

**ЭКСАФЛОПНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ**  
**КОНЦЕПЦИЯ ПО РАЗВИТИЮ ТЕХНОЛОГИИ**  
**ВЫСОКОПРОИЗВОДИТЕЛЬНЫХ ВЫЧИСЛЕНИЙ НА БАЗЕ**  
**СУПЕРЭВМ ЭКСАФЛОПНОГО КЛАССА (2012-2020 гг.)**

**2012**

## СПИСОК ИСПОЛНИТЕЛЕЙ

### Организации

Госкорпорация «Росатом»

ДР НПБ ЯОК

ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ»

ФГУП «РФЯЦ-ВНИИТФ им. академ. Е.И. Забабахина»

Минобрнауки России Департамент развития

### РАН

ИПМ им. М.В.Келдыша РАН

ИПС им. А.К. Айламазяна РАН

НИИСИ РАН

МСЦ РАН

### ВУЗ

НИИММ им. Н.Г. Чеботарева при КГУ

ННГУ им.Н.И.Лобачевского

МГУ им. М.В.Ломоносова

МАИ

МГТУ им. Н.Э. Баумана

ФГУ РИЦ «Курчатовский институт»

ФГУП «НИИ «Квант»

### КОМПАНИИ

ОАО «Т-платформы»

### Исполнители

1. Абрамов Сергей Михайлович - директор ИПС им. А.К. Айламазяна РАН;
2. Аксенов Сергей Викторович - научный сотрудник ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ»;
3. Алексеев Александр Витальевич - старший научный сотрудник ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ»;
4. Бетелин Владимир Борисович - директор НИИСИ РАН, академик РАН;
5. Близнюк Геннадий Геннадьевич - начальник лаборатории ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ»;
6. Бутнев Олег Игоревич - начальник лаборатории ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ»;

- |                                      |   |
|--------------------------------------|---|
| 7. Велихов Василий<br>Евгеньевич     | - заместитель директора ФГУ РНЦ<br>«Курчатовский институт»  |
| 8. Власов Сергей<br>Евгеньевич       | - директор Департамента развития<br>научно-производственной базы ядерного<br>оружейного комплекса Госкорпорации<br>«Росатом»;           |
| 9. Волгин Алексей<br>Валентинович    | - главный специалист Департамента<br>развития научно-производственной базы<br>ядерного оружейного комплекса<br>Госкорпорации «Росатом»; |
| 10. Гергель Виктор<br>Павлович       | - декан факультета ВМК ННГУ<br>им.Н.И.Лобачевского;   |
| 11. Гребенников Андрей<br>Николаевич | - заместитель начальника отделения<br>ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ»;   |
| 12. Денисова Оксана<br>Владимировна  | - научный сотрудник ФГУП «РФЯЦ-<br>ВНИИЭФ»;   |
| 13. Елизаров Александр<br>Михайлович | - директор НИИММ им. Н.Г. Чеботарева<br>при КГУ;  |
| 14. Ермошкина Ксения<br>Сергеевна    | - инженер-программист ФГУП «РФЯЦ-<br>ВНИИЭФ»;   |
| 15. Климов Андрей<br>Валентинович    | - руководитель проектами ИПС им. А.К.<br>Айламазяна РАН   |
| 16. Козелков Андрей<br>Сергеевич     | - начальник группы ФГУП «РФЯЦ-<br>ВНИИЭФ»;  |
| 17. Козманов Михаил<br>Юрьевич       | - начальник отделения ФГУП «РФЯЦ-<br>ВНИИТФ им. академ. Е.И. Забабахина»;   |
| 18. Комков Алексей<br>Николаевич     | - заместитель Генерального Директора по<br>продуктам и технологиям «Т-<br>платформы»  |
| 19. Копкин Сергей<br>Валентинович    | - научный сотрудник ФГУП «РФЯЦ-<br>ВНИИЭФ»;   |
| 20. Корж Антон<br>Александрович      | - архитектор Т-платформы»   |
| 21. Крюков Вячеслав<br>Михайлович    | - начальник отделения ФГУП «РФЯЦ-<br>ВНИИТФ им. академ. Е.И. Забабахина»;   |
| 22. Левин Владимир<br>Константинович | - научный руководитель ФГУП «НИИ<br>«Квант», академик РАН;  |
| 23. Лилитко Евгений<br>Петрович      | - главный специалист ИПС им. А.К.<br>Айламазяна РАН;  |
| 24. Роденко Игорь<br>Николаевич      | - начальник отдела Департамента<br>развития информационно-<br>коммуникационных технологий<br>Минобрнауки России;                        |
| 25. Слепухин Андрей<br>Феликсович    | - главный архитектор «Т-платформы»  |

26. Соловьев Вячеслав Петрович - первый заместитель директора ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ»;
27. Спиридонов Валентин Федорович - начальник отдела ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ»
28. Степаненко Сергей Александрович - начальник отдела ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ»
29. Тихонравов Александр Владимирович - директор научно-исследовательского центра МГУ им. М.В.Ломоносова;
30. Чеботарь Анна Владимировна - инженер ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ»;
31. Четверушкин Борис Николаевич - директор ИПМ им. М.В.Келдыша РАН;
32. Шабанов Борис Михайлович - заместитель директора МСЦ РАН;
33. Шагалиев Рашит Мирзагалиевич - первый заместитель директора ИТМФ ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ»;
34. Южаков Василий Васильевич - заместитель начальника отдела ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ»;
35. Якобовский Михаил Владимирович - заведующий сектором ИПМ им. М.В.Келдыша РАН;

## СОДЕРЖАНИЕ

СПИСОК СОКРАЩЕНИЙ.....	9
ВВЕДЕНИЕ .....	11
1 ЗАДАЧИ ИМИТАЦИОННОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ, ТРЕБУЮЩИЕ СУПЕРЭВМ ЭКСАФЛОПНОГО КЛАССА.....	17
1.1 Общие потребности в эксафлопных вычислениях .....	17
1.2 Исследования в области фундаментальной науки .....	18
1.3 Комплексное моделирование объектов атомной энергетики .....	19
1.3.1 Связные динамические 3D расчеты номинальных и переходных режимов работы реактора.....	20
1.3.2 Расчеты проектных и запроектных аварий.....	23
1.3.3 Ожидаемые результаты .....	23
1.4 Проектирование и разработка изделий в авиастроении .....	24
1.4.1 Конструирование и проектное предсказательное моделирование газотурбинных двигателей.....	27
1.5 Проектирование и разработка изделий в автомобильной промышленности.....	29
1.6 Проектирование и разработка изделий в ракетно-космической отрасли .....	30
1.7 Повышение эффективности нефте- и газодобычи .....	31
1.8 Моделирование процессов горения в двигателях новых конструкций и тепловой энергетике.....	33
1.9 Использование энергии альтернативных возобновляемых источников.....	35
1.10 Задачи управляемого лазерного термоядерного синтеза .....	35
1.11 Создание материалов с радикально новыми свойствами в интересах производства на их основе качественно новой высокотехнологичной продукции .....	36
1.12 Моделирование и анализ сложных явлений и проблем в области живых систем.....	37
2 НАПРАВЛЕНИЯ ФУНДАМЕНТАЛЬНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ В ОБЛАСТИ ТЕХНОЛОГИЙ ВЫСОКОПРОИЗВОДИТЕЛЬНЫХ ВЫЧИСЛЕНИЙ .....	40
2.1 Исследования математических методов и алгоритмов .....	40
2.1.1 Направления развития вычислительных алгоритмов .....	41
2.1.2 Создание решателей систем линейных алгебраических уравнений .....	42
2.1.3 Исследование архитектурных особенностей алгоритмов .....	43
2.2 Архитектуры гибридных вычислительных систем. Средства масштабирования эффективности .....	44

2.2.1	Исследование влияния первичных параметров вычислительных процессов на эффективность гибридных систем .....	45
2.2.2	Исследование архитектур специализированных сегментов .....	46
2.2.3	Исследование средств масштабирования эффективности гибридных вычислительных систем .....	47
2.2.4	Исследование архитектурных средств обеспечения надежности гибридных вычислительных систем .....	48
2.2.5	Разработка прогнозного метода расчета производительности и эффективности гибридных вычислительных систем .....	48
3	СОЗДАНИЕ ЭКСАФЛОПНЫХ СУПЕРЭВМ.....	50
3.1	Эксафлопные ограничения.....	50
3.2	Разработка и оптимизация архитектуры .....	51
3.2.1	Архитектурные средства минимизации длительностей обменов.....	52
3.2.1.1	Адаптация процессов и структур связей .....	52
3.2.1.2	Минимизация длительностей выполнения глобальных алгоритмов обменов .....	53
3.2.2	Средства реконфигурации топологии мультипроцессорных сред .....	53
3.2.3	Разработка средств топологического резервирования мультипроцессорных сред и вычислительных процессов .....	53
3.3	Разработка аппаратных компонентов.....	54
3.3.1	Вычислительные модули .....	55
3.3.1.1	Параметры и состав MIMD/SIMD процессоров .....	55
3.3.1.2	Исследование MIMD/ SIMD/FPGA процессоров .....	56
3.3.1.3	Средства объединения MIMD/ SIMD процессоров .....	57
3.3.2	Система межпроцессорного обмена .....	57
3.3.3	Система ввода/вывода.....	59
3.3.4	Разработка базового ряда экспериментальных образцов вычислительных систем .....	60
3.3.4.1	Разработка универсальной вычислительной среды и системы внешней памяти .....	60
3.3.4.2	Создание специализированных сегментов вычислительной среды .....	62
3.3.4.3	Конструктивные элементы.....	63
3.3.4.4	Системы электропитания и охлаждения.....	63
3.4	Разработка системного программного обеспечения .....	64

3.5 Разработка языков и систем параллельного программирования. Системы поддержки разработки.....	66
3.6 Разработка инструментального обеспечения.....	66
3.6.1 Разработка системы диагностирования и мониторинга компонентов .....	66
3.6.2 Разработка средств проектирования мультипроцессорных систем.....	66
3.6.3 Создание пакета тестовых программ .....	67
3.6.4 Разработка средств тестирования и диагностики коммуникационной среды .....	67
3.6.5 Проектирование и разработка систем для реализации кроссплатформенных расчетов на мультипроцессорных системах .....	68
3.6.6 Препроцессинг и постобработка.....	68
3.6.7 Системы управления научными и инженерными данными.....	69
3.7 Создание базового ряда суперЭВМ .....	70
3.8 Создание и развитие суперкомпьютерных центров .....	71
4. ПОДГОТОВКА ВЫСОКОКВАЛИФИЦИРОВАННЫХ КАДРОВ В ОБЛАСТИ ЭКСАФЛОПНЫХ ТЕХНОЛОГИЙ.....	74
4.1. Создание системы базовых (опорных) научно-образовательных центров эксафлопных вычислительных технологий .....	75
4.2. Разработка учебно-методического обеспечения подготовки кадров в области эксафлопных технологий .....	76
4.3. Реализация образовательных программ подготовки, переподготовки и повышения квалификации кадров в области эксафлопных технологий.....	77
4.4. Разработка и реализация системы информационного обеспечения общества в области суперкомпьютерных технологий.....	78
5. ЭКОНОМИЧЕСКИЕ ПАРАМЕТРЫ КОНЦЕПЦИИ .....	79
ЗАКЛЮЧЕНИЕ .....	82
СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ.....	84
ПРИЛОЖЕНИЕ А .....	87
Перечень направлений и задач по созданию и внедрению прикладного программного обеспечения .....	87
ПРИЛОЖЕНИЕ Б .....	91
Перечень направлений и задач по программе фундаментальных исследований в области технологии высокопроизводительных вычислений .....	91
ПРИЛОЖЕНИЕ В .....	94
Перечень направлений и задач по проектированию и производству эксафлопных суперЭВМ...94	94

ПРИЛОЖЕНИЕ Г .....	107
Перечень направлений и задач для подготовки высококвалифицированных кадров в области эксафлопных технологий .....	107



## СПИСОК СОКРАЩЕНИЙ

DES	Detached-Eddy Simulation - моделирование одиночного вихревого течения;
DNS	Direct Numerical Simulation - прямое численное моделирование;
EESI	European Exascale Software Initiative;
EISC	Exascale Initiative Steering Committee - управляющий комитет эксаскальной инициативы министерства энергетики США;
FLOPS (ФЛОПС)	Floating-Point Operations per Second - количество операций с плавающей точкой в секунду;
FPGA	Field-Programmable Gate Array – программируемые логические интегральные схемы;
GPU	Graphic Processor Unit - графический арифметический процессор (ускоритель);
IESP	International Exascale Software Project;
LES	Large Eddy Simulation - (прямое численное) моделирование крупномасштабной турбулентности;
MIMD	Multiple Instructions - Multiple Data - много потоков команд и множество потоков данных;
RANS	Reynolds Averaged Navier-Stokes - осреднённые по Рейнольдсу уравнения Навье-Стокса;
SIMD	Single Instruction - Multiple Data - один поток команд и множество потоков данных;
TEXT	Towards EXascale Applications;
A3	активная зона;
БН	быстрые нейтроны;
ВС	вычислительной системы;
ЖРД	жидкостный реактивный двигатель;
КС	камера сгорания;
НОЦ ЭВТ	научно-образовательный центр эксафлопных вычислительных технологий;
ОС	операционная система;
СЛАУ	система линейных алгебраических уравнений;
СМПО	система межпроцессорного обмена;
ТВС	тепловыделяющая сборка;
ТНАГ	турбонасосный агрегат горючего;
ЦП	центральный процессор;
1 Гигафлопс, Гфлопс	$10^9$ арифметических операций с вещественными числами двойной точности в секунду;
1 Терафлопс, Тфлопс	$10^{12}$ арифметических операций с вещественными числами двойной точности в секунду;
1 Петафлопс, Пфлопс	$10^{15}$ арифметических операций с вещественными числами двойной точности в секунду;
1 Эксафлопс, Эфлопс	$10^{18}$ арифметических операций с вещественными числами двойной точности в секунду;
MIMD-компонента	условное обозначение вычислительного устройства, реализующего MIMD дисциплину вычислений Multiple Instructions Multiple Data (Множественный поток Команд, Множественный поток Данных). MIMD дисциплина используется, в

SIMD- компонента	<p>частности, в универсальной x86 архитектуре многоядерных микропроцессоров;</p> <p>условное обозначение вычислительного устройства, реализующего SIMD дисциплину вычислений – Single Instruction Multiple Data (Одиночный поток Команд, Множественный поток Данных), характерную для арифметических ускорителей, состоящих из одного командного процессора (управляющего модуля) и нескольких модулей обработки данных. Особенность SIMD – возможность многократного ускорения исполнения специализированного набора простых алгоритмов по сравнению с MIMD-компонентой при существенно меньшем энергопотреблении;</p>
MIMD/SIMD процессор	<p>условное обозначение вычислительного устройства, содержащего MIMD-компоненту и SIMD-компоненту. Основной причиной применения этого термина является необходимость интеграции в составе процессора арифметического устройства (SIMD-компоненты), потребляющего на порядок меньше энергии по сравнению с традиционным процессором (MIMD-компонента);</p>
Вычислительный модуль	<p>множество (непустое) MIMD/SIMD процессоров, конструктивно объединенных в одном корпусе (на одной подложке);</p>
Процессорный элемент	<p>объединение вычислительного модуля и соответствующей ему системы межпроцессорного обмена, включающее интерфейс связи и коммутатор.</p>

## ВВЕДЕНИЕ

Целью Концепции является обоснование необходимости и возможности создания экзафлопных средств математического моделирования, обеспечивающих возможности технологического прорыва в следующих областях, определенных Комиссией при Президенте Российской Федерации по модернизации и технологическому развитию экономики России в качестве стратегических [1]:

- энергоэффективность и энергосбережение, в том числе вопросы разработки новых видов топлива;
- ядерные технологии;
- космические технологии, прежде всего в области телекоммуникаций и навигационных систем (включая создание соответствующей наземной инфраструктуры);
- медицинские технологии (оборудование, лекарственные средства);
- стратегические компьютерные технологии и программное обеспечение.

Математическое моделирование, основанное на применении супер ЭВМ, является инструментом обеспечения конкурентоспособности современного общества и государства. Основная причина – возрастающая экономическая эффективность математического моделирования по сравнению с натурными испытаниями. В течение 10-12 лет производительность супер ЭВМ возрастает в среднем в 1000 раз. Очередным этапом является достижение производительности 1 Эксафлопс ( $10^{18}$  оп/с), планируемое на 2018-2020гг. Основные трудности в достижении экзафлопной производительности – необходимость эффективного использования  $\sim 10^8$  процессорных ядер и преодоление физических ограничений, обусловленных энергопотреблением, надежностью и конструктивными размерами.

В мире ведутся интенсивные разработки средств, позволяющих преодолеть эти ограничения.

В 2009 году по указанию президента США с целью сохранения лидирующих позиций США в области суперкомпьютерных технологий, их внедрению в науку, промышленное производство и социальные сферы разработан план действий под названием Exascale Initiative [2]. Министерством энергетики США из специалистов ядерных лабораторий создан специальный комитет Exascale Initiative Steering Committee (EISC) [3], целями которого являются:

- определение особо значимых научных проблем, требующих наибольшего привлечения вычислительных ресурсов в течение следующего десятилетия;
- определение оптимального пути повышения производительности вновь создаваемых вычислительных систем с учётом потребностей прикладной и фундаментальной науки;
- организация обмена междисциплинарными идеями в интересах развития суперкомпьютерной базы.

Объем ежегодного финансирования исследовательских работ по этому эксафлопному проекту превышает 100 млн. долларов США [4].

Кроме того, министерство энергетики США является одним из основных финансирующих международного проекта International Exascale Software Project (IESP) [5]; соучредителем проекта является также национальный научный фонд (NSF) США. Цель проекта – создание программной базы для суперкомпьютеров эксафлопного уровня, появление которых ожидается в 2018-2020 гг. В проекте, кроме американских, широко задействованы европейские и японские фирмы и организации.

Аналогичные работы, предусматривающие достижение эксафлопной производительности, выполняются под патронажем министерства обороны США через агентство DARPA [6] – в частности, укажем проекты HPCS, UHPC и OHPC. В них объединены ведущие фирмы – Intel, Cray, Nvidia, университеты и национальные лаборатории США.

Создание систем производительностью 10 Пфлопс предусматривается в США уже в 2012 году (см., например, [7,8]).

В Европе эксафлопные технологии реализуются в проекте PRACE (предусматривается создание эксафлопного компьютера в 2019 году) [9] и финансируемых Евросоюзом проектах European Exascale Software Initiative (EESI) [10] и Towards EXascale Applications (TEXT) [11], направленных на разработку программных технологий, предназначенных для использования в компьютерах эксафлопного класса.

У Японии пока специального эксафлопного проекта не существует, но согласно [12] в планах технологического развития на 2011-2015 гг. прописан пункт «разработка

НРС-технологий экзафлопного класса». Возможно тесное сотрудничество с Южной Кореей.

Китай планирует создать в 2015 г. систему производительностью 10 Пфлопс и достигнуть в 2020 г. производительности 1-10 Эксафлопс [13].

Вышеизложенное свидетельствует об интенсивных усилиях, иллюстрируемых в таблице 1, ведущих государств мира по созданию экзафлопных технологий.

Таблица 1 – Эксафлопные проекты

	<b>США</b>	<b>Евросоюз</b>	<b>Китай</b>
	DOE – более 100 млн.\$/год; NSF и университеты до 30 млн.\$/год; DARPA УНРС около 75 млн.\$ на 4 года; Всего на исследования без стоимости машин около 150 млн.\$/год	Еврокомиссия, программы PRACE, DEISA и EESI, национальные программы, университеты и индустрия. Всего на исследования без стоимости машин – 29-43 млн. \$ в год	2012 г. – суперЭВМ петафлопного класса на собственной элементной базе Открытая часть финансирования – 67 млн.\$
<b>10 Пфлопс</b>	2011-2012 г.г. 20 Пфлопс: Sequoia, Titan 10 Пфлопс: Mira	2012-2013 г.г. SuperMUC – 3 Пфлопс Hermit – 4-5 Пфлопс	2015 г. - суперЭВМ 10 Пфлопс; Бюджет: 107 млн. \$
<b>100Пфлопс</b>	2015-2016 г.г. – несколько суперЭВМ (от 50 до 150 Пфлопс)	Официальных данных нет	2015-2020 г.г. Несколько суперЭВМ петафлопной производительности, хотя бы одна 50-100 Пфлопс Бюджет: 615 млн. \$
<b>1000 Пфлопс</b>	2018-2019 г.г. – несколько суперЭВМ (от 1 до 2 Эксафлопс)	2020 г. – европейский Эксафлопс	2020г. 1~10 Эксафлопс Бюджет: еще неизвестен
<b>International Exascale Software Project (IESP)</b> Международный проект по созданию программного обеспечения для вычислительных систем экзафлопного класса (США, Евросоюз, Япония, Китай, Россия и другие страны)			

Оценки, полученные различными экспертами [14, 15] показывают, что следование применяемым в настоящее время технологиям приведёт к тому, что в 2020 г. система производительностью 1 Эксафлопс будет иметь следующие характеристики:

- количество процессорных ядер:  $\sim 10^8$ ;
- потребляемая мощность не менее: 100 МВт;
- длительность наработки на отказ: не более нескольких минут (возможно меньше);
- конструктивные размеры: более 1000 шкафов общей площадью свыше 2000-3000 м<sup>2</sup>.

Одним из вариантов преодоления конструктивных ограничений и достижения эксафлопной производительности является применение гибридных архитектур, содержащих MIMD и SIMD компоненты.

Вследствие сравнительно простой структуры энергопотребление, конструктивные размеры и стоимость, приходящиеся на единицу производительности SIMD компонентов примерно в 5-10 раз меньше по сравнению с MIMD компонентами.

Предварительные оценки показывают, что применение гибридных архитектур позволяет создать вычислительную систему (вычислитель) производительностью:

- 10 Пфлопс в 2014г с энергопотреблением 2000 - 3000 кВт, состоящую из  $10^5/5 \cdot 10^6$  MIMD/SIMD ядер;
- 100 Пфлопс в 2017г с энергопотреблением 4500 – 5000 кВт, состоящую из  $10^6/10^7$  MIMD/SIMD ядер;
- 1000 Пфлопс в 2020г с энергопотреблением  $\sim 20000$  кВт, состоящую из  $10^7/10^8$  MIMD/SIMD ядер.

Достижение эксафлопной производительности требует разработки и применения технологий, реализующих принципиально различные дисциплины вычислений на качественно более высоком уровне параллелизма, сложности и неоднородности вычислительных систем. В частности, необходимы:

- фундаментальные исследования математических методов, алгоритмов и архитектур, позволяющих достигнуть необходимые значения производительности;
- разработка аппаратных и системных программных средств вычислительных систем, удовлетворяющих требованиям по энергопотреблению, надежности и другим физическим параметрам;

- создание и освоение прикладного программного обеспечения для имитационного моделирования на супер ЭВМ экзафлопного класса;
- подготовка высококвалифицированных специалистов в области экзафлопных технологий.

В настоящем документе содержатся предложения по созданию отечественных экзафлопных технологий. Ключевой задачей является создание к 2020 году отечественных экзафлопных технологий. В Концепции выделены ближнесрочные и среднесрочные этапы работ по развитию суперкомпьютерных технологий и изложены актуальные задачи, соответствующие этапам, с указанием необходимых для их решения вычислительных мощностей.

В первом разделе документа изложены актуальные задачи из различных областей человеческой деятельности и оценки производительности, требуемой для их решения.

Во втором разделе сформулированы направления фундаментальных исследований в области численных методов и вычислительных средств, которые необходимо выполнить для достижения и освоения экзафлопной производительности.

В третьем разделе приведены основные направления работ по созданию суперЭВМ экзафлопной производительности и ее компонентов, включая сроки и граничные значения параметров.

