

Информационные технологии

Развитие компьютерной инфраструктуры

Перспективное развитие компьютерной инфраструктуры ОИЯИ призвано обеспечить выполнение целого спектра конкурентоспособных исследований, ведущихся на мировом уровне в ОИЯИ и сотрудничающих с ним мировых центрах как в рамках исследовательской программы ОИЯИ, в частности мегапроекта NICA, так и в рамках приоритетных научных задач, выполняемых в сотрудничестве с ведущими мировыми научными и исследовательскими центрами (ЦЕРН, FAIR, BNL и т. д.).

Для Лаборатории информационных технологий главной задачей семилетнего плана является создание единой информационно-вычислительной среды, объединяющей множество различных технологических решений, концепций и методик. Подобная среда должна объединить суперкомпьютерные (гетерогенные), грид- и облачные комплексы и системы с целью предоставления оптимальных подходов для решения различных типов научных и прикладных задач. Необходимыми требованиями к такой среде являются ее масштабируемость, интероперабельность и адаптируемость к новым техническим решениям.

Ожидаемые результаты

1. Создание в ОИЯИ многофункционального информационно-вычислительного комплекса (МИВК) мирового уровня по развитию прорывных информационных технологий.
2. Развитие территориально распределенной научно-исследовательской среды, обеспечивающей использование мощностей комплекса научными центрами стран-участниц ОИЯИ и другими научными организациями, включая совместные международные проекты.
3. Исследования в области интенсивных операций с большими объемами данных в распределенных системах (Big Data), развитие соответствующих средств и методов визуализации, в том числе 3D.
4. Научные исследования в области интеграции базовых, облачных и грид-технологий с целью их оптимального использования в рамках многофункционального центра.
5. Оптимизация процессов использования существующих мощностей, в частности суперкомпьютеров, для обработки данных в распределенной среде.
6. Внедрение и развитие методологии краткосрочного/среднесрочного/долгосрочного прогнозирования развития многофункционального вычислительного центра.
7. Исследования в области интеграции разнородных вычислительных ресурсов и источников данных в единую распределенную вычислительную систему.
8. Создание программно-технологического комплекса, обеспечивающего внедрение облачных технологий для организации исследований распределенными группами пользователей, внедрение интеллектуальных методов управления грид-облачными структурами нового поколения.
9. Исследования в области глобального мониторинга распределенных вычислительных систем.
10. Разработка новых параллельных приложений, кросс-платформенных и мультиалгоритмических комплексов программ в гетерогенной вычислительной среде, позволяющих расширить круг решаемых фундаментальных научных задач, требующих большого объема вычислений.
11. Создание единой аналитической системы управления ресурсами МИВК и потоками данных для повышения эффективности использования вычислительных ресурсов и ресурсов хранения и упрощения процесса обработки данных новых экспериментов.
12. Развитие гиперконвергентной платформы, включающей суперкомпьютер «Говорун» как спутниковый проект в общем инфраструктурном проекте МИВК, в плане наращивания вычислительных ресурсов и в плане развития сервисов, развернутых на

платформе, определяемых потребностями пользователей, в том числе потребностями мегапроекта NISA и нейтринной программы, для существенного ускорения проводимых исследований на основе парадигмы гетерогенных вычислений.

13. Создание многоуровневого хранилища данных («озеро данных») ОИЯИ для предоставления постоянно расширяемого ресурса долговременного хранения информации, объем и скорость которого сбалансирована с соответствующими потоками информации.

Одной из важнейших составляющих многофункционального информационно-вычислительного комплекса, предоставляющего доступ к ресурсам и возможность работы с большими данными, является сетевая инфраструктура. Для соответствия сетевой инфраструктуры и телекоммуникационных каналов связи ОИЯИ требованиям надежности и доступности комплекса со стороны стран-участниц ОИЯИ и международных коллабораций, использующих ресурсы комплекса для проведения исследований, необходимо обязательное двойное резервирование всех соединений и надежных телекоммуникационных каналов с пропускной способностью 100 Гбит/с и более.

