ПРОГРАММНЫЙ КОМПЛЕКС GIMM_NANO

А.А. Бондаренко, Э.М. Кононов, О.А. Косолапов, С.В. Поляков, М.В. Якобовский

Аннотация

В данной работе представлен Программный Комплекс Graphical Interface for Mathematical Modeling in NANOscience (ПК GIMM_NANO), предназначенный для решения больших задач современной электроники и лазерных нанотехнологий с помощью вычислительных систем сверхвысокой производительности с гибридной архитектурой, сочетающей суперкомпьютерные вычисления на центральных и графических процессорах.

Возможности комплекса GIMM_NANO

Программный комплекс GIMM_NANO содержит весь набор инструментов, позволяющих пользователю решать конкретную задачу от начала до конца: проектирование геометрии задачи; построение расчетной сетки и нанесение на нее атрибутов задачи; проведение расчетов на различных МВС; сохранение и анализ конечных результатов с помощью встроенной программы визуализации. Эти инструменты ориентированы на использование многопроцессорных систем, но могут работать также на персональном компьютере.

Графический интерфейс пользователя обеспечивает ввод данных и выбор действий программы с помощью хорошо знакомых пользователю стандартных визуальных элементов управления (панели инструментов, выпадающие меню, окна списка и др.).

Комплекс GIMM_NANO предназначен для решения:

1. научных и инженерных задач повышенной сложности в области развития микро- и нанотехнологий, связанных с проектированием новых приборов твердотельной и вакуумной электроники;
2. научных и инженерных задач повышенной сложности в области технологий лазерной обработки поверхностей и создания материалов новых типов методами селективного лазерного плавления и спекания;
3. задач обучения студентов и аспирантов ведущих ВУЗов специальностям, связанным с математическим моделированием и инженерными расчётами в соответствующих отраслях знаний.

В данном комплексе реализованы модели, позволяющие проводить исследования конкретных научных и инженерных задач большой вычислительной сложности:

- моделирование неравновесных процессов в полевом нанотранзисторе на основе кремния с целью создания базовых элементов сверхбыстрых цифровых интегральных схем [1];
- моделирование электронных процессов в полевых транзисторах на основе графена и его модификаций на базе уравнений квантовой гидродинамики с целью создания элементов сверхбыстрых аналоговых схем [2];
- расчёты электронной и спиновой динамики состояний базовых элементов квантового компьютера - кубитов - с целью управления этими состояниями и их парным и коллективным взаимодействием, а также с целью проведения измерения состояний [3];
- расчёты эмиссионных свойств наноструктур на основе кремния и углерода, включая структуры из графена, фуллерены и углеродные нанотрубки, с целью создания нового поколения приборов, использующихся в нанолитографии, электронном зондировании поверхностей наноматериалов, СВЧ-наноэлектронике, нанофотонике [4];
- моделирование процессов плавления многокомпонентных порошков при селективном лазерном спекании с целью развития современных технологий прямого изготовления трехмерных изделий любой степени сложности из широкого спектра материалов (металлов, керамики, полимеров, включая многокомпонентные, градиентные, каркасно-заполненные, наноструктурированные) и прежде всего технологии изготовления чипов субмикронного диапазона применительно к реализации устройств наноэлектроники [5];
- моделирование процессов объёмной кристаллизации с целью развития перспективных технологий обработки материалов путём воздействия на образец концентрированных потоков энергий (лазерного и электронного пучков), в том числе технологии лазерного травления применительно к производству современных электронных схем [6].

