

# СУПЕРКОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ В НАНОИНДУСТРИИ

А.В. Мурашов

С развитием отрасли нанотехнологий использование высокопроизводительных вычислений в России приобретает все большее значение для научно-исследовательских и опытно-конструкторских работ. На западе, где опыт применения вычислений в работах исчисляется десятилетиями, использование возможностей суперкомпьютеров в области нанотехнологий является широко применяемой практикой при разработке новых перспективных материалов и устройств. Отставание России как в самой области нанотехнологий, так и в практике использования в работе высокопроизводительных вычислений, в частности, оценивается аналитиками в 10-12 лет. Однако на данный момент, хотя эта отрасль в России находится в стадии становления, научно-исследовательские коллективы уже применяют методы компьютерного моделирования в работе.

Развитие вычислительной техники в совокупности с совершенствованием математических методов, углублением естественнонаучных, прикладных и др. знаний предопределили развитие такого высокотехнологичного направления как математическое (компьютерное) моделирование механических, физико-химических, биологических, молекулярных, технологических и др. процессов.

Использование нанотехнологий в производстве определяется удовлетворением всё более возрастающих требований к техническим характеристикам изделий, их экономичности, техногенной и экологической безопасности и другим характеристикам возможно только на основе использования наиболее полных физических и математических моделей (систем нелинейных уравнений). Решение этих уравнений в полной постановке за адекватное время возможно только на основе методов численного моделирования и только с применением высокопроизводительных многопроцессорных вычислительных систем.

Компьютерные технологии применяются на всех стадиях процесса разработки и производства изделия. Получаемая при этом информация о характере и физических особенностях протекающих процессов даёт возможность анализировать причины того или иного поведения характеристик. Это в свою очередь позволяет осознано выбирать направление поиска технических решений и оптимальных значений определяющих параметров.

Существующие примеры использования суперкомпьютеров в исследованиях и нанотехнологических разработках доказывают, что их применение позволяет повысить качество работ и материалов, сократить сроки выполнения исследовательских работ, что в конечном итоге позволит ускорить выход на рынок конкурентоспособной продукции.

Использование суперкомпьютеров также позволяет получать достоверные данные исследований в результате сравнительного анализа величин, полученных в ходе расчетов, и в эксперименте. Таким образом, снижаются затраты на серии дорогостоящих экспериментальных опытов и сокращаются сроки проведения исследовательских проектов. Целый ряд ученых в России постоянно применяет в работе методы компьютерного моделирования в области исследований роста, свойств и структуры материалов на наноуровне около 200 проектов.

С целью определения потребностей российских ученых и промышленности в использовании суперкомпьютеров в области исследования объектов как нано-уровня, так и промышленных изделий было проведено исследование на соответствующую тему в рамках конкурса **ОАО «Российская корпорация нанотехнологий» (РОСНАНО)**.

В ходе конкурса были выявлены следующие факторы, затрудняющие реализацию потенциала рынка суперкомпьютерных расчетов:

- недостаточно высокий уровень компетентности возможных пользователей в области практического применения методов суперкомпьютерного моделирования и расчетов не позволяет в полной мере реализовать весь потенциал спроса;
- не сформирована система и процедуры доступа коммерческих компаний к суперкомпьютерным мощностям, которые сосредоточены в основном в научно-образовательных учреждениях;
- отсутствуют суперкомпьютерные центры, ориентированные на предоставление сервисов коммерческим компаниям.

Основными целями конкурса являются:

1) Выявление и подтверждение платежеспособного спроса на рынке суперкомпьютерных вычислений в наноиндустрии и инновационных отраслях экономики – прежде всего наукоемких отраслях машиностроения, нефтегазовой и химической промышленности, энергетики, а также таких социально значимых отраслях как строительство, фармацевтика и медицина.

2) Практическая реализация и отработка механизмов удовлетворения этого спроса и технологий выполнения суперкомпьютерных вычислений для инновационных отраслей, включая такие профессиональные сервисы, как предоставление пользователям доступа к суперкомпьютерным ресурсам и экспертизе по решению

практических задач методами высокопроизводительных расчетов.

Третьей и главной целью является формирование и стимулирование рынка суперкомпьютерных расчетов за счет формирования спроса (цель 1) и механизмов его удовлетворения (цель 2). Предлагаемые в ходе конкурса механизмы реализации позволяют привлечь и активизировать потенциальных пользователей за счет возможности решить расчетные задачи на льготных условиях с помощью созданных сервисов.

В целом результаты конкурса показали, что подавляющее большинство клиентов-владельцев задач считают, что применение в ходе исследований высокопроизводительных расчетов является необходимым инструментом в исследованиях объектов. Это позволяет получить новые фундаментальные знания о структуре, явлениях, дает возможность построения виртуальных моделей в реальном времени, сокращает продолжительность разработок. В ряде случаев использование суперкомпьютера является ключевым фактором успеха в работе, обязательным условием.

Вместе с тем значительное количество участников конкурса не располагает достаточной информацией о возможностях высокопроизводительных вычислений, не может оценить объемы задач и сроки их решения с использованием суперкомпьютера.

Уровень решения задач напрямую связывается с доступной производительностью суперкомпьютера. В случае использования для расчетов по текущим проектам персональных компьютеров резко снижается точность расчетов, увеличивается время разработок, снижается качество решений и количество возможных для решения задач.

Заинтересованность в использовании ресурсов напрямую зависит от условий предоставления услуги. При работе на проектах с использованием высокопроизводительных вычислений отмечалось отсутствие или недостаточность доступного отлаженного программного обеспечения для решения конкретных задач, а также необходимость квалифицированной поддержки при работе с высокопроизводительным вычислительным комплексом.

Поскольку подавляющее большинство групп только начинают переход от персональных компьютеров к большим вычислителям, требуется определенное время, чтобы появились масштабные задачи, требующие значительного количества расчетов, и коллективы научились создавать сложные, большие модели. В связи с этим при создании суперкомпьютерного центра представляется целесообразным постепенное наращивание его мощности по производительности, а также расширение спектра оказываемых услуг.