

---

---

# ТЕХНОЛОГИИ ПОДДЕРЖКИ ЖИЗНЕННОГО ЦИКЛА РАСПРЕДЕЛЕННЫХ ПРОБЛЕМНО-ОРИЕНТИРОВАННЫХ СРЕД

---

---

УДК 681.3.069, 681.324

Д. М. Спельников, А. А. Гуськов, В. Г. Маслов, А. В. Бухановский

## УЧЕБНО-НАУЧНЫЙ КОМПЛЕКС „КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ В НАНОТЕХНОЛОГИЯХ“ НА ОСНОВЕ ГРИД-СРЕДЫ

Разработан учебно-научный комплекс для выполнения работ в области моделирования наноразмерных атомно-молекулярных структур, наноматериалов, процессов и устройств на их основе в режиме удаленного доступа к ресурсам распределенной вычислительной среды Грид Национальной нанотехнологической сети.

*Ключевые слова:* нанотехнологии, сервис, распределенная среда, удаленный доступ, портал, наноразмерные системы, учебно-методические материалы.

**Введение.** В настоящее время для изучения сложных систем активно используется так называемая „третья парадигма научного познания“ — изучение на основе компьютерного моделирования [1]. По сравнению с двумя традиционными парадигмами (теорией и экспериментом), она предоставляет широкие возможности для исследования явлений, полномасштабное наблюдение которых ограничено, затруднено или в принципе невозможно. К таким явлениям, в частности, относятся нанотехнологические процессы. Их специфика состоит в том, что в рамках одного процесса необходимо связать характеристики микроуровня (свойства отдельных атомно-молекулярных структур) и макроуровня (свойства конкретных устройств, материалов и явлений на их основе). Как следствие, полномасштабное экспериментальное изучение таких процессов на всех уровнях сопряжено с существенными трудностями. Потому компьютерное моделирование является необходимым инструментом не только изучения и расчета свойств нанотехнологических процессов, но и предметно-ориентированного обучения, связанного с различными направлениями развития nanoиндустрии. Данный факт объясняется тем, что в процессе компьютерного моделирования обучаемый имеет возможность ознакомиться с комплексными свойствами нанотехнологических процессов, прослеживая ключевую специфику нанотехнологий — формирование макрообъектов с заданными свойствами на основе манипулирования характеристик микрообъектов (атомно-молекулярных систем).

Эклектичность способов формирования модельно-методической базы в области нанотехнологий, вызванная их многомасштабностью, породила специфический класс программного инструментария компьютерного моделирования — проблемно-ориентированные оболочки, обеспечивающие доступ к различным прикладным пакетам (и их комбинациям) для решения задач по различным направлениям развития nanoиндустрии. К таким инструментам, в частности, относится комплекс Accelrys [2], портал информационной и инструментальной

поддержки NANOhub [3], а также отечественная разработка Nanomodel.ru [4]. Несмотря на достаточно мощную технологическую основу для научных расчетов, перечисленные комплексы не в полной мере подходят для модельного изучения различных нанотехнологических процессов, поскольку не обеспечивают возможности наблюдения моделируемого процесса на всех этапах или уровнях иерархии.

В настоящей работе рассматривается специализированный учебно-научный комплекс „Компьютерное моделирование в нанотехнологиях“. Его основу составляет аппаратно-программный комплекс (АПК) HPC-NASIS II, который реализует концепцию iPSE [5] и предоставляет доступ к вычислительным сервисам и композитным приложениям в рамках бизнес-модели SaaS (Software as a Service, программное обеспечение как услуга). Вычисления выполняются на ресурсах Грид-среды Национальной нанотехнологической сети [6].

**Методы и технологии компьютерного моделирования.** При компьютерном моделировании в нанотехнологиях используется многомасштабный подход. На нижнем уровне иерархии находится уровень моделирования свойств самих атомно-молекулярных систем на основе квантово-механических *ab initio* расчетов (из первых принципов). На всех последующих уровнях применяются результаты таких расчетов в качестве параметров системы вложенных моделей, определяющих свойства мезомасштабных и макромасштабных явлений.

