

ИЗВЕСТИЯ ВЫСШИХ УЧЕБНЫХ ЗАВЕДЕНИЙ

МАТЕРИАЛЫ ЭЛЕКТРОННОЙ ТЕХНИКИ

ТОМ 23 4/20

Индекс по каталогам «Пресса России» и «Урал Пресс» 47215



Учредитель:

Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования
«Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС» (НИТУ «МИСиС»)

*Известия высших учебных заведений.
Материалы электронной техники.
2020. Т. 23, № 4(92).*

Журнал основан в 1998 г.
Издаётся один раз в 3 месяца.

Издатель: Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС»,
119049, г. Москва, Ленинский просп., д. 4.

Почтовый адрес редакции:
119991, г. Москва, Ленинский просп., д. 4, МИСиС.

Тел.: (495) 638–45–31, внутренний 040–68,
e-mail: met.misis@inbox.ru.

Отпечатано в типографии
Издательского дома «МИСиС»,
119049, г. Москва, Ленинский просп., д. 4.
тел.: (499) 236–76–17.

Подписано в печать 25.02.2021.
Формат 60×90/8. Печать офсетная.
Заказ № 13692. Бумага офсетная.
Печ. л. 9,25. Тираж 150. Цена свободная.

Журнал зарегистрирован
в Федеральной службе по надзору в сфере связи,
информационных технологий и массовых ком-
муникаций (ПИ № ФС 77–59522 от 23.10.2014),
предыдущее свидетельство
№ 016108 от 15.05.1997 (Минпечати РФ).

Редактор М. И. Воронова
Корректор А. В. Шемерова
Верстка А. А. Космынина

Главный редактор

ПАРХОМЕНКО ЮРИЙ НИКОЛАЕВИЧ,

д-р физ.-мат. наук, проф. (АО «Гиредмет» ГНЦ РФ, Москва, Россия)

Заместители главного редактора

КИСЕЛЕВ Дмитрий Александрович, канд. физ.-мат. наук,
КОСТИШИН Владимир Григорьевич, д-р физ.-мат. наук, проф.
(НИТУ «МИСиС», Москва, Россия)

Ответственный секретарь редакции

Космынина Арина Александровна

РЕДАКЦИОННАЯ КОЛЛЕГИЯ

Акчурина Р. Х., д-р техн. наук, проф. (МИТХТ, Москва, Россия)
Асеев А. Л., акад. РАН (ИФП СО РАН, Новосибирск, Россия)
Барберо А., д-р биологии (Институт ядерных исследований, Мехико, Мексика)
Бдикин И. К., д-р физ.-мат. наук (Университет Авейро, Авейро, Португалия)
Бублик В. Т., д-р физ.-мат. наук, проф. (НИТУ «МИСиС», Москва, Россия)
Васкес Л., проф., д-р физики (Университет Комплутенс, Мадрид, Испания)
Вуль А. Я., д-р физ.-мат. наук, проф. (ФТИ им. Иоффе РАН, Санкт-Петербург, Россия)
Гуляев Ю. В., акад. РАН (ИРЭ РАН, Москва, Россия)
Двуреченский А. В., проф., член-корр. РАН (ИФП СО РАН, Новосибирск, Россия)
Казанский А. Г., д-р физ.-мат. наук (МГУ им. М. В. Ломоносова, Москва, Россия)
Калошкин С. Д., д-р физ.-мат. наук, проф. (НИТУ «МИСиС», Москва, Россия)
Кобелева С. П., канд. физ.-мат. наук, доц. (НИТУ «МИСиС», Москва, Россия)
Кожитов Л. В., д-р техн. наук, проф. (НИТУ «МИСиС», Москва, Россия)
Козлова Н. С., канд. физ.-мат. наук (НИТУ «МИСиС», Москва, Россия)
Литовченко В. Г., акад. Укр АН (ИФП им. В. Е. Лашкарева НАН Украины, Киев, Украина)
Ломоносов Е. Е., д-р техн. наук (ИОФ им. А.М. Прохорова РАН, Москва, Россия)
Мансуров З. А., д-р хим. наук, проф. (Институт проблем горения, Алматы, Казахстан)
Маппс Д. Дж., проф. (Университет Плимута, Плимут, Великобритания)
Пенг Х. Х., проф. (Чжэцзянский университет, Ханчжоу, Китай)
Петров А. В., канд. физ.-мат. наук (НПЦ НАНБ по материаловедению, Минск, Беларусь)
Сафаралиев Г. К., проф., член-корр. РАН (ДГУ, Махачкала, Россия)
Соболев Н. А., проф. (Университет Авейро, Авейро, Португалия)
Солнышкин А. В., д-р физ.-мат. наук, проф. (ТГУ, Тверь, Россия)
Табачкова Н. Ю., канд. физ.-мат. наук (ИОФ им. А.М. Прохорова РАН, Москва, Россия)
Тодуа П. А., д-р физ.-мат. наук, проф. (ОАО «НИЦПВ», Москва, Россия)
Федотов А. К., проф. (БГУ, Минск, Беларусь)
Хернандо Б., проф. (Университет Овьедо, Овьедо, Испания)
Чаплыгин Ю. А., проф., член-корр. РАН (МИЭТ, Москва, Россия)
Шварцбург А. Б., д-р физ.-мат. наук (ОИВТ РАН, Москва, Россия)
Щербачев К. Д., канд. физ.-мат. наук (XRD Eigenmann GmbH, Шнайттах, Германия)

Журнал по решению ВАК Минобразования РФ включен в «Перечень периодических и научно-технических изданий, выпускаемых в Российской Федерации, в которых рекомендуется публикация основных результатов диссертаций на соискание ученой степени доктора наук».

Izvestiya vysshikh uchebnykh zavedenii. Materialy elektronnoi tekhniki

Materials of Electronics Engineering

Vol. 23

4/20



Founders:

National University of Science
and Technology «MISIS»

**Izvestiya vuzov. Materialy
elektronnoi tekhniki =
Materials of Electronics
Engineering. 2020, vol. 23, no. 4**

*The journal was founded in 1998
and is published once in 3 months.*

Address of correspondence:
National University of Science
and Technology «MISIS»,
4 Leninskiy Prospekt, Moscow 119991, Russia
Tel./fax: +7(495)638–45–31,
e-mail: met.misis@inbox.ru,
<http://met.misis.ru>

The journal
«Izvestiya Vysshikh Uchebnykh Zavedenii.
Materialy Elektronnoi Tekhniki =
Materials of Electronics Engineering»
is registered in Federal Service for Supervision
in the Sphere of Mass Communications
(PI number FS 77–59522 of 10.23.2014),
the previous certificate number 016108
from 15.05.1997.

Editor M. I. Voronova
Corrector A. V. Shchemerova

Editor-in-Chief

Yuri N. Parkhomenko, Prof., Dr. Sci. (Phys.–Math.),
Scientific Chief of the State Scientific–Research and Design Institute of Rare–Metal Industry «Giredmet» JSC

Deputy Editor-in-Chief

Dmitry A. Kiselev, PhD, Cand. Sci. (Phys.–Math.),
Department of the Material Science of Semiconductors and Dielectrics at the MISiS

Vladimir G. Kostishin, Dr. Sci. (Phys.–Math.), Prof.,
Head of Department of the Technology of Electronic Materials at the MISiS

Assistant Editor

Arina A. Kosmylina

EDITORIAL BOARD

- R. Kh. Akchurin**, Dr. Sci. (Eng.), Prof.,
*Lomonosov Moscow State University
of Fine Chemical Technologies, Moscow, Russia*
- A. L. Aseev**, Academician of the Russian Academy of
Sciences (RAS), *Institute of Semiconductor Physics,
SB RAS, Novosibirsk, Russia*
- I. K. Bdkin**, Dr. Sci. (Phys.–Math.), *Aveiro Institute of
Nanotechnology (AIN), University of Aveiro, Aveiro,
Portugal*
- V. T. Bublik**, Dr. Sci. (Phys.–Math.), Prof.,
*National University of Science and Technology
«MISIS», Moscow, Russia*
- Yu. A. Chaplygin**, Corresponding Member of the Russian
Academy of Sciences (RAS), Prof., *National Research
University of Electronic Technology, Moscow, Russia*
- A. V. Dvurechenskii**, Corresponding Member of the
Russian Academy of Sciences (RAS), Prof.,
*Rzhanov Institute of Semiconductor Physics, SB RAS,
Novosibirsk, Russia*
- A. K. Fedotov**, Prof., *Belarusian State University,
Department of Energy Physics, Minsk, Belarus*
- Yu. V. Gulyaev**, Academician of the Russian Academy
of Sciences (RAS), *Kotelnikov Institute of Radio
Engineering and Electronics of RAS, Moscow, Russia*
- A. Heredia-Barbero**, PhD, Dr. (Biol.), *Instituto de
Ciencias Nucleares de la UNAM, Mexico City, Mexico*
- B. Hernando**, Prof., *Universidad de Oviedo, Oviedo, Spain*
- S. D. Kaloshkin**, Dr. Sci. (Phys.–Math.), Prof., *National
University of Science and Technology «MISIS»,
Moscow, Russia*
- A. G. Kazanskii**, Dr. Sci. (Phys.–Math.), *Lomonosov
Moscow State University, Moscow, Russia*
- S. P. Kobeleva**, Cand. Sci. (Phys.–Math.), Assoc. Prof.,
*National University of Science and Technology
«MISIS», Moscow, Russia*
- L. V. Kozhitov**, Dr. Sci. (Phys.–Math.), Prof., *National
University of Science and Technology «MISIS»,
Moscow, Russia*
- N. S. Kozlova**, Cand. Sci. (Phys.–Math.), *National
University of Science and Technology «MISIS»,
Moscow, Russia*
- V. G. Litovchenko**, Academician of the Ukrainian
Academy of Sciences, *Institute of Semiconductors
Physics, National Academy of Sciences in Ukraine,
Kiev, Ukraine*
- E. E. Lomonova**, Dr. Sci. (Eng.), A.M. Prokhorov General
Physics Institute, *Russian Academy of Sciences,
Moscow, Russia*
- Z. A. Mansurov**, Dr. Sci. (Chim.), Prof., *Al Farabi Kazakh
National University, Institute of Combustion Problems,
Almaty, Kazakhstan*
- D. J. Mapps**, Prof., *University of Plymouth, Plymouth,
United Kingdom*
- H.–X. Peng**, Prof., *Zhejiang University, Hangzhou, China*
- A. V. Petrov**, Cand. Sci. (Phys.–Math.), *Scientific Practical
Materials Research Centre of NAS of Belarus, Minsk,
Belarus*
- G. K. Safaraliev**, Corresponding Member
of the Russian Academy of Sciences (RAS), Prof.,
*Dagestan State University, Makhachkala,
Russia*
- K. D. Shcherbachev**, Cand. Sci. (Phys.–Math.),
XRD Eigenmann GmbH, Schnaittach, Germany
- A. B. Shvartsburg**, Dr. Sci. (Phys.–Math.), Prof., *Joint Institute
for High Temperatures Russian Academy of Sciences,
Moscow, Russia*
- N. A. Sobolev**, Prof., *Aveiro University, Aveiro, Portugal*
- A. V. Solnyshkin**, Dr. Sci. (Phys.–Math.), Prof., *Tver State
University, Tver, Russia*
- N. Yu. Tabachkova**, Cand. Sci. (Phys.–Math.),
*A.M. Prokhorov General Physics Institute, Russian
Academy of Sciences, Moscow, Russia*
- P. A. Todua**, Dr. Sci. (Phys.–Math.), Prof., *Research
Center for Surface and Vacuum, Moscow, Russia*
- L. Vazquez**, Ph. D., Prof., *Universidad Complutense
de Madrid, Madrid, Spain*
- A. Ya. Vul'**, Dr. Sci. (Phys.–Math.), Prof., *Ioffe Physico–
Technical Institute, Saint Petersburg, Russia*

*In accordance with a resolution of the Higher Attestation Committee at the Ministry of Education of the Russian Federation,
the Journal is included in the «List of Periodical and Scientific and Technical Publications Issued in the Russian Federation
in which the Publication of the Main Results of Dr.Sci. Theses is Recommended».*

СОДЕРЖАНИЕ

И. В. Запороцкова, Е. С. Дрючков, Н. П. Борознина, Л. В. Кожитов, А. В. Попкова Поверхностно–модифицированная аминной группой бороуглеродная BC_5 нанотрубка как элемент сенсорного устройства: теоретические исследования.....	253
--	-----

НАНОМАТЕРИАЛЫ И НАНОТЕХНОЛОГИИ

Д. Г. Муратов, Л. В. Кожитов, Т. М. Казарян, А. А. Васильев, А. В. Попкова, Е. Ю. Коровин Синтез и электромагнитные свойства нанокompозитов FeCoNi/C на основе поливинилового спирта.....	260
--	-----

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ В МАТЕРИАЛОВЕДЕНИИ ЭЛЕКТРОННЫХ КОМПОНЕНТОВ*

А. А. Зацаринный, К. К. Абгарян Актуальные проблемы создания исследовательской инфраструктуры для синтеза новых материалов в рамках цифровой трансформации общества	270
--	-----

А. А. Зацаринный, Ю. А. Степченков, Ю. Г. Дьяченко, Ю. В. Рождественский Самосинхронные схемы как база создания высоконадежных высокопроизводительных компьютеров следующего поколения.....	277
--	-----

В. А. Кондрашев, С. А. Денисов Интерфейсы научных сервисов системы моделирования новых материалов на цифровой платформе	282
--	-----

К. И. Волович Оценка загрузки гибридного вычислительного комплекса при выполнении задач моделирования в материаловедении	289
---	-----

Е. С. Гаврилов, Н. А. Зайцев Программные средства для индексирования и предметно–ориентированного поиска научных статей по кристаллографии	297
---	-----

О. В. Уварова, С. И. Уваров Использование машиннообучаемых потенциалов межатомного взаимодействия для изучения свойств кристаллических структур	304
--	-----

С. А. Денисов, К. И. Волович, В. А. Кондрашев Опыт ФИЦ ИУ РАН в предоставлении облачных сервисов высокопроизводительных вычислений для задач материаловедения.....	311
---	-----

Список статей, опубликованных в 2020 г.....	321
--	------------

* Статьи подготовлены по материалам докладов, представленных на II–й международной конференции «Математическое моделирование в материаловедении электронных компонентов», Москва, 19–21 октября 2020 г.

CONTENTS

I. V. Zaporotskova, E. S. Dryuchkov, N. P. Boroznina, L. V. Kozhitov, A. V. Popkova

Surface-modified boroncarbon BC₅ nanotube with amine group as a sensor device element:

theoretical research 253—259

NANOMATERIALS AND NANOTECHNOLOGY

**D. G. Muratov, L. V. Kozhitov, T. M. Kazaryan, A. A. Vasil'ev,
A. V. Popkova, E. Yu. Korovin**

Nanocomposites FeCoNi/C based on polyvinyl alcohol:

synthesis and electromagnetic properties 260—269

MATHEMATICAL MODELING IN MATERIALS SCIENCE OF ELECTRONIC COMPONENTS

A. A. Zatsarinnyy, K. K. Abgaryan

Current problems of creation of research infrastructure for synthesis of new materials

in the framework of the digital transformation of society 270—276

A. A. Zatsarinnyy, Yu. A. Stepchenkov, Yu. G. Diachenko, Yu. V. Rogdestvenski

Self-timed circuits as a basis for developing next generation high-reliable

high-performance computers 277—281

V. A. Kondrashev, S. A. Denisov

System interface of scientific services of a digital platform for multiscale modeling 282—288

K. I. Volovich

Estimation of the workload of a hybrid computing cluster when performing modeling tasks

in materials science 289—296

E. S. Gavrilov, N. A. Zaitsev

Software tools for indexing and subject-oriented search of scientific articles

on crystallography 297—303

O. V. Uvarova, S. I. Uvarov

Machine-learning based interatomic potential for studying of crystal structures properties 304—310

S. A. Denisov, K. I. Volovich, V. A. Kondrashev

Experience of FRC CSC RAS in providing high-performance computing cloud services

for materials science problems 311—320

List of publications for 2020 321—322

УДК 621.315; 620.22-022.532

Поверхностно–модифицированная аминной группой бороуглеродная BC_5 нанотрубка как элемент сенсорного устройства: теоретические исследования

© 2020 г. И. В. Запороцкова^{1,§}, Е. С. Дрючков¹, Н. П. Борознина¹,
Л. В. Кожитов², А. В. Попкова³

¹ *Волгоградский государственный университет,
Университетский просп., д. 100, Волгоград, 400062, Россия*

² *Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС»,
Ленинский просп., д. 4, Москва, 119049, Россия*

³ *НИИ НПО «ЛУЧ», ул. Железнодорожная, д. 24, Подольск, 142103, Россия*

Аннотация. Модификация бороуглеродных нанотрубок функциональными группами актуальна в связи с интенсивным развитием наноиндустрии, в частности, нано– и микроэлектроники. Модифицированная таким образом нанотрубка может быть использована в качестве элемента сенсорного устройства для обнаружения микроколичеств различных веществ, например, металлов, входящих в состав солей и щелочей. В работе обсуждается возможность создания высокоэффективного сенсора на базе однослойной бороуглеродной BC_5 нанотрубки, поверхностно–модифицированной функциональной аминной группой ($-NH_2$). Результаты квантово–химических исследований показали, что функциональная аминная группа присоединяется к бороуглеродной нанотрубке (БУНТ) типа (6, 0) на расстоянии 0,16 нм (при модификации как на поверхностный атом углерода, так и на атом бора), а к БУНТ типа (6, 6) — на расстоянии 0,16 нм при присоединении группы к атому углерода и 0,17 нм при присоединении к атому, что говорит о возникновении химической связи между исследуемыми БУНТ и аминной группой. Представлены результаты компьютерного моделирования взаимодействия между поверхностно–модифицированной BC_5 нанотрубкой и атомами щелочных металлов (литий, натрий, калий), подлежащими инициализации. Исследовано сенсорное взаимодействие модифицированной бороуглеродной наносистемы с атомами металлов, при котором производится идентификация выбранных атомов на определенном расстоянии. При взаимодействии с атомами щелочных металлов в комплексе « $BC_5 + NH_2$ » увеличивает число носителей, обусловленное переносом электронной плотности от атомов металла к модифицированной БУНТ. Результаты, излагаемые в данной статье, были получены в рамках модели молекулярного кластера путем квантово–химических расчетов с использованием расчетного метода DFT с обменно–корреляционным функционалом B3LYP (валентно–расщепленный базисный набор 6–31G). Было доказано, что модифицированная аминной группой бороуглеродная BC_5 нанотрубка показывает сенсорный отклик в отношении вышеуказанных атомов щелочных металлов и может использоваться в качестве элемента сенсорного устройства.

Ключевые слова: бороуглеродная нанотрубка, сенсорные свойства, функциональная группа, аминная группа, поверхностная модификация

Введение

В области материаловедения применительно к нано– и микроэлектронике наблюдается огромный интерес исследователей в отношении углеродных нанотрубок ввиду их уникальных свойств [1—7], что позволяет надеяться на их широкое практическое применение, например, в качестве добавки в полимеры, для использования в плоских панелях дисплеев, преобразователях энергии, хранения водорода, в качестве нанозондов, датчиков, суперконденсаторов и др. [8—13]. Одним из применений нанотрубок в на–

Запороцкова Ирина Владимировна^{1,§} — доктор физ.–мат. наук, профессор, директор института приоритетных технологий, <https://orcid.org/0000-0002-9486-2482>, e-mail: zaporotskova@volsu.ru; **Дрючков Евгений Сергеевич**¹ — аспирант, <https://orcid.org/0000-0002-8995-9773>, e-mail: dryuchkov@volsu.ru; **Борознина Наталья Павловна**¹ — доктор физ.–мат. наук, профессор, <https://orcid.org/0000-0003-0813-6888>, e-mail: boroznina.natalya@volsu.ru; **Кожитов Лев Васильевич**² — доктор техн. наук, профессор, <https://orcid.org/0000-0002-4973-1328>, e-mail: kozitov@misis.ru; **Попкова Алёна Васильевна**³ — старший научный сотрудник, <https://orcid.org/0000-0003-4657-9305>, e-mail: popkova-alena@rambler.ru

§ Автор для переписки

ноэлектронике может быть создание на их основе новых полупроводниковых гетероструктур. Неподдельным интересом пользуются наноструктуры, где атомы углерода заменены на иные элементы [14–16]. Особое внимание уделяется нанотрубкам, в которых поверхностные атомы углерода частично заменены атомами бора — бороуглеродным нанотрубкам (**БУНТ**) [17–19]. БУНТ были получены заменой атомов углерода на атомы бора в потоке тяжелого бесцветного газа трихлорида бора в первом десятилетии XXI в. [20]. Полученная таким образом наноструктура оказалась стабильным полупроводником. Кроме того, бороуглеродные нанотрубки превосходят углеродные своими сорбционными свойствами [21]. Данные исследования позволяют говорить о том, что подобные наноструктуры способны к их применению в качестве сверхминиатюрных устройств, а именно сенсорных датчиков.

В работах [22–23] проведены квантово-химические расчеты, нацеленные на исследование возможности создания сенсорных устройств на основе поверхностно-функционализированных группой — COOH бороуглеродных нанотрубок типа BC_3 (на один гексагон приходится 2 атома бора) и на основе углеродных нанотрубок, поверхностно-модифицированных функциональной аминной группой. Однако поиск новых вариантов модифицированных нанотрубных систем, которые могут быть использованы в качестве датчиков сенсорных устройств по-прежнему актуальны, так как позволяют расширить класс используемых материалов и определить наиболее эффективные из них по степени сенсорного отклика.

В представляемой работе проводится теоретическое исследование взаимодействия между поверхностно-модифицированной аминогруппой бороуглеродной BC_5 нанотрубкой и атомами щелочных металлов (литий, натрий, калий), подлежащими инициализации. Исследовано сенсорное взаимодействие модифицированной бороуглеродной наносистемы с атомами металлов, при котором производится идентификация выбранных атомов на определенном расстоянии. Для выполнения квантово-химических расчетов была использована модель молекулярного кластера и расчетный метод DFT с обменно-корреляционным функционалом B3LYP (валентно-расщепленный базисный набор 6–31G) [24].

Методы исследования

Метод функционала плотности DFT используется в сочетании с различными функционалами [24]. Из известных, большой популярностью среди исследователей пользуется гибридный функционал B3LYP. В его основе лежат три компонента обменного функционала: точный обменный оператор

Хартри—Фокка, функционалы Бекке и Слейтера. Корреляционная часть — сочетание функционала Ли—Янга—Парра (**LYP**) и Воско—Вилка—Нусара (**VWN**). Отличительной чертой такого подхода является то, что три обменных компонента принимаются с помощью весовых коэффициентов, выбранных на основе сравнения с экспериментальными данными. В результате подход принимает на себя особенности полуэмпирического метода. Оказалось, что его точность в большинстве случаев значительно выше, чем у методологически “чистых” функционалов. По всей видимости, это следствие того, что обменная энергия носит не локальный характер, и любая попытка свести ее к локальным функционалам приводит к ошибкам. Обменный функционал Хартри—Фокка позволяет это учитывать.

Таким образом, в представленном теоретическом исследовании был использован функционал B3LYP в рамках теории функционала плотности. Для расчетов использован базисный набор 6–31G, который может быть эффективно применен для атомов от H до Zn. В данном наборе валентность атомных орбиталей определена внутренней и внешней частями, где первая более компактна, а вторая — более диффузна, соответственно. Аббревиатура 6–31G означает, что шесть гауссовских примитивных функций используются для того, чтобы описать орбитальную зону ядра, s- и p-орбитали разделены на компактную часть, составленную тремя гауссовскими функциями, и диффузную часть, которая представлена единственной гауссовской функцией [25].

Результаты и их обсуждение

Первоначальным этапом исследования является изучение возможности присоединения аминной функциональной группы (NH_2) к поверхности бороуглеродной нанотрубки типа BC_5 (на один гексагон приходится 1 атом бора и 5 атомов углерода). Для этого в рамках модели молекулярного кластера были рассмотрены два фрагмента (кластера) бороуглеродных нанотрубок. Один фрагмент имеет хиральность (6, 0), имеющую название *zig-zag*, и другой фрагмент с хиральностью (6, 6), называемой *armchair*. Границы построенного для исследования кластера замкнуты псевдоатомами водорода для снятия краевых эффектов.

Примерно посередине кластера были выбраны атомы C и B, на которые по очереди будет присоединяться аминная функциональная группа. Середина кластера была выбрана для того, чтобы исключить краевые эффекты при функционализации БУНТ. Само присоединение аминной группы к трубке происходило пошагово, а именно: с шагом, равным 0,01 нм, функциональная группа приближалась к атомам C или B, выбранным ранее, а затем фиксировалась.

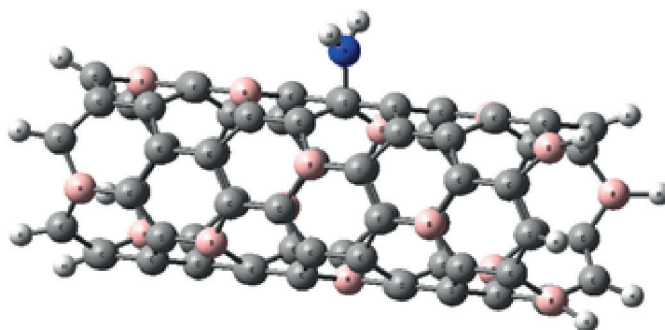


Рис. 1. Модель кластера бороуглеродной BC_5 нанотрубки (6, 0) с модификацией аминной группой, присоединенной к атому углерода поверхности трубки

Fig. 1. Boron–carbon BC_5 cluster model of nanotube (6, 0) modified with an amine group attached to the carbon atom of the tube surface

сировалась энергия, полученная на каждом шаге приближения. На рис. 1 показана модель кластера бороуглеродной BC_5 нанотрубки (6, 0) с модификацией аминной группой, присоединенной к атому углерода поверхности трубки. По данным, полученным в результате моделирования процесса поверхностной функционализации нанотрубки, были построены энергетические кривые взаимодействия (рис. 2), анализ которых показал, между нанотрубкой и функциональной группой устанавливается химическая связь, характеристики которой представлены в табл. 1.

Далее был изучен механизм взаимодействия лития, натрия, калия с атомами водорода аминной группы, модифицирующей поверхность однослойной BC_5 нанотрубки. Моделирование процесса выполнялось следующим образом: атом металла приближался к одному из атомов водорода группы с шагом 0,01 нм, на каждом шаге определялась энергия системы. На основании этих данных были построены энергетические кривые, анализируя которые мы смогли определить расстояния и энергии возникающих взаимодействий (табл. 2) и понять, что атомы и поверхностно-модифицированная

Таблица 1

Характеристики присоединения аминной функциональной группы к поверхностным атомам углерода и бора BC_5 нанотрубок типа (6, 0) и (6, 6)

[Attachment characteristics of the amine functional group to the surface carbon and boron atoms BC_5 nanotubes of types (6, 0) and (6, 6)]

Связь	r_{B3} , нм	E_{B3} , эВ
<i>(6, 0) нанотрубка</i>		
C—NH ₂	0,16	–0,493
B—NH ₂	0,16	–0,865
<i>(6, 6) нанотрубка</i>		
C—NH ₂	0,16	–0,957
B—NH ₂	0,17	–1,173

БУНТ взаимодействуют друг с другом посредством малых сил Ван-дер-Ваальса. При этом атомы металлов присоединяются к функциональной группе безбарьерно. Если бы между модифицированным

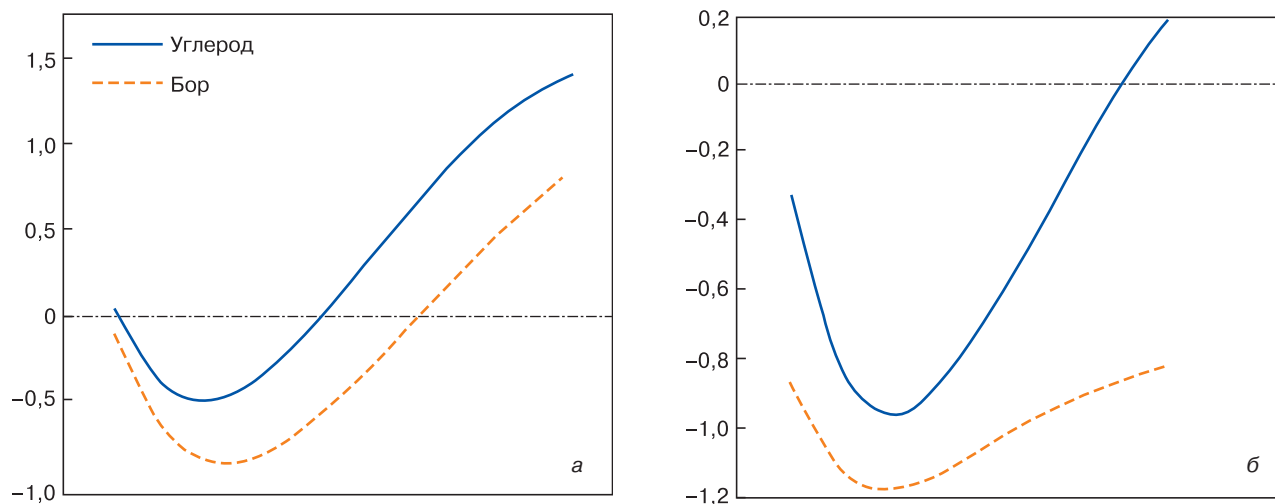


Рис. 2. Энергетические кривые взаимодействия аминной группы с БУНТ: а — (6, 0); б — (6, 6)

Fig. 2. Energy curves for the interaction of the amine group with BCNT: (a) (6, 0); (б) (6, 6)

Таблица 2

**Характеристики взаимодействия атомов щелочных металлов (Li, Na, K)
с модифицированной БУНТ**
[Characteristics of the interaction of alkali metal atoms (Li, Na, K) with modified BCNT]

Межатомная связь	$r_{вз}$, нм	$E_{вз}$, эВ	q	$r_{вз}$, нм	$E_{вз}$, эВ	q
	(6, 0) нанотрубка			(6, 6) нанотрубка		
Модификация на атом углерода						
Li—H	0,20	−0,773	0,235	0,17	−0,668	0,333
Na—H	0,19	−5,935	0,911	0,19	−5,083	0,922
K—H	0,24	−1,355	0,748	0,24	−0,624	0,913
Модификация на атом бора						
Li—H	0,30	−0,145	0,014	0,16	−0,997	0,33
Na—H	0,19	−5,131	0,915	0,20	−5,083	0,921
K—H	0,25	−0,645	0,771	0,24	−0,578	0,731

кластером и атомами щелочных металлов образовывалась химическая связь, это со временем привело бы к разрушению сенсорного датчика. Поскольку связь не образовывается, то полученная система пригодна к многократной работе. Анализ зарядового состояния системы показал, что при взаимодействии с атомами щелочных металлов в комплексе «BC₅ + NH₂» увеличивает число носителей, обусловленное переносом электронной плотности от атомов металла к модифицированной БУНТ.

В продолжение исследования было проведено моделирование процесса сканирования произвольной поверхности, содержащей атомы Li, K, Na, поверхностно-модифицированной аминной группой бороуглеродной BC₅ нанотрубкой и определена ее чувствительность по отношению к выбранным атомам. Процесс моделировался пошаговым движением атома металла параллельно оси нанотрубки вдоль ее поверхности по направлению к аминной группе. Моделировался вариант движения, когда на усредненном расстоянии взаимодействия атомов щелочных металлов (табл. 2) последние последовательно проходили мимо атомов Н. Проанализировав полученные результаты, удалось построить кривые потенциальной энергии, на каждой из которых присутствует минимум, означающий наибольший сенсорный отклик системы. Минимум удалось обнаружить, когда атомы, подлежащие инициализации, находились между атомами водорода аминной груп-

Таблица 3

**Характеристики сенсорного отклика полученных систем на
основе BC₅ типа (6, 0) и (6, 6) на присутствие атомов щелочных
металлов (Li, Na, K)**

[Sensory response characteristics of the resulting BC₅-based systems
of types (6, 0) and (6, 6) to the presence of alkali metal atoms (Li, Na, K)]

Атом металла	$r_{\text{в3}}, \text{нм}$	$E_{\text{в3}}, \text{эВ}$	$r_{\text{в3}}, \text{нм}$	$E_{\text{в3}}, \text{эВ}$
	(6, 0) нанотрубка		(6, 6) нанотрубка	
Модификация на атом углерода				
Li	0,32	−0,837	0,16	−0,887
Na	0,22	−6,012	0,22	−5,173
K	0,25	−1,398	0,26	−0,67
Модификация на атом бора				
Li	0,36	−0,219	0,22	−1,358
Na	0,19	−5,216	0,21	−5,080
K	0,26	−0,695	0,26	−0,665

пы. В табл. 3 приведены результаты сканирования для описанного пути.

Заключение

В результате исследования был изучен механизм взаимодействия аминогруппы с поверхностью бороуглеродной нанотрубки при модифицировании, производимом путем присоединения группы либо к атому углерода, либо к атому бора поверхности. В обоих случаях доказана возможность создания устойчивого комплекса «BC₅ + аминогруппа», который может быть использован в качестве датчика сенсорного устройства.

Исследована возможность взаимодействия атомов щелочных металлов, таких как калий, натрий, литий, с атомом водорода аминогруппы, модифицирующей поверхность бороуглеродных BC_5 нанотрубок с хиральностью (6, 0) и (6, 6). Процесс сканирования произвольной поверхности, содержащей вышеперечисленные атомы, созданной сенсорной системой на основе бороуглеродной BC_5 нанотрубки, поверхностно-модифицированной аминогруппой, показал, что система обеспечивает возникновение сенсорного отклика на присутствие лития, натрия или калия. Полученный сенсорный датчик возможно использовать многократно, без последствий разрушения.

Библиографический список

1. Dresselhaus M. S., Dresselhaus G., Eklund P. C. Science of Fullerenes and Carbon Nanotubes. London: Academic Press, Inc., 1996. 965 p.
2. Saito R., Dresselhaus M. S., Dresselhaus G. Physical properties of carbon nanotubes. London: Imperial College Press, 1998. 262 p.
3. Запорожкова И. В. Углеродные и неуглеродные наноматериалы и композитные структуры на их основе: строение и электронные свойства. Волгоград: ВолГУ, 2009. 490 с.
4. Mohamed A. E.-M. A., Mohamed M. A. Carbon nanotubes: Synthesis, characterization, and applications. In: Carbon Nanomaterials for Agri-food and Environmental Applications. Elsevier Inc., 2019. P. 21—32. DOI: 10.1016/B978-0-12-819786-8.00002-5
5. Arunkumar T., Karthikeyan R., Ram Subramani R., Viswanathan K., Anish M. Synthesis and characterisation of multi-walled carbon nanotubes (MWCNTs) // International Journal of Ambient Energy. 2020. V. 41, N 4. P. 452—456. DOI: 10.1080/01430750.2018.1472657
6. Tomilin O. B., Rodionova E. V., Rodin E. A., Poroshina M. D., Frolov A. S. The effect of carbon nanotube modifications on their emission properties // Fullerenes Nanotubes and Carbon Nanostructures. 2020. V. 28, N 2. P. 123—128. DOI: 10.1080/1536383X.2019.1680978
7. Savin A. V., Savina O. I. An effect of chemical modification of surface of carbon nanotubes on their thermal conductivity // Physics of the Solid State. 2019. V. 61, N 2. P. 279—284. DOI: 10.1134/S1063783419020252
8. Dresselhaus M. S., Dresselhaus G., Avouris P. Carbon nanotubes: synthesis, structure, properties, and application. Berlin: Springer-Verlag, 2000. 464 p.
9. Дьячков П. Н. Электронные свойства и применение нанотрубок. М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2010. 488 с.
10. Wojtkiewicz J., Brzostowski B., Pilch M. Electronic and optical properties of carbon nanotubes directed to their applications in solar cells // PRAM 2019: Parallel Processing and Applied Mathematics. Poland, 2020. P. 341—349. DOI: 10.1007/978-3-030-43222-5_30
11. Suhito I. R., Koo K.-M., Kim T. H. Recent advances in electrochemical sensors for the detection of biomolecules and whole cells // Biomedicine. 2021. V. 9, N 1. P. 1—20. DOI: 10.3390/biomedicines9010015
12. Park S. H., Bai S.-J., Song, Y. S. Improved performance of carbon nanotubes embedded photomicrobial solar cell // Nanotechnology. 2020. V. 31, N 11. P. 115401. DOI: 10.1088/1361-6528/ab5b2a
13. Liu H., Li Y. Modified carbon nanotubes for hydrogen storage at moderate pressure and room temperature // Fullerenes Nanotubes and Carbon Nanostructures. 2020. V. 28, N 8. P. 663—670. DOI: 10.1080/1536383X.2020.1738396
14. Manut A., Zoofakar A. S., Mamat M. H., Ab Ghani N. S., Zolkapli M. Characterization of titanium dioxide (TiO_2) nanotubes for resistive-type humidity sensor // IEEE International Conference on Semiconductor Electronics, Proceedings (ICSE). Vietnam, 2020. P. 104—107. DOI: 10.1109/ICSE49846.2020.9166854
15. Aydın M. T. A., Hoşgün H. L. Hydrothermal synthesis and characterization of vanadium-doped titanium dioxide nanotubes // Journal of the Australian Ceramic Society. 2020. V. 56, N 2. P. 645—651. DOI: 10.1007/s41779-019-00382-y
16. Hussain R. A., Hussain I. Metal telluride nanotubes: Synthesis, and applications // Materials Chemistry and Physics. 2020. V. 256. P. 123691. DOI: 10.1016/j.matchemphys.2020.123691
17. Fujisawa K., Hayashi T., Endo M., Terrones M., Kim J. H., Kim Y. A. Effect of boron doping on the electrical conductivity of metallicity-separated single walled carbon nanotubes // Nanoscale. 2018. V. 10, N 26. P. 12723—12733. DOI: 10.1039/c8nr02323a
18. Liu Y., Khavrus V., Lehmann T., Yang H.-L., Stepien L., Greifzu M., Oswald S., Gemming T., Bezugly V., Cuniberti G. Boron-doped single-walled carbon nanotubes with enhanced thermoelectric power factor for flexible thermoelectric devices // ACS Applied Energy Materials. 2020. V. 3, N 3. P. 2556—2564. DOI: 10.1021/acsam.9b02243
19. Fakhrabadi M. M. S., Allahverdizadeh A., Norouzfard V., Dadashzadeh B. Effects of boron doping on mechanical properties and thermal conductivities of carbon nanotubes // Solid State Communications. 2012. V. 152, N 21. P. 1973—1979. DOI: 10.1016/j.ssc.2012.08.003
20. Rubio A. Formation and electronic properties of BC_3 single-wall nanotubes upon boron substitution of carbon nanotubes // Physics Review Series B. Condensed Matter. 2004. V. 69. P. 245403. DOI: 10.1103/PhysRevB.69.245403
21. Debnarayan J., Sun C.-L., Chen L.-C., Chen K.-H. Effect of chemical doping of boron and nitrogen on the electronic, optical, and electrochemical properties of carbon nanotubes // Progress in Materials Science. 2013. V. 58. P. 565. DOI: 10.1016/j.pmatsci.2013.01.003
22. Boroznina N. P., Boroznin S. V., Zaporotskova I. V., Kozhitov L. V., Popkova A. V. On the practicability of sensors based on surface carboxylated boron-carbon nanotubes // Russian Journal of Inorganic Chemistry. 2019. V. 64, N 1. P. 74—78. DOI: 10.1134/S0036023619010029
23. Boroznina N. P., Zaporotskova I. V., Boroznin S. V., Dryuchkov E. S. Sensors based on amino group surface-modified CNTs // Chemosensors. 2019. V. 7, N 1. P. 11. DOI: 10.3390/CHEMOSENS7010011
24. Koch W., Holthausen M. C. A Chemist's Guide to Density Functional Theory. Weinheim: Wiley-VCH, 2001. 294 p.
25. Rassolov V. A., Ratner M. A., Pople J. A., Redfern P. C., Curtiss L. A. J. 6-31G* basis set for third-row atoms // Journal of Computational Chemistry. 2001. V. 22, N 9. P. 976—984. DOI: 10.1002/jcc.1058

Статья поступила в редакцию 27 января 2021 г.

Izvestiya vuzov. Materialy elektronnoi tekhniki = *Materials of Electronics Engineering*. 2020, vol. 23, no. 4, pp. 253—259.
DOI: 10.17073/1609-3577-2020-4-253-259

Surface-modified boroncarbon BC₅ nanotube with amine group as a sensor device element: theoretical research

I. V. Zaporotskova^{1,§}, E. S. Dryuchkov¹, N. P. Boroznina¹, L. V. Kozhitov², A. V. Popkova³

¹ *Volgograd State University,
100 Universitetskiy Prospekt, Volgograd 400062, Russia*

² *National University of Science and Technology MISiS,
4 Leninsky Prospekt, Moscow 119049, Russia*

³ *LUCH Research and Production Association,
24 Zheleznodorozhnaya Str., Podolsk, Moscow Region 142103, Russia*

Abstract. The modification of boron–carbon nanotubes by functional groups is relevant in connection with the intensive development of the nano–industry, in particular, nano– and microelectronics. The thus modified nanotube can be used as an element of a sensor device for detecting micro amounts of various substances, for example metals included in salts and alkalis. The possibility of creating a highly effective sensor based on a single–layer boron–carbon BC₅ nanotube with a surface modified functional amine group (—NH₂) is being discussed in this paper. Results of quantum–chemical studies showed that the functional amine group connecting to the boron–carbon nanotube (BCNT) type (6, 0) at a distance of 0.16 nm (when modified to both a surface carbon atom and a boron atom), and to BCNT type (6, 6) — at a distance of 0.16 nm when the group connecting to the carbon atom and 0.17 nm when connecting to the boron atom, which indicates the emergence of a chemical bond between the investigated BCNT and the amine group. The results of computer simulation of interaction between surface–modified BC₅ nanotube and alkali metal atoms (lithium, sodium, potassium) to be initialized are presented. The sensory interaction of the modified boron–carbon nanosystem with metal atoms is investigated, at which the selected atoms are identified at a certain distance. When reacting with alkali metal atoms in the BC₅ + NH₂ complex, it increases the number of carriers due to the transfer of electron density from metal atoms to modified BCNT. The results presented in this paper were obtained within the molecular cluster model by quantum–chemical calculations using the calculating DFT method with exchange–correlation functionality B3LYP (valence–split basis set 6–31G). It has been shown that the amine group modified boron–carbon BC₅ nanotube shows a sensory response to the above alkali metal atoms and can be used as an element of the sensor device.

Keywords: boron–carbon nanotube, sensor properties, functional group, amino group, surface modification

References

1. Dresselhaus M. S., Dresselhaus G., Eklund P. C. *Science of Fullerenes and Carbon Nanotubes*. London: Academic Press, Inc., 1996, 965 p.
2. Saito R., Dresselhaus M. S., Dresselhaus G. *Physical properties of carbon*. London: Imperial College Press, 1998, 262 p.
3. Zaporotskova I. V. *Uglerodnye i neuglerodnye nanomaterialy i kompozitnye struktury na ikh osnove: stroenie i elektronnyye svoystva* [Carbon and non-carbon nanomaterials and composite structures based on them: structure and electronic properties]. Volgograd: VolSU, 2009, 490 p. (In Russ.)
4. Mohamed A. E.–M. A., Mohamed M. A. Carbon nanotubes: Synthesis, characterization, and applications. In: *Carbon Nanomaterials for Agri–food and Environmental Applications*. Elsevier Inc., 2019, pp. 21—32. DOI: 10.1016/B978-0-12-819786-8.00002-5
5. Arunkumar T., Karthikeyan R., Ram Subramani R., Viswanathan K., Anish M. Synthesis and characterisation of

multi-walled carbon nanotubes (MWCNTs). *International Journal of Ambient Energy*, 2020, vol. 41, no. 4, pp. 452—456. DOI: 10.1080/01430750.2018.1472657

6. Tomilin O. B., Rodionova E. V., Rodin E. A., Poroshina M. D., Frolov A. S. The effect of carbon nanotube modifications on their emission properties. *Fullerenes Nanotubes and Carbon Nanostructures*, 2020, vol. 28, no. 2, pp. 123—128. DOI: 10.1080/1536383X.2019.1680978

7. Savin A. V., Savina O. I. An effect of chemical modification of surface of carbon nanotubes on their thermal conductivity. *Physics of the Solid State*, 2019, vol. 61, no. 2, pp. 279—284. DOI: 10.1134/S1063783419020252

8. Dresselhaus M. S., Dresselhaus G., Avouris P. Carbon nanotubes: synthesis, structure, properties, and application. Berlin: Springer–Verlag, 2000, 464 p.

9. D'yachkov P. N. *Elektronnyye svoystva i primeneniye nanotrubok* [Electronic properties and use of nanotubes]. Moscow: BINOM. Laboratoriya znaniy, 2010, 488 p. (In Russ.)