Особенности комплекса GIMM_NANO заключаются в следующем:

- в рамках ПК GIMM_NANO реализовано решение актуальных прикладных задач наноэлектроники и лазерной нанотехнологии, которое по разным причинам ранее не могло быть осуществлено;
- эффективное решение прикладных задач опирается на комплексность математического подхода (мультифизичное моделирование сложных физических процессов в наноструктурах), повышенную точность используемых численных методов и алгоритмов и высокую эффективность применяемых параллельных алгоритмов, большая часть которых является оригинальной разработкой;

- ПК GIMM_NANO ориентирован на использование новейшей гибридной параллельной архитектуры, сочетающей различные типы вычислителей (ЦПУ и ГПУ) и различные технологии параллельного программирования (MPI, OpenMP, CUDA), что позволяет в десятки раз сократить временной цикл моделирования и проектирования современных электронных приборов и лазерных нанотехнологий их производства;
- в результате использования ПК GIMM_NANO стоимость компьютерного эксперимента в выбранной предметной области снизится по сравнению с существующими промышленными программными продуктами в десятки раз ввиду более низкой стоимости годовой лицензии (ниже в 10 раз по сравнению с импортным ПО) и проведения расчётов на относительно дешёвых (почти в 10 раз по сравнению с обычными суперкомпьютерами) и энергоэффективных (в 5-10 раз) гибридных вычислительных системах.

В данный момент программный комплекс GIMM_NANO находиться в фазе "изготовление".

Архитектура GIMM_NANO

В целом, ПК GIMM_NANO разрабатывался на основе готовых технологий, решений и шаблонов.

В основе реализации *головной программы* для доступа к системе лежит шаблон тонкого клиента, при реализации которого максимальное количество бизнес-логики выносится на серверный компонент (*сервис управления* и другие программы). Такой подход позволяет упростить *головную программу*, тем самым снизив количество программных ошибок, а четко определенный сетевой интерфейс серверной стороны позволяет автоматизировать его тестирование.

Интеграция расчетных модулей, модулей построения сеток и других приложений комплекса осуществляется за счет специальных библиотек, с которыми должны быть собраны эти модули. То есть все модули, реализующие те или иные математические или физические расчеты и дополнительные сервисы должны работать с данными, предоставляемыми системой только через эти специальные библиотеки.

Такой способ интеграции с одной стороны усложняет использование уже готовых и отлаженных модулей, однако с другой стороны, он позволяет сделать расчет наиболее эффективным с точки зрения производительности. Исходя из концепции, сформулирована укрупнённая компонентная модель комплекса (см. Рис.1).

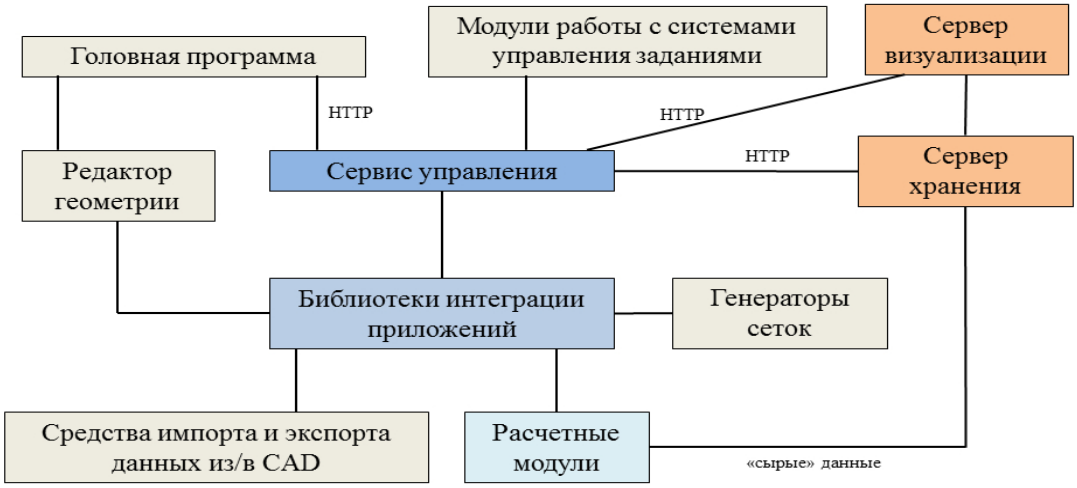

Рис. 1. Укрупнённая компонентная модель ПК GIMM_NANO

Рассмотрим далее отдельно основные компоненты комплекса.

