ИПМ им.М.В.Келдыша РАН

Абрау-2017 • Труды конференции

С.В. Поляков, В.О. Подрыга,
Д.В. Пузырьков

**Облачный сервис для решения
перспективных задач нанотехнологии**

Рекомендуемая форма библиографической ссылки

Поляков С.В., Подрыга В.О., Пузырьков Д.В. Облачный сервис для решения перспективных задач нанотехнологии // Научный сервис в сети Интернет: труды XIX Всероссийской научной конференции (18-23 сентября 2017 г., г. Новороссийск). — М.: ИПМ им. М.В.Келдыша, 2017. — С. 379-388. — URL: <http://keldysh.ru/abrau/2017/54.pdf> doi:[10.20948/abrau-2017-54](https://doi.org/10.20948/abrau-2017-54)

Размещена также [презентация к докладу](#)

Облачный сервис для решения перспективных задач нанотехнологии

С.В. Поляков¹, В.О. Подрыга¹, Д.В. Пузырьков¹

1 ИПМ им. М.В. Келдыша РАН

Аннотация. В работе представлена проблема создания облачного сервиса, предназначенного для решения перспективных задач нанотехнологии на суперкомпьютерных системах. Мотивацией к созданию такого сервиса послужила необходимость интеграции идей, знаний и вычислительных технологий, относящихся к указанной прикладной проблеме, а также необходимость привлечения специалистов к решению задач данного класса. Промежуточным итогом работы стал прототип облачной среды, реализованный в виде сервиса KIAM Multilogin и прикладного программного обеспечения доступного из виртуальных машин пользователей. Первыми приложениями сервиса стали программные комплексы GIMM_NANO и Flow_and_Particles, предназначенные для решения актуальных задач нанoeлектроники, лазерной нанотехнологии, многомасштабных задач прикладной газовой динамики.

Ключевые слова: облачный сервис, виртуализация, суперкомпьютерное моделирование в задачах нанотехнологии

Введение

Настоящая работа посвящена развитию прикладных облачных сервисов, предназначенных для решения сложных задач нанотехнологии компьютерными методами. Фундаментальность и актуальность общей проблемы состоят в том, что в настоящее время в связи с внедрением нанотехнологий во многих отраслях промышленности существует острая необходимость объединения различных математических подходов, информационных и вычислительных ресурсов в единый аппарат компьютерного и суперкомпьютерного моделирования. Наиболее удачным способом такого объединения является создание соответствующих облачных сред и сервисов, в которых каждый пользователь сможет иметь доступ ко всем возможным информационным материалам, моделирующим программам, вычислительным ресурсам и промышленным САПР.

Конкретная задача состоит в создании облачного сервиса для многомасштабного моделирования с помощью гетерогенных кластеров и суперкомпьютеров нелинейных процессов в полидисперсных многокомпонентных средах, использующихся при реализации промышленных нанотехнологий. Для решения задачи в предыдущие два года была разработана

и реализована облачная платформа KIAM Multilogin, позволяющая получить доступ к создаваемой среде моделирования. Архитектура платформы и отдельные компоненты достаточно подробно освещались в работах [1-3]. Прикладная часть сервиса была представлена параллельной программой Flow_and_Particles, предназначенной для многомасштабного молекулярного моделирования процессов взаимодействия частиц газа со стенками микроканалов технических систем. Однако в связи с расширением данного приложения до масштабов программного комплекса и наличия у разработчиков других программных средств, в том числе, программного комплекса GIMM_NANO [4], появилась проблема интеграции подобных программ в большую систему и/или среду.

Проблемы и задачи

В данной работе была поставлена задача создания именно облачного прикладного сервиса. Мотивацией для такого решения стали общие тенденции развития программных средств массового использования. В рамках облачных технологий при этом сразу решается множество проблем: иерархическая аутентификация пользователей, построение общего защищенного информационного пространства, работа пользователей с персональными рабочими столами виртуальных машин, миграция виртуальных машин в постоянно расширяющемся и модифицирующемся поле физических вычислителей, оптимальное управление вычислительными ресурсами, удобство разработки конкретных приложений, безопасное гарантированное хранение критической информации, совместная разработка ПО, обучение работе с сервисами и многое другое.