10. Wojtkiewicz J., Brzostowski B., Pilch M. Electronic and optical properties of carbon nanotubes directed to their applications in solar cells. *PRAM 2019: Parallel Processing and Applied Mathematics*. Poland, 2020, pp. 341—349. DOI: 10.1007/978-3-030-43222-5_30

11. Suhito I. R., Koo K.–M., Kim T. H. Recent advances in electrochemical sensors for the detection of biomolecules and whole cells. *Biomedicines*, 2021, vol. 9, no. 1, pp. 1—20. DOI: 10.3390/biomedicines9010015

12. Park S. H., Bai S.–J., Song Y. S. Improved performance of carbon nanotubes embedded photomicrobial solar cell. *Nanotechnology*, 2020, vol. 31, no. 11, p. 115401. DOI: 10.1088/1361-6528/ab5b2a

13. Liu H., Li Y. Modified carbon nanotubes for hydrogen storage at moderate pressure and room temperature. *Fullerenes Nano-*

Information about authors:

Irina V. Zaporotskova^{1,§} — Dr. Sci. (Phys.–Math.), Professor, Director of the Institute of Priority Technologies, <https://orcid.org/0000-0002-9486-2482>, e-mail: zaporotskova@volsu.ru; **Evgeniy S. Dryuchkov**¹ — Postgraduate Student, <https://orcid.org/0000-0002-8995-9773>, e-mail: dryuchkov@volsu.ru; **Nataliya P. Boroznina**¹ — Dr. Sci. (Phys.–Math.), Professor, <https://orcid.org/0000-0003-0813-6888>, e-mail: boroznina.natalya@volsu.ru; **Lev V. Kozhitov**² — Dr. Sci. (Eng.), Professor, <https://orcid.org/0000-0002-4973-1328>, e-mail: kozhitov@misys.ru; **Alena V. Popkova**³ — Senior Researcher, <https://orcid.org/0000-0003-4657-9305>, e-mail: popkova-alena@rambler.ru

§ Corresponding author

tubes and Carbon Nanostructures, 2020, vol. 28, no. 8, pp. 663—670. DOI: 10.1080/1536383X.2020.1738396

14. Manut A., Zoofakar A. S., Mamat M. H., Ab Ghani N. S., Zolkapli M. Characterization of titanium dioxide (TiO₂) nanotubes for resistive-type humidity sensor. *IEEE International Conference on Semiconductor Electronics, Proceedings (ICSE)*, Vietnam, 2020, pp. 104—107. DOI: 10.1109/ICSE49846.2020.9166854

15. Aydın M. T. A., Hoşgün H. L. Hydrothermal synthesis and characterization of vanadium-doped titanium dioxide nanotubes. *Journal of the Australian Ceramic Society*, 2020, vol. 56, no. 2, pp. 645—651. DOI: 10.1007/s41779-019-00382-y

16. Hussain R. A., Hussain I. Metal telluride nanotubes: Synthesis, and applications. *Materials Chemistry and Physics*, 2020, vol. 256, p. 123691. DOI: 10.1016/j.matchemphys.2020.123691

17. Fujisawa K., Hayashi T., Endo M., Terrones M., Kim J. H., Kim Y. A. Effect of boron doping on the electrical conductivity of metallicity-separated single walled carbon nanotubes. *Nanoscale*, 2018, vol. 10, no. 26, pp. 12723—12733. DOI: 10.1039/c8nr02323a

18. Liu Y., Khavrus V., Lehmann T., Yang H.-L., Stepien L., Greifzu M., Oswald S., Gemming T., Bezugly V., Cuniberti G. Boron-doped single-walled carbon nanotubes with enhanced thermoelectric power factor for flexible thermoelectric devices. *ACS Applied Energy Materials*, 2020, vol. 3, no. 3, pp. 2556—2564. DOI: 10.1021/acsaem.9b02243

19. Fakhrabadi M. M. S., Allahverdizadeh A., Norouzifard V., Dadashzadeh B. Effects of boron doping on mechanical properties

and thermal conductivities of carbon nanotubes. *Solid State Communications*, 2012, vol. 152, no. 21, pp. 1973—1979. DOI: 10.1016/j.ssc.2012.08.003

20. Rubio A. Formation and electronic properties of BC₃ single-wall nanotubes upon boron substitution of carbon nanotubes. *Physics Review Series B. Condensed Matter*, 2004, vol. 69, p. 245403. DOI: 10.1103/PhysRevB.69.245403

21. Debbarayan J., Sun C.-L., Chen L.-C., Chen K.-H. Effect of chemical doping of boron and nitrogen on the electronic, optical, and electrochemical properties of carbon nanotubes. *Progress in Materials Science*, 2013, vol. 58, p. 565. DOI: 10.1016/j.pmatsci.2013.01.003

22. Boroznina N. P., Boroznin S. V., Zaporotskova I. V., Kozhitov L. V., Popkova A. V. On the practicability of sensors based on surface carboxylated boron-carbon nanotubes. *Russian Journal of Inorganic Chemistry*, 2019, vol. 64, no. 1, pp. 74—78. DOI: 10.1134/S0036023619010029

23. Boroznina N. P., Zaporotskova I. V., Boroznin S. V., Dryuchkov E. S. Sensors based on amino group surface-modified CNTs. *Chemosensors*, 2019, vol. 7, no. 1, p. 11. DOI: 10.3390/CHEMOSENSORS7010011

24. Koch W., Holthausen M. C. A Chemist's Guide to Density Functional Theory. Weinheim: Wiley-VCH, 2001, 294 p.

25. Rassolov V. A., Ratner M. A., Pople J. A., Redfern P. C., Curtiss L. A. J. 6-31G* basis set for third-row atoms. *Journal of Computational Chemistry*, 2001, vol. 22, no. 9, pp. 976—984. DOI: 10.1002/jcc.1058

Received January 27, 2021

* * *

НАНОМАТЕРИАЛЫ И НАНОТЕХНОЛОГИИ

NANOMATERIALS AND NANOTECHNOLOGY

Известия высших учебных заведений. Материалы электронной техники. 2020. Т. 23, № 4. С. 260—269.

DOI: 10.17073/1609-3577-2020-4-260-269

УДК 621.335

Синтез и электромагнитные свойства нанокompозитов FeCoNi/C на основе поливинилового спирта

© 2020 г. Д. Г. Муратов^{1,2}, Л. В. Кожитов^{2,§}, Т. М. Казарян^{2,§}, А. А. Васильев^{1,2},
А. В. Попкова³, Е. Ю. Коровин⁴

¹ *Институт нефтехимического синтеза им. А.В. Топчиева Российской академии наук,
Ленинский просп., д. 29, Москва, 119991, Россия*

² *Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС»,
Ленинский просп., д. 4, Москва, 119049, Россия*

³ *НИИ НПО «ЛУЧ», ул. Железнодорожная, д. 24, Подольск, Московская обл., 143103, Россия*

⁴ *Национальный исследовательский Томский государственный университет,
просп. Ленина д. 36, Томск, 634050, Россия*

Аннотация. Синтезированы тройные наночастицы FeCoNi, распределенные и стабилизированные в углеродной матрице металлоуглеродных нанокompозитов FeCoNi/C. Синтез нанокompозитов осуществляли методом контролируемого ИК-пиролиза прекурсоров типа «полимер — нитраты металлов», полученных совместным растворением компонентов с последующим удалением растворителя. Исследовано влияние температуры синтеза на структуру, состав и электромагнитные свойства нанокompозитов. Методом РФА было показано, что образование тройных наночастиц FeCoNi происходит за счет растворения Fe в наночастицах твердого раствора NiCo. С повышением температуры синтеза увеличивается размер наночастиц металлов, что определяется процессами их агломерации и коалесценции при перестройке матрицы. Также в зависимости от температуры синтеза могут образовываться наночастицы тройного сплава с различным составом, причем указанное в прекурсор соотношении металлов достигается при 700 °С. Методом Рамановской спектроскопии было показано, что с увеличением температуры синтеза степень кристалличности углеродной матрицы нанокompозитов возрастает, и могут образовываться графеновые структуры, состоящие из нескольких слоев. Исследованы частотные зависимости относительной комплексной диэлектрической и магнитной проницаемости нанокompозитов в диапазоне 3—13 ГГц. Показано, что повышение температуры синтеза приводит к значительному увеличению как диэлектрических, так и магнитных потерь (~2 раза). Первые связаны с формированием сложной наноструктуры углеродной матрицы нанокompозита, а вторые определяются увеличением размера наночастиц и сдвигом частоты ЕФМР в низкочастотную область. Расчеты потерь на отражение (РЛ) проводились по стандартной методике на основе экспериментальных данных частотных зависимостей комплексной магнитной и диэлектрической проницаемости. Показано, что регулирование частотного диапазона и величины поглощения электромагнитных волн (от 50 до 94 %) может осуществляться путем изменения температуры синтеза нанокompозитов.

Ключевые слова: металлоуглеродные нанокompозиты, комплексная диэлектрическая и магнитная проницаемость, наночастицы FeCoNi, Раман-спектроскопия, потери на отражение, тангенс потерь

Муратов Дмитрий Геннадьевич^{1,2} — канд. техн. наук, ведущий научный сотрудник (1), доцент (2), <https://orcid.org/0000-0002-4865-288X>, e-mail: muratov@ips.ac.ru; **Кожитов Лев Васильевич**^{2,§} — доктор техн. наук, профессор, <https://orcid.org/0000-0002-4973-1328>, e-mail: kozitov@misis.ru; **Казарян Тигран Месропович**^{2,§} — аспирант, e-mail: tigrankasaryan@mail.ru; **Васильев Андрей Александрович**^{1,2} — младший научный сотрудник (1), доцент (2), e-mail: vasilev@ips.ac.ru; **Попкова Алёна Васильевна**³ — канд. техн. наук, старший научный сотрудник, <https://orcid.org/0000-0003-4657-9305>, e-mail: popkova-alena@rambler.ru; **Коровин Евгений Юрьевич**⁴ — канд. физ.-мат. наук, кафедра радиоэлектроники радиофизического факультета, e-mail: korovin_ey@mail.tsu

§ Авторы для переписки

Введение

На сегодняшний день одну из ключевых ролей в быстроразвивающихся отраслях науки и производственных сферах играют наночастицы металлов и сплавов с магнитными свойствами в виду их перспективности использования для устройств магнитной записи. Среди сфер применения особо выделяют следующие направления: медицина — транспортирование лекарств, контрастный агент магнитно-резонансной томографии, гипертермия [1]; химия — катализ нефтехимических процессов [2, 3]; создание феррожидкостей [4—5] и в качестве компонентов материалов, обладающих эффективным радиопоглощением [6—11]. Особенности вещества в наноразмерном состоянии, структуры, химического состава, которые сказываются на электронном состоянии обуславливают уникальность физических и химических свойств наночастиц магнитных сплавов.

Одной из проблем использования магнитных наночастиц является их высокая химическая активность, приводящая к окислению на воздухе и агломерации, определяемая вкладом их высокой удельной поверхности по отношению к объему. Покрытие наночастиц углеродом уменьшает взаимодействие между наночастицами. Углеродная оболочка либо углеродный носитель-матрица наночастиц обеспечивает более высокую частоту собственного естественного ферромагнитного резонанса (**ЕФМР**) по сравнению с объемным материалом. Углеродное покрытие существенно улучшает поглощение электромагнитных волн наночастицами, что обусловлено действием двух механизмов: диэлектрических потерь и магнитных потерь [6—9]. Помимо этого взаимодействие «магнитная наночастица — матрица», зависящее от типа, структуры и состава матрицы, определяет величину дипольных взаимодействий между компонентами композита, что также влияет на радиопоглощающие характеристики материалов [10, 11].

Главным преимуществом использования наноструктурированных гибридных диэлектрико-магнитных материалов является увеличение относительной комплексной диэлектрической проницаемости по сравнению с чистыми порошками металлов. Механизмы, которые повышают комплексную проницаемость, включая подавление вихревых токов, влияют на величину коэффициента отражения и увеличение магнитокристаллической анизотропии, влияющей в свою очередь на частоту ЕФМР. Также различные механизмы, такие как поляризация между магнитными и диэлектрическими фазами и естественная электронная релаксация диэлектрической фазы, повышают комплексную диэлектрическую проницаемость [7—9, 11, 12, 14, 15].

Ввиду перспективности подобных материалов, разработка новых процессов синтеза наночастиц

магнитных материалов, позволяющих получить наночастицы и матрицу, защищающую их от окисления, одновременно в одном процессе без введения восстановителя является весьма актуальной задачей.

Нами разработана относительно простая методика синтеза металлоуглеродных нанокомпозитов на основе прекурсоров «соли металлов — полимер» путем их контролируемого пиролиза с использованием ИК-нагрева. Контроль элементного состава, структуры, размера и морфологии нанокомпозитов и многокомпонентных наночастиц, их кристаллической структуры, а также структуры углеродной матрицы, объединяющей наночастицы сплава, но препятствующей их агломерации, окислению и прямому обменно-магнитному взаимодействию, обеспечивают управление электромагнитными свойствами нанокомпозитов [16—18]. Это представляется перспективным направлением в создании эффективных радиопоглощающих покрытий (**РПП**) и материалов (**РПМ**).

Целью данной работы являлось выявление особенностей структуры и состава нанокомпозитов FeCoNi/C, полученных путем ИК-пиролиза при использовании в качестве органической основы поливинилового спирта и нитратов металлов как исходных компонентов для наночастиц. А также исследование электромагнитных свойств, полученных наноматериалов, в зависимости от условий синтеза.

Экспериментальная часть

Прекурсоры нанокомпозитов изготавливались из совместного раствора поливинилового спирта (**ПВС**), нитрата железа (III) нонагидрата (Acros Organics, 99 %), нитрата кобальта (II) и никеля (II) гексагидратов (Acros Organics, 99 %) в дистиллированной воде, путем сушки от растворителя при $T \leq 70^\circ\text{C}$ (данный параметр является обязательным для обеспечения неизменности химического состава). Концентрация ПВС в дистиллированной воде составляла 5 % (мас.). В представленной работе для синтеза нанокомпозитов использовали промышленный ПВС марки 16/1 (х.ч.) с молекулярной массой $M_r = 55\text{—}70$ тыс. а. е. Отношение суммарной концентрации металлов в прекурсорах составляло 20 % (мас.) от массы полимера, а между собой в следующих пропорциях Fe : Co : Ni = 33 : 33 : 33. Контролируемый пиролиз прекурсоров обеспечивался использованием ИК-нагрева в атмосфере азота в диапазоне температур от 500 до 700 °C при шаге 100 °C.

Для наиболее корректного сравнения результатов режим ИК-пиролиза полностью соответствовал представленному в нашей предыдущей работе [16].

Структурные исследования нанокомпозитов проводились при комнатной температуре на рентгеновском дифрактометре DIFRAY с излучением CrK_α . Данные эксперимента соотносились с эталонами из базы данных PDF-4 (International Centre for Diffraction Data).

Измерение спектров комбинационного рассеяния света (**КРС**) производилось с использованием спектрометра комбинационного рассеяния света inVia Raman Microscope, Renishaw plc при возбуждении лазером с длиной волны излучения 514 нм.

Исследования комплексных значений магнитной и диэлектрической проницаемостей проводились при использовании резонаторного метода на прямоугольном многомодовом резонаторе. Генератором СВЧ и индикатором являлся векторный анализатор цепей E 8363B (Agilent Technologies). Измерения были проведены при использовании систем и методик, аттестованных в ЦКП «Центр радиофизических измерений, диагностики и исследование параметров природных и искусственных материалов» ТГУ (<http://www.ckp.tsu.ru/about/directions/radiophysics>).

Для расчета потерь на отражение использованы следующие соотношения, с учетом того, что слой нанокомпозита безграничный и плоский, расположен на металле, а плоская волна падает из свободного пространства:

$$R = \frac{Z_{\text{вх}} - 1}{Z_{\text{вх}} + 1}, \quad (1)$$

где $Z_{\text{вх}}$ — импеданс на входе границы раздела свободное пространство — образец.

$$Z_{\text{вх}} = -iZt \operatorname{tg}(kd), \quad (2)$$

где Z — волновое сопротивление плоского слоя при условии нахождения на металле; k — волновое число; d — толщина; R — коэффициент отражения

$$Z = \sqrt{\frac{\mu' + i\mu''}{\epsilon' + i\epsilon''}}, \quad (3)$$

$$k = \frac{2\pi f \sqrt{\epsilon^* \mu^*}}{c}. \quad (4)$$

Результаты и их обсуждение

Ранее в нашей работе [16] продемонстрирована возможность синтеза трехкомпонентных наночастиц FeCoNi в составе металлоуглеродных нанокомпозитов, синтез которых осуществлялся на основе нитратов металлов и полиакрилонитрила также с применением ИК-нагрева. В других работах [19—21] было показано, что замена полимера при незначительных изменениях методики синтеза способна обеспечить формирование металлоуглеродных

нанокомпозитов, составом которых вполне можно управлять. При этом, такие полимеры как поливиниловый спирт и хитозан являются более доступными по сравнению с ПАН, а также позволяют использовать менее токсичные растворители, в частности дистиллированную воду вместо диметилформамида и диметилсульфоксида, что, в целом, способно повысить экономическую целесообразность разработки и использования таких композитов.

В процессе карбонизации прекурсоров на основе ПВС может протекать ряд химических реакций в твердой фазе, причем последовательно-параллельных: дегидратация, дегидрирование и частичное окисление полимера с дальнейшей карбонизацией до углерода, многостадийное разложение нитратов за счет высокотемпературного гидролиза и т. п. Среди них особо важным процессом является интенсивное выделение газообразных продуктов (таких как H_2 , CO), которые являются восстановителями для металлов при формировании углеродной матрицы. Также, на восстановление могут влиять атомарный водород и различные активные радикалы, а так как сам процесс происходит при твердой фазе полимера, то с уверенностью можно утверждать, что восстановление металла происходит *in situ*.

Исследования фазового состава нанокомпозитов с применением порошковой дифрактометрии позволило установить, что трехкомпонентный сплав формируется уже при 500 °С. Сопоставление экспериментальных и эталонных данных показывает, что в нанокомпозитах FeCoNi/C на основе ПВС при температурах $T \geq 500$ °С присутствуют ярко выраженные рефлексы твердого раствора металлов с ГЦК типом кристаллической решетки. Также присутствует аморфное гало в области углов $2\theta = 45^\circ + 60^\circ$, которое характеризует оксидные фазы металлов с решеткой магнетита и очень малым (менее 5 нм) размером ОКР (рис. 1).

Поскольку температуры восстановления никеля и кобальта лежат вблизи 200 °С, тройные наночастицы формируются на основе ГЦК решетки твердого раствора CoNi по аналогии с результатами, полученными нами для нанокомпозитов на основе полиакрилонитрила [16]. Однако, при сопоставлении полученных рефлексов показало, что их максимумы лежат левее, что указывает на рост параметра решетки за счет растворения железа в наночастицах.

При увеличении температуры синтеза до 700 °С наблюдается полное исчезновение рефлексов фаз оксидов, что определяется более глубокой карбонизацией матрицы, что обеспечивает поступление восстанавливающих агентов. Также можно отметить, что максимум рефлексов металлической фазы смещается в сторону малых углов, что указывает на рост параметра кристаллической решетки. Т. е. за счет восстановления железа и растворения

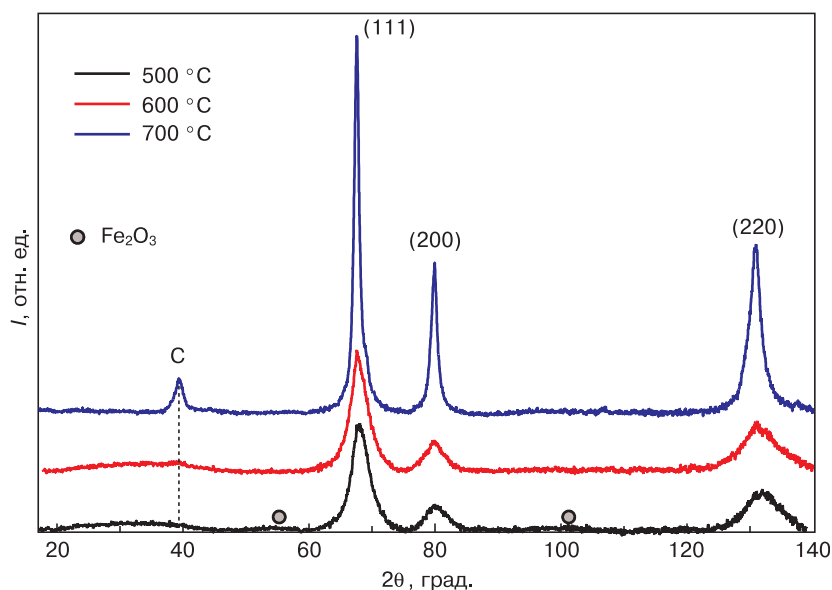


Рис. 1. Дифрактограммы нанокompозитов FeCoNi/C на основе ПВС, синтезированных при различных температурах
Fig. 1. Diffraction patterns of FeCoNi/C nanocomposites based on PVA synthesized at different temperatures

его в наночастицах параметр решетки возрастает от 0,3541 до 0,3564 нм. В конечном итоге происходит формирование фазы тройного эквивалентного твердого раствора (сплава) FeCoNi (рис. 2).

Следует отметить, что при повышении температуры синтеза нанокompозитов наблюдается увеличение относительной интенсивности и уменьшение полуширины рефлексов металлической фазы. Это указывает на увеличение среднего размера ОКР наночастиц сплава FeCoNi. Расчет среднего размера ОКР для наночастиц FeCoNi дает такие значения: 8÷10 нм (500 °C) с резким ростом до 18÷20 нм (700 °C). По сравнению с полученными нами ранее нанокompозитами FeCoNi/C на основе полиакрилонитрила (изменение размера ОКР от 10÷12 до 23÷25 нм), рост

размеров ОКР нанокompозитов на ПВС несколько менее интенсивный [16].

Для нанокompозитов, которые были получены при температуре 500 °C в области углов $2\theta = 20^\circ\div 40^\circ$ наблюдается присутствие широкого гало, такой вид рефлексов характерен для дефектных, сильно аморфных углеродных структур. С ростом температуры синтеза до 600 °C начинает выделяться максимум при $2\theta = 39^\circ$, отвечающему d_{002} графита, что указывает на сильную карбонизацию полимера, т. е. начинает формироваться графитоподобная структура у матрицы нанокompозитов. Для образцов, полученных при более высокой температуре синтеза (600 и 700 °C) наблюдается проявление пика и существенный рост его интенсивности, т. е. происходит

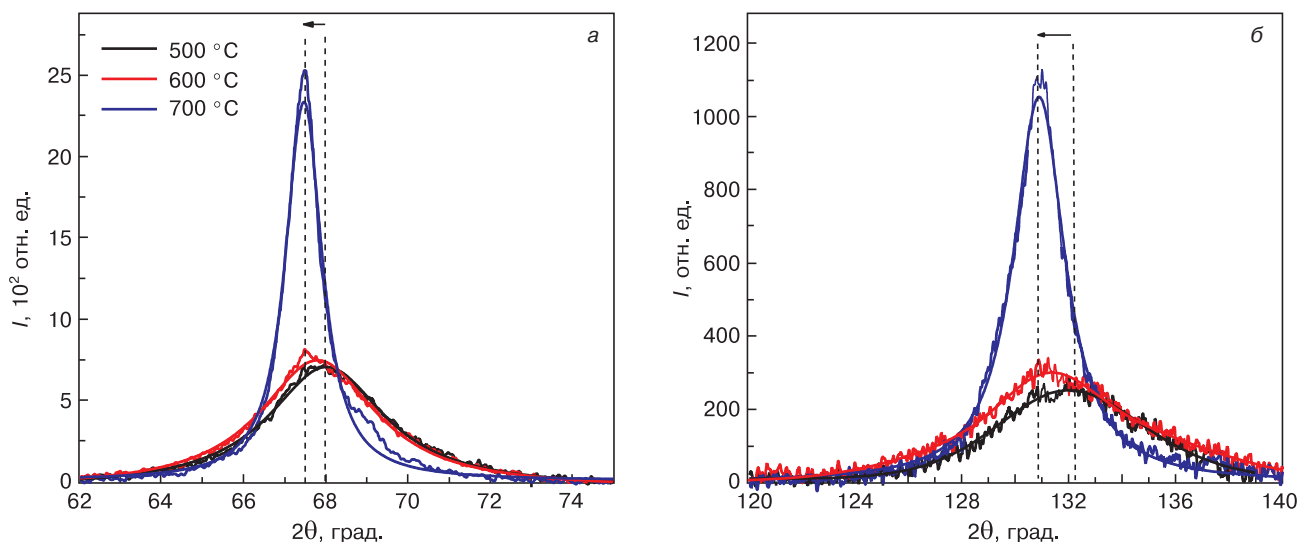


Рис. 2. Дифрактограммы нанокompозитов FeCoNi/C на основе ПВС в области углов $65^\circ\div 70^\circ$ (а) и в области углов $120^\circ\div 140^\circ$ (б), синтезированных при различных температурах
Fig. 2. Diffraction patterns of FeCoNi/C nanocomposites based on PVA in the range $65^\circ\div 70^\circ$ (a) and in the range $120^\circ\div 140^\circ$ (b) synthesized at different temperatures

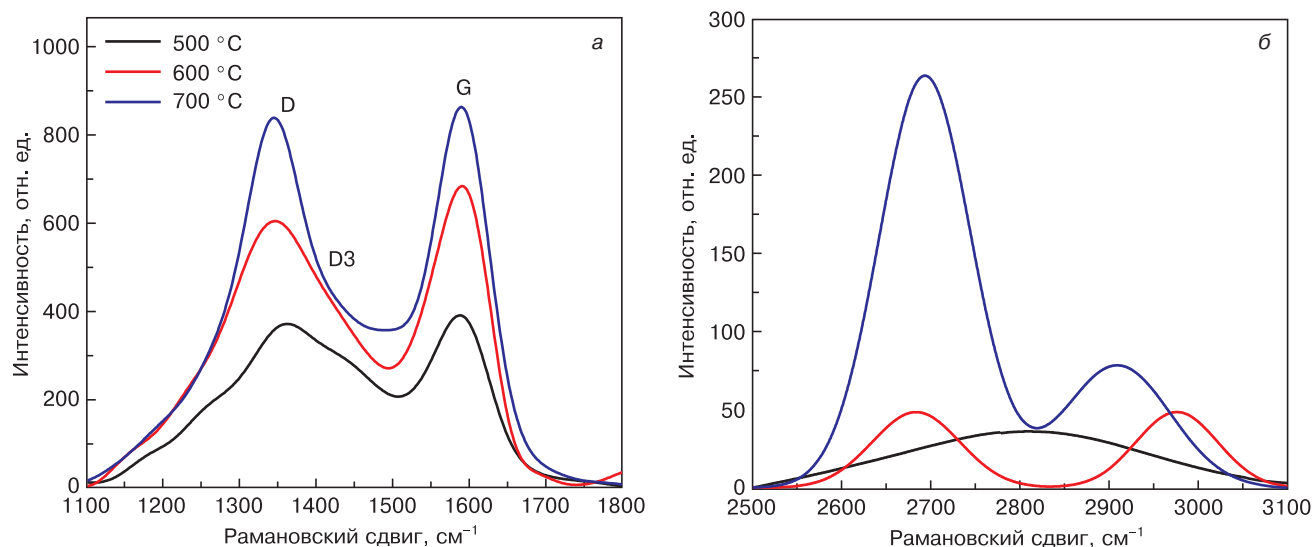


Рис. 3. КР-спектры наноконпозитов FeCoNi/C, синтезированных при различных температурах: область пиков D и G (а), область пиков 2D (б)

Fig. 3. Raman spectra of FeCoNi/C nanocomposites synthesized at different temperatures: region of D and G peaks (а), region of 2D peaks (б)

формирование нанокристаллической углеродной матрицы наноконпозита.

Особенности структурных превращений в матрице наноконпозитов были изучены с помощью Raman-спектроскопии (рис. 3).

Степень упорядоченности углеродных материалов и их вид обычно устанавливают путем сопоставления интенсивностей нескольких характеристических полос на КР-спектрах (D, G, 2D, D3) [22].

Рост температуры синтеза наноконпозитов FeCoNi/C от 500 до 700 °C приводит к тому, что соотношение I_D/I_G стремится к «1», т. е. интенсивности полос становятся сопоставимы. Известно, что для нанокристаллического графита, в котором высока доля оборванных связей $I_D/I_G = 2$. Для наноконпозитов FeCoNi/C это соотношение меньше, что указывает на присутствие структурированного углерода.

Для наноконпозитов, синтезированных при 600 °C появляется слабая полоса 2D (2650 см⁻¹). Такая полоса, как правило, присутствует в графене и в окисленном графене, а в высококачественном графите практически не проявляется [22, 23]. С ростом температуры синтеза наноконпозитов интенсивность полосы возрастает, что указывает на формирование графеноподобных структур в матрице. Сдвиг полосы по частоте объясняется взаимодействием между слоями, которое повышает частоту колебания, т. е. число слоев в таких структурах больше одного. Помимо сдвига в наноконпозитах FeCoNi/C 2D-полоса раздваивается, что также указывает на формирование высокоупорядоченной структуры кристаллитов графита. По-видимому, рост интенсивности полосы следует отнести к образующимся тонким углеродным оболочкам на наночастицах металлов.

Помимо этого присутствует широкая полоса в области 1420—1520 см⁻¹ (D3, «седло»), которая указывает на присутствие аморфного углерода. С ростом температуры синтеза наноконпозитов относительная интенсивность данной полосы снижается (I_{D3}/I_G изменяется от 0,67 до 0,49), а ширина пика D уменьшается, что указывает на снижение доли аморфного углерода в матрице наноконпозитов и подтверждает результаты РФА.

Принимая во внимание достаточно высокую интенсивность 2D-пика, достаточно высокий уровень «седла» между D- и G-пиками и соотношение $I_D/I_G \leq 1$, можно сделать вывод, что углеродная матрица наноконпозитов, и FeCoNi/C в частности, представляет собой графитоподобный материал, состоящий из двух основных компонент: кристаллической, обладающей упорядоченной структурой графита, но с дефектами сдвига слоев относительно друг друга, и аморфной, с высокой плотностью дефектов структуры.

Перестройка структуры матрицы и формирование наночастиц FeCoNi с ростом температуры синтеза вызывают изменения в магнитных и электрофизических свойствах наноконпозитов.

Результаты измерений электромагнитных характеристик наноконпозитов FeCoNi/C на основе ПВС в частотном диапазоне 3—13 ГГц в зависимости от температуры синтеза представлены на рис. 4.

Анализ результатов позволяет констатировать, что с ростом температуры синтеза возрастает диэлектрическая проницаемость материала, что связано с процессом формирования сложной внутренней наноструктуры матрицы. Данное предположение подтверждается результатами РФА и КР-спектроскопии. Также рост диэлектрической проницаемости может определяться

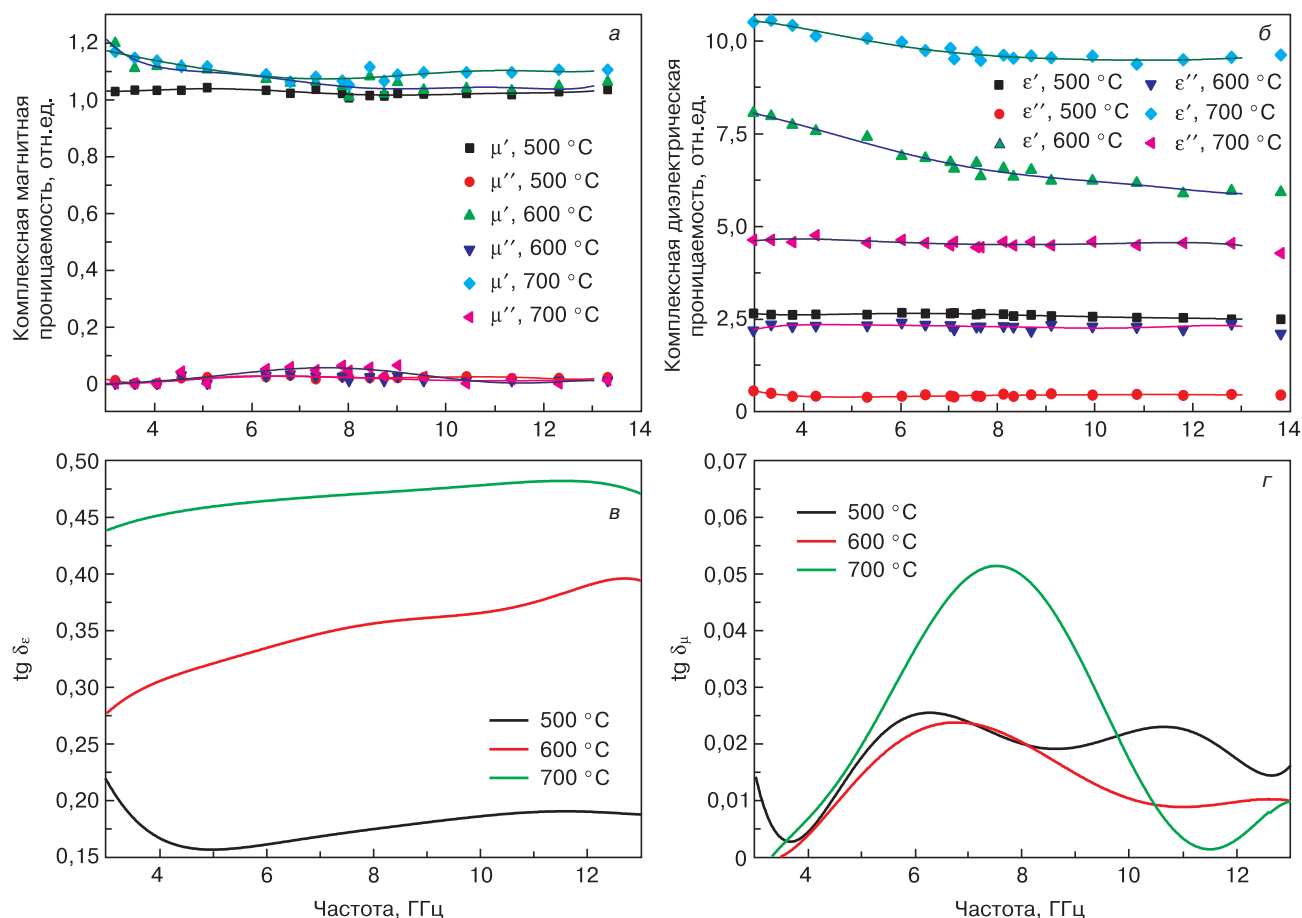


Рис. 4. Частотные зависимости комплексной магнитной (а), диэлектрической (б) проницаемостей и тангенса магнитных (в) и диэлектрических (г) потерь для нанокompозитов FeCoNi/C, синтезированных при различных температурах

Fig. 4. Frequency dependences of the complex permeability (а) and (б) permittivity, and tangent of magnetic (в) and dielectric (г) losses for FeCoNi/C nanocomposites synthesized at different temperatures

формированием достаточно крупных наночастиц, т. е. формируется структура последовательно-параллельных конденсаторов, где аморфный углерод выполняет роль диэлектрика. Помимо роста действительной части комплексной диэлектрической проницаемости увеличивается мнимая часть,

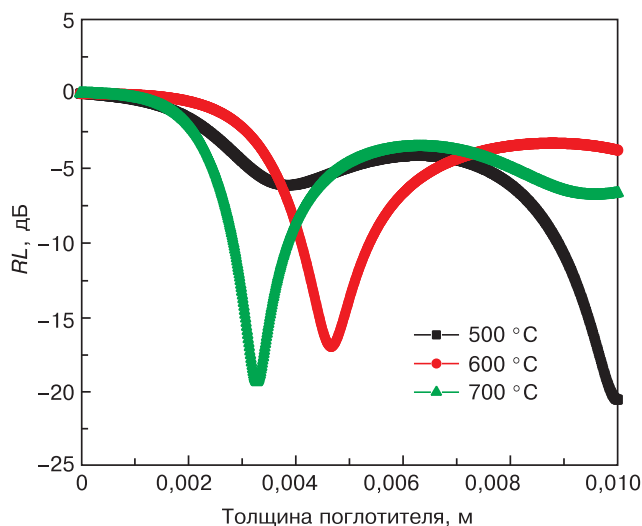


Рис. 5. Оптимальная толщина слоя поглотителя FeCoNi/C

Fig. 5. Optimum thickness of the FeCoNi/C absorber layer

что проявляется в росте диэлектрических потерь в нанокompозитах. Это, по-видимому, определяется изменением механизмов поляризации в матрице нанокompозитов.

Максимум тангенса магнитных потерь с ростом температуры синтеза смещается в область более высоких частот, что связано с изменением состава наночастиц за счет растворения железа, и для образцов, полученных при 700 °C, располагается вблизи частоты 8 ГГц, что определяется частотой ЕФМР наночастиц тройного сплава FeCoNi. Также сдвиг частоты ЕФМР может быть вызван формированием углеродных оболочек на наночастицах, что приводит к изменению механизма взаимодействия с углеродной матрицей.

Оптимальная толщина слоя нанокompозита определялась (рис. 5) при фиксированной частоте, отвечающей максимуму магнитной проницаемости (мнимой составляющей), т. е. в максимуме поглощения за счет ЕФМР.

Анализ показал, что с ростом температуры синтеза нанокompозитов оптимальная толщина слоя поглощающего материала снижается от 9,8 до 3,3 мм, что определяется в первую очередь ростом диэлектрических потерь.

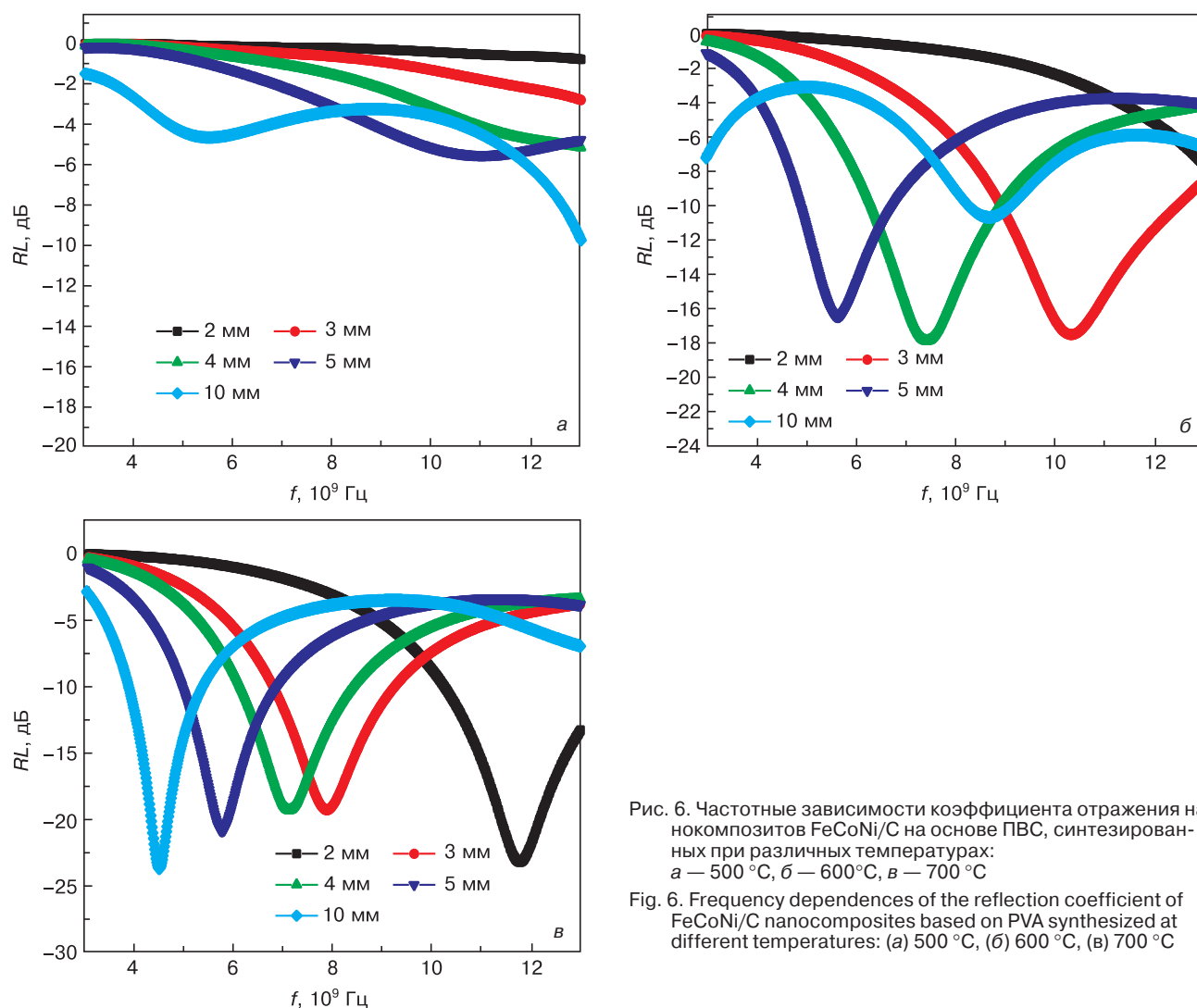


Рис. 6. Частотные зависимости коэффициента отражения нанокompозитов FeCoNi/C на основе ПВХ, синтезированных при различных температурах: а — 500 °С, б — 600 °С, в — 700 °С

Fig. 6. Frequency dependences of the reflection coefficient of FeCoNi/C nanocomposites based on PVA synthesized at different temperatures: (a) 500 °C, (б) 600 °C, (в) 700 °C

Расчеты потерь на отражение при приближении нахождения нанокompозита на металле показали следующие результаты (рис. 6).

Установлено, что с ростом температуры синтеза от 500 до 700 °С величина потерь на отражение (**RL**) изменяется от –6 до –24,5 дБ, что соответствует росту коэффициента поглощения от 0,5 до 0,94 (или от 50 до 94 %). При этом следует отметить, что присутствует два минимума: при 4,4 ГГц и при 11,8 ГГц. Стоит также отметить, что показанный уровень поглощения достигается за счет и диэлектрических и магнитных потерь ($\text{tg } \delta_\epsilon$ изменяется от 0,44 до 0,47 отн. ед., а $\text{tg } \delta_\mu$ варьируется от 0,02 до 0,055 отн. ед.).

Заключение

Таким образом, установлено, что в нанокompозитах FeCoNi/C на основе ПВХ могут быть сформированы тройные наночастицы твердого раствора FeCoNi. Процесс их формирования начинается 500 °С за счет восстановления железа с последующим его растворением в наночастицах на основе твердого раство-

ра CoNi. При повышении температуры синтеза от 500 до 700 °С железо полностью восстанавливается и растворяется в сплаве, что приводит как к росту параметра решетки, так и росту размеров наночастиц тройного FeCoNi от 8÷10 до 18÷20 нм. Также с ростом температуры синтеза за счет более глубокой карбонизации и рекристаллизации формируется наноструктурированная углеродная матрица нанокompозитов, что приводит к росту комплексной диэлектрической проницаемости и росту диэлектрических потерь на межфазную поляризацию.

Повышение температуры синтеза образцов нанокompозитов с 500 до 700 °С величина RL снижается от –6 до –24,5 дБ, что соответствует росту коэффициента поглощения от 0,5 до 0,94 (или от 50 до 94 %). Наибольший интерес представляют нанокompозиты, синтезированные при 700 °С, т. к. обеспечивают максимальное поглощение при минимальной толщине.

