

Вычислительная химия и GRID: история, достижения, перспективы



Институт проблем химической физики, Черноголовка

Волохов Вадим Маркович

Варламов Д.А., Волохов А.В., Пивушков А.В., Покатович Г.А., Прохоров А.И.

Химия – наука о веществах, т.е. о мире, в котором мы живем

Потребители: наука, индустрия
Заказчики: бизнес + государство

Производство новых и модифицированных материалов

Новые и улучшенные технологии производства материалов

Промышленные
параметры реакций

Свойства новых и
улучшенных
материалов

Оптимизация материалов и
наноструктур

Константы скоростей реакций

Квантово-динамические и молекулярно-динамические
исследования

**Квантово-химические расчеты: электронная структура молекул,
потенциалы взаимодействия, строение вещества**

Вычислительная химия – ненасытный потребитель вычислительных ресурсов

1. Первые две научные задачи, использовавшие петафлопсную производительность – это задачи вычислительной химии: расчеты электронной структуры высокотемпературных сверхпроводников и исследования эффекта магнито-сопротивления в наночастицах (метод Monte-Carlo) – “Jaguar”, Oak Ridge, США – 1,64 Pf;
2. Примеры ресурсных требований: исследования свойств воды в низкоразмерных системах - до $8 \cdot 10^6$ CPU(core)-часов (Argonne National Laboratory); исследования химических катализаторов – до $30 \cdot 10^6$ CPU-часов в год – “Jaguar”, 2010;
3. Типичный FULL docking белковых лигандов: 200 атомов x 300 000 конфигураций x 1000 core-часов – более **300 Pflops!!!**
4. Большинство суперкомпьютерных центров США (San Diego, Ohio, Urbana-Illinois etc.) предоставляют до **40%** вычислительных мощностей для нужд биохимии, молекулярного моделирования, квантовой химии, нанотехнологических расчетов

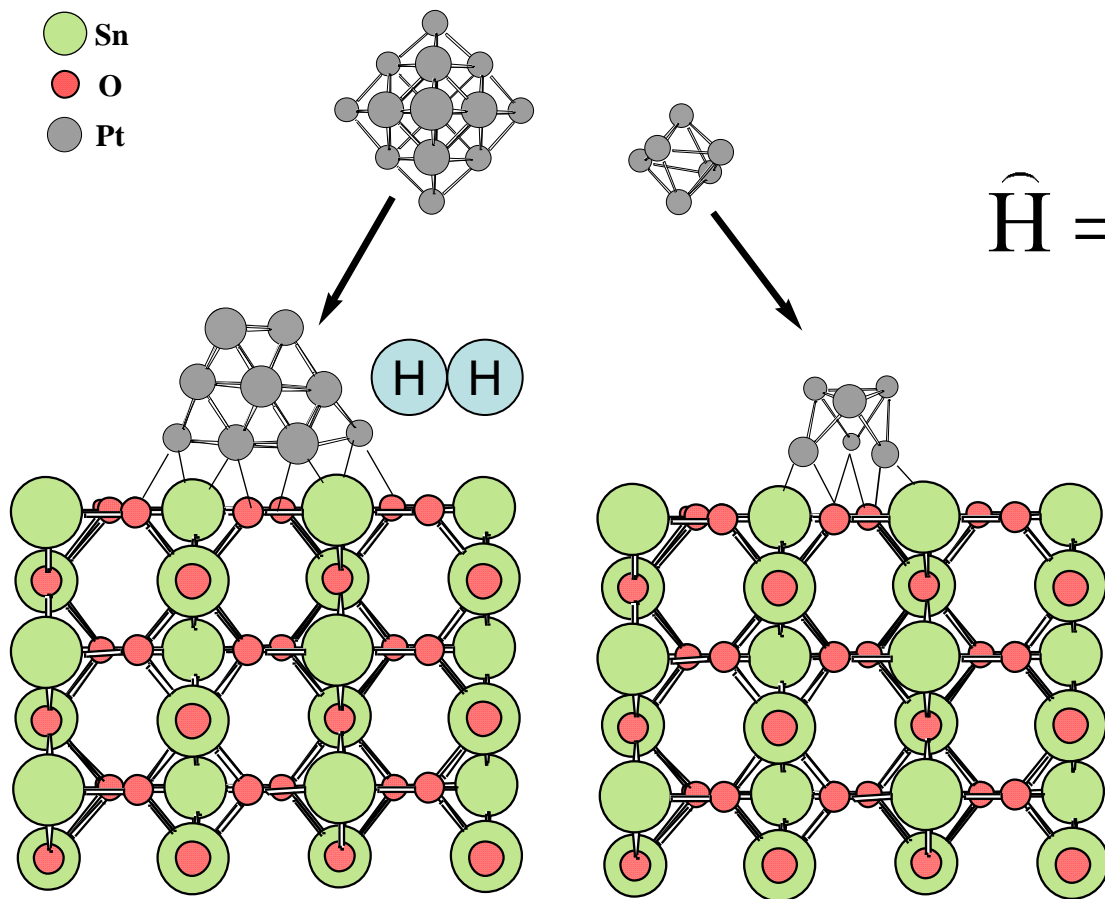
Суперкомпьютерные центры, специализирующиеся на квантово-химических и молекулярно-динамических расчетах

