

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ГРИД-ПОЛИГОНОВ ДЛЯ РЕШЕНИЯ БОЛЬШИХ ЗАДАЧ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ ХИМИИ

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

Вычислительная и квантовая химия являются одними из наиболее заинтересованных в суперкомпьютеринге и ГРИД вычислениях отраслями науки и неэффективны в современном состоянии без использования сверхмощных параллельных и распределенных вычислительных ресурсов для решения задач самых разных классов.

Наиболее востребованы суперкомпьютеринг и ГРИД в следующих тематических направлениях:

- изучение строения вещества;
- строение молекул и структура твердых тел;
- создание материалов с заранее заданными свойствами;
- создание биологически активных веществ и лекарственных препаратов, биотехнологии;
- кинетика и механизм сложных химических реакций;
- химическая физика процессов горения и взрыва;
- газодинамика экстремальных состояний;
- химическая физика процессов образования и модификации полимеров;
- химическая физика биологических процессов и систем;
- предсказательное моделирование наноструктур и различные нанотехнологии;
- общие проблемы химической физики - и др.

Для проведения крупномасштабных вычислений в области вычислительной и квантовой химии и сопряженных областей науки требуется проведение высокоинтенсивных параллельных и распределенных расчетов. Например, некоторые задачи оптимизации молекулярных структур требуют выполнения до 10^9 отдельных расчетов. Подобные расчеты требуют вычислительных ресурсов, которые не может предоставить ни один из доступных вычислительных центров.

Крупномасштабные квантово-химические расчеты – одно из основных научных направлений работы вычислительного центра Института Проблем Химической Физики в Черноголовке (ИПХФ РАН, <http://www.icp.ac.ru>) [1]. Институт располагает богатейшей в России библиотекой параллельных квантово-химических и молекулярно-динамических программ (авторских, "open source" и лицензионных). В течение года в институте проводится расчет от 3 до 4 тысяч вычислительных задач высокой сложности с публикацией более чем 400 печатных работ с использованием результатов проведенных расчетов.

Работы с системами распределенных вычислений в ИПХФ РАН были начаты в 2004 году по программам Президиума РАН и Федеральным целевым научно-техническим программам и продолжают в настоящее время в рамках Программы фундаментальных исследований Президиума РАН № 1 на 2009-2011 годы «Проблемы создания национальной научной распределенной информационно-вычислительной среды на основе развития ГРИД технологий и современных телекоммуникационных сетей», программы Союзного Государства «СКИФ-ГРИД», программы развития Национальной Нанотехнологической Сети (ГридННС).

Были сформулированы три направления исследований: 1) адаптация прикладного ПО в области вычислительной химии к работе в различных ГРИД инфраструктурах и обеспечение возможностей запуска задач на распределенных ресурсах; 2) развитие ресурсного ГРИД сайта (для нескольких распределенных сред), выступающего как в роли полигона для проведения вычислительных экспериментов в данной области, так и в роли средства для решения реальных задач; 3) создание новых методик вычислений в распределенных средах, связанных со спецификой используемого ПО.

Наш опыт проведения расчетов в области химии [2-4] позволил разделить большинство квантово-химических задач на два основных вычислительных типа :

1. задачи, распадающиеся на совокупность независимых заданий, число которых зависит обычно от количества параметров задачи или от «сетки» разбиения искомого области данных;
2. задачи, представляющие собой единый вычислительный процесс, как правило, требующий единовременного выделения большого количества ресурсов (количество CPU, оперативная память на ядро, дисковые массивы).