Библиографический список

1. Xu Y. H., Bai J., Wang J. P. High-magnetic-moment multifunctional nanoparticles for nanomedicine applications // *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*. 2007. V. 311, Iss. 1. P. 131–134. DOI: 10.1016/j.jmmm.2006.11.174

2. Khadzhev S. N., Kulikova M. V., Ivantsov M. I., Zemtsov L. M., Karpacheva G. P., Muratov D. G., Bondarenko G. N., Oknina N. V. Fischer–Tropsch synthesis in the presence of nanosized iron–polymer catalysts in a fixed–bed reactor // *Petroleum Chemistry*. 2016. V. 56. P. 522—528. DOI: 10.1134/S0965544116060049
3. Efimov M. N., Mironova E. Yu., Pavlov A. A., Vasilev A. A., Muratov D. G., Dzidziguri E. L., Yaroslavl'tsev A. B., Karpacheva G. P. Novel polyacrylonitrile–based C/Co–Ru metal–carbon nanocomposites as effective catalysts for ethanol steam reforming // *International Journal of Nanoscience*. 2020. V. 19, N 04, P. 1950031. DOI: 10.1142/S0219581X19500315
4. Gubin S. P., Spichkin Y. I., Yurkov G. Yu., Tishin A. M. Nano-material for high–density magnetic data storage // *Russian Journal of Inorganic Chemistry*. 2002. V. 47. P. S32—S67.
5. Lu An–H., Salabas E. L., Schüth F. Magnetic nanoparticles: synthesis, protection, functionalization, and application // *Angewandte Chemie International Edition*. 2007. V. 46, N 8. P. 1222—1244. DOI: 10.1002/anie.200602866
6. Afghahi S. S., Shokuhfar A. S. Two step synthesis, electromagnetic and microwave absorbing properties of FeCo@C core–shell nanostructure // *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*. 2014. V. 370. P. 37—44. DOI: 10.1016/J.JMMM.2014.06.040
7. Liu X. G., Ou Z. Q., Geng D. Y., Han Z., Jiang J. J., Liu W., Zhang Z. D. Influence of a graphite shell on the thermal and electromagnetic characteristics of FeNi nanoparticles // *Carbon*. 2010. V. 48, Iss. 3. P. 891—897. DOI: 10.1016/j.carbon.2009.11.011
8. Liu Q., Cao B., Feng C., Zhang W., Zhu S., Zhang D. High permittivity and microwave absorption of porous graphitic carbons encapsulating Fe nanoparticles // *Composites Science and Technology*. 2012. V. 72, Iss. 13. P. 1632—1636. DOI: 10.1016/J.COMPOSITECH.2012.06.022
9. Xie Z., Geng D., Liu X., Ma S., Zhang Z. Magnetic and microwave–absorption properties of graphite–coated (Fe,Ni) nanocapsules // *Journal of Materials Science and Technology*. 2011. V. 27, Iss. 7. P. 607—614. DOI: 10.1016/S1005-0302(11)60115-1
10. Ibrahim E. M. M., Hampel S., Wolter A. U. B., Kath M., El–Gendy A. A., Klingeler R., Täschner C., Khavrus V. O., Gemming T., Leonhardt A., Büchner B. Superparamagnetic FeCo and FeNi nanocomposites dispersed in submicrometer–sized C spheres // *The Journal of Physical Chemistry C*. 2012. V. 116, N 42. P. 22509—22517. DOI: 10.1021/JP304236X
11. Yang Y., Qi S., Wang J. Preparation and microwave absorbing properties of nickel–coated graphite nanosheet with pyrrole via in situ polymerization // *Journal of Alloys and Compounds*. 2012. V. 520. P. 114—121. DOI: 10.1016/j.jallcom.2011.12.136
12. Lu B., Dong X. L., Huang H., Zhang X. F., Zhu X. G., Lei J. P., Sun J. P. Microwave absorption properties of the core/shell–type iron and nickel nanoparticles // *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*. 2008. V. 320, Iss. 6. P. 1106—1111. DOI: 10.1016/J.JMMM.2007.10.030
13. Wang B., Zhang J., Wang T., Qiao L., Li F. Synthesis and enhanced microwave absorption properties of Ni@Ni₂O₃ core–shell particles // *Journal of Alloys and Compounds*. 2013. V. 567. P. 21—25. DOI: 10.1016/J.JALLCOM.2013.03.028
14. Fan Y., Yang H., Liu X., Zhu H., Zou G. Preparation and study on radar absorbing materials of nickel–coated carbon fiber and flake graphite // *Journal of Alloys and Compounds*. 2008. V. 461, Iss. 1–2. P. 490—494. DOI: 10.1016/J.JALLCOM.2007.07.034
15. Zhang T., Huang D., Yang Y., Kang F., Gu J. Fe₃O₄/carbon composite nanofiber absorber with enhanced microwave absorption performance // *Journal of Materials Science and Engineering: B*. 2013. V. 178, Iss. 1. P. 1—9. DOI: 10.1016/j.jmse.2012.06.005
16. Муратов Д. Г., Кожитов Л. В., Коровушкин В. В., Коровин Е. Ю., Попкова А. В., Новоторцев В. М. Синтез, структура и электромагнитные свойства нанокompозитов с трехкомпонентными наночастицами Fe, Co, Ni // *Известия вузов. Физика*. 2018. Т. 61, № 10. С. 40—49.
17. Муратов Д. Г., Кожитов Л. В., Карпенков Д. Ю., Якушко Е. В., Коровин Е. Ю., Васильев А. В., Попкова А. В., Казарян Т. М., Шадрин А. В. Синтез и магнитные свойства нанокompозитов Fe–Co–Ni/C // *Известия вузов. Физика*. 2017. Т. 60, № 11. С. 67—73.
18. Кожитов Л. В., Муратов Д. Г., Костишин В. Г., Сусяев В. И., Коровин Е. Ю., Попкова А. В. Синтез, магнитные и электромагнитные свойства нанокompозитов FeCo/C // *Журнал неорганической химии*. 2017. Т. 62, № 11. С. 1507—1514. DOI: 10.7868/S0044457X17110137
19. Vasilev A. A., Efimov M. N., Bondarenko G. N., Muratov D. G., Dzidziguri E. L., Ivantsov M. I., Kulikova M. V., Karpacheva G. P. Fe–Co alloy nanoparticles supported on IR pyrolyzed chitosan as catalyst for Fischer–Tropsch synthesis // *Chemical Physics Letters*. 2019. V. 730. P. 8—13. DOI: 10.1016/j.cplett.2019.05.034
20. Муратов Д. Г., Васильев А. А., Ефимов М. Н., Карпачева Г. П., Дзидзигури Э. Л., Чернавский П. А. Металл–углеродные нанокompозиты FeNi/C: получение, фазовый состав, магнитные свойства // *Физика и химия обработки материалов*. 2018. № 6. С. 26—34. DOI: 10.30791/0015-3214-2018-6-26-34
21. Vasilev A. A., Dzidziguri E. L., Muratov D. G., Zhilyaeva N. A., Efimov M. N., Karpacheva G. P. Morphology and dispersion of FeCo alloy nanoparticles dispersed in a matrix of IR pyrolyzed polyvinyl alcohol // *IOP Conference Series: Materials Science and Engineering*. 2018. V. 347. P. 012011. DOI: 10.1088/1757-8999-X/347/1/012011
22. Ferrari A. C. Raman spectroscopy of graphene and graphite: Disorder, electron–phonon coupling, doping and nonadiabatic effects // *Solid State Communications*. 2007. V. 143, N 1–2. P. 47—57. DOI: 10.1016/j.ssc.2007.03.052
23. Ferrari A. C., Robertson J. Resonant Raman spectroscopy of disordered, amorphous, and diamondlike carbon // *Physical Review B*. 2001. V. 64, N 7. P. 0754141—07541413. DOI: 10.1103/PhysRevB.64.075414

В части синтеза нанокompозитов работа выполнена в рамках Государственного задания Института нефтехимического синтеза имени А.В. Топчиева.

Статья поступила в редакцию 1 февраля 2021 г.

Izvestiya vuzov. Materialy elektronnoi tekhniki = *Materials of Electronics Engineering*. 2020, vol. 23, no. 4, pp. 260—269.
DOI: 10.17073/1609-3577-2020-4-260-269

Nanocomposites FeCoNi/C based on polyvinyl alcohol: synthesis and electromagnetic properties

D. G. Muratov^{1,2}, L. V. Kozhitov^{2,§}, T. M. Kazaryan^{2,§}, A. A. Vasil'ev^{1,2},
A. V. Popkova³, E. Yu. Korovin⁴

¹ *Topchiev Institute for Petrochemical Synthesis, Russian Academy of Sciences,
29 Leninsky Prospekt, Moscow 119991, Russia*

² *National University of Science and Technology MISiS,
4 Leninsky Prospekt, Moscow 119049, Russia*

³ *LUCH Research and Production Association,
24 Zheleznodorozhnaya Str., Podolsk, Moscow Region 142103, Russia*

⁴ *National Research Tomsk State University,
36 Prospekt Lenina, Tomsk 634050, Russia*

Abstract. Triple FeCoNi nanoparticles distributed and stabilized in the carbon matrix of FeCoNi/C metal–carbon nanocomposites were synthesized. The synthesis of nanocomposites was carried out by controlled IR pyrolysis of precursors of the “polymer–metal nitrates” type, obtained by joint dissolution of the components with subsequent removal of the solvent. The effect of the synthesis temperature on the structure, composition, and electromagnetic properties of nanocomposites has been studied. It was shown by XRD that the formation of ternary FeCoNi nanoparticles occurs through the dissolution of Fe in the nanoparticles of the NiCo solid solution. With an increase in the synthesis temperature, the size of metal nanoparticles increases, which is determined by the processes of their agglomeration and coalescence during matrix rearrangement. Also, depending on the synthesis temperature, nanoparticles of a ternary alloy with different compositions can be formed, and the ratio of metals specified in the precursor is achieved at 700 °C. By Raman spectroscopy was shown that, with an increase in the synthesis temperature, the degree of crystallinity of the carbon matrix of nanocomposites increases, and graphene structures consisting of several layers can be formed. The frequency dependences of the relative complex dielectric and magnetic permeabilities of nanocomposites in the range of 3–13 GHz were studied. It is shown that an increase in the synthesis temperature causes a significant increase in both dielectric and magnetic losses (~ 2 times). The former are associated with the formation of a complex nanostructure of the carbon matrix of the nanocomposite, while the latter are determined by an increase in the size of nanoparticles and a shift of the EFMR frequency to the low-frequency region. Reflection loss (RL) calculations were performed according to the standard procedure based on experimental data of the frequency dependences of the complex magnetic and dielectric permittivity. It was shown that control of the frequency range and absorption value of electromagnetic waves (from 50 to 94%) can be carried out by changing the temperature of synthesis of nanocomposites.

Keywords: FeCoNi nanoparticles, metal–carbon nanocomposites, complex permittivity and permeability, loss tangent, reflection loss, Raman spectroscopy

References

1. Xu Y. H., Bai J., Wang J. P. High-magnetic-moment multifunctional nanoparticles for nanomedicine applications. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*. 2007, vol. 311, iss. 1, pp. 131—134. DOI: 10.1016/j.jmmm.2006.11.174

2. Khadzhiev S. N., Kulikova M. V., Ivantsov M. I., Zemtsov L. M., Karpacheva G. P., Muratov D. G., Bondarenko G. N., Oknina N. V. Fischer–Tropsch synthesis in the presence of nanosized

iron–polymer catalysts in a fixed-bed reactor. *Petroleum Chemistry*. 2016, vol. 56, pp. 522—528. DOI: 10.1134/S0965544116060049

3. Efimov M. N., Mironova E. Yu., Pavlov A. A., Vasilev A. A., Muratov D. G., Dzidziguri E. L., Yaroslavl'tsev A. B., Karpacheva G. P. Novel polyacrylonitrile-based C/Co–Ru metal–carbon nanocomposites as effective catalysts for ethanol steam reforming. *International Journal of Nanoscience*. 2020, vol. 19, no. 04, p. 1950031. DOI: 10.1142/S0219581X19500315

4. Gubin S. P., Spichkin Y. I., Yurkov G. Yu., Tishin A. M. Nanomaterial for high-density magnetic data storage. *Russian Journal of Inorganic Chemistry*. 2002, vol. 47, pp. S32—S67.

5. Lu An-H., Salabas E. L., Schüth F. Magnetic nanoparticles: synthesis, protection, functionalization, and application. *Angewandte Chemie International Edition*. 2007, vol. 46, no. 8, pp. 1222—1244. DOI: 10.1002/anie.200602866

6. Afghahi S. S., Shokuhfar A. S. Two step synthesis, electro-magnetic and microwave absorbing properties of FeCo@C core–shell nanostructure. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*. 2014, vol. 370, pp. 37—44. DOI: 10.1016/j.jmmm.2014.06.040

7. Liu X. G., Ou Z. Q., Geng D. Y., Han Z., Jiang J. J., Liu W., Zhang Z. D. Influence of a graphite shell on the thermal and electro-magnetic characteristics of FeNi nanoparticles. *Carbon*. 2010, vol. 48, iss. 3, pp. 891—897. DOI: 10.1016/j.carbon.2009.11.011

Information about authors:

Dmitry G. Muratov^{1,2} — Cand. Sci. (Eng.), Leading Researcher (1), Assistant Professor (2), <https://orcid.org/0000-0002-4865-288X>, e-mail: muratov@ips.ac.ru; **Lev V. Kozhitov**^{2,§} — Dr. Sci. (Eng.), Professor, <https://orcid.org/0000-0002-4973-1328>, e-mail: kozhitov@misis.ru; **Tigran M. Kazaryan**^{2,§} — Postgraduate Student, e-mail: tigrankasaryan@mail.ru; **Andrey A. Vasil'ev**^{1,2} — Junior Researcher (1), Assistant Professor (2), e-mail: vasilev@ips.ac.ru; **Alena V. Popkova**³ — Cand. Sci. (Eng.), Senior Researcher, <https://orcid.org/0000-0003-4657-9305>, e-mail: popkova-alena@rambler.ru; **Evgeniy Yu. Korovin**⁴ — Cand. Sci. (Phys.–Math.), Department of Radioelectronics, Faculty of Radiophysics, e-mail: korovin_ey@mail.tsu

§ Corresponding authors

8. Liu Q., Cao B., Feng C., Zhang W., Zhu S., Zhang D. High permittivity and microwave absorption of porous graphitic carbons encapsulating Fe nanoparticles. *Composites Science and Technology*. 2012, vol. 72, iss. 13, pp. 1632—1636. DOI: 10.1016/J.COMPOSITECH.2012.06.022
9. Xie Z., Geng D., Liu X., Ma S., Zhang Z. Magnetic and microwave-absorption properties of graphite-coated (Fe,Ni) nanocapsules. *Journal of Materials Science and Technology*. 2011, vol. 27, iss. 7, pp. 607—614. DOI: 10.1016/S1005-0302(11)60115-1
10. Ibrahim E. M. M., Hampel S., Wolter A. U. B., Kath M., El-Gendy A. A., Klingeler R., Täschner C., Khavrus V. O., Gemming T., Leonhardt A., Büchner B. Superparamagnetic FeCo and FeNi nanocomposites dispersed in submicrometer-sized C spheres. *The Journal of Physical Chemistry C*. 2012, vol. 116, no. 42, pp. 22509—22517. DOI: 10.1021/JP304236X
11. Yang Y., Qi S., Wang J. Preparation and microwave absorbing properties of nickel-coated graphite nanosheet with pyrrole via in situ polymerization. *Journal of Alloys and Compound*. 2012, vol. 520, pp. 114—121. DOI: 10.1016/j.jallcom.2011.12.136
12. Lu B., Dong X. L., Huang H., Zhang X. F., Zhu X. G., Lei J. P., Sun J. P. Microwave absorption properties of the core/shell-type iron and nickel nanoparticles. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*. 2008, vol. 320, iss. 6, pp. 1106—1111. DOI: 10.1016/J.JMMM.2007.10.030
13. Wang B., Zhang J., Wang T., Qiao L., Li F. Synthesis and enhanced microwave absorption properties of Ni@Ni₂O₃ core-shell particles. *Journal of Alloys and Compounds*. 2013, vol. 567, pp. 21—25. DOI: 10.1016/J.JALLCOM.2013.03.028
14. Fan Y., Yang H., Liu X., Zhu H., Zou G. Preparation and study on radar absorbing materials of nickel-coated carbon fiber and flake graphite. *Journal of Alloys and Compounds*. 2008, vol. 461, iss. 1–2, pp. 490—494. DOI: 10.1016/J.JALLCOM.2007.07.034
15. Zhang T., Huang D., Yang Y., Kang F., Gu J. Fe₃O₄/carbon composite nanofiber absorber with enhanced microwave absorption performance. *Journal of Materials Science and Engineering: B*. 2013, vol. 178, iss. 1, pp. 1—9. DOI: 10.1016/j.jmse.2012.06.005
16. Muratov D. G., Kozhitov L. V., Korovushkin V. V., Korovin E. Y., Popkova A. V., Novotortsev V. M. Synthesis, structure and electromagnetic properties of nanocomposites with three-component FeCoNi nanoparticles. *Russian Physics Journal*. 2019, vol. 61, no. 10, pp. 1788—1797. DOI: 10.1007/s11182-019-01602-5
17. Muratov D. G., Kozhitov L. V., Karpenkov D. Yu., Yakushko E. V., Korovin E. Yu., Vasil'ev A. V., Popkova A. V., Kazaryan T. M., Shadrinov A. V. Synthesis and magnetic properties of Fe-Co-Ni/C nanocomposites. *Russian Physics Journal*. 2018, vol. 60, no. 11, pp. 1924—1930. DOI: 10.1007/s11182-018-1304-y
18. Kozhitov L. V., Muratov D. G., Kostishin V. G., Suslyayev V. I., Korovin E. Yu., Popkova A. V. FeCo/C nanocomposites: synthesis, magnetic and electromagnetic properties. *Russian Journal of Inorganic Chemistry*. 2017, vol. 62, no. 11, pp. 1499—1507. DOI: 10.1134/S0036023617110110
19. Vasilev A. A., Efimov M. N., Bondarenko G. N., Muratov D. G., Dzidziguri E. L., Ivantsov M. I., Kulikova M. V., Karpacheva G. P. Fe—Co alloy nanoparticles supported on IR pyrolyzed chitosan as catalyst for Fischer—Tropsch synthesis. *Chemical Physics Letters*. 2019, vol. 730, pp. 8—13. DOI: 10.1016/j.cplett.2019.05.034
20. Muratov D. G., Vasilev A. A., Efimov M. N., Karpacheva G. P., Dzidziguri E. L., Chernavskiy P. A. Metal-carbon nanocomposites FeNi/C: production, phase composition, magnetic properties. *Inorganic Materials: Applied Research*. 2019, vol. 10, no. 3, pp. 666—672. DOI: 10.1134/S2075113319030298
21. Vasilev A. A., Dzidziguri E. L., Muratov D. G., Zhilyaeva N. A., Efimov M. N., Karpacheva G. P. Morphology and dispersion of FeCo alloy nanoparticles dispersed in a matrix of IR pyrolyzed polyvinyl alcohol. *IOP Conference Series: Materials Science and Engineering*. 2018, vol. 347, pp. 012011. DOI: 10.1088/1757-899X/347/1/012011
22. Ferrari A. C. Raman spectroscopy of graphene and graphite: Disorder, electron-phonon coupling, doping and nonadiabatic effects. *Solid State Communications*. 2007, vol. 143, no. 1–2, pp. 47—57. DOI: 10.1016/j.ssc.2007.03.052
23. Ferrari A. C., Robertson J. Resonant Raman spectroscopy of disordered, amorphous, and diamondlike carbon. *Physical Review B*. 2001, vol. 64, no. 7, pp. 0754141—07541413. DOI: 10.1103/PhysRevB.64.075414

Acknowledgments

The synthesis of nanocomposites in this study was carried out as part of a State Program of Topchiev Institute of Petrochemical Synthesis, Russian Academy of Sciences.

Received February 1, 2021

* * *

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ В МАТЕРИАЛОВЕДЕНИИ ЭЛЕКТРОННЫХ КОМПОНЕНТОВ

MATHEMATICAL MODELING IN MATERIALS SCIENCE OF ELECTRONIC COMPONENTS

Известия высших учебных заведений. Материалы электронной техники. 2020. Т. 23, № 4. С. 270—276.
DOI: 10.17073/1609-3577-2020-4-270-276

УДК 621.365

Актуальные проблемы создания исследовательской инфраструктуры для синтеза новых материалов в рамках цифровой трансформации общества

© 2020 г. А. А. Зацаринный¹, К. К. Абгарян^{1,2,§}

¹ *Федеральный исследовательский центр «Информатика и управление»
Российской академии наук,
ул. Вавилова, д. 44, корп. 2, Москва, 119333, Россия*

² *Московский авиационный институт (национальный исследовательский университет),
Волоколамское шоссе, д. 4, Москва, 125993, Россия*

Аннотация. В статье рассмотрены основные аспекты значимости развития высокопроизводительной среды для научных исследований в условиях цифровой трансформации, применяемых при решении задач синтеза новых материалов с заданными свойствами. Приведены некоторые исторические факты, свидетельствующие об огромной роли, которую сыграли советские ученые в создании вычислительной техники для научных исследований. Дан анализ опыта Федерального исследовательского центра «Информатика и управление» РАН в создании современной высокопроизводительной платформы и ее использовании для научных исследований. Обоснована необходимость ее применения для решения прикладных задач, связанных с подбором новых материалов в области микроэлектроники.

Ключевые слова: исследовательская инфраструктура, синтез новых материалов, гибридная вычислительная архитектура, высокопроизводительный кластер, многомасштабное моделирование, нанoeлектроника, гетероструктура

Факторы, определяющие значимость высокопроизводительных вычислений в цифровой трансформации

Сегодня справедливо полагается, что именно цифровая трансформация дает возможность России войти в состав пяти ведущих экономик мира. При этом ключевым звеном успешного решения этой задачи в условиях нарастающих крупномасштабных угроз национальной безопасности России является повышение качества управленческих решений на всех уровнях государственного управления, т. к. большая часть проблем в развитии страны обусловлена именно неэффективным управлением [1]. Очевидно, что решение назревшего клубка проблем напрямую связано с процессами цифровой трансформации общества. Уже в этом году правительством принят ряд важных решений: предложен «Общенациональный план действий, ...», включая создание

системы управления, основанной на эффективном использовании данных и межведомственную интеграцию различных цифровых платформ; утверждена концепция развития регулирования отношений в сфере технологий искусственного интеллекта и робототехники до 2024 года; выделено финанси-

Зацаринный Александр Алексеевич¹ — доктор техн. наук, главный научный сотрудник, заместитель директора, <https://orcid.org/0000-0002-8872-2774>, e-mail: azatsarinny@frccsc.ru; **Абгарян Каринэ Карленовна**^{1,2,§} — доктор физ.-мат. наук, главный научный сотрудник, зав. отделом (1), зав. кафедрой (2), <https://orcid.org/0000-0002-0059-0712>, e-mail: kristal83@mail.ru

§ Автор для переписки

Статья подготовлена по материалам доклада, представленного на II-й международной конференции «Математическое моделирование в материаловедении электронных компонентов», Москва, 19—21 октября 2020 г. (Зацаринный А.А., Абгарян К.К.). Актуальные проблемы создания исследовательской инфраструктуры для синтеза новых материалов в рамках цифровой трансформации общества. М.: МАКС Пресс, 2020. С. 8—13. DOI: 10.29003/m1507.MMMSEC-2020/8-13)

рование на поддержку стартапов в сфере высоких технологий; принято постановление об информационном моделировании в строительстве (в России внедряется новый градостроительный подход с использованием информационной модели — *Building Information Model (BIM)*) [2—4].

Вместе с тем, по данным Организации экономического содействия и развития (Organisation for Economic Co-operation and Development, OECD) по уровню цифровизации Россия находится только в третьей группе стран, которые относят к потенциально лидирующим [5]. Невысокое 32-е место и в рейтинге ООН. При этом важно отметить, что в рейтинге ООН для крупных мегаполисов первое место в мире занимает Москва за счет высокого уровня онлайн сервисов мобильного банкинга Сбер, Яндекс и Тиньков [6].

Федеральный исследовательский центр «Информатика и управление» Российской академии наук (ФИЦ ИУ РАН) выполняет фундаментальные и прикладные исследования в интересах цифровой трансформации по ряду направлений, относящихся к первому приоритету Стратегии научно-технологического развития России, утвержденной Президентом 1 декабря 2016 г.¹ [7]. Среди них и высокопроизводительная платформа для научных исследований. Заметим, что ФИЦ ИУ РАН в мировом рейтинге Европейской научно-промышленной Палаты среди российских научных организаций в соответствии с результатами по десяти предметным спискам *World Research Institutions Ranking (WRIR)*, сохранил высшую категорию «А» [8].

Ведущие ученые ФИЦ ИУ РАН осуществляют активную преподавательскую деятельность в ведущих вузах по подготовке специалистов для цифровой трансформации (МГУ им. М.В. Ломоносова, МФТИ, МГТУ им. Баумана, МАИ, МИРЭА, РУДН и др.). Так, в работе [9] показана востребованность трех групп специалистов в условиях цифровой трансформации: математиков, программистов и специалистов по анализу больших данных.

Реализация Стратегии, в соответствии с определенными приоритетами, требует развития высокопроизводительной инфраструктуры, представляющей условия для проведения эффективных научных исследований, как научным коллективам, так и отдельным исследователям. Одной из важнейших задач, решаемых в рамках первого приоритета, является синтез новых материалов с заданными свойствами.

К факторам, определяющим значимость высокопроизводительных вычислений для решения такой задачи, следует отнести [10, 11]:

1. Синтез новых материалов с заданными свойствами является стратегически важным на-

правлением инновационного развития в рамках программы цифровой экономики, учитывая низкую инновационную активность России на фоне развитых государств.

2. Успешное решение задач синтеза новых материалов является основой прорывных технологий, необходимых для создания отечественной импорто-независимой электронной компонентной базы.

3. Кардинальное решение проблемы обеспечения информационной безопасности компьютерных систем различного назначения, прежде всего в интересах государственного управления, обороны, безопасности и правопорядка.

4. Требования создания перспективных комплексов вооружения и военной техники на отечественной электронной компонентной базе могут быть выполнены только за счет создания новых комплектующих элементов и материалов, а также технологий их получения.

5. Разработанный научно-методический аппарат требует адекватной поддержки в виде высокопроизводительной гибкой исследовательской инфраструктуры.

6. Создание современной исследовательской инфраструктуры должно стать мощным толчком для развития различных отраслей российской науки, которая находится в условиях концептуального перехода к новой парадигме в научных исследованиях, основанной на анализе накопленных больших данных в конкретных предметных областях [1].

7. Необходимость создания высокопроизводительной исследовательской инфраструктуры является стимулом кардинального реформирования системы подготовки специалистов. Так, факультет вычислительной математики и кибернетики МГУ имени М. В. Ломоносова, ориентирует программы обучения на подготовку специалистов в областях математического моделирования, систем программирования и методов анализа больших данных [9].

Последний фактор приобретает сегодня особое значение, так как постановки задач синтеза новых материалов вызывают необходимость применения современных методов математического моделирования, позволяющих адекватно отразить процессы исследуемой системы, применение которых принципиально требует высокопроизводительную вычислительную среду. Речь идет о методах комплексного моделирования, представляющих из себя синтез аналитического, имитационного и натурного моделирования исследуемых процессов. Такие постановки формулировались и ранее, однако условия для их реализации в виде высокопроизводительной вычислительной платформы появились только в последнее время.

При этом следует подчеркнуть, что все виды моделей в рамках комплексного моделирования играют свою роль на различных этапах исследований.

¹ Указ Президента Российской Федерации от 01.12.2016 г. № 642 «О Стратегии научно-технологического развития Российской Федерации». URL: <http://www.kremlin.ru/acts/bank/41449>

Реализация современных методов моделирования предъявляет повышенные требования не только к количественным характеристикам используемой вычислительной среды (производительность, надежность, емкость хранилища данных, процедуры доступа), но и к качественным показателям, характеризующим гибкость организации вычислительного процесса и эффективность использования вычислительных ресурсов.

Другими словами, современные факторы, определяемые потребностями цифровой трансформации общества, определяют актуальность представления вычислительных систем для научных исследований в виде высокопроизводительной цифровой платформы.

Некоторые исторические факты

Отечественная история развития вычислительной техники для научных исследований богата положительными примерами. Отметим некоторые из них.

В марте 2018 г. в Москве в здании РАН на пленарном заседании очередной (XXIV) годичной научной конференции Института истории естествознания и техники имени С. И. Вавилова (ИИЕТ РАН) было предложено 2018 г. считать годом 70-летия российской информатики [12]. Для этого были весомые основания: 70 лет назад, в 1948 г., постановлением Совета министров СССР (в ответ на известие о компьютерах США MARK и ENIAC) для разработки отечественной ЭВМ были образованы Институт точной механики и вычислительной техники (ИТМиВТ) и Специальное конструкторское бюро № 245 при Московском заводе счетно-аналитических машин.

ИТМиВТ возглавил выдающийся ученый академик С.А. Лебедев, который ранее в Институте электротехники АН Украинской ССР разработал МЭСМ-1 («малая электронно-счетная машина»). Эта был первый компьютер в континентальной Европе (и третьим в мире, после разработок США и Великобритании) [13, 14]. Будучи уже директором ИТМиВТ, С. А. Лебедев разработал большую электронную счетную машину — БЭСМ, которая на протяжении длительного времени использовалась в интересах научных исследований. Интересно, что автор изобретения «Автоматическая цифровая вычислительная машина» (авторское свидетельство от 04.12.1948) член-корреспондент АН СССР И. С. Брук продолжал работу над созданием ЭВМ в Энергетическом институте АН СССР (его не пригласили в ИТМиВТ). Машина, названная М-1, была разработана под его руководством уже декабре 1950 г. (практически одновременно с МЭСМ-1) небольшим коллективом совсем молодых людей (м.н.с. Т. Александриди, А. Залкинд, М. Карцев, Н. Матюхин, техники Л. Журкин, Ю. Рогачёв, Р. Шидловский).

Уже в октябре 1951 г. М-1 выполняла научные расчеты по прогнозированию нагрузки на электросеть по заданию Мосэнерго [14].

На упомянутой выше конференции в 2018 г. памятными дипломами и знаками IEEE (*Institute of Electrical and Electronics Engineers*) чествовали двух сотрудников из той команды И. С. Брука — Т. М. Александриди и Ю. А. Рогачёва [12].

Еще ряд исторических фактов связан с именем А. И. Китова, основавшего в 1954 г. первый в стране вычислительный центр. В 1956 г. была издана его монография «Электронные цифровые машины» по программированию, ЭВМ и различным их применениям. Более того, автор предложил использование ЭВМ для управления производством и решения задач экономики и, по существу, во многом предвосхищал ряд аспектов развития цифровой экономики. О непростой судьбе этого ученого и его выдающихся достижениях в сфере информатики подробно рассказано в двух монографиях, изданных к 100-летию А. И. Китова [15].

Огромный вклад в создание и развитие отечественной вычислительной техники внесли ученые Института кибернетики АН Украинской ССР под руководством академика В. М. Глушкова. В частности, следует отметить разработанный в этом институте вычислительный комплекс «Днепр-2», обеспечивающий работу в режиме разделения времени [16]. Одним из разработчиков этой ЭВМ был В. П. Семик, который в 80-е XX в. успешно работал в ИПИ АН СССР.

Об опыте ФИЦ ИУ РАН

Для повышения эффективности проведения экспериментальных исследований в интересах цифровой трансформации в ФИЦ ИУ РАН создана современная цифровая платформа для научных исследований [17]. Она представляет собой совокупность центра компетенций, высокопроизводительного вычислительного комплекса (**ГВБК**) и совокупности научных сервисов (аналитических, образовательных, библиотечных, вычислительных, аналитических и др.), которые предоставляют услуги различным сферам деятельности (образование, наука, бизнес, промышленность, государственные структуры).

ГВБК ФИЦ ИУ РАН имеет гибридную вычислительную архитектуру, в которой вычислительные ресурсы предоставляются исследователям в виде традиционных облачных услуг, а также с помощью специфических технологий научного сервиса как услуги (*RaaS, Research as a Service*) в виде предметно-ориентированных программ [18—20].

На базе ГВБК создан и зарегистрирован Центр коллективного пользования «Информатика», который предоставляет научным коллективам вычисли-

тельные ресурсы для проведения научных расчетов в виде облачных сервисов (SaaS, PaaS, RaaS). Реализуемые технологии обеспечивают развертывание всех видов программных комплексов (Frameworks) в индивидуальной виртуальной среде Docker, on-line доступ пользователей к инструментальным средствам ГВБК, интерактивную и пакетную обработку вычислительных заданий научных расчетов, создание личных кабинетов пользователей, а также единую точку входа и вспомогательные сервисы цифровой платформы.

Особенности решения задач для синтеза новых материалов

Обоснованы и сформулированы системные решения для проведения исследований с использованием ресурсов цифровой платформы, включая разработку средств предсказательного компьютерного моделирования физической структуры приборов наноэлектроники, нейроморфной архитектуры многоуровневых устройств памяти, дефектообразования в композитных материалах и другие [21—23].

На сегодня можно выделить следующие перспективные направления исследований, в области математического моделирования в материаловедении электронных компонентов:

- современные проблемы создания исследовательской инфраструктуры для синтеза новых материалов с заданными свойствами, включая применение новых методов и средств анализа больших данных;
- проблемы развития материаловедения квантоворазмерных электронных гетероструктур;
- математическое моделирование в структурном материаловедении (многоуровневые, многомасштабные модели, имитационные модели и т.д.);
- моделирование размерных, радиационных, поверхностных и других дефектов в полупроводниковой наноэлектронике;
- моделирование работы многоуровневых элементов памяти для компьютеров следующего поколения;
- моделирование структур и свойств композиционных материалов с нанокристаллами, нанокластерами, наноаморфными включениями и т. д.

Остановимся на некоторых из перечисленных направлений. Как известно, проведение исследований в области материаловедения вычислительно весьма затратны и решение широкого класса задач, в том числе связанных с предсказанием с заданной точностью структурных особенностей и свойств новых материалов, в частности в микроэлектронике, невозможно без применения высокопроизводительных вычислительных средств. В большинстве случаев, вопросы, связанные с синтезом новых материалов можно отнести к многомасштабным научным

проблемам, то есть включающим в себя явления несопоставимых пространственных и/или временных масштабов, изучение которых невозможно без учета всех факторов, играющих ключевые роли в таких задачах.

В настоящее время, развитие методов многомасштабного компьютерного моделирования с размещением программного обеспечения на вычислительных кластерах гибридной архитектуры дает возможность решать задачи по созданию новых материалов в области микроэлектроники. Широко используются методы предсказательного компьютерного моделирования, основанные на применении многомасштабных подходов, которые непосредственно связаны с проведением расчетов на разных масштабных уровнях, зачастую в параллельных режимах и требующих все больших вычислительных затрат. В расчетах на каждом масштабном уровне задействуются программные модули, соответствующие физико-математическим моделям. Так результаты квантово-механических исследований в рамках теории функционала электронной плотности (DFT), реализованные в таких пакетах прикладных программ как Vasp (<https://www.vasp.at>), Siesta (<https://departments.icmab.es/leem/siesta/>), Quantum Espresso (<http://www.quantum-espresso.org>) и других, развернутых на высокопроизводительных кластерах, на сегодня являются одними из наиболее востребованными и по точности решений сравнимыми с экспериментальными данными. Данные пакеты позволяют рассчитать атомно-кристаллическую структуру, а также электронные, фоновые свойства материалов с заданной химической формулой. Кроме того, применение пакетных приложений, таких как, например, программный комплекс Abinit (<https://www.abinit.org>) и другие существенно расширяет возможности изучения различных наблюдаемых свойств материалов, включая оптические, механические, вибрационные и другие. Оригинальные программные разработки, в которых реализованы новые подходы к моделированию в области вычислительного материаловедения, такие например как методы многомасштабного дискретно-элементного моделирования [24], Разработка программных решений, включающих как оригинальные авторские разработки, так и пакетные приложения дает возможность существенно расширить класс решаемых задач.

Построение многомасштабных математических моделей для решения конкретной задачи вычислительно весьма затратно и требуют применения высокопроизводительных ресурсов. Особое значение имеет разработка новых интеграционных платформ, размещенных на высокопроизводительных вычислительных комплексах, которые позволяют решать такие задачи. Так в ФИЦ ИУ РАН на сегодня разработана интеграционная платформа для много-

масштабного моделирования нейроморфных систем [25], которая позволяет изучить влияние различных факторов на процесс обучения нейроморфной сети, и представит возможность формировать информацию для обоснованного выбора новых материалов, строения и топологии ячеек памяти компьютеров следующего поколения.

Стремительное развитие машинного обучения в качестве мощного метода интеграции данных дает возможность за ограниченное время находить решение сложных задач в разных предметных областях. В настоящее время ведутся активные исследования в области применения алгоритмов машинного обучения в задачах материаловедения.

Однако, классические методы машинного обучения часто игнорируют фундаментальные законы физики, что приводит к некорректным задачам или нефизичным решениям.

Многомасштабное моделирование — это успешная стратегия интеграции мультимасштабных, многофизических данных, позволяющая раскрыть механизмы и объяснить функциональные зависимости при изучении физических явлений и процессов.

Интеграция многомасштабного моделирования и методов анализа данных позволяет разрабатывать новые эффективные методы и технологии для проведения комплексных исследований в области естественных и технических наук.

Например, при решении задач, связанных с:

- моделированием технологических процессов, физических структур и устройств микроэлектроники с применением технологий многомасштабного моделирования;
- многомасштабным моделированием многоуровневых элементов памяти для компьютеров нового поколения;
- созданием виртуальных моделей микроэлектронных устройств, в том числе транзисторов, сенсоров, датчиков внешних воздействий;
- развитием методов многомасштабного моделирования, анализа данных и программных средств для разработки виртуальной модели и создания на ее основе нового поколения высокочувствительных, радиационностойких датчиков внешних воздействий с расширенным спектром функциональных свойств в интересах оборонной отрасли.

Использовался интеграционный подход включающий применение методов многомасштабного моделирования и анализа данных с размещением соответствующего программного комплекса на высокопроизводительном программном кластере гибридной архитектуры ФИЦ ИУ РАН.

В расчетах было задействовано до 50 млн чистец, что дало возможность с высокой степенью точности воспроизвести результаты натурных экспериментов и получить качественное пространственно-временное воспроизведение процесса.

В настоящее время компьютерное моделирование стало стандартным инструментом практически во всех областях химии, физики конденсированного состояния и материаловедения. Чтобы идти в ногу с современными экспериментами и постоянно растущей сложностью исследуемых проблем, постоянно возрастает потребность в моделировании более реалистичных, то есть более крупных модельных систем с повышенной точностью. Во многих случаях наличие достаточно эффективных межатомных потенциалов, обеспечивающих надежные энергии и силы, стало серьезным препятствием для выполнения этих симуляций. Для решения этой проблемы в настоящее время происходит смена парадигмы в развитии межатомных потенциалов.

Заключение

Развитие высокопроизводительной среды для научных исследований в условиях цифровой трансформации является актуальной задачей. Исторические факты свидетельствуют о огромном внимании руководства СССР к этому направлению, что обеспечивало ведущие позиции страны в развитии вычислительной техники для научных исследований. Большую роль в развитии этого направления сыграли советские ученые (С. А. Лебедев, И. С. Брук, А. И. Берг, А. И. Китов и др.).

В настоящее время ФИЦ ИУ РАН проводит активные исследования и разработки по развитию современной высокопроизводительной платформы для научных исследований в сфере синтеза новых материалов с заданными свойствами на основе многомасштабного математического моделирования.

Библиографический список

1. Зацаринный А. А., Киселев Э. В., Козлов С. В., Колин К. К. Информационное пространство цифровой экономики России. Концептуальные основы и проблемы формирования / под общ. ред. А. А. Зацаринного. М.: ФИЦ ИУ РАН; ООО «НИПКЦ Восход-А», 2018. 236 с.
2. Михаил Мишустин провел совещание по подготовке плана восстановления экономики, занятости и доходов населения. URL: <http://government.ru/news/39777/>
3. Концепция развития регулирования отношений в сфере технологий искусственного интеллекта и робототехники до 2024 года. Утверждена Распоряжением Правительства Российской Федерации от 19 августа 2020 г. № 2129-р. URL: <http://government.ru/docs/all/129505/>
4. Постановление Правительства Российской Федерации от 15 сентября 2020 года № 1431 «Об утверждении Правил формирования и ведения информационной модели объекта капитального строительства, состава сведений, документов и материалов, включаемых в информационную модель объекта капитального строительства и представляемых в форме электронных документов, и требований к форматам указанных электронных документов, а также о внесении изменения в пункт 6 Положения о выполнении инженерных изысканий для подготовки проектной документации, строительства, реконструкции объектов капитального строительства». URL: <http://government.ru/docs/40424/>
5. Организация экономического сотрудничества и развития. URL: <https://www.oecd.org/>
6. Швецов А. Н., Рысина В. Н. Цифровые технологии в государственном управлении. Российские устремления на фоне зарубежного опыта: Коллективная монография. М.: ПолиПринт-Сервис, 2019. 60 с.

7. Зацаринный А. А. О роли научных исследований в рамках цифровой трансформации общества // Социальные науки и социальные науки. 2020. Т. 1, № 1. С. 47—59. DOI: 10.31249/snsn/2020.01.04
8. Рейтинг World Research Institutions Ranking (WRIR). URL: <http://eurochambres.org/wrir/>
9. Академик РАН И. Соколов: «БМК МГУ — это безусловная востребованность» // Портал «Научная Россия». 12.08.2020. URL: <https://scientificrussia.ru/articles/akademik-ran-i-sokolov-vmkgu-eto-bezuslovnaya-vostrebovannost>
10. Зацаринный А. А., Абгарян К. К. Факторы, определяющие актуальность создания исследовательской инфраструктуры для синтеза новых материалов в рамках реализации приоритетов научно-технологического развития России // Математическое моделирование в материаловедении электронных компонентов: материалы I международной конференции, Москва, 21–23 октября 2019 г. М.: МАКС Пресс, 2019. С. 8—11. DOI: 10.29003/m682.MMMSEC-2019
11. Зацаринный А. А., Абгарян К. К. Факторы, определяющие актуальность создания исследовательской инфраструктуры для синтеза новых материалов в рамках реализации приоритетов научно-технологического развития России // Известия высших учебных заведений. Материалы электронной техники. 2019. Т. 22, № 4. С. 298—301. DOI: 10.17073/1609-3577-2019-4-298-301
12. Программа XXIV Годиной научной международной конференции Института истории естествознания и техники им. С.И. Вавилова РАН. 19–23 марта 2018 г. М.: ИИЕТ РАН, 2018. 36 с. URL: <http://ihst.ru/publications/iiet-annual-conference/>
13. Кауфман Б. История, которую стоит переписать: где на самом деле сделали первый советский компьютер. Истоки первых ЭВМ в СССР // Indicator.Ru. 17.04.2018. URL: <https://indicator.ru/mathematics/pervyj-sovetskij-kompyuter.htm>
14. Малиновский Б. Н. История вычислительной техники в лицах. К.: фирма «КИТ»; ПТОО «А.С.К.», 1995. 384 с.
15. Анатолий Иванович Китов / под ред. В. В. Шилова и В. А. Китова. М.: МАКС Пресс, 2020. 688 с. DOI: 10.29003/m871.kitov
16. Глушков В. М., Семик В. П. Управляющая система «Днепр-2». Математическое обеспечение. К.: РИО Ин-та кибернетики АН УССР, 1968.
17. Зацаринный А. А., Кондрашев В. А., Сорокин А. А. Алгоритмы управления сервис-ориентированными процессами де-
- терминированных научных сервисов в гибридных вычислительных средах цифровых платформ // Системы высокой доступности. 2020. Т. 16, № 3. С. 5—17. DOI: 10.18127/j20729472-202003-01
18. Зацаринный А. А., Волович К. И., Кондрашев В. А. Методологические вопросы управления научными сервисами научных и образовательных организаций Российской Федерации // Сб. трудов XXIII Международной научно-технической конференции «Радиолокация, навигация, связь». В 3-х томах, Воронеж, 18–20 апреля 2017 года. Т. 1. Воронеж: ООО «Вэлборн», 2017. С. 7—14.
19. Кондрашев В. А. Архитектура системы предоставления сервисов цифровой платформы для научных исследований // Системы и средства информатики. 2018. Т. 28, № 3. С. 131—140. DOI: 10.14357/08696527180310
20. Zatsarinny A. A., Kondrashev V. A., Sorokin A. A. Approaches to the organization of the computing process of a hybrid high-performance computing cluster in the digital platform environment // CEUR Workshop Proceedings: ITHPC 2019 – Short Paper Proc. 5th International Conference on Information Technologies and High-Performance Computing, Khabarovsk, 16–19 September 2019. V. 2426. Khabarovsk, 2019. P. 12—16.
21. Абгарян К. К. Многомасштабное моделирование в задачах структурного материаловедения. М.: МАКС Пресс, 2017. 284 с.
22. Абгарян К. К. Задачи оптимизации наноразмерных полупроводниковых гетероструктур // Известия высших учебных заведений. Материалы электронной техники. 2016. Т. 19, № 2. С. 108—114. DOI: 10.17073/1609-3577-2016-2-108-114
23. Абгарян К. К. Многомасштабное моделирование работы многоуровневых элементов памяти, применяемых для создания нейроморфных сетей // Математическое моделирование в материаловедении электронных компонентов: материалы I международной конференции, Москва, 21–23 октября 2019 г. М.: МАКС Пресс, 2019. С. 53—55. DOI: 10.29003/m682.MMMSEC-2019
24. Zhuravlev A. A., Abgaryan K. K., Reviznikov D. L. Discrete element method adopting microstructure information // In: Jain L., Favorskaya M., Nikitin I., Reviznikov D. (Eds) Advances in Theory and Practice of Computational Mechanics. Smart Innovation, Systems and Technologies. V. 173. Singapore: Springer, 2020. P. 225—237. DOI: 10.1007/978-981-15-2600-8_17
25. Абгарян К. К., Гаврилов Е. С. Интеграционная платформа для многомасштабного моделирования нейроморфных систем // Информатика и ее применения. 2020. Т. 14, № 2. С. 104—110. DOI: 10.14357/19922264200215

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках проектов № 18–29–0391 и № 19–29–03051.

Статья поступила в редакцию 11 февраля 2021 г.

Izvestiya vuzov. Materialy elektronnoy tekhniki = Materials of Electronics Engineering. 2020, vol. 23, no. 4, pp. 270—276. DOI: 10.17073/1609-3577-2020-4-270-276

Current problems of creation of research infrastructure for synthesis of new materials in the framework of the digital transformation of society

A. A. Zatsarinny¹, K. K. Abgaryan^{1,2,§}

¹ *Federal Research Centre “Information and Control” of the Russian Academy of Sciences,
44–2 Vavilov Str., Moscow 119333, Russia*

² *Moscow Aviation Institute (National Research University),
4 Volokolamskoe Shosse, Moscow 125993, Russia*

Abstract. The article discusses the main aspects of the significance of the development of a high-performance environment for scientific research in the conditions of digital transformation, used in solving the problems of synthesis of new materials with desired properties. Some historical facts are given that testify to the enormous role played by Soviet scientists in the

Information about authors:

Alexander A. Zatsarinny¹ — Dr. Sci. (Eng.), Chief Researcher, Deputy Director, <https://orcid.org/0000-0002-8872-2774>, e-mail: azatsarinny@frccsc.ru; **Karine K. Abgaryan**^{1,2,§} — Dr. Sci. (Phys.-Math.), Chief Researcher, Head of the Department (1), Head of the Department (2), <https://orcid.org/0000-0002-0059-0712>, e-mail: kristal83@mail.ru

§ Corresponding author

creation of computer technology for scientific research. The analysis of the experience of the Federal Research Centre "Information and Control", RAS in the creation of a modern high-performance platform and its use for scientific research is given. The necessity of its application for solving applied problems related to the selection of new materials in the field of microelectronics is substantiated.

