расчётов для решения прямой и обратной задачи аэродинамического проектирования при ограниченном наборе оптимизируемых параметров на ЭВМ “Ломоносов” Московского государственного университета.

На основе междисциплинарного подхода сегодня возможно надёжное определение аэродинамических характеристик узлов самолёта, включая фюзеляж, механизированное крыло с предкрылком и закрылком, пилоны, мотогондолы, крепления предкрылка и обтекатели механизмов выдвижения закрылков, вихрегенераторы на мотогондолах, а также моделирование струи двигателей. При этом в задаче обтекания решаются уравнения Рейнольдса в частных производных в трёхмерной постановке. Для подобного расчёта аэродинамики самолёта в сложной взлётно-посадочной конфигурации, с учётом работы силовой установки, требуются сетки с количеством ячеек не мене 100–150 млн, время расчёта одной точки может составлять несколько дней. Таков вычислительный уровень, достигнутый на имеющихся в России суперЭВМ, констатировал Сергей Леонидович.

Современные задачи в аэрокосмических приложениях – одни из самых ресурсозависимых. Прогресс в моделировании сложных течений около аэроупругих летательных аппаратов (ЛА) при нестационарном движении с учётом реальных свойств газа, а тем более оптимизация формы ЛА и режимов его полёта, напрямую зависит от мощности используемых суперкомпьютеров. В силу этих причин потребность в наращивании вычислительных мощностей и переход на суперЭВМ мощностью в десятки петафлопс становятся в нашей стране всё острее.

По словам академика Чернышёва, внедрение суперкомпьютерных технологий в авиастроении позволяет перейти на новую систему проектирования и поддержания жизненного цикла летательных аппаратов. Для новой технологии проектирования характерно использование трёхмерного моделирования с имитацией реальных условий эксплуатации без упрощений и допущений, создание дискретных моделей не с десятками миллионов, а с сотнями, вплоть до миллиарда ячеек, решение задач с реальными граничными условиями для реальных условий эксплуатации и, наконец, проведение преимущественно модельных виртуальных, а не физических экспериментов. Научный руководитель ЦАГИ особо отметил не-

обходимость компьютерного моделирования геометрии самолёта с учётом аэродинамики, прочности, аэроупругости, аэроакустики и других характеристик.

Цифровые двойники летательных аппаратов, виртуальные испытания и сертификация — это ближайшее будущее самолётостроения или частично уже настоящее. Внедрение суперкомпьютерных технологий позволяет исключить необходимость доработок узлов самолёта после начала его серийного производства, снизить технические риски, повысить информативность решения инженерных задач, обеспечить возможность создания обширной базы знаний для развития на перспективу.

“Внедрение суперкомпьютерных технологий — важнейшая государственная задача, — подчеркнул, завершая своё выступление, академик С.Л. Чернышёв. — Речь идёт о переходе к новой парадигме, когда вычислительные методы частично должны заменить физический эксперимент. Использование новых методов невозможно без суперкомпьютеров петафлопсного класса”.

“Чем объясняется тот факт, что отечественные авиационные конструкторские бюро довольствуются при расчётах ограниченными вычислительными ресурсами, не говорят о том, что им нужны суперпроизводительные компьютеры?” — задал вопрос выступавшему академик РАН А.М. Сергеев.

“Дело в том, что по бедности своей большинство российских КБ используют коммерческие коды², — констатировал С.Л. Чернышёв, — а их применение в решении задач не требует очень уж больших вычислительных мощностей — достаточно машин терафлопсного класса. Но в этом случае моделирование страдает приблизительностью, и сравнение результатов такого моделирования с экспериментом крайне необходимо. Если сравнение проигнорировать, последствия могут оказаться печальными. Например, проводя эксперимент в аэродинамической трубе ЦАГИ с некой моделью летательного аппарата, разработанного конструкторами одного из КБ, был зафиксирован глобальный отрыв пограничного слоя на входе в воздухозаборник скоростного летательного аппарата. Конструкторы, не использовавшие мощных вычислителей, не смогли предсказать вероятность такого отрыва, что в будущем чревато катастрофой. Вот почему так важна роль науки. КБ не способны разрабатывать мощные вычислительные методы, это задача академических и отраслевых институтов. Но помимо повышения мощности вычислительных систем, актуальны и

другие задачи — создание удобных интерфейсов, эффективное управление сетью суперкомпьютеров, обеспечение надёжной защиты линий связи. Резюмируя, С.Л. Чернышёв выразил пожелание объединять усилия всех организаций, заинтересованных в решении обсуждаемых нами проблем.

