

## **СЕКЦИЯ «АВТОМАТИЗАЦИЯ НАУЧНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ»**

Председатели – Демиденко О.М., Левчук В.Д.

**О.Д. Асенчик, К.С. Курочка, Е.Г. Стародубцев**

**УО «Гомельский государственный технический университет  
имени П.О. Сухого», Гомель, Беларусь**

### **ПРОЕКТИРОВАНИЕ ПРОГРАММНО-АППАРАТНОГО КЛАСТЕРНОГО ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОГО КОМПЛЕКСА ДЛЯ РАСЧЕТА ЭЛЕКТРОМАГНИТНЫХ ПОЛЕЙ ОПТИЧЕСКОГО ДИАПАЗОНА В НАНОСТРУКТУРАХ**

Современные нанотехнологии позволяют создавать и диагностировать материалы с наночастицами произвольной формы и состава [1]. Применение эффективных инструментов для компьютерного моделирования взаимодействия оптического излучения с композиционными наноматериалами различной внутренней структуры существенно облегчает решение задач проектирования таких

материалов с заданными характеристиками для приложений оптоэлектроники и сенсорной техники [2].

Проектируемый программно аппаратный комплекс предназначен для компьютерного моделирования оптических свойств нанокomпозитов и метаматериалов на основе наночастиц восстановленных металлов с целью последующего синтеза образцов с заданными функциональными характеристиками, перспективными для использования в качестве: сенсорных элементов; преобразователей, усилителей излучения; управляющих оптических и оптоэлектронных элементов. Исходя из этого, формировались типовые классы задач, решение которых он должен поддерживать:

1. Расчет 2D и 3D распределений электромагнитных полей оптического диапазона (ЭМП) в ближней зоне внутри и вне металлической однородной или неоднородной наночастицы произвольной формы.

2. Расчет 2D и 3D распределений ЭМП в ближней зоне наноконцентраторов полей – ансамблей близкорасположенных наночастиц (димеры, тримеры и т. д.) одинакового или разного состава, которые имеют:

2.1. сферическую форму; 2.2. произвольную форму.

3. Расчет эффективных характеристик (диэлектрической и магнитной проницаемостей, сечений поглощения и рассеяния) 2D и 3D объемов, содержащих большое количество распределенных по известному закону одинаковых или разных наночастиц, которые имеют:

3.1. сферическую форму; 3.2. произвольную форму.

4. Расчет распределения ЭМП, созданного одним или несколькими точечными источниками (диполями), вблизи металлических наночастиц.

Для расчета распределения ЭМП в различных средах разработано достаточно много методов [2, 3], однако, разработка программного обеспечения (ПО) для их реализации – длительный и трудоемкий процесс. С другой стороны в настоящее время существует много различных готовых пакетов программ, реализующих различные методы расчета [3]. Поэтому с нашей точки зрения перспективным является подход проектирования программно-аппаратных комплексов, соответствующих классу решаемых задач и включающих наборы подходящих готовых программных пакетов.

Очевидно, трудно обеспечить полное соответствие имеющейся функциональности готовых компонентов специфике практических задач, в силу этого программные компоненты комплекса должны быть доступны для модификации. Для обеспечения внутренней верификации, надежности и стабильности получаемых результатов, имеющийся набор

первичных инструментов должен быть избыточным – позволять решать подобные задачи с помощью разных программных пакетов.

Расчет распределения ЭМП вблизи нанообъектов и (или) в трехмерных объемах любым из широко используемых методов требует достаточно производительного вычислительного комплекса. Наиболее доступным решением по показателю цена/производительность является распараллеливание задачи для одновременного решения на некотором изменяемом количестве соединенных между собой линиями связи персональных компьютеров – кластере.

В работе проанализировано и частично апробировано ПО с открытым исходным кодом и лицензией на свободное его использование, реализующее современные численные алгоритмы, на предмет пригодности и эффективности для решения перечисленных выше классов задач. Особое внимание обращалось на возможность запуска анализируемого ПО на кластере. Ниже приведены краткие характеристики выбранных программных пакетов.

Meer – программный пакет, созданный и развиваемый в Массачусетском технологическом институте [4]. Основной используемый алгоритм расчета ЭМП – метод конечных разностей во временной области. Для работы в режиме параллельных вычислений в системах с распределенной памятью пакет поддерживает MPI стандарт. Meer может быть использован для решения всех упомянутых выше классов задач.

