



С тем, что сегодня для эффективной деятельности университета кроме всего прочего необходима и соответствующая ИТ-база, включающая высокопроизводительные системы, вряд ли кто будет спорить. Молодые специалисты, особенно в технических и естественно-научных областях, еще в вузе имевшие возможность поработать на современных вычислительных установках, наиболее востребованы на рынке труда: компании и предприятия готовы принять их на самых выгодных условиях. Такое отношение работодателей к выпускникам того или иного вуза - лучшая визитная карточка для учебного заведения.

Сегодня многие университеты, особенно ставшие победителями инновационных конкурсов Минобрнауки РФ, намерены вложить немалые средства в приобретение суперкомпьютерных комплексов. Но как сделать так, чтобы дорогостоящее оборудование не просто позволяло похвалиться перед коллегами по сообществу: мол, и у нас система не хуже лидеров из Томска (суперкомпьютер "СКИФ Cyberia" с производительностью в 12 терафлопс установлен в начале этого года в Томском госуниверситете и занимает на сегодня первую строку рейтинга Top50 супермашин СНГ. - Прим. автора), а действительно бы работало во славу университета, помогая формировать инфраструктуру не только родного вуза, но и научно-образовательного пространства региона и даже России? Нужны умелые руки и светлые головы, нужна соответствующая внутривузовская структура, располагающая, во-первых, высококвалифицированными кадрами, которые готовы поддерживать функционирование нового суперкомплекса, и, во-вторых, обширным кругом пользователей и задач, требующих для решения именно такие супермощности. Хороший пример такой структуры, отвечающей всем необходимым требованиям, - Научно-исследовательский вычислительный центр МГУ им. М.В.Ломоносова. Развитие и использование суперкомпьютерных технологий - одно из главных направлений деятельности HIVЦ, отметившего полтора года назад свой полувековой юбилей.

ЗАГРУЗИМ!

Большие вычислительные мощности требуют больших задач

Мощная история

Суперкомпьютерный комплекс Научно-исследовательского вычислительного центра МГУ - один из самых мощных в системе отечественной высшей школы, а сам HIVЦ входит в число крупнейших высокопроизводительных центров России.

С момента своего основания в 1955 году Вычислительный центр МГУ всегда играл заметную роль в использовании современной компьютерной техники и распространении передовых вычислительных технологий. Спустя всего год после открытия в его стенах была установлена первая серийная отечественная машина "Стрела": 2000 операций в секунду - огромная скорость по тем временам. В 1961 году введена в строй машина М-20, через пять лет - БЭСМ-4. К 1981 году в ВЦ функционировали четыре БЭСМ-6, две ЕС-1022, МИНСК-32, две ЭВМ Мир-2 и разработанная специалистами центра первая в мире машина с трючной системойчисления - ЭВМ "Сетунь". В конце 1990-х специалисты HIVЦ первыми в России собрали кластерную систему и на ее основе построили работу суперкомпьютерного центра коллективного пользования. Именно тогда параллельные вычисления и сформировались в одно из ведущих направлений работы HIVЦ. Сегодня базой для проведения высокопроизводительных вычислений в HIVЦ служат четыре мощных вычислительных кластера с суммарной производительностью около 2 триллионов операций в секунду.

Такие мощности, четкое понимание перспектив развития суперкомпьютерной области, сильные кадры, научная школа по параллельным вычислениям и современная техника позволяют HIVЦ одновременно выступать центром коллективного пользования и оставаться крупным научным центром, многие исследования которого напрямую связаны с суперкомпьютерной деятельностью. Прежде всего, это развитие программной инфраструктуры высокопроизводительной техники, создание систем анализа структуры программ, мониторинга, сертификации, которые помогают отслеживать качество использования кластерных мощностей и эффективность работы пользовательских программ. Специалистами HIVЦ МГУ разработан ряд уникальных систем, таких, например, как V-Ray - для анализа тонкой параллельной структуры программ и алгоритмов, X-Com - для организации и проведения масштабных расчетов в распределенных вычислительных средах, ParCon - для исследования динамических характеристик параллельных программ. Традиционно сильным направлением работы специалистов HIVЦ является вычислительная математика, численные методы и исследования в смежных научных областях: томографический анализ поверхностных слоев Земли, экология и математические

модели изменения климата, компьютерное проектирование лекарственных препаратов, магнетогидродинамика, квантово-химические расчеты, криптография и другие.

Что считать будем?