Задачи первого типа наиболее применимы к работе в ГРИД средах, поскольку, распределяя независимые задания на множество небольших кластеров (каждый кластер – 10-20 процессоров, задание может исполняться на нем как параллельное), можно добиться высокой эффективности использования вычислительных ресурсов. При этом возможно использование весьма больших вычислительных полигонов (до 10^3 – 10^4 процессоров) как в локальном варианте (в гетерогенных вычислительных средах типа Condor), так и в условиях распределенных сред (совокупность кластеров – ресурсных сайтов). Хорошим примером является траекторные расчеты химических реакций. Характерной системой для подобных расчетов является реакция H_2

+ O₂. Расчет представляет собой моделирование с помощью классических траекторий элементарного акта столкновения. Для расчета полного сечения подобной реакции для набора необходимой статистики следует разыграть: по два угла взаимной ориентации для каждой молекулы, начальные колебательные и вращательные квантовые числа, параметр столкновения, относительную энергию столкновения. Как правило, расчет одной траектории занимает от нескольких минут до первых часов. Последовательный перебор указанных параметров приводит к расчетам десятков миллионов траекторий, что ведет к нереальности решения подобных задач на локальных ресурсах и необходимостью перехода к их решению на распределенных полигонах. Аналогичным способом могут решаться многочисленные многопараметрические задачи химии, для которых свойственен перебор многомерных «сеток» входных параметров, что ведет к увеличению до 10⁸ – 10⁹ числа независимых расчетов.

Задачи второго типа обычно предназначены для решения в условиях суперкомпьютерных центров, т.к. эффективность их решения непосредственно связана с высокими требованиями как к ресурсам суперкомпьютера (вовлекается значительное число процессоров), так и к ресурсам расчетных узлов (значительные объемы оперативной памяти и дискового пространства), а также эффективностью распараллеливания вычислительного процесса. При этом для характерных задач исследования наноструктур и молекулярных кристаллов возможно использование до нескольких тысяч процессоров с потреблением процессорного времени порядка месяца, т.е. использование кластеров терафлопного уровня. При этом использование ГРИД сред возможно для запуска подобных задач на удаленных ресурсах, объединенных в вычислительный полигон. При этом с точки зрения пользователя работа в ГРИД среде отличается в лучшую сторону от обычного удаленного запуска заданий (например, через SSH) в сторону доступности нескольких ресурсов одновременно и упрощения выбора необходимого (и доступного!) вычислительного ресурса.

Основой для проведения работ с распределенными средами стал созданный ранее на основе вычислительного комплекса ИПХФ РАН ресурсный ГРИД центр, включающий сайты распределенных сред gLite, Unicore и Globus. Целью создания ресурсных сайтов стало формирование опытного полигона по проведению вычислительных экспериментов в российском ГРИД сегменте по вычислительной и квантовой химии. Основными задачами в рамках этого направления стали:

1. разработка и использование системы запуска *исходящих* задач (т.е. запускаемых пользователями на удаленных ресурсных узлах) различного типа в распределенных средах;
2. обеспечение проведения вычислительных экспериментов и расчета реальных *входящих* задач на собственном ресурсном узле ИПХФ (выступающем в роли удаленного распределенного ресурса и тестового полигона).

Существующий ресурсный сайт ИПХФ был достаточно детально описан авторами ранее [1, 4, <http://cc-icpc.icp.ac.ru>]. Сейчас он объединяет в своем составе полнофункциональные ресурсные сайты следующих распределенных полигонов:

1. узел консорциума EGEE-RDIG (Enable GRID for E-science и Russian Data Intensive GRID, <http://www.egee-rdig.ru>) на основе среды gLite (<http://glite.web.cern.ch>), работы ведутся в рамках виртуальной организации (ВО) RGSTEST;
2. сайт категории «А» СКИФ-Полигона (<http://skif-grid.botik.ru>) на базе промежуточного ПО Unicore (<http://www.unicore.eu>).
3. сайт Национальной Нанотехнологической Сети (ГридННС, <http://www.ngrid.ru>, среда Globus, <http://www.globus.org>)

Ресурсные сайты позволяют решать *входящие* задачи как с использованием прикладных квантово-химических пакетов, так и общего характера.

В состав ресурсных сайтов входит также комплекс клиентских интерфейсов различных уровней для взаимодействия адаптированного квантово-химического прикладного ПО с указанными ГРИД средами. Они позволяют запускать *исходящие* задачи вычислительной химии на распределенных ресурсах, обеспечивая возможность формирования заданий, запуск на удаленных сайтах (через брокеры ресурсов или в режиме point-to-point -> P2P), мониторинга прохождения заданий, сбора результатов и статистики.