Основным функциональным назначением учебно-научного комплекса является организация доступа и возможности использования распределенных вычислительных сервисов при компьютерном моделировании в нанотехнологиях. Каждый сервис представляет собой прикладной пакет, развернутый на ресурсах среды ГридHPC и доступный в режиме удаленного доступа. Комплекс включает в себя три группы прикладных сервисов:

- 1) для квантово-механического моделирования и *ab initio* расчетов атомно-молекулярных систем,
- 2) для расчетов характеристик различных процессов нанопластики и наноплазмоники,
- 3) для моделирования с помощью методов молекулярной динамики.

Первая группа сервисов позволяет выполнять высокоточные *ab initio* расчеты из свойств малых атомно-молекулярных систем, включая свойства основного и возбужденных состояний, и моделирование мезосистем (до 10 000 атомов) посредством прикладных пакетов GAMESS, ORCA и PRIRODA (неэмпирические методы), SEMP (полуэмпирический метод ZINDO/S-CI) и DPIMC (квантовый метод Монте-Карло).

Вторая группа сервисов ориентирована на решение специфических задач расчета линейных и нелинейных свойств ансамблей наночастиц, погруженных в матрицу или нанесенных на поверхность, выполняемого с помощью пакетов UpConversion, QDLaser, Plasmon и JAggregate [7]. Эти сервисы позволяют моделировать оптические и фотоэлектрические свойства ансамблей наночастиц на подложках и в объеме диэлектриков, степень усиления или подавления комбинационного рассеяния, флуоресценции, переноса возбуждения, нелинейно-оптические свойства ориентированных молекулярных J-агрегатов, энергетические, спектральные и угловые характеристики излучения твердотельных и полупроводниковых лазеров с наноструктурами.

Третья группа сервисов ориентирована на моделирование процессов наногидродинамики и формирования наночастиц, нанопластин и нанотрубок. Она включает в себя пакеты NanoFlow, NAEN и NAMD [8].

Учебно-научный комплекс предоставляет пользователю возможность не только выбора вариантов применения различных прикладных пакетов, но их комбинирования в составе так называемых композитных приложений — набора сервисов, скоординированно выполняемых в составе распределенной среды для решения общей прикладной задачи.

**Вычислительная платформа и программный инструментарий.** Ядром учебно-научного комплекса является аппаратно-программный комплекс HPC-NASIS II, в котором

развиты идеи, заложенные в высокопроизводительном программном комплексе для квантово-механических расчетов и моделирования наноразмерных атомно-молекулярных систем и комплексов HPC-NASIS [9]. АПК выгодно отличается от HPC-NASIS следующим:

- ориентация на технологии удаленного взаимодействия с пользователем через веб-браузер;
- представление пользовательских приложений в форме потоков заданий (workflow, WF) на предметно-ориентированном языке EasyFlow;
- применение новой онтологической базы знаний в области моделирования наноразмерных атомно-молекулярных систем;
- возможность эффективно совокупно использовать ресурсы выделенных суперкомпьютеров и среды Грид;
- поддержка когнитивной визуализации результатов расчетов в режиме удаленного доступа (включая режимы поддержки стереоизображений);
- обеспечение безопасности многопользовательского применения, поддержка операций квотирования, биллинга и тарификации;
- обеспечение коллективной работы над проектами пользователей.

Комплекс HPC-NASIS II разработан на основе многофункциональной инструментально-технологической платформы CLAVIRE (Cloud Applications Virtual Environment), его принципиальная архитектура приведена на рис. 1.