В четвертом разделе изложены мероприятия по подготовке кадров в области вычислительного моделирования и разработки вычислительных средств.

В пятом разделе приведены экономические параметры Концепции (подлежат уточнению).

В Приложениях А, Б, В и Г указаны направления, задачи и исполнители, соответствующие перечисленным разделам.

Концепция основывается на результатах работ, выполняемых Госкорпорацией «Росатом» в широкой кооперации с предприятиями высокотехнологичных отраслей промышленности, ведущими научными школами и образовательными учреждениями, по созданию суперкомпьютерных технологий предсказательного моделирования тера- и петафлопного класса в интересах атомной энергетики, авиации, автомобилестроения и космоса, и предусматривает поэтапное создание на этой основе принципиально новых технологий предсказательного моделирования многомасштабных процессов и взаимодействий экзафлопного уровня сложности. При создании концепции использован

опыт, накопленный в области фундаментальных исследований и других направлений работ.



# 1 ЗАДАЧИ ИМИТАЦИОННОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ, ТРЕБУЮЩИЕ СУПЕРЭВМ ЭКСАФЛОПНОГО КЛАССА

## 1.1 Общие потребности в экзафлопных вычислениях

Уровень и качество разрабатываемой продукции напрямую зависят от развития науки и технологий. Принципиальное повышение качества промышленной продукции в современных условиях может быть достигнуто лишь на основе внедрения технологии предсказательного моделирования как самих материалов, так и сложных технических систем в целом.

Выделяются следующие отрасли и области знаний требующие, в первую очередь, экзафлопных вычислений: фундаментальные исследования, ядерно-оружейный комплекс, машиностроение, материаловедение, атомная и традиционная тепловая энергетика, медицина и фармакология.

В таблице 2 приведены экспертные оценки производительности вычислительных систем, необходимых для разработки наукоемкой продукции (оценки производительности для конкретных задач рассматриваются в п.п. 1.2-1.13).

Таблица 2 - Оценки производительности вычислительных систем

Область применения	2011 год	2015 год	2018 год
Высокотехнологичные отрасли промышленности:			
- авиа-, судостроение	0.3 Пфлопс	3 Пфлопс	1 Эфлопс
- автомобилестроение	0.1 Пфлопс	1 Пфлопс	0.5 Эфлопс
- космическая отрасль	0.1 Пфлопс	2 ПФлопс	1 ЭФлопс
Атомная энергетика	1 Пфлопс	100 Пфлопс	10-20 Эфлопс
Нефтегазовые отрасли	1 Пфлопс	100 Пфлопс	1-10 Эфлопс
Новые материалы на основе нанотехнологий	1 Пфлопс	100 Пфлопс	1-10 Эфлопс
Биотехнологии	1 Пфлопс	10 Пфлопс	1-2 Эфлопс

Стратегической целью развития экзафлопных технологий является радикальное улучшение технико-экономических характеристик сложных технических систем за счет одновременной оптимизации свойств материалов, конструкции и процесса их изготовления. В настоящее время в Госкорпорации «Росатом» активно ведутся работы

по созданию импортозамещающего базового прикладного программного обеспечения, ориентированного на использование суперЭВМ, в интересах различных отраслей промышленности. В рамках проекта «Развитие суперкомпьютеров и грид-технологий», принятого к реализации Комиссией при Президенте Российской Федерации по модернизации и технологическому развитию экономики России, развернуты работы по оснащению организаций Российской Федерации современным отечественным программным обеспечением для имитационного моделирования в атомной энергетике, автомобилестроении, авиастроении, нефтегазовой отрасли. Созданные в рамках этих работ математические модели, вычислительные алгоритмы и программные продукты являются основой для разработки прикладного программного обеспечения с целью решения задач эксафлопного класса.

Ниже в этом разделе рассматриваются основные задачи, требующие эксафлопных технологий.

## **1.2 Исследования в области фундаментальной науки**

Исследования во многих фундаментальных областях современной науки требуют проведения расчетов на вычислительных машинах эксафлопного класса. В качестве примера можно привести квантовую теорию твердого тела и один из наиболее актуальных на сегодняшний день ее разделов теорию сильнокоррелированных электронных систем. Использование перспективных методик, таких как Динамическая Теория Среднего Поля (ДТСП) при численной реализации требуют очень больших вычислительных мощностей. Так, использование квантового метода Монте-Карло требует  $10^{21}$ - $10^{22}$  операций с плавающей точкой, т.е. суточный расчет на машине эксафлопного класса.

Другим направлением фундаментальных исследований, требующим вычислительные ресурсы эксафлопного класса, является физика высоких энергий. Основные задачи, которые предстоит решить в данной области это

- построение уравнений состояния сверхплотной горячей плазмы и расчет ее спектральных свойств;

- построение теории кварк-глюонной плазмы и моделирование состояний ранней вселенной;

- обработка информации, поступающей с детекторов Большого Адронного Коллайдера (десятки петабайт);
- взаимодействие мощного лазерного излучения с веществом;
- релятивистская квантовая фермионная динамика (аналог МД для ядерной материи).

### **1.3 Комплексное моделирование объектов атомной энергетики**

В экономически развитых государствах атомная энергетика включена в число приоритетных отраслей экономики. Объекты атомной энергетики требуют эксафлопных вычислений. В частности, по достижении производительности 1-2 Эксафлопс в 2018 году США планируют осуществить детальное моделирование и оптимизацию атомного реактора с учетом эффектов межатомного взаимодействия, а по достижении производительности 10 Эксафлопс в 2023 году планируют осуществить детальное моделирование атомной электростанции.

Другой приоритетной задачей для «пета- и эксафлопных вычислений» в атомной энергетике США определяют задачу полномасштабного мультифизического моделирования при проектировании реакторов 4-го поколения на быстрых нейтронах и замыкания топливного цикла. Время эксплуатации таких установок должно составлять 40-60 лет. Полномасштабное моделирование должно обеспечить экономию до 20% финансовых средств на проектирование и разработку (называется до 3 млрд. долларов США на фоне общей стоимости установки 15 млрд. долларов США).

Под мультифизическим понимается моделирование в 3D постановке связанных процессов: теплогидравлика, нейтронный и гамма-перенос, радиационная безопасность, моделирование поведения структуры материалов. Принципиально новое в этом подходе по сравнению с используемым в настоящее время инженерным анализом – это широкое применение прямого численного моделирования теплофизических процессов и свойств материалов из первых принципов с учетом молекулярно-динамического взаимодействия.

Для Российской Федерации атомная энергетика является одной из приоритетных отраслей промышленности, от уровня развития которой кардинальным образом зависит уровень экономики нашего государства. Наиболее представительным классом задач, требующим существенных вычислительных ресурсов, является моделирование связанных

процессов (нейтронно-физические, теплогидравлические, химические, прочностные и т.д.) в активной зоне реакторной установки с учетом их взаимного влияния друг на друга.

Характерными особенностями рассматриваемых процессов являются, во первых, повышенные требования к степени их детализации (вплоть до микронного уровня) для корректного учёта всех особенностей самого процесса и взаимовлияния процессов друг на друга, во вторых – необходимость многовариантного моделирования (как правило сотни вариантов), как основы для выбора и принятия оптимального проектного решения. Указанный класс задач характеризуется высокими требованиями как к производительности супер-ЭВМ, так и к системам хранения информации, подготовки данных и обработки полученных результатов.

### **1.3.1 Связные динамические 3D расчёты номинальных и переходных режимов работы реактора**

Наиболее сложными с точки зрения вычислительных ресурсов являются связные динамические 3D расчёты номинальных и переходных режимов работы реактора в полном кластерном приближении с учётом изотопно-изомерной кинетики топлива и продуктов деления, многомерной многофазной теплогидравлики первого и второго контуров, турбулентного перемешивания, дискретного приближения дисперсных частиц, сложной геометрии гидравлической сети.

Ниже рассматриваются возможности применения супер-ЭВМ пета- и эксафлопного класса для решения отдельных классов задач.

#### 1.3.1.1 Термогидродинамика активной зоны и первого контура

По оценкам специалистов для детального описания теплогидравлического течения теплоносителя с использованием более совершенных CFD-методов (термогидродинамика) в тепловыделяющей сборке (ТВС) с учётом влияния решёток, дистанционирующих ТВЭЛы и турбулизирующих теплоноситель, при эффективности распараллеливания порядка 50%:

на ВС производительностью 1 Пфлопс потребуется – 1500 часов;

на ВС производительностью 1 Эфлопс потребуется – 1.5 часа.

Оценки показывают, что использование супер-ЭВМ петафлопного класса существенно расширяет возможности моделирования рассмотренного класса задач, однако для большого количества расчётов необходимо применение вычислительной системы производительностью 1. Эфлопс.

#### 1.3.1.2 Связные расчеты процессов в реакторной установке

Для проведения связанных расчётов процессов в реакторной установке помимо расчёта термогидродинамики необходимо подключение блоков моделирования переноса нейтронов, гамма-квантов и расчёта энерговыделения. Для моделирования таких процессов требуется в несколько десятков раз больше вычислений в одной пространственной ячейке, чем для расчёта термогидродинамики.

На основе оценок проведение таких расчётов потребует:

на ВС 1 Пфлопс – 100000 часов;

на ВС 1 Эфлопс – 100 часов.

#### 1.3.1.3 Моделирование поведения топлива в активной зоне

Рассматривается моделирование и оптимизация поведения топлива с учетом эффектов межатомного взаимодействия. Исходя из этого, для моделирования выгорания топливной кассеты требует уже ресурсов петафлопного уровня, поведение топлива во всей активной зоне - эксафлопных вычислений.

Так по оценке специалистов США [26] моделирование поведения топлива связано со следующими вычислительными затратами (при 20% эффективности распараллеливания):

Моделирование ТВЭЛа ( $3 \cdot 10^8$  ячеек) потребует:

- на ВС 250Тфлопс потребует 25 часов

- на ВС 6Пфлопс – более 1 часа.

Моделирование ТВС (40 стержней) потребует:

- на ВС 4Пфлопс потребует 25 часов

- на ВС 100Пфлопс – 1 час.

Моделирование топливной таблетки ( $10^9$  ячеек)

- на ВС 0.5Пфлопс потребует 2.4 суток

- на ВС 30Пфлопс – 1 час.

Предполагается, что учет химического взаимодействия, переноса примесей, диффузии вещества, нейтронных процессов уменьшит эффективность распараллеливания и увеличит время расчета.

#### 1.3.1.4 Моделирование нейтронно-физических процессов

При численном обосновании конструкции и безопасности эксплуатации АЭС для моделирования нейтронно-ядерных процессов в активной зоне, как правило, используется малогрупповое диффузионное приближение. Для детального моделирования нейтронных процессов необходимо применять более совершенное анизотропное кинетическое приближение, гораздо более затратное с точки зрения вычислительных ресурсов.

Сравнение с количеством ячеек фазового пространства и затратами времени ЦП относительно сегодняшних расчетов показывает, что для детального моделирования задачи этого класса потребуется:

на вычислительной системе 1 Пфлопс – 1000000 часов;

на вычислительной системе 1 Эфлопс – 1000 часов.

Следует отметить, что аналогичные по параметрам требования к вычислительным ресурсам возникают при расчете вариаций (по температуре, выгоранию и т.п.) с последующей сверткой данных при подготовке малогрупповых ячейечных констант.

Помимо производительности использование при полномасштабном моделировании нейтронных процессов кинетического анизотропного приближения требует больших ресурсов оперативной памяти.

Согласно оценкам при проведении расчета на 1 миллионе процессорных ядер каждое ядро должно обладать оперативной памятью в 10 ГБайт.

Один расчет потребует на вычислительной системе производительностью 1Эфлопс порядка 26 часов времени ЦП и 400ПБ ( $4 \cdot 10^8$ ГБ) оперативной памяти.

Для таких расчетов отношение размера памяти к производительности вычислительной системы (Б/флопс) должно быть  $\sim 1.5$ . При используемом сейчас соотношении  $\sim 0.1$ Б/флопс производительность вычислительной системы должна составлять  $\sim 4$ Эфлопс.

Расчеты по программам связи с термогидродинамикой существенно увеличивают эти требования.

### **1.3.2 Расчеты проектных и запроектных аварий**

Связные динамические 3D расчеты проектных и запроектных аварий с учетом деформации элементов конструкции реакторной установки – это еще один класс задач атомной энергетики, требующий больших вычислительных ресурсов. Решение таких задач на экзафлопном уровне позволит реализовать качественно новые подходы на этапах конструирования реакторных установок и обоснования их ядерной безопасности.

Для детального моделирования аварийных ситуаций и обоснования безопасности атомной электростанции помимо теплогидравлических и нейтронно-физических процессов, рассмотренных выше, дополнительно требуется учет ряда процессов. Среди них процессы термомеханики, прочности, плавления, вентиляции помещений, переноса аэрозолей, водородной взрывобезопасности и т.д. Таким образом, рассматриваемый класс задач требует вычислительные ресурсы ЭВМ производительностью минимум 1 Эфлопс.

### **1.3.3 Ожидаемые результаты**

Численное обоснование конструкции и безопасности эксплуатации АЭС, как правило, проводится на основе следующих моделей:

- одномерная теплогидравлика активной зоны и первого контура;
- трехмерное детальное CFD моделирование отдельных элементов гидравлических контуров;
- малогрупповое диффузионное приближение для моделирования нейтронно-ядерных процессов в активной зоне.

В настоящее время в практике конструкторских расчётов и обоснования безопасности используются коды, моделирующие поведение реакторной установки и АЭС в целом. При этом рост требований со стороны надзорных органов, ужесточение конкуренции на рынке приводят к необходимости совершенствования кодов с целью уменьшения неопределённости расчётов. Компьютерные коды усложняются за счёт одновременного моделирования многих процессов: нейтронной кинетики, теплогидравлики, поведения контеймента и термомеханики твелоов. Увеличивается точность пространственного разрешения моделей, моделируются локальные неравномерности потока теплоносителя и т.п.

В результате актуальным становится применение для моделирования высокопроизводительных супер-ЭВМ, а также перехода на качественно новый уровень компьютерных кодов, позволяющих с высокой точностью проводить трёхмерный анализ реакторной установки.

Применение супер-ЭВМ пета- и эксафлопного класса позволит использовать существенно более точные модели и приближения, повысить детализацию расчетов, проводить комплексное моделирование в связанной постановке с одновременным учетом различных физических процессов.

Выход на новый качественный уровень при решении данного класса задач приведёт к улучшению эксплуатационных характеристик реакторных установок и более точному обоснованию меры нейтронной и радиационной безопасности.

Использование вычислительных систем эксафлопного класса для задач комплексного имитационного моделирования работы АЭС позволит:

- снизить затраты на проектирование и обоснование новых АЭС;
- повысить эффективность и безопасность действующих АЭС;
- провести анализ долговременных последствий тяжелых запроектных аварий.

#### **1.4 Проектирование и разработка изделий в авиастроении**

При создании компьютерных моделей, являющихся полноценными виртуальными макетами современных высокотехнологичных авиационных изделий, практически невозможно обойтись без использования численного моделирования протекающих в них физических процессов, основной составляющей которых являются турбулентная гидро-, аэродинамика и конвективный теплообмен.

В последние годы все большее применение находят подходы к моделированию турбулентности, базирующиеся на первых принципах гидродинамики (метод прямого численного моделирования - в англоязычной литературе Direct Numerical Simulation или DNS и метод моделирования крупных вихрей - Large Eddy Simulation или LES). Однако, из-за огромной вычислительной трудоемкости таких подходов их широкое практическое использование может начаться лишь в конце нынешнего столетия. Данный вывод иллюстрирует таблица 3 из [27]. В ней представлены оценки вычислительных ресурсов, необходимых для расчёта обтекания типичного



гражданского самолета или автомобиля с использованием всех известных методов расчета турбулентных течений, начиная от полуэмпирических методов, базирующихся на осредненных по Рейнольдсу уравнениях Навье-Стокса (Reynolds Averaged Navier-Stokes – RANS) и кончая полностью свободным от эмпиризма методом DNS.

Таблица 3 – Вычислительные ресурсы и перспективы практического применения различных подходов к моделированию турбулентных течений

Метод	Необходимое число узлов сетки	Необходимое число шагов по времени	Готовность <sup>*)</sup>
3D Steady RANS	$10^7$	$10^3$	1985
3D Unsteady RANS	$10^7$	$10^{3.5}$	1995
DES	$10^8$	$10^4$	2000
LES <sup>**)</sup>	$10^{11.5}$	$10^{6.7}$	2045
DNS	$10^{16}$	$10^{7.7}$	2080 <sup>***)</sup>

Данные этой таблицы для RANS основаны на реальном опыте использования соответствующих методов имевшемся в 1999 г., а прогноз готовности методов DNS, LES и DES (Detached-Eddy Simulation) сделан на основе весьма оптимистичной оценки темпов роста производительности компьютеров (в два раза каждые пять лет).

Что касается оценок вычислительных ресурсов необходимых для DNS, LES и DES, то они основываются на общих представлениях о характеристиках турбулентности и свойствах указанных методов. Так, в рамках DNS производится непосредственное (без какого-либо предварительного осреднения) численное решение уравнений Навье-Стокса. Однако, не менее очевидно и то, что для практического использования DNS необходимы огромные вычислительные ресурсы.

Без точного разрешения всех пространственно-временных масштабов турбулентности не обойтись при проектировании новых образцов авиационной техники, где турбулентность присутствует при решении большинства практических задач, будь то определение аэродинамических характеристик с целью оптимизации формы фюзеляжа, снижение шума, не говоря о процессах, протекающих в газотурбинных двигателях, которые включают в себя моделирование турбулентного теплообмена, свободной турбулентности, вращения и закрутки потока и т.д.

В авиационной промышленности время расчета одного варианта при решении задач общей и динамической прочности в настоящее время составляет порядка 140 часов при необходимости не более 12 часов. Время расчета одного варианта задачи

оптимизации, в сильно упрощенной постановке составляет около 7200 часов при необходимости не более 120 часов.

Следствием таких больших времен счета отдельных задач проектирования на имеющейся технике является наличие постоянной очереди к вычислительным ресурсам, вынужденное упрощение расчетных схем решения задач и, как следствие, пропуск критических мест и порождение ошибок, которые обнаруживаются только в процессе испытаний изделий.

Для точного предсказания аэродинамических характеристик пассажирского самолёта класса SSJ-100 с целью оптимизации конструкции в постановке RANS необходимо при эффективности распараллеливания 50% с использованием вычислительной системы производительностью 1 Пфлопс до 1.5-2.5 часа на каждый расчётный случай и 1.5 – 3.5 суток для решения всех расчётных случаев.

Для точного же предсказания аэродинамических характеристик боевого манёвренного самолёта, для которого характерны полёты при больших углах атаки, требуется DES модель турбулентности и нестационарный расчёт. При эффективности распараллеливания 50% для решения одного варианта с использованием вычислительной системы производительностью 1 Пфлопс потребуется 2-3 суток, и 150 – 225 суток для решения всех вариантов.

Другой задачей является расчёт воздействия струи авиационного средства поражения (АСП) на детали летательного аппарата в постановке DES с учетом движения АСП и догорания в струе АСП. При эффективности распараллеливания порядка 50% для решения одного расчётного случая с использованием вычислительной системы производительностью 1 Пфлопс потребуется до 2 месяцев, и для решения всех расчётных случаев – 10 – 20 месяцев.

Из приведённых примеров видно, что машины петафлопного класса позволят качественно решать задачи лишь узкого класса – гражданские самолёты и стационарные режимы обтекания. Моделирование сложных физических процессов требует увеличения вычислительных мощностей до эксафлопного класса, а также разработки прикладного программного обеспечения нового поколения.

## **1.4.1 Конструирование и проектное предсказательное моделирование газотурбинных двигателей**

В течение последних 5-10 лет в практику проектирования начинают широко внедряться расчётные методы и комплексы программ пространственного (в том числе нестационарного) анализа для оценки аэродинамических, акустических, тепловых и прочностных характеристик газотурбинных двигателей (ГТД) и их узлов. Данные комплексы «виртуального» проектирования позволяют сократить сроки проектирования двигателей до 3-5 лет за счёт значительного снижения объёма натурных экспериментальных исследований и их замены на вычислительный эксперимент.

В настоящее время к задачам «виртуального» проектирования ГТД относятся задачи моделирования и анализа линейной и нелинейной статики, сложных контактных взаимодействий, собственных частот и форм колебаний, потери устойчивости в линейной и нелинейной постановках, частотного отклика, отклика на случайное воздействие, спектрального анализа, линейных и нелинейных переходных процессов, теплопередачи (линейные и нелинейные, стационарные и нестационарные). Кроме того, задачи аэроупругости на дозвуковых и сверхзвуковых скоростях, внешней и внутренней виброакустики, роторной динамики, ползучести, анализа разрушения конструкции, быстропротекающих высоконелинейных динамических процессов, в том числе, взрывного и ударного характера.

Кроме вышеперечисленных задач, существуют и специальные задачи расчётного моделирования ГТД, к которым относятся задачи оптимизации, тепловой анализ, моделирование систем охлаждения ГТД с учётом всех видов теплообмена, характера течения охлаждающей жидкости и гидравлических потерь. К специальным расчётам можно отнести и связанный тепло-прочностной анализ элементов конструкции.

Интегрируемость и междисциплинарность стали необходимым условием в области инженерного анализа ГТД и решения задач роторной динамики, ведь, как известно, узлы и детали современных ГТД работают при одновременном воздействии температурных, силовых и кинематических нагрузок.

Необходимость постоянного улучшения эксплуатационных характеристик, повышения КПД при снижении массы конструкции предъявляет высочайшие требования к проведению инженерных расчетов на всех этапах разработки данного вида

изделий. А при моделировании каких-либо режимов работы ГТД желательно учесть максимальное количество внешних и внутренних факторов, влияющих на работу изделия, причем на единой расчетной модели («виртуальный» двигатель).

Анализ быстропротекающих процессов ударного характера (попадание птицы, заклинивание ротора, обрыв лопатки ГТД) должен вестись с учетом преднагруженного состояния элементов конструкции, что особенно актуально для двигателей ГТД с высокой степенью двухконтурности. Динамический анализ современного авиационного ГТД или анализ роторной динамики должен учитывать податливость корпусных деталей статора, учитывать изменение жесткости и демпфирующих характеристик опор, которое, в свою очередь, может быть связано с изменением температуры или давления в масляном демпфере. Кроме всего прочего, на динамические характеристики роторной группы оказывают сильное воздействие нагрузки, возникающие при маневрировании летательного аппарата.

Поэтому для решения подобных задач в комплексной постановке нужны более продвинутые специальные системы компьютерного моделирования, пригодные для проведения междисциплинарных расчетов, охватывающих различную физическую природу исследуемых явлений и использующих различные математические модели для описания работы таких высокоэнергетических сложных объектов, каким является ГТД. Без использования супер-ЭВМ пета- и эксафлопного класса решение задачи в комплексной постановке: преднагруженное состояние лопаток + попадание объекта (птицы) + роторная динамика может занимать несколько суток и более, что является неприемлемым с практической точки зрения.

Следующий класс задач, характерных для ГТД, связан с моделированием процессов горения топлива в камере сгорания с учётом турбулентности, что является самым сложным и ресурсоемким разделом гидродинамики. При горении турбулентность осложняется дополнительными факторами — большим количеством разнообразных химических реакций и излучением. Температура, концентрация реагентов и другие параметры изменяются вследствие как химических реакций, так различных физических процессов: конвекции, диффузии, лучистого теплообмена и пр. Для того, чтобы корректно описать процесс горения в камере сгорания ГТД требуется LES (DES) модель турбулентности и пространственные сетки со степенью дискретизации сотни и более миллионов ячеек. При эффективности распараллеливания

50% для решения одного расчетного случая с использованием данной дискретной модели и вычислительной системы производительностью 1 Пфлопс продолжительность расчета может составить до 3 - 5 суток, а для решения всех расчетных случаев до нескольких месяцев и более.