Головная программа

Головная программа является единственной точкой входа в комплекс для конечного пользователя. Все действия, связанные с функциональными возможностями комплекса, осуществляются только через этот компонент. На использование *головной программы* ограничения, связанные с лицензионной защитой, не накладываются, и она распространяется свободно.

Большинство операций *головная программа* выполняет с участием специальной программы – *сервиса управления*. Например, получение списков доступных приложений комплекса и вычислительных систем, запуск приложений на локальных и удалённых вычислительных системах, запуск программ мониторинга и т.д. Даже задание расчётной геометрии и построение сетки не обходится без *сервиса управления*, поскольку он определяет лицензионные возможности и ограничения.

Головная программа настраивается на использование одного или нескольких *сервисов управления*. Параметрами настройки являются HTTP(S) адрес и, опционально, логин/пароль или клиентский SSL-сертификат (для защищенных соединений).

Сервис управления

Сервис управления выполняет роль связующего звена между *головной программой* и практически всеми прикладными компонентами комплекса.

Наличие этого компонента позволяет:

- скрыть от головной программы логику взаимодействия с прикладными модулями;
- не изменять архитектуру и способы взаимодействия компонент для локальной и распределенной инсталляций;
- централизованно управлять списком доступных пользователю подсистем комплекса, в том числе предоставлять разным пользователям различные уровни доступа к ним;
- в перспективе предоставить альтернативный доступ к информации о запущенных и проведенных заданиях (веб-интерфейс, мобильные платформы);

Модули работы с системами управления заданиями

Существуют различные способы запуска параллельных задач на МВС. Для каждой новой МВС предполагается создавать свой подключаемый модуль, который реализует обобщенный интерфейс взаимодействия с МВС.

При поступлении от пользователя команд *сервис управления* обращается к нужному модулю, то есть вызывает нужную процедуру формирования командной строки. Далее полученная командная строка передается на МВС. Каждый модуль позволяет сформировать команды для последующего мониторинга и отмены заданий.

Средства импорта/экспорта расчётной геометрии из/в CAD

Для обеспечения возможности ввода данных о расчётной геометрии из CAD систем, предусмотрены специальные библиотеки импорта. Обратная задача экспорта внутренних геометрических данных комплекса в форматы широко распространённых CAD-систем также возложена на эти средства.

Редактор геометрии расчётной области

Редактор геометрии - программа, обладающая следующими возможностями:

- создание и редактирование геометрии расчетной области с помощью графических примитивов и операций с ними;
- поддержка двумерной и трехмерной геометрии;
- задание геометрических объектов с помощью мыши;
- цифровой ввод параметров геометрических объектов;
- выполнение операций с геометрическими объектами (декомпозиция на более простые объекты, поиск пересечений, булевы операции, построение выпуклой оболочки и т. п.);
- интерактивная графика, которая отображает все произведенные пользователем изменения в реальном времени, используя визуальные средства (раскраска разными цветами, прозрачность, настройку масштаба и угла обзора и т. п.).

Библиотеки интеграции расчётных модулей и других приложений

В программном комплексе GIMM_NANO реализованы библиотеки интеграции:

- Библиотека ввода-вывода локальных данных.
- Библиотека импорта/экспорта геометрических данных из/в CAD.
- Библиотеки генерации сеток различного типа.
- Библиотека функций ввода-вывода и хранения распределённых сеточных данных.
- Библиотеки базовых численных методов.
- Открытые части библиотек прикладных программ.

Каждый расчетный модуль комплекса использует *библиотеку ввода-вывода локальных данных* и может использовать другие библиотеки интеграции.