Конкретной задачей стала, прежде всего, разработка общей концепции прикладной части среды, связанной с суперкомпьютерным моделированием многомасштабных нелинейных процессов в реальных технических микросистемах. Сложность подобного рода задач связана с тем, что используемые математические модели содержат разнородные описания рассматриваемых физических процессов, относящиеся к различным масштабным уровням. Эти разнородность и разномасштабность порождают целый ряд проблем, которые приходится решать одновременно.

Поясним сказанное на конкретном примере. Для этого рассмотрим проблему расчета течения газа по системе металлических трубопроводов реальной трехмерной геометрии. В случае макромасштабной задачи (когда размеры моделируемой системы много больше средней длины свободного пробега молекул, то есть число Кнудсена много меньше 1) и простой декартовой геометрии описание течения потребует использование одной из моделей механики сплошной среды (например, системы уравнений Навье-Стокса для описания течения газа, а также уравнения теплопроводности для описания теплообмена газа со стенками канала). Решение итоговой начально-краевой задачи можно осуществить либо с помощью готового ПО (например, с

помощью пакетов ANSYS CFX, StarCD, OpenFOAM, FlowVision и др.), либо разработать собственный солвер.

По существу дела в случае простой геометрии необходимо воспользоваться сеточным методом конечных разностей/объемов (МКР/МКО) или методом конечных элементов (МКЭ) в совокупности с методом маркеров и ячеек на подходящей структурированной сетке. Параллельная реализация получающегося при этом численного алгоритма обычно не представляет особой сложности. Однако при этом понадобится хорошая библиотека параллельных алгоритмов решения систем линейных и/или нелинейных алгебраических уравнений (например, Aztec, PETSc и др.). Некоторую сложность может представить использование гибридной вычислительной техники, например, систем с центральными и графическими процессорами. Однако и здесь уже имеется множество инструментов от NVidia, Intel и других разработчиков.

В случае необходимости учета криволинейной геометрии системы приходится использовать неструктурированные сетки и специализированные варианты МКО или МКЭ. Если геометрия задачи достаточно сложна, а степень анизотропии расчетной области и сетки высока, то для высокоточного параллельного расчета потребуется параллельная генерация сетки, оптимальное разбиение ее по вычислителям, специальная схема сохранения контрольных точек расчета и результатов вычислений, эффективные параллельные алгоритмы решения алгебраических задач с сингулярными матрицами. В этой ситуации широко распространенное ПО может не подойти либо по причине его высокой стоимости, либо по причине отсутствия надежных алгоритмов решения задачи на всех этапах (задание и/или импорт и анализ геометрии расчетной области, построение и разбиение сетки или множества сеток, формирование набора алгебраических задач, решение алгебраических задач, сохранение, обработка и визуализация результатов).

Если необходимо учесть более сложную физику процесса, то к проблемам обработки геометрических данных добавляются проблема формирования реалистичной математической модели. В рассматриваемом случае необходимо учесть неидеальность газа и стенок канала, взаимное влияние газовой и твердотельной сред на границах раздела. В результате приходится модифицировать модель и методы ее численной реализации, вводя материальные коэффициенты среды, в том числе, реальные уравнения состояния для газа, зависимости коэффициентов вязкости (сдвиговой и объемной), теплопроводности, диффузии от температуры и давления (как для газа, так и для материала стенок канала), специальные алгебраические модели пограничного слоя.

Указанное усложнение математической модели невозможно без знаний свойств веществ в широком диапазоне параметров. Эта информация не всегда имеется в полном объеме даже для хорошо исследованных материалов. Для новых композитных материалов она практически отсутствует. Поэтому для

выполнения основного исследования приходится проводить дополнительные исследования по свойствам используемых в модели газовой и твердой сред. В настоящий момент помимо натуральных экспериментов имеется три основных подхода для получения информации о свойствах вещества: квантово-механический, статистический и гибридный.