Очевидно, что такие временные затраты не допустимы на практике, поэтому очень часто инженерные расчеты ограничиваются решением отдельных, не связанных между собою задач. Однако такой локальный подход не применим для моделирования совместной работы узлов и агрегатов в составе ГТД и здесь уже необходимы эксафлопные технологии.

## **1.5 Проектирование и разработка изделий в автомобильной промышленности**

Полномасштабное моделирование автомобиля с учетом всех конструктивных особенностей (более 2000 деталей и блоков) в приближении сплошной среды (объемные конечные элементы, число элементов на толщину корпуса  $\sim 5$ ) на суперЭВМ 5 Пфлопс составит порядка 10 суток. Еще большая производительность требуется для высокоточного моделирования (с объемными конечными элементами) крэш-тестов различных моделей автомобиля.

Моделирование долговечности конструкции автомобиля, малоцикловой и многоцикловой усталостной прочности и трещиностойкости требует увеличения пространственно-временного разрешения расчетной модели более чем в 1000 раз, что в приближении конечно-элементного моделирования сплошной среды за разумные календарные сроки потребует применения суперЭВМ производительностью 2-3 Эксафлопс.

Моделирование процессов сгорания новых видов топлива в двигателях перспективных конструкций (от течения реакций на уровне отдельных молекул, до образования вихрей при подаче топлива в камеру сгорания) является отдельной задачей, для решения которой необходима супер-ЭВМ производительностью не менее 1 Эфлопс (подробнее о многомасштабности процессов горения изложено в разделе 1.7).

## 1.6 Проектирование и разработка изделий в ракетно-космической отрасли

Наиболее затратными с точки зрения использования вычислительных ресурсов являются задачи расчета аэродинамических характеристик ракетносителей (РН), задачи расчета стадии разделения ступеней РН, задачи моделирования рабочего процесса в турбонасосных агрегатах горючего и окислителя (ТНАГ и ТНАО) жидкостных ракетных двигателей (ЖРД), моделирование рабочего процесса в камере сгорания (КС) ЖРД.

Так при моделировании обтекания РН (например «Русь-М»), в стационарной постановке необходимо провести более 150 расчетов. При этом задача обтекания РН это задача обтекания сложного тела с интерференцией сверхзвуковых струй, с последующим образованием возвратных течений, набегающих на донный экран, что требует уточнения пространственной сетки как вблизи поверхности РКН, так и в некоторой ее окрестности. Влияние на аэродинамические характеристики оказывает ионизация газа в головной ударной волне при гиперзвуковых скоростях течения, неравновесные физико-химические процессы (диссоциация и др.) и унос теплозащитного слоя РН. По оценкам специалистов на машине с производительностью 1 Пфлопс время, необходимое для решения всех расчетных случаев составит от 5 суток. Соответственно при использовании максимального числа пространственных точек время расчета всех случаев возрастает до ~25 суток.

Задача моделирования процесса разделения ступеней РН в стационарной постановке на ВС 1 Пфлопс требует для решения одного расчетного случая от 1 суток. Для расчета всех вариантов при полной загрузке машины петафлопного класса потребуется более 100 суток. В случае проведения многодисциплинарного анализа РН, то есть расчета нестационарного обтекания с учетом динамики конструкции РН время проведения возрастает существенно.

Одна из наиболее важных задач при проектировании жидкостных ракетных двигателей (ЖРД) – моделирование процессов протекающих в самом энергонапряженном агрегате ЖРД – турбонасосном агрегате горючего (ТНАГ).

При моделировании турбины в целом необходимо рассматривать сложную техническую систему, состоящую из сопловых аппаратов I и II ступеней, и рабочих колес турбины I и II ступеней. Процесс проведения расчетов осложняется наличием участков сверхзвуковых течений по относительной скорости на входе и по абсолютной

скорости на выходе, а так же высокой частотой вращения рабочих колес. Поэтому проведение подобного расчета на вычислительной системе петафлопного класса потребует примерно 5 суток. При этом проведение расчетов течения газа в связанной постановке с учетом динамики конструкции приводит к существенному увеличению времени расчетов.

Также большой сложностью характеризуются задачи моделирования процессов, протекающих в камере сгорания жидкостного ракетного двигателя. Основные физические процессы – течение топлива и окислителя в смесительной головке и форсунках ЖРД, горение компонентов топлива, течение продуктов сгорания по газовому тракту камеры и сверхзвуковому соплу, течение охладителя с учетом теплообмена со стенками канала охлаждения и распространении тепла по конструкции камеры. Один из наиболее сложных процессов для моделирования – процесс горения.

По оценкам специалистов для адекватного моделирования процессов горения в камерах ЖРД необходимы расчеты с использованием LES модели турбулентности и пространственные сетки с числом ячеек ~500 миллионов. Для проведения подобного расчета на машине производительностью 1 Пфлопс потребуются примерно 3-4 суток.

Проведение же связанного расчета моделирования основных процессов протекающих в камере РД0146 потребует существенно больших вычислительных ресурсов.

Таким образом, для моделирования изделий ракетно-космической техники за разумные календарные сроки потребуются применение суперЭВМ производительностью 1 Эксафлопс.

## **1.7 Повышение эффективности нефте- и газодобычи**

В России 88% потребляемой энергии вырабатывается за счет сжигания углеводородов (нефть, газ). Прогнозируется, что доминирование углеводородной энергетики в России сохранится на ближайшие 30-50 лет. Т.е. нефтегазодобыча и переработка будут играть значительную роль для социально-экономического развития России. В то же время в Российской Федерации увеличивается доля трудноизвлекаемых запасов нефти (на данный момент порядка 70%). В связи с этим необходима модернизация нефтедобычи на основе методов интенсификации нефтеотдачи. Эффективность нефтедобычи во многом определяется знаниями о структуре и свойствах

нефтяных пластов, о поведении флюидов в условиях высоких давлений и температур, о принципах взаимодействия систем скважин в условиях их эксплуатации и при различных технических приемах интенсификации. Таким образом, задача включает в себя следующие существенно разномасштабные уровни [23]:

- микро- и наноразмер для исследования физических и химических свойств породы на уровне зерна методами молекулярной, кластерной динамики и кинетических моделей;

- макроуровень для моделирования процессов многофазной многокомпонентной неизотермической фильтрации на уровне системы скважин и месторождения в целом.

Оценки вычислительных затрат на решения столь разномасштабных по пространству и времени задач приводят к выводу о необходимости их моделирования с применением супер-ЭВМ экзафлопного класса. Решение данной задачи на суперЭВМ экзафлопного класса потребует примерно 10 суток.

Одной из основных задач для экзафлопных технологий является существенное увеличение извлекаемых запасов углеводородов за счёт увеличения коэффициента извлечения нефти и газа. Последнее может быть достигнуто путем выбора оптимальных стратегий в результате предсказательного моделирования внутрипластового горения нефти в пористой среде при закачивании окислителя в пласт, а также других методов термогазового и химического воздействия на пласт, направленных на повышение нефтеотдачи. Даже управление процессами фронтального вытеснения и обеспечение его устойчивости в состоянии потенциально существенно повысить коэффициент извлечения нефти [24, 25]. В России на данный момент коэффициент извлечения нефти и газа не превышает 27%, необходимо - порядка 60%. Увеличение коэффициента нефте- и газоизвлечения в масштабах России даст дополнительно 100-150 млн тонн углеводородов в год.

Для построения гидродинамической модели нефтегазового месторождения последние двадцать лет наиболее широко используются в нефтегазовой отрасли России гидродинамические симуляторы зарубежной разработки, функционирующие только на персональном компьютере с одним многоядерным микропроцессором. Многопроцессорные версии пакетов в России пока недоступны.



В этих условиях время расчета одного варианта научных и промышленных задач при традиционных способах разработки составляет для месторождения с 50 скважинами 5 суток, а для месторождения с 1000 скважинами 90 суток. Аналогичные времена в случае использования методов повышения нефтегазоотдачи составляют уже 60 суток (50 скважин) и 36 месяцев (1000 скважин), соответственно. Другими словами, без применения супер-ЭВМ пета- и эксафлопного класса не представляется возможным осуществлять гидродинамическое моделирование с точностью и скоростью, необходимой для оперативного управления разработкой нефтяных месторождений с количеством скважин на одном объекте более 100; рассчитывать с помощью гидродинамического моделирования местоположение целиков нефти, не вовлеченных в разработку на уже заводненных нефтяных месторождениях; а так же проектировать (не говоря уже о регулировании) применение инновационных методов разработки трудноизвлекаемых запасов нефти с точным расчетом показателей разработки по всему объекту при количестве скважин на объекте более 30.

## **1.8 Моделирование процессов горения в двигателях новых конструкций и тепловой энергетике**

Основой социально-экономического развития России, также как и США, на ближайшие 30-50 лет будет энергомашиностроение, нефтегазодобыча, переработка и использование углеводородного сырья. Одна из ключевых проблем – моделирование процессов сгорания новых видов топлива в двигателях новых конструкций. Учет этих процессов требует предсказательного многомасштабного моделирования от течения реакции на уровне отдельных молекул, до образования вихрей при подаче топлива в камеру сгорания.

Именно, многомасштабность процессов горения не позволяет провести их прямое численное моделирование с использованием существующих супер-ЭВМ терапетафлопного класса и требует достижения производительности эксафлопного уровня.

Необходимо многомасштабное моделирование процессов сгорания в двигателях новых конструкций. В едином моделирующем коде должны одновременно работать совместно различные вычислительные алгоритмы, как то: квантовая молекулярная динамика, классическая молекулярная динамика, кинетический метод Монте-Карло, имитационное моделирование, моделирование больших вихрей, методы с усреднением

числа Рейнольдса и др., что в свою очередь требует использования суперЭВМ эксафлопного класса.

При горении смеси горючего и окислителя первым характерным масштабом оказывается масштаб явления в целом, который определяет конвективный перенос исходных реагентов и продуктов реакции в пределах расчетной области.

Второй характерный масштаб обусловлен присутствием турбулентности в потоках и определяется масштабом турбулентных пульсаций (от сантиметров в технических устройствах до десятков метров в атмосфере).

Третий характерный масштаб обусловлен многофазностью процесса, когда горючее и окислитель находятся в разных фазах (например, жидкое или твердое горючее в форме капель или частиц и газообразный окислитель, или же газообразное горючее и жидкий окислитель в случае водородного двигателя).

Четвертый характерный масштаб определяется процессами молекулярной диффузии реагентов и тепла и связан с толщиной зоны пламени (от миллиметров до сантиметров).

Пятый характерный размер связан с собственно химическими взаимодействиями между молекулами реагентов (нанометры) и определяет скорость химической реакции, влияние промоторов, ингибиторов, адсорбции и десорбции в случае гетерогенных реакций.

Для расчета потенциалов взаимодействия необходимо спуститься на уровень меньших масштабов и проводить расчеты методами квантовой механики на уровне одной молекулы. Это шестой характерный масштаб данной задачи.

Особо актуальным становится вопрос использования альтернативных видов топлива. Соответственно, необходимо многомасштабное моделирование процессов сгорания в двигателях новых конструкций (от течения реакций на уровне отдельных молекул до образования вихрей при подаче топлива в камеру сгорания). В едином моделирующем коде должны одновременно работать совместно различные вычислительные алгоритмы, как то: квантовая молекулярная динамика, классическая молекулярная динамика, кинетический метод Монте-Карло, имитационное моделирование больших вихрей, прямое численное моделирование на основе системы

Навье-Стокса, моделирование осредненных уравнений Рейнольдса и др., что в свою очередь требует использования суперЭВМ эксафлопного класса.

Следует отметить, что прямое увеличение разрешающей способности кода за счет увеличения числа расчетных узлов по всему полю задачи неэффективно. Даже при наличии супервычислителя, прямое уменьшение расчетных ячеек приведет к соответствующему увеличению количества шагов по времени, что при долгосрочном прогнозировании вызовет накопление ошибки вычислений, сводящей к нулю преимущества супервычислителя. Поэтому эксафлопная производительность нужна не для получения возможности прямого увеличения количества вычислительных операций, а для грамотного сопряжения расчета многомасштабных процессов с заданной точностью в темпе собственного времени каждого процесса, применения оптимальной дискретизации, а также наиболее эффективных приближений и алгоритмов для решения разных классов задач, обеспечения эффективного обмена данными.

## **1.9 Использование энергии альтернативных возобновляемых источников**

Для снижения доминирующей роли углеводородной энергетики в России и мире рассматривается возможность получения энергии из альтернативных возобновляемых источников. Например, за счёт применения биотоплива министерство энергетики США планирует к 2020 году сократить потребление бензина на 20%. Для этого требуется произвести молекулярное моделирование биоструктур из миллионов атомов. Что в свою очередь требует эксафлопных технологий.

Для повышения доли ветроэлектроэнергии до 20% к 2030 году также необходима эксафлопная суперЭВМ, позволяющая осуществить многомасштабное моделирование вихрей различного диаметра в районе двигателя ветроэнергоустановки. Для решения подобной задачи на машинах эксафлопного класса потребуются от нескольких часов до нескольких десятков часов, в зависимости от постановки задачи.

## **1.10 Задачи управляемого лазерного термоядерного синтеза**

В настоящее время в США и в Европе создаются мощные экспериментальные установки по исследованию возможностей зажигания лазерных термоядерных мишеней.

Создание этих установок направлено на развитие фундаментальной науки и альтернативной энергетики.

Стоимость этих установок и проведение таких экспериментов очень высока. Поэтому для обоснования постановки условий экспериментов и трактовки их результатов необходимо компьютерное моделирование реальных условий проведения экспериментов.

При изучении взаимосвязанных и очень чувствительных к различным параметрам физических процессов (особенно в лазерной короне), происходящих в термоядерных мишенях, необходимо как можно более точно описать условия формирования фронта ударной волны, оптические свойства веществ и материалов, развитие неустойчивостей, турбулентного перемешивания, особенно в присутствии сложных электромагнитных полей, перенос быстрых заряженных частиц и др.

Согласно оценкам, на машине эксафлопного класса такие расчеты могут быть посчитаны в течение 4-7 суток.

### **1.11 Создание материалов с радикально новыми свойствами в интересах производства на их основе качественно новой высокотехнологичной продукции**

Дальнейший прогресс в машиностроении, материаловедении, в атомной и традиционной тепловой энергетике, медицине, фармакологии становится невозможным без моделирования на уровне атомно-молекулярных взаимодействий. Ключевой становится задача создания материалов, технологий, сложных технических конструкций, биосистем на базе компьютерного моделирования на микро- и наноуровне. Моделирование с высокой точностью разномасштабных процессов, начиная с уровня отдельных атомов и выше, требует вычислительных ресурсов порядка 1-10 Эфлопс.

Следующей задачей эксафлопного класса является анализ процессов радиационного воздействия на различные материалы, моделирование процессов радиационного старения и разрушения конструкционных материалов и др. Ансамбли с числом атомов  $\sim 10^9$ - $10^{11}$  требуют вычислительных мощностей  $\sim 10$ -100 Тфлоп. В

дальнейшем предполагается как усложнение моделей взаимодействия атомов, так и переход на ансамбли с числом атомов  $\sim 10^{16}$  и более. Соответственно должна возрастать производительность суперЭВМ до 1-10 Эфлоп.

Еще одним важным направлением атомистического моделирования является компьютерный дизайн новых материалов с заданными свойствами, например радиационностойких реакторных сталей и сплавов. Основным инструментом здесь является первопринципная молекулярная динамика. Повышение вычислительной мощности до 1 Эфлопс позволит выйти на этот уровень.

## **1.12 Моделирование и анализ сложных явлений и проблем в области живых систем**

Проблематика живых систем отличается широким спектром задач от организации медицинской помощи населению страны до моделирования человеческого мозга, решение которых при всем их многообразии основывается на вычислительных процессах, обладающих некоторой общностью. Данное единство позволяет выдвинуть требования к архитектуре необходимых компьютерных средств и поставить задачу создания оригинальных суперкомпьютерных вычислительных систем рекордной производительности на основе неоднородных (гибридных) вычислительных элементов (в т. ч. за счет применения графических процессоров).

Рассмотрим ряд задач из области живых систем.

1. Медицинская диагностика по данным магнитно-резонансной, компьютерной рентгеновской, оптической когерентной томографии, ультразвуковой, функциональной и морфологической диагностики

Отличительной особенностью данного направления является ориентация на высокотехнологическое медицинское оборудование, при использовании которого возникают задачи сбора, хранения и обработки биомедицинской информации большого объема, представляемой в виде трехмерных изображений, видео- и графических данных. Так, для хранения медицинской информации по результатам томографических обследований для 10000 пациентов потребуются устройства хранения емкостью не менее 10 терабайт ( $10^{12}$  -  $10^{14}$  байт). При количестве пациентов свыше миллиона человек

требования к системе хранения данных возрастают до 10 петабайт. Практика масштабных вычислений показывает, что вычислительная мощность компьютерных систем обработки данных должна соответствовать емкости хранимой информации – тем самым, производительность специализированных высокопроизводительных компьютерных систем должна составлять порядка 100 петафлопс. По экспертным оценкам для обработки такого объема информации потребуется производительность ~10 петафлопс.

## 2. Биоимиджинг

Проблемы биомедицинской визуализации, т.е. построения изображений внутренней структуры биологических объектов с помощью использования различных типов излучений, являются традиционным полем приложения методов вычислительной математики и компьютерного моделирования. При моделировании распространения света в биотканях, являющихся сильно рассеивающими излучение средами, с использованием метода Монте-Карло требуется расчёт траекторий достаточно большого (до  $10^{10}$ - $10^{14}$ ) числа фотонов, формирующих поле облучения в среде.

## 3. Моделирование работы мозга и разработка мозг-компьютерных интерфейсов

Современные компьютерные модели мозга базируются на интеграции в сетевые архитектуры большого количества нейронов (несколько миллионов и выше), соединенных синаптическими связями. Оценки показывают, что для моделирования в реальном времени (т.е. со скоростью, сопоставимой с реальной скоростью обработки информации в объеме всего около 1 мм<sup>3</sup> мозга) уже требуются компьютерные мощности на уровне 1 петафлопс. И, тем самым, моделирование сколько-либо значимых объемов мозга требует суперкомпьютерных систем эксафлопной производительности.

## 4. Применение методов молекулярной динамики и квантовой химии для исследований в области биоинженерии

Биоинженерия является одним из самых перспективных направлений современной науки, требующих огромных объемов компьютерных вычислений. Большой интерес представляют задачи создания искусственных белков, выполняющих заданные функции, разработки новых лекарственных препаратов и т. п.

Описание близкого межмолекулярного взаимодействия осуществляется введением эффективных силовых полей, вид и величина которых определяются на основе квантовохимического рассмотрения. Здесь также широко используются параллельные методы вычислений, в том числе базирующиеся на методе Монте-Карло, с возможностью существенного ускорения за счет использования графических процессоров.

## 5. Компактные лазерные ускорители для радиационной терапии

Создание компактных лазерных ускорителей заряженных частиц с последующим их использованием в адронной терапии раковых опухолей является одной из актуальных задач сегодняшней науки. Ее решение позволило бы широко распространить адронную терапию в клиническую практику за счет сооружения компактных радиационных установок в многочисленных существующих онкологических центрах.

Моделирование взаимодействия сверхмощных лазерных полей с веществом осуществляется с помощью так называемых PIC-кодов (Particle-In-Cell simulation, или вычисления методом частиц в ячейках). Производительность суперЭВМ, требуемая для проведения варианта расчета взаимодействия лазерного импульса с мишенью, составляет 1 Эфлопс.

## **2 НАПРАВЛЕНИЯ ФУНДАМЕНТАЛЬНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ В ОБЛАСТИ ТЕХНОЛОГИЙ ВЫСОКОПРОИЗВОДИТЕЛЬНЫХ ВЫЧИСЛЕНИЙ**

Программа фундаментальных исследований должна рассматривать:

- математические методы и алгоритмы, предназначенные для экзафлопных вычислительных систем;
- архитектуры перспективных вычислительных систем, их принципиальные возможности.

### **2.1 Исследования математических методов и алгоритмов**

Особенностью систем экзафлопного класса, накладывающей специфичные требования к методам моделирования, является количество процессорных ядер и их неоднородность. Влияние этой особенности экзафлопных систем на численные методы необходимо исследовать применительно к следующим физическим процессам, характерным для задач, рассмотренных в Главе 1:

- моделирование процессов в физике высоких энергий и элементарных частиц;
- перенос нейтронов и их взаимодействие со средой;
- перенос рентгеновского излучения;
- перенос заряженных частиц;
- молекулярная динамика;
- теплопроводность;
- турбулентное перемешивание;
- процессы горения и взрыва;
- процессы термовязкоупругопластического деформирования и разрушения повреждаемых сред;
- тепломассообмен и гидродинамика многофазных сред;
- фильтрация многофазных флюидов в пористой среде с деформируемым и повреждаемым скелетом;
- акустика;
- обработка сейсмических данных и т. д.



Использование экзафлопных вычислительных систем дает возможность перейти к более детальному моделированию физических процессов по следующим направлениям:

- более подробная дискретизация по переменным фазового пространства;
  - применения более точных (и, как правило, более сложных) моделей, например, кинетическое приближение вместо диффузионного, прямое моделирование вместо полуэмпирических подходов;
  - использование более совершенных разностных схем повышенной точности;
  - повышение размерности фазового пространства (3D вместо 2D);
- и т. п.

Как указано в третьей части документа, развитие мультипроцессорных вычислительных систем, по-видимому, будет идти по следующим направлениям (не исключая других):

- применение гибридных архитектур; значительная часть производительности будет обеспечиваться арифметическими ускорителями (GPU, FPGA и другими аппаратными средствами следующих поколений);
- увеличение количества процессорных ядер как во всей системе, так и внутри процессорных элементов;
- рост сложности коммуникационной среды; существенные различия в скорости передачи информации на различных уровнях.

### **2.1.1 Направления развития вычислительных алгоритмов**

Для эффективного использования производительности вычислительной системы существующие в настоящее время прикладные программы и комплексы должны быть существенно переработаны, а создаваемые должны учитывать вероятные тенденции развития вычислительных систем. Можно определить ряд направлений такой деятельности.

1. Внедрение в прикладные программные комплексы новых более совершенных (хотя и более затратных с точки зрения вычислительных ресурсов) расчетных схем и приближений. Такая работа помимо создания новых и модификации существующих вычислительных алгоритмов требует численных исследований точности и обоснования новых алгоритмов, а также анализа их применимости к рассматриваемым классам задач имитационного моделирования.

2. В связи с общим увеличением количества вычислительных ядер в перспективных вычислительных системах требуется модификация существующих и создание новых математических методик с целью эффективного распараллеливания на десятки и сотни миллионов процессов. Для большинства методик при использовании комбинированных технологий распараллеливания необходима ориентация на смешанные многоуровневые алгоритмы, например, использование технологии распараллеливания с применением модели распределенной памяти (средствами MPI) между отдельными элементами и модели общей памяти (средствами OpenMP) внутри узлов.

3. Следующим направлением развития математических методик является их адаптация на вычислительные системы следующих поколений. Они, по-видимому, будут базироваться на гибридной архитектуре, например, универсальные ядра, в комплексе с арифметическими ускорителями (GPU и/или FPGA), а также, вероятно, более сложные аппаратные решения, специализированные для решения конкретного типа задач, вид которых пока не определен.

Наиболее сложным представляется переход математических методик к эффективному использованию гибридной архитектуры. В настоящее время в этой области вычислительной техники еще не сформированы устоявшиеся стандарты аппаратного и программного обеспечения, а также отсутствует длительный опыт использования этих средств.