Директор Научно-исследовательского вычислительного центра МГУ им. М.В. Ломоносова член-корреспондент РАН **В.В. Воеводин** начал свой доклад с констатации грустного факта: российские учёные лишены возможности использовать передовые вычислительные технологии (а это инструмент, без которого не обойтись в современной науке) в той мере, в какой их используют зарубежные коллеги. Но тем, кто работает в МГУ, повезло: ещё в начале двухтысячных годов по инициативе ректора университета академик РАН В.А. Садовничего здесь создан самый мощный в научно-образовательном сообществе России вычислительный комплекс, причём он постоянно развивается, его мощности востребованы всеми факультетами университета, ими пользуются также институты Академии наук, образовательные и другие организации.

Комплекс решает множество разнообразных задач. Владимир Валентинович в качестве примера привёл исследования в области медицины. Суперкомпьютер оказался незаменим на начальной стадии разработки лекарств. Пандемия COVID-19 выявила востребованность скрининга больших баз данных о молекулах в целях поиска веществ, связывающихся с белками-мишенями и блокирующих размножение коронавируса SARS-Cov-2. (Уже появились публикации в научных журналах о суперкомпьютерном скрининге более миллиона различных молекул. Сформированы базы данных, содержащие сведения о миллиарде молекул.) Такие базы требуют больших вычислительных мощностей, а сам процесс формирования баз данных длителен. Так, докинг³ одной молекулы на одном ядре занимает примерно 10^1 – 10^2 мин, для скрининга 10^6 молекул требуется примерно 10^4 – 10^5 ядер.

Московский государственный университет, Государственный научный центр вирусологии и биотехнологии “Вектор” и Воронежский государственный университет заключили соглашение о совместных научных исследованиях для создания противовирусных препаратов прямого действия на SARS-Cov-2. Научно-исследовательский вычислительный центр МГУ с использованием кластера “Ломоносов-2” провёл докинг десятков тысяч органических молекул. В результате найдены

² Коммерческий код — совокупность условных обозначений: цифровые и буквенные шифры, применяемые в документации и переписке в целях экономии времени, расходов и для удобства обработки средствами компьютерной техники.

³ Молекулярный докинг — метод молекулярного моделирования, позволяющий предсказать наиболее выгодную для образования устойчивого комплекса ориентацию и конформацию одной молекулы (лиганда) в сайте связывания другой (рецептора).

и подтверждены в экспериментах, проведённых сотрудниками “Вектора”, ингибиторы главной протеазы коронавируса и подавляющие с высокой селективностью репликацию этого вируса в культуре клеток.

Директор Научно-исследовательского вычислительного центра МГУ привёл и другие примеры использования возможностей суперкомпьютера. В их числе – разработка ультразвукового томографа для диагностики рака молочной железы. Задача эта настолько трудоёмка, что требует петафлопсных компьютерных мощностей. Ещё одна перспективная область применения суперЭВМ – квантовая фотофизика и фотохимия живых систем. Сотрудниками университета разрабатываются новые подходы к управлению процессами поглощения, преобразования и передачи энергии в фотоактивных биосистемах на квантовом уровне с использованием суперкомпьютерного моделирования.

В.В. Воеводин поддержал мнение академика Б.Н. Четверушкина о необходимости повышения мощностей вычислительной техники в России, приведя в пример Японию, где введён в эксплуатацию самый быстрый и мощный в мире суперкомпьютер “Фугаку”. В 2021 г. суперЭВМ мощностью 0.5 эксафлопс будет создана в Финляндии. Востребованность суперкомпьютерных ресурсов в России огромна, отставание в этой области от общемировых тенденций приобрело опасный характер, поэтому в нашей стране в минимальные сроки необходимо создать национальную суперкомпьютерную инфраструктуру.

