

Открытие Центра Обработки Данных РХТУ им. Д.И. Менделеева

Д.А. Сахаров
Проректор по экономике и инновациям

1

Сегодня в РХТУ был открыт Центр Обработки Данных



**MENDELEEV
UNIVERSITY**

DATA CENTER

Железное сердце Университета

Центр обработки данных - это сложная экосистема, помогающая решать задачи по цифровизации и автоматизации научно-исследовательских, учебных- и бизнес- процессов Университета, которая включает в себя целый комплекс IT-решений, высокотехнологичного оборудования и инженерных конструкций.

Департамент информационных технологий РХТУ им. Д.И. Менделеева



ДЕПАРТАМЕНТ
ИНФОРМАЦИОННЫХ
ТЕХНОЛОГИЙ
РХТУ им. Д.И. Менделеева

ДИТ проводит экскурсии ☺ | обращаться на

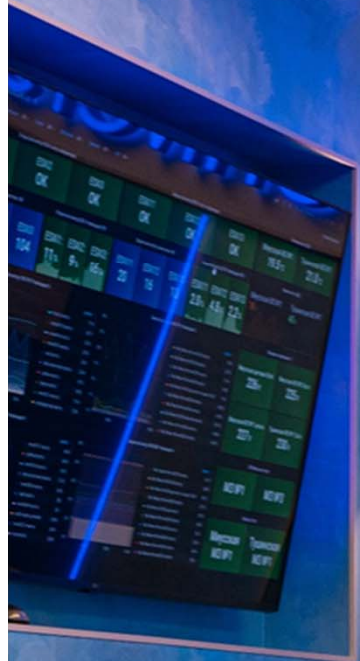
support@muctr.ru

Подробная информация о проекте размещена по адресу

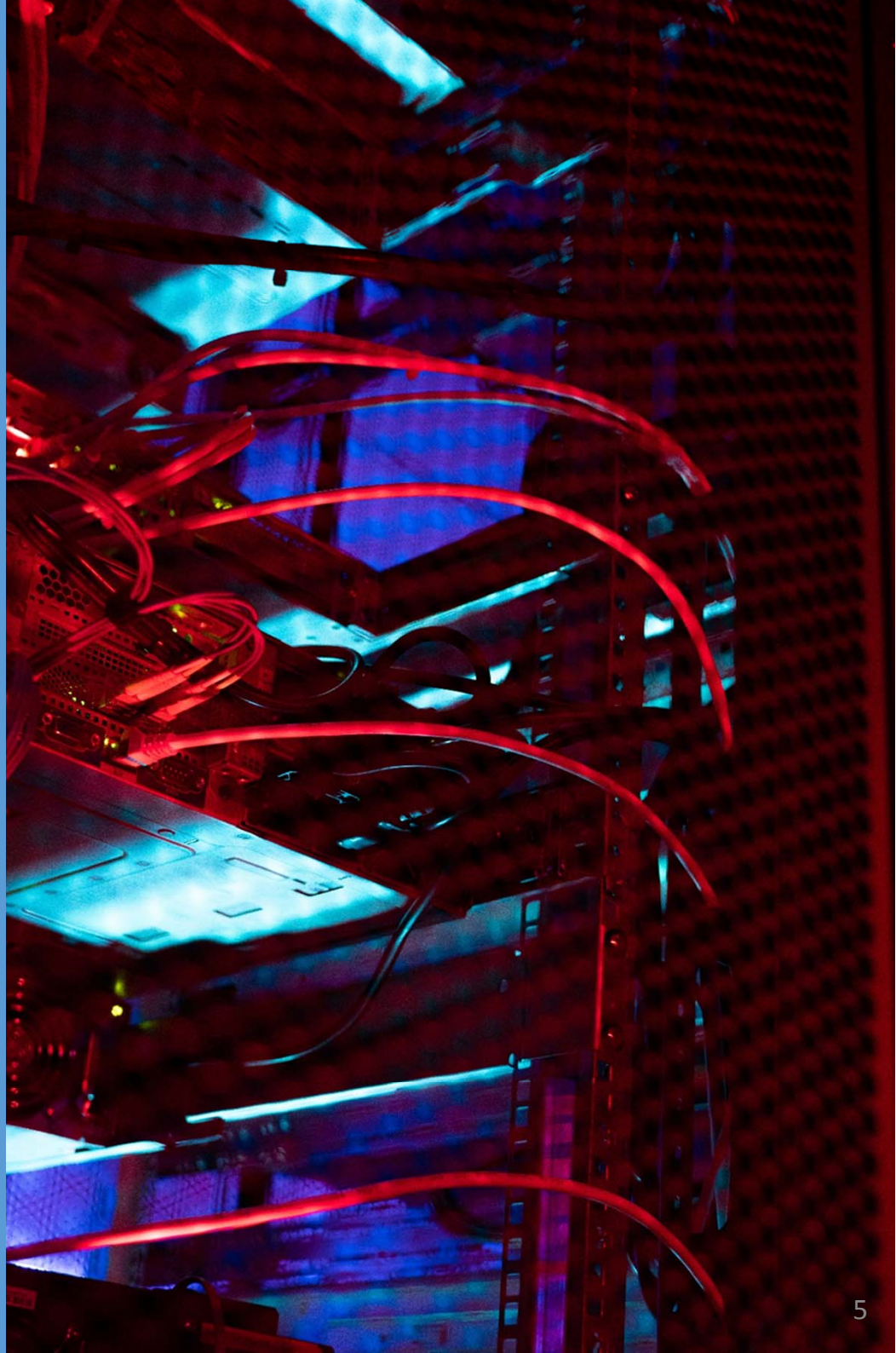
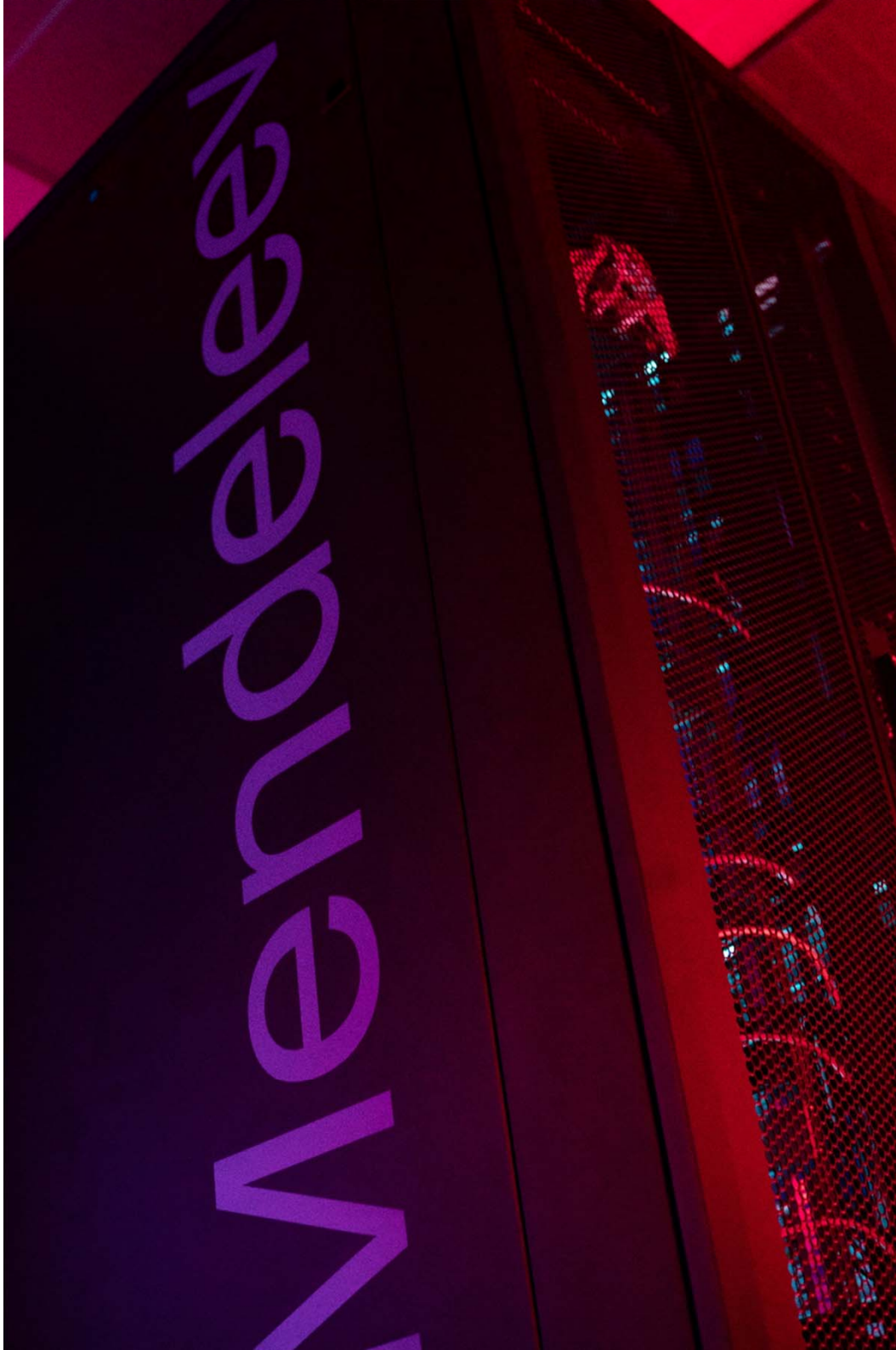
<https://edc.muctr.ru/>