### **2.1.2 Создание решателей систем линейных алгебраических уравнений**

Для ускорения перехода математических комплексов к эффективному использованию гибридных вычислителей необходимо проведение масштабных исследований применимости перспективных технологий для тех или иных методик.

Для ряда методик, основанных на решении сложных уравнений математической физики в частных производных детерминистскими методами, необходимо рассмотреть отдельный подход их адаптации к перспективным гибридным архитектурам. Так, во всех этих методиках наиболее затратную часть вычислительного процесса можно свести к решению системы линейных алгебраических уравнений (СЛАУ). Для решения этих систем могут использоваться стандартные решатели, общие для многих математических методик.

Создание эффективных параллельных решателей СЛАУ становится отдельной задачей, ориентированной на перспективную гибридную архитектуру. Такой подход, с одной стороны, может обеспечить относительно безболезненный для большинства математических методик переход на использование гибридной архитектуры. С другой стороны, при последующем вероятном изменении аппаратных и программных средств вычислительных систем не потребуются большая работа по переделке сложных вычислительных комплексов.

### **2.1.3 Исследование архитектурных особенностей алгоритмов**

Очевидно, что развитие вычислительных методов, прикладного математического обеспечения, исследование связи между алгоритмами и архитектурой вычислительной системы – является основным элементом успеха стратегии экзафлопных вычислений. Без наличия алгоритмов, допускающих адаптацию на сложную архитектуру систем, невозможно решение рассмотренных выше актуальных задач, да и вообще становится бессмысленным само создание систем сверхвысокой производительности.

Целью этого направления фундаментальных исследований является анализ существующих и создание новых алгоритмов, которые бы хорошо адаптировались на многоуровневую архитектуру вычислительных систем, основанную на существенно многоядерных процессорах общего назначения и/или ускорителях. Необходимо проанализировать возможности развития вычислительных алгоритмов применительно к перспективным и, в том числе гибридным, вычислительным системам. При этом рассматриваются вопросы математического моделирования как «традиционных» задач (термогидродинамика, перенос частиц, газовая динамика, теплопроводность, молекулярная динамика, фильтрация, методы решения СЛАУ), так и новых направлений моделирования, которые связаны с описанием физических процессов на современном, более детальном уровне (турбулентность, процессы разрушения, процессы горения и т. п.)

Для типовых алгоритмов, характерных для рассматриваемых в проекте прикладных программных методик, необходимо выполнить исследования с точки зрения их применимости на перспективных вычислительных системах различной архитектуры.

Другой задачей фундаментальных исследований является формирование требований к архитектуре и характеристикам перспективных вычислительных систем с точки зрения типовых алгоритмов (производительность, скорость обменов, память и т. п.).

Следующим направлением является разработка, изучение и численные исследования на модельных задачах новых математических методов, разностных схем и т. п. для рассматриваемого в рамках проекта круга задач экзафлопного класса.

Результатом первого этапа (до 2014 года) должно быть создание вычислительных алгоритмов, адаптируемых на архитектуру существенно многоядерных процессоров (общего назначения или ускорителей), позволяющих решать актуальные задачи на системах с производительностью до 10 Пфлопс должны быть выявлены границы применимости гибридных вычислительных систем. Намечены пути по созданию специализированных вычислительных узлов, ориентированных на непосредственное использование разработанных алгоритмов.

На последующих этапах работа будет выполняться в зависимости от сложившихся к 2014 и 2017 гг. тенденций в развитии вычислительной техники. Будет происходить эволюционное развитие полученных на первом этапе результатов.

## **2.2 Архитектуры гибридных вычислительных систем. Средства масштабирования эффективности**

Представляется необходимым выполнить:

- исследования значений ускорения вычислений гибридными системами и их эффективности с учетом действий законов Амдаля и Густафсона (методы деления/умножения) на  $\sim 10^8$  ядер и обобщить эти исследования на рекурсивные гибридные архитектуры;
- исследования средств масштабирования эффективности гибридных систем в условиях роста их сложности;
- исследования архитектурных средств обеспечения надежности гибридных вычислительных систем;
- исследование взаимодействия вычислительной среды экзафлопной производительности с внешней памятью и с графической подсистемой.

В результате указанных работ должны быть выявлены принципиальные возможности и ограничения, характеризующие вычислительные системы из  $\sim 10^8$  ядер, а также определены перспективные направления для достижения следующих пороговых значений производительности. Перечень направлений и задач, образующих предлагаемую программу фундаментальных исследований, приведен в Приложении Б.

### **2.2.1 Исследование влияния первичных параметров вычислительных процессов на эффективность гибридных систем**

Значения ускорения вычислений гибридными системами и их эффективность зависят от особенностей решаемой задачи и параметров вычислительной среды.

К особенностям задачи, точнее – алгоритма ее решения, относятся длительности нераспараллеливаемых фрагментов, количество и тип операций обмена информацией, синхронность вычислительных процессов и т.п. Создание прикладных алгоритмов и программ, позволяющих максимально использовать возможности вычислительных систем, является специфичной, проблемно – ориентированной областью математики и программирования, методы которой развиваются в 2.1.

В архитектурном аспекте необходимо выполнить исследование средств достижения и масштабирования эффективности мультипроцессорных систем из гибридных элементов, определяемых лишь самыми общими параметрами процессов.

В отличие от однородных для гибридных архитектур характерно то, что вычислительный процесс распределяется между MIMD и SIMD компонентами и лишь затем между процессорами, образующими эти компоненты.

Результирующее ускорение зависит от ускорений достигаемых на MIMD и SIMD компонентах и от размера “долей” вычислительного процесса, приходящихся на эти компоненты.

В результате выполнения исследований:

- для метода деления вычислений и метода умножения исследуется влияние перечисленных факторов на результирующее ускорение, достигаемое применением гибридных вычислителей;

- должны быть получены оценки длительности вычислений гибридными системами в зависимости от соотношений между фрагментами вычислительного

процесса и производительностью MIMD и SIMD компонент, выполняющих эти фрагменты.

Исследование и развитие средств масштабирования предполагается выполнить:

- применительно к одному процессорному элементу;
- применительно к мультипроцессорной среде, состоящей из множества процессорных элементов;
- применительно к системам, архитектурно состоящих из систем меньшей размерности.

### **2.2.2 Исследование архитектур специализированных сегментов**

Принципиальным фактором, определяющим возможность задействования специализированного сегмента, является наличие в вычислительном процессе локального фрагмента, требующего большого количества вычислений.

Целесообразность создания сегмента зависит, во-первых, от доли длительности этого фрагмента, и, во-вторых, от его сложности. Результирующее ускорение описывается законом Амдаля, из которого следует, например, что если фрагмент занимает 90% длительности исходного процесса, и в результате задействования специальных средств его длительность будет «сведена к нулю», то длительность всего процесса будет уменьшена в десять раз. Сложность фрагмента должна позволять его реализацию физическим устройством, параметры которого на этом фрагменте превосходят значения, достигаемые универсальными вычислителями.

В результате выполнения исследований предполагается:

- определить алгоритмы и архитектуру, позволяющие на определённом классе задач получить максимальное быстроедействие по сравнению с универсальными супер ЭВМ;
- сформулировать требования к арифметическим ускорителям и оценить значения параметров, необходимые для решения указанных задач.

### **2.2.3 Исследование средств масштабирования эффективности гибридных вычислительных систем**

Параметрами мультипроцессорных сред, определяющими их эффективность, являются количество процессорных элементов, соотношение между арифметической производительностью процессоров и пропускной способностью средств связи, топология связей среды, надежность и т.д.

Определяющее влияние (помимо надежности рассматриваемой далее) на эффективность среды оказывают разнообразие операций обменов информацией и реализующих эти операции алгоритмов, различных для разных сред и механизмов доставки информации. Необходимо исследовать длительности выполнения средой операций обмена информацией. В частности:

- разработать для различных топологий алгоритмы выполнения операций обменов информацией между процессорными элементами, а также между мультипроцессорной средой и внешней памятью;
- разработать средства построения кластерных сред, в которых процессорные элементы являются в свою очередь средами;
- исследовать средства маршрутизации и коммуникационные возможности различных топологий мультипроцессорных сред;
- оценить зависимости эффективности мультипроцессорных сред от временной сложности алгоритмов обменов (в частности глобальных) для различных топологий и механизмов обмена информацией; показать близость оценок временной сложности этих алгоритмов минимальным значениям;
- разработать средства построения множеств бесконфликтных обменов для сред с различной топологией связей, получить оценки количества и мощности этих множеств.

Тем самым будут установлены сравнительные принципиальные возможности применения тех или иных топологий мультипроцессорных сред в заданных условиях и пороговые значения эффективности, достигаемые ими.

## **2.2.4 Исследование архитектурных средств обеспечения надежности гибридных вычислительных систем**

Надежность мультипроцессорной среды оценивается значением вероятности, с которым эта среда выполняет заданную программу и, следовательно, в течение определенного временного интервала обеспечивает достигаемую на этой программе реальную производительность (и эффективность).

Вследствие неоднородности среды и большого количества ядер необходимы методы резервирования мультипроцессорных сред, обеспечивающие неизменность топологии среды и полную идентичность резервных и резервируемых элементов. Это достигается, во-первых, топологическим резервированием избыточными элементами (сохраняющим производительность среды и связи между процессорными элементами) и, во-вторых, избирательным резервированием, когда одна часть среды используется в случае необходимости для резервирования ее другой части.

В результате исследования должны быть получены оценки вероятностей безотказной работы среды; варьируя количество резервных элементов (как в первом методе, так и во втором) можно изменять значения надежности с целью достижения требуемых приложениями.

Создаваемые средства должны обеспечить с заданной вероятностью безотказное выполнение вычислительного процесса определенной длительности, занимающего заданное количество процессорных элементов.

## **2.2.5 Разработка прогнозного метода расчета производительности и эффективности гибридных вычислительных систем**

Создание систем экзафлопной производительности - ресурсоемкий процесс, достижение требуемого результата зависит от многих факторов.

Необходима разработка метода, позволяющего исходя из параметров используемых компонент и результатов тестирования, ранее созданных систем, прогнозировать при соблюдении определённых условий значения производительности и эффективности вновь создаваемой среды.

Метод прогнозирования основан на применении:

- принципа идентичности топологий мультипроцессорных сред;



- условия соблюдения баланса между арифметической производительностью процессорного элемента и пропускной способностью его средств связи.

Применение разработанных средств должно позволить на этапе проектирования оценивать аппаратную и метрическую сложности мультипроцессорных сред, оптимизировать их пространственное размещение, прогнозировать эффективность, обеспечивать требуемые значения надежности. Актуальность этих методов будет возрастать с увеличением сложности (и соответствующим ростом значений других параметров) будущих мультипроцессорных сред.

## 3 СОЗДАНИЕ ЭКСАФЛОПНЫХ СУПЕРЭВМ

### 3.1 Эксафлопные ограничения

Критичными параметрами эксафлопной ЭВМ в современном представлении являются:

- эффективность;
- энергопотребление;
- надёжность.

Оценки, полученные различными экспертами [14, 15] показывают, что следование применяемым в настоящее время технологиям приведёт к тому, что в 2020г. машина производительностью 1 Эксафлопс будет иметь следующие характеристики:

- количество процессорных ядер  $\sim 10^8$ ;
- потребляемая мощность не менее 100 МВт;
- длительность наработки на отказ не более нескольких минут (возможно меньше);
- конструктивные размеры – более  $10^3$  шкафов общей площадью свыше 2000-3000 м<sup>2</sup>.

Одним из вариантов преодоления конструктивных ограничений и достижения эксафлопной производительности является применение гибридных архитектур, содержащих MIMD и SIMD компоненты.

Вследствие сравнительно простой структуры энергопотребление, конструктивные размеры и стоимость, приходящиеся на единицу производительности SIMD компонентов примерно в 5-10 раз меньше по сравнению с MIMD компонентами.

Предварительные оценки показывают, что применение гибридных архитектур позволяет создать вычислительную систему производительностью:

- 10 Пфлопс в 2014г с энергопотреблением 2000 - 3000 кВт, состоящую из  $10^5/5 \cdot 10^6$  MIMD/SIMD ядер;
- 100 Пфлопс в 2017г с энергопотреблением 4500 – 5000 кВт, состоящую из  $10^6/10^7$  MIMD/SIMD ядер;
- 1000 Пфлопс в 2020г с энергопотреблением  $\sim 20000$  кВт, состоящую из  $10^7/10^8$  MIMD/SIMD ядер.

Потребуется реализация принципиально различных дисциплин вычислений на качественно более высоком уровне параллелизма, сложности и неоднородности вычислительных систем.

Эксафлопная производительность может быть достигнута в результате комплекса взаимозависимых работ, которые включают следующее:

- разработку оптимальной архитектуры, позволяющей обеспечить эффективное исполнение приложений системой из  $\sim 10^8$  ядер;
- создание аппаратных компонентов, удовлетворяющих конструктивным ограничениям и требованиям надёжности;
- разработку системного программного обеспечения, реализующего управление ресурсами и надёжное исполнение приложений на разных уровнях параллелизма;
- создание базового ряда суперЭВМ (экспериментальных систем), позволяющих верифицировать проектные решения.

Удовлетворительным результатом этих работ, приемлемым для практики, будет создание машины, имеющей пиковую производительность не менее 1 Эксафлопс и соответствующую пропускную способность средств обмена информацией, энергопотребление 10-20 МВт, занимающую 100-200 шкафов, оснащённую системным программным обеспечением, позволяющим эффективно распараллеливать приложения на  $\sim 10^8$  процессов, а также соответствующим прикладным программным обеспечением, допускающим эффективное исполнение с указанным параллелизмом.

Оценим возможности достижения перечисленных параметров; последующие названия разделов обозначают направления работ, подразделов – задач, пункты в подразделах – мероприятия и т.д. Приводимые расчеты иллюстрируют лишь принципиальную достижимость целей рассматриваемыми средствами и не должны трактоваться как элементы эскизного или технического проектов.

### **3.2 Разработка и оптимизация архитектуры**

Архитектурные средства должны обеспечить масштабирование эффективности и надёжное выполнение вычислений гибридной системой, содержащей  $\sim 10^8$  ядер, имеющей сильно неоднородную коммутационную среду, в которой скорости обменов

между ядрами одного процессора будут в сотни раз превышать скорости обменов между удаленными ядрами.

Основными архитектурными факторами, определяющими масштабируемость и надёжность (и дополняющими технологические результаты – задержки коммутации, длительности наработки на отказ отдельных компонентов), являются:

- минимизация длительностей обменов информацией в процессе вычислений;
- устранение влияния сбоев и отказов элементов на вычислительный процесс.

### **3.2.1 Архитектурные средства минимизации длительностей обменов**

#### **3.2.1.1 Адаптация процессов и структур связей**

Эти средства предполагают, прежде всего, взаимную адаптацию вычислительного процесса и структуры связей между процессорными элементами с целью минимизации расстояний обменов и исключения конфликтов при выполнении обменов. Возможности адаптации зависят как от топологии вычислительной среды (2D, 3D,  $\Gamma^n$ ,  $T^n$ ), так и от свойств вычислительного процесса (явные схемы, регулярные связи и т.д.) С увеличением сложности машины актуальность и результативность этих средств будет возрастать.

Выполняемые работы необходимо согласовать с работами, указанными в разделе 2, в результате которых должны быть выявлены «регулярные» методы, допускающие простую балансировку нагрузки и однотипность обменов.

В результате должны быть разработаны реализованные в виде инструментального программного комплекса, функционирующего в составе БСПО, средства декомпозиции вычислительных процессов в соответствии с топологиями коммуникационной среды и пропускных способностей ее компонентов, позволяющие вследствие оптимизации размещения и сокращения длительности обменов информацией, сохранить эффективность на некотором пороговом уровне при значительном увеличении количества элементов. Эти средства должны функционировать и в случае отказа отдельных элементов.

### **3.2.1.2 Минимизация длительностей выполнения глобальных алгоритмов обменов**

Предусматривается исследование и разработка топологий, минимизирующих длительности выполнения «сложных», в частности, глобальных алгоритмов обменов, включая обмены с внешней (файловой) средой. Необходимо оценить коммуникационные параметры различных топологий, реализовать алгоритмы маршрутизации для обмена информацией между  $10^9$  процессами.

Результатом работы должна быть библиотека программ глобальных обменов для неоднородных коммуникационных сред, включая генераторы бесконфликтных множеств обменов для выбранных топологий.

### **3.2.2 Средства реконфигурации топологии мультипроцессорных сред**

Задействование в составе процессоров и вычислительных модулей принципиально различных по дисциплине обработки MIMD и SIMD компонент (в перспективе возможно FPGA компонент) обуславливает необходимость оптимизации состава вычислителя, применяемого для выполнения заданного вычислительного процесса. Варьирование составом и производительностью MIMD и SIMD компонент позволяет, исходя из первичных свойств процесса, получить максимальное для заданных условий ускорение вычислений. В результате исследования необходимо разработать и реализовать средства анализа свойств вычислительного процесса и логической реконфигурации структуры вычислительных модулей, обеспечивающую наибольшее для заданных условий ускорение вычислений.

### **3.2.3 Разработка средств топологического резервирования мультипроцессорных сред и вычислительных процессов**

Сбои и отказы отдельных элементов обусловлены как аппаратными, так и программными эффектами, характер и источник которых «некогда» выяснять в процессе счета, их надо исключать и изолировать.

Архитектурные средства обеспечения надежности (дополняющие технологические и схемотехнические достижения) должны не только устранять

источники сбоев и отказов, но и сохранять эффекты масштабирования эффективности, достигаемые в результате применения средств, указанных в предыдущих разделах.

Это может быть достигнуто применением методов топологического резервирования, позволяющих обеспечить в случае отказов и сбоев неизменность топологии среды и ее производительности; в результате полностью исключается необходимость каких бы то ни было изменений исполняемых программ и процессов в случае отказов.

Реализация средств топологического резервирования применительно к процессору (резервирование ядер MIMD и SIMD компонентов), вычислительному модулю (резервирование процессоров), процессорному элементу (резервирование модулей) и т.п. позволит создавать среды с наперед заданными значениями вероятностей исполнения вычислительного процесса определенной длительности.

В результате должны быть разработаны архитектурные решения, а также созданы реализованные в системных библиотеках средства сохранения и возобновления вычислительных процессов на уровне ядра, модуля, элемента и т.д.

### **3.3 Разработка аппаратных компонентов**

Ключевыми компонентами, которые необходимы в машинах эксафлопного класса, но могут оказаться запрещенными к применению без разрешения правительств стран-производителей, являются:

- процессоры для научных расчётов, в качестве которых в ближайшей перспективе рассматриваются MIMD/SIMD процессоры (MIMD – универсальная часть, SIMD – арифметические ускорители), называемые также гибридными; в более отдаленной – MIMD/ SIMD/FPGA;

- система межпроцессорного обмена (СМПО).

Остальные компоненты, по-видимому, будут производиться большими сериями и многими производителями.

Ниже обосновываются значения базовых параметров процессоров и СМПО. В оптимистичном сценарии они могут быть получены на основе импортных компонент. Однако представляется необходимым создание отечественных изделий. Это требует воспитания и развития высококвалифицированных коллективов и соответствующей

культуры проектирования. Эти процессы даже в международной кооперации занимают годы.

### 3.3.1 Вычислительные модули

#### 3.3.1.1 Параметры и состав MIMD/SIMD процессоров

Вычислительный компонент экзафлопной машины (включающий не только процессоры, но и память) должен обеспечить достижение экзафлопной производительности при «разумном» значении энергопотребления – 10-20 МВт и технологической надёжности.

Первое может быть достигнуто совместным применением MIMD и SIMD компонентов. Вследствие сравнительно простой структуры, энергопотребление, конструктивные размеры и стоимость, приходящиеся на единицу производительности SIMD-компонентов, примерно в 10 раз меньше по сравнению с MIMD-компонентами.

Из приведённых в [16-18] данных следуют представленные в таблице 4 значения  $q$  Гфлопс/Вт – удельные производительности для MIMD и SIMD компонентов.

Таблица 4 – Значения удельной производительности

	<b>MIMD Гфлопс/Вт</b>	<b>SIMD Гфлопс/Вт</b>
2010	0,5-1,0	2
2012	1-2	8
2014	2-4	24
2016	4-8	50
2018	10-15	100

В соответствии с указанными в таблице 4 значениями возможна разработка ряда отечественных MIMD/SIMD процессоров производительностью:

- 64 Гфлопс / 500 Гфлопс в 2012 году (проектные нормы 65нм/30нм);
- 144 Гфлопс / 2000 Гфлопс в 2014 году (проектные нормы 45нм/22нм);
- 2000 Гфлопс / 16000 Гфлопс в 2017 году (проектные нормы 22нм/17 нм).

Потребляемая мощность при этом остаётся постоянной – 300-500 Вт.

Вследствие лучшей технологической оснащенности производительность зарубежных компонент в указанные годы может составлять (в планах Intel 15 нм в 2013г. и 8 нм в 2017г.) [16]:

- 256-512 Гфлопс / 1500-2000 Гфлопс в 2012г. проектные нормы 30/30 нм;
- 500-1000 Гфлопс / 4000-8000 Гфлопс в 2014г. проектные нормы 22/22 нм;
- 1000-2000 Гфлопс / 10000-16000 Гфлопс в 2017г. проектные нормы 17/17 нм.

В дальнейших расчетах используем нижние оценки для MIMD-компонент и верхние – для SIMD; это обусловлено большей технологической «простотой» SIMD-компонент.

Потребляемая мощность процессора постоянна – 300-500 Вт.

Полагаем, что к 2017г. отечественные и зарубежные процессоры будут иметь одинаковые значения параметров.

Структура проектируемых процессоров должна содержать:

- избыточные резервные ядра, которые в случае отказа (необходимо уточнить, как его обнаружить) замещают неисправные, сохраняя топологию и обеспечивая (по аналогии с корректировкой памяти) низкоуровневое повышение надёжности в зависимости от кратности резервирования;

- средства динамической реконфигурации структуры процессора, обеспечивающие разделение ядер MIMD и SIMD-компонент на определенные, соответствующие друг другу подмножества (соединенные между собой), состав и производительность которых определяется в соответствии с параметрами исполняемого процесса.

### **3.3.1.2 Исследование MIMD/ SIMD/FPGA процессоров**

FPGA компонента аппаратно реализует исполняемый алгоритм. Вследствие разнообразия алгоритмов и сравнительно высокой стоимости, FPGA компоненты в настоящее время применяются в основном для реализации малоразрядных специфичных вычислений – обработка сигналов, комбинаторные вычисления и т.п. Отсюда сравнительная ограниченность средств программирования.

Представляется необходимым исследование класса научных задач, для решения которых целесообразно применение FPGA в комплексе с MIMD и SIMD компонентами с оценкой параметров энергопотребления и стоимости, а также прогнозом



задействования этих структур для достижения следующих пороговых значений производительности – Zettaflops и Yottaflops.

### **3.3.1.3 Средства объединения MIMD/ SIMD процессоров**

Функционирование современных процессоров требует ~1500 внешних выводов на его корпусе. Полагаем, что это количество, определяемое механическими параметрами, не изменится. Чтобы уменьшить количество связей, реализуемых проводными соединениями, применяют объединение процессоров в вычислительный модуль.

Например, для объединения процессоров и реализации обменов между ними в настоящее время используют общую «подложку», на которой микроэлектронными технологиями реализуются связи между процессорами и внешний интерфейс, через который осуществляется связь с системой межпроцессорного обмена. Примером внешнего интерфейса является совокупность одновременно задействуемых разъемов интерфейса PCI Express или Hypertransport. Возможны другие конструктивные элементы.