Автор ещё одного содоклада, директор Института механики и математики им. Н.Н. Красовского УрО РАН член-корреспондент РАН **Н.Ю. Лукоянов** рассказал участникам заседания об Уральском суперкомпьютерном центре коллективного пользования, работающем на базе ИММ УрО РАН. Для обновления вычислителей Центра в 2010 г. Уральским отделением РАН была принята программа по созданию к 2015 г. суперкомпьютера “Уран” петафлопсной производительности. В 2012 г. уральский вычислительный кластер даже попал в рейтинг Топ-500 суперкомпьютеров мира. К сожалению, программа не была завершена. В 2013 г. Академия наук перестала быть распорядителем средств для академических институтов, финансирование программы прекратилось. Правда, в 2016 г. ФАНО выделило на продолжение модернизации кластера определённые средства, а с 2019 г. Центр участвует в программе обновления приборной базы в рамках федерального проекта “Развитие передовой инфраструктуры для проведения исследований и разработок в Российской Федерации”. Однако получаемые средства уходят в основном на поддержание вычислителя в работоспособном состоянии, о каком-то

существенном развитии говорить не приходится, признаёт Николай Юрьевич.

Производительность “Урана” составляет сегодня около четверти петафлопса, это немного даже по российским меркам (18-е место в рейтинге Топ-50 суперкомпьютеров стран СНГ). Тем не менее “Уран” востребован, он загружен круглосуточно, семь дней в неделю. Его постоянными пользователями являются 17 институтов УрО РАН, а также Уральский федеральный и Удмуртский государственный университеты. К кластеру обеспечен доступ через Интернет из любой точки мира, налажена служба технической поддержки пользователей, создана информационно-телекоммуникационная сеть, связывающая научные организации Уральского региона. В основном суперкомпьютер используется для проведения фундаментальных научных исследований и решения прикладных задач гражданской тематики. Н.Ю. Лукоянов привёл несколько примеров.

В ИММ УрО РАН суперкомпьютер применяется для обработки данных дистанционного зондирования земной поверхности; решения задач, связанных с математическим обеспечением систем управления движущимися объектами. Учёные-химики производят расчёты с целью получения новых устойчивых соединений с заданными свойствами. Совместно с физиологами исследуются математические модели сердца. Экологи анализируют ДНК микроорганизмов.

В 2019 г. на Урале был создан Межрегиональный научно-образовательный центр “Передовые производственные технологии и материалы”, планируется запустить ряд новых амбициозных проектов. В их числе оратор назвал разработку новых методов в области искусственного интеллекта, моделирование и виртуальное исследование свойств новых материалов, моделирование ракетно-космического комплекса с многоразовой ракетой-носителем и универсальной космической платформой, разработку прототипа нового малогабаритного турбореактивного двигателя для беспилотных летательных аппаратов, технологий и материалов для создания жидкосолевых реакторов, промышленную реализацию замкнутого ядерного топливного цикла на базе реакторов на быстрых нейтронах, создание новых технологий в реконструктивной хирургии и экспресс-имплантации. Осуществление этих проектов вряд ли возможно без вычислительной поддержки, полагает директор ИММ УрО РАН, отмечая две тенденции. Позитивная: налицо востребованность суперкомпьютеров со стороны академических институтов и университетов, наблюдается оживление интереса промышленности и инновационных компаний к высокопроизводительным вычислениям. Есть кадры, способные развивать и обслуживать суперкомпьютерную технику, нала-

живать её эффективное использование. Негативная: имеющихся вычислительных мощностей явно не хватает, они не соответствуют передовому мировому уровню, к тому же значительная часть вычислителей, особенно региональных, физически и морально устарела. Ограниченность инструментария уже на старте сужает масштабность планируемых задач. Регионы нуждаются в новой программе переоснащения современными супервычислителями мощностью в десятки петафлопс.

