

Материалы научно-технического совещания «Высокопроизводительные вычислительные ресурсы России для создания наукоемких технологий и развития инфраструктуры наноиндустрии», 14-17 октября 2008 г., Уфа. Изд-во: Уфимский государственный технический университет, 2009 г. стр. 35-51 ISBN 978-5-86911-919-3

УДК 004.38

С.М.Абрамов

Институт программных систем Российской академии наук, Переславль-Залесский

## **СУПЕРКОМПЬЮТЕРЫ «СКИФ» — ЭФФЕКТИВНАЯ ПЛАТФОРМА ДЛЯ ВЫЧИСЛЕНИЙ В ИНТЕРЕСАХ РАЗВИТИЯ НАУКОЕМКИХ ТЕХНОЛОГИЙ И НАНОИНДУСТРИИ**

**Аннотация.** В данной работе дается краткий обзор отечественных суперЭВМ семейства «СКИФ», основных результатов суперкомпьютерной программы «СКИФ» и первого этапа программы «СКИФ-ГРИД», перспектив развития данного научно-технического направления. В заключении рассматривается опыт использования суперЭВМ «СКИФ» в интересах различных наукоемких отраслей, в том числе и для нанотехнологий.

**Суперкомпьютерные программы «СКИФ» и «СКИФ-ГРИД» Союзного государства**  
Программа «СКИФ» выполнялась в 2000—2004 годах. Полное название программы «СКИФ» — *Разработка и освоение в серийном производстве семейства моделей высокопроизводительных вычислительных систем с параллельной архитектурой (суперкомпьютеров) и создание прикладных программно-аппаратных комплексов на их основе*, — точно определяло и содержание работ. Это была серьезная совместная научно-техническая программа двух стран — России и Беларуси.

Работы по созданию аппаратных и программных средств для семейства суперкомпьютеров «СКИФ» ИПС РАН велись в тесном сотрудничестве с исполнителями от Республики Беларусь и с основными исполнителями Программы со стороны России, среди которых были:

— ОАО «Научно-исследовательский центр электронно-вычислительной техники» (НИЦЭВТ, Москва);

Центр научных телекоммуникаций и информационных технологий (ЦНТК РАН, Москва);

— НИИ механики МГУ имени М. В. Ломоносова (Москва);

— Институт высокопроизводительных вычислений и информационных систем (ИВВиИС, С.-Пб.);

— Российский НИИ региональных проблем (РосНИИ РП, Переславль-Залесский);

— Компания «Суперкомпьютерные системы» (СКС, Москва).

Мероприятия программы «СКИФ» охватывали все области суперкомпьютерной отрасли:

— разработка и производство микроэлементной базы, суперЭВМ, системного ПО для них, инструментального ПО и прикладных систем;

— вспомогательные мероприятия — подготовка и переподготовка кадров, создание единого информационного пространства проекта.

Программа «СКИФ» была признана одной из самых успешных программ Союзного государства. Результаты, достигнутые в ходе выполнения программы, получили и высокую правительственную оценку. За работу «Разработка конструкторской и программной документации, подготовка промышленного производства и выпуск образцов высокопроизводительных вычислительных систем (суперкомпьютеров) семейства «СКИФ»

Ряда I и Ряда II» была присуждена премия Правительства Российской Федерации в области науки и техники за 2006 год группе исполнителей Программы «СКИФ».

Суперкомпьютерная программа «СКИФ-ГРИД»<sup>1</sup> Союзного государства является продолжением программы «СКИФ». Ее выполнение началось в июне 2007 года. В ней ИПС РАН так же является головным исполнителем от России. Суперкомпьютерная программа «СКИФ-ГРИД» выполняется в два этапа: 1 этап 2007—2008 гг., 2 этап 2009—2010 гг.

Программа включает четыре направления работ:

— **GRID-технологии:** развитие, исследование и внедрение средств высокопроизводительных вычислений на основе GRID-технологий; поддержка гетерогенных, территориально-распределенных вычислительных комплексов.

— **Суперкомпьютеры семейства «СКИФ» (ряд 3 и 4):** создание суперкомпьютеров «СКИФ» нового поколения на базе новых перспективных процессоров и вычислительных узлов, новых технических средств системной сети, управления системой, спецвычислителей и гибридных узлов, разработка соответствующего программного обеспечения.

— **Защита информации:** реализация (аппаратных и программных) средств защиты информации в создаваемых вычислительных комплексах.

— **Пилотные системы:** реализация прикладных систем в перспективных областях применения создаваемых вычислительных установок, решение актуальных задач на суперкомпьютерах и GRID-системах, усилия по подготовке и переподготовке кадров в области суперкомпьютерных и GRID-технологий.

К исполнению Программы привлечено большое количество организаций. В том числе, российских исполнителей программы — более 20, среди

них: ГЦ РАН, ИКИ РАН, ИПМ им. М. В. Келдыша РАН, ИППИ РАН, ИПХФ РАН, ИХФ РАН, НИВЦ МГУ, НИИ КС, НИИФХБ МГУ, НИИЯФ МГУ, ННГУ, НПЦ «Элвис», ОИЯИ, ООО «Т-Платформы», ООО «ЮникАйСиз», ПензГУ, СПБАЭП, СПбГПУ, ТГУ, Химический факультет МГУ, ЧелГУ, ЮУрГУ.