Mendeleev University

Data Center









**Оснащение
«Контура научных исследований»
ЦОД РХТУ им. Д.И. Менделеева
высокопроизводительным
вычислительным кластером (НРС)**

Д.А. Сахаров

Проректор по экономике и инновациям

1 Текущая ситуация и предпосылки



В Университете существует значительный дефицит вычислительных мощностей при постоянном росте потребности в них

Ключевые направления потребления ИТ-инфраструктуры для научных исследований и расчётов:



1. Федеральные и национальные проекты, в которых участвует Университет:
Цифровое материаловедение НИЧ в роли ключевого представителя компетенций в области хим.технологии



2. Внутренние подразделения:
Кафедры Университета
НИЧ
ЦЦТ

приоритет2030^



приоритет2030^

3. Внутренние стратегические и макро- проекты:
СТРАТ.ПРОЕКТ: Разработка, проектирование, сопровождение и строительство химических производств
Передовые инженерные школы
СТРАТ.ПРОЕКТ: Цифровое моделирование материалов и процессов

Кроме того, в современных реалиях 2022 года РХТУ с накопленными компетенциями становится всё более востребованным внутри РФ и стран-партнёров. При этом Университет, как и все организации, сам страдает от санкций, затруднений с поставками импортного высокотехнологичного оборудования и нишевых лицензий ПО и их удорожанием. Вчера стоило меньше, чем сегодня.

2 Для чего нужен НРС и какие дефициты он закрывает:



1. Появляются расчётные мощности для обеспечения науки и исследований, а не для бизнес- и инфраструктурных процессов.
2. Защищённость результатов расчётов и исследований.
4. Существенное снижение стоимости и сроков проведения исследований Университета за счёт перехода лабораторных экспериментов к цифровым.
5. Обучение и ДПО. Появляется возможность предоставлять обучающимся ДПО доступ к виртуальной лаборатории (виртуальные рабочие столы и вычислительные мощности с профильным программным обеспечением).
6. Открывается окно возможностей по расширению деятельности в области цифрового материаловедения.
7. Позволит создавать, масштабировать и тиражировать модели предсказывающие свойства материалов, мультимасштабные модели процессов для зелёной энергетики, композитной отрасли и новой медицины.
8. При внесении соответствующих изменений в ОКВЭДы позволит Университету стать сервис-провайдером (виртуальным ЦКП) и получать прибыль за счёт продаж IaaS + DaaS для внешних Заказчиков, как для проведения собственных исследований и проектирования, так и в рамках обучения.
9. Экономия средств на аренде облачных решений.
10. Один из ключевых компонентов для перехода к состоянию Центр компетенций.

3

Описание технического решения и архитектуры



- Для обеспечения гибкости при расчётах планируется использование универсальной архитектуры кластера, в которой часть вычислительных узлов будет на процессорах Intel Xeon, а часть - на процессорах AMD Epyc, между ними будет организована высокоскоростная интеркоммутиация.
- Первая и вторая конфигурация вычислительных узлов будут оснащены графическими процессорами - NVIDIA GRID последнего поколения, способными охватить широкий спектр приложений для data science, визуализации и высокопроизводительных вычислений (HPC)
- Кластер будет исполнен только с использованием Hi-End оборудования уровня Mission-critical, которое поддерживает множество уровней отказоустойчивости, ориентированных на защиту данных и непрерывное обеспечение надежности
- На кластер будет установлено программное обеспечение для виртуализации VMware и операционные системы Windows Server Datacenter, используемые в Enterprise-организациях, для развёртывания динамических виртуальных сред, под решение любых задач. Данное решение позволяет использовать каждый элемент инфраструктуры наиболее эффективным образом (без простоев, с постоянным перераспределением под наиболее приоритетные задачи в реальном времени)
- Независимые производители программного обеспечения (ISV), совместимые с предлагаемыми решениями:



4 Что делаем в рамках ландшафтного проекта



Задачи внутри проекта

1. Создаём полномасштабный, единый центр с полным спектром ПО для создания материалов и изделий, разработки технологий любого уровня сложности.
2. Развёртываем автономный вычислительный GRID-кластер с возможностью динамического выделения мощностей под задачи научно-исследовательских подразделений и кафедр.
3. Развёртываем системы моделирования поведения «цифровых двойников» материалов в виртуальных внешних средах с различными комбинированными профилями воздействий и оценки соответствия заданным требованиям.
4. Организуем возможность ведения параллельных вычислений для MD и CAE (Biovia, Simulia, и т.п.)
5. Развиваем компетенции и функции по направлениям востребованным в гос- и бизнес- секторе:
 - моделирование свойств, структуры, технологии получения новых материалов;
 - определение необходимого уровня свойств материалов для новых изделий;
 - хранение данных о материалах, технологиях и изделиях;
 - проектирование с глубоким расчётом ТСО.

Внепроектные, сопряжённые задачи

1. Инвентаризация того что есть
2. Выстраивание механизмов совместной работы подразделений
3. Создание механизмов управление ресурсами
4. Формулировка отсутствующих научных компетенций
5. Проведение ряда научно-исследовательских работ для добора научных компетенций
 - НИРы по созданию моделей предсказывающих свойства материалов
 - НИРы по связке моделей микро- и макромасштабов

5 Дополнительный слайд | Матрица участия структурных подразделений в различных уровнях моделирования



Матрица участия структурных подразделений в различных уровнях моделирования

№П	Уровни моделирования	КХТП	ИКТ	ХФИ	КХТК	НПМ*	Квантовой химии	ЦЦТ
5	Технология	x	x	x	x	x	x	x
4	Макроуровень	V	V	V	V	V	x	V
3	Микроуровень	x	V	V	x	V	x	x
2	Нанометровый	x	V	V	x	V	x	x
1	Атомный	x	V	x	x	x	V	x

часы ↑

мсек ↓

Также развиты компетенции по параллельным вычислениям



Спасибо за внимание