Очень важный вопрос, касающийся затрат на эксплуатацию суперЭВМ, источников оплаты машино-времени, задал докладчику академик А.М. Сергеев. Отвечая на него, Н.Ю. Лукоянов отметил, что в рамках государственного задания институты и университеты, подведомственные Минобрнауки, выполняют работы на “Уране” без оплаты использования его мощностей. Если расчёты производятся в рамках хозяйственных договоров или грантов, то есть не по государственному заданию, они оплачиваются заказчиком. “Допустим, государство выделило 10 млрд рублей на приобретение машины мощностью 30 петафлопс. Возможна ли её самоокупаемость?” – в продолжение первого вопроса спросил А.М. Сергеев. “С вычислителями такой мощности в России никто пока не работал, но можно предположить, что машина подобного класса с учётом её высокого энергопотребления, затрат на оплату работы персонала вряд ли окупаема, по крайней мере в первые годы своего функционирования”, – заметил Н.Ю. Лукоянов, добавив, что самые мощные супер-ЭВМ рейтинга Топ-500 используются в научных целях для проведения вычислительных экспериментов, то есть для приобретения нового знания, что связано с немалыми затратами. “Но за научные исследования кто-то должен платить, – резонно заметил А.М. Сергеев, – в нашем случае – Министерство науки и высшего образования РФ. Расходы на эксперименты, в которых не обойтись без суперкомпьютеров, необходимо предусмотреть заранее. Вопрос выделения дополнительных средств на поддержание этой дорогостоящей техники нуждается в серьёзном обсуждении с коллегами из Минобрнауки”.

“Суперкомпьютерное климатическое моделирование в России” – ещё один содоклад, заслушанный участниками заседания. Его представили ведущий научный сотрудник Института вычислительной математики им. Г.И. Марчука РАН доктор физико-математических наук **Е.М. Володин**, главные научные сотрудники ИВМ РАН академик РАН **В.П. Дымников** и член-корреспондент РАН **В.Н. Лыков**, выступивший на заседании президиума РАН от имени авторского коллектива. Сославшись на климатическую доктрину России, в которой говорится о том, что глобальное изменение климата предполагает необходимость заблаговременного формирования

всеобъемлющего и взвешенного подхода государства к проблемам климата и смежным вопросам на основе комплексного научного анализа экологических, экономических и социальных факторов, Василий Николаевич отметил значимость научно обоснованных прогнозов глобальных климатических изменений, подчеркнув, что проблема эта междисциплинарная, а язык обсуждения проблемы – математика. С её позиций климат определяется как статистический ансамбль состояний, принимаемый климатической системой, под которой обычно понимаются взаимодействующие между собой атмосфера, океан, суша, криосфера, биосфера за достаточно большой интервал времени.

Сложность объекта моделирования требует больших вычислительных ресурсов. Более того, в настоящее время происходит переход от климатических моделей, цель которых – воспроизведение и прогноз чисто термодинамических характеристик, к моделям Земной системы. Последние расширяют понятие “климатическая система” как за счёт рассмотрения дополнительно геосфер (литосферы, гелиосферы и др.), так и за счёт описания более широкого круга физических, химических, биологических и социальных взаимодействий. Крайне необходима разработка отечественных моделей, которые могут быть использованы для получения независимых оценок (“независимых” здесь ключевое слово) состояния Земной системы как в глобальном, так и в региональном масштабе, ну и, разумеется, для понимания влияния изменений климата на отрасли хозяйства, подверженные влиянию климатических факторов.

