

Суперкомпьютеры в нанотехнологиях

Наталья Раус (Москва)

Современные исследования в области нанотехнологий всё чаще требуют дополнения физического эксперимента «численным» – компьютерным моделированием атомарной структуры и эволюции нанообъекта, основанным на базовых физических законах. При условии доступности вычислительных ресурсов достаточной мощности моделирование даёт то, что не может обеспечить эксперимент: возможность проследить и понять, какие именно фундаментальные факторы обуславливают те или иные особенности поведения системы. Без использования действительно мощных суперкомпьютеров крайне затруднительно реализовать «инженерный» подход к нанотехнологиям – создание наносистем с чётко заданными произвольными свойствами и возможностями.

Возможность работы с материей на уровне индивидуальных атомов представляет собой важнейшую цель прикладной науки. Но в то же время сами по себе такие приложения обладают огромной важностью для развития промышленности. В частности, когда постановка прямого эксперимента или разработка простой модели затруднительна или невозможна (будь то астрофизика, исследование процессов в недрах планет при сверхвысоких температурах и давлениях, изучение сейсмической активности, разработка ядерного оружия или расчёт внешней аэродинамики городского рекламного щита – см. рис. 1), незаменимым методом исследования и проектирования является компьютерное моделирование. При этом вместо информативных высокоуровневых феноменологических моделей, разработанных под конкретную задачу, используются более универсальные принципы (например, фундаментальные законы квантовой механики). За счёт такого «отката назад» по лестнице уровней описания системы, вычислительная сложность задачи сильно возрастает; однако колоссальное превосходство вычислительной мощности компью-

теров над возможностями человека часто позволяет решить задачи, принципиально неразрешимые на уровне «карандаша и бумаги».

Именно поэтому компьютерное моделирование оказывается поистине незаменимым инструментом при решении инженерных задач, целью которых является оптимизация тех или иных наноструктур и наноматериалов под заданное приложение. При этом большую выгоду можно получить с помощью «виртуального прототипирования», рассчитывая характеристики объектов-кандидатов без необходимости их реального синтеза (см. рис. 2). Это подчас является слишком дорогостоящей задачей, чтобы отбор можно было произвести на основании реальных измерений. Пользу от такого подхода в значительной мере уже ощутила фармакология: «виртуальный скрининг» малых молекул на предмет сродства к белку-мишени уже сейчас позволяет сэкономить миллионы долларов на разработке препаратов и сократить сроки выхода препарата на рынок на многие месяцы. В случае нанотехнологий такой подход осложняется большим разнообразием возможных физических, химических и био-

логических приложений, каждое из которых требует своего уникального подхода, а также – большим разнообразием и сложностью неорганической химии по сравнению с биоорганической.

Применение методов компьютерного моделирования в нанотехнологиях уже зарекомендовало себя как важнейший исследовательский инструмент, что видно по лавинообразному росту числа публикаций в научных журналах нанотехнологической тематики, посвящённых расчётам свойств наноструктур, – как самостоятельным, так и в тесном сотрудничестве с экспериментаторами. Моделирование позволяет в мельчайших деталях предсказать и проследить за атомарной структурой и динамикой наночастиц и наноматериалов, исследовать процессы химического катализа на наноуровне, изучить электронную структуру и транспортные свойства молекулярных электронных устройств, и т.д. Фактически на сегодняшний день именно нанотехнологии и смежные области являются основными потребителями машинного времени во всех мировых суперкомпьютерных центрах широкой специализации.

Доступность вычислительной техники петафлопсного масштаба (производительностью более квадриллиона операций в секунду) постепенно позволяет переходить от моделирования «по аналогии» на примерах простых модельных систем к вполне реалистичным расчётам на размерных и временных масштабах, действительно имеющих значение в нанотехнологиях. С другой стороны, большая важность методов компьютерного моделирования в нанотехнологиях стимулирует чрезвычайно активную раз-

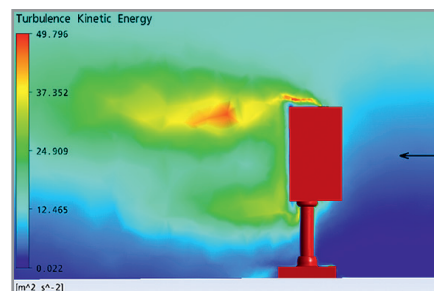
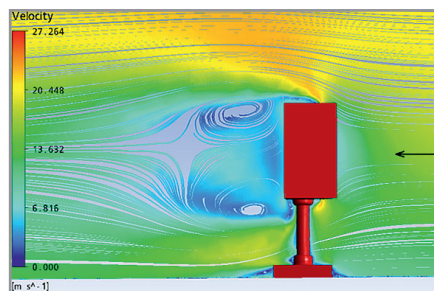
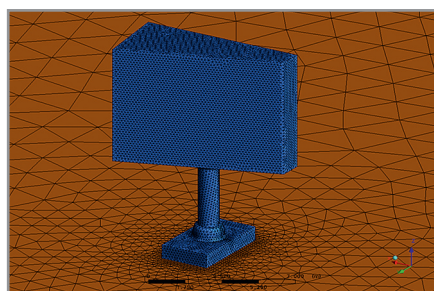