По масштабам программа «СКИФ-ГРИД» примерно в два-три раза крупнее программы «СКИФ»: по количеству привлеченных предприятий, по объемам запланированных работ и объемам ресурсов, привлекаемым для выполнения данных работ. Так, в исполнение программы «СКИФ» было вовлечено примерно по десять предприятий со стороны Беларуси и России. В программе «СКИФ-ГРИД» только со стороны Российской Федерации сегодня участвуют уже более 20 организаций.

Головными исполнителями программ «СКИФ» и «СКИФ-ГРИД» являются: со стороны Беларуси — Объединенный институт проблем информатики Национальной академии наук Беларуси, со стороны России — Институт программных систем Российской академии наук. Заказчики-координаторы: со стороны Беларуси — Национальная академия наук Беларуси, со стороны России — Федеральное агентство на науке и инновациям.

Суперкомпьютерная программа «СКИФ» — это серьезная, комплексная программа, в рамках которой по единой концепции создавались широкий спектр моделей семейства «СКИФ» и обеспечивалась возможность подбора конфигураций, оптимальных для различных применений.

Девятнадцать мероприятий программы покрывали все слои суперкомпьютерной отрасли:

- разработка и реализация аппаратных средств;
- разработка и реализация системного программного обеспечения;
- разработка и реализация инструментальных средств и законченных (пилотных) прикладных систем;
- вспомогательные мероприятия;
- подготовка и переподготовка кадров;

---

<sup>1</sup> Полное наименование программы: «Разработка и использование программно-аппаратных средств GRID-технологий и перспективных высокопроизводительных (суперкомпьютерных) вычислительных систем семейства «СКИФ»»

— создание и эксплуатация единого информационного пространства программы.

Как правило, когда говорят о результатах программ «СКИФ» и «СКИФ-ГРИД», внимание уделяется аппаратным средствам, мощностям разработанных суперЭВМ, а также фактам вхождения в список самых мощных суперЭВМ мира (Top500<sup>2</sup>). Это, действительно, очень важно, но хотелось бы отметить, что большая часть усилий, большее время, большие трудозатраты и значительная часть финансов в обеих программах было потрачено на создание программного обеспечения. Так, чтобы оценить масштабность комплекта программного обеспечения суперкомпьютеров семейства «СКИФ», перечислим, что в него входит:

— **системное ПО**: операционная система; базовые библиотеки поддержки параллельного счета; файловые системы; системы очередей, мониторинга и управления; стандартные системы программирования — С, С++, Fortran; и т.п.;

— **средства разработки параллельных программ** — программные системы, инструментальные средства и библиотеки: Grace, Open TS, MIRACLE и др.;

— **два десятка параллельных прикладных систем** для различных областей.

### СуперЭВМ семейства «СКИФ» Ряда 1,2,3 и 4

Суперкомпьютеры семейства «СКИФ» [5] выпускались отдельными группами, называемыми «рядами». На сегодняшний день разработаны суперЭВМ Ряда 1, 2 и 3. Проработаны технические решения, подготовлена эскизная конструкторская документация суперЭВМ Ряда 4 семейства «СКИФ».

Конструкторская документация для суперЭВМ Ряда 1 (семейства «СКИФ»), а также их опытные образцы разрабатывались и выпускались в 2000—2003 гг. Решения, которые были при этом выработаны, были способны обеспечивать мощность суперЭВМ от 20 до 500 GFlops<sup>3</sup>.

Для этих суперЭВМ были характерны следующие технические решения: использовались 32-х-разрядные одноядерные CPU. Для системной сети использовался SCI (2D-top) и Myrinet. В качестве вспомогательной сети использовался FastEthernet. Форм-фактор для вычислительных узлов в данных суперЭВМ — монтируемые в стойки корпуса — от 4U до 1U.

В эти же годы была разработана и освоена в производство отечественная системная сеть — плата SCI (2D-Top). Эта работа была выполнена исполнителем программы «СКИФ» ОАО НИЦЭВТ.

Конструкторская документация и опытные образцы Ряда 2 суперЭВМ семейства «СКИФ» разрабатывались и выпускались в 2003—2007 гг. Полученные здесь решения позволяли выпускать суперЭВМ мощностью 0,1 —5 Tflops. Использовались одноядерные CPU как 32-х-разрядные, так и 64-х-разрядные (для старших моделей Ряда 2). В качестве системной сети использовался SCI (3D-top) и Infiniband. В качестве вспомогательной сети использовался GB Ethernet. Существенно повысилась плотность упаковки вычислительной мощности. Использовались серверы с форм-фактором 1U и даже rack называемые решения Hyper-Blade.

---

<sup>2</sup> www.top500.org

<sup>3</sup> Единицы производительности суперЭВМ: 1 Gflops — миллиард операций с плавающей точкой в секунду, 1 Tflops = 1 000 Gflops — триллион операций с плавающей точкой в секунду, 1 Pflops = 1 000 Tflops — тысяча триллионов с плавающей точкой в секунду.