Первый подход связан с методами *ab initio* (из первых принципов), позволяющими получить детальную информацию о веществах на молекулярном и субмолекулярном уровнях путем решения соответствующих квантово-механических задач. Однако такой подход является наиболее вычислительно емким и не позволяет в реальные сроки получить информацию о больших системах частиц (в современной ситуации размеры изучаемых квантово-механических систем составляют порядка нескольких тысяч структурных единиц – молекул, атомов, электронов, протонов, нейтронов и т.д.). Поэтому приходится упрощать соответствующие модели, переходя к гибридным схемам.

В рамках статистического подхода наоборот возможно рассмотрение очень больших систем (в настоящее время количество случайных величин может достигать 15-20 десятичных порядков), однако точность получаемых данных в больших системах сначала возрастает с ростом числа испытаний, но затем резко убывает вследствие нарастания паразитных шумов. В результате и в рамках данного подхода приходится искать гибридные решения.

Среди наиболее эффективных гибридных подходов выделим методы решения задач на основе кинетического уравнения Больцмана или Фокера-Планка в связке со статистическими методами Монте-Карло, а также методы классической и квантовой молекулярной динамики. Эти подходы удачно комбинируют модели из первых принципов со статистическими и вариационными вычислениями умеренного объема и позволяют с хорошей точностью определять материальные свойства различных сред и материалов. На основе этих подходов обычно формируются базы данных по свойствам вещества. В частности, широко известны база данных NIST (США), а также отечественная ЭПИДИФ и др. Однако использование подобных баз данных возможно лишь в ограниченном диапазоне параметров и в режиме *off-line*, когда пользователь вынужден вручную собирать необходимые ему данные. Поэтому исследователям приходится самостоятельно создавать подобные базы данных с использованием различных пакетов для квантово-механических, статистических и молекулярно-динамических расчетов. Среди них отметим *AB INITIO*, *GAMESS*, *GAUSSIAN*, *VASP*, *HyperChem*, *LAMMPS*, *GROMACS* и многие другие.

В случае мезо- или микромасштабной задачи (когда в отдельных зонах течения число Кнудсена приближается или даже превосходит 1) дополнительной проблемой является нарушение гипотезы сплошности среды. В этой ситуации приходится использовать смешанные модели, объединяющие описания механики сплошной среды и альтернативные описания (мезо- и

микроскопические). На программном уровне это означает использование в общем расчете алгоритмов различного рода, реализованных в рамках различных библиотек и/или пакетов. Единственной корректной возможностью таких вычислений является метод расщепления по физическим процессам. В рамках этого метода возможно сопряжение практически любых вычислительных схем (необходимо только выполнение условий устойчивости общего алгоритма). В данной работе именно эта концепция заложена в основу разрабатываемого облачного сервиса.

Архитектура облачного сервиса и сценарии работы пользователей

Рассмотрим кратко архитектуру разрабатываемого прикладного облачного сервиса (см. рис. 1). Она предполагает наличие скрытой от пользователей распределенной вычислительной платформы и единой схемы доступа к ней через Интернет/Интранет с помощью специализированного web-портала. При этом предполагаются стандартные механизмы аутентификации пользователей (логин – пароль, логин – открытый ключ и др.) и их ролевая дифференциация (начинающий пользователь, пользователь-исследователь, разработчик, администратор и т.д.). Внутри данной облачной архитектуры помимо серверов доступа, имеются информационный портал, портал обучения, исследовательский портал, портал разработчиков, а также вычислительные ресурсы в виде серверов баз данных и рабочих вычислителей (кластеров и суперкомпьютеров).