Для определенности в расчетах полагаем, что в результате разработки вычислительного модуля должно быть реализовано конструктивное объединение:

- 4 процессоров суммарной производительностью 1 Тфлопс / 8 Тфлопс в 2014г.;
- 8 процессоров суммарной производительностью 4 Тфлопс / 64 Тфлопс в 2017г.;
- 16 процессоров суммарной производительностью 16 Тфлопс / 256 Тфлопс в 2019г.

### **3.3.2 Система межпроцессорного обмена**

Система межпроцессорного обмена должна обеспечивать передачу информации между различными обменивающимися устройствами – между процессорами, вычислительными модулями, их объединениями в группы (кластеры) и между стойками (т.наз. dragonfly-среды).

Скорость обмена информацией на различных уровнях будет сильно различаться (от  $10^{12}$  Байт/с до  $10^{10}$  Байт/с). В зависимости от значения скорости применяются различные физические среды (медь, оптоволокно) и обеспечиваются соответствующие параметры надёжности и стоимости.

Используя полученные независимо оценки отечественных и зарубежных экспертов, показывающие необходимость выполнения соотношения  $\frac{V}{\pi} \sim 0,5-0,05$  Байт/флопс, где  $v$  - суммарная пропускная способность средств обмена информацией между вычислительным модулем и внешней средой,  $\pi$  - пиковая производительность вычислительного модуля, находим, что суммарная пропускная способность внешнего интерфейса вычислительного модуля должна составлять<sup>1</sup>:

- 250 ГБайт /с в 2014г. ( $\frac{V}{\pi}=0,25$  для MIMD и  $\frac{V}{\pi}=0,03$  для SIMD); для 4 процессоров суммарной производительностью 1 Тфлопс / 8 Тфлопс;

- 2500 ГБайт /с в 2017г. ( $\frac{V}{\pi}=0,625$  для MIMD и  $\frac{V}{\pi}=0,04$  для SIMD); для 8 процессоров суммарной производительностью 4 Тфлопс / 64 Тфлопс;

- 25000 ГБайт /с в 2020г. ( $\frac{V}{\pi}=1,6$  для MIMD и  $\frac{V}{\pi}=0,09$  для SIMD); для 16 процессоров суммарной производительностью 16 Тфлопс / 256 Тфлопс.

Пропускная способность канала может быть ниже:

- на порядок для связи между модулями (первый уровень);
- на два порядка для связи между кластерами (второй уровень, 10 модулей);
- на три порядка для связи между стойками (третий уровень, ~100 модулей).

При этом необходимо иметь возможность одновременно задействовать количество каналов, обеспечивающее суммарную пропускную способность не ниже пропускной способности интерфейса вычислительного модуля.

---

<sup>1</sup> Для системы Blue Waters [7]  $\pi=1$  Тфлопс,  $v=192$  ГБайт/с,  $\frac{V}{\pi}=0,2$ ; для системы Cray XE6 [8]

$\pi=210$  Гфлопс,  $v=25,6$  ГБайт/с,  $\frac{V}{\pi}=0,12$ ; в эксафлопном проекте Nvidia [18]  $\pi=13$  Тфлопс,  $v=1$  ТБайт/с,

$\frac{V}{\pi}=0,1$ .

### 3.3.3 Система ввода/вывода

Системы ввода/вывода суперкомпьютеров эксафлопного класса должны будут эффективно функционировать в следующих условиях:

- количество параллельных потоков ввода/вывода  $\sim 10^8$ ;
- количество файлов ( $10^9$ - $10^{10}$ );
- объем хранения, байт ( $10^{16}$ - $10^{17}$ ).

Первоочередной задачей является преодоление увеличивающегося технологического разрыва между значениями производительности доступа к оперативной и внешней памяти, вследствие чего масштабирование системы ввода/вывода ведет к значительному увеличению сложности и стоимости.

Архитектурные решения, существенно расширяющие допустимое множество клиентов ввода/вывода, должны снять дисбаланс в области обменов с внешней памятью. Первые реализации такого подхода (т.н. I/O forwarding) показали свою целесообразность, а также необходимость дальнейшего совершенствования и большей стандартизации программных интерфейсов.

Анализ существующих схем организации обменов прикладных программ с системой хранения показывает, что наиболее типичными (и тяжелыми для системы ввода/вывода) являются следующие типы операций:

- все процессы задачи считывают одни и те же данные из системы хранения;
- процессы задачи одновременно считывают или записывают свою часть из общего для задачи набора данных.

В связи с увеличением количества одновременно выполняемых запросов к системе хранения необходима разработка общих методов построения системы ввода/вывода, допускающей высокую степень масштабирования по числу запросов применительно к типичным операциям ввода/вывода.

Представляется, что приемлемое соотношение числа клиентов к одному серверу могло бы быть в диапазоне 1:1000 – 1:2000. Необходимым условием является

разработка эффективных протоколов репликации и обеспечение целостности метаданных.

Целесообразно проведение исследований, направленных на разработку нового типа файловых систем, сочетающих простые и контентно-зависимые метаданные, расширяющих возможности эффективного поиска информации, учитывающих, как агрегацию метаданных, так и их распределение, а также исследований в области «active storage». Способность новых файловых систем более глубоко отслеживать, фиксировать и задействовать в поисковых операциях характеристики жизненного цикла данных также позволит повысить качество поиска.

Приложение, неэффективно использующее предоставленную модель данных, может свести к нулю архитектурные достоинства системы ввода/вывода. Отдельным направлением работ должно быть совершенствование существующих и разработка высокоуровневых библиотек ввода/вывода. Система ввода/вывода должна учитывать используемые приложением модели данных и способы их отображения на нижележащий слой хранения.

### **3.3.4 Разработка базового ряда экспериментальных образцов вычислительных систем**

Помимо рассмотренных компонент – вычислительных модулей и СМПО - создание опытных образцов предусматривает разработку собственно вычислительной среды и системы внешней памяти, конструктивных элементов, кабельной системы, систем диагностирования, электропитания и охлаждения.

#### **3.3.4.1 Разработка универсальной вычислительной среды и системы внешней памяти**

Основными параметрами вычислительной среды, исчисляемыми в соответствии с параметрами компонентов, являются:

- производительность;
- надежность;
- потребляемая мощность;
- пропускная способность средств связи;
- пропускная способность средств связи с системой внешней памяти.

В таблице 5 приведены значения перечисленных параметров для систем производительностью 10 Пфлопс, 100 Пфлопс и 1000 Пфлопс; значения емкости оперативной и внешней памяти, а также скорости обмена с внешней памятью указаны согласно [14-18].

Вычислительные среды и системы внешней памяти с указанными параметрами и являются индикаторами рассмотренных выше разработок.

Таблица 5 – Значения параметров экспериментальных систем

Параметр	2014 г.	2017 г.	2020 г.
Пиковая производительность MIMD/SIMD, Пфлопс	10 (1,0+9,0)	100 (10+90)	1000 (100+900)
Количество MIMD/SIMD ядер, шт.	$10^5/4,5 \cdot 10^6$	$10^6/10^7$	$10^7/10^8$
Потребляемая мощность, КВт	1625 (500+1125)	4300 (2500+1800)	19000 (10000+9000)
Емкость оперативной памяти, Пбайт	0,5-1,0	2-4	30-40
Пиковая производительность MIMD/SIMD процессора, Гфлопс	(256-512)/ (1500-2000)	(500-1000)/ (4000-8000)	(1000-2000)/ (10000-16000)
Пиковая производительность вычислительного модуля MIMD/SIMD, Тфлопс	(1-2)/(6-8)	(4-8)/(32-64)	(16-32)/ (160-256)
Общая пропускная способность интерфейса вычислительного модуля, Гбайт/с	100-250	1000-2500	10000-25000
Количество MIMD/SIMD процессоров, шт.	4500-6000	11250-22500	50000-90000
Количество вычислительных модулей, шт.	1000-1500	1400-3000	3500-5600
Внешняя память параллельной ФС, Пбайт	10	100	1000
Скорость обмена с внешней памятью, Тбайт/с	1-2	6	60

Необходимо указать на ориентировочный характер приведенных значений параметров; их уточнения и конкретизации должны быть получены в результате

исследования и разработок, которые необходимо выполнить до этапов ОКР (в частности, разработки ТЗ).

### **3.3.4.2 Создание специализированных сегментов вычислительной среды**

Создание специализированных процессоров и вычислительных систем для решения определенной задачи позволяет при выполнении определённых условий, наличие которых является результатом исследований из раздела 2, достигнуть именно на этой задаче рекордных значений производительности, задействуя сравнительно малые ресурсы в части элементной базы и программных средств.

Ряд специализированных вычислительных систем уже сейчас на определенных задачах демонстрируют близкую к эксафлопной производительность, в частности, малоразрядную (менее 64 разрядов).

В качестве задачи, для решения которой целесообразно создать специализированную вычислительную систему, в этой концепции предлагается использовать задачу горения. Необходимость решения именно этой задачи обоснована в разделе 1; целесообразность создания специализированного сегмента устанавливается в результате исследований, выполняемых согласно разделу 2. На основе полученных результатов планируется:

1. разработать аппаратуру и программный эмулятор для исследования поведенческой модели требуемого специализированного процессора;
2. разработать вычислительную модель для каждого масштаба моделируемого процесса;
3. разработать архитектуры сегментов суперЭВМ, ориентированные на решение задач каждого масштаба;
4. разработать программный комплекс для решения задач горения и подземной гидродинамики, ориентированных на специализированную супер ЭВМ эксафлопного класса;
5. создать инфраструктуру проектирования СБИС по доступным проектным нормам;
6. выполнить разработку СБИС микропроцессоров и коммуникационной СБИС «в кремнии»;

7. создать производство СБИС на территории России и изготовить микропроцессорные СБИС для специализированного сегмента производительностью 100 Пфлопс в России (200 тыс. чипов);
8. изготовить опытный образец специализированного сегмента производительностью 100 Пфлопс на отечественной элементной базе;
9. установить прикладной программный комплекс на специализированный сегмент производительностью 100 Пфлопс и выполнить сравнительные исследования пиковой производительности на специальном классе задач.

Полностью перечень направлений и задач приведен в Приложении В.

В результате должен быть создан опытный образец специализированного сегмента производительностью 100 Пфлопс, который на задачах горения и подземной гидродинамики по производительности не будет уступать универсальной супер ЭВМ пиковой производительностью 1000 Пфлопс.

### **3.3.4.3 Конструктивные элементы**

Приемлемый для практики вариант реализации вычислительной системы занимает 100-200 стоек. Исходя из этого, получаем, что конструктивный элемент должен:

- обеспечивать эффективный отвод 100-200 кВт тепла; это потребует разработки соответствующей системы теплообмена и утилизации тепловой энергии для хозяйственных нужд с обратной связью, препятствующей разрушению вычислительной компоненты от теплового удара в случае внезапного отказа системы холодоснабжения;
- осуществлять связи внутри стойки посредством внутрислоежных соединений, реализующих указанные выше пропускные способности СМПО;
- обеспечивать реализацию связей между стойками в соответствии с параметрами СМПО.

Используемая топология связей должна обеспечивать минимизацию метрической сложности.

### **3.3.4.4 Системы электропитания и охлаждения**

Создание этих систем предусматривает применение типовых компонент, обеспечивающих бесперебойность питания. Представляется, что наибольшую

сложность и актуальность приобретает проблема полезного использования тепла, выделяемого вычислительными системами.

Система охлаждения и система электропитания должны обладать обратной связью с вычислительным комплексом, обеспечивающей возможность автоматического оперативного полного или частичного отключения/остановки счета при аварийном полном или частичном отключении или снижении производительности системы охлаждения и системы электропитания. Эта функция становится тем более актуальной, чем больше тепла, выделяемого вычислительным модулем, необходимо отвести во избежание перегрева.

Системы охлаждения и электроснабжения должны быть выбраны и построены с учетом энергосберегающих технологий. Необходимо разработать систему рекуперации тепла с учетом ассимиляции тепловыделений от технологического оборудования.

Поддержание параметров микроклимата, электропитания, а также рабочих параметров оборудования, входящих в комплекс систем инженерного оборудования, должно осуществляться автоматически.

### **3.4 Разработка системного программного обеспечения**

Наряду с различными ОС, сопровождающими аппаратные компоненты, и обеспечивающими функционирование  $10^8$  процессов, требуется разработать и задействовать необходимую для эксплуатации инфраструктуру базового системного и прикладного программного обеспечения, включающую:

- масштабируемые средства программирования, реализующие распараллеливание и одновременное исполнение  $\sim 10^8$  процессов;
- единую систему управления заданиями и управления ресурсами вычислительных комплексов и оперативного мониторинга, обеспечивающую оптимизацию размещения процессов по вычислительным элементам, алгоритмы управления очередями заданий, учитывающих их приоритетность, а также временные, структурные и другие параметры;
- инструментальные средства сбора, накопления и анализа статистической информации счета программ пользователей, а также состояния аппаратных и программных компонент вычислительных комплексов (статистика по ошибкам, отказам оборудования и выполняемым регламентным и аварийным работам);



- системы иерархического хранения данных;
- инструментальные средства исследования неустойчивости мультипроцессорных систем и автоматическую систему тестирования;
- инструментальные средства кроссплатформенных расчетов;
- инструментальные средства профилирования, отладки программ, предварительной и постобработки данных расчетов, визуализации;
- систему сетевой инсталляции, конфигурирования и загрузки ОС;
- средства поддержки работы с контрольными точками и т. п.

Разработка перечисленных средств должна выполняться поэтапно в соответствии с развитием аппаратных компонентов. Эти средства, как и другие компоненты, должны апробироваться на базовом ряде суперЭВМ.

В результате должна быть создана эффективная полнофункциональная операционная среда для высокопроизводительных вычислительных приложений, включая механизмы управления оперативной памятью, высокоскоростного доступа к большим объемам данных, системы многоуровневого управления и хранения данных, оригинальных средств отладки и профилирования, а так же методы декомпозиции и размещения процессов по элементам гибридной вычислительной среды в соответствии с топологией и параметрами её коммуникационной среды. Это должно позволить сохранить эффективность системы при значительном наращивании количества элементов в условиях сильной неоднородности коммуникационных сред.

Разработка каждой из перечисленных компонент выполняется поэтапно в соответствии с возрастанием сложности компонент в создаваемых машинах.

С учетом многопользовательского режима эксплуатации систем экзафлопного класса, определяющим необходимость и возможность одновременной работы многих организаций, включая коммерческие, операционная система должна обладать встроенными сертифицированными функциями защиты информации до уровня коммерческая и/или служебная тайна. Данные элементы защиты должны предусматриваться, разрабатываться и сертифицироваться одновременно с созданием базового системного программного обеспечения.

### **3.5 Разработка языков и систем параллельного программирования. Системы поддержки разработки**

Разработка системы параллельного программирования призвана максимально автоматизировать организацию и синхронизацию параллельно функционирующих  $\sim 10^8$  процессов.

Разработка эффективных программ для гибридных вычислительных систем в привычной и освоенной пользователями языковой среде предполагает создание гибридного языка Фортран и использование языков с явным параллелизмом.

Необходимо исследовать средства автоматизации преобразования имеющихся последовательных Фортран-программ в эффективные параллельные программы для гибридных вычислителей.

### **3.6 Разработка инструментального обеспечения**

#### **3.6.1 Разработка системы диагностирования и мониторинга компонентов**

В результате должна быть реализована система оперативного сбора и обработки информации от всех программных и аппаратных компонент вычислительных комплексов, включая значения температуры, режимы блоков питания, состояния программных сервисов и систем и т.д.

#### **3.6.2 Разработка средств проектирования мультипроцессорных систем**

Для автоматизации проектирования современных супер ЭВМ представляется необходимым разработка системы автоматического проектирования процессорного элемента и создание специального инструментального программного обеспечения, позволяющего для различных топологий и компонентов оценивать и оптимизировать значения следующих параметров мультипроцессорных систем:

- аппаратную и метрическую сложность;
- эффективность на определённых классах задач;
- конструктивную масштабируемость;
- коммуникационные возможности и сложность маршрутизации;
- надёжность.

Результатом создания этого программного обеспечения должен стать инструмент проектирования вычислительных систем, предсказательного моделирования их поведения и эффективности.

### **3.6.3 Создание пакета тестовых программ**

Для оценки показателей производительности и эффективности разрабатываемых суперЭВМ необходимо создать пакет тестовых программ, а также разработать методику тестирования суперЭВМ (в том числе, с гибридной архитектурой). Тестовые программы из состава пакета могут использоваться как на этапе разработки и наладки суперЭВМ, так и на приемочных испытаниях.

Этот пакет может быть разработан на основе Библиотеки тестов, используемой в настоящее время в Госкорпорации «Росатом» [19].

### **3.6.4 Разработка средств тестирования и диагностики коммуникационной среды**

Коммуникационная среда является одной из важнейших компонент любой распределенной вычислительной системы, поскольку она оказывает непосредственное влияние на такие критические параметры системы, как производительность и надежность. В составе программного обеспечения суперЭВМ должны быть средства, обеспечивающие непрерывный мониторинг компонент коммуникационной среды, регистрацию наиболее существенных событий, рассылку уведомлений обслуживающему персоналу при необходимости. Также необходимо разработать набор диагностических тестов для проверки связности сети, выявления дефектных элементов и ошибок, связанных с нарушением целостности передаваемых данных и порядка следования сообщений. Тесты должны учитывать специфику конкретной коммуникационной среды и использовать низкоуровневые программные интерфейсы. Кроме того, необходимы вспомогательные программные средства для выявления и локализации проблем - трассировка пакетов, анализ маршрутной информации, вывод сведений о конфигурации сети и пр.

### **3.6.5 Проектирование и разработка систем для реализации кроссплатформенных расчетов на мультипроцессорных системах**

Процесс разработки специализированного программного обеспечения для разных типов научных задач проходит, как правило, итерационный путь развития. Большинство разрабатываемых программ создается на первом этапе на рабочих местах оснащенных операционной системой с удобным и привычным графическим интерфейсом, имеющей полный комплект средств разработки и отладки программ. На дальнейших этапах по мере потребностей в вычислительной мощности программа может адаптироваться под операционные системы, реализующие функции массовой параллельности. В связи с этим, а также в связи с наличием множества программ, адаптированных под совершенно конкретную операционную среду исполнения, современные суперЭВМ должны реализовывать функции проведения кроссплатформенных расчетов. В планируемых к созданию суперЭВМ предусматривается разработка средств обеспечения кроссплатформенных расчетов на гибридных архитектурах.

### **3.6.6 Препроцессинг и постобработка**

Высокопроизводительные вычислительные системы пета- и эксафлопного класса открывают новые возможности по численному моделированию физических процессов, дают возможность перейти к более детальному численному моделированию физических процессов и дают толчок для активной оптимизации и модернизации алгоритмов математических методик. Эти процессы влекут за собой грандиозный рост объёмов результатов имитационного моделирования и серьёзное усложнение технологий подготовки данных для дальнейших расчётов.

В связи с этим остро встаёт задача совершенствования существующих и разработки новых программных комплексов и алгоритмов для подготовки начальных данных численного моделирования и для анализа и обработки результатов моделирования. Анализ и визуализация данных могут оказаться ограничивающими факторами в достижении понимания научных результатов. Потенциальное влияние вычислений экса-масштаба будет измеряться не просто мощностью, которую они могут обеспечить для моделирования и обработки, но также возможностями, которые они предоставляют для управления полученными данными и их осмысления.

Обработать такие расчётные данные без применения высокопроизводительных вычислительных систем пета- и эксафлопного класса не представляется возможным.

Важно отметить, что в данной предметной области проще перестроить алгоритмы, чем в численном моделировании, также часто нет необходимости в двойной точности вычислений. Поэтому решения задач предобработки и постобработки с помощью высокопроизводительных вычислительных систем нового поколения могут быть стартовой и опытной площадкой для дальнейшей модернизации математических методик.

### **3.6.7 Системы управления научными и инженерными данными**

Экспериментальная наука и моделирование (включая имитационное) в настоящее время порождают наборы данных петабайтного масштаба (в комбинации с многократным выполнением задач моделирования они достигают эксабайтных масштабов). Управление наборами данных эксабайтного масштаба должно уже сейчас являться частью процесса планирования для основных перспективных научных проектов, связанных с мегаустановками (физика высоких энергий) и сложными задачами моделирования.

Управление научными и инженерными данными позволяет решать не только проблемы больших объёмов данных и их сложности, но также повышает эффективность повторного использования данных, что во многих методах научного и инженерного анализа является критическим фактором для успешного поиска скрытых закономерностей в данных. Важнейшей задачей является организация взаимодействия эксафлопных вычислительных систем с распределёнными эксабайтными источниками данных, а также организация хранения, обмена, обработки и анализа (включая визуализацию) эксабайтных потоков данных.

Это направление является жизненно важным для систем пета-масштаба и будет еще важнее для экса-систем, поскольку большинство научных и инженерных приложений таких масштабов будут отличаться чрезвычайно интенсивной обработкой данных. Нужен общий подход, который перекрывал бы все этапы от получения исходных данных до заключительного анализа полученных данных.

Для управления научными и инженерными данными в различных прикладных дисциплинах на экса-масштабе требуется:

- Доступность инструментов управления данными, способных управлять данными в заданном масштабе.
- Наличие масштабируемых алгоритмических методов для статистического анализа и обработки данных в заданном масштабе.
- Наличие математических моделей, позволяющих “сохранить данные сейчас и проанализировать позже” в заданном масштабе.
- Наличие моделей и инструментов для индексирования, выполнения запросов и поиска в огромных наборах данных для выявления экспертных знаний.
- Наличие инструментов для управления рабочим процессом.
- Наличие масштабируемых форматов данных и метаданных.

Управление научными данными объединяет несколько задач, требующих проработки на эксафлопном уровне. Среди них:

- средства поиска, обработки и анализа данных;
- управление рабочим потоком;
- создание новых баз данных;
- масштабируемые научные форматы и высокоуровневые библиотеки;
- глобальные (wide area) доступ, перемещение и запросы данных.

### **3.7 Создание базового ряда суперЭВМ**

С целью обеспечения паритетного уровня работ с другими государствами разработку базового ряда необходимо выполнять в следующие сроки:

- система производительностью не менее 10 Пфлопс – 2014г.;
- система производительностью не менее 100 Пфлопс – 2017г.;
- система производительностью не менее 1000 Пфлопс – 2020г.

Параметры создаваемых систем указаны в таблице 5.

В планируемых машинах, предусматривается, начиная со второго этапа, задействование компонентов, средств проектирования, моделирования и масштабирования, созданных на предыдущем этапе.

Указанные значения производительности и следующая из них сложность создаваемых суперЭВМ представляются достаточными для всесторонней проверки архитектурных и программных решений, задействованных в этих системах.

Предлагаемые сроки и этапы взаимоувязываются с планами создания прикладного программного обеспечения.

Создание вычислительных систем предусматривает процесс приобретения компонент, их автономного тестирования, монтажа и проведения испытаний.

Создание систем производительностью 10 Пфлопс в 2014 г. и 100 Пфлопс в 2017 г. позволит подготовить и обосновать проектные решения для машины производительностью в 1 Эксафлопс.

### **3.8 Создание и развитие суперкомпьютерных центров**

Одной из актуальных задач развития суперкомпьютерной отрасли России является создание суперкомпьютерных центров (СКЦ). СКЦ позиционируются как центры коллективного пользования с предоставлением вычислительных ресурсов предприятиям и организациям для проведения расчетов с использованием скоростных каналов удаленного доступа. Основная задача суперкомпьютерных центров коллективного пользования – широкомасштабное применение отечественных суперкомпьютерных технологий в промышленности, образовании и научных исследованиях.

Помимо предоставления вычислительных ресурсов СКЦ представляет собой структуру, выполняющую ряд других важных функций: развитие технологий удаленного доступа к вычислительным системам, развитие спектра услуг по решению практических задач, развитие экспертизы по суперкомпьютерному моделированию в различных отраслях, подготовка высококвалифицированных специалистов в области разработки и применения суперкомпьютерных технологий и др.

