УДК 004.051

ПОДХОДЫ К созданиЮ ВЫСОКОПРОИЗВОДИТЕЛЬНОЙ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ среды для моделирования ячеек энергонезависИмой памяти на ЦКП «Информатика»

*Денисов Сергей Анатольевич, начальник ЦКП «Информатика» 1,*

*SDenisov@frccsc.ru*

*Кондрашев Вадим Адольфович, к.т.н., заместитель директора1,*

*VKondrashev@frccsc.ru*

*1Федеральный исследовательский центр «Информатика и управление» Российской академии наук (ФИЦ ИУ РАН), г. Москва*

Аннотация: В работе рассматривается подход по предоставлению высокопроизводительных вычислительных ресурсов ЦКП «Информатика» при разработке отечественной системы моделирования ячеек энергонезависимой памяти при решении актуальных задач материаловедения.

Ключевые слова: высокопроизводительный вычислительный комплекс, гибридная архитектура, графический ускоритель, индивидуальная среда моделирования, система математического моделирования, система разработки.

Развитие микроэлектроники неразрывно связано с разработкой средств автоматизированного проектирования, в том числе специализированных программных систем моделирования [1], которые в основном являются продуктами зарубежных компаний, например, Cadence Design System, Synopsys, Ansys и Siemens EDA. Как известно, подобные системы предъявляют высокие требования как к вычислительным ресурсам, так и к способам предоставления доступа пользователей к системе моделирования, и применяются в вычислительных комплексах, которые обладают высокой производительностью. В настоящее время, столкнувшись с необходимостью импортозамещения, российские компании, ученые и исследователи в области микроэлектроники активно ведут разработки отечественных аналогов зарубежных систем в том числе для моделирования ячеек энергонезависимой памяти [2].

При этом возникла острая необходимость в обеспечении единого цикла разработки систем моделирования, включающего как классические этапы создания программного кода, так и этап проверки корректности работы системы по назначению путем выполнения расчетных задач моделирования в среде высокопроизводительных вычислений.

Для обеспечения единого цикла разработки системы моделирования в центре коллективного пользования «Высокопроизводительные вычисления и большие данные» (ЦКП «Информатика») [3] в дополнение к существующим технологиям предоставления доступа к программным системам моделирования в высокопроизводительной вычислительной среде [4] была внедрена широко известная система совместной разработки GitLab с поддержкой функций непрерывной разработки CI/CD (Continuous Integration / Continuous Deployment).

Особенностью внедрения является интеграция среды GitLab с существующей системой управления вычислительными заданиями Slurm [5,6], которая позволила реализовать единый цикл разработки отечественной системы моделирования ячеек энергонезависимой памяти с задействованием высокопроизводительных вычислительных ресурсов ЦКП.

Единый цикл разработки можно представить в виде совокупности трех основных этапов:

- создание (разработка) программного кода системы моделирования;

- тестирование программного кода на предмет поиска ошибок, допущенных при создании кода;

‑ тестирование системы моделирования, реализованной программным кодом, путем выполнения расчетных задач в среде высокопроизводительных вычислений ЦКП.

Создание программного кода реализуется на рабочих местах разработчиков с применением инструментов совместной разработки, интегрированных в GitLab. В дополнение к разработке программного кода разработчики подготавливают сценарии CI/CD, позволяющие автоматически запускать процессы тестирования программного кода и/или системы моделирования при наступлении определенных событий в системе GitLab, например, при сохранении изменений программного кода (git commit).

Тестирование программного кода выполняется на выделенном вычислительном сервере, функционирующем в вычислительной среде ЦКП. Данный сервер обеспечивает функционирование сервисов GitLab Runner (например, shell runner, docker runner) и Slurm. Сервисы GitLab Runner предназначены для исполнения программного кода в соответствии с подготовленными сценариями CI/CD на данном вычислительном сервере, в том числе в заранее подготовленной индивидуальной среде. Сервис Slurm предназначен для постановки расчетных задач в очередь заданий вычислительной среды ЦКП, выделения необходимых вычислительных ресурсов, последующего запуска расчетного задания и освобождения ресурсов при завершении расчетов.

Тестирование системы моделирования выполняется путем запуска расчетных задач в вычислительной среде ЦКП с возможностью использования входящих в ее состав высокопроизводительных гибридных вычислительных серверов, оснащенных графическими ускорителями вычислений (GPU). Постановка расчетных задач в очередь заданий обеспечивается на выделенном сервере сервисом GitLab Runner, который выполняет следующие функции:

- в момент исполнения соответствующего сценария CI/CD интерпретирует указанные в сценарии параметры постановки расчетного задания в очередь заданий;

- формирует скрипт постановки расчетного задания в очередь заданий, используя директивы, поддерживаемые системой управления вычислительными заданиями;

- запускает расчетное задание на исполнение путем выполнения команды sbatch.

Таким образом реализуется единый цикл разработки отечественной системы моделирования ячеек энергонезависимой памяти с задействованием высокопроизводительных вычислительных ресурсов ЦКП «Информатика».

Выводы

Представленный подход обеспечивает доступ пользователей к высокопроизводительной вычислительной среде ЦКП «Информатика» на основе реализации единого цикла разработки системы моделирования ячеек энергонезависимой памяти в задачах материаловедения. Такой подход позволяет расширить функционал системы GitLab за счет интеграции с системой управления вычислительными заданиями Slurm и создать для разработчиков более комфортные условия работы при разработке подобных систем моделирования, а также сократить время проверок программного кода и системы моделирования в целом.

*Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ, грант №23-91-01012.*

Список использованных источников

1. Zatsarinny A.A., Abgaryan K.K. Factors determining the relevance of creating a research infrastructure for synthesizing new materials in implementing the priorities of scientific and technological development of Russia. - Russian Microelectronics. 2020. Т. 49. № 8. С. 600-602.
2. Абгарян К.К. Интеллектуальные информационные системы в микроэлектронике // В сборнике Математическое моделирование в материаловедении электронных компонентов. Материалы V международной конференции, 2023, с. 8-14
3. ЦКП «Информатика» // [Электронный ресурс] - http://www.frccsc.ru/ckp
4. Денисов С.А., Кондрашев В.А. Возможности ЦКП «Информатика» по предоставлению высокопроизводительных вычислительных ресурсов для решения задач материаловедения // В сборнике Математическое моделирование в материаловедении электронных компонентов. Материалы V международной конференции, 2023, с. 22-25
5. Slurm Documentation // [Электронный ресурс] -https://slurm.schedmd.com/documentation.html
6. Denisov S, Kondrashev V, Zatsarinny A. Dynamic Job Queue Management for Interactive and Batch Computation on HPC System. // Engineering Proceedings, 2023, vol. 33(1):55

APPROACHES TO CREATING A HIGH-PERFORMANCE COMPUTING ENVIRONMENT FOR MODELING NON-VOLATILE MEMORY CELLS AT THE SHARED RESEARCH FACILITIES «HIGH PERFORMANCE COMPUTING AND BIG DATA» (CKP «INFORMATICS»)

S.A. Denisov, V.A. Kondrashev

Abstract: The paper discusses an approach to providing high-performance computing resources of the CKP «Informatics» in the development of a domestic system for modeling non-volatile memory cells when solving current problems in materials science.

Keywords: high-performance computing cluster, hybrid architecture, graphics accelerator, individual modeling environment, container, mathematical modeling system, development system.