Рис. 1. Общая логическая схема облачного сервиса

Серверы доступа образуют децентрализованную систему, в которой отдельные элементы могут быть разнесены территориально, но синхронизированы по определенному принципу. Серверы доступа содержат помимо сервиса аутентификации платформу для запуска и функционирования виртуальных машин (ВМ) пользователей. Виртуальные машины пользователей хранятся в одной или нескольких базах данных (БДВМ). Они могут быть запущены сервисом в любое время и на любом сервере доступа, но только в единственном экземпляре. Одновременный запуск виртуальной машины пользователя на нескольких серверах доступа исключается. При этом возможна миграция виртуальной машины пользователя на менее загруженный сервер доступа, осуществляемая с помощью сохранения всех данных ВМ и холодного рестарта. Также каждый пользователь может иметь несколько вариантов ВМ, различаемых по типу ОС и/или целевому назначению, например по ролевой функции (пользователь, разработчик, администратор), а также несколько сохраненных состояний конкретной ВМ (snapshots).

Сценарий работы начинающего пользователя стартует с процедуры его регистрации на серверах доступа в роли начинающего пользователя, подготовки одной или нескольких виртуальных машин (обычно это выбор ВМ из репозитория в соответствии с конкретными предпочтениями пользователя), изучения возможностей облачной среды на информационном портале, обучения работе в рамках конкретных проектов. После прохождения первичного курса обучения пользователь получает статус пользователя-исследователя и/или пользователя-разработчика и может приступить к работе в рамках одного или нескольких проектов. При этом у него имеется возможность инициировать новый проект.

Сценарий работы пользователя-исследователя связан с подготовкой и проведением длительных циклов расчетов в рамках одного или нескольких проектов. При этом задействуются все основные прикладные сервисы облачной среды. Применительно к задачам вычислительной гидродинамики необходимо использовать следующие коммерческие или открытые программные средства: CAD системы для задания геометрии (например, SolidWorks, ParaSolid и др.), генераторы сеток (например, GAMBIT, TetGen, Ani3D и др.), программы разбиения сеток по вычислителям (например, METIS, ParMETIS, Jostle и др.), конкретные солверы из набора доступных пакетов (например, ANSYS CFX, StarCD, Comsol, OpenFOAM, FemLab и др.), последовательные и параллельные визуализаторы получаемых промежуточных и результирующих данных (например, TecPlot, ParaView, MolDraw, ChemDraw и др.), а также программы пред- и постобработки данных на всех этапах расчетов. Последние необходимы для объединения отдельных этапов вычислений по данным.

Сценарий работы пользователя-разработчика ПО связан с использованием специализированных виртуальных машин (оснащенных необходимыми лицензионными и/или свободно распространяемыми средствами программирования), установкой готовых пакетов программ на вычислители, а

также с разработкой и тестированием новых программ и сервисов в различных ОС и окружениях.

Облачный сервис как средство интеграции технологий

Описанная выше архитектура сервиса и сценарии работы пользователей присущи многим облачным системам. Однако в создаваемом варианте сервиса такое стандартное решение является лишь частью общей реализации. Более сложными и актуальными частями в данном случае являются системы управления информационными, образовательными и вычислительными ресурсами, а также система управления проектами.

К настоящему моменту в развиваемом сервисе в полномасштабном варианте имеется лишь система управления вычислительными ресурсами и расчетными заданиями пользователей. Она носит название KIAM Job_Control и частично освещалась в работе [2]. На данной стадии разработки облачного проекта она позволяет пользователям проводить масштабные вычисления на основе отдельных параллельных программ из пакетов GIMM_NANO и Flow_and_Particles, а также сохранять результаты в соответствующих базах данных, проводить их постобработку и визуализацию. Новизна решений в данной компоненте сервиса связана с реализацией механизма многомашинных вычислений (когда один и тот же длительный расчет может мигрировать с одного вычислительного кластера на другой), а также с реализацией механизма интерактивной работы с запущенным параллельным или распределенным приложением (для чего создан специальный файловый интерфейс взаимодействия, включающий язык команд).

Системы управления информационными и образовательными ресурсами находятся в стадии разработки и в итоге будут представлять собой распределенную базу знаний по всем аспектам прикладного сервиса: от технологий его реализации до технологий моделирования, реализованных в рамках доступных пользователям пакетов прикладных программ и отдельных приложений. Конкретное решение в данном направлении предполагается реализовать на основе Википедии.