Важнейшей задачей семилетнего плана будет дальнейшее расширение инженерной инфраструктуры многофункционального вычислительно-информационного центра, связанной с запуском ускорительного комплекса NISA и проведением экспериментов на нем.

Одной из самых востребованных и амбициозных задач, которая должна быть реализована в рамках семилетнего плана развития ОИЯИ, является создание корпоративной информационной системы ОИЯИ для коллективного пользования и управления информацией, получаемой в лабораториях и подразделениях Института, и создание общего информационного пространства, совершенствования информационного обеспечения и поддержки процесса принятия решений. ОИЯИ планирует создать цифровую модель международного исследовательского центра — тиражируемую информационную платформу, позволяющую автоматизировать и оцифровать административные процессы для обеспечения максимальной эффективности основной деятельности научного центра.

Математическая поддержка исследований, проводимых в ОИЯИ

Решение задач в области вычислительной физики и математики в широком спектре исследований, проводимых в ОИЯИ, требует развития новых математических методов и подходов, создания алгоритмов и программ для численного и символьно-численного моделирования на новейших вычислительных аппаратных комплексах с многоядерной архитектурой, сопроцессорами и графическими ускорителями. Такие вычислительные системы предоставляют возможность существенно ускорять математические расчеты путем выбора технологии распараллеливания, учитывающей специфику решаемой задачи. Особую актуальность приобретают вопросы адаптации на гетерогенных архитектурах разработанного ранее программного обеспечения и создание новых приложений на основе современных технологий распараллеливания, оптимально использующих возможности, предоставляемые вычислительными ресурсами. Отдельной задачей является разработка программных платформ и сред для создания параллельных приложений и развитие сервисов, значительно упрощающих пользователям работу на подобных вычислительных комплексах.

Ожидаемые результаты

1. Разработка программного обеспечения и осуществление математической поддержки экспериментов, проводимых на базовых установках ОИЯИ и в рамках международных коллабораций на крупнейших установках мира, в том числе внедрение высокоскоростных методов, алгоритмов и программных средств для параллельной обработки и анализа экспериментальных данных на гетерогенных и распределенных вычислительных комплексах.
2. Развитие численных методов, алгоритмов и программных комплексов для моделирования сложных физических систем, включая взаимодействия внутри горячей

и плотной ядерной материи, физико-химические процессы в материалах, возникающие при облучении тяжелыми ионами, эволюцию локализованных наноструктур в открытых диссипативных системах, свойства атомов в магнитооптических ловушках, электромагнитный отклик наночастиц и оптические свойства наноматериалов, эволюцию квантовых систем во внешних полях, астрофизические исследования.

3. Разработка методов и алгоритмов компьютерной алгебры для моделирования и исследования квантовых вычислений и информационных процессов, низкоразмерных наноструктур во внешних полях, дискретных квантовых систем с нетривиальными симметриями.
4. Разработка математических, алгоритмических и программных методов описания перепутанности (сцепленности) состояний систем кубитов как основного ресурса квантовой информатики.
5. Разработка символьно-численных методов, алгоритмов и комплексов программ для анализа низкоразмерных составных квантовых систем в молекулярной, атомной и ядерной физике.
6. Развитие алгоритмов на основе рекуррентных и свёрточных нейронных сетей для задач ML/DL и анализа больших данных, которые в первую очередь предназначены для ускорения распознавания множественных треков в экспериментах физики частиц, в том числе для мегапроекта NICA и нужд нейтринных экспериментов.