Рис. 1. Некоторые модели суперЭВМ семейства «СКИФ» Ряда 1

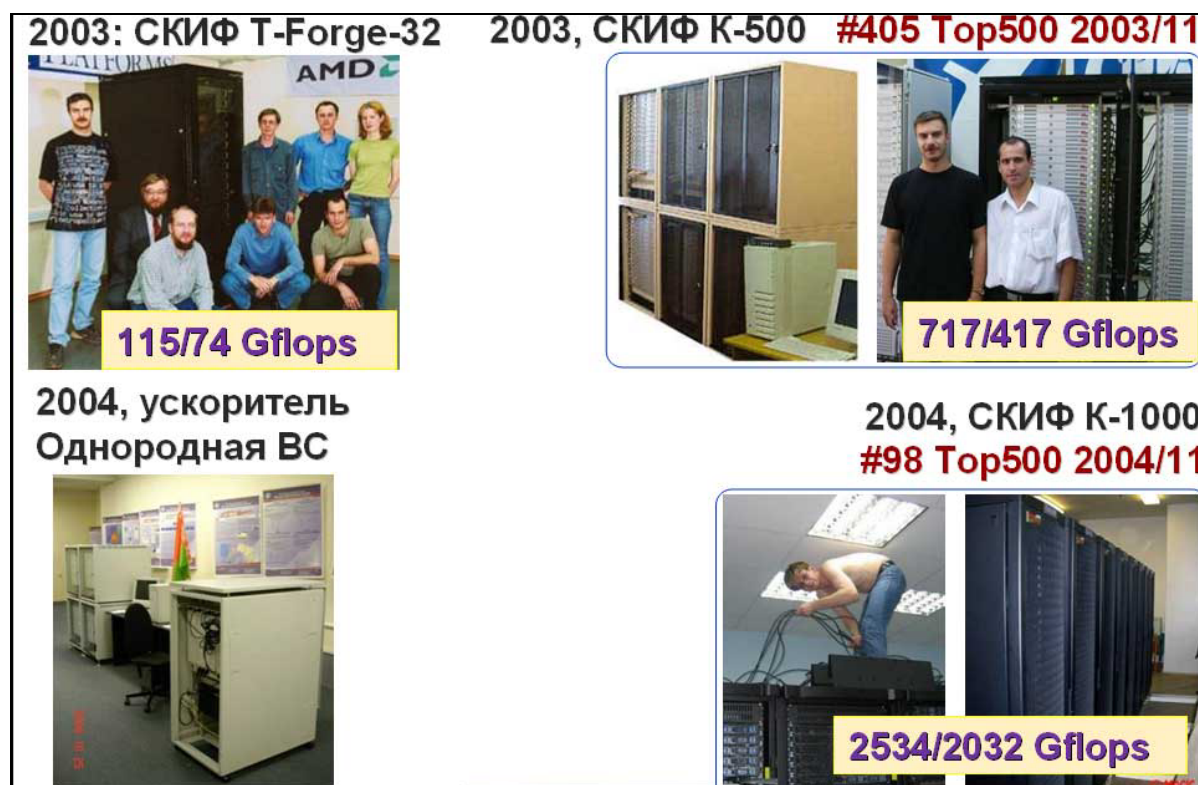


Рис. 2. Некоторые модели суперЭВМ семейства «СКИФ» Ряда 2

Отметим, что в эти же годы были разработаны системы управления и мониторинга суперкомпьютеров ServNet v.1 и ServNet v.2 (разработка ИПС РАН). Добавим, что в эти же годы стали развиваться работы по изучению и применению ускорителей, как построенных на FPGA, так и ускорителей, выполненных полностью на отечественной элементной базе. Это так называемые однородные вычислительные системы (ОВС).

Конструкторская документация и опытные образцы Ряда 3 [2] суперЭВМ семейства «СКИФ» разрабатывались в 2007—2008 гг. Полученные здесь технические решения

позволяют строить суперкомпьютеры с производительностью от 5 до 150 Tflops. В этих суперЭВМ использовались 2-4-ядерные 64-х-разрядные CPU. В качестве системной сети использовалась Infiniband DDR, в качестве вспомогательной сети — GB Ethernet. В младших моделях использовались монтируемые в 19" монтажный шкаф серверы с форм-фактором 1U. В старших моделях использовались отечественные blade-решения, позволяющие в 5U упаковывать 10 вычислительных узлов. Плотность упаковки 4 CPU на 1 U. Для данных суперЭВМ использовалась новая версия управляющей сети — ServNet v.3 (разработка ИПС РАН). В силу того, что повысилась плотность упаковки процессоров, соответственно, повысилась плотность выделения тепловой энергии на единицу объема. И если до этого использовалось воздушное охлаждение, то здесь использовалось уже трехконтурное охлаждение воздух-вода-фреон.



Рис. 3. Некоторые модели суперЭВМ семейства «СКИФ» Ряда 3

Конструкторская документация и опытные образцы Ряда 4 суперЭВМ семейства «СКИФ» запланированы к разработке в 2009—2011 гг. Данные суперЭВМ будут иметь производительность 500—5 000 Tflops. В качестве системной сети в них будет использована отечественная системная сеть (3D-тор на базе FPGA), а в качестве вспомогательной сети — Infiniband QDR или 10Gb Ethernet. Еще больше повысится плотность упаковки вычислительной мощности. Будут использоваться новые отечественные blade-системы, которые позволяют упаковать 32 вычислительных узла в шасси 6U. Плотность упаковки — более 10 CPU на 1U. Такая высокая плотность упаковки потребует совершенно новых подходов к охлаждению вычислительной установки. Поэтому разрабатывается система непосредственного водяного охлаждения вычислительных узлов. В рамках семейства «СКИФ» Ряда 4 должно быть предусмотрено широкое использование спецпроцессоров и ускорителей, построенных на разных аппаратных решениях.





