

## ВАРИАНТЫ РЕШЕНИЯ ПРИКЛАДНЫХ ЗАДАЧ ХИМИИ В РАСПРЕДЕЛЕННЫХ И ПАРАЛЛЕЛЬНЫХ СРЕДАХ

Д.А. Варламов, В.М. Волохов, А.В. Пивушков, Г.А. Покатович, Н.Ф. Сурков

Масштабность задач вычислительной химии подразумевает обязательное применение для их решения как параллельных, так и распределенных сред. Многие задачи (моделирование молекулярных структур и их динамики, поведение и энергетика сложных химических реакций, наномоделирование, газодинамика и другие) в принципе не могут быть решены на однопроцессорных или SMP-узлах даже в обозримом будущем. Например, время расчета поведения нанотрубок, легированных металлами, состоящих из  $n \cdot 10^3$  атомов может достигать 3-4 лет для однопроцессорных систем. Поэтому все большее значение принимает адаптация наиболее востребованных прикладных пакетов вычислительной химии и авторских программ к работе в условиях параллельных и/или распределенных сред.

Еще с конца 90-х годов в ИПХФ проводились интенсивные работы по применению методов параллельных (а с 2005 года – и распределенных) расчетов для нужд вычислительной и квантовой химии. Создан и эксплуатируется вычислительный центр, объединяющий 3 кластера (более 150 процессоров) интегрированной мощностью до 1,3 Тф (с перспективой роста до 5,7 Тф). Как базовая составляющая в него входит ресурсный узел сервисов GRID (построенный на middleware gLite и Unicore), а также несколько пользовательских интерфейсов и шлюзов к инфраструктуре GRID (включая WWW портал). Созданная структура позволяет проводить крупномасштабные вычислительные эксперименты с параллельными вариантами ПО (с использованием до 130 процессоров) и в распределенных средах (причем как внутри центра на базе локальной сети, так и на крупных внешних полигонах типа RDIG и СКИФ-ГРИД). Более детально структура вычислительного центра ИПХФ была описана нами ранее [1,2]. Сейчас ведутся работы по созданию на том же ресурсном узле блока виртуальных ресурсов для проведения экспериментов по совмещению разнородных вычислительных сред.

Для обработки заданий на кластерах выбрана система PBS Torque (<http://www.clusterresources.com>). Она охватывает весь спектр применяемых задач, позволяя решать как типичные параллельные задачи с непрерывным обменом данными (например, GAMESS, Dalton 2, Gaussian), так и генерируемые "пучки" формально независимых задач. Для обработки параллельных задач использованы сокетные решения и среды MpiCh версий 1 и 2.

Рассмотрим параллельные и/или распределенные варианты различного ПО вычислительной химии.

### 1. Стандартные прикладные пакеты

К ним относятся пакеты GAMESS, Gaussian, Dalton, CPMD, VASP, MolPro. Большинство из них поддерживает работу в SMP средах собственными средствами, однако, их ресурсоемкость требует использования и независимо-параллельных (сокетных и MPI) вариантов, а также возможности запуска на удаленных ресурсных узлах. Пока для распространения этих пакетов на расчетные узлы GRID возможна только ручная их установка и настройка, что связано со сложностью установки как самих пакетов, так и требуемого ими окружения, а размеры пакетов (сотни мегабайт) затрудняют возможности их передачи на узлы в качестве единого задания. Однако, была показана (на примере узла ИПХФ, используемого в роли удаленного) принципиальная возможность и такого варианта расчетов. Опишем реализации параллельных и распределенных методов для некоторых из них.

а) Пакет GAMESS (General Atomic and Molecular Electronic Structure System). Для пакета GAMESS авторами была создана среда, позволяющая проводить его распараллеливание как сокетным способом, так и посредством протокола MPI (пакет mpich2). Сокетный вариант отличается существенно более простой реализацией и повышенным быстродействием, однако, при запуске через GRID инфраструктуру имеет ряд недостатков: неправильно оценивает необходимые процессорные ресурсы, требует фиксированного числа процессоров и обязательного явного указания стартового узла, не позволяет точного мониторинга задач, для запуска в среде gLite – обязательного единого NFS пространства на одном из рабочих узлов. В условиях избыточных вычислительных мощностей этот вариант приемлем, но для лимитированных ресурсов его использование пока проблематично. MPI вариант реализован только для среды MpiCh-2 из-за передачи огромного числа переменных окружения и параметров (чего не дает "стандартная" реализация MPI). Он более применим для GRID среды, т.к. требует определения только минимального числа доступных процессоров, не «завязан» на стартовую машину, не нуждается в явном описании расчетных узлов. Были проведены успешные запуски ряда заданий для расчетов по программе GAMESS в тестовой VORGSTEST, а затем и проведены масштабные расчеты на нескольких десятках процессоров с получением результатов расчетов на конкретном UI (User Interface). В настоящее время создан WWW интерфейс для упрощения формирования и запуска задач в GRID инфраструктуру, их мониторинга и получения результатов, поскольку квантово-химический комплекс GAMESS отличается очень обширным количеством входных данных. Все данные делятся на 114 групп, которые содержат в совокупности более 500 простых параметров и параметров-массивов, и их «сборка» и запуск вручную – весьма трудоемкий процесс, не говоря уже о работе с низкоуровневыми интерфейсами распределенных сред.

б) Пакет Gaussian-D03. Показана возможность его распараллеливания между узлами с использованием пакета Linda (под управлением PBS Torque) с масштабированием до 16 процессоров. На внутренних ресурсах ИПХФ Gaussian (лицензионная версия) в параллельном варианте является наиболее востребованным пакетом, однако, наибольшую проблему вызывают вопросы лицензионных ограничений использования данного коммерческого ПО в рамках распределенных сред. Для него был также сформирован пакет скриптов для запуска заданий посредством GRID технологий на SMP серверах и успешно просчитан ряд реальных задач, запущенных через UI интерфейс.

