

**ЦКП "Сибирский суперкомпьютерный центр".
Использование высокопроизводительного
вычислительного оборудования в научном и
образовательном процессах**

Зав. Лаб. СМ ИВМиМГ СО РАН, руководитель ЦКП ССКЦ СО РАН,
к.ф.-м.н. Черных И.Г.

НКС-1П (РСК, горячая вода, 2448 ядер, ~182ТФЛОПС Rpeak):

- 27 узлов: 2 CPU Intel Xeon E5-2697v4 [128 GB DDR4, 256 GB DDR4] (864 ядер, 2.6GHz) (1 узел 2x375GB Intel Optane [IMDT])
- 16 узлов: 1 CPU Intel Xeon Phi 7290 KNL [16 GB MCDRAM+96 GB DDR4] (1152 ядер, 1.5-1.7 GHz)
- 1 узел: 2 CPU Intel Xeon Platinum 8268 [192 GB DDR4] (48 ядер, 2.9 GHz)
- 9 узлов: 2 CPU Intel Xeon Gold 6248R [192/384/768 GB DDR4] (384 ядер, 2.9 GHz)
- Intel OmniPath 100 Gb/s
- Intel Lustre – 200 TB + NFS 100TB(ИГил СО РАН)

НКС-30Т (НР, воздушное охлаждение, ~1500 CPU ядер (2.9GHz), ~61000 GPU ядер, 85ТФЛОПС (сегмент с GPU) + 22ТФЛОПС (сегмент CPU)):

- 576 CPU Intel Xeon E5450/E5540(2688 ядер)
- 80 CPU Intel Xeon X5670(480 ядер)
- 120 GPU NVIDIA Tesla M 2090(61440 ядер)
- Infiniband QDR 40 Gb/s
- HP Ibrix – 90 TB

Commercial and open source software:

Engineering simulation software:

ANSYS (CFD+CFX) 14.5

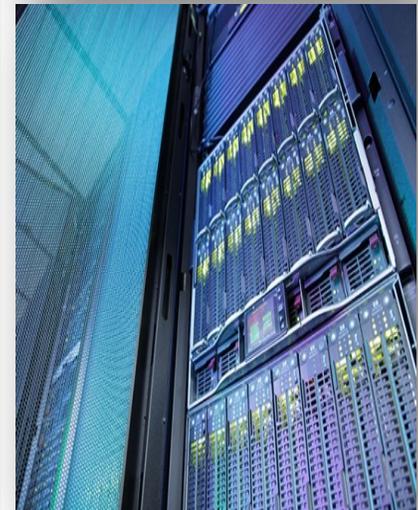
Quantum chemistry:

GAUSSIAN 09, QUANTUM ESPRESSO 6.1,

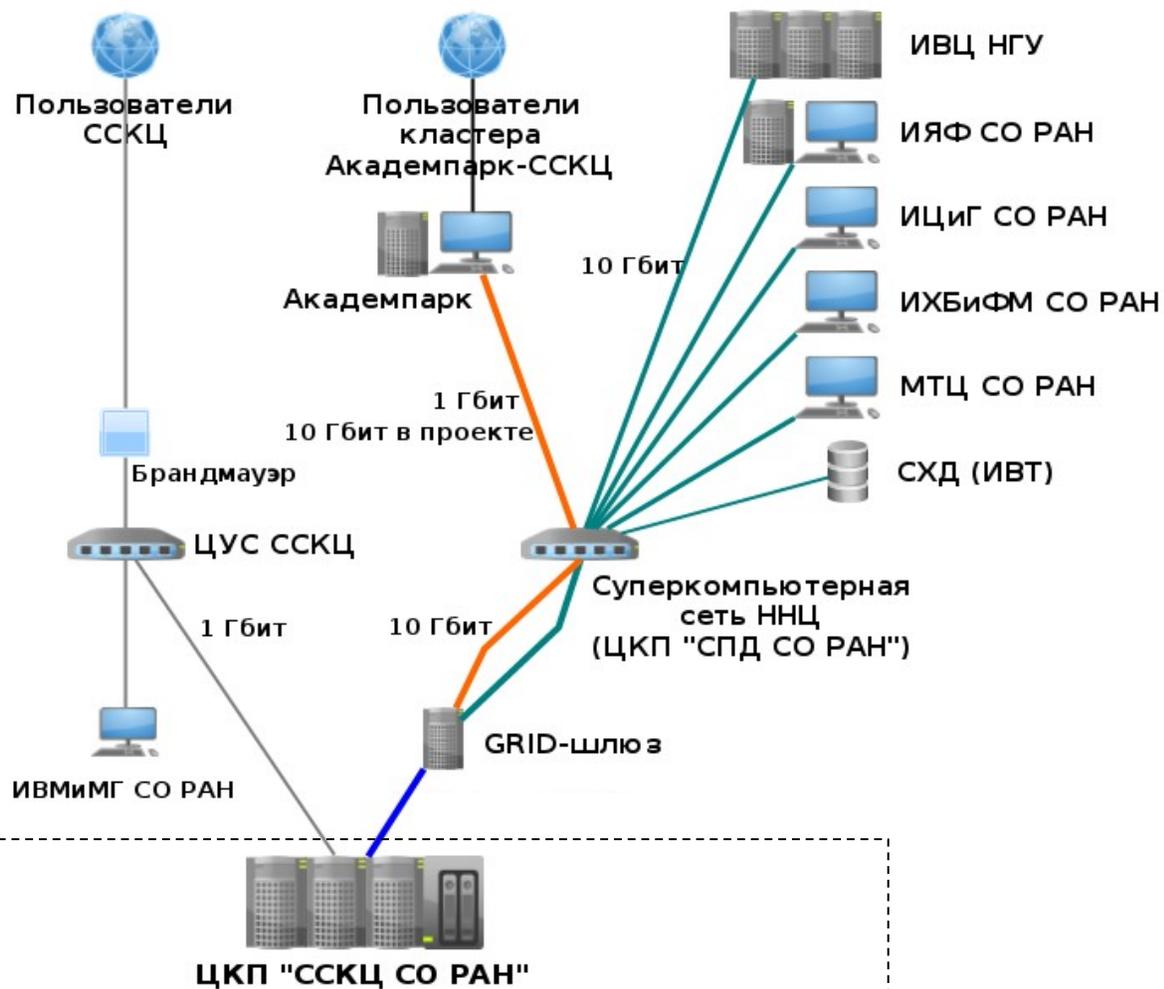
NWCHEM

Molecular dynamics:

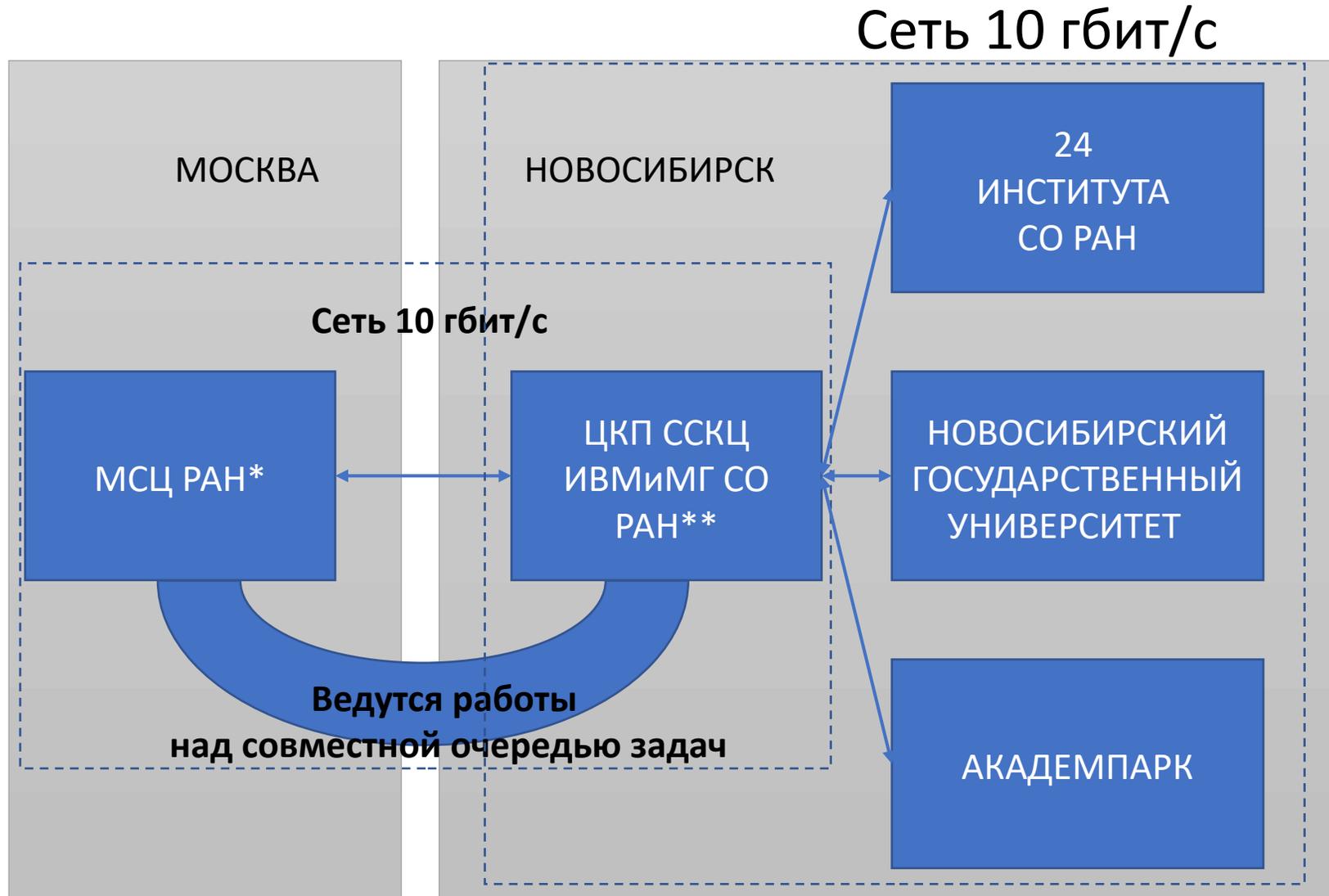
GROMACS 4.6, NAMD 2.12



Новая инсталляция
ИМ СО РАН
7 выч узлов CPU+GPU



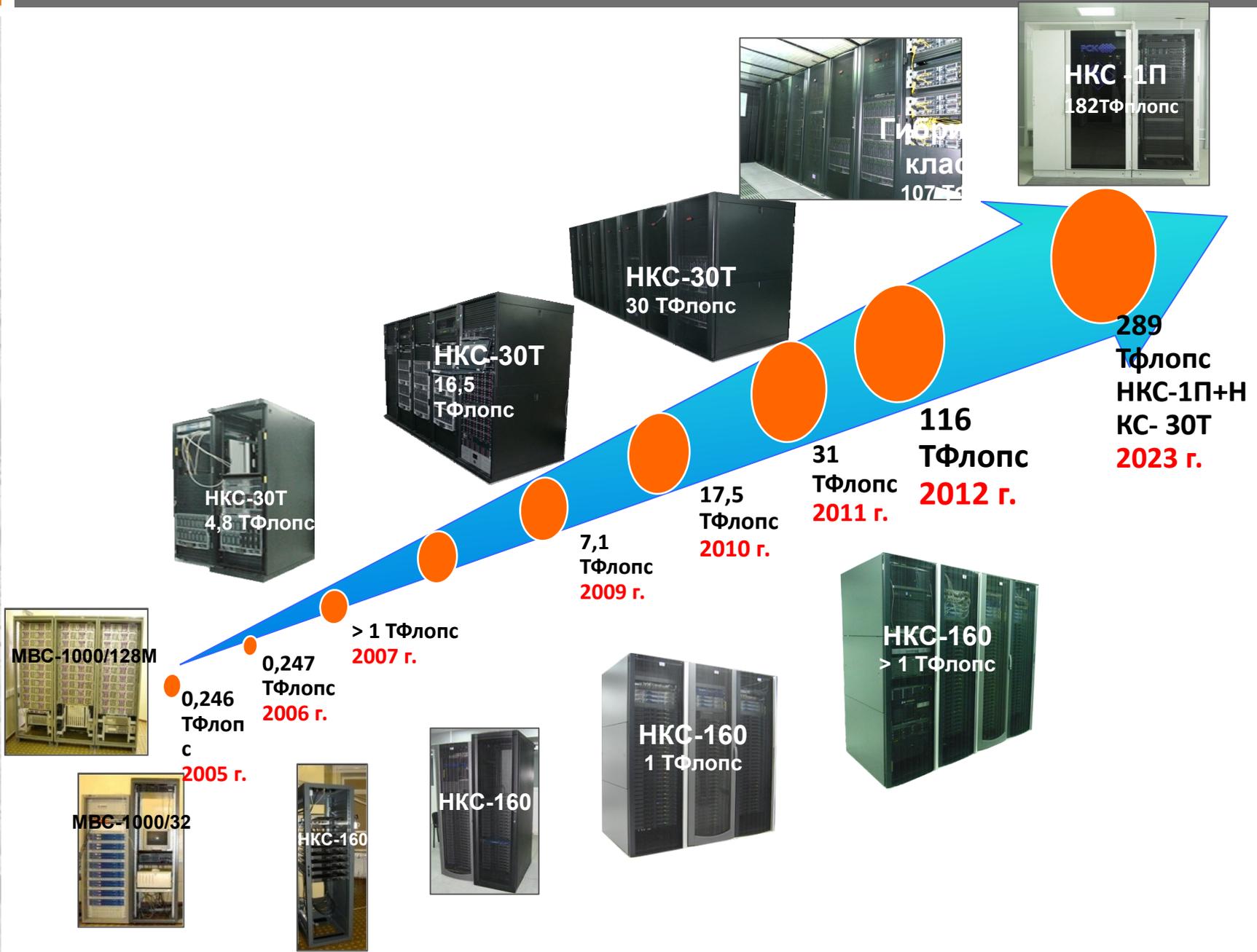
Блок вычислительных узлов ИГиЛ СО РАН
10+ выч узлов CPU+GPU