Рис. 4. Внешний вид проектируемой суперЭВМ семейства «СКИФ» Ряда 4 (500 Tflops)

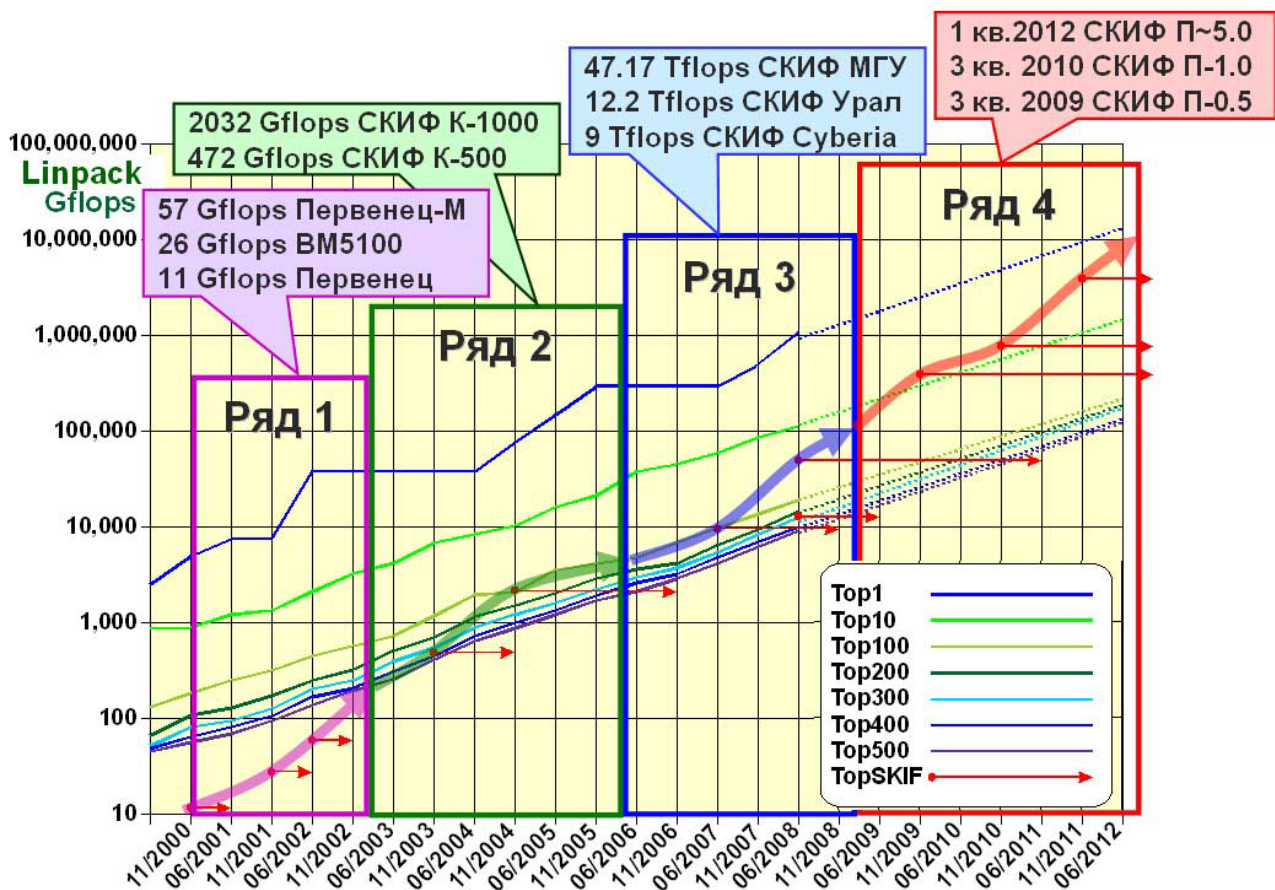


Рис. 5. Семейство суперЭВМ «СКИФ» Ряд 1, 2, 3 и 4

### Роль вычислительных наук в экономике, основанной на знаниях

Сегодня критические (прорывные) технологии в государствах, строящих экономику, основанную на знаниях, исследуются и разрабатываются на базе широкого использования высокопроизводительных вычислений [4]. И другого пути — нет. Без серьезной суперкомпьютерной инфраструктуры:

- невозможно создать современные изделия высокой (аэрокосмическая техника, суда, энергетические блоки электростанций различных типов) и даже средней сложности (автомобили, конкурентоспособная бытовая техника и т.п.);
- невозможно быстрее конкурентов разрабатывать новые лекарства и материалы с заданными свойствами;
- невозможно развивать перспективные технологии (биотехнологии, нанотехнологии, решения для энергетики будущего и т. п.).