Оратор подчеркнул, что климатическая модель, создаваемая в ИВМ РАН, – единственная от России, участвующая в Международном проекте сравнения климатических моделей (CMIP – Coupled Model Intercomparison Project), разрабатываемых в разных странах. Этот проект позволяет приблизиться к наиболее корректному описанию современного климата. Количество численных экспериментов с каждой новой фазой проекта CMIP стремительно растёт, причём в сравнительном анализе участвуют только модели, удовлетворяющие усложняющимся требованиям (в их числе высокое пространственное разрешение, включение описания новых физических, химических и биологических процессов). Характерно, что практически каждый из участвующих в проекте зарубежных коллективов имеет собственный суперкомпьютер, используемый исключительно для моделирования Земной системы. В.Н. Лыков отметил, что, несмотря на большие трудности с вычислительными ресурсами в стране, ИВМ РАН продолжает участвовать в проекте CMIP.

Совершенствование суперкомпьютерных систем и технологий ставит проблему разработки моделей с типичным размером конечно-разностной сетки, достаточным для описания мезомасштабных (в диапазоне 2–200 км) негидростатических процессов на земном шаре и пригодных для исследования актуальных, в том числе для России, региональных проблем климатической изменчивости.

За последние 40 лет производительность суперкомпьютеров возросла по порядку величины в 10^9 раз (от 10^6 до 10^{15} оп./сек). Примерно также в 10^9 раз выросли вычислительные затраты на проведение численных экспериментов по моделированию климата и его изменений (вследствие увеличения пространственно-временного разрешения и перехода к длительным, на сотни и тысячи лет, интегрированиям). На повестке дня – проведение ансамблевых расчётов (размер выборки порядка 10^2 – 10^3 экспериментов), что уже сейчас требует использования петафлопсных, а в будущем – эксафлопсных, вычислительных систем.

С содокладом “Метод молекулярной динамики: виртуальный дизайн новых химических соединений и основанных на них материалах” выступил заведующий лабораторией теории и моделирования полимерных систем Института высокомолекулярных соединений РАН член-корреспондент РАН **С.В. Люлин**.

Предваряя основную тему, Сергей Владимирович пояснил для неспециалистов: молекулярная динамика – это метод компьютерного моделирования, основанный на одновременном решении множества уравнений классической физики – уравнений движения Ньютона, каждое из которых может быть написано для отдельного атома исследуемой системы (атомистически-детальные модели, позволяющие точно учитывать движение каждого атома). В среднем около 50% вычислительных ресурсов суперкомпьютера, используемого в научных целях, тратится на моделирование методом молекулярной динамики.

Моделирование с использованием высокопроизводительных систем критически важно для разработки и исследования новых материалов, включая полимерные нанокompозиты – перспективные инновационные материалы, востребованные в различных областях промышленности. Характерное время структурной организации, например, кристаллизации простых полимеров (типа полиэтилена) лежит в диапазоне от микро- до миллисекунд.

В настоящее время использование суперкомпьютера “Ломоносов-2” (наиболее производительного отечественного суперкомпьютера, доступного для фундаментальных исследований) позволяет в течение одного месяца осуществлять моделирование 1–10 микросекунд процесса фор-

мирования реального полимерного нанокompозита с характерным размером порядка 10 нанометров. Моделирование подобной системы с длительностью процессов, измеряемых миллисекундами, требует от 100 до 1000 месяцев или от 10 до 100 лет. То есть учёный в течение своей жизни может не дожидаться результатов. Такая же ситуация в биологических задачах, важных для медицины: фолдинг белка характеризуется длительностью несколько миллисекунд. По словам С.В. Люлина, решение подобных задач на современном уровне становится возможным только при увеличении производительности используемых вычислительных систем не менее чем на порядок.

Далее Сергей Владимирович отметил шаги Министерства науки и высшего образования РФ для поэтапного улучшения ситуации с супервычислениями в стране. В августе 2020 г. была утверждена концепция развития национальной суперкомпьютерной инфраструктуры, она разрабатывалась при активном участии академических учёных. Документ предусматривает запуск к 2023–2024 г. линейки вычислителей петафлопсного класса (от 10 до 50 петафлопс) и выход в будущем на эксафлопсную мощность. Что касается задачи на сегодня, то академическому сообществу, по мнению С.В. Люлина, на основе утверждённой министерством концепции⁴ необходимо сформировать программу строительства суперкомпьютерной инфраструктуры.