DDSCAT – программный пакет [5], использующий для расчета ЭМП метод приближения дискретных диполей. Последняя версия DDSCAT 7.1 для реализации режима параллельных вычислений поддерживает MPI и OpenMP стандарты, для работы в системах с распределенной и общей памятью соответственно. ПО используется для решения почти всех упомянутых выше классов задач 1–3. Исключение составляет расчет полей, порожденных точечным источником.

NFM-DS – программный пакет [6], комбинирующий подходы двух методов – метода нулевого поля (NFM), являющегося наиболее распространенной реализацией метода Т-матриц, и метода вспомогательных или дискретных источников (DS), иногда называемого методом обобщенных мультиполей (GMT). Для работы в режиме параллельных вычислений NFM-DS поддерживает стандарт OpenMP. Непосредственно NFM-DS можно использовать для задач 3.1, 3.2, связанных с расчетом параметров ЭМП в дальней зоне.

GMM-FIELD и GMM-DIP – программные пакеты [7] для расчета локальных ЭМП (задачи 2.1 и 4). GMM-DIP позволяет находить распределения ЭМП, индуцированные точечным дипольным источником, вблизи сферических частиц. Основной используемый

алгоритм расчета – модифицированный метод расширения теории Ми (рассеяние на единичной сфере) для множественного рассеяния на сферах. Версии для работы в режиме параллельных вычислений нет.

MSTM – программный пакет [8], использующий для расчета ЭМП метод Т-матрицы, основанный на формализме теории Ми для множественного рассеяния на сферических частицах. Для работы в режиме параллельных вычислений в системах с распределенной памятью пакет поддерживает стандарт MPI. MSTM может быть использован для решения задач 2.1, 3.1.

Для доступа к функциям пакета Meep используются C++ или Scheme интерфейсы. Для пакетов DDSCAT, NFM-DS, GMM-FIELD, GMM-DIP, MSTM задание параметров решения конкретной задачи осуществляется через текстовые файлы определенной внутренней структуры.

В качестве базовой формы построения вычислительной системы была выбрана централизованная модель с общедоступным состоянием [9]. Для организации взаимодействия между вычислительными узлами использовался механизм передачи сообщений на базе стандарта MPI (Message Passing Interface), обеспечивающий связь между ветвями параллельного приложения [10]. В качестве реализации MPI был выбран пакет MPICH, поддерживаемый большинством разработчиков рассмотренного выше прикладного ПО.

При исследовании математических моделей наноструктур можно выделить два основных класса решаемых задач: 1) решение одиночной задачи; 2) множественные независимые решения одной задачи с разными входными параметрами, например, получение набора оптических характеристик для различных длин волн возбуждающего излучения. Для первого класса задач эффективным методом решения является распараллеливание, что может быть реализовано только на уровне прикладного ПО. В этом случае а «узким местом», влияющим на итоговую производительность, является коммуникация данных. При этом для каждого пакета, конкретной задачи и вычислительной мощности кластера существует предел по числу узлов, выше которого производительность не увеличивается, а уменьшается. В этом случае более эффективен второй подход, когда независимо друг от друга, параллельно на различном числе узлов можно решать несколько независимых задач.

В силу разнородности используемых пакетов, различных способов задания исходных данных и типов организации распределённых вычислений, пользователям необходимо уметь работать со всем применяемым ПО, знать технологии распределённых вычислений и т. п. На практике это не представляется возможным. Поэтому предлагается использовать подход, основанный на объектно-ориентированном

моделировании физических систем [11]. Для этих целей предлагается ввести ряд модельных классов объектов, описывающих любую из типовых задач, указанных выше, на некоем промежуточном мета-языке, а затем осуществлять трансляцию описания в файл задания конкретного ПО для его решения. В результате пользователю не требуется изучать много пакетов программ, а достаточно освоить только один мета-язык, который должен предоставлять возможности настройки параллельных вычислений (в частности, тип задания – сериализуемое, распределённое; количество необходимых вычислительных узлов).