Keywords: research infrastructure, synthesis of new materials, hybrid computing architecture, high-performance cluster, multiscale modeling, nanoelectronics, heterostructure

References

1. Zatsarinnyy A. A., Kiselev E. V., Kozlov S. V., Kolin K. K. Information space of the digital economy of Russia. Conceptual foundations and problems of formation. Moscow: OOO "NIPKT's Voskhod-A", 2018. 236 p. (In Russ.)
2. Mikhail Mishustin held a meeting on the preparation of a plan for the recovery of the economy, employment and incomes of the population. (In Russ.). URL: <http://government.ru/news/39777/>
3. Concept for the development of regulation of relations in the field of artificial intelligence technologies and robotics until 2024. Approved by Order of the Government of the Russian Federation of August 19, 2020 No. 2129-r. (In Russ.). URL: <http://government.ru/docs/all/129505/>
4. Decree of the Government of the Russian Federation of September 15, 2020 No. 1431 "On approval of the Rules for the formation and maintenance of an information model of a capital construction object, the composition of information, documents and materials included in the information model of a capital construction object and submitted in the form of electronic documents, and requirements for formats of these electronic documents, as well as on amending paragraph 6 of the Regulations on the implementation of engineering surveys for the preparation of project documentation, construction, reconstruction of capital construction objects. (In Russ.). URL: <http://government.ru/docs/40424/>
5. Organisation for Economic Co-operation and Development. URL: <https://www.oecd.org/>
6. Shvetsov A. N., Rysina V. N. Digital technologies in public administration. Russian aspirations against the background of foreign experience: Collective monograph. Moscow: PolyPrintService, 2019. 60 p. (In Russ.)
7. Zatsarinnyy A. A. About the role of scientific research as part of the digital transformation of society. *Social Novelties and Social Sciences*. 2020, vol. 1, no. 1, pp. 47–59. (In Russ.). DOI: 10.31249/snsn/2020.01.04
8. World Research Institutions Ranking (WRIR). URL: <http://eurochambres.org/wrir/>
9. Academician of the Russian Academy of Sciences I. Sokolov: "Faculty of Computational Mathematics and Cybernetics of the Moscow State University is an unconditional demand". *Portal "Scientific Russia"*. 08.12.2020. (In Russ.). URL: <https://scientificrussia.ru/articles/akademik-ran-i-sokolov-vmk-mgu-eto-bezuslovnaya-vostrebovanost>
10. Zatsarinnyy A. A., Abgaryan K. K. Factors determining the relevance of creating a research infrastructure for the synthesis of new materials in the framework of the implementation of the priorities of the scientific and technological development of Russia. *Mathematical Modeling in Materials Science of Electronic Component: Proc. I International Conference. Moscow, October 21–23, 2019*. Moscow: MAKS Press, 2019. Pp. 8–11. (In Russ.). DOI: 10.29003/m682.MMMSEC-2019
11. Zatsarinnyy A. A., Abgaryan K. K. Factors determining the relevance of creation research infrastructure for the synthesis of new materials in the framework of the implementation of the priorities of scientific and technological development of Russia. *Izvestiya Vysshikh Uchebnykh Zavedenii. Materialy Elektronnoi Tekhniki = Materials of Electronics Engineering*. 2019, vol. 22, no. 4, pp. 298–301. (In Russ.). DOI: 10.17073/1609-3577-2019-4-298-301
12. Program of the XXIV Annual Scientific International Conference of the S.I. Vavilov Institute for the History of Science and Technology, RAS. March 19–23, 2018. Moscow: IHST RAS, 2018. 36 p. (In Russ.). URL: <http://ihst.ru/publications/iiet-annual-conference/>
13. Kaufman B. A story worth rewriting: where the first Soviet computer was actually made. The origins of the first computers in the USSR. *Indicator.Ru*. 04.17.2018. (In Russ.). URL: <https://indicator.ru/mathematics/pervyj-sovetskij-kompyuter.htm>
14. Malinovsky B. N. The history of computer technology in faces. Kyiv: firma "KIT"; PTOO "A.S.K.", 1995. 384 p. (In Russ.)
15. Anatoly Ivanovich Kitov / Ed. V. V. Shilov and V. A. Kitov. Moscow: MAKS Press, 2020. 688 p. (In Russ.). DOI: 10.29003/m871.kitov
16. Glushkov V. M., Semik V. P. Control system "Dnepr-2". Mathematical support. Kyiv: RIO In-ta kibernetiki AN USSR, 1968. (In Russ.)
17. Zatsarinnyy A. A., Kondrashev V. A., Sorokin A. A. Algorithms for managing service-oriented processes of determinate research services in hybrid computing environments of digital platforms. *Highly Available Systems*. 2020, vol. 16, no. 3, pp. 5–17. (In Russ.). DOI: 10.18127/j20729472-202003-01
18. Zatsarinnyy A. A., Volovich K. I., Kondrashev V. A. Methodological problems of management of Russian Federation scientific and educational organizations science services. In: *Proc. XXIII International Scientific and Technical Conference "Radar, navigation, communication"*. In 3 vols. Voronezh: OOO "Velborn", 2017. Pp. 7–14. (In Russ.)
19. Kondrashev V. A. Architecture of the service delivery system for the research services digital platform. *Systems and Means of Informatics*. 2018, vol. 28, iss. 3, pp. 131–140. (In Russ.). DOI: 10.14357/08696527180310
20. Zatsarinnyy A. A., Kondrashev V. A., Sorokin A. A. Approaches to the organization of the computing process of a hybrid high-performance computing cluster in the digital platform environment. *CEUR Workshop Proc.: 5th International Conference on Information Technologies and High-Performance Computing, ITHPC 2019; Computing Center of Far East Branch of the Russian Academy of Science, Khabarovsk, 16–19 September 2019, vol. 2426*. Khabarovsk, 2019. Pp. 12–16.
21. Abgaryan K. K. *Multiscale modeling in problems of structural materials science*. Moscow: MAKS Press, 2017. 284 p. (In Russ.)
22. Abgaryan K. K. Optimization problems of nanosized semiconductor heterostructures. *Russian Microelectronics*. 2018, vol. 47, no. 8, pp. 583–588. DOI: 10.1134/S1063739718080024
23. Abgaryan K. K. Multiscale modeling of the operation of multilevel memory elements used to create neuromorphic networks. *Mathematical Modeling in Materials Science of Electronic Component: Proc. I International Conference. Moscow, October 21–23, 2019*. Moscow: MAKS Press, 2019. Pp. 53–55. (In Russ.). DOI: 10.29003/m682.MMMSEC-2019
24. Zhuravlev A. A., Abgaryan K. K., Reviznikov D. L. Discrete element method adopting microstructure information. In: Jain L., Favorskaya M., Nikitin I., Reviznikov D. (Eds) *Advances in Theory and Practice of Computational Mechanics. Smart Innovation, Systems and Technologies, vol. 173*. Singapore: Springer, 2020. Pp. 225–237. DOI: 10.1007/978-981-15-2600-8_17
25. Abgaryan K. K., Gavrilov E. S. Integration platform for multiscale modeling of neuromorphic systems. *Informatics and Applications*. 2020, vol. 14, iss. 2, pp. 104–110. (In Russ.). DOI: 10.14357/19922264200215

Acknowledgments

The study was carried out with the financial support of the Russian Foundation for Basic Research within the framework of projects No. 18–29–0391 and No. 19–29–03051.

Received February 11, 2021

УДК 621.315;004.3:004.9

Самосинхронные схемы как база создания высоконадежных высокопроизводительных компьютеров следующего поколения

© 2020 г. А. А. Зацаринный¹, Ю. А. Степченков^{1,§}, Ю. Г. Дьяченко¹,
Ю. В. Рождественский¹

¹ *Федеральный исследовательский центр «Информатика и управление»
Российской академии наук,
ул. Вавилова, д. 44, корп. 2, Москва, 119333, Россия*

Аннотация. В работе предлагаются конструктивные и схемотехнические решения для реализации высокопроизводительных компьютеров следующего поколения. Они основаны на методологии проектирования самосинхронных схем и обеспечивают повышение устойчивости вычислительных систем к логическим сбоям, являющимся следствием наведенных помех и радиационного воздействия.

Ключевые слова: самосинхронная схема, индикация, сбоеустойчивость, КМОП, многопороговый транзистор

Введение

В последние годы увеличение производительности цифровых вычислительных устройств наталкивается на необходимость преодоления проблем, возникающих в синхронной схемотехнике. Основным трендом современной микроэлектроники являются постоянная борьба за снижение энергопотребления и соблюдение жестких требований к надежности и помехозащищенности схем. В настоящее время существует достаточно хорошо проработанная альтернатива синхронным схемам — самосинхронные (СС) схемы [1—3]. Они являются многообещающей заменой синхронных схем в качестве схемотехнической базы для создания компьютеров нового поколения,

обеспечивая бесперебойную работу в нестабильных условиях эксплуатации вычислительных систем (напряжения питания, температуры) и повышенную устойчивость к воздействию неблагоприятных факторов окружающей среды.

СС-схемы лишены основных недостатков синхронных схем, например, избыточного потребления вследствие наличия глобальных цепей синхронизации. В сравнении с синхронными аналогами СС-схемы обладают следующими основными преимуществами:

- стабильная работа в изменяющихся условиях эксплуатации;
- предотвращение генерации некорректных данных при появлении константной неисправности, при которой выход элемента «залипает» в одном состоянии.

СС-схемы естественно устойчивы к параметрическим отказам, вызываемым процессами старения и неблагоприятными воздействиями окружающей среды. Они автоматически прекращают функционирование при статическом отказе элемента и локализируют неисправность. Благодаря своей дисциплине работы, они обнаруживают все константные неисправности и характеризуются более высокой по сравнению с синхронными аналогами устойчивостью к помехам и кратковременным логическим сбоям.

В данной работе обсуждаются конструктивные и схемотехнические методы повышения надежности СС-схем и вычислительных систем на их основе и даются рекомендации по их реализации.

Зацаринный Александр Алексеевич¹ — доктор техн. наук, главный научный сотрудник, заместитель директора, <https://orcid.org/0000-0002-8872-2774>, e-mail: azatsarinny@frccsc.ru; **Степченков Юрий Афанасьевич**^{1,§} — канд. техн. наук, ведущий отделом, <https://orcid.org/0000-0003-4784-7519>, e-mail: YStepchenkov@ipiran.ru; **Дьяченко Юрий Георгиевич**¹ — канд. техн. наук, старший научный сотрудник, <https://orcid.org/0000-0003-0212-4931>, e-mail: diaura@mail.ru; **Рождественский Юрий Владимирович**¹ — канд. техн. наук, ведущий научный сотрудник, e-mail: YRogdest@ipiran.ru

§ Автор для переписки

Статья подготовлена по материалам доклада, представленного на II-й международной конференции «Математическое моделирование в материаловедении электронных компонентов», Москва, 19—21 октября 2020 г. (Зацаринный А.А., Степченков Ю.А., Дьяченко Ю.Г., Рождественский Ю.В. Самосинхронные схемы как база создания высоконадежных высокопроизводительных компьютеров следующего поколения. М.: МАКС Пресс, 2020. С. 114—116. DOI: 10.29003/m1535.MMMSEC-2020/114-116)

Повышение сбоеустойчивости СС–схем

Проектирование действительно СС–схем основано на четыре основных принципах [1]: избыточном кодировании информационных бит; двухфазном поведении; индикации окончания переключения схемы в очередное состояние; запрос–ответном взаимодействии соседних в тракте обработки информации СС–устройств. Избыточное кодирование позволяет относительно простыми средствами различить соседние состояния СС–схемы в процессе ее работы. Наиболее популярными способами избыточного кодирования информационных бит являются парафазное со спейсером, бифазное с сигналом управления и унарное с сигналом управления кодирование [2].

Использование парафазного кода для представления информационных сигналов [4] упрощает индикацию окончания переходных процессов в элементах СС–схемы и повышает надежность передачи информации между блоками вычислительной системы. Традиционно парафазный информационный сигнал имеет два рабочих состояния («01», «10») и одно спейсерное состояние («00» — нулевой спейсер или «11» — единичный спейсер). Они представляют значение парафазного сигнала в любой момент времени. Четвертое состояние двухбитового представления парафазного сигнала (соответственно, «11» или «00») считается запрещенным. В отсутствие логических сбоев оно в СС–схеме никогда не реализуется.

Однако в реальных условиях эксплуатации СС–схемы подвержены воздействию электромагнитных помех и радиации, которые могут привести к локальному изменению потенциала какой-либо цепи схемы. Современные цифровые сверхбольшие интегральные схемы (**СБИС**) изготавливаются по технологии комплементарный металл–оксид–полупроводник (**КМОП**). Их работа основана на коммутации питания и «земли» на выход логиче-

ского элемента КМОП–транзисторами, управляемых затворными потенциалами. Поэтому изменение потенциала на затворе из-за внешнего воздействия может привести к сбойному переключению транзистора и изменению состояния парафазного сигнала, формируемого двумя логическими элементами.

Анализ поведения самосинхронных схем в условиях воздействия неблагоприятных факторов окружающей среды, приводящих к появлению кратковременных логических сбоев, показывает, что СС–схемы обладают естественной устойчивостью к кратковременным логическим сбоям. Они маскируют более 80 % логических сбоев за счет своих принципов организации и функционирования: двухфазной дисциплины и избыточного кодирования информационных сигналов.

Традиционная индикация СС–схем, определяющая окончание переключения схемы в очередную фазу работы, основана на использовании элемента ИЛИ–НЕ (для нулевого спейсера) или И–НЕ (для единичного спейсера). Поэтому состояние, противоположное спейсеру (анти–спейсер), воспринимается как рабочее, что приводит к распространению логической ошибки по схеме. Однако индикация запрещенного состояния парафазного сигнала, появляющегося в результате логического сбоя, как спейсера [5], маскирует данный логический сбой, предотвращая генерацию некорректного результата на выходе СС–схемы. Для реализации такого свойства достаточно в качестве элемента первого каскада индикаторной подсхемы СС–схемы использовать элемент «равнозначность» или «неравнозначность» [6].

Индикация анти–спейсера как спейсера и модификация С–элемента, основного элемента индикаторной подсхемы СС–схем, с целью предотвращения «залипания» его в состоянии анти–спейсера в составе регистра ступени СС–конвейера [6], как показано на рис. 1, обеспечивают повышение устойчивости СС–схем к кратковременным логическим сбоям на 11,5 %.

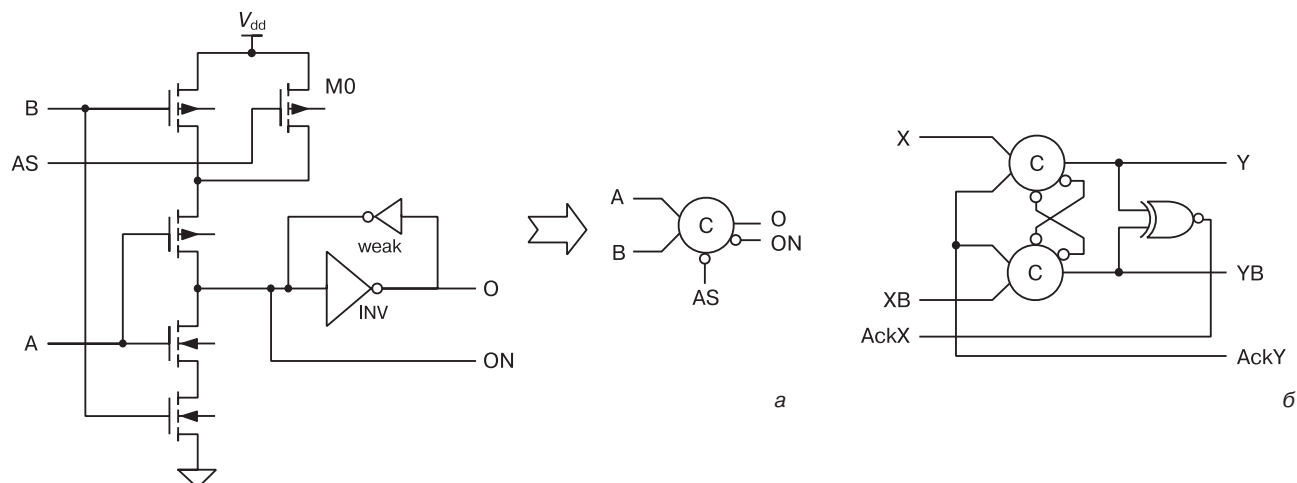


Рис. 1. С–элемент, маскирующий состояние анти–спейсера (а) и разряд регистра СС–конвейера на его основе (б)
Fig. 1. C–element that masks the state of the anti–spacer (a) and the bit of the register of the ST–case based on it (b)

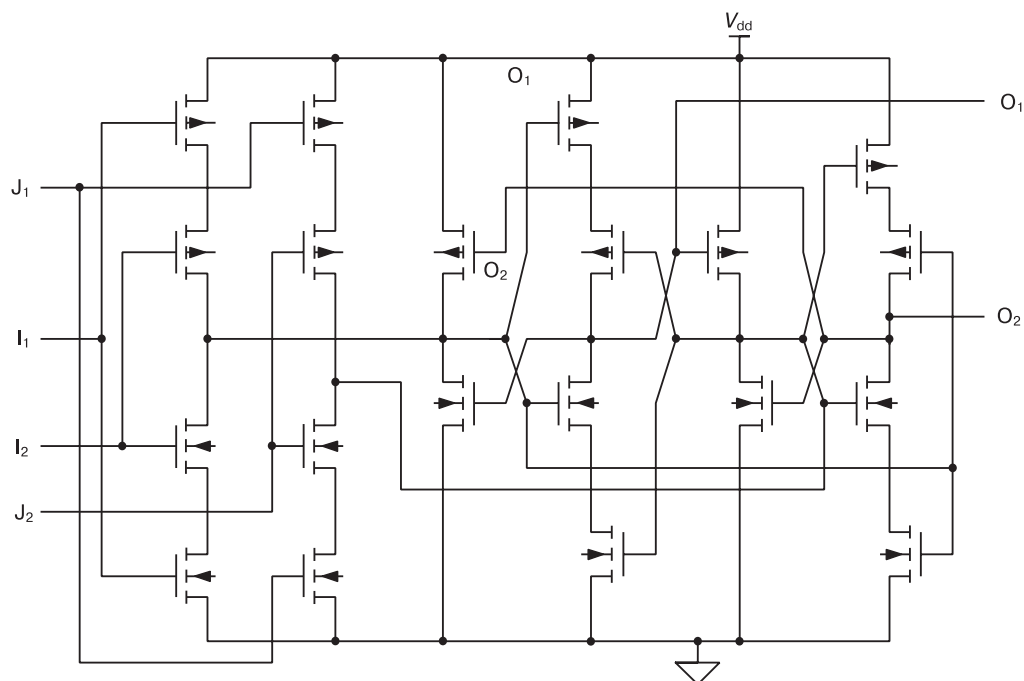


Рис. 2. Сбоеустойчивый С-элемент

Fig. 2. Fault-tolerant C-element

Логические сбои, возникающие по тем же причинам в индикаторной подсхеме СС-схемы, парируются за счет использования *Dual Interlocked Cell* (DICE) подхода [7]. Схема С-элемента DICE-

Функционирование многопороговых инверторов

[Operation of multi-threshold inverters]

Схема рис. 3, а		Схема рис. 3, б		Схема рис. 3, в	
X	Y	X	Y	X	Y
V_{dd}	V_{ss}	V_{dd}	V_{ss}	V_{dd}	V_{ss}
V_{cc}	G_{nd}	G_{nd}	G_{nd}	G_{nd}	G_{nd}
G_{nd}	V_{cc}	V_{ss}	V_{dd}	V_{ss}	V_{dd}
V_{ss}	V_{dd}	—	—	—	—

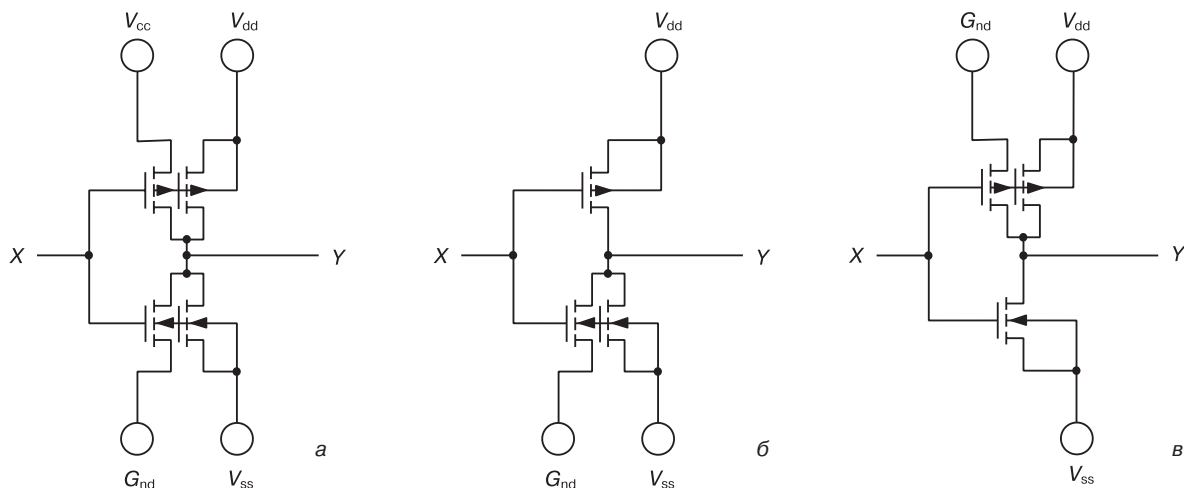


Рис. 3. Варианты инвертора на многопороговых КМОП-транзисторах

Fig. 3. Variants of the inverter on multithreshold CMOS transistors

типа показана на рис. 2. Она маскирует одиночные логические сбои во внутренних узлах С-элемента и предотвращает распространение логических сбоев, возникших на его выходах.

Предложенные конструктивные и схемотехнические методы проектирования критических узлов СС-схем повышают устойчивость комбинационных СС-схем к кратковременным логическим сбоям до уровня 96 %, а СС-конвейера — до уровня 98,5 %.

Уменьшение сложности СС-схем

Основной недостаток самосинхронных схем — аппаратная избыточность, связанная с избыточным кодированием информационных сигналов и необходимостью подтверждения завершения процессов пе-

реключения всех элементов схемы. Действительно, парафазное кодирование информационных сигналов и наличие индикаторной подсхемы в 2,5—3 раза увеличивает сложность комбинационной СС-схемы в сравнении с синхронным аналогом. Однако исследования показывают возможность сокращения аппаратных затрат на реализацию СС-схем за счет использования нового схемотехнического компонента — многопорогового транзистора. Его применение позволило бы упростить схемотехническую и топологическую реализации СС-схем и за счет этого дополнительно увеличить их помехо- и сбоеустойчивость.

Схемы вариантов инвертора на многопороговых КМОП-транзисторах показаны на рис. 3. Они коммутируют на выход разные высокие (V_{cc} , V_{dd}) и низкие (G_{nd} , V_{ss}) уровни под управлением соответствующего уровня входного сигнала X в соответствии с таблицей.

Однако, использование многопороговых МОП-транзисторов сопряжено с изменением стандартного технологического маршрута изготовления КМОП СБИС и с уменьшением помехоустойчивости схемы, поскольку она обладает повышенной чувствительностью к потенциалу на затворе многопорогового транзистора. Поэтому необходимы дополнительные исследования для проверки целесообразности применения многопороговых транзисторов в цифровой схемотехнике вообще и в СС-схемах в частности.

Заключение

СС-схемы являются перспективным схемотехническим базисом для создания высокопроизводительных и высоконадежных компьютеров следующего поколения благодаря своим уникальным свойствам.

В работе предложены новые подходы к повышению надежности СС-схем в базисе КМОП технологии, включающие схемотехнические, конструктив-

ные и топологические способы. В совокупности они позволяют повысить устойчивость комбинационных СС-схем к кратковременным логическим сбоям до уровня 96 %, а СС-конвейера — до уровня 98,5 %.

Разработка многопороговых МОП транзисторов и схемотехники основных элементов СС-схем на их основе позволит, по предварительным оценкам, сократить сложность СС-устройств и площадь их топологической реализации, тем самым снижая их энергопотребление и повышая сбоеустойчивость. Но этот вопрос требует дальнейших исследований.

Библиографический список

1. Степченко Ю. А., Дьяченко Ю. Г., Горелкин Г. А. Самосинхронные схемы — будущее микроэлектроники // Вопросы радиоэлектроники. 2011. Т. 4, № 2. С. 153—184.
2. Степченко Ю. А., Денисов А. Н., Дьяченко Ю. Г., Гринфельд Ф. И., Филимоненко О. П., Морозов Н. В., Степченко Д. Ю., Плеханов Л. П. Библиотека функциональных ячеек для проектирования самосинхронных полужаказных БМК микросхем серий 5503/5507. М.: Техносфера, 2017. 367 с. URL: <http://www.technosfera.ru/lib/book/497>
3. Tailor R. A., Reese R. B. Uncle—Unified NCL Environment—an NCL design tool. Ch. 14 // In: Di J., Smith S. C. (Eds) Asynchronous Circuit Applications. 2019. P. 293—307. DOI: 10.1049/PBCS061E_ch14
4. Пат. № 2718220 (РФ). Формирователь парафазного сигнала с единичным спейсером / А. А. Зацаринный, С. В. Козлов, Ю. А. Степченко, Ю. Г. Дьяченко, 2020. Бюл. № 10. URL: https://yandex.ru/patents/doc/RU2718220C1_20200331
5. Stepchenkov Y. A., Kamenskih A. N., Diachenko Y. G., Rogdestvenski Y. V., Diachenko D. Y. Improvement of the natural self-timed circuit tolerance to short-term soft errors // Advances in Science, Technology and Engineering Systems Journal. 2020. V. 5, N 2. P. 44—56. DOI: 10.25046/aj050206
6. Stepchenkov Y., Rogdestvenski Y., Kamenskih A., Diachenko Y., Diachenko D. Improvement of the quasi delay-insensitive pipeline noise immunity // Proc. 11th International Conference on Dependable Systems, Services and Technologies (DESSERT), Kyiv, Ukraine, 14–18 May, 2020. IEEE, 2020. P. 47—51. DOI: 10.1109/DESSERT50317.2020.9125021
7. Sokolov I., Stepchenkov Yu., Diachenko Yu., Rogdestvenski Yu., Diachenko D. Increasing self-timed circuit soft error tolerance // Proc. EastWest Design & Test Symposium (EWDTS), Varna, Bulgaria, September 4–7, 2020. Varna, 2020. P. 450—454. DOI: 10.1109/EWDTS50664.2020.9224705

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации, проект № 075–15–2020–799.

Статья поступила в редакцию 12 ноября 2020 г.

Izvestiya vuzov. Materialy elektronnoi tekhniki = Materials of Electronics Engineering. 2020, vol. 23, no. 4, pp. 277—281.
DOI: 10.17073/1609-3577-2020-4-277-281

Self-timed circuits as a basis for developing next generation high-reliable high-performance computers

A. A. Zatsarinnyy¹, Yu. A. Stepchenkov^{1,§}, Yu. G. Diachenko¹, Yu. V. Rogdestvenski¹

¹ *Federal Research Center “Computer Science and Control”
of the Russian Academy of Sciences,
44–2 Vavilov Str., Moscow 119333, Russia*

Abstract. The paper proposes design and circuitry solutions for the implementation of high-performance next generation computers. They are based on self-timed circuit design methodology and provide an increase in the tolerance of computing systems to soft errors resulting from induced noises and radiation exposure.

Keywords: self-timed circuit, indication, fault tolerance, CMOS, multi-threshold transistor

References

1. Stepchenkov Y. A., D'yachenko Y. G., Gorelkin G. A. Self-synchronous circuits are the future of microelectronics. *Voprosy radioelektroniki = Questions of Radio Electronics*. 2011, vol. 4, no. 2, pp. 153—184.
2. Stepchenkov Yu. A., Denisov A. N., Dyachenko Yu. G., Grinfeld F. I., Filimonenko O. P., Morozov N. V., Stepchenkov D. Yu., Plekhanov L. P. *Library functional cells for the design of self-synchronous semi-custom BMK microcircuits of the 5503/5507 series*. Moscow: Technosfera, 2017. 367 p. (In Russ.). URL: <http://www.technosfera.ru/lib/book/497>
3. Tailor R. A., Reese R. B. Uncle—Unified NCL Environment—an NCL design tool. Ch. 14. In: Di J., Smith S. C. (Eds) *Asynchronous Circuit Applications*. 2019. Pp. 293—307. DOI: 10.1049/PBCS061E_ch14

Information about authors:

Alexander A. Zatsarinnyy¹ — Dr. Sci. (Eng.), Chief Researcher, Deputy Director, <https://orcid.org/0000-0002-8872-2774>, e-mail: AZatsarinny@ipiran.ru; **Yury A. Stepchenkov^{1,§}** — Cand. Sci. (Eng.), Department Head, <https://orcid.org/0000-0003-4784-7519>, e-mail: YStepchenkov@ipiran.ru; **Yury G. Diachenko¹** — Cand. Sci. (Eng.), Senior Researcher, <https://orcid.org/0000-0003-0212-4931>, e-mail: diaura@mail.ru; **Yury V. Rogdestvenski¹** — Cand. Sci. (Eng.), Leading Researcher, e-mail: YRogdest@ipiran.ru

§ Corresponding author

4. Pat. No. 2718220 (RF). *Formirovatel' parafaznogo signala s yedinichnym speyserom* [Paraphase signal former with a single spacer]. A. A. Zatsarinnyy, S. V. Kozlov, Yu. A. Stepchenkov, Yu. G. Dyachenko, 2020. Bul. No. 10. (In Russ.). URL: https://yandex.ru/patents/doc/RU2718220C1_20200331

5. Stepchenkov Y. A., Kamenskih A. N., Diachenko Y. G., Rogdestvenski Y. V., Diachenko D. Y. Improvement of the natural self-timed circuit tolerance to short-term soft errors. *Advances in Science, Technology and Engineering Systems Journal*. 2020, vol. 5, no. 2, pp. 44—56. DOI: 10.25046/aj050206

6. Stepchenkov Y., Rogdestvenski Y., Kamenskih A., Diachenko Y., Diachenko D. Improvement of the quasi delay-insensitive pipeline noise immunity. *Proc. 11th International Conference on Dependable Systems, Services and Technologies (DESSERT). Kyiv, Ukraine, 14–18 May, 2020*. IEEE, 2020. Pp. 47—51. DOI: 10.1109/DESSERT50317.2020.9125021

7. Sokolov I., Stepchenkov Yu., Diachenko Yu., Rogdestvenski Yu., Diachenko D. Increasing self-timed circuit soft error tolerance. *Proc. EastWest Design & Test Symposium (EWDTS). Varna, Bulgaria, September 4–7, 2020*. Varna, 2020. Pp. 450—454. DOI: 10.1109/EWDTS50664.2020.9224705

Acknowledgments

The work was supported by the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation, project No. 075–15–2020–799.

Received November 12, 2020

Интерфейсы научных сервисов системы моделирования новых материалов на цифровой платформе

© 2020 г. В. А. Кондрашев¹, С. А. Денисов^{1,§}

¹ *Федеральный исследовательский центр «Информатика и управление»
Российской академии наук,
ул. Вавилова, д. 44, корп. 2, Москва, 119333, Россия*

Аннотация. Рассмотрены вопросы формирования системных интерфейсов цифровой платформы для управления процессом оказания научного сервиса, включающего, в том числе, интеграцию научных сервисов для решения комплексной исследовательской задачи, например многомасштабного моделирования свойств новых материалов или проведения междисциплинарных исследований. На основе приведенной в работе функциональной структуры интеграции научных сервисов цифровой платформы (применительно к многомасштабному моделированию) сформулированы требования к системному интерфейсу, а также предложена архитектура системного интерфейса интеграции научных сервисов цифровой платформы. Предложена модель системного интерфейса для информационного взаимодействия с сервисами и наборами данных цифровой платформы в процессах управления процессом оказания научных сервисов. Эта модель основывается на современных решениях управления виртуальной инфраструктурой, которая базируется на технологиях контейнерной обработки и микросервисов, а также средств оркестровки и коммуникации контейнеров (*service mesh*), технологиях гибкой (*agile*) интеграции. Основной функцией такой цифровой платформы является обеспечение процессов подготовки и проведения исследований за счет формализации сценариев взаимодействия исследователей, поставщиков (источников) исходных данных, потребителей результатов, наряду с инструментами поддержки системных интерфейсов цифровой платформы. В проекте предложены средства организации взаимодействия сервисов, зарегистрированных на платформе, с целью обеспечения выполнения научного исследования. Синхронизация процессов предоставления услуг, обеспечение передачи данных между сервисами и получение конечного результата также реализуются за счет процессов управления цифровой платформой, в основе которой лежит предложенный системный интерфейс. Впервые разработана модель системных интерфейсов. Предложенный интерфейс взаимодействия позволяет эффективно консолидировать высокопроизводительные вычислительные ресурсы и математические модели на основе технологий цифровой платформы. Это особенно актуально для организации решения задач многомасштабного моделирования как комплекса моделей, каждая из которых функционирует в одном пространственно-временном масштабе.

Ключевые слова: многомасштабное моделирование, научный сервис, цифровая платформа, облачные вычисления, система интеграции, системный интерфейс, междисциплинарные исследования

Введение

Современные условия развития облачных цифровых платформ [1] создают предпосылки для эффективного многомасштабного моделирования свойств новых материалов [2, 3] в нескольких пространственно-временных масштабах за счет консолидированного комплекса облачных сервисов, каждый из которых выполняет моделирование в одном пространственно-временном масштабе [4]. Для этого единой информационной среде цифровой платформы требуется наличие инструментов сопряжения комплекса научных сервисов. Этот комплекс сервисов использует основные функции системного интерфейса информационного взаимодействия, с сервисами и наборами данных цифровой платфор-

мы для управления процессом оказания научного сервиса в ходе заказа и выполнения комплекса научных сервисов. Происходит обмен исходными данными и результатами выполнения научного сервиса для широкого круга комплексных исследований, включая многомасштабное моделирование,

Кондрашев Вадим Адольфович¹ — канд. техн. наук, заместитель директора, e-mail: vkondrashev@frccsc.ru; **Денисов Сергей Анатольевич**^{1,§} — ведущий инженер, e-mail: sdenisov@frccsc.ru

§ Автор для переписки

Статья подготовлена по материалам доклада, представленного на II-й международной конференции «Математическое моделирование в материаловедении электронных компонентов», Москва, 19—21 октября 2020 г. (Кондрашев В.А., Денисов С.А. Интерфейсы научных сервисов системы моделирования новых материалов на цифровой платформе. М.: МАКС Пресс, 2020. С. 22—25. DOI: 10.29003/m1509.MMMSEC-2020/22-25)

междисциплинарные исследования, решение задач искусственного интеллекта. В соответствии с подходом, предложенным в работе [5], единая информационная среда цифровой платформы формируется как сервисно-ориентированный комплекс на основе технологии облачных вычислений, виртуализации (контейнеризации) вычислительных ресурсов, микросервисных архитектур. Такой комплекс обеспечивает системные интерфейсы для эффективной интеграции компонентов комплекса, включая пользовательские сервисы.

Учитывая, что цифровые платформы призваны алгоритмизировать взаимоотношения значимого количества пользователей в единой информационной среде, формирование системного интерфейса должно предусматривать эффективную интеграцию разнородных информационных систем, создаваемых в течение продолжительного времени в соответствии с широким спектром информационных технологий. Ниже на примере многомасштабного моделирования будут предложены подходы для решения проблем обеспечения взаимодействия разнородных информационных вычислительных систем для их эффективной интеграции в экосистему цифровых платформ для научных исследований.

Функциональная структура интеграции научных сервисов основных исследовательских процессов цифровой платформы

Функциональная структура интеграции научных сервисов основных исследовательских процессов цифровой платформы на примере многомасштабного моделирования представлена на рис. 1.

Основными функциональными компонентами платформы являются:

- каталог исследования;
- каталог заявок на участие в исследовании;
- каталог результатов;
- каталог услуг (научных сервисов).

Центральный компонент цифровой платформы научных исследований — это каталог исследований, хранящий информацию об исследованиях, в том числе моделировании (планируемых, проводимых, завершенных).

На основе каталога исследований обеспечивается выполнение следующих функций платформы, применительно к моделированию свойств новых материалов:

- управление поиском и отображением систематизированной информации о моделировании;
- управление процессом создания и обработки заявок на проведение моделирования от Заказчиков, включая поиск и предоставление списка текущих заявок на моделирование от Исполнителей, согласование требований заявок между заказчиком и исполнителем;

– согласование плана и условий проведения моделирования, включая использование научной инфраструктуры и научных сервисов;

– получение информации о ходе и результатах моделирования, а также оценка результатов моделирования;

– получение информации о потребленных ресурсах.

Ведение каталога заявок на участие в исследовании обеспечивает формирование и управление заявками на участие в работах по моделированию. Каталог содержит карточки заявок на участие в работах, создаваемые потенциальным исполнителем с указанием информации, требуемой Заказчиком для отбора Исполнителя.

Каталог результатов накапливает информацию о результатах моделирования для использования их в других работах, оценки результативности исследователей и автоматизации процессов отчетности по исследованию.

Каталог услуг содержит описание научных сервисов моделирования, выполняемых по квазидетерминированным параметризованным методикам (алгоритмам).

Процесс многомасштабного моделирования, описываемый инструментами платформы, содержит две основные стадии:

- подготовка модели;
- моделирование.

На стадии подготовки модели проводится:

- заказ моделирования — создается карточка исследования;
- подача заявок — потенциальные исполнители регистрируют заявки на проведение моделирования;
- экспертиза и отбор предложений исполнителей (конкурс);
- выбор исполнителей;
- согласование плана и условий выполнения моделирования.

На стадии выполнения моделирования проводится:

- выполнение исследовательских работ;
- размещение информации о ходе моделирования (промежуточных результатах и доступности ресурсов в соответствии с планом работ, корректировка плана при необходимости);
- размещение отчетов и окончательных результатов моделирования в каталоге результатов;
- расчет потребленных ресурсов, подведение итогов моделирования и его архивирование.

Платформа научных исследований предоставляет инструменты для совместной работы исследователей и интегрирует сервисы в единый цикл многомасштабного моделирования и других исследований, включая междисциплинарные исследо-

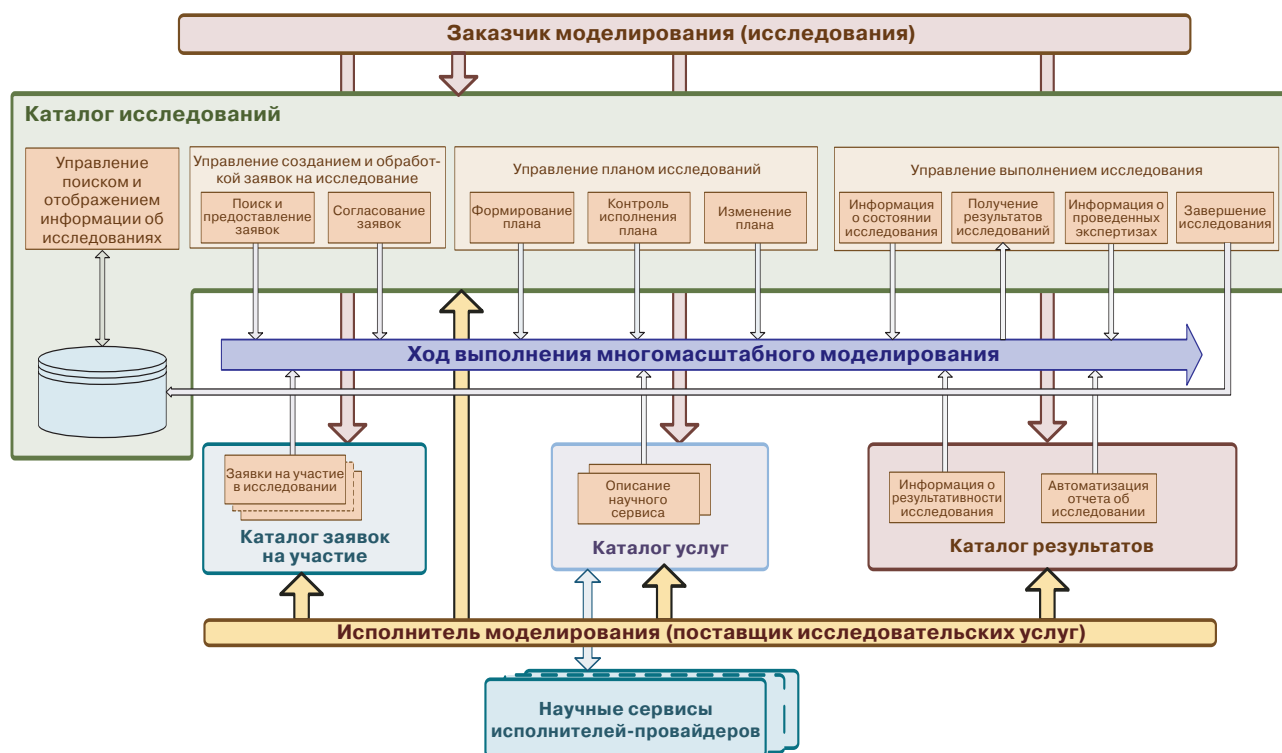


Рис. 1. Функциональная структура интеграции научных сервисов исследовательских процессов цифровой платформы применительно к многомасштабному моделированию

Fig. 1. Functional structure of the integration of scientific services of research processes of the digital platform in relation to multiscale modeling

вания, для которых цифровая платформа является эффективным средством организации комплексного исследования.

Описанные выше процессы автоматизируются сервисами цифровой платформы [6], реализуемыми в соответствии с методологией микросервисной архитектурой, обеспечивающей необходимый уровень масштабируемости и адаптируемости к динамично развивающимся информационным технологиям. Системный интерфейс платформы должен интегрировать описанные процессы между собой и информационными системами исполнителей, предоставлять исполнителям инструменты для описания своих научных сервисов и их интегрирования в среду платформы.

Требования к системному интерфейсу по интеграции научных сервисов цифровой платформы

Основополагающим требованием к системному интерфейсу цифровой платформы является необходимость интеграции следующих типов взаимодействующих информационных систем:

- адресная (уникальная) интеграция информационных систем по технологии «точка–точка»;
- интеграция корпоративных информационных систем, взаимодействующих по технологии интеграционной шины;

– интеграция современных информационных сервисов, функционирующих в соответствии с парадигмой микросервисов, — гибкая (*agile*), ранее «легкая», или облегченная (*lightweight*) интеграция.

Основополагающие идеи технологии интеграции «точка–точка» закладывались в 1980—1990 гг. в семиуровневую эталонную модель взаимодействия открытых систем (OSI, *Open Systems Interconnection*) и появившуюся практически одновременно с ней парадигму вызова удаленных процедур (RPC, *Remote Procedure Call*) [7, 8]. Были определены понятия многоуровневого взаимодействия — протоколы и интерфейсы взаимодействия, протокольные блоки данных, сервисные элементы и точки доступа к сервисным элементам, а также ряд понятий объектно-ориентированного программирования, связанных с коммуникацией объектов, центральным из которых стало понятие «вызов удаленных процедур» (RPC). Несмотря на существенное методологическое продвижение в области интеграции слабосвязанных систем, работы по интеграции были трудоемкими и тесно связанными с парой взаимодействующих систем. Обычно в каждой паре взаимодействующих систем создавалась подсистема взаимодействия, которая по согласованному протоколу взаимодействовала с аналогичной подсистемой другой системы в режиме «точка–точка». Даже с учетом существования ряда стандартизованных протоколов и интерфейсов взаимодействия, решения по интеграции

были уникальны для каждой пары взаимодействующих систем [9]. Тем не менее, современная цифровая платформа должна иметь инструменты для создания сервиса, обеспечивающего взаимодействие с технологически устаревшей информационной системой пользователя платформы по согласованному протоколу.

Развитие технологии интеграции информационных систем привело к появлению на рубеже XX—XXI вв. парадигмы «промежуточного слоя» (*middleware*) и связанных с ним понятий: MOM (*Message-oriented middleware*, промежуточное программное обеспечение, ориентированное на обработку сообщений), «интеграционная шина» (ESB, *Enterprise Service Bus*, корпоративная сервисная шина), сервис-ориентированная архитектура (SOA, *Service-oriented architecture*) [10]. Появился ряд решений, унифицирующих интеграцию информационных систем на уровне предприятия за счет создания централизованных информационных брокеров, обеспечивающих передачу информации между системами. Для подключения к информационному брокеру создавался адаптер (коннектор), который преобразовывал информацию к согласованному виду для передачи ее адаптеру (коннектору) другой информационной системы. Промежуточный слой старались обременить задачами транзакционной гарантированной асинхронной доставки информации (обычно, в виде сообщений). На предприятии появились централизованные подразделения, занимающиеся интеграцией информационных систем предприятия, процессы интеграции стали унифицированы. Тем не менее, процедуры интеграции не были лишены недостатков, которые стали проявляться тем сильнее, чем больший поток информации, предназначенной для клиентов предприятия, стал циркулировать как внутри предприятия, так и за его пределами. Основным недостатком интеграционной шины связывают с ее централизованным характером, т. е. с тем, что на этапе ее становления было достоинством. Оказалось, что ряд модернизаций информационных систем и самой интеграционной шины временами существенно ухудшают непрерывное информационное обслуживание подразделений предприятия и его клиентов. Взаимодействие между подразделениями предприятий, занимающихся интеграцией, разработкой информационных систем, обслуживанием подразделений и клиентов предприятия, бюрократизировалось и не обеспечивало той скорости реакции на изменение информационных потоков, которая стала необходимой для конкурентоспособности предприятия. Это послужило одной из существенных предпосылок для перехода к парадигме микросервисов и гибкой интеграции. Однако в настоящее время в эксплуатации предприятий остаются интеграционные шины, возможности которых целесообразно, а следователь-

но, и необходимо использовать в сервисной модели цифровой платформы.

