

СПЕЦИАЛИЗАЦИЯ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОГО КЛАСТЕРА ДЛЯ ПРОВЕДЕНИЯ КВАНТОВОХИМИЧЕСКИХ РАСЧЕТОВ

В.В. Коваль, А.Г. Стариков

В октябре 2008 года состоялся ввод в эксплуатацию специализированного вычислительного центра департамента химии ЮФУ, предназначенного для проведения квантовохимических исследований. Приобретение и установка оборудования и программного обеспечения осуществлено в рамках реализации Программы развития Южного федерального университета из средств национального проекта "Образование". Главный вычислительный ресурс центра - кластер "Silver" состоит из 50 blade-серверов, объединенных высокоскоростной сетью InfiniBand. Каждый узел кластера включает в себя два четырехядерных процессора Intel Xeon 5365 с тактовой частотой 3ГГц, 16Гб оперативной памяти и дисковый массив Raid-0 с двумя дисками SAS 73Гб 10000rpm. Операционной системой служит Linux SLES 10. В качестве прикладного программного обеспечения используются Gaussian 03 ver. E.01, US Gamess ver. Mar. 2007, MolPro 2008.1.

Необходимость создания специализированного центра продиктована тем, что квантовохимические расчеты являются наиболее требовательными к вычислительным ресурсам приложениями. Лишь применение высокоуровневых методов обеспечивает точность расчетов, сопоставимую с экспериментальными данными. Например, в [1] описывается вычислительный эксперимент с использованием методом связанных кластеров (CCSD(T)) по изучению свойств **одной** молекулы октана, который потребовал 23 часа работы 1400 процессоров Itanium2. При этом загрузка процессоров составляла 75%, а средняя производительность - 6,3 Tflops. По мнению специалистов компании Intel компьютер, способный проводить квантовохимические расчеты любой сложности, должен иметь производительность не менее 1 Zettaflops (10^{21} flops), что значительно превышает потребности в вычислительных ресурсах при проведении аэродинамического анализа, в космологии и т.д. По их прогнозам такая мощность будет достигнута самым быстрым компьютером в мире лишь к 2030 году [2].

Специализация центра заключается в том, что его проектирование и настройка были выполнены с учетом особенностей установленного лицензионного программного обеспечения для проведения квантовохимических расчетов - Gaussian03, Gamess, MolPro. Поскольку задачи могут выполняться от нескольких часов до нескольких недель, и не всегда представляется возможным предсказать длительность расчета, на кластере нет ограничений по времени по времени выполнения заданий. Проведенная модификация системы управления очередями позволяет автоматически вносить изменения в задачи пользователей в зависимости от используемого метода расчета и количества запрашиваемых процессоров. В течение месяца с момента запуска оборудования проводилось его тестирование для выработки рекомендаций по эффективному использованию созданного ресурса.

Среди приоритетных задач, которые решаются с использованием нового кластера, следует отметить: изучение органических и координационных систем для молекулярных переключателей и магнитоактивных комплексных соединений для молекулярных магнетиков; исследование пространственного и электронного строения соединений и кластеров как новых структурных мотивов для варьируемого дизайна новых полимерных и трехмерных кристаллических образований; компьютерное моделирование фотохромных превращений молекулярных и наномолекулярных систем, направленное на предсказание бистабильных структур для трехмерной молекулярной памяти, систем преобразования энергии и химической сенсорики.