В качестве аппаратно-программной платформы для организации распределённых вычислений была выбрана локально-вычислительная сеть 100-baseTX, объединяющая 45 персональных компьютеров, в качестве операционной системы – Ubuntu 10.10. Для организации распределённых вычислений используется MPICH. Для управления сериализуемой обработкой необходим планировщик, а для преобразования моделей из мета-языка в файлы заданий приложений – транслятор.

Анализируя результаты проектирования и проведенных оценочных вычислительных экспериментов, можно сделать следующие выводы.

1. Сериализуемая обработка не требует адаптации алгоритмов и ПО к распределённой вычислительной среде; минимизируется внутрисетевой трафик, что значительно уменьшает время вычислений при исследовании математической модели. Она может использоваться для получения спектральных зависимостей параметров и для реализации процедур усреднения по ансамблю частиц. Однако в этом случае приходится разрабатывать дополнительное ПО для управления заданиями (планировщик).

2. Прямое решение уравнений Максвелла в дифференциальной форме требует значительных затрат времени и обладает хорошей распараллеливаемостью. Эффективность использования кластера возрастает с увеличением объёма вычислений пропорционально числу компьютеров с замедлением приблизительно в 0,75 раза, обусловленным дополнительными затратами времени на передачу данных и другими накладными расходами.

3. Для каждой задачи существует предел по количеству узлов кластера, выше которого время решения не уменьшается с увеличением числа узлов, а растёт. Это связано с тем, что скорость передачи данных становится сопоставимой со скоростью их обработки. Таким образом, для каждой конкретной архитектуры вычислительно-коммуникационных средств возникает задача определения количества узлов, при котором программный комплекс будет использоваться наиболее эффективно.

## Литература

1. Наноматериалы и нанотехнологии / В.М. Анищик [и др.]; под ред. В.М. Борисенко, Н.К. Толочко. – Минск: Изд. центр БГУ, 2008. – 375 с.
2. Климов, В.В. Наноплазмоника / В.В. Климов – Москва: ФИЗМАТЛИТ, 2010. – 480 с.
3. Hellmers, J. Classification of Software for the Simulation of Light Scattering and Realization within an Internet Information Portal / J. Hellmers, T. Wriedt // Journal of Universal Computer Science. – 2010. – Vol. 16. – № 9. – P. 1176–1189.
4. МЕЕР: A flexible free-software package for electromagnetic simulations by the FDTD method / Ardavan F. Oskooi, David Roundy, Mihai Ibanescu, Peter Bermel, J.D. Joannopoulos, Steven G. Johnson // Computer Physics Communications. – 2010. – № 181. – P. 687–702.
5. Draine, B.T. User Guide to the Discrete Dipole Approximation Code DDSCAT 7.1 / B.T. Draine, P.J. Flatau // arXiv:1002.1505v1 [astro-ph.IM]. – 2010. – Режим доступа: <http://arXiv.org/abs/1002.1505v1>, свободный.
6. Doicu, A. Light Scattering by Systems of Particles: Null-field Method with Discrete Sources: Theory and Programs / A. Doicu, T. Wriedt, Y.A. Eremin. – Berlin, Heidelberg, New York: Springer, 2006. – 337 p.
7. Shaping Emission Spectra of Fluorescent Molecules with Single Plasmonic Nanoresonators / M. Ringler, A. Schwemer, M. Wunderlich, A. Nichtl, K.Kürzinger, T.A. Klar, J. Feldmann // Phys. Rev. Lett. – 2008. – Vol. 100. – № 20. – P. 3002–3006.
8. Mackowski, D.W. A multiple sphere T-matrix Fortran code for use on parallel computer clusters / D.W. Mackowski, M.I. Mishchenko // Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer. – 2011. – Vol. 112. – № 13. – P. 2182–2192.
9. Модели и средства программирования ГРИД-систем / А.Е. Дорошенко, А.П. Розенблат, К.А. Рухлис, Ю.М. Тырчак // Проблеми програмування. – 2007. – № 3. – С. 16–31.
10. Snir, M. MPI: The Complete Reference / Steve Otto, Steven Huss-Lederman, David Walker and Jack Dongarra. – MIT Press, 1996.
11. Курочка, К.С. Технология визуального объектно-ориентированного моделирования сложных систем / К.С. Курочка // Известия Гомельского государственного университета имени Ф. Скорины. – 2007. – № 5(44). – С. 36–41.