Завершающий содоклад “Актуальные задачи развития технологий высокопроизводительных вычислений, включая суперкомпьютерные технологии” представил заместитель директора Российского федерального ядерного центра “Все-российский научно-исследовательский институт экспериментальной физики” (РФЯЦ-ВНИИЭФ), первый заместитель директора Института теоретической и математической физики РФЯЦ-ВНИИЭФ доктор физико-математических наук **Р.М. Шаралиев**. Он отметил, что в саровском ядерном центре традиционно уделяется большое внимание суперкомпьютерным технологиям, и охарактеризовал два класса решаемых с их помощью задач. Первый – моделирование процессов, протекающих в установках лазерного термоядерного синтеза, в том числе переноса лазерного излучения, генерации в рентгеновское, а затем формирования поля рентгеновского излучения на поверхности термоядерных мишеней и их сжатие. Второй класс задач связан с исследованиями свойств материалов при сверхвысоких сжатиях. Оба класса задач требуют высочайшей точности численных методов. Сложность моделирования состоит в

⁴ Член-корреспондент РАН С.В. Люлин с апреля по октябрь 2020 г. занимал должность заместителя министра науки и высшего образования РФ, в настоящее время – заместитель президента РАН.

том, что одновременно надо учитывать процессы, связанные с газодинамикой, переносом энергии фотонами, электронами, ионами, и в то же время с устойчивостью, играющей в моделируемых процессах важнейшую роль, а помимо того большой круг других процессов и явлений. “Мы проводим расчёты на машинах петафлопного класса, тогда как для полномасштабного моделирования требуются вычислители класса эксафлопного, позволяющие достигать детальных сеточных аппроксимаций”, – констатировал Шагалиев.

Второй класс задач носит прикладной характер. На протяжении последнего десятилетия НИИЭФ активно сотрудничает с конструкторскими бюро машиностроения. По словам оратора, “перед нами поставлена задача создания отечественного программного продукта, не уступающего мировым передовым разработкам, поэтапного его внедрения в работу предприятий. Если мы её не решим и сохранится зависимость промышленных предприятий от зарубежных пакетов программ, мы обречены на второстепенную роль, обречены на отставание. Потому что становится очевидным: сложные технические системы – системы авиастроения, ракетостроения, атомной энергетики, невозможно создать без технологий суперкомпьютерного моделирования. По существу речь идёт о создании виртуальных двойников будущего изделия. Эта работа требует привлечения коллег из отраслей промышленности, хорошей экспериментальной базы. Без такой кооперации довести модели до нужного уровня одни мы не сможем”.

В РФЯЦ-ВНИИЭФ развивается пакет программ “Логос”⁵. Эти работы ведутся в тесном сотрудничестве с институтами РАН, университетами, а также с КБ машиностроения, что позволяет вывести знания, накопленные в научных школах Академии наук, на уровень практического применения промышленностью.

По мнению Р.М. Шагалиева, главное на современном этапе, если речь идёт о суперкомпьютерных технологиях, – определить круг задач, в решение которых должно включиться научное сообщество, исследовательским организациям взять на себя чёткие обязательства, причём с конкретными сроками их выполнения. Тогда шансы на то, что лица, принимающие стратегические решения в нашей стране, прислушаются к мнению учёных, повысятся. Разумеется, надо плотно

взаимодействовать с представителями промышленности, привыкшими использовать, что греха таить, устаревшие или устаревающие на глазах программные продукты, вникать в проблемы отраслей. По мнению Шагалиева, “представители промышленности должны стать нашими коллегами по работе”. Что касается самих суперЭВМ, то их сеть на современном этапе надо создавать из компонентов, имеющихся на рынке, одновременно разрабатывая и отечественную элементную базу. Минпромторг РФ принимает для этого меры: создана машина малого класса, в ближайшее время появятся два типа машин среднего класса, важнейшая задача в дальнейшем – выйти на сверхмощные машины из отечественных компонентов.