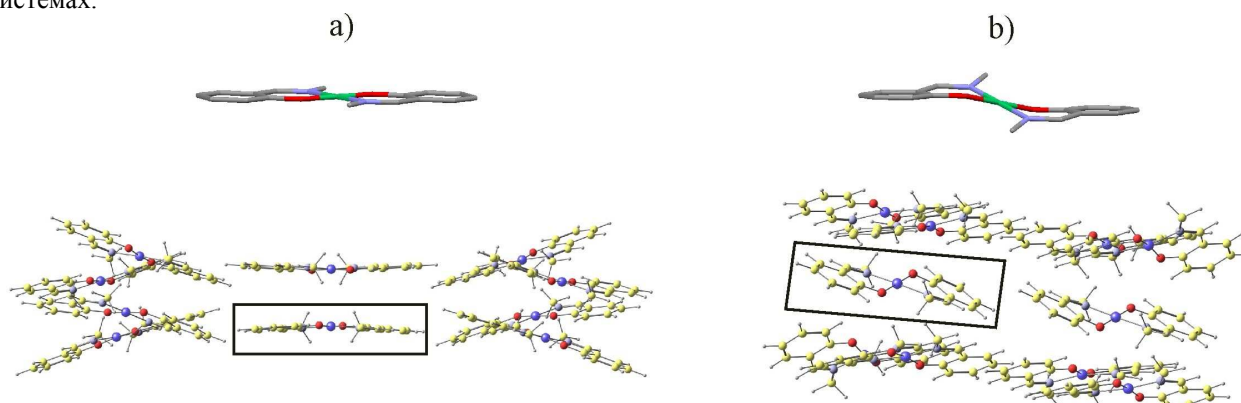
Подготовительный этап по созданию кластера "Silver" фактически начался в 2003 году сборкой небольшого кластера на базе процессоров Pentium-4 и продолжился в 2006 году созданием вычислительной системы на базе серверов с процессорами Itanium2. Это позволило накопить практический опыт, как проектирования и обслуживания кластеров, так и их применения для проведения квантовохимических расчетов. Затем была проведена работа по тестированию и сравнению существующих аппаратных платформ с использованием квантовохимического программного обеспечения.

Наибольшие трудности вызвала оценка производительности кластерных систем. К моменту начала тестирования уже было ясно: стандартные тесты производительности вычислительных систем, например HPL (High Performance Linpack), не отражают реальных возможностей кластерных установок для проведения квантовохимических расчетов. Поэтому настройка и тестирование кластерной системы "Silver" выполнялась путем решения реальных задач различной размерности.

Запуск вычислительного центра впервые дал ученым ЮФУ возможность проводить на высоком, близком к экспериментальному, уровне теоретические исследования не только отдельных молекул, но и наноматериалов, предсказывать их свойства в различных агрегатных состояниях. Это позволяет рассматривать центр как виртуальную химическую лабораторию, в которой все опыты по «получению» новых химических веществ и изучению их свойств проводятся на компьютере.

Наиболее показательным примером новых возможностей, открывшихся после создания нового вычислительного ресурса, является моделирование кристаллической структуры бис-(N-метилсалицилальдиминато) Ni(II) методом теории функционала плотности (B3LYP/6-31g(p)) путем

оптимизации геометрии кластера, состоящего из десяти молекул. Ранее системы такого размера исследовались лишь полуэмпирическими методами или методом молекулярной механики, однако эти приближения не предназначены для расчетов структур, включающих атомы переходных металлов. Необходимость данного расчета продиктована тем, что существует два типа упаковки таких молекул, характеризующиеся планарным **a)** и ступенчато-искаженным **b)** строением комплексов. До настоящего времени предметом дискуссий являются роль электронных, стерических факторов и кристаллической упаковки, в существовании перегиба в таких системах.



Результаты, полученные в ходе проведения компьютерного эксперимента [3], позволили установить, что существенное различие геометрических характеристик комплексов является следствием особенности кристаллической упаковки молекул в кристаллах, которая может быть воспроизведена только расчетами молекулярных ассоциатов, включающих достаточно большое количество молекул. Время расчета составило около четырех недель при использовании ресурсов, производительность которых оценивается в 1 Tflops.

В настоящее время на кластере “Silver” одновременно выполняются более 20-ти задач, примерно столько же находится в очереди, что свидетельствует о его востребованности химиками-теоретиками ЮФУ.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект 09-03-00684a) и Министерства образования и науки (проект РНП 2.2.1.1/2348).

ЛИТЕРАТУРА:

1. Lisa Pollack, Theresa L. Windus, Wibe A. de Jong, David A. Dixon. Thermodynamic Properties of the C5, C6, and C8 n-Alkanes from ab Initio Electronic Structure Theory // *J. Phys. Chem. A*, Vol. 109, № 31, 2005.
2. Stephen Pawlowski. Petascale Computing Research Challenges Challenges-A Manycore Perspective // http://www.ece.arizona.edu/~hpca/slides/2007_HPCA_Pawlowski.pdf.
3. Starikov A.G., Minyaev R.M., Minkin V.I. Theoretical modeling of the molecular, crystal structure and the square-planar to tetrahedral conformational rearrangement of trans-planar bis-(N-methylsalicylaldiminato) nickel(II). // *Mendeleev Commun.* 2009. Vol. 19., № 2. P. 64-66.