С учетом различной потребности предприятий и организаций в вычислительных ресурсах целесообразным является создание суперкомпьютерных центров различного уровня, которые могут быть классифицированы по производительности:

- федеральные суперкомпьютерные центры – центры с производительностью вычислительных ресурсов от сотен ТФлопс до десятков ПФлопс и более;

- региональные и отраслевые суперкомпьютерные центры – центры с производительностью вычислительных ресурсов от нескольких ТФлопс до сотен ТФлопс и более.

В качестве федеральных СКЦ предлагается развитие существующих в настоящее время крупных вычислительных центров, нацеленных на решение глобальных задач науки, промышленности и образования:

- вычислительный центр ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ», основное назначение которого – решение наукоемких задач в интересах исследований и разработок высокотехнологичных отраслей промышленности (ядерная энергетика, авиа- и ракетостроение, автомобилестроение и др.) и науки (лазерный термоядерный синтез, ядерная физика, физика высоких плотностей энергии и др.), разработка и внедрение ключевых компонент суперкомпьютерных технологий;
- вычислительный центр МГУ им. М.В. Ломоносова, основное назначение которого – фундаментальные научные исследования: обслуживание масштабных научных и исследовательских проектов, разработка компонент суперкомпьютерных технологий;
- межведомственный суперкомпьютерный центр РАН, основное назначение которого фундаментальные научные исследования в интересах развития суперкомпьютерных технологий;
- вычислительный центр НИЦ «Курчатовский институт», основное назначение которого – исследования в области ядерной физики и НБИК-технологий, обработка сверхбольших массивов данных и др.

Региональные и отраслевые СКЦ должны быть созданы в крупных регионах России, обладающих высоким наукоемким потенциалом, а также на базе крупных ВУЗов, ведущих предприятий высокотехнологичных отраслей промышленности и отраслевых НИИ.

Предлагается создание порядка 1-2 десятков региональных СКЦ (размещение в крупных научных центрах: ФГУП «ВНИИТФ», ИПМ им. М.В. Келдыша С.-Петербург, Нижний Новгород (ННГУ), Уфа (УГАТУ), Казань (КГУ), Екатеринбург, Новосибирск (НГУ), Томск (ТГУ), Челябинск (ЮУрГУ), Владивосток и др.) и порядка 40 отраслевых СКЦ (размещение: предприятия и НИИ наукоемких отраслей – ОАО



«Атомэнергопроект» г. Санкт-Петербург, ОАО ОКБ «ГИДРОПРЕСС», ОАО «ОКБМ Африкантов», ФГУП «НИТИ им. А.П. Александрова», ОАО «ВНИИАЭС», ОАО «Атомэнергопроект» г. Москва, ОАО «НИКИЭТ», ФГУП «ГНЦ РФ ФЭИ», ИБРАЭ РАН; ОАО «ОКБ Сухого», ОАО «НПО Сатурн», ФГУП «ЦАГИ», ФГУМ «ЦИАМ им. П.И. Баранова»; ОАО «КАМАЗ»; ФКП «НИЦ РКП», ОАО «КБ ХимАвтоматики», ФГУП ГНПРКЦ «ЦСКБ-Прогресс», ФГУП «ЦНИИМаш»; ОАО «ЦНИИ «Буревестник»; ОАО «ЦКБ МТ «Рубин»; организации РАН – НИИСИ РАН; крупные ВУЗы – МАИ, МГТУ им. Баумана, СГАУ и др.)

Обобщённые параметры СКЦ по производительности супер-ЭВМ и энергопотреблению представлены в таблице 6.

Таблица 6. Общие параметры СКЦ по этапам.

Тип СКЦ	Количество	2015	2017	2020
<b>Федеральные</b>	<b>4</b>	<b>1ПФ</b>	<b>10ПФ</b>	<b>100ПФ</b>
Энергопотребление		до 1 МВт	до 1,5 МВт	2-3 МВт
<b>Региональные и отраслевые</b>	<b>10-20 и 40</b>	<b>50ТФ</b>	<b>500ТФ</b>	<b>5ПФ</b>
Энергопотребление		до 50 кВт	до 100 кВт	100-150 кВт

Этапы развития СКЦ представлены в разделе 5 и Приложении В, соответственно. При расчёте затрат на создание СКЦ помимо стоимости супер-ЭВМ следует учитывать расходы на капитальное строительство, поскольку во многих случаях возможно использование уже существующих помещений. Кроме того, на стоимость инженерной инфраструктуры сильное влияние оказывают климатические факторы, уровень оснащённости территории, ценовой уровень региона и пр.

Эксплуатационные расходы так же напрямую зависят от территориального расположения конкретного суперкомпьютерного центра. По экспертным оценкам они могут составлять 6-10% в год от стоимости супер-ЭВМ.

#### **4. ПОДГОТОВКА ВЫСОКОКВАЛИФИЦИРОВАННЫХ КАДРОВ В ОБЛАСТИ ЭКСАФЛОПНЫХ ТЕХНОЛОГИЙ**

Значимость развития и практического использования перспективных супер ЭВМ экзафлопного уровня ставит перед системой высшего образования проблему подготовки высококвалифицированных кадров в области суперкомпьютерных технологий. Масштабность задач математического моделирования сложных явлений, систем и объектов, сложность разработки экзафлопных систем и их программного обеспечения требует применения качественно новых подходов к подготовке кадров. Решение данной проблемы относится к стратегически важным в работах по созданию экзафлопных технологий.

Для решения проблемы подготовки кадров максимально должен быть задействован потенциал Суперкомпьютерного консорциума университетов России (<http://www.hpc-russia.ru>), в состав которого входят более 30 российских университетов.

Принципиально важным является использование результатов выполнения Проекта комиссии Президента по модернизации и техническому развитию экономики России «Создание системы подготовки высококвалифицированных кадров в области суперкомпьютерных технологий и специализированного программного обеспечения».

Деятельность по созданию системы подготовки высококвалифицированных кадров в области экзафлопных технологий может быть организована по следующим четырем видам работ:

- создание системы базовых (опорных) научно-образовательных центров экзафлопных вычислительных технологий;
- разработка учебно-методического обеспечения подготовки кадров в области экзафлопных технологий;
- реализация образовательных программ подготовки, переподготовки и повышения квалификации кадров в области экзафлопных технологий;
- разработка и реализация системы информационного обеспечения общества в области суперкомпьютерных технологий.

Охарактеризуем их. Перечень направлений и задач приведены в Приложении Г.

#### **4.1. Создание системы базовых (опорных) научно-образовательных центров эксафлопных вычислительных технологий**

Необходимое качество работ может быть обеспечено при максимальной концентрации усилий и привлечения потенциала ведущих организаций Минобрнауки России, РАН, промышленности, имеющих опыт и успешно действующих в области суперкомпьютерных технологий. Первоочередная задача по созданию системы подготовки состоит в организации сети базовых (опорных) научно-образовательных центров эксафлопных вычислительных технологий (НОЦ ЭВТ). В состав такой сети должны войти 10-12 ведущих университетов России, институтов РАН, организаций промышленности.

В университетах должна быть организована целевая интенсивная подготовка высококвалифицированных специалистов в области эксафлопных технологий (бакалавриат, магистратура, аспирантура, докторантура) и должно быть обеспечено активное выполнение фундаментальных и прикладных работ по эксафлопной тематике.

В институтах РАН, включаемых в состав сети НОЦ ЭВТ, должно быть организовано выполнение научно-исследовательских работ в области эксафлопных вычислений с активным привлечением студентов старших курсов, магистров, аспирантов, молодых ученых и специалистов. В данных институтах могут создаваться базовые кафедры и научно исследовательские лаборатории для целевой интенсивной подготовки специалистов эксафлопной тематики. Создание НОЦ ЭВТ университетской части сети может быть выполнено как развитие центров суперкомпьютерных технологий, образованных в рамках Проекта комиссии Президента по модернизации и техническому развитию экономики России «Создание системы подготовки высококвалифицированных кадров в области суперкомпьютерных технологий и специализированного программного обеспечения» [20] в 2010-2011 гг.

В организациях промышленности, включаемых в состав сети НОЦ ЭВТ, должно обеспечиваться возможность образовательных научных и практических стажировок студентов старших курсов, магистров, аспирантов, молодых ученых и специалистов для практического освоения проблематики эксафлопных вычислений.

В создаваемой сети НОЦ ЭВТ должна быть обеспечена концентрация научно-образовательного потенциала страны в области эксафлопных технологий, что позволит

достичь высокого уровня подготовки кадров в области экзафлопных вычислений. В организациях (университетах, институтах РАН, предприятиях), включаемых в состав сети, должны иметься или должен быть обеспечен доступ к вычислительным ресурсам петафлопного уровня.

#### **4.2. Разработка учебно-методического обеспечения подготовки кадров в области экзафлопных технологий**

Масштабность задачи развития экзафлопных технологий, сложность разработки программного обеспечения для супер-ЭВМ экзафлопного класса требуют радикального изменения существующей системы высшего образования в области информационных технологий. Представляется необходимым введение нового направления подготовки по теме «Математическое моделирование и высокопроизводительные вычисления» с длительностью обучения не менее 5 лет (подготовка специалистов). Для реализации данного предложения необходима оперативная подготовка федерального образовательного стандарта 3 поколения.

В этом же направлении работ целесообразным является подготовка профилей «Математическое моделирование сложных явлений, объектов и систем» и «Высокопроизводительные вычисления» в существующем направлении подготовки «Прикладная математика и информатика», по которому осуществляется подготовка кадров более чем в 60 университетах страны.

Значимой частью работ по созданию учебно-методического обеспечения подготовки кадров в области экзафлопных технологий должна явиться разработка предложений по расширению федеральных образовательных стандартов, по которым будет обеспечена подготовка специалистов по всему спектру проблем экзафлопных технологий:

- физика моделей;
- математическое моделирование;
- архитектура вычислительных систем и аппаратное обеспечение;
- разработка программного обеспечения;
- проектирование, разработка и эксплуатация суперкомпьютерных систем.

Необходимо расширить федеральные образовательные стандарты, по которым осуществляется подготовка специалистов в разных проблемно-ориентированных

областях деятельности для включения в программы подготовки разделов, связанных с математическим моделированием, вычислительными методами, вычислительным экспериментом, суперкомпьютерными технологиями.

Необходимо разработать планы образовательных, научных и практических стажировок студентов старших курсов, магистров, аспирантов, молодых ученых и специалистов по практическому освоению технологии экзафлопных вычислений. Должна предусматриваться возможность как краткосрочных (от нескольких недель до 2-3 месяцев), так и долгосрочных (до 2-3 лет) образовательных и научных стажировок. Среди категорий лиц, для которых могут быть организованы стажировки, особое внимание должно быть уделено преподавателям вузов, осуществляющих подготовку специалистов в области высокопроизводительных вычислений.

Существенной частью работ должна явиться разработка образовательных программ переподготовки и повышения квалификации кадров в области экзафлопных технологий.

В рамках данного направления должны быть разработаны предложения по созданию новых и развитию существующих учебных курсов, по подготовке учебников и учебно-методических материалов по проблематике экзафлопных вычислений. Существенной частью разрабатываемого учебно-методического обеспечения должны являться целевые лабораторные практикумы.

При выполнении работ данного направления должны использоваться в полной мере результаты выполнения Проекта комиссии Президента по модернизации и техническому развитию экономики России «Создание системы подготовки высококвалифицированных кадров в области суперкомпьютерных технологий и специализированного программного обеспечения» [20].

#### **4.3. Реализация образовательных программ подготовки, переподготовки и повышения квалификации кадров в области экзафлопных технологий**

Реализация образовательных программ подготовки, переподготовки и повышения квалификации кадров в области экзафлопных технологий должна включать:

- разработку и реализацию мер по привлечению талантливой молодежи для обучения в области математического моделирования и высокопроизводительных вычислений;

- организацию массового обучения для достижения базового уровня подготовки в области математического моделирования и высокопроизводительных вычислений;
- реализацию целевой подготовки кадров в области экзафлопных технологий (бакалавриат);
- реализацию целевой интенсивной подготовки высококвалифицированных кадров в области экзафлопных технологий (магистратура);
- реализацию подготовки кадров высшей квалификации в области экзафлопных технологий (аспирантура, докторантура);
- реализацию программ переподготовки и повышения квалификации кадров в области экзафлопных технологий;
- реализацию планов образовательных, научных и практических стажировок студентов старших курсов, магистров, аспирантов, молодых ученых, специалистов и преподавателей вузов для практического освоения проблематики экзафлопных вычислений.

#### **4.4. Разработка и реализация системы информационного обеспечения общества в области суперкомпьютерных технологий**

Необходимо обеспечить реализацию системы информирования общества в области экзафлопных технологий, что предусматривает публикацию монографий, учебников, научно-популярных статей, подготовку и трансляцию передач телевидения, размещение материалов в электронных изданиях и других презентаций результатов развития системы экзафлопных технологий. Выполнение работ данного направления ориентировано на популяризацию научных знаний в области суперкомпьютерных средств и технологий, привлечение талантливой молодежи в науку и в развитие стратегических направлений экономики.

## 5. ЭКОНОМИЧЕСКИЕ ПАРАМЕТРЫ КОНЦЕПЦИИ

Подробно перечень направлений и задач, требуемые для реализации Концепции с указанием исполнителей, приведены в Приложениях А, Б, В и Г.

Эти оценки обобщены по этапам и указаны в таблице 7.

Таблица 7 - Стоимость создания технологии высокопроизводительных вычислений

		1 этап 2012-2014	2 этап 2015-2017	3 этап 2018-2020
№	Направления	Ресурсное обеспечение чел/л и млн.рублей		
<b>Создание и внедрение прикладного программного обеспечения</b>				
1	Исследование предметных областей и разработка математических методов и расчетных схем решения экзафлопсных задач имитационного моделирования	Подлежит уточнению	Подлежит уточнению.	Подлежит уточнению
<b>Фундаментальные исследования технологий высокопроизводительных вычислений</b>				
2	Исследование алгоритмов математического моделирования, численных методов повышенной точности и их применимости для перспективных вычислительных систем.	Подлежит уточнению.	Подлежит уточнению.	Подлежит уточнению
3	Исследование и разработка архитектур гибридных вычислительных систем и средств масштабирования эффективности			
<b>Создание суперЭВМ</b>				
4	Разработка и оптимизация архитектуры	Подлежит уточнению	Подлежит уточнению	Подлежит уточнению
5	Разработка аппаратных компонентов			
6	Разработка системного программного обеспечения			
7	Разработка инструментального программного обеспечения			
8	Разработка языков и систем параллельного программирования			
9	Создание опытного образца суперЭВМ			
10	Создание и развитие суперкомпьютерных центров			
<b>Разработка специализированных сегментов суперЭВМ</b>				
10	Создание специализированных сегментов суперЭВМ.	Подлежит уточнению	Подлежит уточнению	Подлежит уточнению

Продолжение таблицы 7.

		1 этап 2012-2014	2 этап 2015-2017	3 этап 2018-2020
№	Направления	Ресурсное обеспечение чел/л и млн.рублей		
<b>Подготовка специалистов</b>				
11	Создание системы базовых (опорных) научно-образовательных центров эксафлопсных вычислительных технологий	Подлежит уточнению	Подлежит уточнению	Подлежит уточнению
12	Разработка учебно-методического обеспечения подготовки кадров в области эксафлопсных технологий			
13	Реализация образовательных программ подготовки, переподготовки и повышения квалификации кадров в области эксафлопсных технологий			
14	Разработка и реализации системы информационного обеспечения общества о достижениях в области суперкомпьютерных технологий			
	<b>Общая стоимость этапа:</b>	Подлежит уточнению	Подлежит уточнению	Подлежит уточнению
	<b>В том числе:</b>			
	Стоимость создания технологии эксафлопсных вычислений	Подлежит уточнению	Подлежит уточнению	Подлежит уточнению
	Стоимость создания отечественной электронной компонентной базы	Подлежит уточнению	Подлежит уточнению	Подлежит уточнению

Итоговая стоимость создания технологии высокопроизводительных вычислений для решения наукоемких задач промышленности на базе вычислительной системы эксафлопного класса указана в таблице 8.



Таблица 8 - Итоговая стоимость создания эксафлопных технологий

Направления	Ресурсы
<b>Создание и внедрение прикладного программного обеспечения</b>	
<ul style="list-style-type: none"> <li>– Исследование предметных областей и разработка математических методов и расчетных схем решения эксафлопсных задач имитационного моделирования</li> </ul>	Подлежит уточнению
<b>Фундаментальные исследования технологий высокопроизводительных вычислений</b>	
<ul style="list-style-type: none"> <li>– Исследование алгоритмов математического моделирования, численных методов повышенной точности и их применимости для перспективных вычислительных систем;</li> <li>– Исследование и разработка архитектур гибридных вычислительных систем и средств масштабирования эффективности.</li> </ul>	Подлежит уточнению.
<b>Создание суперЭВМ</b>	
<ul style="list-style-type: none"> <li>– Разработка и оптимизация архитектуры;</li> <li>– Разработка аппаратных компонентов;</li> <li>– Разработка системного программного обеспечения;</li> <li>– Разработка инструментального программного обеспечения;</li> <li>– Разработка языков и систем параллельного программирования;</li> <li>– Создание базового ряда суперЭВМ;</li> <li>– Создание и развитие суперкомпьютерных центров</li> </ul>	Подлежит уточнению
<b>Разработка специализированных сегментов суперЭВМ</b>	
<ul style="list-style-type: none"> <li>– Разработка специализированных сегментов суперЭВМ.</li> </ul>	Подлежит уточнению
<b>Подготовка специалистов</b>	
<ul style="list-style-type: none"> <li>– Создание системы базовых (опорных) научно-образовательных центров эксафлопсных вычислительных технологий;</li> <li>– Разработка учебно-методического обеспечения подготовки кадров в области эксафлопсных технологий;</li> <li>– Реализация образовательных программ подготовки, переподготовки и повышения квалификации кадров в области эксафлопсных технологий.</li> </ul>	Подлежит уточнению.

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В документе представлены концептуальные предложения по созданию принципиально новой технологии высокопроизводительных вычислений на базе суперЭВМ экзафлопного класса на 2012-2020 годы. Реализация Концепции требует разработки качественно новых технологий и направлена на решение стратегических задач развития РФ в ближайшее десятилетие.

При создании вычислительных систем экзафлопного класса необходимо использовать принципиально новые гибридные архитектуры, реализующие различные дисциплины вычислений, а также разработать прикладное программное обеспечение, качественно отличное от существующего.

Работы предполагается выполнить в три этапа с окончанием в 2015, 2017 и 2020 году, предусматривающих разработку суперЭВМ производительностью 10, 100 и 1000 Пфлопс, соответственно. Созданные суперЭВМ будут оснащены специально разработанным прикладным программным обеспечением, позволяющим выполнять комплексное моделирование разномасштабных процессов на основе совершенных математических методик с использованием мультифизичных моделей.

Применение экзафлопных технологий направлено на решение ключевых задач обороны и высокотехнологичных отраслей промышленности, в частности:

- обеспечения надежности и безопасности ядерного арсенала в современных условиях (отсутствие натуральных испытаний, изменения в материалах и технологиях производства).

- повышения безопасности, сокращения сроков разработки и проектирования ЯЭУ, увеличения эффективности атомных электростанций.

- повышения эффективности тепловой энергетики на базе углеводородных источников энергии, а также совершенствования технических характеристик и усиления конкурентоспособности наукоёмкой продукции высокотехнологичных отраслей промышленности (авиационная, ракетно-космическая, автомобильная, судостроительная отрасли и др.).

Изложенный в документе перечень работ определяет необходимые принципиальные результаты, сроки и трудозатраты, требуемые для их достижения. Он может быть дополнен и уточнен в процессе реализации представленных предложений.

Развитие технологии высокопроизводительных вычислений на базе суперЭВМ эксафлопного класса является комплексной задачей, реализация которой возможна только в широкой кооперации научно-исследовательских и конструкторских организаций промышленности, учреждений науки и образования. Создание данной технологии является неотъемлемым условием инновационного развития науки, промышленности и экономики России..

## СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ

- [1] Протокол заседания комиссии при Президенте Российской Федерации по модернизации и технологическому развитию экономики России от 18 июня 2009 г. № 1. [Электронный ресурс]. Режим доступа:  
<http://www.i-russia.ru/sessions/decisions/24.html>
- [2] Rick Stevens and Andy White. A DOE Laboratory plan for providing exascale applications and technologies for critical DOE mission needs [Электронный ресурс]. Режим доступа: [http://computing.ornl.gov/workshops/SCIDAC2010/r\\_stevens.pdf](http://computing.ornl.gov/workshops/SCIDAC2010/r_stevens.pdf)
- [3] Rick Stevens and Andy White. A decadal DOE plan for providing exascale applications and technologies for critical DOE mission needs [Электронный ресурс]. Режим доступа: <http://asc.llnl.gov/ascrihome/post-meeting.html>
- [4] Steven E. Koonin Under Secretary for Science. Simulations, Exascale, and the Broader Energy Context. 8 March 2011. ASCR Exascale Research Kickoff Meeting [Электронный ресурс]. Режим доступа:  
<http://exascaleresearch.labworks.org/ascrMar2011/ascr2011/index/materials>
- [5] International Exascale Software Project [Электронный ресурс]. Режим доступа: [www.exascale.org](http://www.exascale.org)
- [6] The Defense Advanced Research Projects Agency DARPA [Электронный ресурс]. Режим доступа: [www.darpa.mil](http://www.darpa.mil)
- [7] IBM Blue Waters [Электронный ресурс]. Режим доступа:  
<http://www.ncsa.illinois.edu/BlueWaters>
- [8] Cray Titan [Электронный ресурс]. Режим доступа:  
<http://www.knoxnews.com/news/2011/mar/07/oak-ridge-lab-to-add-titanic-supercomputer/>
- [9] PRACE [Электронный ресурс]. Режим доступа: [www.prace-project.eu](http://www.prace-project.eu);
- [10] European Exascale Software Initiative (EESI) European roadmap for Exascale [Электронный ресурс]. Режим доступа: <http://www.eesi-project.eu/>
- [11] Towards EXascale Applications (TEXT) Project Overview [Электронный ресурс]. Режим доступа: <http://www.project-text.eu>
- [12] Investigation Report on Existing HPC Initiatives. CSA-2010-261513 European Exascale Software Initiative CONTRACT NO EESI 261513
- [13] Режим доступа: <http://www.exascale.org/mediawiki/images/b/b8/Talk25-zjin.pdf>

[14] Impact of Architecture and Technology for Extreme Scale on Software and Algorithm Design. Jack Dongarra. Cross-cutting Technologies for Computing at the Exascale. February 2-5, 2010 – Washington, D.C.

[15] Exascale Evolution. Brad Benton, IBM. March 15, 2010.

[16] Режим доступа:

[http://www.ecmwf.int/newsevents/meetings/workshops/2010/high\\_performance\\_computing\\_14th/presentations/barkai.pdf](http://www.ecmwf.int/newsevents/meetings/workshops/2010/high_performance_computing_14th/presentations/barkai.pdf)

[17] SC'09 Exascale Panel. Steve Scott. Cray Chief Technology Officer. Exhibitor Forum, SC' 09.

[18] An Nvidia Exascale Machine in 2017.

[19] Бартенев Ю.Г., Степаненко С.А., Игнатьев А.О., Крюков В.М. Процедура тестирования мультипроцессорных вычислительных систем на приемочных испытаниях. инв. № 8/19618, 2006г.

[20] [Электронный ресурс]. Режим доступа: <http://www.i-russia.ru>.