Работа в рамках ВО RGSTEST обеспечивает доступ к вычислительным мощностям до 800 процессоров и дисковым массивам порядка 8-15 терабайт в нескольких географических зонах (Москва, Протвино, Харьков, Черноголовка и др.). Разнородность узлов данной ВО позволяет легко варьировать параметры запускаемых задач, ориентируясь на различные типы ресурсов. Использование подобного полигона обеспечивает проведение достаточно масштабных вычислительных экспериментов как научного, так и прикладного характеров.

Ресурсный сайт для среды Unicore позволяет выполнять входящие задачи сертифицированных пользователей СКИФ-Полигона, производить мониторинг задач и передавать полученные результаты пользователям. Обеспечена возможность мониторинга состояния сайта извне. Клиентский интерфейс обеспечивает запуски исходящих задач через среду Unicore на собственном ресурсном сайте ИПХФ (в роли удаленного ресурса - <https://unicorgw.icp.ac.ru:8080>) и на доступных ресурсных узлах СКИФ-Полигона – ИПС РАН, СКИФ-Cyberia (Томский ГУ, <https://cyberia.tsu.ru>), СевКазГУ (<https://skif-poligon.ncstu.ru>), Нижегородского ГУ (<https://85.143.3.48>) и др., что подтверждает работоспособность как ресурсного сайта, так и клиентского интерфейса среды Unicore.

В рамках создаваемой с 2010 года Национальной Нанотехнологической Сети (ГридННС) предоставлен доступ к ресурсам с общим числом CPU более 8000 (<http://mon.ngrid.ru/stats?page=usage>) и большим количеством виртуальных организаций, в том числе поддерживающих квантово-химические расчеты (на базе сайта ИПХФ создана и функционирует ВО nanochem).

Составная часть ресурсного центра – ГРИД портал, объединение ГРИД и Web сервисов. Создан высокоуровневый интерфейс, позволяющий более эффективно использовать все преимущества ГРИД расчетов. Эта среда позволяет пользователям получить доступ к ГРИД ресурсам и сервисам, вызывать и настраивать их с помощью web-браузера. Архитектура ГРИД портала основана на идее, что порталная система является контейнером для пользовательских интерфейсов (инструментов, клиентов), обеспечивающих работу с ГРИД службами. Преимущество данной архитектуры в том, что она достаточно легко позволяет встраивать в портал интерфейсы новых ГРИД служб и изменять существующие. Портальные сервисы контролируют и визуализируют пользовательский интерфейс. Сформирован WWW портал (<http://grid.icp.ac.ru>, Grid Enabled Chemical Physics – GECР), включающий высокоуровневые пользовательские WWW интерфейсы к следующим прикладным пакетам:

1. Квантово-химический комплекс GAMESS-US, методы *ab initio* которого могут использовать параллельные вычисления;
2. Вычисление многопараметрических функций, под которой следует понимать целый класс задач химической физики, обладающих свойством параллелизма по данным (Data Parallel).

Данные интерфейсы позволяют определять входные параметры и условия (включая загрузку данных, конфигурационных файлов, сертификатов пользователя), формировать сложные первичные файлы запуска, производить (при условии авторизации пользователя) запуск данного ПО в распределенной среде, осуществлять мониторинг выполнения заданий и сбор результатов. Интегрирована также технология работы через web-интерфейс с «пучками» независимых заданий на «нарезаемых» областях данных. Заметим, что основная часть программного кода web-интерфейсов не связана напрямую с выбранной распределенной средой, поэтому они могут подключены к нескольким вариантам таковых сред. Данные интерфейсы значительно снижают трудоемкость работы пользователя в части формирования задач и работы с первичными данными и значительно облегчают работу с пакетами в распределенных средах, особенно для неподготовленного пользователя.

Нами проводилась экспериментальная проверка и апробация возможности использования ГРИД ресурсов для расчетов с использованием стандартных прикладных пакетов программ (в том числе параллельных версий), применяемых в вычислительной химии, а также различных авторских программ, разработанных в ИПХФ и НЦЧ РАН. Для адаптации в распределенных средах ранее [2] был выбран ряд прикладных пакетов (GAMESS-US, VASP, Gaussian-98,-03, Dalton-2, CPMD, NAMD, авторские программы по решению многопараметрических задач из области квантовой химии и молекулярной динамики). Для них был проведен детальный анализ модульной структуры квантово-химического кода и изучены особенности работы различных реализаций однопроцессорных и параллельных версий, определены стратегии реализации выбранных типов квантово-химических вычислений применительно к распределенным средам.