В комплексе представлена возможность создания пользователем приложения, которое использует библиотеки интеграции и расчетные модули, например, осуществляет ввод параметров, построение сетки, расчёты отдельных подзадач, сохранение и визуализацию результатов только средствами комплекса (с помощью вызова функций из библиотек интеграции).

Во время старта расчётного или сервисного модуля, происходит инициализация объектов и функций библиотек интеграции аргументами командной строки. За формирование этих аргументов отвечает *сервис управления*. Таким образом, в расчетные модули и другие приложения комплекса унифицированным способом будут попадать входные данные. Аналогично, при завершении работы модуля формируется код возврата и структура данных, которые передаются *сервису управления*.

Сервер и клиент визуализации

Программа визуализации предназначена прежде всего для преобразования геометрических объектов и сеточных данных больших объемов в форму удобную для изображения на оборудовании пользователя. Предполагается, что геометрические объекты и сеточные данные получены в результате вычислительных экспериментов на кластерах и суперкомпьютерах, в том числе с помощью программ ПК GIMM_NANO. В качестве форм представления сеточных данных выбраны: линии уровня в заданном сечении и поверхности уровня в трёхмерном пространстве. *Программа визуализации* позволяет строить изображение одномерных сеток, двумерных декартовых и треугольных сеток в плоскости, трехмерные декартовы сетки.

Программа визуализации состоит из серверной и клиентской частей. Серверная часть предназначена для преобразования данных и может выполняться на удаленной от пользователя распределенной вычислительной системе. Клиентская часть предназначена для изображения данных на оборудовании пользователя.

Программа визуализации использует средства ввода-вывода и средства хранения распределённых сеточных данных сверхбольшого объёма программы ПК GIMM_NANO.

В ПК GIMM_NANO принята следующая схема визуализации:

1. Результаты расчетов пользователя на распределенных вычислительных системах сохраняются *сервером управления* на *сервере хранения данных*.

2. Пользователь с помощью *графической части* оформляет запрос на визуализацию, а именно, выбирает вид конечного изображения данных (построение одномерной, двумерной или трехмерной сетки, линий уровня в заданном сечении или поверхностей уровня в пространстве), указывает значения параметров необходимых для запуска соответствующей процедуры построения изображений.

3. Запрос на визуализацию оформляется в виде специального ini файла. *Сервер управления* проводит проверку на допустимость запроса с точки зрения лицензионного соглашения, затем ini файл передается на *сервер хранения данных*.

4. *Серверная часть программы визуализации* считывает содержимое ini файла и файлов с описанием сеточных данных, осуществляет соответствующие построение. Результат работы записывается в соответствующий выходной файл (output.txt) на *сервер хранения данных*.

5. *Серверная часть программы визуализации* передает сообщение *серверу управления* об окончании построений, с адресом результирующего файла (output.txt).

6. *Сервер управления* осуществляет запуск *клиентской части программы визуализации* на оборудовании пользователя и передает её файл (output.txt) для построения изображения. *Клиентская часть программы визуализации* строит результирующее изображение и обрабатывает последующие запросы пользователя по преобразованию этого изображения.

Примеры работы программы визуализации приведены на Рис.2, Рис.3.