С развитием SOA, усовершенствованием веб-технологий и API (*Application Programming Interface*, программный интерфейс приложения) на основе веб, распространением стиля REST (*Representational State Transfer*, передача состояния представления) [11], формата обмена данными JSON (*JavaScript Object Notation*), фреймворка gRPC (система вызова удаленных процедур, разработанная компанией Google), появлением парадигмы микросервисной архитектуры [12] стал формироваться архитектурный подход облегченной (*lightweight*) интеграции. В работе [13] предлагается перейти от термина «облегченная интеграция» к термину «гибкая интеграция» (*agile integration*). К основным свойствам гибкой интеграции относятся следующие:

- контейнерная среда интеграции (каждая интеграция приложений использует преимущества многослойной архитектуры микросервисов, осуществляется отдельными контейнерами со своей средой выполнения, настроенной на эту интеграцию);
- децентрализованная интеграция (интеграционные контейнеры функционируют независимо друг от друга, что повышает надежность функционирования комплексной системы интеграции);
- многокомпонентная интеграция (контейнер интеграции взаимодействует с множеством микросервисов, что повышает гибкость и масштабируемость информационной системы).

Очевидно, что в основе цифровой платформы должны функционировать инструменты управления виртуальной контейнерной и гибкой интеграции, базирующиеся на технологии контейнерной обработки и микросервисов. В перечень инструментов контейнерной интеграции должны входить средства оркестровки контейнеров, коммуникации контейнеров (*service mesh*), а также управления бизнес-логикой.

Архитектура системного интерфейса интеграции цифровой платформы

Предлагаемая архитектура системного интерфейса интеграции цифровой платформы научных исследований приведена на рис. 2.

Центральный компонент архитектуры — микросервисные приложения, гарантирующие решение целевых задач платформы и функционирующие в виртуальной контейнерной среде облачных вычислений. Основное взаимодействие компонентов платформы осуществляется в контейнерной среде исполнения гибкой интеграции с использованием элементов системного интерфейса API, обеспечивающей децентрализованную мелкогранулярную многокомпонентную интеграцию.

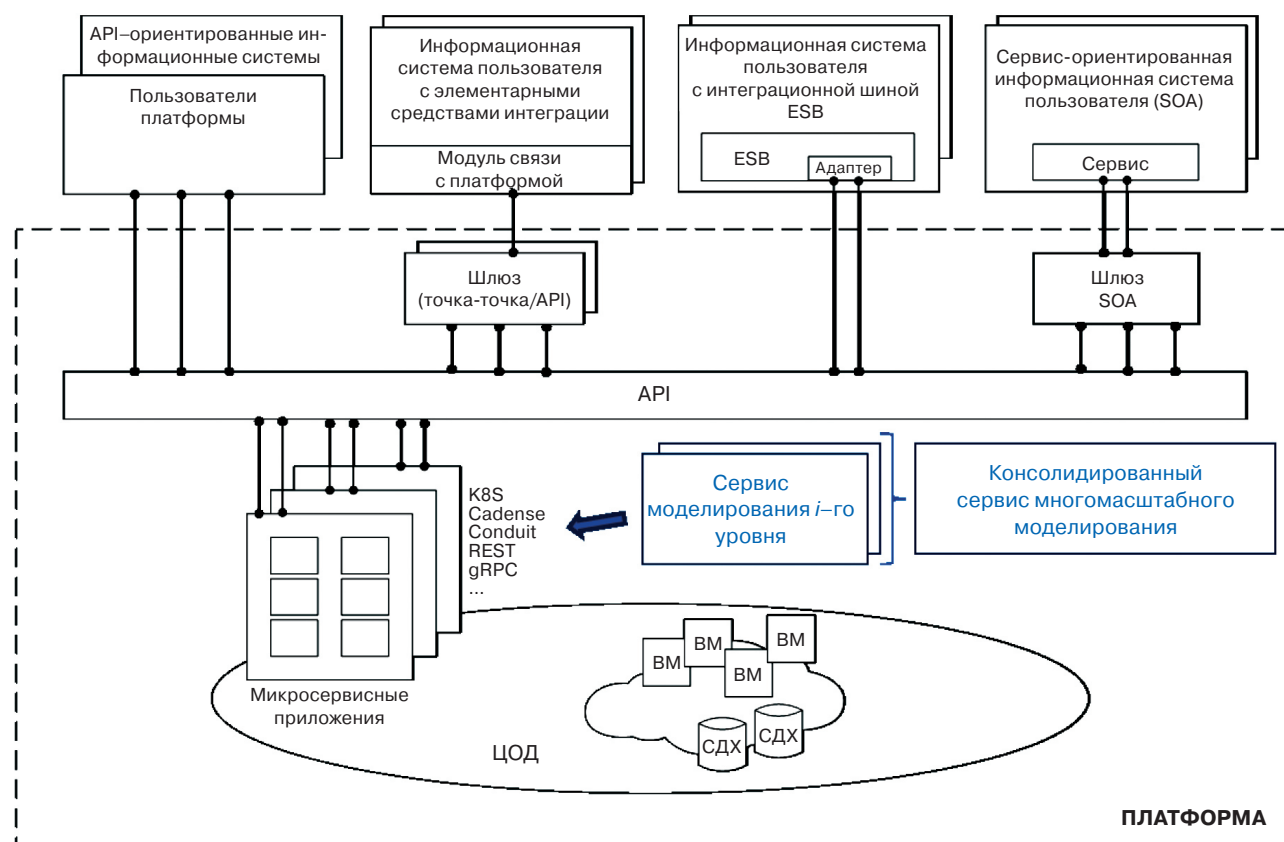


Рис. 2. Архитектура системного интерфейса интеграции цифровой платформы научных исследований для многомасштабного моделирования

Fig. 2. Architecture of the system interface for integrating a digital research platform for multi-scale simulation

Для взаимодействия с пользовательскими информационными системами, не работающими с веб-API в стиле REST или gRPC, предусматривается возможность шлюзования по технологии «точка-точка». Пользовательские информационные системы, функционирующие на основе интеграционных решений ESB, позволяют разработать адаптер для подключения к системному интерфейсу цифровой платформы. Также предоставляется возможность для сервис-ориентированных информационных систем получить доступ к системному интерфейсу цифровой платформы, разместив на средствах платформы специализированный шлюз, согласующий правила интеграции пользовательской системы и цифровой платформы.

Провайдером услуг цифровой платформы могут выступать различные информационные системы, в том числе высокопроизводительные вычислительные комплексы, предоставляющие ресурсы как облачные сервисы. Особенностью функционирования вычислительного комплекса при предоставлении услуг на цифровой платформе является разноплановость вычислительных задач, обрабатываемых комплексом. Клиентами вычислительного комплекса становятся научные коллективы, использующие для решения задач разные типы программного обеспечения, интегрированных сред и вычислительных технологий. Современным решением этой проблемы

является создание индивидуальных программных сред, использующих технологию виртуализации на базе контейнеров [14–16]. Предлагаемый системный интерфейс позволяет обеспечивать доступ к этим услугам центра обработки данных (ЦОД) платформы для всех видов пользовательских информационных систем.

Заключение

Основной функцией цифровой платформы научных сервисов применительно к задачам многомасштабного моделирования является обеспечение процессов подготовки и проведения моделирования за счет формализации сценариев консолидации однослойных математических моделей и предоставление инструментов для взаимодействия исследователей, поставщиков исходных данных и научных сервисов, потребителей результатов. Механизмы поддержки каталогов заявок, исследований, научных сервисов и результатов позволяют реализовывать бизнес-процессы взаимодействия ученых при выполнении широкого спектра научных исследований, включая многомасштабное моделирование.

Важнейшим процессом, реализуемым цифровой платформой, является организация взаимодействия сервисов, зарегистрированных на платформе, с целью обеспечения выполнения научного исследо-

вания. Синхронизация процессов предоставления услуг и передачи данных между сервисами, а также получение конечного результата обеспечиваются путем реализации бизнес-процессов цифровой платформы, в основе которой лежит предложенный системный интерфейс.

Предложенный интерфейс взаимодействия на основе подходов гибкой интеграции, облачных технологий и виртуализации позволит создавать цифровые платформы для научных исследований. На базе таких цифровых платформ ученые получают возможность организации исследований, создания научных коллективов, публикации собственных научных сервисов, доступа к сервисам других научных организаций, а также получения и публикации результатов с учетом существующих информационных систем и накопленной в них информации.

Применение предложенных подходов для создания системного интерфейса цифровой платформы при решении задач многомасштабного моделирования на цифровых платформах для научных исследований позволит эффективно консолидировать высокопроизводительные вычислительные ресурсы и математические модели, предоставляя широкому кругу научных коллективов следующие преимущества:

- единое информационное пространство научных исследований;
- консолидация научных коллективов для совместных исследований;
- эффективное использование вычислительных ресурсов за счет «эластичности» технологий облачных вычислений.

Эксперименты по интеграции приложений цифровой платформы для научных исследований проведены с использованием вычислительных ресурсов ЦКП «Информатика» ФИЦ ИУ РАН [17].

Библиографический список

1. Зацаринный А. А., Киселев Э. В., Козлов С. В., Колин К. К. Информационное пространство цифровой экономики России. Концептуальные основы и проблемы формирования / под общ. ред. А. А. Зацаринного. М.: ФИЦ ИУ РАН; ООО «НИПКЦ Восход-А», 2018. 236 с.
2. Абгарян К. К., Гаврилов Е. С. Интеграционная платформа для многомасштабного моделирования нейроморфных систем // Информатика и ее применения. 2020. Т. 14, № 2. С. 104–110. DOI: 10.14357/19922264200215
3. Абгарян К. К., Гаврилов Е. С. Информационная поддержка интеграционной платформы многомасштабного моделирования // Системы и средства информатики. 2019. Т. 29, № 1. С. 53–62. DOI: 10.14357/08696527190105
4. Зацаринный А. А., Кондрашев В. А., Сорокин А. А., Денисов С. А. Методы консолидации научных сервисов // Известия высших учебных заведений. Материалы электронной техники. 2019. Т. 22, № 4. С. 302–307. DOI: 10.17073/1609-3577-2019-4-302-307
5. Кондрашев В. А. Архитектура системы предоставления сервисов цифровой платформы для научных исследований // Системы и средства информатики. 2018. Т. 28, № 3. С. 131–140. DOI: 10.14357/08696527180310
6. Зацаринный А. А., Кондрашев В. А., Сорокин А. А. Алгоритмы управления сервис-ориентированными процессами детерминированных научных сервисов в гибридных вычислительных средах цифровых платформ // Системы высокой доступности. 2020. Т. 16, № 3. С. 5–17. DOI: 10.18127/j20729472-202003-01
7. Кондрашев В. А., Рождественский С. М. Архитектура сетевого обеспечения и средства распределенного программирования в мобильной операционной системе // В сб.: Машино-независимые операционные системы. М.: МЦНТИ, 1987. С. 31–49.
8. Ершов О., Кондрашев В., Рождественский С. Вызов удаленных процедур — модели, аспекты реализации // В сб.: Сети ЭВМ. Аппаратные и программные средства для сетевых процессоров, локальные вычислительные сети, распределенная обработка на базе сетевых средств / под общей ред. В. Д. Праченко. М.: ИПИ РАН, 1988. С. 80–97.
9. Зацаринный А. А., Ионенков Ю. С., Козлов С. В. Некоторые вопросы проектирования информационно-телекоммуникационных систем. М.: ИПИ РАН, 2010. 218 с.
10. Бондаренко Т. В., Бондаренко О. А., Волович К. И., Гринев С. А., Кондрашев В. А. и др. Аспекты использования парадигмы электронного сообщения для интеграции приложений в корпоративных информационных системах. М.: ИПИ РАН, 2006. 79 с.
11. Fielding R. T. Architectural styles and the design of network-based software architectures. Diss. Ph.D. University of California, 2000. URL: <https://www.ics.uci.edu/~fielding/pubs/dissertation/top.htm> (дата обращения: 15.01.2020).
12. Lewis J., Fowler M. Microservices. URL: <https://martinfowler.com/articles/microservices.html> (дата обращения: 15.01.2020).
13. Clark K. Moving to a lightweight, agile integration architecture. URL: <https://developer.ibm.com/articles/cl-lightweight-integration-2/> (дата обращения: 15.01.2020)
14. Волович К. И., Шабанов А. П., Мальковский С. И. Конвергентные вычисления в гибридном высокопроизводительном вычислительном комплексе // Системы высокой доступности. 2020. Т. 16, № 2. С. 22–32. DOI: 10.18127/j20729472-202002-02
15. Volovich K. I., Denisov S. A., Malkovsky S. I. Formation of an individual modeling environment in a hybrid high-performance computing system // Russian Microelectronics. 2020. V. 49, N 8. P. 580–583. DOI: 10.1134/S1063739720080107
16. Волович К. И. Некоторые системотехнические вопросы предоставления вычислительных ресурсов для научных исследований в гибридной высокопроизводительной облачной среде // Системы и средства информатики. 2018. Т. 28, Вып. 4. С. 97–108. DOI: 10.14357/08696527180410
17. Положение о Центре коллективного пользования «Информатика». URL: <http://www.frccsc.ru/ckp> (дата обращения: 15.01.2020).

Работа выполнена при частичной поддержке РФФИ (проекты № 18–29–03091 и № 19–29–03051).

Статья поступила в редакцию 12 ноября 2020 г.

Izvestiya vuzov. Materialy elektronnoi tekhniki = *Materials of Electronics Engineering*. 2020, vol. 23, no. 4, pp. 282—288.
DOI: 10.17073/1609-3577-2020-4-282-288

System interface of scientific services of a digital platform for multiscale modeling

V. A. Kondrashev¹, S. A. Denisov¹

¹ *Federal Research Center “Computer Science and Control” of the Russian Academy of Sciences,
44–2 Vavilov Str., Moscow 119333, Russia*

Abstract. The paper deals with the formation of system interfaces of a digital platform for managing the process of providing scientific services, including the integration of scientific services for solving a complex research problem, for example, multiscale modeling of the properties of new materials or conducting interdisciplinary research. On the basis of the functional structure of the integration of scientific services of a digital platform (in relation to multiscale modeling) presented in the work, requirements for the system interface are formulated, and the architecture of the system interface for the integration of scientific services of a digital platform is proposed. The proposed model of a system interface for information interaction with services and datasets of a digital platform in management processes for the provision of scientific services is based on modern solutions for managing virtual infrastructure, based on container processing technologies and microservices, as well as container orchestration and communication (service mesh), flexible technologies (agile) integration. Taking into account that the main function of the digital platform is to provide processes for the preparation and conduct of research by formalizing the interaction scenarios of researchers, suppliers (sources) of initial data, consumers of the results, along with tools for supporting system interfaces to the catalogs of the digital platform, the project offers means for organizing the interaction of services, registered on the platform in order to ensure the execution of scientific research. Synchronization of the processes of providing services, ensuring the transfer of data between services and obtaining the final result are also ensured by implementing the control processes of the digital platform, which is based on the proposed system interface. The developed model of system interfaces is new in the work. The proposed interaction interface allows you to effectively consolidate high-performance computing resources and mathematical models based on digital platform technologies. This is especially important for organizing the solution of multiscale modeling problems as a complex of models, each of which operates on the same space-time scale.

Keywords: multiscale modeling, scientific service, digital platform, cloud computing, integration system, system interface, interdisciplinary research

References

1. Zatsarinnyy A. A., Kiselev E. V., Kozlov S. V., Kolin K. K. Information space of the digital economy of Russia. Conceptual foundations and problems of formation. Moscow: OOO “NIPKTs Voskhod-A”, 2018. 236 p. (In Russ.)
2. Abgaryan K. K., Gavrilov E. S. Integration platform for multiscale modeling of neuromorphic systems. *Informatics and Applications*. 2020, vol. 14, iss. 2, pp. 104—110. (In Russ.). DOI: 10.14357/19922264200215
3. Abgaryan K. K., Gavrilov E. S. Information support of the multiscale modeling integration platform. *Systems and Means of Informatics*. 2019, vol. 29, iss. 1, pp. 53—62. DOI: 10.14357/08696527190105
4. Zatsarinnyy A. A., Kondrashev V. A., Sorokin, A. A., Denisov S. A. Scientific services consolidation methods. *Russian Microelectronics*. 2020, vol. 49, no. 8, pp. 612—616. DOI: 10.1134/S1063739720080144
5. Kondrashev V. A. Architecture of the service delivery system for the research services digital platform. *Systems and Means of Informatics*. 2018, vol. 28, iss. 3, pp. 131—140. (In Russ.). DOI: 10.14357/08696527180310
6. Zatsarinnyy A. A., Kondrashev V. A., Sorokin A. A. Algorithms for managing service-oriented processes of determinate research services in hybrid computing environments of digital platforms. *Highly Available Systems*. 2020, vol. 16, no. 3, pp. 5—17. (In Russ.). DOI: 10.18127/j20729472-202003-01
7. Kondrashev V. A., Rozhdestvenski S. M. Networking architecture and distributed programming tools in a mobile operating system. In: *Machine-Independent Operating Systems*. Moscow: MTsNTI, 1987. P. 31—49. (In Russ.)
8. Ershov O., Kondrashev V., Rozhdestvenski S. Calling remote procedures – models, aspects of implementation. In: *Computer networks. Hardware and software for network processors, local area networks, distributed processing based on network facilities*. Moscow: IPI RAN, 1988. Pp. 80—97. (In Russ.)
9. Zatsarinnyy A. A., Ionenkov Yu. S., Kozlov S. V. Some issues of designing information and telecommunication systems. Moscow: IPI RAN, 2010. 218 p. (In Russ.)
10. Bondarenko T. V., Bondarenko O. A., Volovich K. I., Grinev S. A., Kondrashev V. A. et al. Aspects of using the electronic message paradigm for integrating applications in corporate information systems. M.: IPI RAN, 2006. 79 p. (In Russ.)
11. Fielding R. T. *Architectural styles and the design of network-based software architectures*. Diss. Ph.D. University of California, 2000. URL: <https://www.ics.uci.edu/~fielding/pubs/dissertation/top.htm> (accessed: 15.01.2020).
12. Lewis J., Fowler M. Microservices. URL: <https://martinfowler.com/articles/microservices.html> (accessed: 15.01.2020).
13. Clark K. Moving to a lightweight, agile integration architecture. URL: <https://developer.ibm.com/articles/cl-lightweight-integration-2/> (accessed: 15.01.2020).
14. Volovich K. I., Shabanov A. P., Malkovsky S. I. Converged computing in a hybrid HPC cluster. *Highly Available Systems*. 2020, vol. 16, no. 2, pp. 22—32. (In Russ.). DOI: 10.18127/j20729472-202002-02
15. Volovich K. I., Denisov S. A., Malkovsky S. I. Formation of an individual modeling environment in a hybrid high-performance computing system. *Russian Microelectronics*. 2020, vol. 49, no. 8, pp. 580—583. DOI: 10.1134/S1063739720080107
16. Volovich K. I. Organization of calculations in a hybrid high-performance computing cluster for parallel execution of heterogeneous tasks. *Systems and Means of Informatics*, 2018, vol. 28, no. 4, pp. 98—109. (In Russ.). DOI: 10.14357/08696527180410
17. Regulations on the Center for Collective Use “Informatics”. (In Russ.). URL: <http://ckp.frccsc.ru> (accessed: 15.01.2020).

Acknowledgments

This work was supported in part by the Russian Foundation for Basic Research (projects No. 18–29–03091 and No. 19–29–03051).

Information about authors:

Vadim A. Kondrashev¹ — Cand. Sci. (Eng.), Deputy Director, e-mail: vkondrashev@frccsc.ru; **Sergey A. Denisov^{1,*}** — Lead Engineer, e-mail: sdenisov@frccsc.ru

* Corresponding author

УДК 621.315; 004.051

Оценка загрузки гибридного вычислительного комплекса при выполнении задач моделирования в материаловедении

© 2020 г. К. И. Волович^{1,§}

¹ *Федеральный исследовательский центр «Информатика и управление»
Российской академии наук,
ул. Вавилова, д. 44, корп. 2, Москва, 119333, Россия*

Аннотация. Статья посвящена методикам расчета и оценке эффективности функционирования гибридных вычислительных систем. Программные системы материаловедения демонстрируют максимальную эффективность при функционировании именно на гибридных вычислительных системах при использовании графических ускорителей для проведения расчетов. В качестве примера можно привести программные системы VASP (The Vienna Ab initio Simulation Package) и Quantum ESPRESSO. Эти программные системы проявляют наибольшую эффективность при монопольном использовании вычислительных ресурсов: RAM, CPU, GPU. При эксплуатации гибридного высокопроизводительного комплекса возникает задача управления ресурсами и разделения их между группой пользователей. Необходимо разработать технологии, которые обеспечивают выделение ресурсов приложениям материаловедения для разных пользователей и научных коллективов. Современным подходом в организации вычислительного процесса является использование технологий виртуализации и облачных технологий. Облачные технологии позволяют предоставлять пользователям услуги SaaS и PaaS. Целесообразно предоставлять командам прикладные системы материаловедения как облачные сервисы. Такие разноплановые подходы в условиях применения в одном вычислительном комплексе требуют выработки методов по оптимизации загрузки ресурсов высокопроизводительного комплекса, оценке эффективности использования его вычислительных возможностей и выработке методики совершенствования пользовательских программ. Определение качества загрузки комплекса является важной задачей при предоставлении сервисов высокопроизводительных вычислений научным коллективам, выполняющими междисциплинарные научные исследования в различных областях науки и техники. В статье предлагается метод расчета значения величины загрузки с использованием пиковых значений производительности комплекса. Анализируются результаты и качество функционирования облачных научных сервисов высокопроизводительных вычислений с помощью Roofline-модели.

Ключевые слова: гибридная архитектура, эффективность, оптимизация кода, облачный сервис, графический ускоритель, оценка загрузки, оценка эффективности

Введение

Важнейшей задачей при эксплуатации высокопроизводительного вычислительного комплекса является обеспечение наиболее полной загрузки его ресурсов.

Задачи материаловедения представляют собой смесь вычислительных заданий, требующих для

эффективного выполнения различных ресурсов вычислительного комплекса: оперативной памяти, ядер центральных процессоров, графических ускорителей вычислений [1, 2].

Необходимо отметить, что в условиях функционирования крупного вычислительного комплекса необходимо обеспечить одновременное решение ряда научных задач, требующих аналогичных вычислительных ресурсов, но предъявляющих другие требования к программному окружению прикладной задачи [3—5].

Для решения междисциплинарных научных задач в том числе в области материаловедения, биомедицинской химии, оптимизации [6], предлагается метод предоставления ресурсов вычислительных комплексов как облачных сервисов цифровой платформы [7—9]. Особенностью функционирования цифровой платформы в части предоставления услуг

Волович Константин Иосифович^{1,§} — канд. техн. наук, старший научный сотрудник, e-mail: kvolovich@frccsc.ru

§ Автор для переписки

Статья подготовлена по материалам доклада, представленного на II-й международной конференции «Математическое моделирование в материаловедении электронных компонентов», Москва, 19—21 октября 2020 г. (Волович К.И. Оценка загрузки гибридного вычислительного комплекса при выполнении задач моделирования в материаловедении. М.: МАКС Пресс, 2020. С. 30—33. DOI: 10.29003/m1511.MMMSEC-2020/30-33)

высокопроизводительных вычислений являются повышенные требования к оптимизации функционирования гибридных вычислителей, направленные на увеличение их загрузки пользовательскими задачами [10].

В задаче максимизации загрузки гибридного высокопроизводительного комплекса можно выделить два основных направления [11, 12]:

- обеспечение выполнения максимально возможного количества приложений на определенном периоде времени;
- максимально качественное использование ресурсов комплекса приложениями пользователей.

Определение качества загрузки комплекса является важной задачей при эксплуатации, поскольку позволяет планировать предоставление ресурсов, оценивать необходимость модернизации, определять качество предоставляемых услуг.

Как правило, загрузка определяется как отношение метрики (параметра) загрузки к максимально возможному значению данного параметра. Метрика определяется путем измерения или расчета.

Для повышения эффективности прикладного программного кода следует осуществлять выработку рекомендаций по оптимизации пользовательских программ. Отметим, что особенностью вычислительных заданий материаловедения является активное использование интегрированных программных сред VASP, Quantum ESPRESSO и др. Рекомендации по оптимизации могут касаться как пользовательского программного кода, так и кода интегрированных сред. Использование Roofline-моделей позволяет проанализировать основные программные процедуры прикладного программного обеспечения и интегрированных сред и выработать направления оптимизации программного кода.

Оценка загрузки гибридного вычислительного комплекса при предоставлении ресурсов в рамках цифровой платформы

Для традиционных суперкомпьютеров параметром загрузки может быть количество ядро-часов, которые были предоставлены приложению для выполнения расчетов [13]. Отношение выделенных ядро-часов к максимально возможному является показателем загрузки комплекса. Данные параметры рассчитываются для определенного периода времени и представляют собой интегральный показатель загрузки за данный период.

Для гибридных архитектур, предоставляющих вычислительные ресурсы как сервисы цифровой платформы, такой подход представляется менее показательным, поскольку в гибридном вычислительном комплексе присутствуют ядра различных типов, а задания резервируют ресурсы вычислителя не ядрами, а целиком графическими ускорителями.

При этом заказ вычислительных сервисов осуществляется разными научными коллективами, размещающих в вычислительном комплексе приложения из различных областей науки и техники, которые требуют различной программной среды и различного состава вычислительных ресурсов.

Задачи выполнения расчетов материаловедения и смежных научных дисциплин, использующих интегрированные системы расчета межмолекулярных взаимодействий, являются ярким примером

Предлагаемая методика позволяет учесть эту особенность. Оценка загрузки определяется путем сравнения запрашиваемого приложениями и максимально возможного количества операций с плавающей точкой за единицу времени.

Отметим, что существует различие между теоретически возможной производительностью компонентов и комплекса в целом (пиковая производительность) и практически достижимыми результатами. Результаты определяются различными тестами и сильно отличающимися в зависимости от типа задач и параметров настройки комплекса [14].

Для оценки загрузки гибридного высокопроизводительного вычислительного комплекса воспользуемся пиковой производительностью. Она определяется как сумма пиковых производительностей его компонентов — узлов

$$P_{\text{peak}} = \sum_{i=1}^K P_{\text{host } i}, \quad (1)$$

где P_{peak} — пиковая производительность вычислительного комплекса; $P_{\text{host } i}$ — пиковая производительность (P_{host}) i -го узла вычислительного комплекса.

Отметим, что при суммировании не учитываются потери производительности, которые возникают при взаимодействии узлов по объединяющей их вычислительной сети (*Interconnect*).

Пиковая производительность узла P_{host} определяется как сумма производительностей центральных процессоров узла P_{cpu} и его графических ускорителей P_{gpu} . Предполагается, что они полностью загружены операциями с плавающей точкой, не выполняют каких-либо других операций, а потери на передачу данных между центральными процессорами и графическими ускорителями отсутствуют

$$P_{\text{host}} = N_{\text{cpu}} P_{\text{cpu}} + N_{\text{gpu}} P_{\text{gpu}}, \quad (2)$$

где N_{cpu} — количество центральных процессоров в вычислительном узле; N_{gpu} — количество графических ускорителей в вычислительном узле; P_{cpu} — пиковая производительность центрального процессора; P_{gpu} — пиковая производительность графического ускорителя.

Для расчета пиковой производительности центрального процессора (3) будем считать, что операции выполняются ядрами параллельно, каждое ядро может обрабатывать группу потоков, а в потоке допускается параллельное выполнение нескольких операций, если для этого имеется несколько операционных блоков. Такая ядерно-потокковая архитектура характерна для современных классических процессоров различных производителей:

$$P_{\text{cpu}} = n_{\text{core}} n_{\text{stream}} n_{\text{unit}} F_{\text{cpu}}, \quad (3)$$

где n_{core} — количество ядер центрального процессора; n_{stream} — количество потоков, обрабатываемых ядром центрального процессора; n_{unit} — количество операционных блоков на проток, соответствует количеству операций, выполняемых в одном потоке за один такт; F_{cpu} — частота центрального процессора.

Для оценки производительности графических ускорителей воспользуемся свойствами современной архитектурой ускорителей компании NVidia семейства Volta, как наиболее популярных. Ускорители NVidia содержат ядра cuda- и tensor-ядра, позволяющие выполнять параллельные операции над числами с плавающей точкой и матрицами таких чисел. Производительность графического ускорителя определяется как сумма производительностей всех ядер без учета потерь на диспетчеризацию и взаимодействие [15–17]

$$P_{\text{gpu}} = P_{\text{cuda}} + P_{\text{tensor}}, \quad (4)$$

где P_{cuda} — суммарная производительность cuda-ядер графического ускорителя; P_{tensor} — суммарная производительность tensor-ядер графического ускорителя.

Определим значение производительности cuda-ядер графического ускорителя по формуле (5), считая, что операция с плавающей точкой выполняется за один такт.

Tensor-ядра выполняют за один такт перемножение квадратных матриц. При расчете количества операций, выполняемых при этом, будем учитывать, что вычисление каждого элемента результирующей матрицы требует выполнения операций умножения, равного порядку матрицы, а также операций сложения на единицу меньше. Таким образом, общая производительность tensor-ядер вычисляется по формуле (6).

Отметим, что точность выполнения операций с плавающей точкой для различных ядер может отличаться. В графическом ускорителе NVidia Tesla V 100 cuda-ядра используют числа двойной точности, а tensor — одинарной точности. В данной методике оценки производительности эта особенность не учитывается.

Суммарные производительности cuda- и tensor-ядер определяются по формулам (5) и (6):

$$P_{\text{cuda}} = n_{\text{cuda}} F_{\text{gpu}}, \quad (5)$$

$$P_{\text{tensor}} = n_{\text{tensor}} r^2 (2r - 1) F_{\text{gpu}}, \quad (6)$$

где n_{cuda} — количество cuda-ядер графического ускорителя; n_{tensor} — количество tensor-ядер графического ускорителя; r — порядок квадратной матрицы; F_{gpu} — частота графического ускорителя.

Пиковая производительность графического ускорителя вычисляется по формуле

$$P_{\text{gpu}} = [n_{\text{cuda}} + n_{\text{tensor}} r^2 (2r - 1)] F_{\text{gpu}}. \quad (7)$$

Пиковая производительность вычислительного узла гибридного высокопроизводительного вычислительного комплекса вычисляется по формуле (8).

$$P_{\text{host}} = N_{\text{cpu}} n_{\text{core}} n_{\text{stream}} n_{\text{unit}} F_{\text{cpu}} + [n_{\text{cuda}} + n_{\text{tensor}} r^2 (2r - 1)] F_{\text{gpu}}. \quad (8)$$

Суммарная пиковая производительность гибридного высокопроизводительного комплекса вычисляется по формуле (1).

Как показано выше, производительность вычислительного комплекса рассчитывается как сумма производительностей его компонентов и выражается количеством операций с плавающей точкой, выполняемых в секунду.

Ресурсом гибридного высокопроизводительного вычислительного комплекса на интервале времени будет пиковое значение количества операций с плавающей точкой, доступное пользователям в течение этого интервала.

Рассмотрим суммарное количество операций гибридного высокопроизводительного вычислительного комплекса $Op(T)$ на интервале времени T определяется как:

$$Op(T) = P_{\text{peak}} T, \quad (9)$$

где T — интервал времени.

Такая пиковая оценка отличается от фактической, получаемой на основе различных тестов. Однако, как отмечалось выше, в данной методике будем пользоваться пиковыми значениями.

Для оценки требований приложений к ресурсам гибридного высокопроизводительного вычислительного комплекса вычислим требуемое для выполнения приложения количество операций (10).

Для каждого приложения резервируется некоторое количество ядер центральных процессоров, графических ускорителей, а также время выполнения. Учтем, что ресурсы графических ускорителей

резервируются целиком, а ресурсы центральных процессоров — по ядрам. Поэтому суммарное количество операций гибридного высокопроизводительного вычислительного комплекса, выполненных задачей $Op_{app}(t)$ за заданное время t определяется количеством зарезервированных приложением ядер центральных процессоров (R_{cpu}) и графических ускорителей (R_{gpu})

$$Op_{app}(t) = \left(\frac{R_{cpu} P_{cpu}}{n} + R_{gpu} P_{gpu} \right) t, \quad (10)$$

где R_{cpu} — количество зарезервированных приложением ядер центральных процессоров; n — общее количество ядер центральных процессоров; R_{gpu} — количество зарезервированных приложением графических ускорителей.

После расчетов для всех приложений $i = 1, \dots, N$, выполнение которых приходилось на период T , получим суммарное количество операций, требуемых для выполнения приложений на периоде T :

$$Op_{app}(T) = \sum_{i=1}^N \left(\frac{R_{cpu} i P_{cpu}}{n} + R_{gpu} i P_{gpu} \right) t_i, \text{ для } t_i \in T. \quad (11)$$

Исследование производительности вычислительных узлов при предоставлении облачных сервисов

Использование расчетной пиковой производительности вычислительных узлов позволяет оценить требуемый приложениями объем вычислительных операций, однако не позволяет судить о том, насколько эффективно используются ресурсы вычислительного комплекса.

Общей задачей организации вычислительного процесса при предоставлении облачных услуг цифровой платформы научных сервисов является

максимизация реальной производительности вычислительного узла. В суперкомпьютерной области принято оценивать реальную производительность вычислительных комплексов с помощью тестов задач линейной алгебры LINPACK [14]. Однако, показанная на данных тестах производительность как правило не достигается при решении конкретных научных задач. Это связано с недостаточной оптимизацией программного кода прикладных задач и ее адаптации к архитектуре вычислительного комплекса.

Поэтому при эксплуатации вычислительного комплекса полезно производить оценку качества функционирования пользовательских приложений и выдавать рекомендации пользователям по оптимизации приложений.

Качество использования ресурсов вычислительного комплекса приложением полезно представлять с использованием так называемой Roofline-модели [18].

Модель позволяет показать производительность компонентов алгоритма (процедур и циклов) в условиях естественных ограничений вычислительной системы — производительности памяти и пиковой производительности вычислительного блока. Причем, в зависимости от использованной технологии могут устанавливаться различные границы. Так, производительность памяти для собственно RAM и кешей разного уровня является различной. Поэтому при условии использования приложением разных технологий работы с памятью технологические ограничения производительности различаются. Аналогично, производительность вычислительных блоков ограничивается возможностями технологии: скалярные вычисления, векторизация и т. д.

Проведенные с использованием оборудования ЦКП «Информатика» [19] эксперименты с тестами из пакета NPV [20] показали, что границами по

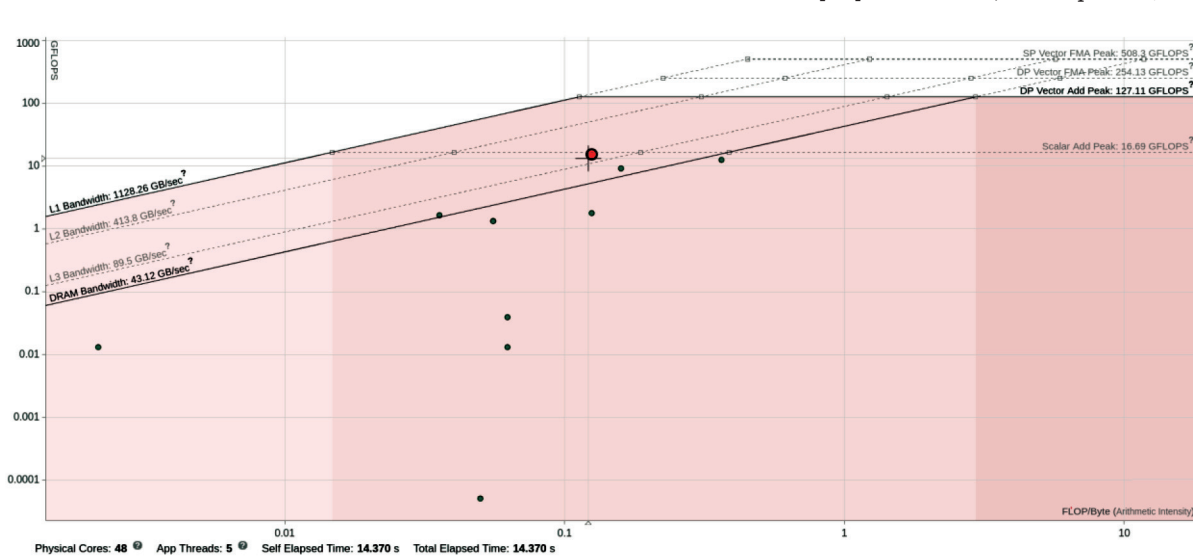


Рис. 1. Производительность приложений преобразования Фурье
Fig. 1. Performance of Fourier transform applications

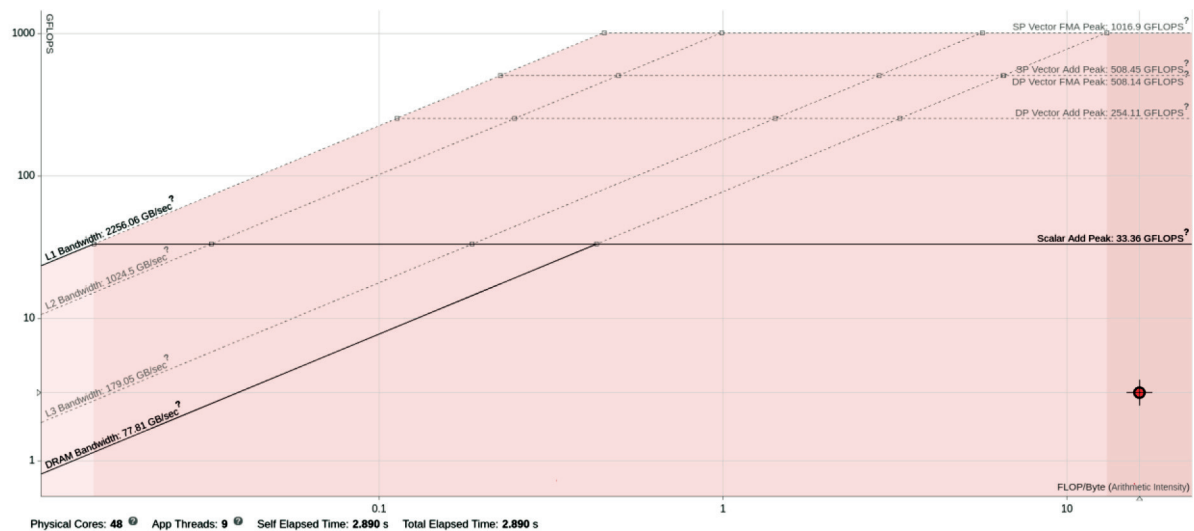


Рис. 2. Производительность приложений сортировки
Fig. 2. Sorting application performance

производительности приложения могут служить как оперативная память, так и вычислительные блоки.

На рис. 1 представлено графическое изображение Roofline-модели приложения с использованием операций преобразования Фурье при выполнении на платформе Intel Xeon.

Из рис. 1 видно, что ограничивающими факторами для основного цикла приложения являются производительность процессора по скалярным операциям (*Scalar Add Peak*) и производительность кеша памяти второго уровня.

На основе Roofline-модели можно определить пути оптимизации приложений. В рассмотренном на рис. 1 примере направлением оптимизации является переход к векторным технологиям архитектуры Intel Xeon и переструктуризация приложения таким образом, чтобы задействовать функционирование кеша первого уровня. В этом случае основной цикл программы может быть сдвинут вертикально вверх по диаграмме, что будет означать более эффективное использование возможностей вычислительной архитектуры по производительности на операциях с плавающей точкой.

Другим направлением оптимизации может быть уменьшение соотношения операций с плавающей точкой и объема обмена с памятью. При этом основной цикл программы будет сдвинут на диаграмме вправо. В этом случае переход к векторным технологиям (движение вверх по диаграмме) может осуществляться без использования кеширования памяти.

На рис. 2 представлена Roofline-модель для приложений сортировки со случайным доступом к памяти.

Из рис. 2 видно, что главный цикл приложения находится в области, в которой соотношение между производительностью памяти и вычислительного

блока таково, что достаточно использования RAM без кеширования для любой технологии вычислений — скалярной или векторной. При этом использование приложением производительности вычислительных блоков не является оптимальным. Имеется многократный запас по производительности скалярной технологии и еще более существенный для векторной технологии.

Заключение

Современные тенденции предоставления информационных сервисов как облачных услуг цифровых платформ требуют выработки новых подходов к организации вычислительного процесса суперкомпьютеров и гибридных вычислительных комплексов.

Отличительной особенностью цифровых платформ для научных исследований является аккумуляция разнородных научных задач из разных областей прикладной и фундаментальной науки, а также междисциплинарных задач. Задачи, требующие вычислительных сервисов и ресурсов размещаются средствами цифровой платформы в разного рода вычислительных комплексах, зарегистрированных как сервисы платформы.

В этих условиях организация вычислительного процесса в гибридных высокопроизводительных комплексах должна быть направлена с одной стороны на обеспечение возможности одновременного исполнения разнотипных задач, часто требующих создания вычислительных сред, не совместимых между собой. С другой стороны должны разрабатываться методы по оптимизации загрузки вычислительного комплекса, позволяющий максимально использовать возможности вычислительной инфраструктуры по выполнению математических расчетов.

Задачи первого направления решаются с использованием технологий виртуализации, применения облачных сервисов и средств цифровой платформы для научных исследований.

Решение задач второго направления возможно за счет применения предложенных в статье методов и подходов, которые позволяют определять априори требуемые задачами вычислительные ресурсы и на основе данной информации планировать загрузку и выполнение заданий гибридного высокопроизводительного вычислительного комплекса.

Для повышения эффективности выполнения вычислительных заданий в состав сервисов цифровой платформы и высокопроизводительных вычислительных комплексов должны входить средства анализа эффективности программного кода пользователей приложений.

Построение интуитивно понятных графических Roofline моделей позволит пользователям высокопроизводительных комплексов в составе цифровой платформы научных исследований определять «узкие места» в программном коде и выбирать пути оптимизации использования вычислительных ресурсов.