*МСЦ РАН – Межведомственный Суперкомпьютерный Центр РАН

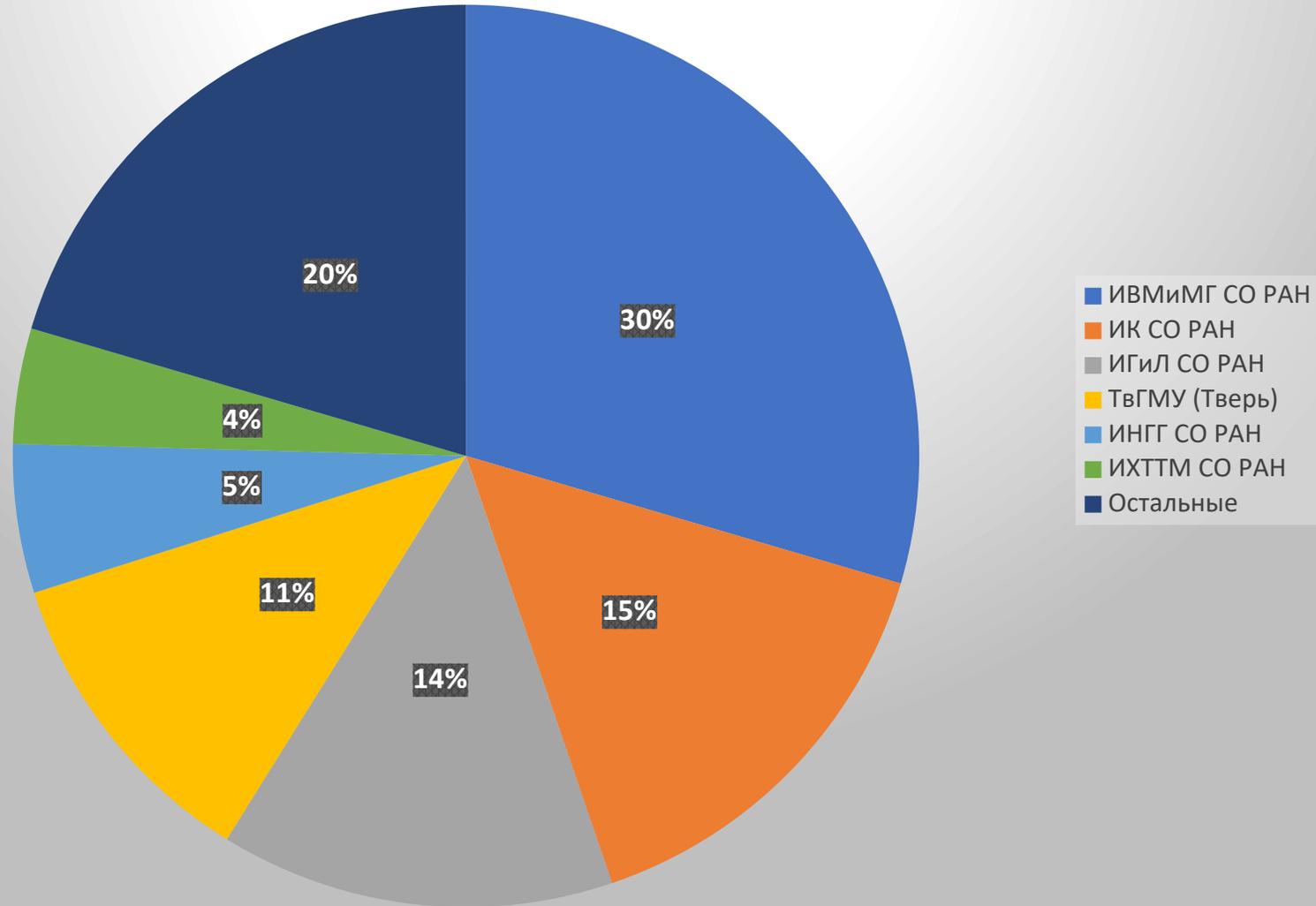
**ЦКП ССКЦ ИВМиМГ СО РАН – Центр Коллективного Пользования Сибирский Суперкомпьютерный Центр СО РАН