Таблица 1

Таблица 1

Суперкомпьютеры семейства «СКИФ» Ряд 1, 2, 3 и 4

Ряд	Годы и пиковая производительность (расчетный диапазон)	Ядер в CPU/разрядность	Сетевые решения вспомогательной / системной сети	Форм-фактор / CPU/U	Примечание
1	2000–2003 0.020–0.5 Tflops	1 / 32	FastEthernet / SCI (2D-тор), Myrinet	4U–1U / 0.5–2 CPU/U	Отечественный SCI (2D-тор). Охлаждение: воздух
2	2003–2007 0.1–5 Tflops	1 / 32–64	GB Ethernet / SCI (3D-тор), Infiniband	1U, Hyper-Blade 2 CPU/U	ServNet v.1, v.2 Ускорители: FPGA, OBC. Охлаждение: воздух.
3	2007–2008 5–150 Tflops	2–4 / 64	GB Ethernet / Infiniband DDR	1U, blades (20 CPU в 5U) / 2–4 CPU/U	ServNet v.3. Охлаждение: воздух–вода–фреон.
4	2009–2011 500–5 000 Tflops	4–8 / 64	Infiniband QDR / отечественная системная сеть (3D-тор)	Сверхкомпактные blades (64 CPU в 6U) / 10.7 CPU/U	Новые подходы к охлаждению. Ускорители: FPGA, GPU, Cell, МЦОС

*«Технологии, таланты и деньги доступны многим странам. Поэтому США стоит перед лицом непредсказуемых экономических конкурентов из-за рубежа. Страна, которая желает победить в конкуренции, должна победить в вычислениях».*

Не важно, о конкуренции в каком секторе экономики идет речь: сказанное верно для добывающих и перерабатывающих секторов экономики, и особенно это верно при разработке новых технологий. Поэтому в развитых странах мира для перехода к экономике знаний создается новая инфраструктура государства — государственная система из мощных суперкомпьютерных центров, объединенных сверхбыстрыми каналами связи в грид-систему. То есть, по сути, речь идет о национальной научно-исследовательской информационно-вычислительной сети. Для такой системы часто используют термин «киберинфраструктура». В этих странах на создание национальной киберинфраструктуры



выделяются большие финансы из государственных бюджетов: в 2005—2007 гг. США тратили на эти цели от 2 до 4 млрд. долларов в год.

Тем самым, краткое определение сегодняшней роли суперкомпьютер-ных технологий может быть таким: это ключевая критическая технология, единственный инструмент, дающий возможность победить в конкурентной борьбе.



Рис. 6. Соответствие уровня суперкомпьютерных технологий уровню конкурентоспособности разработок, создаваемых при помощи данных суперЭВМ

В каждый момент времени, если посмотреть уровень развития суперкомпьютерной отрасли (например, если посмотреть список Top500), можно выделить два слоя:

— **Технологии уровня «N».** Инновационные, совершенно новые суперкомпьютеры, которые сильно вырываются вперед. Они сделаны по технологиям будущего, они еще не вполне разработаны, а только-только разрабатываются в мире. Такие машины соответствуют первым 10—20 местам списка Top500. Эти суперЭВМ обладают мощностью, которая радикально отличает их от всех других машин. И на них можно выполнить вычисления, разработать новые материалы, новые технологические решения, которые позволят обладающей ими стране быть вне конкуренции и существенно оторваться от других производителей материалов, лекарств, механизмов и тому подобного;

— **Технологии уровня «N-1».** Технологии более низкого уровня, отработанные решения, воспроизводить их способны многие страны. Соответственно, расчеты, выполняемые на ТАКИХ машинах, позволяют достичь НОРМАЛЬНОЙ конкурентоспособности. Т.е. позволяют создавать материалы, механизмы, решения такие же, как и у многих других стран. В данном случае мы получаем рядовую конкурентоспособность. Тут можно выходить на мировой рынок, но при этом придется вести изнурительную конкурентную борьбу.

Надо честно отметить, что за предыдущие годы суперЭВМ Ряда 1-3 относились к технологическому уровню «N-1». А вот суперЭВМ Ряда 4 впервые попадут в технологический уровень «N».

#### **Что есть отечественного в суперЭВМ семейства «СКИФ»?**

Когда обсуждаются суперкомпьютеры семейства «СКИФ», создаваемые в рамках научно-технических программ Союзного государства «СКИФ» и «СКИФ-ГРИД», то всегда



задается вопрос: «А что отечественного есть в этих суперЭВМ, ведь в них же используются импортные комплектующие...»? Это правда, пока еще в странах-участниках Союзного договора не развито производство необходимых для суперЭВМ отечественных микропроцессоров и сопутствующих комплектующих. В результате приходится использовать импортную элементную базу. Впрочем, такая ситуация не является исключением.

Суперкомпьютеры (впрочем, как и компьютеры) — технически сложные устройства. Как правило, такого рода изделия создаются с широким использованием мирового распределения труда. Общая практика, когда в суперЭВМ, разрабатываемой одной компанией некоторой страны, широко используются компоненты, разработанные и производящиеся в самых различных компаниях в разных странах мира. В настоящее время ни одна страна мира (за исключением разве что США), не производит все без исключения компоненты компьютерной техники и суперкомпьютеров в частности.