в) Для пакетов CPMD и Dalton-2 показана возможность запуска в распределенных средах (при предварительных установке и настройке), при этом оба пакета могут эффективно совмещать работу в SMP архитектурах с работой в MPI среде.

Для всех пакетов основную трудность для применения в распределенных средах вызывает механизм их транспортировки и запуска на неподготовленном заранее ресурсном узле. В настоящее время для решения этих проблем авторами изучается использование различных технологий виртуализации ресурсов (технологии VMWare, Xen, VirtualBox) и создания виртуальных приложений для запуска на гетерогенных распределенных ресурсах (создание VM в качестве задач, приложения в виде «контейнеров» - Virtual Workspaces и т.п.)

## 2. Авторские программы, разработанные в ИПХФ и ИЦЧ

а) Программы по расчету многопараметрических задач из области квантовой химии с количеством параметров до 20. Например, расчет процесса туннельного прохождения протона через потенциальный барьер, параметры которого периодически зависят от времени, а параметрами являются частота и амплитуда излучения (создание материалов для оптической сверхплотной памяти). Подобные задачи имеют высокую вычислительную сложность, однако вычисления в каждой точке сетки происходят совершенно независимо друг от друга, что позволило разбить область вычислений на множество непересекающихся подобластей и на каждой из них запускать задачу на подмножестве процессоров. Область решения задачи была разбита на 30 областей по ~4200 точек в каждой. При применении одиночного ПК оцениваемое время решения задачи составило бы 5-6 тысяч часов. Распараллеливание задачи осуществлялось на UI узла ИПХФ авторскими скриптами и средствами среды Condor, задания выполнялись независимо друг от друга. Входные данные для одной из подобластей, получившихся в результате разбиения области данных, помещались во входной «box» и передавались вместе с бинарным заданием на внешний брокер ресурсов (НИИЯФ), который определяет свободный Computer Element (CE) в VO RGSTEST, на который и направлялось единичное задание. Объем передаваемых входных данных для одного задания составлял около 1 Мб, выходные – до 0.5 Мб, таким образом, для расчета типовой задачи происходила передача до 7,5 Гб данных на внешние расчетные узлы. Выходные данные вместе с файлом результатов помещались в выходной «box» и передавались на хранение на Storage Element, откуда извлекались командой `edg-job-get-output`. Была показана возможность работы и мониторинга любых количеств CE в виртуальной организации. Расчет в среде GRID (с занятием до 300 процессоров на 4 ресурсных узлах) занял около 36 часов. Аналогичные вычислительные эксперименты ставились и в условиях среды X-Com разработки НИВЦ МГУ при близкой эффективности.

б) Расчет оптимальных параметров для создания промышленной установки (теплового узла) по выращиванию крупногабаритных кристаллов. Двумерная задача предусматривает до 109 единичных параллельных независимых расчетов, что делает ее идеальной для решения путем запуска «пучков» задач на распределенных ресурсах, при этом могут быть использованы и SMP варианты расчетов. Набор авторских скриптов «нарезает» задачу и запускает совокупность заданий через брокер ресурсов на вычислительных мощностях VO RGSTEST. В настоящее время разрабатывается вариант отправки «областей» рассчитываемой сетки на удаленные CE с «нарезкой» их уже непосредственно на ресурсных узлах. Решено несколько упрощенных вариантов задачи (до 70000 заданий), однако, полномасштабный вычислительный эксперимент требует существенно более корректного программного кода (нежели сейчас) и способен занять до 1000 процессоров одновременно, что возможно лишь в рамках крупных полигонов (типа создаваемого полигона СКИФ-GRID с участием узла ИПХФ).

в) Для изучения проблем прохождения параллельных программ с использованием интерфейса MPI на ресурсном узле GRID в ИПХФ РАН была использована реальная газодинамическая программа моделирования на молекулярном уровне процесса образования ударной волны в трубе применительно к газовой смеси, и после отработки тестов решено несколько реальных задач (со временем расчета до нескольких недель).

Для обеспечения комфортной работы пользователя и автоматизации запуска несколько UI были интегрированы в WWW-портал <http://grid.icp.ac.ru> (Grid Enabled Chemical Physics – GECР). Портал является подбором пилотных высокоуровневых интерфейсов для запуска нескольких классов многопараметрических задач и некоторых прикладных пакетов.

Перечисленные примеры – лишь небольшая часть задач вычислительной химии и примыкающих к ним по структуре вычислений задач, которые могут быть адаптированы к решению в условиях параллельных сред и рамках инфраструктуры GRID. Наши исследования продемонстрировали огромные возможности параллельных и/или распределенных технологий в области вычислительной химии. Существенные трудности, связанные с установкой различного middleware (PBS, gLite, Unicore, Condor, Xcom) многократно перекрываются новыми возможностями и перспективами в решении крупномасштабных химических задач.

ЛИТЕРАТУРА:

1. Д.А. Варламов, В.М. Волохов, Г.А. Покатович, Н.Ф. Сурков, А.В. Пивушков Труды Международной научной конференции “Параллельные вычислительные технологии (ПаВТ’2008)” ; Санкт-Петербург, 28 января–1 февраля 2008 г., с.318-322
2. С.М. Алдошин, Д.А. Варламов, В.М. Волохов, Г.А. Покатович, Н.Ф. Сурков, А.И. Станиловский Труды Всероссийской научной конференции «Научный сервис в сети Интернет: технологии параллельного программирования», Новороссийск, 2006, М.:, изд-во МГУ, с.91-93