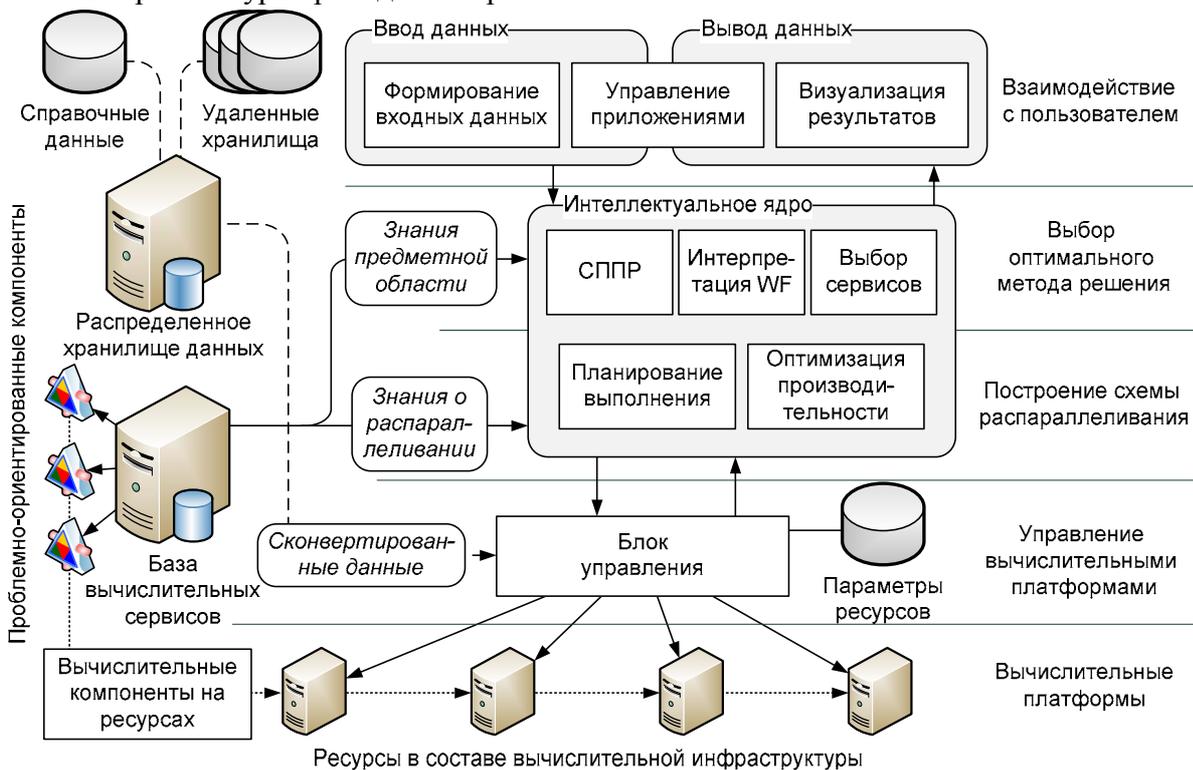


Рис. 1

На уровне взаимодействия с пользователем выполняются процессы разработки и отладки композитных приложений, подготовки входных данных, а также интерпретации и визуализации результатов расчетов. Уровень выбора оптимального метода решения включает в себя процессы поддержки принятия решений пользователя в ходе конструирования композитного приложения, выбора определенных прикладных сервисов, а также интерпретации пользовательского WF в исполнимую форму. На уровне построения схемы распараллеливания реализуются задачи планирования исполнения блоков композитного приложения в распределенной вычислительной среде. Уровень управления вычислительными платформами обеспечивает запуск отдельных задач (в составе композитного приложения) на исполнение, а также мониторинг их

работы, обмен входными и выходными данными. Уровень вычислительных платформ включает низкоуровневую инфраструктуру среды распределенных вычислений (например, ГридННС).

Комплекс HPC-NASIS II предоставляет пользователю четыре режима организации вычислительного процесса с использованием прикладных сервисов в распределенной среде:

1) режим интеллектуальной поддержки, в рамках которого пользователь формулирует постановку задачи на языке предметной области на основе опроса экспертной системы. В результате пользователю предлагается наиболее отвечающий его целям вариант использования прикладного пакета, на основе которого автоматически генерируется сценарий запуска;

2) режим ручного создания композитных приложений: подразумевает описание композитного приложения в окне редактирования на языке EasyFlow, с непосредственным определением режимов вызова прикладных пакетов, необходимых пользователю;

3) режим использования шаблонов, соответствующих типовому применению вызовов отдельных прикладных пакетов. В этом случае пользователь отвечает за подготовку входных данных; выбор вычислительного ресурса и запуск пакета выполняются комплексом автоматически;

4) режим использования сценариев позволяет применять заранее подготовленные описания композитных приложений с ассоциированными входными данными в форме проектов HPC-NASIS II. Сценарии могут содержаться как в хранилище данных пользователя HPC-NASIS II, так и во внешних хранилищах в составе Национальной нанотехнологической сети, с возможностью загрузки в комплекс. При этом пользователь (по необходимости) может изменять только отдельные значения параметров запуска.

Все варианты использования комплекса позволяют обеспечить доступ к вычислительным сервисам и композитным приложениям на их основе в рамках бизнес-модели SaaS, поэтому пользователь может не устанавливать специализированное программное обеспечение на свой компьютер, а ограничиться использованием стандартного web-браузера.