Взявший затем слово научный руководитель Иркутского научного центра СО РАН академик РАН **И.В. Бычков**, продолжив тему поиска источников финансирования инфраструктуры суперЭВМ, оплаты машинного времени и работы персонала, привёл такой факт. В иркутском Центре коллективного пользования половина машино-часов предоставляется сторонним организациям с учётом возмещения ими расходов на материалы и обслуживание машин. В грантах РФФИ также предусматривалась возможность оплаты научной инфраструктуры. То есть опыт поиска путей хотя бы частичной самоокупаемости эксплуатации этой дорогостоящей техники есть, и его нужно развивать.

Академик-секретарь Отделения нанотехнологий и информационных технологий РАН академик РАН **Г.Я. Красников** поделился имеющейся у него информацией о том, что, по прогнозам, к 2032–2033 гг. за рубежом будет создана машина зета-класса производительностью 10^{21} операций в секунду. Это ещё один аргумент в пользу активизации работ в российской микроэлектронике.

Ректор МГУ имени М.В. Ломоносова академик РАН **В.А. Садовничий** высказал мнение, что научному сообществу необходимо выработать согласованную позицию по важнейшему для страны вопросу – развитию высокопроизводительных вычислений. Решение этой задачи он отнёс к самым значимым из стоящих перед отечественной наукой и, как следствие, перед промышленностью. Он напомнил, что Президент РФ в апреле 2020 г. дал поручение представить предложения, направленные на увеличение мощности ресурсов российских суперкомпьютерных центров, в том числе региональных. В этой связи большой группой учёных была разработана концепция национальной суперкомпьютерной инфраструктуры, поддержанная Минобрнауки России. Выделено 700 задач, для решения которых требуются суперкомпьютерные ресурсы. Чтобы эту программу профинансировать, обязательно

⁵ Пакет программ “Логос”, разрабатываемый специалистами входящего в ГК “Росатом” РФЯЦ-ВНИИЭФ, предназначен для промышленного 3D-моделирования. Он позволяет моделировать процессы аэро-, гидро- и газодинамики, турбулентного перемешивания, распространения тепла в твёрдом теле, тепловой конвекции, переноса излучения, течения в пористой среде. Области применения: авиационная промышленность, атомная энергетика, ракетно-космическая отрасль, автомобильная промышленность и др.

нужно войти в национальный проект “Наука” или в проект “Цифровая экономика”, иначе многочисленные предложения, прозвучавшие в ходе заседании президиума РАН, останутся нереализованными.

Виктор Антонович акцентировал внимание и на такой важной задаче, как подготовка кадров. А упомянув о суперкомпьютере “Ломоносов”, создававшемся исключительно за счёт собственных средств университета, подчеркнул, что инфраструктура потребовала не меньших средств, чем сама машина, то есть 6–7 млрд рублей. Вычислитель петафлопсного класса – это своего рода завод, занимающий большие площади (одни только стойки “Ломоносова” занимают 2000 м²) и нуждающийся в 10–12, а то и более мегаватт электрической мощности. Поэтому необходим план размещения супервычислителей в масштабах страны с учётом возможностей регионов.

Научный руководитель Института автоматизации и процессов управления ДВО РАН академик РАН **Ю.Н. Кульчин** напомнил о том, что М.В. Келдыш

много сил приложил для создания Дальневосточного отделения АН СССР и его институтов. В настоящее время на Дальнем Востоке действуют два суперкомпьютерных центра, их услугами пользуются около 30 научных институтов, университетов и промышленных организаций. Объём задач требует повышения мощности каждого из центров хотя бы до трёх петафлопс, поэтому Юрий Николаевич высказался в поддержку инициативы по разработке стратегии создания региональной сети суперкомпьютерных центров.

Завершая обсуждение научного сообщения академика РАН Б.Н. Четверушкина, президент РАН А.М. Сергеев ещё раз подчеркнул важность обсуждаемого вопроса с точки зрения научно-технологического развития страны. Оно в значительной мере зависит от того, насколько суперкомпьютеры высокой производительности, то есть сопоставимой с достигнутой в передовых странах, войдут во все области науки и отрасли промышленности.