Библиографический список

1. Журавлев А. А., Ревизников Д. Л., Абгарян К. К. Метод дискретных элементов с атомарной структурой // Материалы XXI международной конференции по вычислительной механике и современным прикладным программным системам (ВМСППС'2019), Алушта, 24–31 мая 2019 г. М.: Московский авиационный институт, 2019. С. 59–61.
2. Карцев А., Мальковский С. И., Волович К. И., Сорокин А. А. Исследование производительности и масштабируемости пакета Quantum ESPRESSO при изучении низкоразмерных систем на гибридных вычислительных системах // Математическое моделирование в материаловедении электронных компонентов: материалы I международной конференции, Москва, 21–23 октября 2019 г. М.: МАКС Пресс, 2019. С. 18–20. DOI: 10.29003/m682.MMMSEC-2019
3. Vouzis P. D., Sahinidis N. V. GPU-BLAST: using graphics processors to accelerate protein sequence alignment // Bioinformatics. 2011. V. 27, Iss. 2. P. 182–188. DOI: 10.1093/bioinformatics/btq644
4. Микурова А. В., Скворцов В. С. Создание обобщенной модели предсказания ингибирования нейраминидазы вируса гриппа различных штаммов // Биомедицинская химия. 2018. Т. 64, № 3. С. 247–252. DOI 10.18097/PBMC20186403247
5. Микурова А. В., Скворцов В. С., Раевский О. А. Компьютерная оценка селективности ингибирования мускариновых рецепторов M1–M4 // Biomedical Chemistry: Research and Methods. 2018. Т. 1, № 3. С. e00072. DOI: 10.18097/BMCRM00072
6. Горчаков А. Ю., Посыпкин М. А. Сравнение вариантов многопоточной реализации метода ветвей и границ для многоядерных систем // Современные информационные технологии и ИТ-образование. 2018. Т. 14, № 1. С. 138–148. DOI: 10.25559/STITO.14.201801.138–148
7. Berriman G. B., Deelman E., Juve G., Rynge M., Vöckler J.-S. The application of cloud computing to scientific workflows: a study of cost and performance // Philosophical Transactions of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences. 2013. V. 371, Iss. 1983. P. 20120066. DOI: 10.1098/rsta.2012.0066
8. Яковлевский М. В., Бондаренко А. А., Выродов А. В., Григорьев С. К., Корнилина М. А., Плотноков А. И., Поляков С. В., Попов И. В., Пузырьков Д. В., Суков С. А. Облачный сервис для решения многомасштабных задач нанотехнологии на кластерах и суперкомпьютерах // Известия ЮФУ. Технические науки. 2016. № 12. С. 103–114. DOI: 10.18522/2311-3103-2016-12-103114
9. Ding F., an Mey D., Wienke S., Zhang R., Li L. A study on today's cloud environments for HPC applications // In: Helfert M., Desprez F., Ferguson D., Leymann F. (eds) Cloud Computing and Services Science. CLOSER 2013. Communications in Computer and Information Science. V. 453. Cham: Springer, 2014. P. 114–127. DOI: 10.1007/978-3-319-11561-0_8
10. Волович К. И., Зацаринный А. А., Кондрашев В. А., Шабанов А. П. О некоторых подходах к представлению научных исследований как облачного сервиса // Системы и средства информатики. 2017. Т. 27, № 1. С. 73–84. DOI: 10.14357/08696527170105
11. Абрамов С. М. 2018: анализ суперкомпьютерных киберинфраструктур ведущих стран мира // Суперкомпьютерные технологии (СКТ–2018): материалы 5-й Всероссийской научно-технической конференции, Дивноморское, Геленджик, 17–22 сентября 2018 г. Т. 1. Дивноморское, Геленджик: Южный федеральный университет, 2018. С. 11–18.
12. Абрамов С. М., Лилитко Е. П. Состояние и перспективы развития вычислительных систем сверхвысокой производительности // Информационные технологии и вычислительные системы. 2013. № 2. С. 6–22.
13. Клинов М. С., Лапшина С. Ю., Телегин П. Н., Шабанов Б. М. Особенности использования многоядерных процессоров в научных вычислениях // Вестник Уфимского государственного авиационного технического университета. 2012. Т. 16, № 6. С. 25–31.
14. Абрамов С. М. Правда, искажающая истину. Как следует анализировать Top500? // Вестник Южно-уральского государственного университета. Серия: Вычислительная математика и информатика. 2013. Т. 2, № 3. С. 5–31. DOI: 10.14529/cmse130301
15. Afanasyev I., Voevodin V. The comparison of large-scale graph processing algorithms implementation methods for Intel KNL and NVIDIA GPU // In: Voevodin V., Sobolev S. (eds) Supercomputing. RuSCDays 2017. Communications in Computer and Information Science. V. 793. Cham: Springer, 2017. P. 80–94. DOI: 10.1007/978-3-319-71255-0_7
16. Sobolev S. I., Antonov A. S., Shvets P. A., Nikitenko D. A., Stefanov K. S., Voevodin V. V., Voevodin V. I., Zhumatiy S. A. Evaluation of the octotron system on the lomonosov-2 supercomputer // Параллельные вычислительные технологии (ПаВТ'2018): труды международной научной конференции, Ростов-на-Дону, 2–6 апреля 2018 г. Челябинск: Издательский центр ЮУрГУ, 2018. С. 176–184.
17. Zatsarinny A. A., Gorshenin A. K., Kondrashev V. A., Volovich K. I., Denisov S. A. Toward high performance solutions as services of research digital platform // Procedia Computer Science: Proc. 13th International Symposium "Intelligent Systems", INTELS 2018, St. Petersburg, 22–24 October 2018. V. 150. St. Petersburg: Elsevier B.V., 2019. P. 622–627. DOI: 10.1016/j.procs.2019.02.078
18. Williams S., Waterman A., Patterson D. Roofline: an insightful visual performance model for multicore architectures // Communications of the ACM. 2009. V. 52, N 4. P. 65–76. DOI: 10.1145/1498765.1498785
19. Положение о Центре коллективного пользования «Информатика». URL: <https://www.frccsc.ru/ckp> (дата обращения: 15.01.2020).
20. NAS Parallel Benchmarks (NPB). URL: <https://www.nas.nasa.gov/publications/npb.html> (дата обращения: 15.01.2020).

Эксперименты по измерению производительности приложений при предоставлении облачных сервисов проведены с использованием вычислительных ресурсов ЦКП «Информатика» ФИЦ ИУ РАН.

Статья поступила в редакцию 11 декабря 2020 г.

Izvestiya vuzov. Materialy elektronnoi tekhniki = Materials of Electronics Engineering. 2020, vol. 23, no. 4, pp. 289—296.
DOI: 10.17073/1609-3577-2020-4-289-296

Estimation of the workload of a hybrid computing cluster when performing modeling tasks in materials science

K. I. Volovich^{1,§}

¹ *Federal Research Center “Computer Science and Control” of the Russian Academy of Sciences,
44–2 Vavilov Str., Moscow 119333, Russia*

Abstract. The article is devoted to methods of calculation and evaluation of the efficiency of functioning of hybrid computing systems. Material science software systems demonstrate maximum efficiency when operating on hybrid computing systems when using graphics accelerators for calculations. Examples include the VASP (The Vienna Ab initio Simulation Package) and Quantum ESPRESSO software systems. These software systems are most efficient when using monopolistic computing resources: RAM, CPU, GPU.

When operating a hybrid high-performance cluster, the problem arises of resource management and their division between a group of users. Technologies need to be developed that ensure the allocation of resources to materials science applications for different users and research teams. The modern approach to organizing the computing process is the use of virtualization and cloud technologies. Cloud technologies enable the provision of SaaS and PaaS services to users. It is advisable to provide scientific teams with applied materials science systems as cloud services.

Such diverse approaches, when applied in a single computer complex, require the development of methods for optimizing the load on the resources of a high-performance complex, assessing the efficiency of using its computational capabilities, and developing methods for improving user programs.

Determining the quality of the complex loading is an important task when providing high-performance computing services to research teams performing interdisciplinary research in various fields of science and technology. The article proposes a method for calculating the value of the load value using the peak performance values of the complex. The results and performance quality of high performance computing cloud scientific services are analyzed using a Roofline model.

Keywords: hybrid architecture, efficiency, code optimization, cloud service, graphics accelerator, load estimation, efficiency assessment

References

1. Zhuravlev A. A., Reviznikov D. L., Abgaryan K. K. The method of discrete elements with an atomic structure. *Proc. XXI International Conference on Computational Mechanics and Modern Applied Software Systems. Alushta, May 24–31, 2019*. Moscow: Moskovskiy aviatsionnyy institut, 2019. Pp. 59—61. (In Russ.)
2. Kartsev A., Malkovsky S. I., Volovich K. I., Sorokin A. A. Investigation of performance and scalability of the Quantum ESPRESSO package in the study of low-dimensional systems on hybrid computing systems. *Mathematical Modeling in Materials Science of Electronic Component: Proc. I International Conference. Moscow, October 21–23, 2019*. Moscow: MAKSS Press, 2019. Pp. 18—20. (In Russ.) DOI: 10.29003/m682.MMMSEC-2019
3. Vouzis P. D., Sahinidis N. V. GPU-BLAST: using graphics processors to accelerate protein sequence alignment. *Bioinformatics*. 2011, vol. 27, iss. 2, pp. 182—188. DOI: 10.1093/bioinformatics/btq644
4. Mikurova A. V., Skvortsov V. S. A generalized prediction model of inhibition of neuraminidase of influenza virus of various strains. *Biochemistry (Moscow), Supplement Series B: Biomedical Chemistry*. 2018, vol. 12, no. 4, pp. 322—329. DOI: 10.1134/S1990750818040054
5. Mikurova A. V., Skvortsov V. S., Raevsky O. A. Computational evaluation of selectivity of inhibition of muscarinic receptors M1–M4. *Biomedical Chemistry: Research and Methods*. 2018, vol. 1, no. 3, p. e00072. (In Russ.) DOI: 10.18097/BMCRM00072
6. Gorchakov A. Ju., Posypkin Comparison of variants of multithreading realization of method of branches and borders for multi-core systems. *Modern Information Technologies and IT-Education*. 2018, vol. 14, no. 1, pp. 138—148. (In Russ.) DOI: 10.25559/SITITO.14.201801.138-148
7. Berriman G. B., Deelman E., Juve G., Rynge M., Vöckler J.–S. The application of cloud computing to scientific workflows: a study of cost and performance. *Philosophical Transactions of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*. 2013, vol. 371, iss. 1983, p. 20120066. DOI: 10.1098/rsta.2012.0066
8. Yakobovskiy M. V., Bondarenko A. A., Vyrodov A. V., Grigoriev S. K., Kornilina M. A., Plotnikov A. I., Polyakov S. V., Popov I. V., Puzyrkov D. V., Soukov S. A. Cloud service for solution of multiscale nanotechnology problems on clusters and supercomputers. *Izvestiya SFedU. Engineering Sciences*. 2016, no. 12, pp. 103—114. (In Russ.) DOI: 10.18522/2311-3103-2016-12-103114
9. Ding F., an Mey D., Wienke S., Zhang R., Li L. A study on today's cloud environments for HPC applications. In: Helfert M., Desprez F., Ferguson D., Leymann F. (eds) *Cloud Computing and Services Science. CLOSER 2013. Communications in Computer and Information Science*, vol. 453. Cham: Springer, 2014. Pp. 114—127. DOI: 10.1007/978-3-319-11561-0_8
10. Volovich K. I., Zatsarinnyy A. A., Kondrashev V. A., Shabanov A. P. Scientific research as a cloud service. *Systems and*

Information about author:

Konstantin I. Volovich^{1,§} — Cand. Sci. (Eng.), Senior Researcher, e-mail: kvolovich@frcsc.ru

§ Corresponding author

Means of Informatics. 2017, vol. 27, iss. 1, pp. 73—84. (In Russ.). DOI: 10.14357/08696527170105

11. Abramov S. M. 2018: Analysis of supercomputer cyber infrastructures of the leading countries of the world. In: *Supercomputer Technologies: Proc. 5th All-Russian scientific and technical conference. Divnomorskoye, Gelendzhik, September 17–22, 2018, vol. 1*. Divnomorskoye, Gelendzhik: Yuzhnyy federal'nyy universitet, 2018. Pp. 11—18. (In Russ.)

12. Abramov S. M., Lilitko E. P. Current state and development prospects of high-end HPC systems. *Journal of Information Technologies and Computing Systems*. 2013, no. 2, pp. 6—22. (In Russ.)

13. Klinov M. S., Lapshina S. Yu., Telegin P. N., Shabanov B. M. Multicore processing features in scientific computing. *Vestnik UGATU*. 2012, vol. 16, no. 6, pp. 25—31. (In Russ.)

14. Abramov S. M. True judgments that distort the real truth. How to analyze the Top500? *Bulletin of the South Ural State University Computational Mathematics and Software Engineering*. 2013, vol. 2, no. 3, pp. 5—31. (In Russ.). DOI: 10.14529/cmse130301

15. Afanasyev I., Voevodin V. The comparison of large-scale graph processing algorithms implementation methods for Intel KNL and NVIDIA GPU. In: Voevodin V., Sobolev S. (eds) *Supercomputing. RuSCDays 2017. Communications in Computer and Information Science, vol. 793*. Cham: Springer, 2017. Pp. 80—94. DOI: 10.1007/978-3-319-71255-0_7

16. Sobolev S. I., Antonov A. S., Shvets P. A., Nikitenko D. A., Stefanov K. S., Voevodin Vad. V., Voevodin Vl. V., Zhumatiy S. A. Evaluation of the octotron system on the Lomonosov-2 supercomputer. *Parallel Computing Technologies (PaVT'2018): Proc. International*

Scientific Conference. Rostov-on-Don, April 2–6, 2018. Chelyabinsk: Izdatel'skiy tsentr YUUrGU, 2018. Pp. 176—184.

17. Zatsarinny A. A., Gorshenin A. K., Kondrashev V. A., Volovich K. I., Denisov S. A. Toward high performance solutions as services of research digital platform. *Procedia Computer Science: Proc. 13th International Symposium «Intelligent Systems», INTELS 2018. St. Petersburg, 22–24 October 2018, vol. 150*. St. Petersburg: Elsevier B.V., 2019. Pp. 622—627. DOI: 10.1016/j.procs.2019.02.078

18. Williams S., Waterman A., Patterson D. Roofline: an insightful visual performance model for multicore architectures. *Communications of the ACM*. 2009, vol. 52, no. 4, pp. 65—76. DOI: 10.1145/1498765.1498785

19. Regulations on the Center for Collective Use “Informatics”. (In Russ.). URL: <https://www.frccsc.ru/ckp> (accessed: 15.01.2020).

20. NAS Parallel Benchmarks (NPB). URL: <https://www.nas.nasa.gov/publications/npb.html> (accessed: 15.01.2020).

Acknowledgments

This work was supported in part by the Russian Foundation for Basic Research (projects No. 18–29–03100 and No. 18–07–00669).

Experiments to measure the performance of applications in the provision of cloud services were carried out using the computing resources of the Center for Collective Use “Informatics” of the Federal Research Center “Computer Science and Control” of the Russian Academy of Sciences.

Received December 11, 2020

Программные средства для индексирования и предметно–ориентированного поиска научных статей по кристаллографии

© 2020 г. Е. С. Гаврилов^{1,2,§}, Н. А. Зайцев³

¹ *Московский авиационный институт (национальный исследовательский университет),
Волоколамское шоссе, д. 4, Москва, 125993, Россия*

² *Федеральный исследовательский центр «Информатика и управление»
Российской академии наук,
ул. Вавилова, д. 44, корп. 2, Москва, 119333, Россия*

³ *ПАО «Сбербанк», ул. Вавилова, д. 19, Москва, 117312, Россия*

Аннотация. Представлены программные модули, реализующие индексацию научных статей, предметно–ориентированный поиск по ним, пользовательский интерфейс, а также программный интерфейс для сторонних потребителей. Приведено подробное описание процесса настройки полнотекстового поиска до уровня предметно–ориентированного.

Ключевые слова: полнотекстовый поиск, предметно–ориентированный поиск, инвертированный индекс, поисковая система Elasticsearch, язык Java, Фреймворк Spring, язык JavaScript, Фреймворк React

Введение

Одним из основных источников данных при подготовке вычислительных экспериментов являются научные статьи, из которых берутся свойства материалов, а также результаты экспериментов. В работе представлены программные средства, позволяющих исследователям–физикам в области материаловедения быстро находить тематические статьи по заданным предметно–ориентированным критериям поиска. Например, задав название материала, или химическую формулу, тип кристаллической решетки и метод расчета — получить список статей, где они упоминаются вместе или отдельно, упорядоченных по релевантности.

В статье решается задача поиска научных публикаций, необходимых для научных исследований в области вычислительного материаловедения. Для этого были разработаны программные модули для индексации научных статей и полнотекстово–

го поиска по ним, настроен поисковый индекс для предметно–ориентированного поиска и реализован пользовательский интерфейс. Также был реализован программный интерфейс (**API**) для полученного поискового сервиса.

Сценарии использования

Пользователем системы является ученый–исследователь в области вычислительного материаловедения. Пользователь может производить поиск публикаций как по произвольному запросу, так и по предметно–ориентированному. С целью поиска входных данных для расчетов, результатов экспериментов, литературы для цитирования. Реализованный программный поисковый сервис подразумевает возможность интеграции с внешними информационными системами посредством предоставления своего API.

Полнотекстовой поиск

Автоматизированный поиск документов, при котором поиск ведется не только по именам документов, но и по их содержанию называется полнотекстовым поиском. В основе полнотекстового поиска лежит структура данных — инвертированный индекс.

Гаврилов Евгений Сергеевич^{1,2,§} — старший преподаватель (1), научный сотрудник (2), e-mail: eugavrilov@gmail.com; **Зайцев Н. А.**³ — разработчик, e-mail: JacksonGibsonESP@gmail.com

§ Автор для переписки

* Статья подготовлена по материалам доклада, представленного на II–й международной конференции «Математическое моделирование в материаловедении электронных компонентов», Москва, 19–21 октября 2020 г.

Добавление документа в индекс называется индексацией. Перед индексацией документа происходит его предобработка. Наиболее часто текст документа приводится к нижнему регистру, отбрасываются знаки пунктуации и текст бьется на слова (термы) по пробелам. Инвертированный индекс ставит в соответствие терм и номер документа в котором он встречается, и опционально позицию в нем. Что позволяет быстро находить вхождения термина в документы. В отличие от прямого индекса, где каждому документу ставится в соответствие набор термов, встречающихся в нем.

В качестве реализации инвертированного индекса используется поисковая система Elasticsearch [1]. Elasticsearch — это свободно распространяемая поисковая система, построенная на технологии Apache Lucene™ — свободной библиотеки для высокопроизводительного полнотекстового поиска. Elasticsearch написан на языке Java и использует Lucene внутри себя для индексации и поиска, но он стремится сделать полнотекстовый поиск простым и понятным для пользователя, скрывая сложности работы с Lucene за RESTful API.

Вывод результатов поиска (поисковая выдача) сортируется по релевантности (соответствию запросу пользователя).

Архитектура

На рис. 1 приведена диаграмма потоков данных, описывающая архитектуру реализованного поискового сервиса.

Первоначально на сервер помещаются все статьи, по которым необходимо производить полнотек-

стовый поиск. Затем, администратор запускает модуль индексации документов, написанный на языке Java и представляющий из себя консольное приложение. Это приложение считывает документы с диска и преобразовывает их в base64-представление. Далее приложение осуществляет отправку в поисковую систему Elasticsearch на индексацию, используя производительное Elasticsearch Java API.

Отдельно на сервере работает приложение, отвечающее за предоставление API реализованного поискового сервиса сторонним потребителям. В зависимости от поступающих к нему запросов производит либо запрос к Elasticsearch за поисковой выдачей, либо производит выгрузку потребителю исходного документа с диска.

Извне к поисковому сервису можно обратиться посредством предоставляемого API. Одним из потребителей данного программного интерфейса является пользовательский веб-интерфейс.

Модуль индексации документов. Для того, чтобы Elasticsearch мог проиндексировать наиболее часто встречающиеся форматы документов, такие как pdf, .doc, .docx, .rtf, .htm, .html, .odt, был установлен плагин Ingest Attachment [2]. Для этого необходимо сконвертировать их в base64-формат.

Для добавления документа в индекс был настроен собственный пайплайн (pipeline). Пайплайн описывает порядок действий, предпринимаемый Elasticsearch при добавлении нового документа в индекс и состоит из обработчиков (processors), которые производят некоторые действия над документом или же описывают его конфигурацию.

Настройка обработчика с конфигурацией плагина Attachment, включала в себя указание имени

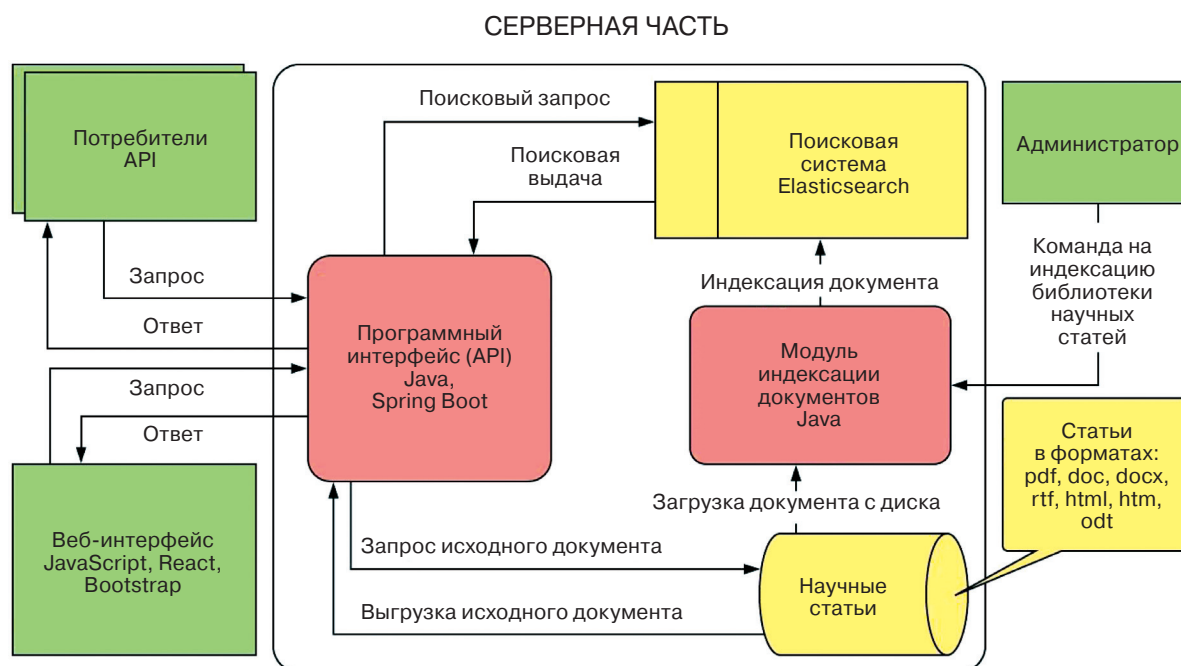


Рис. 1. Архитектура поискового сервиса

Fig. 1. Search service architecture



Рис. 2. Последовательность работы фильтров токенов

Fig. 2. Sequence of operation of token filters

поля, в котором находится base64–представление документа, а также снятие ограничений на количество символов в документе.

Помимо этого, для повышения производительности Elasticsearch, решено было уменьшить размер индекса, удалив поле data с base64–представлением исходного документа. Добавлен стандартный обработчик «remove» с именем поля, которое необходимо удалить из документа, после его добавления в индекс.

Таким образом поле «data» сначала обрабатывается плагином Ingest Attachment, чтобы извлечь из него текстовое представление документа, которое затем добавляется в индекс. После чего это поле удаляется. Таким образом объем индекса с 520 документами уменьшился с 2,4 Гб до 108 Мб, значительно повысив производительность.

Для анализа была взята готовая подборка статей по кристаллографии у представителя предметной области. Статьи проиндексировали приложением, получив набор из 594 документов, в основном на русском языке. Но среди них присутствует некоторое количество нерелевантных документов, состоящих исключительно из тэгов html–разметки. Большинство из этих файлов было удалено путем добавления условия на длину файлов — после индексации удаляются все документы не длиннее 1000 символов.

В Elasticsearch термы называются токенами. Был создан собственный анализатор токенов, с воз-

можностью отсеивания стоп–слов, поиска без учета регистра, с использованием словаря синонимов, а также с учетом морфологии как английского, так и русского языков.

Данный анализатор «crystal» устроен следующим образом: используется токенайзер «whitespace», который разбивает текст на термы по пробелам. Затем указывается последовательность фильтров, которые могут модифицировать эти термы, — удалять их или добавлять новые. Причем очень важен порядок, в котором они указаны, т.к. они применяются к потоку термов последовательно, как при индексации, так и при поиске документа. Пример работы проиллюстрирован на рис. 2.

Первый фильтр — это словарь синонимов, который производит замену термов слева от символа «=>» на все термы, указанные справа от него. В этом словаре указаны символы химических элементов из периодической таблицы Менделеева. Каждая строка ставит в соответствие символ химического элемента и его английское название, например, Be => Beryllium. Только затем применяется фильтр, приводящий термы к нижнему регистру. Это сделано затем, чтобы последующий за ними фильтр стоп–слов, не удалил приведенный к нижнему регистру терм be, который полностью совпадает с одним из стоп слов. Таким образом, сделав поисковый запрос по «Be» будут найдены все документы со вхождением данного слова с учетом регистра и его синонимов, а по запросу «be» отобразятся все документы в

индексе, что означает, что запрос был пустым, т. е. не содержал термов. Elasticsearch можно настроить так, чтобы он отображал пустую выдачу при пустом запросе, это поведение можно менять соответствующим параметром Java API.

Стоит сказать, что *synonym*-фильтр разбивает синонимы на токены при помощи токенайзера, объявленного в анализаторе, внутри которого он используется. Фильтрует же термы при помощи фильтров, объявленных до него в цепочке.

После этих двух фильтров, применяется третий — второй словарь синонимов, основной, который добавляет к русскоязычным написаниям химических элементов их англоязычные версии: Бериллий => Beryllium. Он содержит описание химических формул: AlN, Aluminum Nitride, Нитрид алюминия => AluminumNitride. Результирующий терм написан без пробела затем, чтобы избежать нерелевантного поиска, вызванного, по всей видимости, непредсказуемым циклическим слиянием правил замены термов. Также в этом словаре содержатся описания типов кристаллических систем и атомных радиусов: Кубическая, Cubic => Кубическая, Cubic, Ионный, Ionic => Ионный, Ionic.

Затем наступает очередь стоп-фильтров. Эти фильтры удаляют термы, содержащие предлоги, суффиксы, междометия, частицы и тому подобные часто встречающиеся термы, поиск по которым не будет повышать релевантность поиска. Используется два фильтра, один для русского языка, другой для английского. Эти фильтры поставляются вместе с Elasticsearch.

После наступает черед фильтров, реализующих стемминг (*stemming*) — это нахождение основы слова для заданного исходного слова. Основа обязательно совпадает с морфологическим корнем слова. Опять же, используется два стандартных фильтра для английского и русского языка. Пример работы стемминга: превращает слово «Подложка» в терм «подложк», что позволяет производить поиск, не зависящий от окончаний слова, входящего в запрос. Все слова «Подложка», «Подложкой», «Подложками» и т.д. будут порождать одинаковую поисковую выдачу. Теперь, Elasticsearch настроен и готов к работе.

Индексировать документы можно вручную, при помощи REST запросов к Elasticsearch, но это слишком неудобно, и поэтому была написана программа на языке Java с использованием Elasticsearch Java API. Это модуль был назван *pdf_index*.

При запуске программы происходит подключение к Elasticsearch, создание индекса «crystal» в случае, если его еще нет, иначе удаляется и создается заново, применяются настройки индекса, с указанием используемого анализатора токенов. Затем *pdf_index* считывает файлы из указанной пользователем директории, проверяет, что они относятся к

одному из следующих форматов: .pdf, .doc, .docx, .rtf, .html, .htm или .odt. Файлы других форматов игнорируются. После проверки этого условия программа конвертирует файл в base64-представление, чтобы плагин Ingest Attachment смог распарсить¹ этот документ, и отправляет на индексацию в Elasticsearch. Затем эта строка помещается в поле «data» запроса. Также помимо этого поля, добавляется поле, содержащее дату добавления документа в индекс, имя документа и информация о пути, по которому он был найден на диске. Путь указывается для того, чтобы была возможность затем его выкачать с диска. Помимо прочего указывается имя пайплайна — «attachment», и задается id документа как md5 хеш-сумма от имени файла. Это необходимо для того, чтобы в индекс не добавлялись одинаковые документы, потому что если id не указать явно, то он будет сгенерирован случайным образом. Такой способ задания id был выбран также по тому, что его можно беспрепятственно использовать в составе url запроса к Elasticsearch.

Модуль, предоставляющий API. Чтобы изолировать фронтенд часть от особенностей работы с Elasticsearch, было создано приложение на Spring Boot [3] под названием *crystal_proxy*. Запуск данного приложения представляет из себя старт сервера приложений Apache Tomcat с загруженным в контейнер сервлетов скомпилированным Java приложением. Все это происходит автоматически и одной командой командной строки, что является одним из плюсов использования Spring Boot. Таким образом, приложение постоянно слушает заданный в конфигурационном файле порт, и принимает несколько видов REST запросов и обычных GET, делая исходя из них новые к Elasticsearch, получает ответ, и преобразует его в понятный для фронтенда вид. Это нельзя назвать проксированием в чистом виде, так как API *crystal_proxy* и Elasticsearch отличается. Далее следует описание API данного приложения:

- GET запрос по адресу `/api/check` должен вернуть следующий текст: «Hello! It's Crystal Proxy Application!». Этот запрос используется для проверки работоспособности приложения.
- GET запрос по адресу `/api/getFileById` с Id документа, переданным в атрибутах запроса. Произойдет загрузка документа на фронт.
- REST GET запрос по адресу `/api/getContentById` с Id документа, переданным в атрибутах запроса, вернет JSON с содержимым документа.
- REST GET запрос по адресу `/api/search` с текстом запроса Query, типом химического элемента ChemicalElement, химической формулой ChemicalFormula, типом кристаллической решетки

¹ Парсинг — автоматизированный сбор и систематизация информации из открытых источников с помощью скриптов. Другое название этого процесса — веб-скрейпинг.

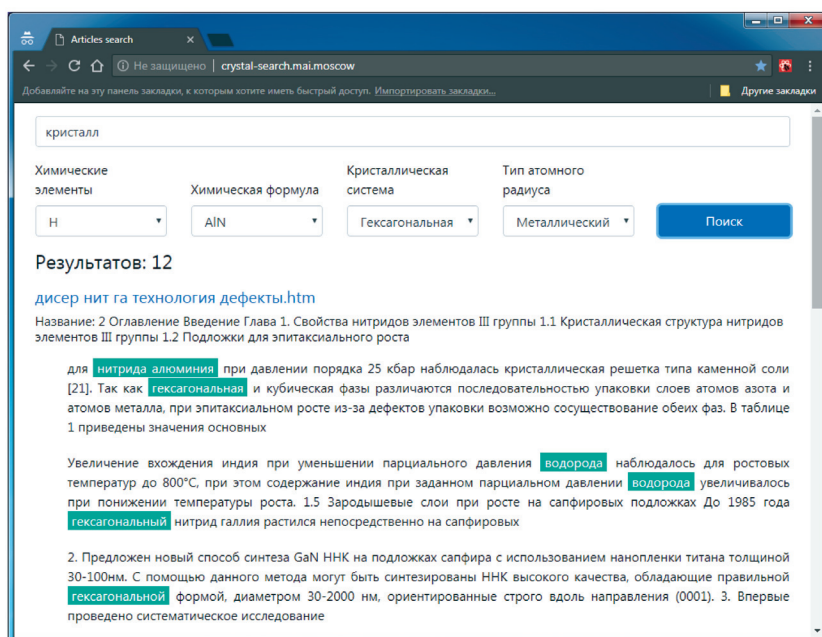


Рис. 3. Веб–интерфейс пользователя

Fig. 3. Web user interface

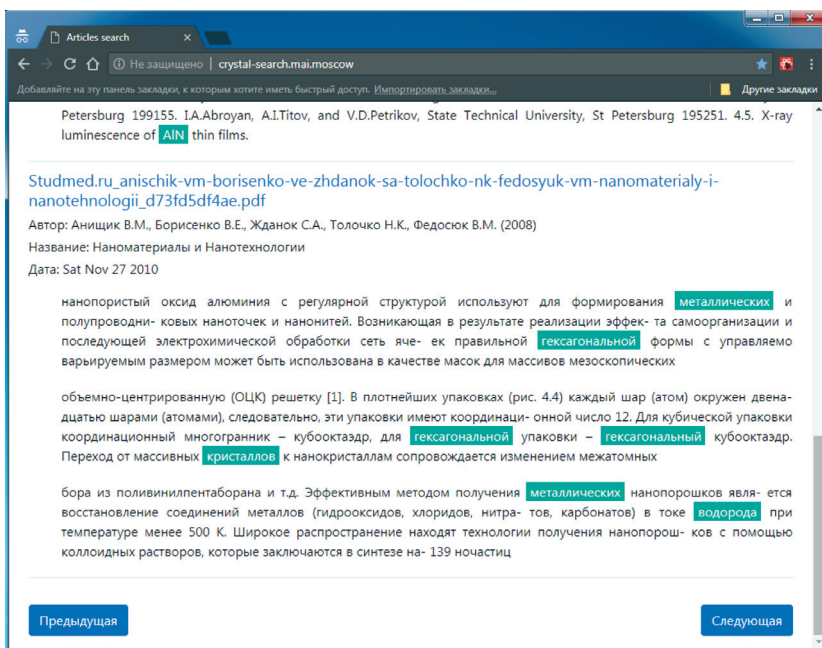
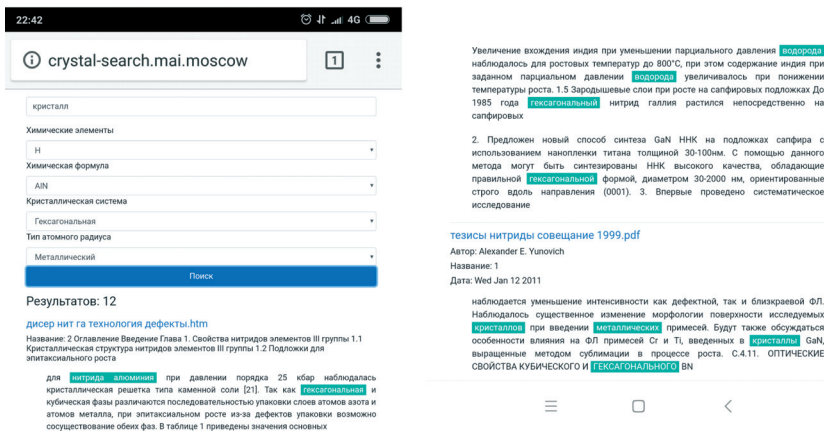


Рис. 4. Навигация веб–интерфейса

Fig. 4. Web interface navigation



ки CrystalSystem, типом атомного радиуса RadiusType, пространственной группой SpaceGroup, номером документа с которого начинается выдача from (по умолчанию 0), размером выдачи size (по умолчанию 10), переданными в атрибутах запроса (ни один из параметров не является обязательным), вернет JSON с соответствующей поисковой выдачей.

- REST GET запрос по адресу /api/getChemicalElements возвращает JSON со списком химических элементов, которые фронтенд отобразит в соответствующем селекторе. Задается в файле на сервере.

- REST GET запрос по адресу /api/getChemicalFormulas возвращает JSON со списком химических формул, которые фронтенд отобразит в соответствующем селекторе. Задается в файле на сервере.

- REST GET запрос по адресу /api/getCrystalSystems возвращает JSON со списком кристаллических систем, которые фронтенд отобразит в соответствующем селекторе. Задается в файле на сервере.

- REST GET запрос по адресу /api/getRadiusTypes возвращает JSON со списком атомных радиусов, которые фронтенд отобразит в соответствующем селекторе. Задается в файле на сервере.

Есть возможность настройки адреса и порта Elasticsearch, имени индекса, количества фрагментов текста документа, отображаемого на фронтенде, с вхождением поискового запроса, а также их длины. Можно настроить путь на сервере к файлам с данными для селекторов на фронтенде.

Поисковый запрос строится по двум полям документа: по тексту — «attachment.content» и имени — «filename». Таким образом повышается релевантность поиска, т.е. в поисковой выдаче первыми идут документы, у которых поисковый запрос имеет вхождение как в текст статьи, так и в ее название. Поисковый запрос строится таким образом, чтобы наибольшей релевантностью обладали

Рис. 5. Адаптивный дизайн интерфейса
Fig. 5. Responsive interface design

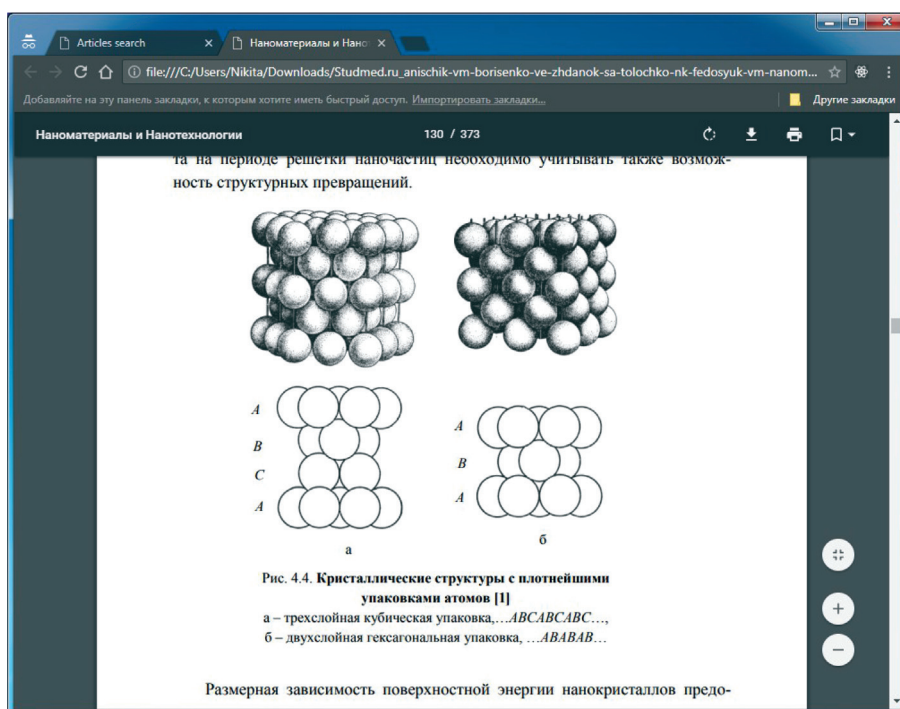


Рис. 6. Загрузка исходного документа

Fig. 6. Loading the original document

те документы, в которых все термины из поискового запроса входят в текст одновременно. В названии документа и его содержимом будут отмечаться вхождение термов поискового запроса.

Модуль пользовательского интерфейса. На рис. 3 изображено реализованное одностраничное React [4] приложение с использованием библиотеки компонентов Bootstrap 4.1.0 [5]. Приложение предоставляет строку поиска, а также четыре селектора с параметрами поиска: символ химического элемента, химическая формула, тип кристаллической решетки, тип атомного радиуса. На странице отображается количество найденных документов, затем следует не более трех документов, с подсветкой вхождения в текст поискового запроса, а также опциональной дополнительной информацией: имя автора документа, название документа, дата создания документа. Количество и длина этих фрагментов задаются на бекенде. Каждый документ предваряется своим именем, которое является ссылкой для загрузки документа. Это имя является именем файла на диске сервера, а название документа берется из служебного поля в документе. После списка документов идет поле навигации, отвечающее за переключение между страницами поисковой выдачи (рис. 4). Приложение осуществляет запросы к расположенному на бекенде приложению `crystal_proxu`.

Из рис. 3 можно видеть, как работает поиск, обратите внимание на стемминг — учитываются разные окончания слова. Выбраны данные во всех четырех селекторах. Списки селекторов заполняются по запросу на бекенд, то есть на бекенде хранятся все символы химических элементов, формул, кристал-

лических систем и атомных радиусов. Выводится количество найденных документов — 13.

Одно из преимуществ использования Bootstrap — это сетка (*grid system*) [5] которая позволяет задать ширину и положение каждого компонента. В основном это необходимо для корректного поведения веб-страницы при изменении ее размера, а также при отображении на разных устройствах, что можно проследить на рис. 5. Из рис. 5 видно, что компоненты не уходят за границы экрана, а перегруппируются, чтобы быть всегда на виду, что очень удобно на мобильных устройствах. Также используется класс-компонента *flex* [6], который позволяет задать положение компонента внутри ячейки, его работу можно проследить на рис. 3, где видно, что селекторы находятся на одной линии, иначе селектор с химическими формулами находился выше остальных.

Таким образом, у представителя предметной области есть понятный интерфейс для осуществления полнотекстового поиска по коллекции документов организации [7].

Заключение

В статье рассмотрена задача поиска научных публикаций, разработаны программные модули для индексации научных статей и полнотекстового поиска по ним, настроен поисковый индекс для предметно-ориентированного поиска и реализован пользовательский интерфейс. Реализован программный интерфейс для полученного поискового сервиса.

Библиографический список

1. Elasticsearch. URL: <https://www.elastic.co/elasticsearch/> (дата обращения: 30.06.2020).
2. Ingest Attachment Processor Plugin. URL: <https://www.elastic.co/guide/en/elasticsearch/plugins/7.17/ingest-attachment.html> / (дата обращения: 30.06.2020).
3. Spring Boot. URL: <https://spring.io/projects/spring-boot/> (дата обращения: 30.06.2020).
4. React. URL: <https://legacy.reactjs.org/> (дата обращения: 30.06.2020).
5. Bootstrap 4.1.0. URL: <https://bootstrap-4.ru/docs/4.1/getting-started/introduction/> (дата обращения: 30.06.2020).
6. Flexbox. URL: <https://support.google.com/webdesigner/answer/10995586?hl=ru> (дата обращения: 30.06.2020).
7. Зайцев Н. А. Инструментарий для сбора, индексирования и классификации статей по кристаллографии // Материалы XX Юбилейной Международной конференции по вычислительной механике и современным прикладным системам (ВМСПИС'2017), Алушта, 24–31 мая 2017 г. Алушта: Издательство МАИ–Принт, 2017. С. 144–146.

Дополнительная информация

Для написания всех трех приложений использовалась система контроля версий Git с репозиторием на GitHub в среде разработки IntelliJ IDEA. Исходные коды доступны по следующим адресам:

https://github.com/JacksonGibsonESP/pdf_index
https://github.com/JacksonGibsonESP/crystal_proxy
https://github.com/JacksonGibsonESP/Elastic_Front

Все клиент–серверное приложение было целиком развернуто на удаленном сервере и доступно по адресу:

<http://crystal-search.mai.moscow>

Статья поступила в редакцию 14 января 2021 г.

Izvestiya vuzov. Materialy elektronnoi tekhniki = Materials of Electronics Engineering. 2020, vol. 23, no. 4, pp. 297–303.
 DOI: 10.17073/1609-3577-2020-4-297-303

Software tools for indexing and subject-oriented search of scientific articles on crystallography

E. S. Gavrilov^{1,2,§}, N. A. Zaitsev³

¹ *Moscow Aviation Institute (National Research University),
4 Volokolamskoe Shosse, Moscow 125993, Russia*

² *Federal Research Centre “Information and Control” of the Russian Academy of Sciences,
44–2 Vavilov Str., Moscow 119333, Russia*

³ *Sberbank, 19 Vavilov Str., Moscow 117312, Russia*

Abstract. Software modules are presented that implement the indexing of scientific articles, subject-oriented search on them, a user interface, as well as a software interface for third-party consumers. A detailed description of the process of setting up full-text search to the level of subject-oriented is given.

Keywords: full-text search, domain-specific search, inverted index, Elasticsearch search engine, Java language, Spring framework, JavaScript language, React framework

References

1. Elasticsearch. URL: <https://www.elastic.co/elasticsearch/> (accessed: 30.06.2020).
2. Ingest Attachment Processor Plugin. URL: <https://www.elastic.co/guide/en/elasticsearch/plugins/7.17/ingest-attachment.html> / (accessed: 30.06.2020).
3. Spring Boot. URL: <https://spring.io/projects/spring-boot/> (accessed: 30.06.2020).
4. React. URL: <https://legacy.reactjs.org/> (accessed: 30.06.2020).
5. Bootstrap 4.1.0. (In Russ.). URL: <https://bootstrap-4.ru/docs/4.1/getting-started/introduction/> (accessed: 30.06.2020).
6. Flexbox. (In Russ.). URL: <https://support.google.com/web-designer/answer/10995586?hl=ru> (accessed: 30.06.2020).
7. Zaitsev N. A. Tools for collecting, indexing and classifying articles on crystallography. *Proc. XX Anniversary International Conference on Computational Mechanics and Modern Applied Systems, Alushta, May 24–31, 2017.* Alushta: Izdatel'stvo MAI–Print, 2017. Pp. 144–146. (In Russ.)

Information about authors:

Evgeny S. Gavrilov^{1,2,§} — Senior Lecturer (1), Researcher (2), e-mail: eugavrilov@gmail.com; **N. A. Zaitsev³** — Developer, e-mail: JacksonGibsonESP@gmail.com

§ Corresponding author

Received January 14, 2021

УДК 621.315.592

Использование машиннообучаемых потенциалов межатомного взаимодействия для изучения свойств кристаллических структур

© 2020 г. О. В. Уварова^{1,2,§}, С. И. Уваров¹

¹ *Федеральный исследовательский центр «Информатика и управление»
Российской академии наук,
ул. Вавилова, д. 44, корп. 2, Москва, 119333, Россия*

² *Московский авиационный институт (национальный исследовательский университет),
Волоколамское шоссе, д. 4, Москва, 125993, Россия*

Аннотация. В процессе моделирования многослойных полупроводниковых наноструктур существенную роль играет быстрое получение точных значений характеристик рассматриваемой структуры. Одной из таких характеристик является значение энергии взаимодействия атомов внутри структуры. Значение энергии важно для получения и других величин, таких как объемный модуль упругости структуры, модуль сдвига и др. В работе рассматриваются способ получения энергии взаимодействия двух атомов, основанный на методах машинного обучения. Модель, построенная на основе машиннообучаемого потенциала GAP (Gaussian Approximation Potential), обучается на заранее подготовленной выборке и позволяет предсказать значения энергии пар атомов для тестовых данных. В качестве признаков использовались значения координат взаимодействующих атомов, расстояние между атомами, значение постоянной решетки структуры, указание на тип взаимодействующих атомов, а также значение, описывающее окружение атомов. Вычислительный эксперимент проводился с участием однокомпонентных соединений, таких как Si, Ge и C. Оценивались скорость получения энергии взаимодействующих атомов, а также точность полученного значения. Характеристики скорости и точности сравнивались со значениями, полученными с помощью многочастичного потенциала межатомного взаимодействия — потенциала Терсоффа.

Ключевые слова: кристаллические структуры, потенциальная энергия структуры, потенциал Терсоффа, машиннообучаемый потенциал, Gaussian Approximation Potential, Gaussian Process Regression, машинное обучение

Введение

Моделирование свойств структур и процессов, происходящих в структурах, является важным направлением современных научных исследований. В настоящее время активно изучаются многослойные полупроводниковые материалы, с помощью которых создаются приборы для нанoeлектроники — транзисторы, светодиоды, полупроводниковые лазеры и др.

Для изучения механизмов возникновения дефектов, появлении вакансий, дивакансий и др. активно применяется молекулярно-динамический подход. В процессе молекулярно-динамического моделирования важно понимание начального со-

стояния кристаллической структуры. Начальное состояние определяется с помощью квантово-механических расчетов, однако моделирование систем, состоящих из более чем 1000 атомов с помощью квантово-механического моделирования является вычислительно затратным. Возникает необходимость использования методов, позволяющих без существенной потери точности получать значения характеристик структур с большей вычислительной эффективностью.

Цель работы — сравнение двух методов получения энергии взаимодействия атомов внутри структуры: с помощью многочастичного потенциала межатомного взаимодействия и с помощью потенциала, основанного на методе машинного обучения.