**Учебно-методические материалы.** В состав учебно-научного комплекса входят гипертекстовые материалы, необходимые для освоения приемов работы с комплексом HPC-NASIS II, а также для обучения по таким направлениям развития nanoиндустрии, как нанобиотехнологии, nanoинженерия и nanoэлектроника. В состав учебно-методических материалов входят методики использования комплекса, учебные модули, лабораторные работы, методические указания для исследовательских работ и электронные тьюторы.

Методики использования комплекса HPC-NASIS II (технологические инструкции) описывают возможности применения комплекса для решения различных предметных задач в области нанотехнологий, порядок работы с сервисами и композитными приложениями в режиме удаленного доступа, а также особенности использования комплекса в режиме симулятора нанотехнологических процессов.

Учебные модули охватывают отдельные разделы знаний по направлениям „nanобиотехнологии“, „nanoинженерия“, „nanoэлектроника“. В них представлены теоретические основы расчетных методов и моделей, реализуемых комплексом HPC-NASIS II, а также предметные направления, освоение которых требует интенсивного применения средств компьютерного моделирования в нанотехнологиях:

- фотоника наноструктур и наноструктурных материалов;
- квантово-химические методы;
- моделирование оптических и электрофизических свойств наноструктур методами квантовой химии;
- оптические солитоны и солитонные линии связи;
- компьютерное моделирование лазеров и лазерно-оптических систем;
- течения жидкости в наноканалах.

Лабораторные работы предназначены для исследования различных явлений и свойств атомно-молекулярных систем, процессов, материалов и устройств на их основе с целью прак-

тического закрепления знаний и навыков, полученных в ходе освоения материалов учебных модулей. Все лабораторные работы выполняются на данном портале в режиме удаленного доступа. Методические указания для исследовательских работ способствуют стимулированию научной активности студентов и аспирантов в области нанотехнологий. Они ориентированы на поддержку самостоятельного решения практических задач с использованием комплекса НРС-NASIS II. Электронные тьюторы представляют собой анимированные демонстрации работы с комплексом НРС-NASIS II. Они воспроизводят как технические аспекты работы в режиме удаленного доступа, так и методические аспекты применения комплекса для решения конкретных прикладных задач.

Программная документация на комплекс НРС-NASIS II и прикладные пакеты в его составе доступна в составе учебно-методических материалов. Ее целесообразно использовать при самостоятельном выполнении исследовательских работ с применением новых пакетов и разработкой собственных композитных приложений.

**Средства взаимодействия с пользователем в режиме удаленного доступа.** Основным средством работы с учебно-научным комплексом является web-портал, который реализует интерфейс, обеспечивающий удаленный доступ пользователей к учебно-методическим материалам и сервисам НРС-NASIS II. Web-портал построен с применением системы управления контентом (CMS), которая разработана с использованием архитектуры MVC (Model—View—Controller, Модель—Представление—Контроллер). Структура портала представлена несколькими группами, каждая из которых содержит набор специализированных сервисов (хранения, мониторинга, вычислительные, персональные). Блоки „Модель“ и „Контроллер“ компонента реализованы с помощью языка программирования PHP 5.2, блок „Представление“ — с помощью технологий Javascript, html DOM, Ajax (библиотека jquery), Silverlight, Flash. Связь с web-сервисами осуществляется на основе стандарта SOAP. Для хранения данных может использоваться сервер базы данных MySQL или PostgreSQL. Для связи приложений с сервером базы данных используется язык запросов SQL. Хостинг сервисов осуществляется с помощью web-сервера Apache на UNIX-платформе.

Процесс работы с учебно-научным комплексом организован в рамках модели профессионального интернет-сообщества пользователей НРС-NASIS II. Сообщество организовано на основе виртуального рабочего пространства в рамках специализированной социальной сети. Основным источником мотивации для членов сообщества является возможность доступа к вычислительным сервисам, композитным приложениям и учебно-методическим материалам. Членом сообщества автоматически становится каждый зарегистрированный пользователь НРС-NASIS II. Как следствие, он приобретает следующие возможности:

- предоставлять информацию о себе другим членам профессионального интернет-сообщества;
- обмениваться профессиональными материалами с другими членами профессионального интернет-сообщества в рамках виртуальных групп социальной сети;
- предоставлять свои проекты НРС-NASIS II для общего доступа (для коллаборативной работы или независимого использования).