В полном соответствии с данной тенденцией суперкомпьютеры семейства «СКИФ» основываются на использовании зарубежной компонентной базы, что позволяет обеспечить конкурентоспособность по такому важнейшему параметру как производительность. Суперкомпьютеры семейства «СКИФ» разрабатываются, собираются, налаживаются и тестируются нашими специалистами. При этом Беларусь и Россия являются собственниками конструкторской документации на узлы суперЭВМ семейства «СКИФ» и на изделия целиком. На часть разработок имеются патенты. Это еще одно документальное подтверждение оригинальности отечественных разработок.

Независимая экспертиза страны происхождения суперЭВМ выполняется и при включении суперЭВМ в рейтинг Top500. Поданные заявителем сведения о стране происхождения и о производителе проверяются составителями списка и, если нужно, исправляются — такие случаи известны. Во всех случаях вхождения всех суперЭВМ семейства «СКИФ» данная проверка страны происхождения проходила успешно — составители списка оставляли без изменения сведения о российском происхождении суперЭВМ семейства «СКИФ»: СКИФ К-500, СКИФ К-1000, СКИФ Cyberia, СКИФ МГУ и СКИФ Урал (редакции рейтинга 11/2003, 11/2004-06/2006, 06/2007, 11/2007, 06/2008).

В целом, за всю историю Top500 российское происхождение [3] признавалось только у этих пяти суперЭВМ семейства «СКИФ» и еще у «МВС-1000М» (НИИ «Квант», редакции рейтинга 06/2002-06/2004). Все остальные установленные в России системы, попавшие в Top500, являются импортными — производства: Hewlett-Packard, Sun Microsystems и ЮМ.

Еще одно объективное доказательство отечественного происхождения суперЭВМ семейства СКИФ — превышение зарубежных аналогов по показателям. Если некоторая суперЭВМ обладает характеристиками, которые превышают достижения отрасли, то это является неоспоримым доказательством уникальности, оригинальности установки. СуперЭВМ семейства «СКИФ» часто показывали лучшие в отрасли результаты. Например: — «СКИФ К-500», «СКИФ Cyberia», «СКИФ МГУ», «СКИФ Урал» продемонстрировали лучший показатель КПД на процессорах Intel. Да, в суперЭВМ семейства СКИФ используются импортные процессоры, но отечественным разработчикам удается их использовать лучше, чем кому бы то ни было!

— В ноябре 2004 «СКИФ К-1000» занял первое место в мире на тесте «столкновение 3 автомобилей» в рейтинге TopCrunch ([www.topcrunch.org](http://www.topcrunch.org), поддержан DARPA).

— В феврале 2007 «СКИФ Cyberia» выдает показатели лучшие, чем у современных суперЭВМ (Cray, HP, IBM, SUN): лучший (на 8...13%) КПД, лучшую (в 2 — 1.5 раза) масштабируемость на прикладном инженерном пакете STAR-CD.

Часто разработанные СКИФ-решения превышают зарубежные аналоги и по техническим возможностям:

— blade-решение для суперЭВМ «СКИФ МГУ» и «СКИФ Урал» имело (на момент выпуска): плотность упаковки вычислительной мощности процессоров Intel — на 20 % лучше всех аналогичных изделий в мире; стандартный разъем PCI Express; «N+1»

резервирование и «горячую замену» как блоков питания, так и вентиляторов. Такое сочетание важных эксплуатационных свойств встречается только в данной blade-системе;

- система управления СКИФ ServNet версии 1, 2, 3 (разработана в ИПС РАН) поддерживает ряд уникальных возможностей. Например, функцию «черного ящика» — сохранение последних записей о событиях в отказавшем блоке.

СуперЭВМ семейства «СКИФ» являются отечественными системами, разработанными на базе импортных комплектующих, с постепенно нарастающей долей импортозамещения.

В суперкомпьютерах «СКИФ» ряда 1 отечественными были:

- схемотехнические решения;
- конструкторская документация (КД) корпусов и стоек (стойки и корпуса выпускались в Минске);
- программное обеспечение (ПО) кластерного уровня семейства СКИФ — ПО КУ СКИФ.

При этом набор отечественного базового программного обеспечения (ПО КУ СКИФ) разрабатывался и на основе оригинальных разработок, и на основе доработок и адаптации программного обеспечения с открытыми исходными текстами.

СуперЭВМ «СКИФ» Ряд 2 также разработаны по оригинальному проекту. И здесь отечественными являлись:

- схемотехнические решения;
- конструкторская документация (КД) корпусов и стоек;
- разработка и программное обеспечение — ПО КУ СКИФ.

Кроме того:

- отдельные компоненты узлов были доработаны по документации российских разработчиков — например, материнские платы для «СКИФ К-500» и «СКИФ К-1000»;
- суперЭВМ «СКИФ» ряда 2 оснащались сетью управления и мониторинга отечественной разработки — ServNet версии 1 и 2, разработка ИПС РАН;
- в суперкомпьютере «СКИФ ЕС1710.03» использовался интерконнект отечественного производства (НИЦЭВТ, интерконнект SCI 2D-тор).

Суперкомпьютеры «СКИФ» ряда 3 «СКИФ МГУ» и «СКИФ Урал» созданы на основе blade-серверов отечественной разработки, имеющих уникальные показатели. Таким образом, здесь отечественными были:

- схемотехнические решения;
- конструкторская документация на сами blade-серверы и шасси;
- программное обеспечение — ПО КУ СКИФ;
- конструкторская и программная документация на сервисную сеть ServNet версии 3 (платы ServNet T-60 и ServNet SCB).