Постановка задачи и метод решения

Одной из важнейших характеристик структуры является значение ее потенциальной энергии E . Она рассчитывается как совокупность энергий взаи-

Уварова Ольга Владимировна^{1,2,§} — младший научный сотрудник, <https://orcid.org/0000-0001-6260-9696>, e-mail: olga25v@gmail.com; Уваров Сергей Игоревич¹ — младший научный сотрудник, <https://orcid.org/0000-0002-1023-5212>, e-mail: seruv25@gmail.com

§ Автор для переписки

модействия V_{ij} пар атомов структуры и при расчете требует прохождения по всем атомам системы:

$$E = \sum_i E_i = \frac{1}{2} \sum_i V_{ij}. \quad (1)$$

Расчет энергии — ресурсоемкая, но необходимая процедура, использующаяся в том числе для получения значений таких величин, как объемный модуль упругости (2), модуль сдвига (3) и др.

$$B = -V \frac{dP}{dV} = \frac{1}{\Omega} \frac{d^2 E}{dv^2}, \quad (2)$$

где P — напряжение; Ω — объем, приходящийся на один атом ячейки.

$$C' = \frac{1}{4\Omega} \frac{d^2 E}{d\epsilon^2}, \quad (3)$$

где ϵ определяет сдвиговую деформацию системы.

Для получения энергии структуры атомов возможно использование многочастичных потенциалов. Так, потенциал Терсоффа подходит для описания структур с ковалентным типом связи и позволяет рассчитывать энергию взаимодействия (V_{ij}) двух атомов i и j в присутствии третьего атома k [1]:

$$V_{ij} = f_C(r_{ij}) \left[f_R(r_{ij}) + b_{ij} f_A(r_{ij}) \right],$$

$$f_C(r_{ij}) = \begin{cases} 1, & r_{ij} < R - R_{\text{cut}} \\ \frac{1}{2} \left[1 + \cos \left[\frac{\pi(r_{ij} - R)}{2R_{\text{cut}}} \right] \right], & R - R_{\text{cut}} < r_{ij} < R + R_{\text{cut}} \\ 0, & r_{ij} > R + R_{\text{cut}} \end{cases},$$

$$f_R(r_{ij}) = A_{ij} \exp \left[-\kappa_{ij} (r_{ij} - R_e) \right],$$

$$f_A(r_{ij}) = B_{ij} \exp \left[-\mu_{ij} (r_{ij} - R_e) \right],$$

$$b_{ij} = \chi_{ij} \left(1 + \gamma_i^{\eta_i} \zeta_{ij}^{\eta_i} \right)^{-\frac{\eta_i}{2}},$$

$$\zeta_{ij}^{\eta_i} = \sum_{k \neq ij} f_C(r_{ik}) \omega_{ik} g(\theta_{jik}),$$

$$\omega_{ik} = \exp \left[\lambda^3 (r_{ij} - r_{ik})^3 \right],$$

$$g(\theta_{jik}) = 1 + \frac{c_i^2}{d_i^2} - \frac{c_i^2}{\left[d_i^2 + (h_i - \cos \theta_{jik})^2 \right]},$$

$$A_i = \frac{D_{ei}}{S_i - 1}, \quad B_i = \frac{S_i D_{ei}}{S_i - 1},$$

$$\kappa_i = \beta_i \sqrt{2S_i}, \quad \mu_i = \beta_i \sqrt{\frac{2}{S_i}},$$

где $c, d, n, h, D_e, S, \beta, R_e, \lambda, \gamma, \chi$ — параметры потенциала Терсоффа, индивидуальные для каждого соединения.

Существенной сложностью при использовании такого подхода является необходимость подбора набора параметров для каждого соединения. Значение параметра зависит от типа взаимодействующих атомов и подбирается для пар и троек атомов. Так, для однокомпонентного соединения, где взаимодействуют атомы только одного типа, насчитывается 11 параметров потенциала Терсоффа. В случае же с двухкомпонентными соединениями, количество различных параметров возрастает до 33. Скорость подбора параметров для системы, состоящей из более 1000 атомов оказывается низкой. Сложность расчета значения энергии системы с учетом известных параметров потенциала оценивается как $O(n^3)$, где n — количество атомов в системе.

Алгоритм подбора параметров потенциала Терсоффа, наилучшим образом описывающих моделирование физических процессов в структурах, представлен в работе [2].

В настоящее время активное развитие получили машиннообучаемые потенциалы — потенциалы, основанные на методах машинного обучения. Модели, которые лежат в основе таких потенциалов, после обучения на квантово-механических расчетах позволяют предсказывать значения с достаточной точностью и вычислительной эффективностью.

Одними из примеров машиннообучаемых потенциалов являются потенциалы гауссового приближения GAP (*Gaussian Approximation Potentials*). В качестве метода обучения в GAP используется регрессия на основе гауссовских процессов (GPR, *Gaussian Process Regression*) [3].

Пусть $X = (x_1, x_2, \dots, x_n)^T \in \mathbb{R}^{n \times D}$ — признаковое описание выборки из n объектов, а $y = (y_1, y_2, \dots, y_n)^T \in \mathbb{R}^n$ — соответствующие им известные значения, где y — зашумленные значения некоторого скрытого случайного процесса $f: \mathbb{R}^D \rightarrow \mathbb{R}$, являющегося гауссовским процессом.

$$f \sim GP[\mu(\cdot, \cdot), k(\cdot, \cdot)],$$

$k(\cdot, \cdot)$ — ковариационная функция — ядро; $\mu(\cdot, \cdot) = 0$ — математическое ожидание.

Для любого конечного набора переменных $F = f(X)$,

$$F = [f(x_1), \dots, f(x_n)] \sim \mathcal{N}[\mu(\cdot, \cdot), k(\cdot, \cdot)].$$

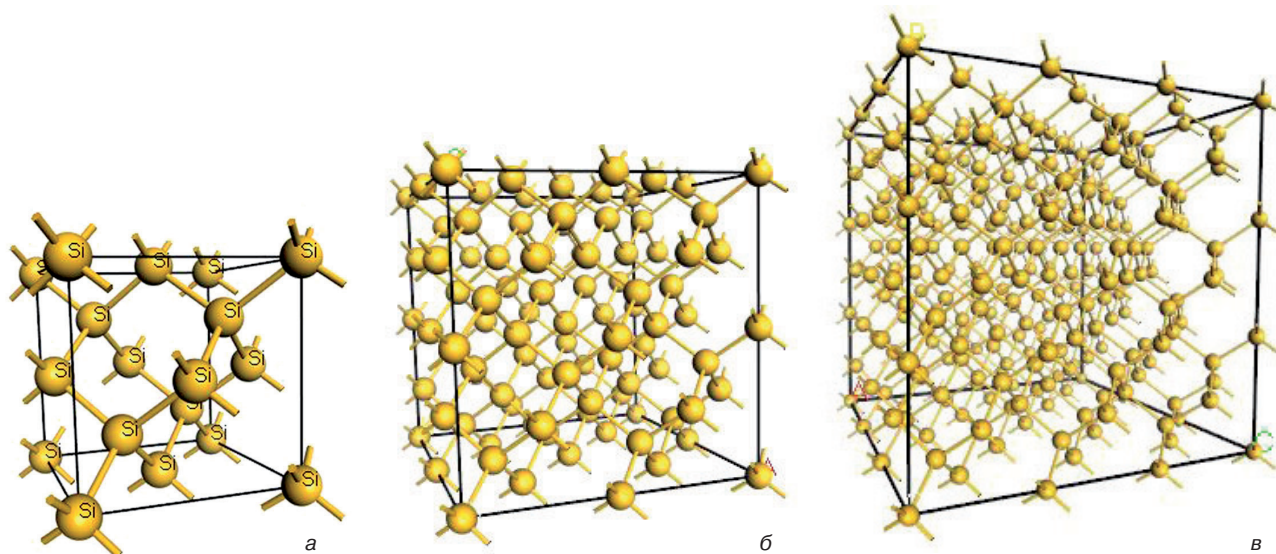


Рис. 1. Операций симметрии базисных атомов:

a — элементарная ячейка из 18 атомов Si; *б* — размноженная ячейка из 64 атомов Si; *в* — размноженная ячейка из 280 атомов Si

Fig. 1. Operations of symmetry of basic atoms:

(*a*) unit cell of 18 Si atoms; (*б*) multiplied cell of 64 Si atoms; (*в*) multiplied cell of 280 Si atoms

В качестве ядра используется радиально-базисная функция.

$$k(x, y, r, \sigma_{\text{noise}}, \sigma_{\text{sf}}) = \sigma_{\text{sf}}^2 \exp\left(-\frac{\|x - y\|^2}{r^2}\right) + \sigma_{\text{noise}}^2.$$

Вычислительный эксперимент

Было проведено исследование на следующих однокомпонентных структурах: Si, Ge, C. Для каждого соединения были известны его базисные атомы, занимающие позиции Уайкова. С помощью операций симметрии базисные атомы размножались до элементарной ячейки, которая, в свою очередь, с помощью параллельного переноса по всем направлениям размножалась до структур, состоящих из более 250 атомов (рис. 1).

Рассматривались следующие конфигурации атомов в полученных структурах: отклонения ато-

мов от положения равновесия по всем трем направлениям, возникновение дефектов: вакансии и дивакансии в различных позициях базисных атомов.

Для рассмотренных конфигураций атомов рассчитывались значения энергии с помощью пакета *Quantum Espresso (QE)*. Рассчитывались значения энергии взаимодействия таких пар взаимодействующих атомов *i* и *j* в рамках каждой системы, где атомы *i* не принадлежат тождественным элементам симметрии и принимают значение неэквивалентных позиций базисных атомов, а атомы *j* находятся в пределах радиуса отсечения R_{cut} . Для всех рассматриваемых соединений и структур атомов было рассчитано порядка 13000 значений энергий взаимодействующих пар атомов.

Для использования методов машинного обучения все категориальные признаки были переведены в числовые, с помощью однострочного кодирования был зафиксирован тип взаимодействующих атомов.

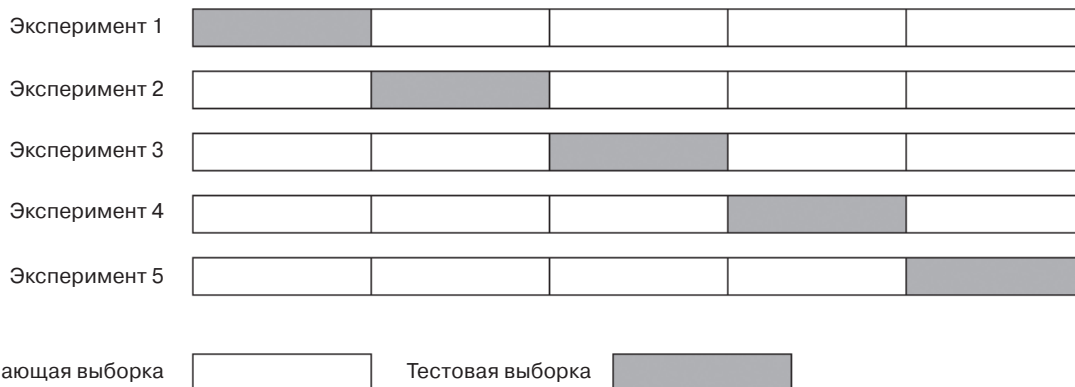


Рис. 2. Кросс-валидация

Fig. 2. Cross-validation

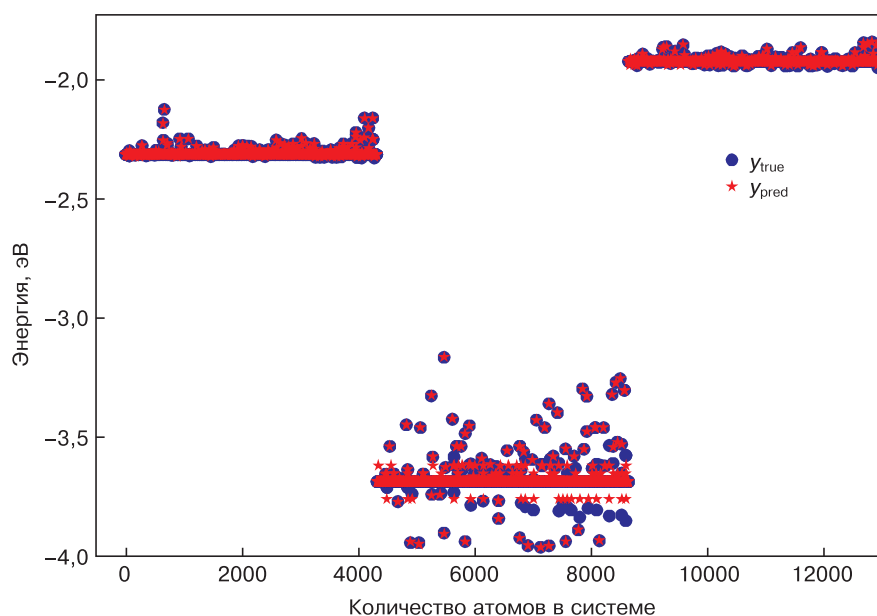


Рис. 3. Предсказанные значения энергии (y_{pred}) и верные значения энергии (y_{true}) взаимодействия пар атомов для структур Si, Ge и C

Fig. 3. Predicted values of energy (y_{pred}) and correct values of energy (y_{true}) of interaction of pairs of atoms for structures of Si, Ge and C

Так как обученный алгоритм может сильно меняться в зависимости от обучающей выборки, использовалась кросс-валидация (рис. 2) — разбиение данных на несколько одинаковых частей для поочередного использования каждой части в качестве тестовой выборки, а оставшейся части — в качестве обучающей выборки.

Для оценки качества работы алгоритма использовались метрики средней квадратичной ошибки

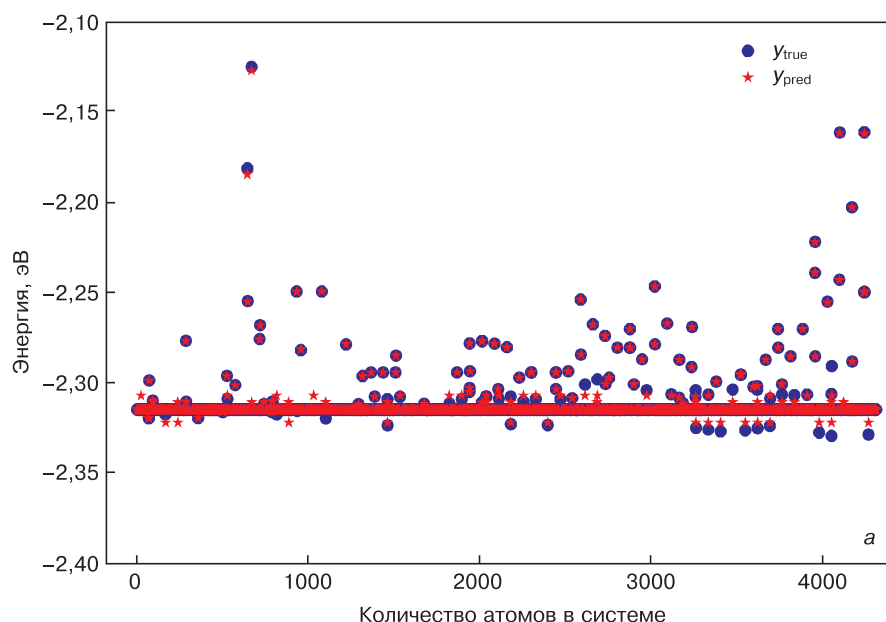
$$MSE = \frac{1}{n} \sum (y_{\text{true}} - y_{\text{pred}})^2,$$

где y_{true} — значение энергии, рассчитанное с помощью QE; y_{pred} — значение энергии, предсказанное с помощью машиннообученной модели.

При расчете значения энергии взаимодействия атомов с помощью потенциала Терсоффа с подобранными параметрами было получено значение $MSE = 0,00001$ [2].

Для исследования применимости использования машиннообучаемых потенциалов в изучении свойств структур проводился эксперимент с использованием машиннообучаемого потенциала GAP. Для признакового описания значений энергии взаимодействия атомов использовались:

- координаты взаимодействующих атомов;
- расстояние между взаимодействующими атомами;
- постоянная решетка системы, в рамках которой рассматривается взаимодействие двух атомов;



Продолжение рис. 4 см. на следующей странице

Начало рис. 4 см. на предыдущей странице

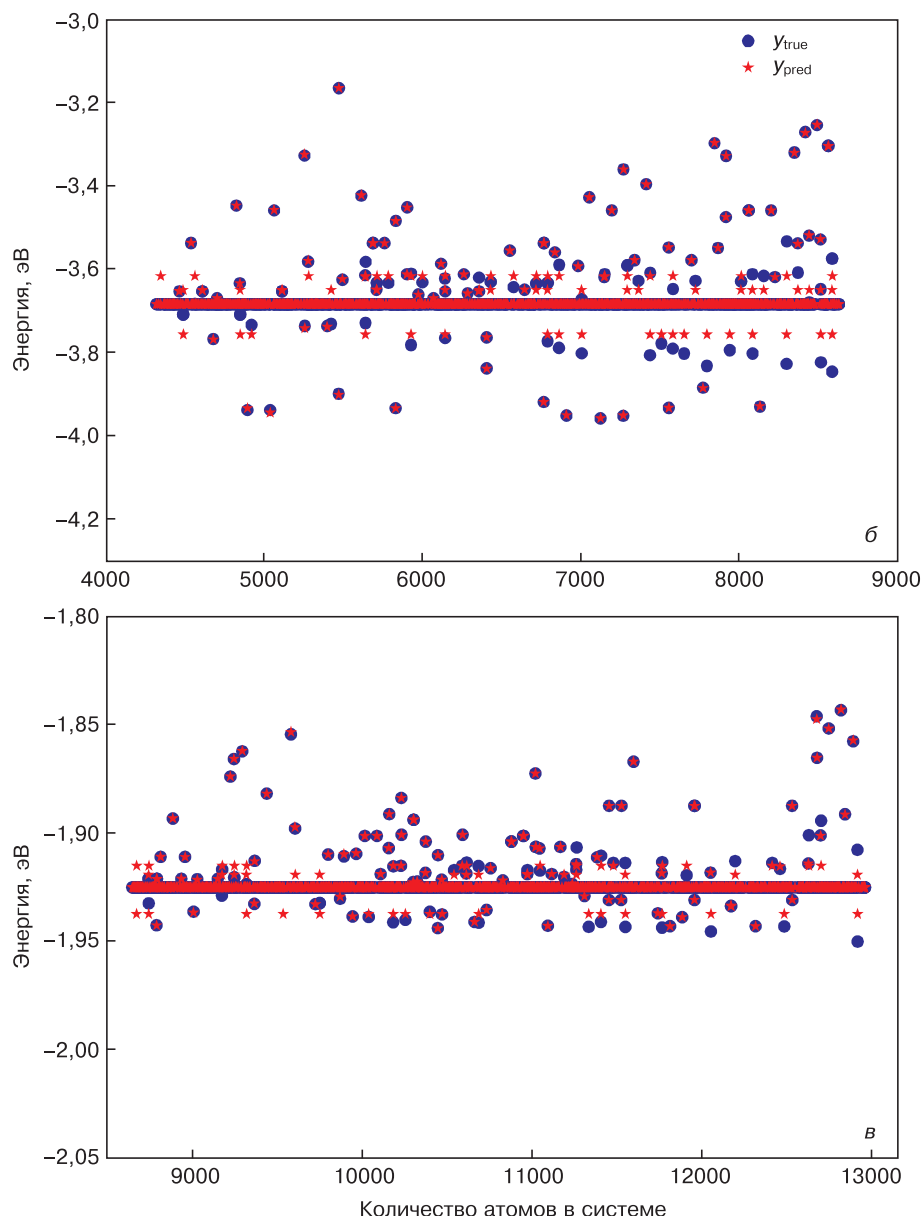


Рис. 4. Предсказанные значения энергии (y_{pred}) и верные значения энергии (y_{true}) взаимодействия пар атомов структур: а — Si; б — C; в — Ge

Fig. 4. Predicted values of energy (y_{pred}) and correct values of energy (y_{true}) of interaction of pairs of atoms of structures: (a) Si; (b) C; (v) Ge

- указание на тип взаимодействующих атомов;
- значение X_E , описывающее окружение атома [4]:

$$X_E = \sum_i \sum_{j \neq i} \exp \left[- \left(\frac{r_{ij}}{R_{\text{cut}}} \right)^p \right],$$

где r_{ij} — расстояние между атомами i и j ; R_{cut} — расстояние отсечения, параметр, определяемый для каждой структуры исходя из ее геометрических характеристик; p — параметр, определяемый для каждой структуры.

Была обучена модель, позволяющая предсказывать значения энергии E взаимодействия пар

атомов для структур Si, Ge и C. В результате оценки качества данной модели было получено значение $MSE = 0,0000283$.

На рис. 3 представлено распределение предсказанных (y_{pred}) и верных (y_{true}) значений энергии, полученных с помощью QE, для взаимодействующих пар атомов структур Si, Ge и C. На рис. 4 представлены y_{pred} и y_{true} для структур каждого из рассматриваемых элементов.

При этом скорость расчета энергии взаимодействия атомов с помощью потенциала Терсоффа проигрывает скорости получения значения энергии с помощью машиннообученной модели, как показано на рис. 5.

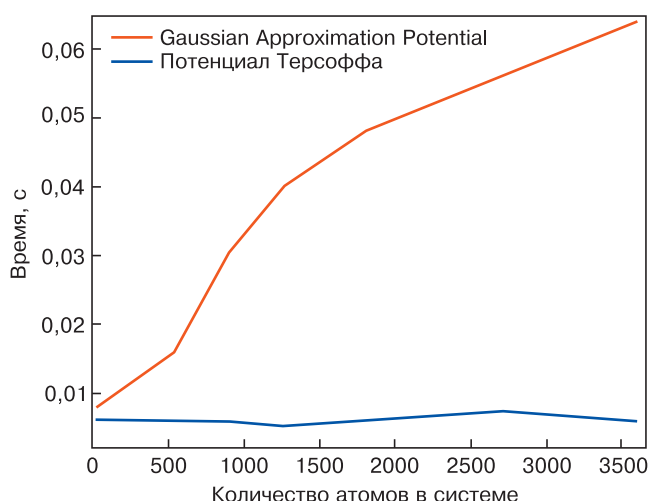


Рис. 5. Зависимость скорости расчета энергии от количества атомов в системе

Fig. 5. Dependence of the rate of energy calculation on the number of atoms in the system

Заключение

Таким образом, благодаря использованию методов машинного обучения и, в частности, машиннообучаемых потенциалов, возможно существенное ускорение работы алгоритмов получения значения свойств материалов, например, энергии взаимодействия атомов в структуре атомов. Демонстрируемая же точность при этом ниже, чем при расчете значений с помощью многочастичного потенциала. Это говорит о необходимости поиска более прогрессивных алгоритмов машинного обучения и наиболее подходящих машиннообучаемых потенциалов для дальнейшего улучшения точности модели.

Библиографический список

1. Powell D. Elasticity, lattice dynamics and parameterization techniques for the Tersoff potential applied to elemental and type III–V semiconductors: dis. University of Sheffield, 2006. 259 p. URL: <https://etheses.whiterose.ac.uk/15100/1/434519.pdf>
2. Abgaryan K. K., Volodina O. V., Uvarov S. I. Mathematical modeling of point defect cluster formation in silicon based on molecular dynamic approach // Modern Electronic Materials. 2015. V. 1, N 3. P. 82—87. DOI: 10.1016/j.moem.2016.03.001

3. Bartók–Pirtay A. The Gaussian Approximation Potential: an interatomic potential derived from first principles quantum mechanics. Springer Science & Business Media, 2010. 107 p. DOI: 10.1007/978-3-642-14067-9

4. Круглов И. А. Поиск новых соединений, изучение их стабильности и свойств с использованием современных методов компьютерного дизайна материалов: Дисс. канд. физ.-мат. наук. М.: Ин-т физики высоких давлений им. Л.Ф. Верещагина РАН, 2018. 112 с.

5. Gramacy R. B. Surrogates: Gaussian process modeling, design, and optimization for the applied sciences. Chapman and Hall/CRC, 2020. 559 p.

6. Vorontsov K. Mathematical Learning Methods on Precendents. Course of Lectures, 2006.

7. Rupp M., Tkatchenko A., Müller K.-R., von Lilienfeld O. A. Fast and accurate modeling of molecular atomization energies with machine learning // Phys. Rev. Lett. 2012. V. 108, N 5. P. 058301. DOI: 10.1103/PhysRevLett.108.058301

8. Faber F., Lindmaa A., von Lilienfeld O. A., Armiento R. Crystal structure representations for machine learning models of formation energies // Int. J. Quantum Chem. 2015. V. 115, N 16. P. 1094—1101. DOI: 10.1002/qua.24917

9. Bartók A. P., Csányi G. Gaussian approximation potentials: A brief tutorial introduction // Int. J. Quantum Chem. 2015. V. 115, N 16. P. 1051—1057. DOI: 10.1002/qua.24927

10. Abgaryan K. K., Mutigullin I. V., Uvarov S. I., Uvarova O. V. Multiscale Modeling of Clusters of Point Defects in Semiconductor Structures // CEUR Workshop Proceedings, 2019. P. 43—51. <http://ceur-ws.org/Vol-2426/paper7.pdf>

11. Deringer V. L., Csányi G. Machine learning based interatomic potential for amorphous carbon // Phys. Rev. B. 2017. V. 95, N 9. P. 094203. DOI: 10.1103/PhysRevB.95.094203

12. Novikov I. S., Shapeev A. V. Improving accuracy of interatomic potentials: more physics or more data? A case study of silica // Materials Today Commun. 2019. V. 18. P. 74—80. DOI: 10.1016/j.mtcomm.2018.11.008

13. Wu S. Q., Ji M., Wang C. Z., Nguyen M. C., Zhao X., Umamoto K., Wentzcovitch R. M., Ho K. M. An adaptive genetic algorithm for crystal structure prediction // J. Phys.: Condens. Matter. 2014. V. 26, N 3. P. 035402. DOI: 10.1088/0953-8984/26/3/035402

14. Rupp M., Tkatchenko A., Müller K.-R., von Lilienfeld O. A. Fast and accurate modeling of molecular atomization energies with machine learning // Phys. Rev. Lett. 2012. V. 108, N 5. P. 058301. DOI: 10.1103/PhysRevLett.108.058301

15. Coifman R. R., Kevrekidis I. G., Lafon S., Maggioni M., Nadler B. Diffusion maps, reduction coordinates, and low dimensional representation of stochastic systems // Multiscale Model. Simul. 2008. V. 7, N 2. P. 842—864. DOI: 10.1137/070696325

16. Behler J., Parrinello M. Generalized neural-network representation of high-dimensional potential-energy surfaces // Phys. Rev. Lett. 2007. V. 98, N 14. P. 146401. DOI: 10.1103/PhysRevLett.98.146401

17. Hastie T., Tibshirani R., Friedman J. The elements of statistical learning: data mining, inference, and prediction. Springer Science & Business Media, 2009. 767 p. DOI: 10.1007/b94608

Работа выполнена при поддержке РФФИ проект № 19-29-03051 мк.

При проведении расчетов использовался вычислительный кластер ФИЦ ИУ РАН.

Статья поступила в редакцию 14 декабря 2020 г.

Izvestiya vuzov. Materialy elektronnoi tekhniki = *Materials of Electronics Engineering*. 2020, vol. 23, no. 4, pp. 304–310.
DOI: 10.17073/1609-3577-2020-4-304-310

Machine-learning based interatomic potential for studying of crystal structures properties

O. V. Uvarova^{1,2,*}, S. I. Uvarov¹

¹ *Federal Research Centre “Computer Science and Control” of the Russian Academy of Sciences,
44 Vavilov Str., Moscow 119333, Russia*

² *Moscow Aviation Institute (National Research University),
4 Volokolamskoe Shosse, 4, Moscow 125993, Russia*

Abstract. In the process of modeling multilayer semiconductor nanostructures, it is important to quickly obtain accurate values the characteristics of the structure under consideration. One of these characteristics is the value of the interaction energy of atoms within the structure. The energy value is also important for obtaining other quantities, such as bulk modulus of the structure, shear modulus etc. The paper considers a machine learning based method for obtaining the interaction energy of two atoms. A model built on the basis of the Gaussian Approximation Potential (GAP) is trained on a previously prepared sample and allows predicting the energy values of atom pairs for test data. The values of the coordinates of the interacting atoms, the distance between the atoms, the value of the lattice constant of the structure, an indication of the type of interacting atoms, and also the value describing the environment of the atoms were used as features. The coordinates of the atoms, the distance between the atoms, the lattice constant of the structure, an indication of the type of interacting atoms, the value describing the environment of the atoms were used as features. The computational experiment was carried out with structures of Si, Ge and C. There were estimated the rate of obtaining the energy of interacting atoms and the accuracy of the obtained value. The characteristics of speed and accuracy were compared with the characteristics that were achieved using the many-particle interatomic potential — the Tersoff potential.

Keywords: crystal structures, potential energy of structure, Tersoff potential, machine learning potential, Gaussian Approximation Potential, Gaussian Process Regression, machine learning

References

1. Powell D. *Elasticity, lattice dynamics and parameterization techniques for the Tersoff potential applied to elemental and type III–V semiconductors*. Dis. (PhD). University of Sheffield, 2006, 259 p. URL: <https://etheses.whiterose.ac.uk/15100/1/434519.pdf>
2. Abgaryan K. K., Volodina O. V., Uvarov S. I. Mathematical modeling of point defect cluster formation in silicon based on molecular dynamic approach. *Modern Electronic Materials*, 2015, vol. 1, no. 3, pp. 82–87. DOI: 10.1016/j.moem.2016.03.001
3. Bartók-Pirtay A. *The Gaussian Approximation Potential: an interatomic potential derived from first principles quantum mechanics*. Springer Science & Business Media, 2010. 107 p. DOI: 10.1007/978-3-642-14067-9
4. Kruglov I. A. *Search for new compounds, study of their stability and properties using modern methods of computer design of materials*. Diss. Cand. Sci. (Phys.–Math.). Moscow: Institute of High Pressure Physics. L.F. Vereshchagin RAS, 2018, 112 p. (In Russ.)
5. Gramacy R. B. *Surrogates: Gaussian process modeling, design, and optimization for the applied sciences*. Chapman and Hall/CRC, 2020, 559 p.
6. Vorontsov K. *Mathematical Learning Methods on Precendents*. Course of Lectures, 2006.
7. Rupp M., Tkatchenko A., Müller K.-R., von Lilienfeld O. A. Fast and accurate modeling of molecular atomization energies with machine learning. *Phys. Rev. Lett.*, 2012, vol. 108, no. 5, p. 058301. DOI: 10.1103/PhysRevLett.108.058301
8. Faber F., Lindmaa A., von Lilienfeld O. A., Armiento R. Crystal structure representations for machine learning models of formation energies. *Int. J. Quantum Chem.*, 2015, vol. 115, no. 16, pp. 1094–1101. DOI: 10.1002/qua.24917
9. Bartók A. P., Csányi G. Gaussian approximation potentials: A brief tutorial introduction. *Int. J. Quantum Chem.*, 2015, vol. 115, no. 16, pp. 1051–1057. DOI: 10.1002/qua.24927
10. Abgaryan K. K., Mutigullin I. V., Uvarov S. I., Uvarova O. V. Multiscale modeling of clusters of point defects in semiconductor structures. In: *CEUR Workshop Proceedings*, 2019, pp. 43–51. URL: <http://ceur-ws.org/Vol-2426/paper7.pdf>
11. Deringer V. L., Csányi G. Machine learning based interatomic potential for amorphous carbon. *Phys. Rev. B*, 2017, vol. 95, no. 9, p. 094203. DOI: 10.1103/PhysRevB.95.094203
12. Novikov I. S., Shapeev A. V. Improving accuracy of interatomic potentials: more physics or more data? A case study of silica. *Materials Today Commun.*, 2019, vol. 18, pp. 74–80. DOI: 10.1016/j.mtcomm.2018.11.008
13. Wu S. Q., Ji M., Wang C. Z., Nguyen M. C., Zhao X., Umemoto K., Wentzcovitch R. M., Ho K. M. An adaptive genetic algorithm for crystal structure prediction. *J. Phys.: Condens. Matter*. 2014, vol. 26, no. 3, p. 035402. DOI: 10.1088/0953-8984/26/3/035402
14. Rupp M., Tkatchenko A., Müller K.-R., von Lilienfeld O. A. Fast and accurate modeling of molecular atomization energies with machine learning. *Phys. Rev. Lett.*, 2012, vol. 108, no. 5, p. 058301. DOI: 10.1103/PhysRevLett.108.058301
15. Coifman R. R., Kevrekidis I. G., Lafon S., Maggioni M., Nadler B. Diffusion maps, reduction coordinates, and low dimensional representation of stochastic systems. *Multiscale Model. Simul.*, 2008, vol. 7, no. 2, pp. 842–864. DOI: 10.1137/070696325
16. Behler J., Parrinello M. Generalized neural-network representation of high-dimensional potential–energy surfaces. *Phys. Rev. Lett.*, 2007, vol. 98, no. 14, p. 146401. DOI: 10.1103/PhysRevLett.98.146401
17. Hastie T., Tibshirani R., Friedman J. *The elements of statistical learning: data mining, inference, and prediction*. Springer Science & Business Media, 2009, 767 p. DOI: 10.1007/b94608

Acknowledgments

This work was supported by the Russian Foundation for Basic Research, project No. 19–29–03051 MK.

The calculations were performed using the computing cluster of the Federal Research Center of the Institute of Management of the Russian Academy of Sciences.

Information about authors:

Olga V. Uvarova^{1,2,*}: Junior Researcher (olga25v@gmail.com); <https://orcid.org/0000-0001-6260-9696>; **Sergey I. Uvarov**¹: Junior Researcher (seruv25@gmail.com); <https://orcid.org/0000-0002-1023-5212>

* Corresponding author

Received December 14, 2020

Опыт ФИЦ ИУ РАН в предоставлении облачных сервисов высокопроизводительных вычислений для задач материаловедения

© 2020 г. С. А. Денисов^{1,§}, К. И. Волович¹, В. А. Кондрашев¹

¹ *Федеральный исследовательский центр «Информатика и управление»
Российской академии наук,
ул. Вавилова, д. 44, корп. 2, Москва, 119333, Россия*

Аннотация. Для решения задач материаловедения в том числе многомасштабного моделирования для синтеза материалов с заданными свойствами в ФИЦ ИУ РАН создана современная цифровая платформа для научных исследований, представляющая собой совокупность центра компетенций, высокопроизводительного вычислительного комплекса и комплекса научных сервисов, предоставляемых исследователям в виде традиционных облачных услуг в режимах программных (SaaS), платформенных (PaaS) и инфраструктурных (IaaS) сервисов, а также с помощью специфических технологий предоставления исследователям научного сервиса как услуги (RaaS, Research as a Service).

Другими примерами научных областей для которых применяются научные сервисы в совокупности с сервисами высокопроизводительных вычислений являются: биомедицинская химия, кристаллография, компьютерная лингвистика, искусственный интеллект.

В статье приводится описание информационно-вычислительной среды ЦКП «Информатика», составляющей основу инструментально-технологической инфраструктуры для макетирования, а также макета системы управления детерминированными научными сервисами цифровой платформы.

В статье представлены результаты экспериментальных исследований, проведенных применительно к алгоритмам передачи и промежуточного хранения исходных данных, сервисам обмена данными при взаимодействии с пользователем платформы, облачным научным сервисам высокопроизводительных вычислений, алгоритмам взаимодействия адаптеров обмена данными при обеспечении взаимодействия между платформой, актуальных при решении задач многомасштабного моделирования для синтеза материалов с заданными свойствами.

Полученные результаты позволяют оценить практические аспекты функционирования цифровой платформы для научных исследований, предназначенной для эффективной организации научных исследований и управления научной приборной базой в интересах широкого круга исследовательских коллективов и промышленных потребителей.

Ключевые слова: научный сервис, консолидированный научный сервис, цифровая платформа, облачные вычисления, сервис-ориентированная архитектура, микросервисы, гибкая интеграция

Введение

Для повышения эффективности проведения экспериментальных исследований в интересах цифровой трансформации [1] в ФИЦ ИУ РАН создана современная цифровая платформа для научных исследований. Она представляет собой совокупность центра компетенций, в котором концентрируются знания в конкретной области, высокопроизводительного вычислительного комплекса и комплекса научных сервисов (аналитических, образовательных, библиотечных, вычислительных, аналитических и др.), которые предоставляют услуги различным сферам деятельности (образованию, науке, коммерции, промышленности, государственным структурам) [2—5].

Особое внимание уделяется исследованиям по многомасштабному моделированию для синтеза материалов с заданными свойствами [6, 7], которые направлены на разработку алгоритмов машинного

Денисов Сергей Анатольевич^{1,§} — ведущий инженер, e-mail: sdenisov@frccsc.ru; **Волович Константин Иосифович**¹ — канд. техн. наук, старший научный сотрудник, e-mail: kvolovich@frccsc.ru; **Кондрашев Вадим Адольфович**¹ — канд. техн. наук, заместитель директора, e-mail: vkondrashev@frccsc.ru

§ Автор для переписки

Статья подготовлена по материалам доклада, представленного на II-й международной конференции «Математическое моделирование в материаловедении электронных компонентов», Москва, 19—21 октября 2020 г. (Денисов С.А., Волович К.И., Кондрашев В.А. Опыт ФИЦ ИУ РАН в предоставлении облачных сервисов высокопроизводительных вычислений для задач материаловедения. М.: МАКС Пресс, 2020. С. 26—29. DOI: 10.29003/m1510.MMMSEC-2020/26-29)

обучения и методов управления большими данными для решения задач квантово-механического моделирования. Использование нейросетевых алгоритмов позволяет с высокой точностью находить решение задач расчета электронной плотности при заданной конфигурации атомов, а также поиска атомной структуры, минимизирующей энергию системы. Выполняются работы в области полупроводникового материаловедения, высокоскоростного взаимодействия твердых тел (внедрение) и моделирования свойств композитных материалов с дефектами.

Для решения выше обозначенных задач материаловедения цифровая платформа предоставляет исследователям высокопроизводительные вычислительные ресурсы в виде традиционных облачных услуг в режимах программных (SaaS), платформенных (PaaS) и инфраструктурных (IaaS) сервисов, а также с помощью специфических технологий предоставления исследователям научного сервиса как услуги (RaaS, *Research as a Service*) [8]. В экосистеме цифровой платформы возможно создание облачных сред для интегрированных систем моделирования ABINIT, VASP, Quantum ESPRESSO, LAMMPS, MEEP, MPB, OpenFOAM и др., что позволяет проводить практически любые научные и научно-практические расчеты.

Настоящая работа представляет практические аспекты реализации этих решений на макете системы управления детерминированными научными сервисами цифровой платформы в части обеспечения внешнего интерфейса с пользователями платформы и результаты экспериментальных исследований на макете по следующим направлениям:

- экспериментальное исследование алгоритмов передачи и промежуточного хранения исходных данных для проведения исследований и результатов исследований;
- моделирование функционирования сервиса обмена данными при взаимодействии с пользователем платформы, эксперименты по передаче больших объемов данных;
- экспериментальное исследование функционирования облачных научных сервисов высокопроизводительных вычислений;
- экспериментальное исследование алгоритмов взаимодействия адаптеров обмена данными при обеспечении взаимодействия между платформой и сервисами высокопроизводительных вычислений.

Макетирование системы управления детерминированными научными сервисами проводилось для среды облачных вычислений с применением технологий виртуализации (контейнеризации) в парадигме сервис-ориентированной архитектуры на основе положений технологии «гибкой интеграции» (*Agile Integration*), web-интерфейсов и микросервисов. Для макета использовались средства Центра

коллективного пользования ФИЦ ИУ РАН (ЦКП «Информатика») [9].

Инструментально-технологическая среда для макетирования

Основу ЦКП «Информатика» составляет информационно-вычислительная среда, включающая в себя среду высокопроизводительных вычислений и среду виртуализации, функционирующие на технических средствах ЦОД ФИЦ ИУ РАН [10] (рис. 1).

В состав технических средств ЦОД входят:

- телекоммуникационные средства (коммутаторы, маршрутизаторы, межсетевые экраны) в совокупности образующие телекоммуникационную подсистему ЦОД;
- серверная группировка ЦОД для обработки информации и высокопроизводительных вычислений;
- технические средства системы хранения данных.

Телекоммуникационные средства образуют следующие основные вычислительные сети:

- сеть управления информационно-вычислительной и инженерной инфраструктурой ЦОД — низкоскоростная сеть Ethernet (1 Гбит/с);
- информационная вычислительная сеть — высокоскоростная сеть Ethernet (10/40 Гбит/с);
- сеть системы хранения данных — сеть Fibre Channel (16 Гбит/с);
- высокоскоростная сеть межузлового взаимодействия кластера высокопроизводительных вычислений — сеть InfiniBand (100 Гбит/с).

Серверная группировка ЦОД включает два типа серверов: информационные сервера виртуальной инфраструктуры и высокопроизводительные вычислительные сервера со следующими интегральными характеристиками:

- общее число серверов — 22 шт.;
- общее число центральных процессоров (CPU) — 41 шт.;
- общее число графических ускорителей (GPU) — 30 шт.;
- общее число ядер центральных процессоров (CPU Core) — 728 шт.;
- общий пул оперативной памяти (RAM) — 13 ТБ.

Система хранения данных геораспределенное метространище на основе сети FiberChannel общим объемом чуть более 1 ПБ.

Среда высокопроизводительных вычислений ЦОД (HPC, *High Performance Computing*) включает:

- гибридный высокопроизводительный вычислительный комплекс архитектуры IBM Power9 с GPU Nvidia V100 NVlink (2 узла, 8 GPU);

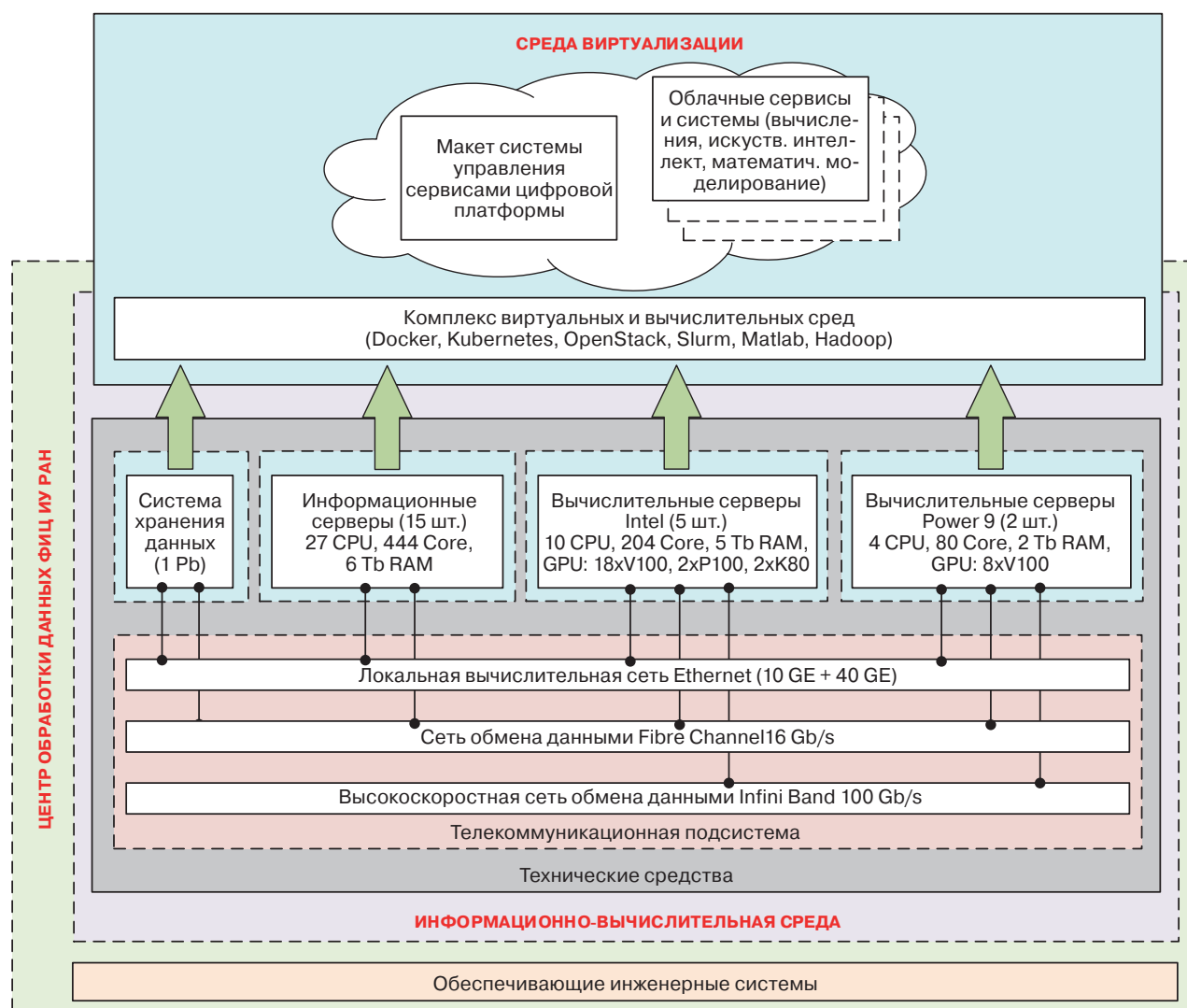


Рис. 1. Инструментально–технологическая среда ЦКП «Информатика»

Fig. 1. Instrumental and technological environment of the Center for Collective Use "Informatics"

– гибридный высокопроизводительный вычислительный комплекс архитектуры Intel с GPU Nvidia V100 (2 узла, 16 GPU);

– вычислительный комплекс (БК) архитектуры Intel с GPU Nvidia P100 и K80.