Рис. 1. Анализ внешней аэродинамики и НДС городского рекламного щита

работку новых параллельных вычислительных алгоритмов, необходимых для использования столь больших мощностей. Наглядной иллюстрацией служит тот факт, что первые два прикладных научных расчёта, в ходе которых был преодолен рубеж производительности в 1 Петафлопс, представляли собой исследования по молекулярному моделированию: расчёты электронной структуры высокотемпературных сверхпроводников (купратов) квантовым методом Монте-Карло и изучение эффекта гигантского магнитосопротивления в магнитных наночастицах. Оба рекорда производительности были поставлены на суперкомпьютере Jaguar, установленном в Национальной лаборатории Оук Ридж в США (<http://www.ornl.gov>) и занимающем второе место в последней редакции списка Top500 самых высокопроизводительных суперкомпьютеров мира (суммарная производительность суперкомпьютерного комплекса составляет 1,64 Петафлопс).

Наиболее показательные результаты с использованием суперкомпьютеров в области нанотехнологий продемонстрированы именно на западе, где уже наработан большой опыт применения высокопроизводительных вычислений в области нанотехнологий. Использование возможностей суперкомпьютеров широко практикуется при разработке новых перспективных материалов и устройств и опирается на серьезную поддержку ведущих лабораторий, располагающих мощными суперкомпьютерными ресурсами. Так, например, для поддержки исследования свойств воды в малоразмерных системах на суперкомпьютере Национальной лаборатории Argonne, США (производительность – 557 триллионов операций в секунду, или терафлопс), в 2008–2009 г.г. выделено 8 млн. процессорных часов. На проект развития интегрального подхода к рациональной разработке химических катализаторов на суперкомпьютере Jaguar Национальной лаборатории Оук Ридж, США, в 2008 г. выделено 10 млн. процессорных часов, а в 2009 – уже 30 млн. ч. Поддержка ряда подобных исследований в области нанотехнологий осуществляется в рамках программы INCITE Министерства энергетики США (<http://www.er.doe.gov/ascr/INCITE/index.html>), а также в рамках родственных программ.

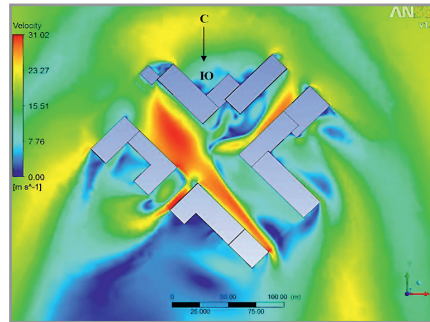
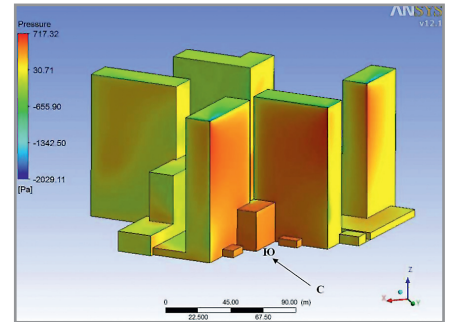


Рис. 2. Аэродинамический расчёт комплекса зданий

В России с развитием нанотехнологий использование высокопроизводительных вычислений также приобретает всё большее значение. И если раньше они наиболее активно использовались для научно-исследовательских и опытно-конструкторских работ, а ряд научных коллективов активно применял методы компьютерного моделирования, то теперь стоит очевидная задача – ускорить внедрение суперкомпьютерного моделирования на промышленных предприятиях и в коммерческих компаниях для разработки и производства новых высокотехнологичных продуктов.

Суперкомпьютерное моделирование, заменяющее натурные испытания при разработке новых технологий, открывает принципиально иные возможности для промышленности и nanoотрасли – например, создание «наномашин» с заданными свойствами и возможностями. Однако на самостоятельное освоение суперкомпьютеров



компаниям вынуждены тратить десятки лет и миллионы долларов. В связи с этим государственная корпорация РОСНАНО запустила проект по формированию рынка суперкомпьютерных вычислений в nanoиндустрии и промышленности, в рамках которого предприятия получают не только доступ к суперкомпьютерам, но и готовые результаты расчётов.

Проект предоставит инженерам и исследователям полный комплекс услуг по постановке задач и подбору ПО, моделированию, суперкомпьютерным расчётам, анализу и интерпретации результатов. Предприятия смогут внедрить результаты моделирования и оценить его преимущества на практике. Такой подход направлен на активное формирование рынка коммерческих суперкомпьютерных расчётов при поддержке государства, радикально сокращая путь к новым технологиям в наукоёмких отраслях промышленности. ©