Учебно-научный комплекс обеспечивает возможность коллаборативной работы географически разделенных пользователей над одним проектом. Для обеспечения этой функции задействованы возможности симулятора нанотехнологических процессов (СНП) — репозитория композитных приложений.

На рис. 2 приведена схема организации коллаборативной работы пользователей над одним проектом с использованием СНП. В ней участвуют два пользователя. Пользователь „А“ создает, настраивает и исследует собственное композитное приложение, убеждаясь в его работоспособности. В том случае, если пользователь желает сделать проект доступным, выполняется отчуждение проекта с записью в репозиторий СНП. При этом пользователю „А“

предлагается создать краткую аннотацию приложения и сформировать графический образ, ассоциируемый с ним (например, в виде WF). В том случае, если проект сохранен в репозитории СНП, его описание становится доступным другим зарегистрированным пользователям HPC-NASIS II через web-портал удаленного доступа, поэтому пользователь „Б“ по описанию может выбрать приложение из каталога. При этом автоматически запускается сеанс работы с комплексом HPC-NASIS II и загружается соответствующий (готовый) проект от имени пользователя „Б“.

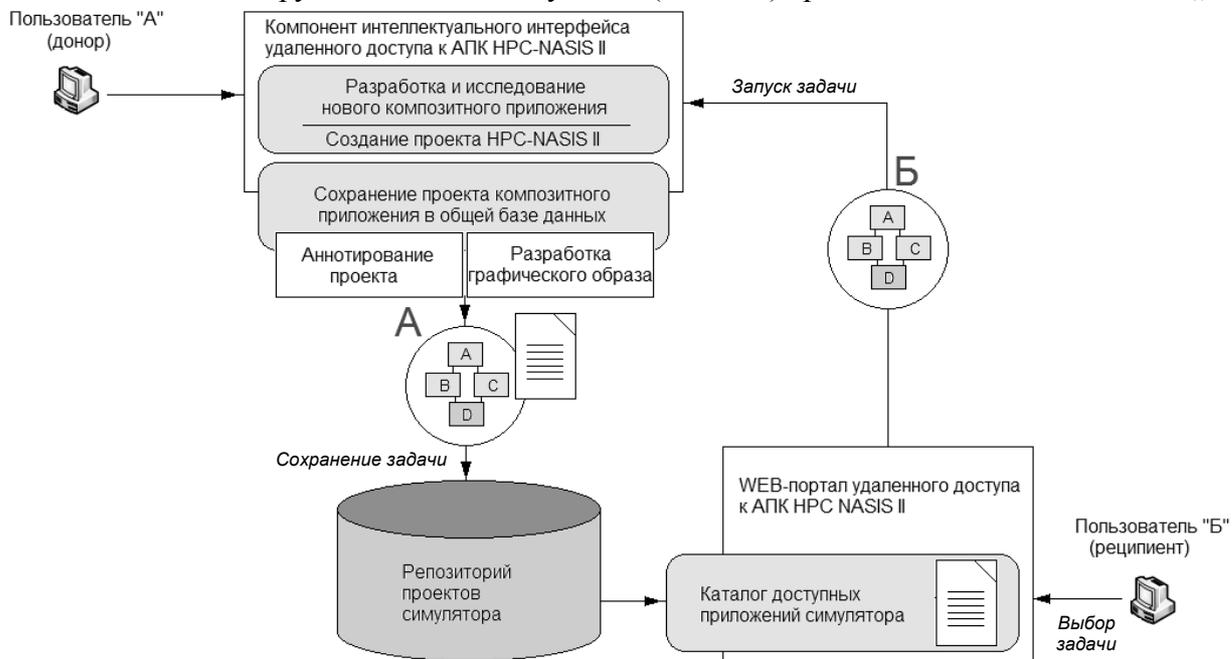


Рис. 2

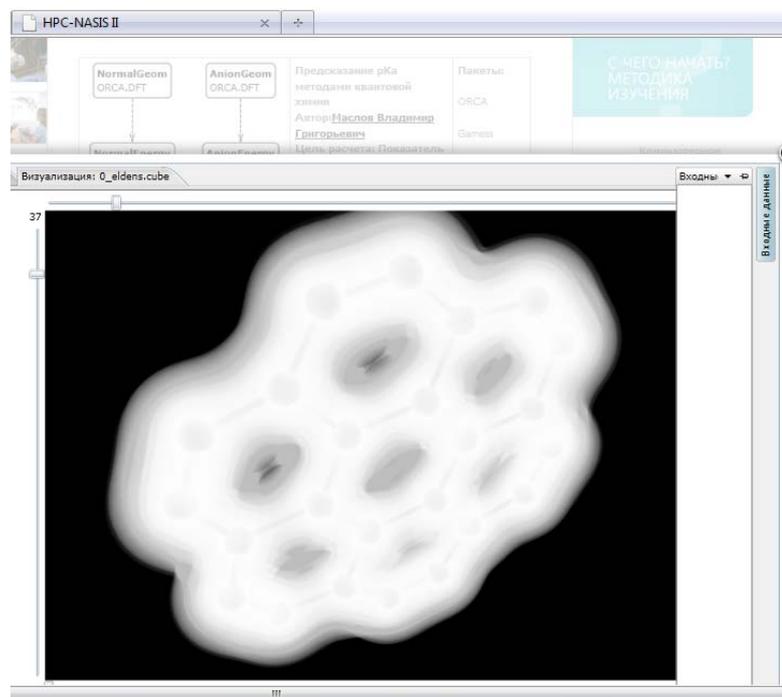


Рис. 3

Учебно-научный комплекс предоставляет пользователю мощный инструмент для предметно-ориентированной визуализации, позволяя формировать изображение на web-сервере с последующей передачей пользователю растрового графического файла. Визуализация выполняется как с помощью специализированных приложений, ориентированных на атомно-

молекулярные системы, так и посредством пакетов обработки данных общего назначения (например, SciLab [10]). На рис. 3 приведены примеры визуализации результатов моделирования.

**Заключение.** Учебно-научный комплекс „Компьютерное моделирование в нанотехнологиях“ доступен членам Национальной нанотехнологической сети (см. <<http://hpc-nasis.ifmo.ru>>).

Работа выполнена в рамках государственного контракта № 16.647.12.2025 „Создание функционирующего в режиме удаленного доступа интерактивного учебно-методического комплекса для выполнения работ в области моделирования наноразмерных атомно-молекулярных структур, наноматериалов, процессов и устройств на их основе, в распределенной вычислительной среде“.