Комплексы объединены в высокопроизводительный вычислительный кластер под управлением диспетчера задач Slurm и предназначены для решения широкого спектра задач, относящихся к классу HPC. Диспетчер задач Slurm предоставляет пользователям широкие возможности для решения вычислительных задач математического моделирования и искусственного интеллекта посредством запуска вычислительных заданий:

- на одном сервере из состава комплекса;
- на группе серверов, относящихся к одному комплексу;
- на серверах и/или группе серверов, относящихся к разным комплексам.

Среда виртуализации обеспечивает функционирование широкого круга информационно–

вычислительных систем, предоставляет возможность построения экспериментальных стендов и создания макетов информационных облачных систем, в том числе макета системы управления детерминированными научными сервисами цифровой платформы.

В работах [11–13] описаны архитектура, подходы и решения, применяемые при создании макета системы управления детерминированными научными сервисами цифровой платформы (рис. 2). Предлагаемые в этих работах решения и подходы позволяют широкому кругу исследователей и промышленных потребителей воспользоваться достоинствами технологий цифровой экономики в сфере науки.

Интеграционная система является центральным элементом макета и обеспечивает взаимодействие систем макета.

Система ведения каталога научных сервисов является основой предоставления научных сервисов цифровой платформой и предназначена для спецификации научного сервиса.

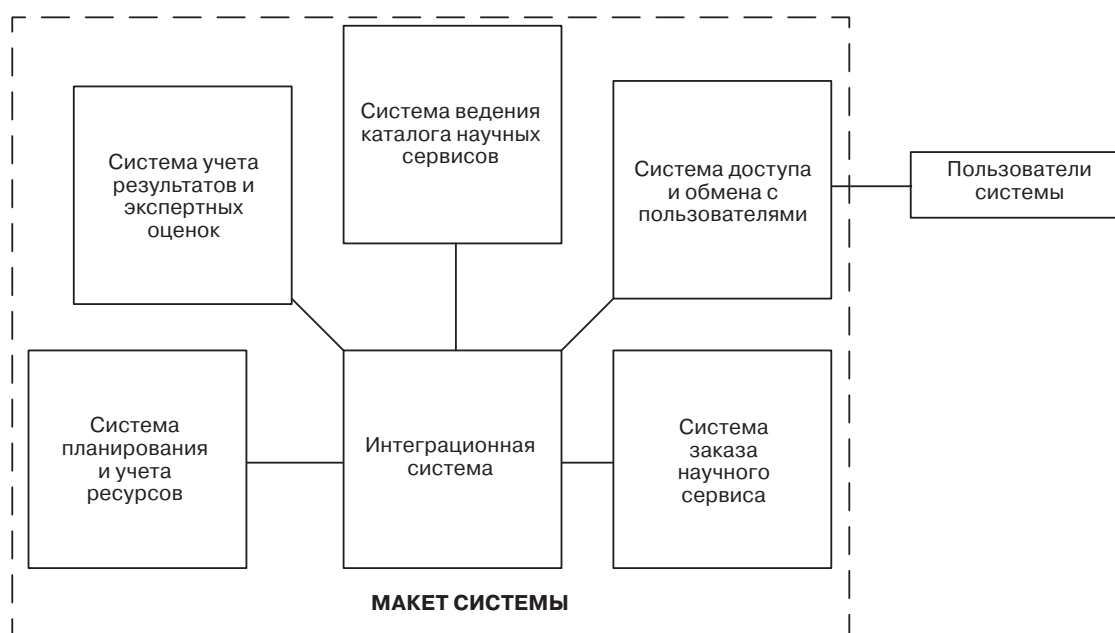


Рис. 2. Взаимосвязь функциональных компонентов макета системы управления сервисами цифровой платформы
Fig. 2. Interrelation of the functional components of the layout of the digital platform service management system

Система заказа научного сервиса предназначена для документирования процессов оказания научной услуги в результате выполнения процессов поиска, выбора и заказа научной услуги во взаимодействии с каталогом научных сервисов, системой планирования и учета ресурсов, а также системой учета результатов и экспертных оценок.

Система планирования и учета ресурсов предназначена для ведения реестра ресурсов (персонала, приборной базы, расходных материалов) и их состояния, а также календаря загрузки и резервирования ресурсов.

Система учета результатов и экспертных оценок предназначена для ведения реестра результатов и накопления оценок предоставленного сервиса в реестре заказов.

Система доступа и обмена с пользователями обеспечивает внешний веб-интерфейс взаимодействия пользователя с цифровой платформой научных сервисов для трех категорий пользователей: заказчика сервиса, поставщика сервиса и оператора (администратора, аналитика) платформы.

Далее в статье представлены результаты экспериментальных исследований алгоритмов взаимодействия пользователя с научными сервисами цифровой платформы по следующим направлениям:

- экспериментальное исследование алгоритмов передачи и промежуточного хранения исходных данных для проведения исследований и результатов исследований;
- моделирование функционирования сервиса обмена данными при взаимодействии с пользователем платформы, эксперименты по передаче больших объемов данных;

- экспериментальное исследование функционирования облачных научных сервисов высокопроизводительных вычислений;

- экспериментальное исследование алгоритмов взаимодействия адаптеров обмена данными при обеспечении взаимодействия между платформой и сервисами высокопроизводительных вычислений.

Экспериментальные исследования функционирования облачных научных сервисов высокопроизводительных вычислений

Экспериментальное исследование алгоритмов передачи и промежуточного хранения исходных данных для проведения исследований и результатов исследований. Передача исходных данных от источника данных к среде обработки данных, расположенной в облачной цифровой платформе, сама по себе является предметом исследований и поиска оптимального алгоритма функционирования.

Алгоритм передачи данных должен учитывать объем необходимых для исследования данных, производительность источника данных и каналов передачи данных, потребность вычислителя в скорости доставки данных, возможность повторного получения данных из источников.

С целью проведения исследований по выбору тех или иных алгоритмов передачи данных были проведены эксперименты по моделированию следующих исходных ситуаций.

Вариант 1. Объем данных, необходимых для вычислений не превосходит возможности хранилища данных вычислительного комплекса. Производительность источника данных и каналов связи

позволяют осуществить передачу данных за приемлемое время до начала эксперимента. Потребность вычислителя в потоке данных удовлетворяется производительностью хранилища данных вычислительного комплекса.

Вариант 2. Объем данных, необходимых для вычислений превосходит возможности хранилища данных вычислительного комплекса. Возможна загрузка части необходимых данных в промежуточное хранилище. Потребность вычислителя в потоке данных удовлетворяется производительностью хранилища данных вычислительного комплекса.

Вариант 3. Объем данных, необходимых для вычислений превосходит возможности хранилища данных вычислительного комплекса. Возможна загрузка часть необходимых данных в промежуточное хранилище. Потребность вычислителя в потоке данных не удовлетворяется производительностью хранилища данных вычислительного комплекса.

Вариант № 1 является тривиальным и для его реализации требуется последовательная загрузка исходных данных из источника данных в хранилище вычислительного комплекса с последующим выполнением расчетной задачи.

В варианте № 2 для организации передачи данных используется промежуточный буфер, в который до начала вычислений загружается массив исходных данных из источника данных, после чего выполняется вычислительная задача. Параллельно с выполнением вычислительной задачи осуществляется передача данных из источника данных в освобождающиеся области промежуточного буфера. В случае опустошения промежуточного буфера выполнение расчетной задачи приостанавливается до заполнения буфера данными из источника данных.

Наиболее сложным с точки зрения организации вычислительного процесса является вариант № 3. В этом случае производительности промежуточного хранилища недостаточно для предоставления вычислительной задаче исходных данных с производительностью, обеспечивающей непрерывное выполнение вычислительной задачи. Требуются дополнительные системотехнические решения, позволяющие внутри существующего вычислительного комплекса создать высокопроизводительное промежуточное хранилище данных.

В эксперименте в качестве высокопроизводительного промежуточного хранилища использовался выделенный в системе хранения данных ЦОД ФИЦ ИУ РАН блок накопителей SSD, обладающих высокой скоростью передачи данных. Такое системотехническое решение позволяет обеспечить увеличение потока данных от хранилища к вычислителю и преодолеть ограничение по производительности источника.

Отметим, что другими методами повышения производительности промежуточного хранилища

данных является использование параллельных файловых систем, объединяющих группу узлов хранения данных и узлов потребителей данных. В качестве примеров таких решения можно привести параллельную файловую систему Lustre или проприетарное решение компании IBM — Elastic Storage.

Эксперименты с передачей и промежуточным хранением массивов данных, предназначенных для решения научных задач показали, что для оптимального обеспечения расчетных задач исходными данными требуются как алгоритмические, так и системотехнические решения, направленные на организацию вычислительного процесса и создание высокопроизводительных компонентов хранения данных на основе открытых либо проприетарных решений.

Моделирование функционирования сервиса обмена данными при взаимодействии с пользователем платформы, эксперименты по передаче больших объемов данных. Моделирование функционирования сервиса обмена данными заключалось в проведении экспериментов по передаче/загрузки пользователем данных из различных web-интерфейсов цифровой платформы, поддерживающих функции передачи/получения данных, в существующую систему хранения данных информационно-вычислительной среды ЦОД ФИЦ ИУ РАН, в которой были выделены три области памяти, имитирующие коллективное, персональное и промежуточное хранилище данных цифровой платформы. Взаимодействие сервиса обмена данными с системой хранения данных осуществлялось по протоколу NFS.

В ходе экспериментов было установлено, что:

1) по управляющим воздействиям пользователей сервисы, отвечающие за работу web-интерфейсов, осуществляют вызов экземпляра сервиса обмена данными и передают ему список загружаемых данных;

2) осуществляется двустороннее взаимодействие сервиса обмена данными с сервисом авторизации; сервис обмена данными отправляет сервису авторизации запросы о допустимости выполнения пользователем операции загрузки/получения данных и получает ответы от сервиса авторизации;

3) сервисом обмена данных осуществляется проверка объема и формат загружаемых данных на соответствие объему и форматам, допустимым для формы загрузки; определяется тип хранилища, в которое будут помещены данные; определяются права доступа других пользователей к загружаемым данным и осуществляется загрузка данных во временное хранилище;

4) осуществляется двустороннее взаимодействие сервиса обмена данными с сервисом антивирусного сканирования. Сервис обмена данными отправляет сервису антивирусного сканирования

запросы о допустимости загрузки данных из временного хранилища и получает ответы от сервиса антивирусного сканирования;

5) сервисом обмена данных осуществляется передача управляющих команд в систему хранения данных на перемещение данных из временного хранилища в коллективное или персональное хранилище.

Эксперименты по передаче и обработке больших данных проводились на гибридном высокопроизводительном комплексе архитектуры IBM Power 9, подключенному к системе хранения данных по протоколу NFS. Эксперименты по передаче больших объемов данных проводились путем генерации случайных наборов данных вне вычислительного комплекса и их передаче в систему хранения данных. Эксперименты показали, что узким местом являются каналы связи, соединяющие источники данных с вычислительным комплексом.

Экспериментальное исследование функционирования облачных научных сервисов высокопроизводительных вычислений. Основной задачей функционирования научных сервисов высокопроизводительных вычислений в облачной среде является предоставление пользователям доступа к высокопроизводительным вычислительным средам (HPC) в виде SaaS, PaaS, IaaS посредством технологий виртуализации, «гибкой интеграции» и web-интерфейсов.

Экспериментальные исследования функционирования научных сервисов высокопроизводительных вычислений макета системы управления детерминированными научными сервисами цифровой платформы заключались в предоставлении пользователям доступа к ресурсам гибридного высокопроизводительного вычислительного комплекса (ГВБК) архитектуры IBM Power 9 в среде высокопроизводительных вычислений ЦОД ФИЦ ИУ РАН.

При проведении экспериментальных исследований была смоделирована работа сервисов, относящихся к типам SaaS и PaaS [14–17]. В ходе экспериментов выполнялись следующие проверки:

1) проверка получения пользователем доступа к сервисам высокопроизводительных вычислений и, как следствие, к интерпретатору командной строки индивидуальной среды исполнения ГВБК; в результате работы сервиса доступа по VPN-сети и системы доступа пользователей к сервисам цифровой платформы пользователь получал доступ к сервисам высокопроизводительных вычислений;

2) проверка обмена данными пользователем с цифровой платформой; в результате работы сервиса обмена данными между пользователями и цифровой платформой пользователь обменивался данными с цифровой платформой;

3) проверка получения пользователем доступа к своим данным в индивидуальной среде исполнения ГВБК; в результате работы адаптера для обмена

данными между сервисами цифровой платформы и сервисами поставщиков услуг пользователь получал доступ к своим данным в индивидуальной среде исполнения ГВБК.

В результате экспериментов по предоставлению облачного сервиса высокопроизводительных вычислений типа PaaS пользователь получал облачный программно-технический ресурс, позволяющий формировать программную среду и решать научную задачу с использованием ресурсов высокопроизводительной вычислительной среды. Опыт ФИЦ ИУ РАН показывает, что сервисы типа PaaS являются наиболее востребованными при решении научных задач, поскольку предоставляют максимальную гибкость при формировании индивидуальной программной среды, что особенно важно для исследовательских работ.

Эксперименты по предоставлению облачных сервисов SaaS проводились в едином комплексе исследований с сервисами PaaS. Для этого на этапе формирования индивидуальной среды исполнения после завершения всех операций по формированию и настройке виртуального контейнера образ этого контейнера помещался в репозиторий вычислительного комплекса и становился доступным для создания новых контейнеров.

В результате пользователь получал возможность создать готовую вычислительную среду из репозитория без дополнительных настроек, что позволяет после создания контейнера сразу переходить к этапу загрузки исходных данных и выполнения приложений.

Сервисы SaaS могут быть востребованы для многократного повторения высокопроизводительных вычислений, не требующих изменения вычислительной среды. Такой подход позволяет экономить ресурсы вычислительного комплекса.

Примерами научных областей для которых применялись сервисы высокопроизводительных вычислений являются: биомедицинская химия, кристаллография, материаловедение, компьютерная лингвистика, искусственный интеллект и другие.

Сервисы высокопроизводительных вычислений для задач биомедицинской химии были использованы для поиска молекулярных структур, обладающих биологической активностью по отношению к мускариновым рецепторам, которые являются важными биомолекулами, ингибиторы которых рассматриваются как лекарственные средства для лечения целого спектра патологических состояний [18], а также для построения универсальной модели предсказания значений IC₅₀ ингибиторов нейраминидазы вируса гриппа произвольного штамма [19].

Сервисы высокопроизводительных вычислений для задач кристаллографии применялись для построения энергетических моделей молекулярного взаимодействия [20].

Для задач вычислительного материаловедения, включая задачи молекулярно-динамического моделирования процесса высокоскоростного взаимодействия частиц [21] и теплопереноса в многослойных структурах проводилось развертывание специфической интегрированной среды VASP на основе базового контейнера с программным обеспечением CUDA.

В задачах анализа больших объемов текстов выбраны две функции, наиболее востребованные у пользователей и требовательные к объему вычислений, а именно семантический поиск и поиск текстовых заимствований [22]. Для решения данной задачи была развернута нетипичная конфигурация — на основе постоянно функционирующего контейнера, обрабатывающего запросы пользователей к web-серверу.

В качестве примера научного исследования с использованием методом искусственного интеллекта можно привести сегментирование трехмерных медицинских изображений, полученных при помощи компьютерной томографии, с применением нейронных сетей глубокого обучения, проводимого участниками магистерских программ [23].

Экспериментальное исследование алгоритмов взаимодействия адаптеров обмена данными при обеспечении взаимодействия между платформой и сервисами высокопроизводительных вычислений. Адаптеры обмена данными, обеспечивающие взаимодействие пользователя и вычислительного комплекса представляют собой сервисы цифровой платформы, использующие единую службу аутентификации платформы (SSO) для получения доступа к централизованному хранилищу данных. Алгоритм функционирования службы-адаптера предполагает выполнение следующих шагов:

- определение прав пользователя по результатам аутентификации в домене SSO;
- выделение области данных в хранилище данных, которая ассоциирована с пользователем;
- передача данных по инициативе пользователя, либо по инициативе вычислительного комплекса (загрузка данных из источника).

В случае передачи данных по инициативе пользователя:

- предоставление доступа к интерфейсу передачи данных. В качестве протокола передачи данных использовались протоколы SFTP (передача на основе протокола SSH) и HTTPS;
- прием данных от пользователя (источника) и помещение их в хранилище;

В случае передачи данных по инициативе вычислительного комплекса (загрузка данных из источника):

- получение доступа к интерфейсу передачи данных. В качестве протокола передачи данных использовались протокол HTTP, при необходимости с использованием аутентификации;

- загрузка данных от источника и помещение их в хранилище.

Отметим, что облачная среда вычислительного комплекса позволяет создавать внутренние сервисы платформы на базе тех же принципов, что и сервисы, предназначенные для обслуживания пользователей. В эксперименте адаптер обмена данными представлял собой виртуальный контейнер на базе технологии docker, разворачиваемый в облачной среде. Для каждой пользовательской сессии создавался отдельный контейнер, выполняющий описанный выше алгоритм. Таким образом, адаптер передачи данных предоставлял пользователю облачный сервис типа SaaS.

Среда исполнения адаптера, основанная на сценариях языка Python, которые обеспечивают выполнение аутентификации (через SSO), работу по протоколам SFTP, HTTP/HTTPS, взаимодействие с хранилищем данных.

В случае необходимости может быть использован любой другой контейнер, выполняющий другие внутренние алгоритмы, однако, предоставляющий унифицированный интерфейс для пользователя и файлового хранилища.

Эксперименты показали, что такая модульность особенно удобна при взаимодействии с разнотипными источниками данных, интерактивными пользователями и автоматизированными системами, которые могут выступать в роли пользователей высокопроизводительного вычислительного комплекса.

Таким образом, при создании адаптеров обмена данными поддерживается множественность алгоритмов доступа и взаимодействия источника данных и хранилища данных высокопроизводительного комплекса при сохранении интерфейсов взаимодействия.

Выполнению этих условий способствует реализация адаптера данных как облачного сервиса цифровой платформы типа SaaS.

Заключение

В статье представлены результаты экспериментальных исследований, проведенные применительно к алгоритмам передачи и промежуточного хранения исходных данных, сервисам обмена данными при взаимодействии с пользователем платформы, облачным научным сервисам высокопроизводительных вычислений, алгоритмам взаимодействия адаптеров обмена данными при обеспечении взаимодействия между платформой, актуальных при решении задач многомасштабного моделирования для синтеза материалов с заданными свойствами.

Экспериментальные исследования, продемонстрировали следующие результаты:

- обмен данными касательно сведений о времени начала выполнения услуги, исполняемой команде

и исходных данных, о ходе и результате выполнения услуги целесообразно реализовывать с применением технологий web-интерфейсов (web-API в стиле REST или gRPC). Обмен данными, содержащими исполняемую команду, исходные данные, результат выполнения во избежание чрезмерной нагрузки на сервис целесообразно реализовывать посредством механизма сетевых виртуальных устройств хранения данных в облачной среде цифровой платформы;

– сервисы высокопроизводительных вычислений типа PaaS являются наиболее востребованными при решении научных задач, поскольку предоставляют максимальную гибкость при формировании индивидуальной программной среды, что особенно важно для исследовательских работ;

– подход, при котором для каждой пользовательской сессии адаптер обмена данными реализуется в виде виртуального контейнера, является наиболее применимым при взаимодействии с разнотипными источниками данных, поскольку поддерживается множественность алгоритмов доступа и взаимодействия источника данных и хранилища данных высокопроизводительного комплекса.

Полученные результаты позволили оценить практические аспекты функционирования цифровой платформы для научных исследований, предназначенной для эффективной организации научных исследований и управления научной приборной базой в интересах широкого круга исследовательских коллективов и промышленных потребителей в том числе о области материаловедения.

Библиографический список

1. Зацаринный А. А., Киселев Э. В., Козлов С. В., Колин К. К. Информационное пространство цифровой экономики России. Концептуальные основы и проблемы формирования / под общ. ред. А. А. Зацаринного. М.: ФИЦ ИУ РАН; ООО «НИПКЦ Восход-А», 2018. 236 с.
2. Зацаринный А. А., Кондрашев В. А., Сучков А. П. Система научных сервисов как актуальный компонент научных исследований // Системы и средства информатики. 2019. Т. 29, № 1. С. 25—40. DOI: 10.14357/08696527190103
3. Zatsarinny A. A., Kondrashev V. A., Sorokin A. A. Approaches to the organization of the computing process of a hybrid high-performance computing cluster in the digital platform environment // CEUR Workshop Proceedings: ITHPC 2019 – Short Paper Proc. 5th International Conference on Information Technologies and High-Performance Computing, Khabarovsk, 16–19 September 2019. V. 2426. Khabarovsk, 2019. P. 12—16.
4. Зацаринный А. А., Кондрашев В. А., Сорокин А. А., Денисов С. А. Методы консолидации научных сервисов // Известия высших учебных заведений. Материалы электронной техники. 2019. Т. 22, № 4. С. 302—307. DOI: 10.17073/1609-3577-2019-4-302-307
5. Волович К. И., Денисов С. А. Основные научно-технические проблемы применения гибридных высокопроизводительных вычислительных комплексов в материаловедении // Известия высших учебных заведений. Материалы электронной техники. 2019. Т. 22, № 4. С. 262—267. DOI: 10.17073/1609-3577-2019-4-262-267
6. Абгарян К. К. Многомасштабное моделирование работы многоуровневых элементов памяти, применяемых для создания нейроморфных сетей // Математическое моделирование в материаловедении электронных компонентов: материалы I международной конференции, Москва, 21–23 октября 2019 г. М.: МАКС Пресс, 2019. С. 53—55. DOI: 10.29003/m682.MMMSEC-2019
7. Абгарян К. К. Информационная технология построения многомасштабных моделей в задачах вычислительного материаловедения // Системы высокой доступности. 2018. Т. 14, № 2. С. 9—15.
8. Кондрашев В. А., Волович К. И. Управление сервисами цифровой платформы на примере услуги высокопроизводительных вычислений // Математическое моделирование и информационные технологии в инженерных и бизнес-приложениях: материалы международной научной конференции, Воронеж, 3–6 сентября 2018 г., Воронеж: Воронежский государственный университет, 2018. С. 217—223.
9. Положение о Центре коллективного пользования «Информатика». URL: <https://www.frccsc.ru/ckp> (дата обращения: 23.06.2020).
10. Зацаринный А. А., Гаранин А. И., Кондрашев В. А., Волович К. И., Мальковский С. И. Оценка надежности гибридного высокопроизводительного вычислительного комплекса при решении научных задач // Системы и средства информатики. 2019. Т. 29, № 2. С. 135—147. DOI: 10.14357/08696527190212
11. Кондрашев В. А. Архитектура системы предоставления сервисов цифровой платформы для научных исследований // Системы и средства информатики. 2018. Т. 28, № 3. С. 131—140. DOI: 10.14357/08696527180310
12. Zatsarinny A. A., Kondrashev V. A., Sorokin A. A., Denisov S. A. Scientific services consolidation methods // Russian Microelectronics. 2020. V. 49, N 8. P. 612—616. DOI: 10.1134/S1063739720080144
13. Зацаринный А. А., Кондрашев В. А., Сорокин А. А. Алгоритмы управления сервис-ориентированными процессами детерминированных научных сервисов в гибридных вычислительных средах цифровых платформ // Системы высокой доступности. 2020. Т. 16, № 3. С. 5—17. DOI: 10.18127/j20729472-202003-01
14. Волович К. И. Некоторые системотехнические вопросы предоставления вычислительных ресурсов для научных исследований в гибридной высокопроизводительной облачной среде // Системы и средства информатики. 2018. Т. 28, № 4. С. 98—109. DOI: 10.14357/08696527180410
15. Волович К. И., Денисов С. А., Мальковский С. И. Формирование индивидуальной среды моделирования в гибридном высокопроизводительном вычислительном комплексе // Математическое моделирование в материаловедении электронных компонентов: материалы I международной конференции, Москва, 21–23 октября 2019 г. М.: МАКС Пресс, 2019. С. 21—24. DOI: 10.29003/m682.MMMSEC-2019
16. Волович К. И., Денисов С. А. Подходы к организации вычислительного процесса гибридного высокопроизводительного вычислительного комплекса для решения задач материаловедения // Информатика: проблемы, методы, технологии: материалы XX Международной научно-методической конференции, Воронеж, 13–14 февраля 2020 г. Воронеж: “Научно-исследовательские публикации” (ООО “Вэлборн”), 2020. С. 368—377.
17. Volovich K. I., Denisov S. A., Shabanov A. P., Malkovsky S. I. Aspects of the assessment of the quality of loading hybrid high-performance computing cluster // CEUR Workshop Proceedings: ITHPC 2019 – Short Paper Proc. 5th International Conference on Information Technologies and High-Performance Computing, Khabarovsk, 16–19 September 2019. V. 2426. Khabarovsk, 2019. P. 7—11.
18. Микурова А. В., Скворцов В. С., Раевский О. А. Компьютерная оценка селективности ингибирования мускариновых рецепторов M1–M4 // Biomedical Chemistry: Research and Methods. 2018. Т. 1, № 3. С. e00072. DOI: 10.18097/BMCRM00072
19. Микурова А. В., Скворцов В. С. Создание обобщенной модели предсказания ингибирования нейраминидазы вируса гриппа различных штаммов // Биомедицинская химия. 2018. Т. 64, № 3. С. 247—252. DOI: 10.18097/PBMC20186403247
20. Eistrikh-Heller P. A., Rubinsky S. V., Prokofev I. I., Gabdulkhakov A. G., Mironov A. S., Lashkov A. A. X-ray structure and molecular dynamics study of uridine phosphorylase from vibrio cholerae in complex with 2,2'-anhydrouridine // Crystallography Reports. 2020. V. 65, N 2. P. 269—277. DOI: 10.1134/S1063774520020066
21. Абгарян К. К., Ревизников Д. Л., Журавлев А. А. Параллельная обработка данных в задачах компьютерного моделирования высокоскоростного взаимодействия твердых тел //

Материалы XX Юбилейной Международной конференции по вычислительной механике и современным прикладным системам (ВМСППС'2017), Алушта, 24–31 мая 2017 г. Алушта: Изд-во МАИ–Принт, 2017. С. 27–28.

22. Ядринцев В. В., Клубина К. В., Тихомиров И. А., Гершельман А. Ф. Выбор серверного решения для цифровой платформы поиска и анализа текстов // Системы и средства информатики. 2018. Т. 28, № 3. С. 26–38. DOI: 10.14357/08696527180302

23. Аветисян М. С. Сегментирование объемных медицинских изображений с использованием сверточных нейронных сетей // Магистерская диссертация. М.: МГУ им. М.В. Ломоносова, 2018. С. 58. URL: <http://synthesis.ipi.ac.ru/synthesis/student/BigData/master-thesis/2018%20Аветисян.pdf> (дата обращения: 30.06.2020).

Работа выполнена при частичной поддержке РФФИ (проекты № 18–29–03100 и № 18–29–03091) с использованием ресурсов гибридного высокопроизводительного вычислительного комплекса Центра коллективного пользования «Информатика» ФИЦ ИУ РАН.

Статья поступила в редакцию 30 ноября 2020 г.

Izvestiya vuzov. Materialy elektronnoi tekhniki = Materials of Electronics Engineering. 2020, vol. 23, no. 4, pp. 311–320. DOI: 10.17073/1609-3577-2020-4-311-320

Experience of FRC CSC RAS in providing high–performance computing cloud services for materials science problems

S. A. Denisov^{1,§}, K. I. Volovich¹, V. A. Kondrashev¹

¹ *Federal Research Center “Computer Science and Control” of the Russian Academy of Sciences, 44–2 Vavilov Str., Moscow 119333, Russia*

Abstract. To solve the problems of materials science, including multiscale modeling for the synthesis of materials with specified properties, a modern digital platform for scientific research has been created at the FRC CSC RAS. The digital platform is a combination of a competence center, a high–performance computing complex and a set of scientific services that are provided to researchers in the form of traditional cloud services in software (SaaS), platform (PaaS) and infrastructure (IaaS) services, as well as using specific technologies for providing researchers scientific service as a service (RaaS, Research as a Service).

Other examples of scientific fields for which scientific services are used in conjunction with high–performance computing services are: biomedical chemistry, crystallography, computational linguistics, artificial intelligence.

The article describes the information and computing environment of the sharing research facilities Center for Collective Use “Informatics”, which forms the basis of the instrumental and technological infrastructure for prototyping, as well as the layout of the control system for deterministic scientific services of the digital platform.

The article presents the results of experimental studies carried out in relation to algorithms for the transfer and intermediate storage of initial data, data exchange services when interacting with a platform user, cloud scientific high–performance computing services, algorithms for the interaction of data exchange adapters when ensuring interaction between the platform, which are relevant in solving problems of multiscale modeling for the synthesis of materials with desired properties.

The results obtained allow us to evaluate the practical aspects of the functioning of a digital platform for scientific research, designed for the effective organization of scientific research and management of the scientific instrument base in the interests of a wide range of research teams and industrial consumers.

Keywords: scientific service, consolidated scientific service, digital platform, cloud computing, service oriented architecture, microservices, flexible integration

References

1. Zatsarinnyy A. A., Kiselev E. V., Kozlov S. V., Kolin K. K. Information space of the digital economy of Russia. Conceptual foundations and problems of formation. Moscow: OOO “NIPKTS Voskhod–A”, 2018. 236 p. (In Russ.)
2. Zatsarinnyy A. A., Kondrashev V. A., Suchkov A. P. The system of scientific services as a relevant component of scientific research. *Systems and Means of Informatics*. 2019, vol. 29, iss. 1, pp. 25–40. (In Russ.). DOI: 10.14357/08696527190103
3. Zatsarinnyy A. A., Kondrashev V. A., Sorokin A. A. Approaches to the organization of the computing process of a hybrid

high–performance computing cluster in the digital platform environment. *CEUR Workshop Proc.: 5th International Conference on Information Technologies and High–Performance Computing, ITHPC 2019; Computing Center of Far East Branch of the Russian Academy of Science. Khabarovsk, 16–19 September 2019, vol. 2426*. Khabarovsk, 2019. Pp. 12–16.

4. Zatsarinnyy A. A., Kondrashev V. A., Sorokin A. A., Denisov S. A. Scientific services consolidation methods. *Izvestiya Vysshikh Uchebnykh Zavedenii. Materialy Elektronnoi Tekhniki = Materials of Electronics Engineering*. 2019, vol. 22, no. 4, pp. 302–307. (In Russ.). DOI: 10.17073/1609-3577-2019-4-302-307

5. Volovich K. I., Denisov S. A. The main scientific and technical problems of using hybrid HPC clusters in materials science. *Izvestiya Vysshikh Uchebnykh Zavedenii. Materialy Elektronnoi Tekhniki = Materials of Electronics Engineering*. 2019, vol. 22, no. 4, pp. 262–267. (In Russ.). DOI: 10.17073/1609-3577-2019-4-262-267

6. Abgaryan K. K. Multiscale modeling of the operation of multilevel memory elements used to create neuromorphic networks. *Mathematical Modeling in Materials Science of Electronic Compo-*

Information about authors:

Sergey A. Denisov^{1,§} — Lead Engineer, e-mail: sdenisov@frccsc.ru; **Konstantin I. Volovich**¹ — Cand. Sci. (Eng.), Senior Researcher, e-mail: kvolovich@frccsc.ru; **Vadim A. Kondrashev**¹ — Cand. Sci. (Eng.), Deputy Director, e-mail: vkondrashev@frccsc.ru

§ Corresponding author

nent: *Proc. I International Conference. Moscow, October 21–23, 2019*. Moscow: MAKS Press, 2019. Pp. 53–55. (In Russ.). DOI: 10.29003/m682.MMMSEC-2019

7. Abgaryan K. K. Information technology of the construction of multi-scale models in problems of computational materials science. *Highly Available Systems*. 2018, vol. 14, no. 2, pp. 9–15. (In Russ.)

8. Kondrashev V. A., Volovich K. I. Digital platform service management on the example of high-performance computing services. *Mathematical Modeling and Information Technologies in Engineering and Business Applications: Proc. International Scientific Conference. Voronezh, September 3–6, 2018*. Voronezh: Voronezhskiy gosudarstvennyy universitet, 2018. Pp. 217–223. (In Russ.)

9. Regulations on the Center for Collective Use “Informatics”. (In Russ.). URL: <https://www.frcsc.ru/ckp> (accessed: 23.06.2020).

10. Zatsarinny A. A., Garanin A. I., Kondrashev V. A., Volovich K. I., Malkovsky S. I. Evaluation of reliability of the hybrid high-performance computing complex in solution of scientific problems. *Systems and Means of Informatics*. 2019, vol. 29, iss. 2, pp. 135–147. (In Russ.). DOI: 10.14357/08696527190212

11. Kondrashev V. A. Architecture of the service delivery system for the research services digital platform. *Systems and Means of Informatics*. 2018, vol. 28, iss. 3, pp. 131–140. (In Russ.). DOI: 10.14357/08696527180310

12. Zatsarinny A. A., Kondrashev V. A., Sorokin A. A., Denisov S. A. Scientific services consolidation methods. *Russian Microelectronics*. 2020, vol. 49, no. 8, pp. 612–616. DOI: 10.1134/S1063739720080144

13. Zatsarinny A. A., Kondrashev V. A., Sorokin A. A. Algorithms for managing service-oriented processes of determinate research services in hybrid computing environments of digital platforms. *Highly Available Systems*. 2020, vol. 16, no. 3, pp. 5–17. (In Russ.). DOI: 10.18127/j20729472-202003-01

14. Volovich K. I. Organization of calculations in a hybrid high-performance computing cluster for parallel execution of heterogeneous tasks. *Systems and Means of Informatics*. 2018, vol. 28, iss. 4, pp. 98–109. (In Russ.). DOI: 10.14357/08696527180410

15. Volovich K. I., Denisov S. A., Malkovsky S. I. Formation of an individual modeling environment in a hybrid high-performance computer system. *Mathematical Modeling in Materials Science of Electronic Component: Proc. I International Conference. Moscow, October 21–23, 2019*. Moscow: MAKS Press, 2019. Pp. 21–24. (In Russ.). DOI: 10.29003/m682.MMMSEC-2019

16. Volovich K. I., Denisov S. A. Approaches to organizing the computational process of a hybrid high-performance computing complex for solving problems of materials science. *Informatics: Problems, Methods, Technologies: Proc. XX International Scientific and Methodological Conference. Voronezh, February 13–14, 2020*. Voronezh: “Nauchno-issledovatel’skiye publikatsii” (OOO “Velborn”), 2020. Pp. 368–377. (In Russ.)

17. Volovich K. I., Denisov S. A., Shabanov A. P., Malkovsky S. I. Aspects of the assessment of the quality of loading hybrid high-performance computing cluster. *CEUR Workshop Proc.: 5th International Conference on Information Technologies and High-Performance Computing, ITHPC 2019; Computing Center of Far East Branch of the Russian Academy of Science. Khabarovsk, 16–19 September 2019, vol. 2426*. Khabarovsk, 2019. Pp. 7–11.

18. Mikurova A. V., Skvortsov V. S., Raevsky O. A. Computational evaluation of selectivity of inhibition of muscarinic receptors M1–M4. *Biomedical Chemistry: Research and Methods*. 2018, vol. 1, no. 3, p. e00072. (In Russ.). DOI: 10.18097/BMCRM00072

19. Mikurova A. V., Skvortsov V. S. A generalized prediction model of inhibition of neuraminidase of influenza virus of various strains. *Biochemistry (Moscow), Supplement Series B: Biomedical Chemistry*. 2018, vol. 12, no. 4, pp. 322–329. DOI: 10.1134/S1990750818040054

20. Eistrikh–Heller P. A., Rubinsky S. V., Prokofev I. I., Gabdulkhakov A. G., Mironov A. S., Lashkov A. A. X-ray structure and molecular dynamics study of uridine phosphorylase from vibrio cholerae in complex with 2,2′-anhydrouridine. *Crystallography Reports*. 2020, vol. 65, no. 2, pp. 269–277. DOI: 10.1134/S1063774520020066

21. Abgaryan K. K., Reviznikov D. L., Zhuravlev A. A. Parallel data processing in problems of computer simulation of high-speed interaction of solid bodies. *Proc. XX Anniversary International Conference on Computational Mechanics and Modern Applied Systems. Alushta, May 24–31, 2017*. Alushta: Izdatel’stvo MAI–Print, 2017. Pp. 27–28. (In Russ.)

22. Yadrintsev V., Klyubina K., Tikhomirov I., Gershel’man A. Choosing server solution for digital platform of text search and analysis. *Systems and Means of Informatics*. 2018, vol. 28, iss. 3, pp. 26–38. (In Russ.). DOI: 10.14357/08696527180302

23. Avetisyan M. S. *Segmentation of volumetric medical images using convolutional neural networks*. Master’s Thesis. Moscow: MGU im. M.V. Lomonosov, 2018. P. 58. (In Russ.). URL: <http://synthesis.ipi.ac.ru/synthesis/student/BigData/master-thesis/2018%20Аветисян.pdf> (accessed: 30.06.2020).

Acknowledgments

This work was supported in part by the Russian Foundation for Basic Research (project No. 18–29–03100 and No. 18–29–03091) using the resources of the hybrid high-performance computing complex of the of the Center for Collective Use “Informatics” of the Federal Research Center “Computer Science and Control” of the Russian Academy of Sciences.

Received November 30, 2020

* * *

Список статей, опубликованных в 2020 г.

**И. В. Кубасов, А. М. Кислюк, А. В. Турутин,
М. Д. Малинкович, Ю. Н. Пархоменко**

Бидоменные сегнетоэлектрические кристаллы:
свойства и перспективы применения1 5—56

**И. В. Запороцкова, Е. С. Дрючков,
Н. П. Борознина, Л. В. Кожитов, А. В. Попкова**

Поверхностно-модифицированная
аминной группой бороуглеродная BC_5 нанотрубка
как элемент сенсорного устройства:
теоретические исследования4 253—259

МАТЕРИАЛОВЕДЕНИЕ И ТЕХНОЛОГИЯ. ПОЛУПРОВОДНИКИ

Н. А. Кульчицкий, А. В. Наумов, В. В. Старцев

Фотонные и терагерцовые применения
как следующий драйвер рынка
арсенида галлия3 167—176

МАТЕРИАЛОВЕДЕНИЕ И ТЕХНОЛОГИЯ. ДИЭЛЕКТРИКИ

В. М. Тимохин, В. М. Гармаш, В. А. Теджетов

Технология термостимулированной
диагностики анизотропии и оптических
осей кристаллов2 99—108

В. А. Теджетов, А. В. Подкопаев, А. А. Сысоев

Особенности механизма люминесценции
и эффективного запаса энергии
в монокристаллах $Lu_2SiO_5 : Ce^{3+}$ 3 177—185

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ И МАТЕРИАЛОВ

Г. Суханек, Л. Фельсберг, Г. Герлах

Материаловедческие вопросы термодинамического
моделирования тонкопленочных твердотельных
электрокалорических охладителей1 57—70

**В. Н. Мордкович, К. К. Абгарян, Д. Л. Ревизников,
А. В. Леонов**

Моделирование полевых элементов Холла
на основе наноразмерных гетероструктур
«кремний на изоляторе»2 109—115

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ В МАТЕРИАЛОВЕДЕНИИ ЭЛЕКТРОННЫХ КОМПОНЕНТОВ

А. А. Зацаринный, К. К. Абгарян

Актуальные проблемы создания
исследовательской инфраструктуры
для синтеза новых материалов в рамках
цифровой трансформации общества4 270—276

**А. А. Зацаринный, Ю. А. Степченков,
Ю. Г. Дьяченко, Ю. В. Рождественский**

Самосинхронные схемы как база создания
высоконадежных высокопроизводительных
компьютеров следующего поколения4 277—281

В. А. Кондрашев, С. А. Денисов

Интерфейсы научных сервисов системы
моделирования новых материалов
на цифровой платформе4 282—288

К. И. Волович

Оценка загрузки гибридного вычислительного
комплекса при выполнении задач
моделирования в материаловедении4 289—296

Е. С. Гаврилов, Н. А. Зайцев

Программные средства для индексирования
и предметно-ориентированного поиска
научных статей по кристаллографии4 297—303

О. В. Уварова, С. И. Уваров

Использование машиннообучаемых потенциалов
межатомного взаимодействия для изучения свойств
кристаллических структур4 304—310

С. А. Денисов, К. И. Волович, В. А. Кондрашев

Опыт ФИЦ ИУ РАН в предоставлении облачных
сервисов высокопроизводительных вычислений
для задач материаловедения4 311—320

НАНОМАТЕРИАЛЫ И НАНОТЕХНОЛОГИИ

П. В. Шалаев, П. А. Монахова, С. А. Терещенко

Исследование наностержней коллоидного золота
в жидких дисперсиях методами, основанными
на рассеянии света2 116—126

А. Ю. Морозов, К. К. Абгарян, Д. Л. Ревизников

Математическое моделирование самообучающейся
нейроморфной сети, основанной на наноразмерных
мемристивных элементах с 1T1R-кроссбар-
архитектурой3 186—195

**И. В. Запороцкова, Р. Д. Радченко, Л. В. Кожитов,
П. А. Запороцков, А. В. Попкова**

Теоретические исследования металлокомпозита
на основе монослоя пиролизованного
полиакрилонитрила, содержащего парные атомы
металлов Fe—Co, Ni—Co, Fe—Ni
и аморфизирующую присадку кремния3 196—202

**В. Ю. Железнов, Т. В. Малинский,
С. И. Миколуцкий, В. Е. Рогалин, С. А. Филин,
Ю. В. Хомич, В. А. Ямщиков, И. А. Каплунов,
А. И. Иванова**

Модификация поверхности германия
при воздействии излучения наносекундного
ультрафиолетового лазера3 203—212

Д. Г. Муратов, Л. В. Кожитов, Т. М. Казарян, А. А. Васильев, А. В. Попкова, Е. Ю. Коровин
Синтез и электромагнитные свойства нанокмполитов FeCoNi/C на основе поливинилового спирта.....4 260—269

ЭПИТАКСИАЛЬНЫЕ СЛОИ И МНОГОСЛОЙНЫЕ КОМПОЗИЦИИ

А. А. Слепцова, С. В. Черных, Д. А. Подгорный, И. А. Жильников
Оптимизация процесса пассивации при изготовлении СВЧ-транзисторов на основе AlGaIn/GaN гетероструктур методом ICP CVD.....2 127—133

С. А. Адарчин, В. Г. Косушкин, В. М. Гурин, Л. В. Кожитов, М. С. Васютин, В. Г. Бебенин
Моделирование напряжений в многослойных полупроводниковых структурах автомобильных регуляторов и прогнозирование надежности их работы.....2 134—141

ФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА И МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЙ

Н. А. Каланда
Электропроводность монокристаллов $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ в условиях анионного упорядочения в слоях $\text{Cu}(1)\text{O}_{1-\delta}$ 1 71—77

У. А. Марьяна, В. А. Воробьев, А. П. Марьян
ИК-люминесценция $\text{CaGa}_2\text{O}_4 : \text{Yb}^{3+}$ при возбуждении излучением с длиной волны 940 и 980 нм1 78—85

И. Н. Ганиев, А. П. Абулаков, Дж. Х. Джайлоев, У. Ш. Якубов, А. Г. Сафаров, В. Д. Абулхаев
Влияние добавок висмута на теплофизические и термодинамические свойства алюминиевого полупроводникового сплава E-AlMgSi (алдрей).....1 86—93

В. А. Ткаченко, О. А. Ткаченко, Д. Г. Бакшеев, О. П. Сушков
Влияние самоорганизации поверхностного заряда на затворно-индуцированные электронную и дырочную двумерные системы2 142—150

И. Н. Ганиев, Ф. А. Алиев, Х. О. Одиназода, А. М. Сафаров, Р. Усмонов
Коррозия алюминиевого проводникового сплава E-AlMgSi (алдрей), легированного индием2 151—161

А. П. Марьян, У. А. Марьяна, В. А. Воробьев, Р. В. Пигулев
Фотолюминесценция CaGa_2O_4 , активированного редкоземельными ионами Yb^{3+} , Er^{3+} 3 213—221

И. Н. Ганиев, С. Э. Отаджонов, М. Махмудов, М. М. Махмадизода, В. Д. Абулхаев
Влияние щелочноземельных металлов на теплоемкость и изменение термодинамических функций сплава АК1М2 на основе особо чистого алюминия3 222—228

В. В. Сиксин
Многофункциональная ионизационная камера и ее электронный тракт для применения на медицинском ускорителе «Прометеус»3 229—240

ОБЩИЕ ВОПРОСЫ

А. А. Зацаринный, К. И. Волович, С. А. Денисов, Ю. С. Ионенков, В. А. Кондрашев
Вопросы выбора показателей эффективности функционирования высокопроизводительного вычислительного комплекса на примере ЦКП «Информатика» ФИЦ ИУ РАН3 241—247

РЕЦЕНЗИЯ НА КНИГУ

N. A. Sobolev
Review on the book
Nuclear Doping of Semiconductor Materials (second edition, revised) Executive Editor, Dr. Sci. (Eng.) V. A. Kharchenko2 162

Памяти Хасана Ильича Макеева (1930—2019)1 94

XXX Международная конференция «Радиационная физика твердого тела».....3 248

* * *