План развития многофункционального информационно-вычислительного комплекса

Компоненты многофункционального информационно-вычислительного комплекса (МИВК)	2017	2018	2019	2020	2021	2022	2023
Tier1-CMS							
Наращивание производительности: CPU kHS06	67,2	83,2	160,0	200,0	240,0	300,0	350,0
Наращивание дисковой системы хранения, Тбайт	5070	6100	8000	8800	10800	13100	16100
Наращивание системы массовой памяти, Тбайт	20000	20000	20000	25000	30000	35000	42000
Tier2 и вычислительные ресурсы с системой хранения для локальных пользователей							
Наращивание производительности: CPU kHS06	59,2	75,2	96,0	110,0	130,0	150,0	170,0
Наращивание дисковой системы хранения, Тбайт	2970	3400	5000	5500	6000	6500	7000
Гетерогенный кластер для параллельных вычислений							
Производительность, Тфлопс	180	240	300	360	420	480	540
Наращивание дисковой системы хранения, Тбайт	55	60	60	65	70	75	80
Облачная инфраструктура							
Ядра	630	1000	1500	2250	3500	5000	7500
ОЗУ, Гбайт	1280	2000	3000	4500	7000	10000	15000
Дисковые серверы, Тбайт	40	80	160	320	640	1200	2500
Внешние телекоммуникационные каналы и локальная сеть ОИЯИ							
Пропускная способность, Гбит/с	100						

График финансирования (тыс. долл. США)

Наименование работ	2017	2018	2019	2020	2021	2022	2023
Раздел I							
Поэтапная модернизация системы климат-контроля, системы пожаротушения и источников бесперебойного питания (ИБП)	404,3	794,9	1454,7	697,8	666,3	521,2	507,3
Поэтапное увеличение вычислительных ресурсов	653,0	1 603,2	690,0	1 578,0	839,4	907,8	870,4
Поэтапное расширение системы хранения данных на дисковых серверах	433,2	1 593,3	119,9	1 365,1	1 177,6	1 199,2	1 399,3
Поэтапное увеличение емкости роботизированного ленточного хранилища	263,8	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Поэтапное наращивание локальной сетевой инфраструктуры	377,6	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Наращивание вычислительных ресурсов и дисковых массивов гетерогенного кластера (платформа HybriLIT)	41,7	116,9	48,4	151,6	150,0	361,3	412,5
Суперкомпьютер «Говорун»	2 495,0	194,6	2 537,6	0,0	0,0	0,0	0,0
Развитие облачной инфраструктуры	172,1	0,0	0,0	176,3	110,0	110,5	110,5
Дизельная генераторная установка (ДГУ)	440,4	412,2	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Замена трансформаторов	327,3	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Итого по разделу I	5 608,4	4 715,1	4 850,6	3 968,8	2 943,3	3 100,0	3 300,0
Раздел II							
Поэтапное наращивание локальной сетевой инфраструктуры	0,0	1 272,7	682,5	390,3	25,7	0,0	0,0
Поэтапное увеличение емкости роботизированного ленточного хранилища	0,0	0,0	1320,0	0,0	145,5	148,3	149,7
Расходные материалы, оборудование и специализированное лицензионное ПО	281,0	230,7	192,5	43,1	220,1	121,2	120,3
Замена критического и устаревшего оборудования	301,7	294,4	965,7	139,2	0,0	88,0	280,1
Оборудование для центрального ядра сетевой инфраструктуры	282,9	193,2	201,5	0,0	234,4	122,3	330,2
Модернизация оборудования внешних каналов связи и переход на 100 Гбит/с	180,0	340,2	260,1	52,7	0,0	200,0	0,0
Дизельная генераторная установка (ДГУ)	0,0	0,0	18,2	87,0	20,0	20,2	19,7
Модернизация 2-го и 4-го этажей	0,0	0,0	0,0	0,0	12,7	0,0	0,0
Итого по разделу II	1 045,6	2 331,2	3 640,5	712,3	658,4	700,0	900,0
Итого	6 654,0	7 046,3	8 491,1	4 681,1	3 601,7	3 800,0	4 200,0
Лицензионное программное оборудование	233,6	228,0	203,8	201,1	200,0	150,0	250,0