В дальнейшем, в рамках реализации суперЭВМ «СКИФ» Ряд 4, к данным отечественным компонентам добавятся ускорители вычислений и гибридные узлы, отечественный интерконнект, российская интеллектуальная собственность на все печатные платы (материнские и соединительные) и все конструктивы суперЭВМ.

В таблице 1 представлены основные параметры суперкомпьютеров семейства «СКИФ» Ряд 1, 2, 3 и 4. Кроме того, в таблице указаны элементы суперЭВМ, являющиеся отечественной интеллектуальной собственностью — в дополнение к общим схемотехническим решениям, конструкторской и программной документации на суперЭВМ семейства «СКИФ», которые всегда разрабатываются нами и принадлежат нам.

### **Вычисления в интересах развития наукоемких технологий и nano-индустрии на платформе суперЭВМ семейства «СКИФ»**

В рамках программ «СКИФ» и «СКИФ-ГРИД» мы создавали не только опытные образцы, конструкторскую и программную документацию системного уровня, но также мы создавали прикладные (пилотные) программные системы.

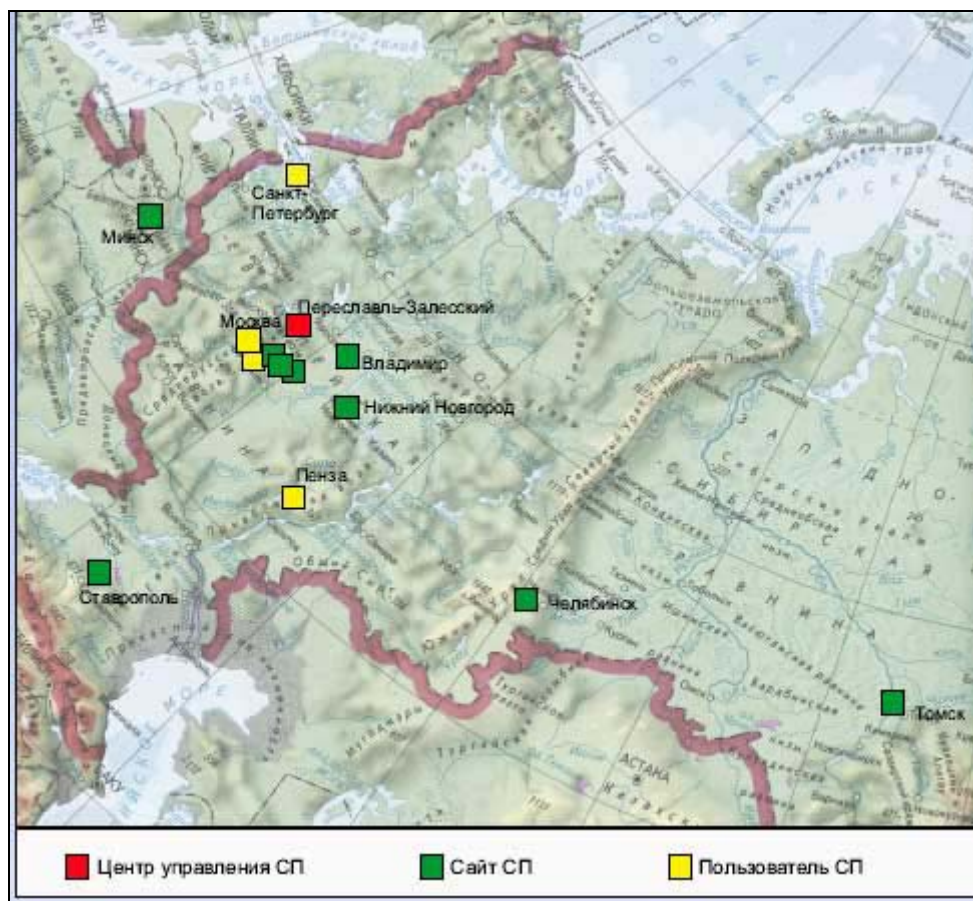


Рис. 7. Распределенная вычислительная система «СКИФ-Полигон»

В рамках программы «СКИФ-ГРИД» в качестве платформы для таких прикладных систем создан и развивается так называемый «СКИФ-Полигон» [1]. Распределенная вычислительная система «СКИФ-Полигон» объединяет суперкомпьютерные центры, в которых расположены суперЭВМ семейства «СКИФ» и научно-исследовательские центры, которым необходим доступ к вычислительным ресурсам. К осени 2008 года были объединены ресурсы суперкомпьютерных центров, расположенных в самых разных городах Беларуси и России: Минск, Москва, Переславль-Залесский, Челябинск, Томск, Ставрополь и другие города. Суммарная пиковая производительность системы «СКИФ-Полигон» сегодня превышает 100 Tflops. В дальнейшем предусмотрено расширение состава участников «СКИФ-Полигона» и увеличение его производительности. Система «СКИФ-Полигон» является эффективной платформой, на которой проводятся разработки системного и прикладного программного обеспечения для суперЭВМ семейства «СКИФ».