Для выбранных прикладных пакетов были созданы и протестированы на реальных задачах низкоуровневые интерфейсы для запуска их в распределенных средах (в основном – для среды gLite, в меньшей степени для сред Unicore и Globus). Данные интерфейсы включают набор скриптов по формированию исходящих заданий, запуску через брокер ресурсов или в режиме P2P на удаленных узлах, мониторингу выполнения задач, возвращению полученных результатов с удаленных ресурсов и «сборку» окончательных результатов на интерфейсе пользователя. Реализованы интерфейсы для однопроцессорных и параллельных (SMP, сокетные, MPI-1,2) вариантов указанного ПО. На ресурсном ГРИД узле ИПХФ, использованном в качестве удаленного распределенного ресурса, проведены запуски указанного прикладного ПО через инфраструктуры ВО RGSTEST (EGEE-RDIG), СКИФ-Полигона, ГриННС. Запуски адаптированного ПО проводились в разных режимах и конфигурациях (с разным количеством процессоров и использованием разных вариантов параллельных расчетов). Были изучены варианты совмещения различных вариантов распараллеливания (например, SMP+MPI) вычислений применительно к некоторым прикладным пакетам (пакеты Dalton-2 и CPMD).

Следует отметить, что большинство прикладных пакетов вычислительной химии отличаются сложностью конфигураций и повышенными требованиями к среде выполнения, особенно при параллельных расчетах. Обычно эта проблема решается созданием виртуальных организаций, т.е. объединением через распределенные среды во многом однотипных (по установленному программному обеспечению и настройкам) вычислительных ресурсов. Для них прикладные пакеты (вместе со средствами конфигурирования и настройки) распространяются из единого репозитория (например, для ПО ЦЕРНа – Atlas, CMC, Alice). В большинстве же случаев неподготовленный ресурсный сайт не имеет нужного заранее установленного прикладного ПО или не сконфигурирован должным образом, поэтому запуск непредустановленных сложных прикладных пакетов для таких ресурсов обычно оканчивается неудачей. Поэтому в общем случае необходима ручная или полуавтоматическая перенастройка ресурсных узлов распределенных сред, включающая установку собственно пакетов, конфигурирование центрального узла и расчетных узлов (настройка переменных окружения, общих

NFS ресурсов, PBS очередей), установка дополнительных системных библиотек и исполняемых файлов (включая параллельные среды типа Mpich-2). При условии этого возможны запуски пакетов на распределенных узлах.

Для частичного решения данной проблемы авторами был разработан метод создания виртуальных перемещаемых программных «контейнеров». «Контейнер», включающий прикладной пакет, набор необходимых системных файлов и библиотек, скрипты по развертыванию и настройке среды исполнения, файлы данных и конфигурационные файлы, доставляется на ресурсный узел ГРИД среды стандартными средствами распределенного middleware. Применение таких «контейнеров» позволяет передавать заранее настроенную среду как единое задание, не требующее дополнительного конфигурирования и сложной процедуры установки и настройки. «Контейнер» по прибытии на ресурсный узел производит развертывание пакета и необходимых системных библиотек, настройку среды исполнения (включая параллельную среду), запуск задания, по его окончании проводится отправка результатов на пользовательский интерфейс и «очистка» среды исполнения, т.е. приведение ресурса в первоначальное состояние. Так могут быть разрешены проблемы установки, настройки, несовместимости с операционной системой и другими программами, решаются конфликты одинаковых приложений. Разработаны методы запуска «контейнеров» как в виде последовательности скриптов, так и в виде единого бинарного задания.