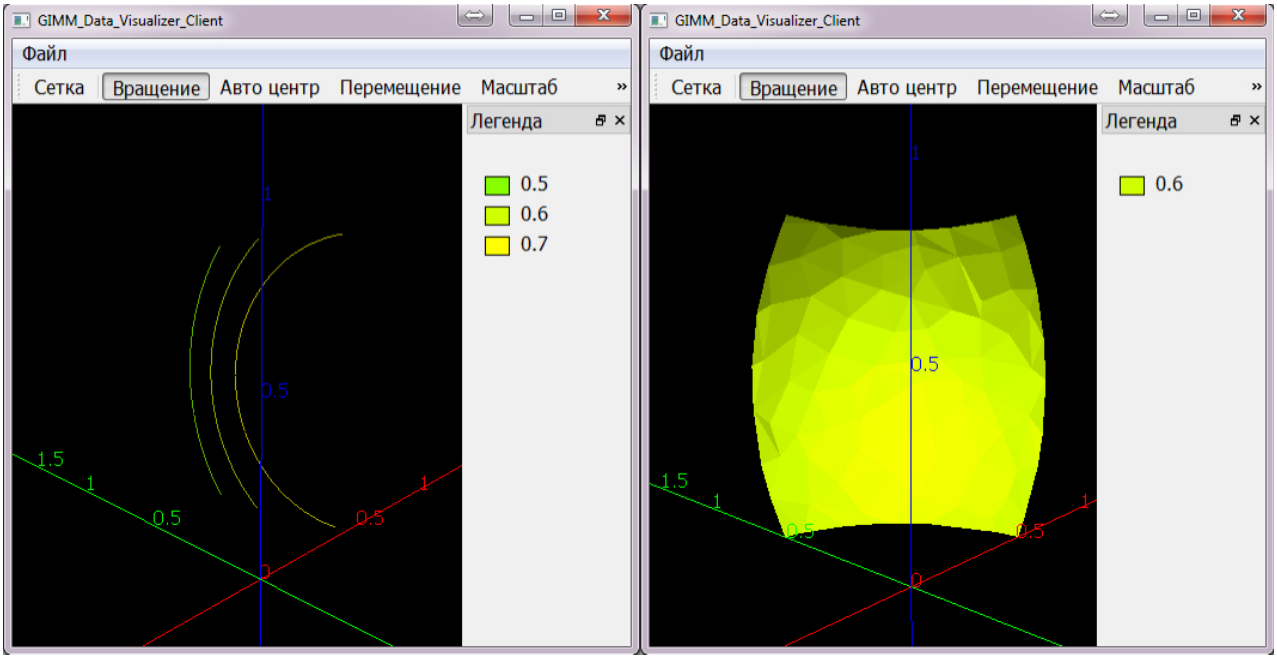

Рис. 2. Изображения получены для одного файла. Слева изображения трех линий уровня в сечении плоскости x = 0.37, для которых функция принимает значения f1 = 0.5, f2 = 0.6, f3 = 0.7. Справа изображение поверхности уровня для значения функции f = 0.6