Система управления проектами также пока не реализована, хотя подобные системы широко распространены в бизнесе и в зарубежных государственных учреждениях. По-видимому, здесь сказывается сильная недетерминированность процессов научных исследований. Поэтому в рамках данного направления предполагается начать с автоматизации процессов разработки приложений. Для этого предполагается создать единое прикладное API разработчика, основанное на web-технологиях и интегрированное с системой контроля версий (по аналогии с GitHub и Git).

Для реализации задачи создания прикладной части предлагаемого сервиса имеется определенный задел, полученный при создании пакета GIMM_NANO. В рамках этого проекта была определена архитектура и отдельные элементы конструктора параллельных гибридных приложений в области решения задач

нанотехнологии на основе готовых библиотечных функций. В частности, был разработан программный интерфейс для языков C++, C и Fortran, позволяющий собрать гибридное MPI-приложение из некоторых готовых компонентов и вновь разрабатываемой расчетной части, определяющей новизну и целевую функцию кода.

К готовым компонентам приложения в рамках пакета GIMM_NANO относятся:

- функции ввода-вывода (как последовательного, так и распределенного) текстовых и двоичных данных, относящиеся к описанию геометрии расчетной области, параметрам сеток, физическим параметрам задачи, параметрам численной методики, параметрам параллельных вычислений, полям рассчитанных данных и т.д.,

- параллельные генераторы сеток определенного типа (декартовых, треугольных, тетраэдральных, гибридных, блочных и т.д.),

- параллельные решатели систем линейных и нелинейных уравнений, поддерживающие вычисления на центральных процессорах (CPU), векторных процессорах (VPU) и графических ускорителях (GPU).

Разработка приложения в целом проводится в соответствии с концепцией гибридной параллельной платформы [5], отличительная особенность которой состоит в стремлении максимального учета особенностей решаемой задачи и архитектуры того или иного вычислителя при минимальных отличиях кода от реализации на CPU. Достижение таких параметров реализуется за счет написания специальных функций и макросов, учитывающих конкретные параметры алгоритмов и возможностей вычислителей. В основном успех или неуспех такой реализации зависит от возможностей векторизации вычислений и использования блочной обработки слабо структурированных данных.

При интеграции решений пакета GIMM_NANO, основанного на моделях механики сплошной среды, с приложениями молекулярной динамики из пакета Flow_and_Particles, удалось реализовать многомасштабные двухуровневые параллельные алгоритмы и соответствующие программы, позволяющие решать новые классы задач технической газовой динамики характерные для современной нанотехнологии. Новизна решения связана с тем, что в рамках единого расчета производятся вычисления как по моделям механики сплошной среды, так и в рамках различных вариантов метода частиц. Реализация решения была выполнена на основе метода расщепления по физическим процессам, происходящим на разных масштабных уровнях. Сложность сопряжения расчетов на разных масштабных уровнях состоит в том, что их результаты формулируются в терминах различных понятий и функций. На макроуровне мы имеем дело с пространственными распределениями непрерывных величин (например, плотности, температуры, давления, вектора скорости потока и т.д.). На микроуровне рассматриваются отдельные частицы, в том числе молекулы, атомы и/или их электронные оболочки. Осуществить правильный прямой и обратный переход между этими системами оказалось трудной задачей.

Проблема сопряжения расчетов на разных масштабных уровнях была решена с помощью нескольких подтверждающихся на практике гипотез. Первая из них состоит в том, что в любом микрообъеме газа с линейным размером порядка длины свободного пробега молекул достаточно быстро формируется локально-максвелловское распределение модуля скорости частиц. При этом среднее направление векторов скоростей частиц соответствует суммарному импульсу микрообъема, а пространственное распределение частиц близко к равномерному. Данная гипотеза позволяет корректно перейти от макроописания газовой среды к описанию системы частиц.

Вторая гипотеза состоит в том, что поскольку в микрообъеме масштаб времени связан в основном с временами взаимодействия отдельных частиц между собой, то на временных масштабах динамики сплошной среды выделенный микрообъем успевает достичь локального термодинамического равновесия. Данная гипотеза позволяет осуществить переход от описания системы частиц к средним макропараметрам микрообъема в целом.