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Naumov L. Modelling with Cellular Automata: Problem Solving Environments and Multidimensional Applications. Amsterdam, 2011. 136 p.
2. Accelrys [Электронный ресурс]: <<http://accelrys.com>>.
3. Nanomodel [Электронный ресурс]: <<http://nanomodel.ru>>.
4. Бухановский А. В., Ковальчук С. В., Марьин С. В. Интеллектуальные высокопроизводительные программные комплексы моделирования сложных систем: концепция, архитектура и примеры реализации // Изв. вузов. Приборостроение. 2009. Т. 52, № 10. С. 5—24.
5. ГридННС [Электронный ресурс]: <<http://www.ngrid.ru/trac>>.
6. Розанов Н. Н. Диссипативные оптические солитоны. М.: Физматлит, 2011. 536 с.
7. NAMD [Электронный ресурс]: <<http://www.ks.uiuc.edu/Research/namd>>.
8. Васильев В. Н. и др. Высокопроизводительный программный комплекс моделирования атомно-молекулярных наноразмерных систем // Науч.-техн. вестн. СПбГУ ИТМО. 2008. Вып. 54. С. 3—12.
9. SciLab [Электронный ресурс]: <<http://www.scilab.org>>.

#### Сведения об авторах

- Дмитрий Михайлович Спельников** — НИИ Научно-технологических компьютерных технологий Санкт-Петербургского государственного университета информационных технологий, механики и оптики; младший научный сотрудник;  
E-mail: pilule@ya.ru
- Александр Александрович Гуськов** — НИИ Научно-технологических компьютерных технологий Санкт-Петербургского государственного университета информационных технологий, механики и оптики; младший научный сотрудник;  
E-mail: aleksander.guskov@gmail.com
- Владимир Григорьевич Маслов** — д-р физ.-мат. наук; Санкт-Петербургский государственный университет информационных технологий, механики и оптики, кафедра ЦИОТ; E-mail: maslov04@bk.ru
- Александр Валерьевич Бухановский** — д-р техн. наук, профессор; НИИ Научно-технологических компьютерных технологий Санкт-Петербургского государственного университета информационных технологий, механики и оптики; директор;  
E-mail: avb\_mail@mail.ru

Рекомендована НИИ НКТ

Поступила в редакцию  
15.05.11 г.