ИСТОРИЯ



СИБИРСКИЙ СУПЕРКОМПЬЮТЕРНЫЙ ЦЕНТР ИВМИМГ СО РАН

Доля ресурсов ЦКП (2023)



Квантово-химические расчеты и задачи молекулярной динамики:

- Компьютерное моделирование систем, содержащих биологически активные вещества и материалы биомедицинского назначения;
- Расчёты динамических и структурных характеристик методом молекулярной динамики на основе *ab initio* и классического подходов. Определение коэффициентов диффузии молекул, наночастиц, конъюгатов для возможного прогнозирования адресной трансмембранной доставки препаратов в клетку с помощью среднеквадратичных смещений подвижных частиц;
- Исследование электронных структур материалов

Моделирование погоды, климата и охрана окружающей среды:

- анализ химического состава атмосферы;
- определение очага цунами;
- перенос солнечного излучения;
- анализ изменения климата;
- оценка риска загрязнения окружающей среды от агрегированных источников.

Моделирование разведки, добычи и транспортировки углеводородов:

- сейсморазведка природных ископаемых;
- фильтрационное горение газов;
- моделирование процессов вытеснения нефти в скважину;
- задачи каротажного зондирования;
- импозийное и химическое воздействие на пористую среду нефтяного пласта.

Моделирование авиакосмической техники:

- анализ движения стабилизированной по крену ракеты;
- анализ состояния теплоизолированной обшивки летательного аппарата;
- анализ аэродинамических и акустических характеристик винтов вертолета;
- анализ аэродинамических свойств крыльев самолета;
- задачи обледенения крыла;
- моделирование топливных систем самолета;
- задача спуска космического аппарата в океан;
- теплокомфорт человека в летательных аппаратах.

Новосибирский государственный университет

Механико-математический факультет:

- Кафедра вычислительной математики
- Кафедра вычислительных систем
- Кафедра математических методов геофизики

Факультет информационных технологий:

- Кафедра параллельных вычислений

Новосибирский государственный технический университет

Факультет прикладной математики и информатики:

- Кафедра параллельных вычислительных технологий

Факультет автоматики и вычислительной техники:

- Кафедра сетевых информационных технологий

Спасибо за внимание