Для решения части задач «первого» вычислительного типа (например, широкого класса многопараметрических задач вычислительной химии) с использованием ГРИД технологий был создан метод запуска «пучков» независимых заданий для использования всех доступных ресурсов распределенной среды. При этом полная задача разбивается на огромное количество независимых подзадач (каждая определяется группой значений совокупности параметров). Задача автоматизации процесса разбиения полной задачи на фрагменты важна и определяет удобство пользования системой. Была разработана методика запуска задач и получения результатов методом запуска «пучков» заданий на всех доступных ресурсах выбранной распределенной среды. На языке Perl написан комплекс программ для запуска «пучков» заданий и получения результатов счета с использованием пользовательских интерфейсов (UI) сред gLite и Unicore. Для решения многопараметрических задач квантовой химии были разработаны методы формирования «пучков» независимых заданий с варьирующими параметрами – до 10^4 , в перспективе до 10^7 «атомарных» заданий на задачу. Для выбранных областей данных авторскими скриптами производится «нарезка» областей данных, формирование пулов независимых заданий, создание очередей запуска и отправки заданий на брокер ресурсов. После запуска периодически запускаемые (средствами ОС, например по cron) скрипты ведут мониторинг выполнения заданий, контроль таймаутов, перезапуск неудачных заданий и сбор результатов выполненных заданий (с использованием базы данных и таблиц в ней, контролирующей состояние заданий – «ожидание», «запуск», «выполнение» и т.д.). По окончании расчетов проводится сборка «атомарных» результатов в единый выходной файл. Были сформированы и направлены на распределенные ресурсы ВО RGSTEST и СКИФ-полигона "пучки" заданий, проведены мониторинг их выполнения и "сборка" результатов с различных ресурсов. Для ВО RGSTEST было задействовано до 400 процессоров (Москва, Протвино, Харьков, Черноголовка), для СКИФ-Полигона – доступные CPU узлов, указанных выше (до 120).

Детальнее разработанные методики вычислений описаны в другой статье авторов в этом сборнике.

В итоге наши работы позволили создать в рамках технологий ГРИД вычислительную среду для проведения крупномасштабных расчетов в области вычислительной химии:

1. создан комплекс адаптированных к различным ГРИД средам различных вычислительных полигонов прикладных программных пакетов вычислительной химии с интерфейсами различного уровня (от низкоуровневых интерфейсов до Web-портала),
2. разработаны новые методики вычислений (методы формирования «пучков» независимых заданий, метод «виртуальных контейнеров» и т.д.) в распределенных и параллельных средах;
3. создан ресурсный центр (включающий ресурсные сайты полигонов EGEE-RDIG, СКИФ-Полигона, ГридННС) для проведения вычислительных экспериментов в области химии, объединяющий как ресурсы для решения входящих заданий в средах gLite, Unicore, Globus, так и пользовательские интерфейсы к этим распределенным средам для решения исходящих задач.

ЛИТЕРАТУРА:

1. Варламов Д.А., Волохов В.М., Пивушков А.В., Сурков Н.Ф., Покатович Г.А. Распределенные и параллельные вычисления в области химии на ресурсном узле ГРИД ИПХФ РАН // “Distributed Computing and Grid-Technologies in Science and Education: Extended Proceedings of the 3rd Intern.Conf.” (Dubna, June 30-July 4, 2008). – Dubna: JINR, 2008, с.127-130
2. В.М. Волохов, Д.А. Варламов, А.В. Пивушков, Н.Ф. Сурков, Г.А. Покатович ГРИД и вычислительная химия // "Вычислительные методы и программирование", М.: МГУ, 2009, т.10, № 2, с.78-88
3. В.М. Волохов, Д.А. Варламов, А.В. Пивушков Крупномасштабные задачи химии на параллельных и распределенных вычислительных полигонах: современное состояние и перспективы // “Научный сервис в сети Интернет: решение больших задач», Всероссийская научная конференция, (г. Новороссийск, 22-27 сентября 2008) – М.; Изд-во МГУ, 468 с., с.210-212

4. Волохов В.М., Варламов Д.А., Пивушков А.В., Покатович Г.А., Сурков Н.Ф. Технологии ГРИД в вычислительной химии // "Вычислительные методы и программирование", М.: МГУ, 2010, т.11, № 1, с.42-49