[21] Blue Waters: Leading the Way in Sustained Petascale Computing. Thom Dunning. National Center for Supercomputing Applications, Institute for Advanced Computing, University of Illinois at Urbana-Champaign, 13-14 April 2011, Helsinki, Finland.

[22] April 13, 2011 Knoxville News Sentinel Munger: China could become supercomputing partner. [Электронный ресурс]. Режим доступа: <http://www.knoxnews.com/news/2011/apr/13/china-could-become-supercomputing-partner/>

[23] В.Б. Бетелин, А.А. Боксерман, В.Е. Костюков, В.А. Савельев. «Проблемы управления процессами повышения нефтеотдачи на основе моделирования на супер-ЭВМ». НефтеГазоПромысловый инжиниринг. 2010, 3 кв., с.20-24.

[24] Smirnov N.N., Kisselev A.B., Nikitin V.F., Zvyaguin A.V., Thiercelin M. LegrosJ.C. Hydraulic Fracturing and Filtration in Porous Medium. 2006 SPE Russian Oil and Gas Technical Conference and Exhibition, Moscow, October 2006. SPE-102570.

[25] Smirnov N.N., V.F.Nikitin, V.R.Dushin, Yu.G.Phylippov, V.A.Nerchenko. Three-dimensional convection and unstable displacement of viscous fluids from strongly encumbered space. Acta Astronautica, vol. 66 (2010) pp. 844–863.

[26] John A. Turner. Computational Science Challenges in Nuclear Energy. 2<sup>nd</sup> Workshop on “Frontiers of Multi-core Computing”. University of Maryland. 22 September 2010.

[27] Spallart. «Strategies for turbulence modeling and simulations», Int. J. Heat Fluid Flow, 2000, v.21, pp. 252-263, 2000.

## ПРИЛОЖЕНИЕ А

### Перечень направлений и задач по созданию и внедрению прикладного программного обеспечения

1. НАПРАВЛЕНИЕ: Изучение предметных областей и разработка математических методов и расчетных схем решения эксафлопных задач

1.1. ЗАДАЧА: Разработка математических методов и расчетных схем решения задач для атомной отрасли.

ИСПОЛНИТЕЛИ: Госкорпорация «Росатом», РАН, Минобрнауки России, НИЦ «КИ».

В рамках проекта рассматриваются широкий круг задач как по моделированию номинальных режимов работы АЭС, так и вопросы безопасности:

- трехмерный перенос нейтронов в групповом кинетическом приближении и методом Монте-Карло;
- трехмерная многофазная термогидродинамика;
- задачи прочности;
- процессы разрушения;
- процессы плавления;
- водородный взрыв;
- молекулярная динамика;
- решатели СЛАУ, ориентированные на рассматриваемые методики.

По каждой из задач, связанной с разработкой и адаптацией на перспективные ВС соответствующих моделей физических процессов, предполагается выполнение аналогичных мероприятий. Отдельно рассматриваются задачи моделирования переноса нейтронов методом Монте-Карло, молекулярной динамики и разработки решателей СЛАУ.

РЕЗУЛЬТАТ: Математические методы и расчётные схемы решения задач эксафлопного класса для атомной отрасли.

1.2. ЗАДАЧА: Моделирование экологически чистых двигателей внутреннего сгорания.

ИСПОЛНИТЕЛИ: НИИСИ РАН, Госкорпорация «Росатом», ИПМ им М.В.Келдыша РАН, организации РАН, Минобрнауки России, промышленные предприятия.

- В качестве результата первого этапа - 2014 (система 10 Пфлопс) создание прототипа программного продукта для гетерогенной вычислительной системы, позволяющего моделировать и прогнозировать поведение установок. Пространственное разрешение будет составлять до  $10^8$  узлов. В качестве результата – выработка рекомендаций по конструкции более чистых (с уменьшением вредных выбросов до 20%) двигателей на углеводородном сырье.

- Этап II – до 2017 г. 100 Пфлопс.

Связан с развитием результатов первого этапа, а именно, с созданием программного продукта для передачи, с целью использования в промышленности, а также с модификацией методов и проведением пилотных расчетов на вычислительных системах с производительностью несколько десятков петафлопс и степенью пространственной детализации  $10^9$  узлов.

- Возможным результатом этапа II, как и последующего этапа III до 2020 г., будет развитие методов и программного обеспечения для возможно появившихся к 2020 г. новых архитектур вычислительных систем. Этап III будет либо логическим продолжением этапа II, либо будет связан с созданием принципиально новых методов и математического обеспечения (в зависимости от тенденций развития вычислительной техники).

### 1.3. ЗАДАЧА: Моделирование турбулентных течений.

ИСПОЛНИТЕЛИ: ИПМ РАН, Госкорпорация «Росатом», РАН, промышленные предприятия, НИЦ «КИ».

Турбулентные течения характеризуются высокими числами Рейнольдса (сотни тысяч, десятки миллионов и выше). Правильное моделирование таких течений открывает широкие возможности для последующего решения оптимизационных задач в авиации. Наиболее корректное и полное описание таких течений возможно с использованием сверхбольших сеток в рамках прямого численного моделирования (DNS) либо в рамках моделирования крупных вихрей (LES).

Целями проведения расчетов реалистичных турбулентных течений являются:

- 1) отработка методики крупномасштабных расчетов;



- 2) получение детализированной картины течения и более глубокое понимание с ее помощью характерных газодинамических процессов, определяющих тот или иной тип течения;
- 3) получение достоверных данных для последующей верификации упрощенных моделей турбулентных течений (RANS), а также выбора полуэмпирических констант в подходах LES, DES.

- **I этап 2014:** разработка методики крупномасштабных расчетов и ее апробация на расчетах простейших задач на основе уравнений Навье-Стокса с использованием сетки размерности 1 млрд. элементов и 1 млн CPU.

- **II этап 2017:** расчет серии верификационных задач аэродинамики (полости, профили и т.п.) и оценка эффективности используемых методик расчета. Не менее 3х задач.

- **III этап 2020:** проведение рекордного расчета одной из актуальных задач обтекания, связанной с внешними турбулентными течениями.

1.4. ЗАДАЧА: Разработка математических методов для решения задач в интересах нефтегазовой отрасли.

Исполнители. НИИСИ РАН, Госкорпорация «Росатом», организации РАН, Минобрнауки России, нефтегазовой отрасли, НИЦ «КИ».

РЕЗУЛЬТАТ: Математические методы для решения задач экзафлопного класса в интересах нефтегазовой отрасли

1.5. ЗАДАЧА: Разработка математических методов для решения задач моделирования процессов горения.

ИСПОЛНИТЕЛИ: НИИСИ РАН, Госкорпорация «Росатом», организации РАН

РЕЗУЛЬТАТ: Математические методы для решения задач экзафлопного класса моделирования процессов горения.

1.6. ЗАДАЧА: Проектирование и разработка наукоёмких изделий в авиастроении.

ИСПОЛНИТЕЛИ: Госкорпорация «Росатом», ОАО «ОКБ Сухого», ОАО «НПО Сатурн», СПбГПУ, организации РАН, ФГУП ЦАГИ, ФГУП ЦИАМ.

1.7. ЗАДАЧА: Разработка методов, физико-математических моделей и комплекса программ для обеспечения надежности и долговечности прочных конструкций современных образцов промышленных изделий.

ИСПОЛНИТЕЛИ: Госкорпорация «Росатом», РАН, Минобрнауки России, промышленные предприятия Российской Федерации, НИЦ «КИ».

РЕЗУЛЬТАТ: Методы, физико-математические модели и комплекс программ для решения нового класса задач обеспечения надежности, прочности и долговечности конструкций современных образцов промышленных изделий.

1.8. ЗАДАЧА: Горение водорода в режиме впрыска и смешения с кислородом в ЖРД.

ИСПОЛНИТЕЛИ: НИИСИ РАН, Госкорпорация «Росатом», организации Роскосмоса.

РЕЗУЛЬТАТ: Методы, физико-математические модели и программы для решения нового класса задач моделирования горения водорода в ЖРД.

1.9. ЗАДАЧА: Горение компонентов кислород/керосин в ЖРД.

ИСПОЛНИТЕЛИ: НИИСИ РАН, Госкорпорация «Росатом», организации Роскосмоса.

РЕЗУЛЬТАТ: Методы, физико-математические модели и программы для решения нового класса задач моделирования горения углеводородов в ЖРД.

1.10. ЗАДАЧА: Течение криогенных компонентов в питающей магистрали и турбонасосе с учетом возможного вскипания.

ИСПОЛНИТЕЛИ: НИИСИ РАН, Госкорпорация «Росатом», организации Роскосмоса.

РЕЗУЛЬТАТ: Методы, физико-математические модели и программы для решения нового класса задач моделирования течения криогенных компонентов.

1.11. ЗАДАЧА: Моделирование работы газодинамического тракта испытательного стенда с учетом испарения впрыскиваемого охладителя и конденсации остывающих продуктов горения.

ИСПОЛНИТЕЛИ: НИИСИ РАН, Госкорпорация «Росатом», организации Роскосмоса.

РЕЗУЛЬТАТ: Методы, физико-математические модели и программы для решения нового класса задач моделирования работы газодинамического тракта испытательного стенда.

1.12. ЗАДАЧА: Смесеобразование и горение при впрыскивании дизельного топлива в цилиндр двигателя.

ИСПОЛНИТЕЛИ: НИИСИ РАН, Госкорпорация «Росатом», организации РАН, промышленные предприятия.

1.13. ЗАДАЧА: Математическое моделирование засасывания в воздухозаборник газотурбинного двигателя пыли со взлетной полосы.

ИСПОЛНИТЕЛИ: НИИСИ РАН, Госкорпорация «Росатом», организации РАН, ОАО «ОКБ Сухого».

## **ПРИЛОЖЕНИЕ Б**

### **Перечень направлений и задач по программе фундаментальных исследований в области технологии высокопроизводительных вычислений**

**1. НАПРАВЛЕНИЕ:** Изучение типовых алгоритмов математического моделирования и их применимости для перспективных вычислительных систем.

**1.1. ЗАДАЧА:** Выделение типовых алгоритмов, характерных для рассматриваемых в проекте прикладных программных методик.

ИСПОЛНИТЕЛИ: Госкорпорация «Росатом», РАН, Минобрнауки России, НИЦ «КИ».

РЕЗУЛЬТАТ: Типовые вычислительные алгоритмы, характерные для задач наукоёмких отраслей промышленности.

**1.2. ЗАДАЧА:** Анализ типовых алгоритмов с точки зрения их применимости на перспективных вычислительных систем различной архитектуры.

ИСПОЛНИТЕЛИ: Госкорпорация «Росатом», РАН, Минобрнауки России.

**РЕЗУЛЬТАТ:** Рекомендации по применению типовых алгоритмов на перспективных вычислительных системах.

**1.3. ЗАДАЧА:** Формирование требований к архитектуре и характеристикам перспективных вычислительных систем с точки зрения типовых алгоритмов (производительность, скорость обменов, память и т. п.).

**ИСПОЛНИТЕЛИ:** Госкорпорация «Росатом», РАН, Минобрнауки России, НИЦ «КИ».

**РЕЗУЛЬТАТ:** Рекомендации по архитектуре и характеристикам перспективных вычислительных систем.

**2. НАПРАВЛЕНИЕ:** Изучение численных методов повышенной точности.

**2.1 ЗАДАЧА:** Разработка, изучение и численные исследования на модельных задачах новых математических методов, разностных схем и т. п. для рассматриваемого в рамках концепции круга задач эксафлопного класса.

**ИСПОЛНИТЕЛИ:** Госкорпорация «Росатом», РАН, Минобрнауки России, НИЦ «КИ».

**РЕЗУЛЬТАТ:** Новые математические методы повышенной точности для рассматриваемого в рамках концепции круга задач эксафлопного класса.

**3. НАПРАВЛЕНИЕ:** Архитектуры гибридных вычислительных систем. Средства масштабирования эффективности

**3.1 ЗАДАЧА:** Исследование значений эффективности гибридных систем с учетом действий законов Амдаля и Густафсона (методы деления/умножения) на  $10^8$ - $10^9$  ядер. Обобщение результатов исследования на рекурсивные гибридные архитектуры.

**ИСПОЛНИТЕЛИ:** Госкорпорация «Росатом», РАН (ИПС, ИПМ, НИИСИ) Минобрнауки России.

**РЕЗУЛЬТАТ:** Зависимости и оценки значений ускорения и эффективности гибридных систем; отчеты, публикации.

**3.2 ЗАДАЧА:** Исследование архитектур специализированных сегментов

**ИСПОЛНИТЕЛЬ:** НИИСИ РАН

**РЕЗУЛЬТАТ:** Определение алгоритма и архитектуры, позволяющие на определённом классе задач получить максимальное быстродействие по сравнению с универсальными суперЭВМ; формулировка требований к арифметическим ускорителям и потоковым процессорам.

**3.3 ЗАДАЧА:** Исследование средств масштабирования эффективности гибридных систем в условиях роста их сложности.

**ИСПОЛНИТЕЛЬ:** Госкорпорация «Росатом».

**РЕЗУЛЬТАТ:** Зависимости и оценки эффективности гибридных систем; отчеты, публикации.

**3.4 ЗАДАЧА:** Исследование архитектурных средств обеспечения надежности гибридных вычислительных систем

**ИСПОЛНИТЕЛЬ:** Госкорпорация «Росатом».

**РЕЗУЛЬТАТ:** Зависимости и оценки значений параметров надежности гибридных систем.

**3.5 ЗАДАЧА:** Исследование взаимодействия вычислительной среды экзафлопной производительности с внешней памятью.

**ИСПОЛНИТЕЛЬ:** Госкорпорация «Росатом».

**РЕЗУЛЬТАТ:** Зависимости и оценки дисциплин взаимодействия для различных архитектур.

**3.6 ЗАДАЧА:** Исследование, адаптация, тестирование и выборка открытых кодов для решения задач численного моделирования, предобработки и постобработки для решения задач пета- и экзафлопного класса.

**ИСПОЛНИТЕЛИ:** Госкорпорация «Росатом», РАН, Минобрнауки России

**РЕЗУЛЬТАТ:** Набор открытых кодов для решения задач численного моделирования, предобработки и постобработки для решения задач пета- и экзафлопного класса.

## **ПРИЛОЖЕНИЕ В**

### **Перечень направлений и задач по проектированию и производству эксафлопных суперЭВМ**

#### **1 НАПРАВЛЕНИЕ: АРХИТЕКТУРНОЕ МАСШТАБИРОВАНИЕ. РАЗРАБОТКА И ОПТИМИЗАЦИЯ АРХИТЕКТУРЫ**

**1.1 ЗАДАЧА:** Архитектурные средства минимизации длительностей обменов

**ИСПОЛНИТЕЛИ:** Госкорпорация «Росатом», РАН (ИПМ, ИПС, НИИСИ),  
Минобрнауки России.

**1.2 ЗАДАЧА:** Разработка реконфигурируемых топологий гибридных  
мультипроцессорных систем

**ИСПОЛНИТЕЛИ:** Госкорпорация «Росатом», РАН (ИПМ, ИПС, НИИСИ),  
Минобрнауки России

**РЕЗУЛЬТАТ:** Аппаратно-программные средства реконфигурации структуры  
вычислительных модулей на основе анализа свойств вычислительного процесса,  
обеспечивающие наибольшее для заданных условий ускорение вычислений.

**1.3 ЗАДАЧА:** Исследование надежностных параметров топологий

**ИСПОЛНИТЕЛИ:** Госкорпорация «Росатом», РАН (ИПМ, ИПС, НИИСИ),  
Минобрнауки России.

**РЕЗУЛЬТАТ:** Среды из зарезервированных на различных уровнях элементов,  
имеющие заданные значения вероятностей исполнения вычислительного процесса  
определенной длительности.

#### **2 НАПРАВЛЕНИЕ: РАЗРАБОТКА АППАРАТНЫХ КОМПОНЕНТОВ**

**2.1 ЗАДАЧА:** Разработка вычислительного модуля

**ИСПОЛНИТЕЛИ:** Госкорпорация «Росатом», РАН (ИПМ, ИПС, НИИСИ),  
Минобрнауки России.

**2.2 ЗАДАЧА:** Разработка системы межпроцессорного обмена

ИСПОЛНИТЕЛИ: Госкорпорация «Росатом», РАН (ИПМ, ИПС, НИИСИ), Минобрнауки России, НИИ КВАНТ.

**2.3 ЗАДАЧА:** Разработка базового ряда экспериментальных образцов вычислительных систем

ИСПОЛНИТЕЛИ: Госкорпорация «Росатом», РАН (ИПМ, ИПС НИИСИ), Минобрнауки России, НИИ КВАНТ

### **3 НАПРАВЛЕНИЕ: РАЗРАБОТКА СИСТЕМНОГО ПРОГРАММНОГО ОБЕСПЕЧЕНИЯ**

**3.1 ЗАДАЧА:** Проектирование и реализация ядра операционной среды для гибридных MIMD/SIMD архитектур, максимально эффективно задействующей вычислительное оборудование

ИСПОЛНИТЕЛИ: Госкорпорация «Росатом», РАН (ИПМ, ИПС НИИСИ), Минобрнауки России.

РЕЗУЛЬТАТ 1: Операционная среда для вычислительной системы производительностью 10 Пфлопс

РЕЗУЛЬТАТ 2: Операционная среда для вычислительной системы производительностью 100 Пфлопс

РЕЗУЛЬТАТ 3: Операционная среда для вычислительной системы производительностью 1000 Пфлопс

**3.2 ЗАДАЧА:** Разработка коммуникационного ПО и базовых коммуникационных библиотек в соответствии с топологией мультипроцессорной среды

ИСПОЛНИТЕЛИ: Госкорпорация «Росатом», РАН (ИПМ, ИПС НИИСИ), Минобрнауки России.

РЕЗУЛЬТАТ 1: Реализация эффективных топологически ориентированных коммуникационных интерфейсов и библиотек для вычислительной системы производительностью 10 Пфлопс

РЕЗУЛЬТАТ 2: Реализация эффективных топологически ориентированных коммуникационных интерфейсов и библиотек для вычислительной системы производительностью 100 Пфлопс

РЕЗУЛЬТАТ 3: Реализация эффективных топологически ориентированных коммуникационных интерфейсов и библиотек для вычислительной системы производительностью 1000 Пфлопс

### **3.3 ЗАДАЧА:** Создание системы иерархического хранения данных

ИСПОЛНИТЕЛИ: Госкорпорация «Росатом», РАН (ИПМ, ИПС, НИИСИ), Минобрнауки России, НИИ КВАНТ

РЕЗУЛЬТАТ 1: Система иерархического хранения данных, включая параллельную файловую систему, для вычислительных систем производительностью 10 Пфлопс.

РЕЗУЛЬТАТ 2: Система иерархического хранения данных для вычислительных систем производительностью 100 Пфлопс.

РЕЗУЛЬТАТ 3: Система иерархического хранения данных для вычислительных систем производительностью 1000 Пфлопс

**3.4 ЗАДАЧА:** Разработка программных средств обеспечения отказоустойчивости вычислительной системы

ИСПОЛНИТЕЛИ: Госкорпорация «Росатом», РАН (ИПМ, ИПС, НИИСИ), Минобрнауки России.

**3.5 ЗАДАЧА:** Создание масштабируемых средств программирования, реализующих распараллеливание и одновременное исполнение  $\sim 10^8$  процессов.

ИСПОЛНИТЕЛИ: Госкорпорация «Росатом», РАН (ИПМ, ИПС, НИИСИ), Минобрнауки России, НИИ КВАНТ

РЕЗУЛЬТАТ 1: Средства программирования, реализующие исполнение приложений на  $10^6$  процессорах для систем производительностью 10 Пфлопс.

РЕЗУЛЬТАТ 2: Средства программирования, реализующие исполнение приложений на  $10^7$  процессорах для систем производительностью 100 Пфлопс.



**РЕЗУЛЬТАТ 3:** Средства программирования, реализующие исполнение приложений на  $10^8$  процессорах для систем производительностью 1000 Пфлопс.

**3.6 ЗАДАЧА:** Создание единой системы управления заданиями и управления ресурсами, обеспечивающей оптимизацию размещения процессов по вычислительным элементам и надёжность.

**ИСПОЛНИТЕЛИ:** Госкорпорация «Росатом», РАН (ИПМ, ИПС, НИИСИ), Минобрнауки России, НИИ КВАНТ

**РЕЗУЛЬТАТ 1:** Система управления заданиями и ресурсами, обеспечивающая оптимизацию одновременного исполнения  $10^6$  процессов для вычислительных систем производительностью 10 Пфлопс

**РЕЗУЛЬТАТ 2:** Система управления заданиями и ресурсами, обеспечивающая оптимизацию одновременного исполнения  $10^7$  процессов для вычислительных систем производительностью 100 Пфлопс

**РЕЗУЛЬТАТ 3:** Система управления заданиями и ресурсами, обеспечивающая оптимизацию одновременного исполнения  $10^8$  процессов для вычислительных систем производительностью 1000 Пфлопс

#### **4. НАПРАВЛЕНИЕ: РАЗРАБОТКА ИНСТРУМЕНТАЛЬНОГО ПРОГРАММНОГО ОБЕСПЕЧЕНИЯ**

**4.1 ЗАДАЧА:** Создание системы сетевой инсталляции, конфигурирования и загрузки ОС

**ИСПОЛНИТЕЛИ:** Госкорпорация «Росатом», РАН (ИПМ, ИПС, НИИСИ), Минобрнауки России, НИИ КВАНТ

**РЕЗУЛЬТАТ 1:** Система сетевой инсталляции, конфигурирования и загрузки ОС на  $10^6$  процессорах для вычислительных систем производительностью 10 Пфлопс

**РЕЗУЛЬТАТ 2:** Система сетевой инсталляции, конфигурирования и загрузки ОС на  $10^7$  процессоров для вычислительных систем производительностью 100 Пфлопс

**РЕЗУЛЬТАТ 3:** Система сетевой инсталляции, конфигурирования и загрузки ОС на  $10^8$  процессоров для вычислительных систем производительностью 1000 Пфлопс

**4.2 ЗАДАЧА:** Создание инструментальных средств сбора и анализа статистической информации о работе вычислительной системы

**ИСПОЛНИТЕЛИ:** Госкорпорация «Росатом», РАН (ИПМ, ИПС, НИИСИ), Минобрнауки России.

**РЕЗУЛЬТАТ 1:** Инструментальные средства сбора и анализа статистической информации с  $10^6$  процессоров для систем производительностью 10 Пфлопс

**РЕЗУЛЬТАТ 2:** Инструментальные средства сбора и анализа статистической информации с  $10^7$  процессоров для систем производительностью 100 Пфлопс

**РЕЗУЛЬТАТ 3:** Инструментальные средства сбора и анализа статистической информации с  $10^8$  процессоров для систем производительностью 1000 Пфлопс

**4.3 ЗАДАЧА:** Разработка системы диагностирования и мониторинга компонентов, включая значения температуры, режимы блоков питания и т.д.

**ИСПОЛНИТЕЛИ:** Госкорпорация «Росатом», РАН (ИПМ, ИПС, НИИСИ), Минобрнауки России.

**РЕЗУЛЬТАТ 1:** Система оперативного сбора и обработки информации для систем производительностью 10Пфлопс

**РЕЗУЛЬТАТ 2:** Система оперативного сбора и обработки информации для систем производительностью 100 Пфлопс.

**РЕЗУЛЬТАТ 3:** Система оперативного сбора и обработки информации для систем производительностью 1000 Пфлопс

**4.4 ЗАДАЧА:** Разработка средств проектирования мультипроцессорных систем

**ИСПОЛНИТЕЛИ:** Госкорпорация «Росатом», РАН (ИПМ, ИПС, НИИСИ) Минобрнауки России, НИИ КВАНТ

**РЕЗУЛЬТАТ 1:** Программный комплекс предсказательного моделирования значений параметров и эффективности создаваемых вычислительных систем.