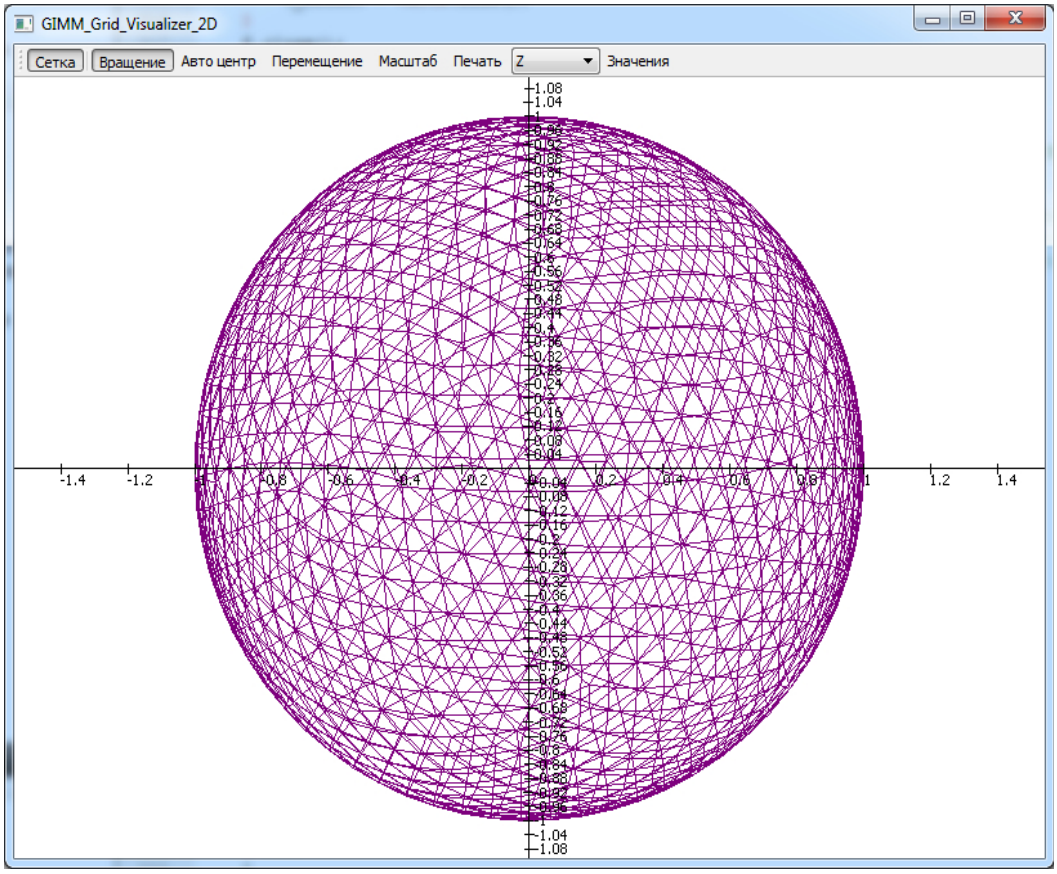

Рис. 3. Изображение двумерной треугольной сетки на сфере

Заключение

В работе представлен программный комплекс GIMM_NANO, ориентированный на решение задач на современных высокопроизводительных системах в параллельном режиме на сетках больших размеров и различной структуры.

Комплекс содержит весь набор инструментов, позволяющих пользователю выполнить всю цепочку вычислительного эксперимента: проектирование геометрии задачи; построение расчетной сетки и нанесение на нее атрибутов задачи; проведение расчетов на различных МВС; сохранение и анализ конечных результатов с помощью программы визуализации. Практически на каждом этапе решения задачи обработка данных и вычисления могут выполняться в параллельном режиме.

Работа выполнена при финансовой поддержке Минобрнауки России по государственному контракту № 07.524.12.4019 от 17.05.2012.

ЛИТЕРАТУРА:

1. V. Vyurkov I. Semenikhin, S. Filippov, A. Orlikovsky "Quantum simulation of an ultrathin body field-effect transistor with channel imperfections" // Solid-State Electronics Volume 70, April 2012, Pages 106–113
2. D. Svintsov, V. Vyurkov, V. Ryzhii and T. Otsuji "Effect of Mexican Hat on graphene bilayer field-effect transistor characteristics" // *Jpn. J. Appl. Phys.*, vol. 50, 2011 070112
3. А.А. Мельников, Л.Е. Федичкин "Квантовая коррекция ошибок в кремниевых зарядовых кубитах" // Микроэлектроника 2013, том 42, № 3, с. 186–193
4. В.А. Федирко, Д.А. Зенюк, С.В. Поляков "К моделированию туннельного переноса электронов из ультратонкого лезвийного автокатода" // Математическое моделирование, 2012 год, том 24, номер 12, с. 13-22
5. F.Kh. Mirzade, V.G. Niziev, V.Ya. Panchenko, M.D. Khomenko, R.V. Grishaev, S. Pityana, Corney van Rooyen "Kinetic approach in numerical modeling of melting and crystallization at laser cladding with powder injection" // Physica B: Condensed Matter 423 (2013), p. 69-76
6. F.K. Mirzade, M.D. Khomenko, V.G. Niziev, R.V. Grishaev, V.Y. Panchenko. "Three dimensional model of melting and crystallization kinetics during laser cladding process" // Proceedings of SPIE Volume 8677, article id. 86770R, pp. 14 (2012)