Пример решения одной практической многомасштабной задачи об истечении струи азота в вакуум представлен в [6]. В его рамках удалось продемонстрировать как корректность решения прикладной задачи, так и эффективность разработанной облачной технологии. При этом важно подчеркнуть, что быстрая разработка соответствующего приложения была выполнена за счет использования технологий, реализованных в пакете GIMM_NANO. Однако выполнение самих длительных и вычислительно очень емких расчетов и анализа получаемых в них промежуточных и окончательных результатов стало возможно лишь с использованием системы управления расчетами KIAM Job_Control [1, 2] и приложения распределенной визуализации Flow_and_Particles_View [1].

Заключение

В работе представлен прототип облачного сервиса, предназначенный для решения перспективных задач нанотехнологии на суперкомпьютерных системах. Прототип реализован в виде сервиса доступа KIAM Multilogin и прикладного программного обеспечения доступного из виртуальных машин пользователей. Первым опытом интеграции параллельных приложений в рамках создаваемого сервиса стали отдельные программы из пакетов GIMM_NANO и Flow_and_Particles, предназначенные для решения сложных задач наноэлектроники, лазерной нанотехнологии, а также многомасштабных задач технической газовой динамики. Дальнейшее развитие сервиса состоит в совершенствовании систем управления информационными, образовательными и вычислительными ресурсами, добавлении новых пакетов и приложений, создании гибкой системы управления проектами.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проекты №№ 15-29-07090-офи_м, 15-07-06082-а, 16-07-00519-а).

Литература

1. Поляков С.В., Выродов А.В., Пузырьков Д.В., Якобовский М.В. Облачный сервис для решения многомасштабных задач нанотехнологии на суперкомпьютерных системах // Труды Института системного программирования РАН. — 2015. — Т. 27, вып. 6. — С. 409-420. doi: 10.15514/ISPRAS-2015-27(6)-26.
2. Пузырьков Д.В., Подрыга В.О., Поляков С.В., Якобовский М.В. Среда управления задачами KIAM_JOB_CONTROL и ее применение в облачных и GRID вычислениях (Puzyrkov D., Podryga V., Polyakov S., Iakobovskii M. KIAM_JOB_CONTROL task management environment and its application to cloud and GRID computing) // Selected Papers of the 7th International Conference Distributed Computing and Grid-technologies in Science and Education (GRID 2016), ed. by V. Korenkov, T. Zaikina, F. Nechaevskiy, July 4-9, 2016, Dubna, Russia. — CEUR Workshop Proceedings. — 2017. — Vol-1787. — P. 416-422. URL: <http://ceur-ws.org/Vol-1787/>
3. Якобовский М.В., Бондаренко А.А., Выродов А.В., Григорьев С.К., Корнилина М.А., Плотников А.И., Поляков С.В., Попов И.В., Пузырьков Д.В., Суков С.А. Облачный сервис для решения многомасштабных задач нанотехнологии на кластерах и суперкомпьютерах // Известия ЮФУ. Технические науки. — 2016. — № 12. — С. 103-114. doi: 10.18522/2311-3103-2016-12-103114
4. Бондаренко А.А., Поляков С.В., Якобовский М.В., Косолапов О.А., Кононов Э.М. Программный комплекс GIMM_NANO // Международная суперкомпьютерная конференция "Научный сервис в сети Интернет: все грани параллелизма", 23 - 28 сентября 2013 г., г. Новороссийск, CD-proceedings, 1-5 pp.
5. Поляков С.В., Карамзин Ю.Н., Косолапов О.А., Кудряшова Т.А., Суков С.А. Гибридная суперкомпьютерная платформа и разработка приложений для решения задач механики сплошной среды сеточными методами // Известия ЮФУ. Технические науки. — 2012. — № 6 (131). — С. 105-115.
6. Подрыга В.О., Поляков С.В. Многомасштабное моделирование истечения газовой струи в вакуум // Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша. — 2016. — № 81. — 52 с.