На платформе опытных образцов суперЭВМ семейства «СКИФ», а также на платформе «СКИФ-Полигона» в разных местах выполняются различные работы, многие из которых либо близки, либо напрямую связаны с наноиндустрией. Разрабатываемые программные комплексы предназначены для выполнения научных и инженерных расчетов в таких важнейших областях как:

- исследования в области обработки здравоохранения (например, обработка и хранение цифровых маммограмм);
- исследования в области проектирования лекарств с заданными свойствами;
- расчеты в интересах разработки новых материалов, в том числе — наноматериалов;
- исследования в области биоинформатики;
- расчеты, связанные с обеспечением безопасности атомных электростанций;
- расчеты в интересах различных разделов наук о Земле;
- и другие исследования.

Перечислим некоторые из разработок демонстрационных (пилотных) прикладных систем, созданных в рамках программы «СКИФ» и первого этапа программы «СКИФ-ГРИФ».

В Челябинском государственном университете разработана и развивается система MultiGen на базе системы программирования OpenTS<sup>4</sup>. В этой работе речь идет об изучении свойств различных лекарственных форм и о проектировании новых лекарств с заранее известными свойствами на базе многоконформационной модели.

В НИИ Механики МГУ имени М. В. Ломоносова также на базе Open TS разработан пакет обчета обтекания плохообтекаемых тел. В этом пакете используется оригинальный подход академика О.М. Белоцерковского представления потока в виде взаимодействия микровихрей различной направленности.

В НИИ космических систем разработано несколько прикладных систем, связанных с дистанционным зондированием Земли:

— программный комплекс построения изображения по сигналу с космического радара;

— программный комплекс моделирования сигнала широкополосного радара.

Эти системы написаны на базе системы программирования OpenTS.

В НИИФХБ МГУ им. А.Н. Белозерского разработано программное обеспечение грид-сервиса «молекулярный докинг». Комплекс используется для нахождения структуры перспективных лекарственных средств:

В ИПХФ (Черноголовка) работают над различными расчетами, связанными с нанотехнологиями и новыми материалами.

Химический факультет МГУ имени М. В. Ломоносова проводит исследования в области расчетов различных наномеханизмов: биологические молекулярные моторы и наноавтомобили:

Полученные на сегодня результаты позволяют утверждать, что суперкомпьютеры семейства «СКИФ» являются удачной платформой для проведения расчетов в интересах развития nanoиндустрии Российской Федерации.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. С.М. Абрамов, В.Ф. Заднепровский, А.А. Московский «СКИФ-полигон» — текущее состояние и перспективы развития II Труды Второй Международной научной конференции «Суперкомпьютерные системы и их применение (SSA'2008)» 27-29 октября 2008 г., Минск. — Минск: ОИПИ НАН Беларуси, 2008, с. 112-113 ISBN 978-985-6744-46-7.
2. С.М. Абрамов, В.В. Анищенко, В.Ф. Заднепровский, А.А. Московский, А.М. Криштофик, В.Ю. Опанасенко, Н.Н. Парамонов Развитие семейства отечественных суперкомпьютеров «СКИФ» в рамках программы Союзного государства «СКИФ-ГРИД» II Научный сервис в сети Интернет: решение больших задач. Труды Всероссийской научной конференции, 22-27 сентября 2008 г. Новороссийск. - М.: Изд-во МГУ им. М.В. Ломоносова, 2008 с. 286-291 (CD) ISBN 978-5-211-05616-9.
3. С.М. Абрамов, В.Ф. Заднепровский, А.А. Московский Отечественные суперЭВМ и грид-системы I. Проблемы развития национальной киберинфраструктуры в России //В сборнике «Российские суперкомпьютеры: Наука. Технологии. Производство». - Библиотека ЦСПП, Выпуск 2, 100 с., ил., с. 36-54. ISBN 5-8027-0061-0.
4. С.М. Абрамов, В.Ф. Заднепровский, А.А. Московский Опыт использования СуперЭВМ для эффективного развития «прорывных технологий» (на примере нанотехнологий) //XII научно-практическая конференция Университета города Переславля «Программные системы: теория и приложения». Переславль-Залесский: Изд-во «Университет города Переславля», 2008, Том 1, с. 37-50. ISBN 978-5-901795-11-8.

---

<sup>4</sup> Разработка ИПС РАН [6]



5. С.М. Абрамов Итоги суперкомпьютерной программы «СКИФ» Союзного государства и перспективы ее развития //В книге «Пути ученого. Е.П. Велихов». Под общей редакцией академика РАН В.П. Смирнова - М.: РНЦ «Курчатовский институт», с. 325-333 ISBN 978-5-9900996-1-6.

6. С.М. Абрамов, А.А. Кузнецов, В.А. Роганов Кросстатформенная версия Т-системы с открытой архитектурой // Труды Международной научной конференции «Параллельные вычислительные технологии (ПаВГ2007)», Челябинск, 29 января - 2 февраля 2007 г., Челябинск, изд. ЮУрГУ, Т 1, с. 115 -121.

#### ОБ АВТОРЕ

Абрамов Сергей Михайлович, директор Института программных систем РАН, д-р физ.-мат.наук, член-корр. РАН E-mail: [psi@botik.ru](mailto:psi@botik.ru)