Этот вопрос для вуза, решившегося потратить солидные деньги на приобретение современной суперкомпьютерной системы, весьма актуальный. Шагать в ногу со временем и поставить у себя суперсистему в несколько терафлопс, конечно, престижно. Но что толку даже в самой современной технике, если она пылится без дела? Кстати, по мнению большинства ИТ-профессионалов, для поддержки учебного процесса вуза на современном уровне вполне достаточно системы на 0,5 терафлопс, не больше. Приобретение более серьезных мощностей требует наличия задач иного масштаба и привлечения для их решения коллег из других научных областей, а еще лучше пользователей из промышленности.

В HIVЦ привыкли думать об

центра хорошо известен не только в научно-образовательном сообществе страны, но и в среде представителей промышленных структур. Кстати, в 2000 году, когда в HIVЦ начала действовать первая кластерная установка коллективного пользования, в МГУ существовало лишь несколько научных групп, которым для решения их задач требовались значительные мощности. Сегодня благодаря тесным контактам HIVЦ со всеми "читающими" подразделениями МГУ - факультетами ВМиК, физическим, химическим, биоинженерии и биоинформатики, механико-математическим, с НИИЯФ, НИИФХБ, ГАИШ и другими - свои исследования с использованием возможностей суперкомпьютерной техники ведут 80 научных групп Московского университета, многих вузов страны и институтов РАН.

Вот лишь один из многочисленных примеров такого взаимодействия. Совместно со специалистами Гематологического научного центра РАН в HIVЦ заняты решением за-

суперкомпьютерных ресурсов. На основании одной из серий расчетов для белка тромбина из более двух тысяч кандидатов были отобраны наиболее перспективные, 30 из которых заказаны в Национальном институте рака (США) и уже сейчас получены для проведения экспериментов. Совместная работа молекулярных дизайнеров HIVЦ, химиков-синтетиков Института органической химии РАН и биохимиков ГИЦ РАН привела к открытию и патентованию новых синтетических низкомолекулярных ингибиторов тромбина, обладающих высокой антикоагулянтной активностью в плазме крови. Эти соединения станут основой новых эффективных лекарств от тромбозов.

Весьма активно развивается сотрудничество HIVЦ в суперкомпьютерной области с академическими структурами. Среди основных партнеров центра в решении различных научных задач и реализации совместных проектов - Межведомственный суперкомпьютерный центр и Институт программных систем РАН, академические институты математического моделирования, прикладной математики, вычислительной математики, проблем химической физики и многие другие.

Дела наши общие

Статус одного из крупнейших высокопроизводительных центров России постоянно требует от специалистов HIVЦ активных действий по формированию инфраструктуры суперкомпьютерного сообщества страны. Важным направлением этой работы стали общенациональные проекты, реализация которых помогает эффективно наращивать вычислительные мощности отечественных вузов и НИИ, вести подготовку ИТ-специалистов, активизировать взаимодействие научно-образовательного сообщества с промышленностью и бизнесом. Если для кого-то термин "общенациональные" в данном случае звучит слишком громко, стоит внимательно изучить суть этих проектов, а главное - уже полученные результаты. Тогда все станет на свои места: уровень пафоса слова и уровень решаемых задач находятся в полном соответствии.

Parallel.ru - информационно-аналитический центр по параллельным вычислениям - был создан в 1998 году (www.parallel.ru). Быстро выйдя за рамки обычного веб-ресурса, он объединил большое число специалистов в данной области, предоставив им не только возможность общения, но и актуальную информацию. Материалы центра включают регулярные обзоры новостей мира высокопроизводительных вычислений, описание архитектур компьютеров и технологий параллельного программирования, учебные материалы, списки предстоящих конференций, информацию о российских ресурсах в данной области и многое другое, в списке его новостной рассылки - более трех тысяч адресатов.



Фото Николая Степаненкова

ответе на вопрос "Что считать будем?" заранее, еще до приобретения новой техники, готовя для нее и кадры, и фронт работ. Именно поэтому сегодня вокруг центра уже сформировался коллектив пользователей, готовых с момента установки новой системы сразу же начать ее полноценную загрузку. Стоит отметить, что число заинтересованных в сотрудничестве с HIVЦ в области высокопроизводительных вычислений постоянно растет. Что, впрочем, и неудивительно, поскольку профессионализм специалистов

дачи докинга молекул органических соединений в активных центрах белков-мишеней. Такие исследования необходимы при разработке новых лекарственных препаратов, они позволяют значительно упростить и ускорить отбор потенциально эффективных соединений. Основная вычислительная сложность заключается в поиске глобального минимума на сложной энергетической поверхности, содержащей большое количество локальных минимумов. Единственный вариант решения в данном случае - использование