**РЕЗУЛЬТАТ 2:** Система автоматизированного проектирования мультипроцессорной среды.

**4.5 ЗАДАЧА:** Создание пакета тестовых программ

**ИСПОЛНИТЕЛИ:** Госкорпорация «Росатом».

**РЕЗУЛЬТАТ 1:** Пакет тестовых программ и методика тестирования систем производительностью 10Пфлопс.

**РЕЗУЛЬТАТ 2:** Пакет тестовых программ и методика тестирования систем производительностью 100Пфлопс.

**РЕЗУЛЬТАТ 3:** Пакет тестовых программ и методика тестирования систем производительностью 1000Пфлопс.

**4.6 ЗАДАЧА:** Разработка средств тестирования и диагностики коммуникационной среды

**ИСПОЛНИТЕЛИ:** Госкорпорация «Росатом»

**РЕЗУЛЬТАТ 1:** Программные средства для мониторинга, тестирования и диагностики компонент коммуникационной среды систем производительностью 10Пфлопс.

**РЕЗУЛЬТАТ 2:** Программные средства для мониторинга, тестирования и диагностики компонент коммуникационной среды систем производительностью 100Пфлопс.

**РЕЗУЛЬТАТ 3:** Программные средства для мониторинга, тестирования и диагностики компонент коммуникационной среды систем производительностью 1000Пфлопс.

**4.7 ЗАДАЧА:** Проектирование и разработка инструментария для реализации кроссплатформенных расчетов на мультипроцессорных системах

**ИСПОЛНИТЕЛЬ:** Госкорпорация «Росатом»

**РЕЗУЛЬТАТ 1:** Инструментарий для проведения кроссплатформенных расчетов, облачных вычислений для систем производительностью 10Пфлопс.

**РЕЗУЛЬТАТ 2:** Инструментарий для проведения кроссплатформенных расчетов, облачных вычислений для систем производительностью 100Пфлопс.

**РЕЗУЛЬТАТ:** Инструментарий для проведения кроссплатформенных расчетов, облачных вычислений для систем производительностью 1000Пфлопс.

**4.8 ЗАДАЧА:** Технология подготовки и обработки данных для математического моделирования (препроцессор) с точки зрения применимости на перспективных вычислительных систем различной архитектуры.

ИСПОЛНИТЕЛИ: Госкорпорация «Росатом», РАН, Минобрнауки России.

РЕЗУЛЬТАТ: Новые алгоритмы и технологии построения начальных данных на супер-ЭВМ эксафлопного класса.

**4.9 ЗАДАЧА:** Визуализация результатов математического моделирования (постпроцессор) с точки зрения применимости на перспективных суперЭВМ различной архитектуры.

ИСПОЛНИТЕЛИ: Госкорпорация «Росатом», РАН, Минобрнауки России, НИЦ «КИ».

РЕЗУЛЬТАТ: Новые алгоритмы и технологии обработки и визуализации данных на супер-ЭВМ эксафлопного класса.

**4.10 ЗАДАЧА:** Создание масштабируемых средств поиска, статистического анализа и обработки данных.

Разработка масштабируемых алгоритмов и программ для работы с многопараметрическими, многомерными, иерархическими и многомасштабными сверхбольшими наборами данных с применением параллельных языков и гибридной архитектуры, использующей программируемые логические матрицы (FPGA) и графические ускорители (GPGPU), разработка алгоритмов и создание библиотек и утилит для работы с данными в гибридной архитектуре.

ИСПОЛНИТЕЛЬ: НИЦ «КИ», Минобрнауки России, ГК «РОСАТОМ», РАН

**4.11 ЗАДАЧА:** Расширение существующих и создание новых систем управления базами данных

Исследование новых подходов, включая модели данных, языки запросов, составные типы данных для научных приложений. Расширение реляционных и объектных систем управления базами данных и создание новых систем управления базами данных для масштабируемого хранения научных данных.

ИСПОЛНИТЕЛЬ: НИЦ «КИ», Минобрнауки России, ГК «РОСАТОМ», РАН

## **5 НАПРАВЛЕНИЕ: РАЗРАБОТКА ЯЗЫКОВ И СИСТЕМ ПАРАЛЛЕЛЬНОГО ПРОГРАММИРОВАНИЯ**

**5.1 ЗАДАЧА:** Создание гибридного языка Фортран для эффективного использования гибридных MIMD/SIMD процессорных элементов.

ИСПОЛНИТЕЛЬ: ИПМ РАН, ИПС РАН

РЕЗУЛЬТАТ 1: Система программирования для языка Фортран

РЕЗУЛЬТАТ 2: Создание гибридного языка Фортран для эффективного использования гибридных MIMD/SIMD/ FPGA процессорных элементов

РЕЗУЛЬТАТ 3: Модернизация и сопровождение системы программирования для MIMD/SIMD/FPGA структур

**5.2 ЗАДАЧА:** Создание гибридного языка C++ для эффективного использования гибридных MIMD/SIMD процессорных элементов

ИСПОЛНИТЕЛЬ: ИПМ РАН, ИПС РАН

РЕЗУЛЬТАТ 1: Система программирования для языка C++

РЕЗУЛЬТАТ 2: Создание гибридного языка C++ для эффективного использования гибридных MIMD/SIMD/FPGA процессорных элементов

РЕЗУЛЬТАТ 3: Модернизация и сопровождение системы программирования для MIMD/SIMD/FPGA структур

## **6 НАПРАВЛЕНИЕ: РАЗРАБОТКА СПЕЦИАЛИЗИРОВАННЫХ СЕГМЕНТОВ СУПЕРЭВМ**

**6.1 ЗАДАЧА:** Разработка документации, закупка комплектующих и сборка сегмента суперЭВМ производительностью 0.5 Пфлопс.

ИСПОЛНИТЕЛИ: НИИСИ РАН, Госкорпорация «Росатом»

РЕЗУЛЬТАТ: Сегмент суперЭВМ

**6.2 ЗАДАЧА:** Оптимизация программного обеспечения для суперЭВМ

ИСПОЛНИТЕЛИ: НИИСИ РАН, Госкорпорация «Росатом»

РЕЗУЛЬТАТ: ПО для специализированной суперЭВМ

**6.3 ЗАДАЧА:** Разработка аппаратуры и программного эмулятора для исследования поведенческой модели специализированного процессора.

**ИСПОЛНИТЕЛИ:** НИИСИ РАН, Госкорпорация «Росатом»

**РЕЗУЛЬТАТ:** Аппаратура и программный эмулятор для специализированного процессора.

**6.4 ЗАДАЧА:** Разработка программного эмулятора поведенческой модели коммуникационного блока.

**ИСПОЛНИТЕЛИ:** НИИСИ РАН, Госкорпорация «Росатом»

**РЕЗУЛЬТАТ:** Программный эмулятор поведенческой модели коммуникационного блока.

**6.5 ЗАДАЧА:** Исследование по прогнозированию поведения специализированного процессора на определенном круге сценариев с использованием программируемых логических интегральных схем.

**ИСПОЛНИТЕЛИ:** НИИСИ РАН, Госкорпорация «Росатом»

**РЕЗУЛЬТАТ:** Программируемые логические интегральные схемы. Прогноз поведения специализированного процессора. Отчет.

**6.6 ЗАДАЧА:** Разработка вычислительной модели. Для каждого масштаба определение методов и алгоритмов численной реализации.

**ИСПОЛНИТЕЛИ:** НИИСИ РАН, Госкорпорация «Росатом»

**РЕЗУЛЬТАТ:** Методы, алгоритмы и программы численной реализации.

**6.7 ЗАДАЧА:** Описание архитектуры сегментов суперЭВМ, ориентированных на решение задач каждого масштаба.

**ИСПОЛНИТЕЛИ:** НИИСИ РАН, Госкорпорация «Росатом»

**РЕЗУЛЬТАТ:** Архитектуры сегментов суперЭВМ.

**6.8 ЗАДАЧА:** Балансировка производительности различных сегментов суперЭВМ для задач выбранного класса. Проведение оценки производительности и влияния на нее проектных решений.

ИСПОЛНИТЕЛИ: НИИСИ РАН, Госкорпорация «Росатом»

РЕЗУЛЬТАТ: Программный модуль балансировки

**6.9 ЗАДАЧА:** Разработка инфраструктуры проектирования СБИС по проектным нормам 45 нм.

ИСПОЛНИТЕЛИ: НИИСИ РАН, Госкорпорация «Росатом»

РЕЗУЛЬТАТ: Аппаратно-программный комплекс для проектирования СБИС, комплект документации по маршруту проектирования, опытные образцы тестовых СБИС, разработанных по данному маршруту проектирования и изготовленных на зарубежных фабриках.

**6.10 ЗАДАЧА:** Разработка СБИС микропроцессоров и коммуникационной СБИС «в кремнии» по проектным нормам 45 нм.

ИСПОЛНИТЕЛИ: НИИСИ РАН, Госкорпорация «Росатом»

РЕЗУЛЬТАТ: Комплект РКД. СБИС микропроцессоров и коммуникационная СБИС «в кремнии».

**6.11 ЗАДАЧА:** Изготовление СБИС за рубежом и создание макета стойки для специализированного суперкомпьютера для решения задач горения и подземной гидродинамики.

ИСПОЛНИТЕЛИ: НИИСИ РАН, Госкорпорация «Росатом»

РЕЗУЛЬТАТ: Комплект РКД. Макет стойки

**6.12 ЗАДАЧА:** Создание мелкосерийного производства СБИС с проектными нормами не хуже 45 нм на территории Российской Федерации.

ИСПОЛНИТЕЛИ: НИИСИ РАН, Госкорпорация «Росатом»

РЕЗУЛЬТАТ: Акты приемки, производство СБИС

**6.13 ЗАДАЧА:** Изготовление микропроцессорных СБИС для суперкомпьютера 100 Пфлопс в России (200 тыс. чипов).

ИСПОЛНИТЕЛИ: НИИСИ РАН, Госкорпорация «Росатом»

**РЕЗУЛЬТАТ:** Акты приемки. СБИС для суперкомпьютера 100 Пфлопс в России (200 тыс. чипов).

**6.14 ЗАДАЧА:** Изготовление специализированного суперкомпьютера производительностью 100 Пфлопс на отечественной элементной базе.

**ИСПОЛНИТЕЛИ:** НИИСИ РАН, Госкорпорация «Росатом»

**РЕЗУЛЬТАТ:** Комплект РКД. Опытный образец специализированного суперкомпьютера производительностью 100 Пфлопс, акт

**6.15 ЗАДАЧА:** Установка комплекса на суперкомпьютер производительности 100 Пфлопс. Сравнительные исследования пиковой производительности на решении ориентированного класса задач.

**ИСПОЛНИТЕЛИ:** НИИСИ РАН, Госкорпорация «Росатом»

**РЕЗУЛЬТАТ:** Приемочные испытания опытного образца специализированного суперкомпьютера производительностью 100 Пфлопс. Решение задач горения и подземной гидродинамики и моделирование процессов нефтегазодобычи на специализированной супер ЭВМ с производительностью близкой к эксафлопной.

**6.16 ЗАДАЧА:** Модернизация разработанных СБИС на технологический процесс образца 2015-2016 гг.

**ИСПОЛНИТЕЛИ:** НИИСИ РАН, Госкорпорация «Росатом»

**РЕЗУЛЬТАТ:** Конструкторская документация, и акт приемки

**6.17 ЗАДАЧА:** Изготовление СБИС за рубежом

**ИСПОЛНИТЕЛИ:** НИИСИ РАН, Госкорпорация «Росатом»

**РЕЗУЛЬТАТ:** Акт приемки

**6.18 ЗАДАЧА:** Изготовление суперкомпьютера 500 Пфлопс в России на элементной базе отечественной разработки.

**ИСПОЛНИТЕЛИ:** НИИСИ РАН, Госкорпорация «Росатом»

**РЕЗУЛЬТАТ:** Конструкторская документация, образец и акт приемки.



## **7 НАПРАВЛЕНИЕ: СОЗДАНИЕ БАЗОВОГО РЯДА СУПЕР ЭВМ**

ИСПОЛНИТЕЛИ: Госкорпорация «Росатом», РАН (ИПМ, ИПС НИИСИ), Минобрнауки России, НИИ КВАНТ

**7.1. ЗАДАЧА:** Разработка РКД, изготовление, монтаж, тестирование компонент, проведение приемочных испытаний

РЕЗУЛЬТАТ: Опытный образец производительностью 10 Пфлопс

**7.2 ЗАДАЧА:** Разработка РКД, изготовление, монтаж, тестирование компонент, проведение приемочных испытаний.

РЕЗУЛЬТАТ: Опытный образец производительностью 100 Пфлопс

**7.3 ЗАДАЧА:** Разработка РКД, изготовление, монтаж, тестирование компонент, проведение приемочных испытаний в соответствии с техническим проектом

РЕЗУЛЬТАТ: Система производительностью 1000 Пфлопс

## **8 НАПРАВЛЕНИЕ: СОЗДАНИЕ И РАЗВИТИЕ СУПЕРКОМПЬЮТЕРНЫХ ЦЕНТРОВ**

ИСПОЛНИТЕЛИ: ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ», МГУ им. М.В. Ломоносова, РАН, НИЦ «Курчатовский институт», ФГУП «РФЯЦ-ВНИИТФ», Т-Платформы и др.

**8.1 ЗАДАЧА:** Развитие федеральных суперкомпьютерных центров на базе существующих крупных вычислительных центров: ВЦ ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ», ВЦ МГУ им. М.В. Ломоносова, МВЦ РАН, ВЦ НИЦ «Курчатовский институт».

I Этап: 2015 г. – оснащение федеральных СКЦ супер-ЭВМ производительностью до 1 ПФлопс;

II Этап: 2017 г. – оснащение федеральных СКЦ супер-ЭВМ производительностью до 10 ПФлопс;

III Этап: 2020 г. – оснащение федеральных СКЦ супер-ЭВМ производительностью до 100 ПФлопс.

**8.2 ЗАДАЧА:** Создание и развитие региональных и отраслевых суперкомпьютерных центров в крупных регионах России, обладающих высоким наукоемким потенциалом, а также на базе крупных ВУЗов, ведущих предприятий высокотехнологичных отраслей промышленности и отраслевых НИИ.

I Этап: 2015 г. – оснащение региональных СКЦ супер-ЭВМ производительностью до 50 ТФлопс, оснащение отраслевых СКЦ супер-ЭВМ производительностью 50 ТФлопс;  
II Этап: 2017 г. – оснащение региональных СКЦ супер-ЭВМ производительностью до 500ТФлопс, оснащение отраслевых СКЦ супер-ЭВМ производительностью 500 ТФлопс;  
III Этап: 2020 г. – оснащение региональных СКЦ супер-ЭВМ производительностью до 5 ПФлопс, оснащение отраслевых СКЦ супер-ЭВМ производительностью до 5 ПФлопс.

**РЕЗУЛЬТАТ:** Создание и развитие суперкомпьютерных центров (СКЦ) коллективного пользования различного уровня с предоставлением вычислительных ресурсов предприятиям и организациям с использованием скоростных каналов удаленного доступа.

## ПРИЛОЖЕНИЕ Г

### **Перечень направлений и задач для подготовки высококвалифицированных кадров в области эксафлопных технологий**

#### **НАПРАВЛЕНИЕ 1. СОЗДАНИЕ СИСТЕМЫ БАЗОВЫХ (ОПОРНЫХ) НАУЧНО-ОБРАЗОВАТЕЛЬНЫХ ЦЕНТРОВ ЭКСАФЛОПНЫХ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫХ ТЕХНОЛОГИЙ**

1.1. ЗАДАЧА. Проектирование системы базовых (опорных) научно-образовательных центров эксафлопных вычислительных технологий. Развертывание сети.

ИСПОЛНИТЕЛИ: Минобрнауки России (Суперкомпьютерный консорциум университетов России), Госкорпорация «Росатом», РАН (ИПМ, ИПС, НИИСИ).

РЕЗУЛЬТАТ: Система базовых (опорных) научно-образовательных центров эксафлопных вычислительных технологий.

1.2 ЗАДАЧА. Обеспечение доступа системы базовых (опорных) научно-образовательных центров к суперкомпьютерным ресурсам (не менее 500 терафлопс).

ИСПОЛНИТЕЛИ: Минобрнауки России (Суперкомпьютерный консорциум университетов России), Госкорпорация «Росатом», РАН (ИПМ, ИПС, НИИСИ)

РЕЗУЛЬТАТ: Удаленный доступ к суперкомпьютерным вычислительным комплексам в базовых (опорных) научно-образовательных центрах.

1.3 ЗАДАЧА. Оснащение системы базовых (опорных) научно-образовательных центров суперкомпьютерными ресурсами (не менее 100 терафлопс).

ИСПОЛНИТЕЛИ: Минобрнауки России (Суперкомпьютерный консорциум университетов России), Госкорпорация «Росатом», РАН (ИПМ, ИПС, НИИСИ)

РЕЗУЛЬТАТ: Суперкомпьютерные вычислительные комплексы в базовых (опорных) научно-образовательных центрах.

1.4 ЗАДАЧА. Расширение суперкомпьютерных ресурсов для системы базовых (опорных) научно-образовательных центров (не менее 125-400 терафлопс).

ИСПОЛНИТЕЛИ: Минобрнауки России (Суперкомпьютерный консорциум университетов России), Госкорпорация «Росатом», РАН (ИПМ, ИПС, НИИСИ)

РЕЗУЛЬТАТ: Суперкомпьютерные вычислительные комплексы в базовых (опорных) научно-образовательных центрах.

## НАПРАВЛЕНИЕ 2. РАЗРАБОТКА УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОГО ОБЕСПЕЧЕНИЯ ПОДГОТОВКИ КАДРОВ В ОБЛАСТИ ЭКСАФЛОПНЫХ ТЕХНОЛОГИЙ

2.1 ЗАДАЧА. Разработка нового образовательного направления «Математическое моделирование и высокопроизводительные вычисления».

ИСПОЛНИТЕЛЬ: Минобрнауки России (Суперкомпьютерный консорциум университетов России), Госкорпорация «Росатом», РАН (ИПМ, ИПС, НИИСИ).

РЕЗУЛЬТАТ: Федеральный государственный образовательный стандарт нового образовательного направления «Математическое моделирование и высокопроизводительные вычисления».

2.2 ЗАДАЧА. Разработка профилей «Математическое моделирование сложных явлений, объектов и систем» и «Высокопроизводительные вычисления» в существующем направлении подготовки «Прикладная математика и информатика».

ИСПОЛНИТЕЛИ: Минобрнауки России (Суперкомпьютерный консорциум университетов России), Госкорпорация «Росатом», РАН (ИПМ, ИПС, НИИСИ)

РЕЗУЛЬТАТ: Профили «Математическое моделирование сложных явлений, объектов и систем» и «Высокопроизводительные вычисления» в существующем направлении подготовки «Прикладная математика и информатика».

2.3 ЗАДАЧА. Разработка предложений по включению разделов, связанных с математическим моделированием, вычислительными методами, вычислительным экспериментом, суперкомпьютерными технологиями, в федеральные образовательные стандарты физико-математических и технических направлений подготовки.

ИСПОЛНИТЕЛИ: Минобрнауки России (Суперкомпьютерный консорциум университетов России), Госкорпорация «Росатом», РАН (ИПМ, ИПС, НИИСИ).

РЕЗУЛЬТАТ: Предложения по включению разделов, связанных с математическим моделированием, вычислительными методами, вычислительным экспериментом, суперкомпьютерными технологиями, в федеральные образовательные стандарты физико-математических и технических направлений подготовки.

2.4 ЗАДАЧА. Разработка образовательных программ переподготовки и повышения квалификации кадров в области экзафлопных технологий.

ИСПОЛНИТЕЛИ: Минобрнауки России (Суперкомпьютерный консорциум университетов России), Госкорпорация «Росатом», РАН (ИПМ, ИПС, НИИСИ).

РЕЗУЛЬТАТ: Образовательные программы переподготовки и повышения квалификации кадров в области экзафлопных технологий.

2.5 ЗАДАЧА. Разработка новых и развитие существующих учебных курсов, подготовка учебно-методических материалов по проблематике экзафлопных вычислений.

ИСПОЛНИТЕЛИ: Минобрнауки России (Суперкомпьютерный консорциум университетов России), Госкорпорация «Росатом», РАН (ИПМ, ИПС, НИИСИ).

РЕЗУЛЬТАТ: Учебные курсы и учебно-методические материалы по проблематике экзафлопных вычислений.

### НАПРАВЛЕНИЕ 3. РЕАЛИЗАЦИЯ ОБРАЗОВАТЕЛЬНЫХ ПРОГРАММ ПОДГОТОВКИ, ПЕРЕПОДГОТОВКИ И ПОВЫШЕНИЯ КВАЛИФИКАЦИИ КАДРОВ В ОБЛАСТИ ЭКСАФЛОПНЫХ ТЕХНОЛОГИЙ

3.1 ЗАДАЧА. Организация массового обучения в области математического моделирования и высокопроизводительных вычислений.

ИСПОЛНИТЕЛИ: Минобрнауки России (Суперкомпьютерный консорциум университетов России), Госкорпорация «Росатом», РАН (ИПМ, ИПС, НИИСИ).

РЕЗУЛЬТАТ: Количество обученных.

3.2 ЗАДАЧА. Реализация целевой подготовки кадров в области экзафлопных технологий (бакалавриат).

ИСПОЛНИТЕЛИ: Минобрнауки России (Суперкомпьютерный консорциум университетов России), Госкорпорация «Росатом», РАН (ИПМ, ИПС, НИИСИ).

РЕЗУЛЬТАТ: Количество университетов, реализующих подготовку. Количество обученных.

3.3 ЗАДАЧА. Реализация целевой интенсивной подготовки высококвалифицированных кадров в области экзафлопных технологий (магистратура).

ИСПОЛНИТЕЛИ: Минобрнауки России (Суперкомпьютерный консорциум университетов России), Госкорпорация «Росатом», РАН (ИПМ, ИПС, НИИСИ).

РЕЗУЛЬТАТ: Количество университетов, реализующих подготовку. Количество обученных.

3.4 ЗАДАЧА. Реализация образовательных программ переподготовки и повышения квалификации кадров в области экзафлопных технологий.

ИСПОЛНИТЕЛИ: Минобрнауки России (Суперкомпьютерный консорциум университетов России), Госкорпорация «Росатом», РАН (ИПМ, ИПС, НИИСИ)

РЕЗУЛЬТАТ: Количество организаций, реализующих подготовку. Количество обученных.

#### НАПРАВЛЕНИЕ 4. РАЗРАБОТКА И РЕАЛИЗАЦИИ СИСТЕМЫ ИНФОРМАЦИОННОГО ОБЕСПЕЧЕНИЯ ОБЩЕСТВА В ОБЛАСТИ СУПЕРКОМПЬЮТЕРНЫХ ТЕХНОЛОГИЙ

4.1 ЗАДАЧА. Разработка и реализация системы информирования общества в области экзафлопных технологий.

ИСПОЛНИТЕЛИ: Минобрнауки России (Суперкомпьютерный консорциум университетов России), Госкорпорация «Росатом», РАН (ИПМ, ИПС, НИИСИ).

РЕЗУЛЬТАТ: Количество мероприятий.

4.2 ЗАДАЧА. Разработка и реализация системы молодежных научно-образовательных школ, семинаров, конференций в области эксафлопных технологий.

ИСПОЛНИТЕЛИ: Минобрнауки России (Суперкомпьютерный консорциум университетов России), Госкорпорация «Росатом», РАН (ИПМ, ИПС, НИИСИ).

РЕЗУЛЬТАТ: Количество мероприятий системы молодежных научно-образовательных школ, семинаров, конференций в области эксафлопных технологий.