1. The EPSRC (Engineering and Physical Sciences Research Council), UK служба National Service for Computational Chemistry Software, Великобритания, <http://www.nscs.ac.uk> – >250 Tflops
2. The National Resource for Biomedical and Chemistry Supercomputing (NRBSC, <http://www.nrbsc.org>, США) – расчет молекулярных систем от 20000 до 120000 атомов, обеспечивает доступ внешних пользователей к вычислительным ресурсам до 100 000 CPU-часов на структуру;
3. Chemical Computing Group (<http://www.chemcomp.com>), Квебек, Канада – >120 Tflops
4. Lawrence Berkeley National Laboratory (США, <http://www.lbl.gov/csd>), подразделение вычислительной химии – > 450 Tflops;
5. Lehrstuhl für Theoretische Chemie der Technische Universität München, Мюнхен, Германия (<http://www.lrz.de/services/software/chemie>) – собственный Linux кластер (>96 Tflops) плюс постоянно выделенные ресурсы Supercomputer Center;
6. Swiss National Supercomputing Centre (<http://www.cscs.ch>) – для химических расчетов выделены ресурсы от десятков Tflops до суб Pflops

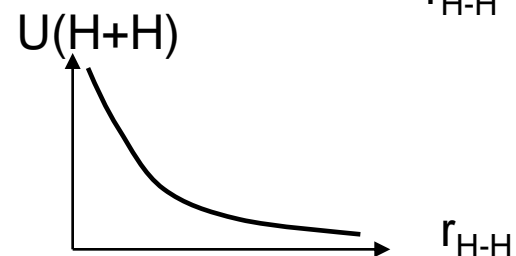
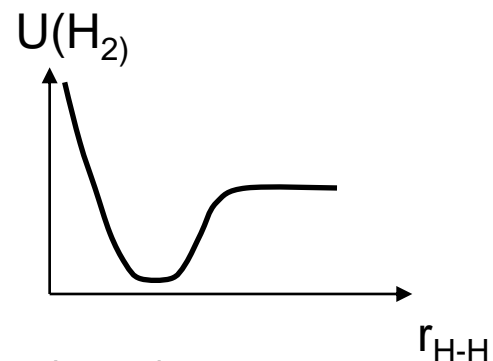
Квантово-химические ресурсоемкие расчеты (ИПХФ РАН)

Исследование каталитического распада H_2 на нанокластере Pt на поверхности кристалла SnO_2

● Sn
● O
● Pt

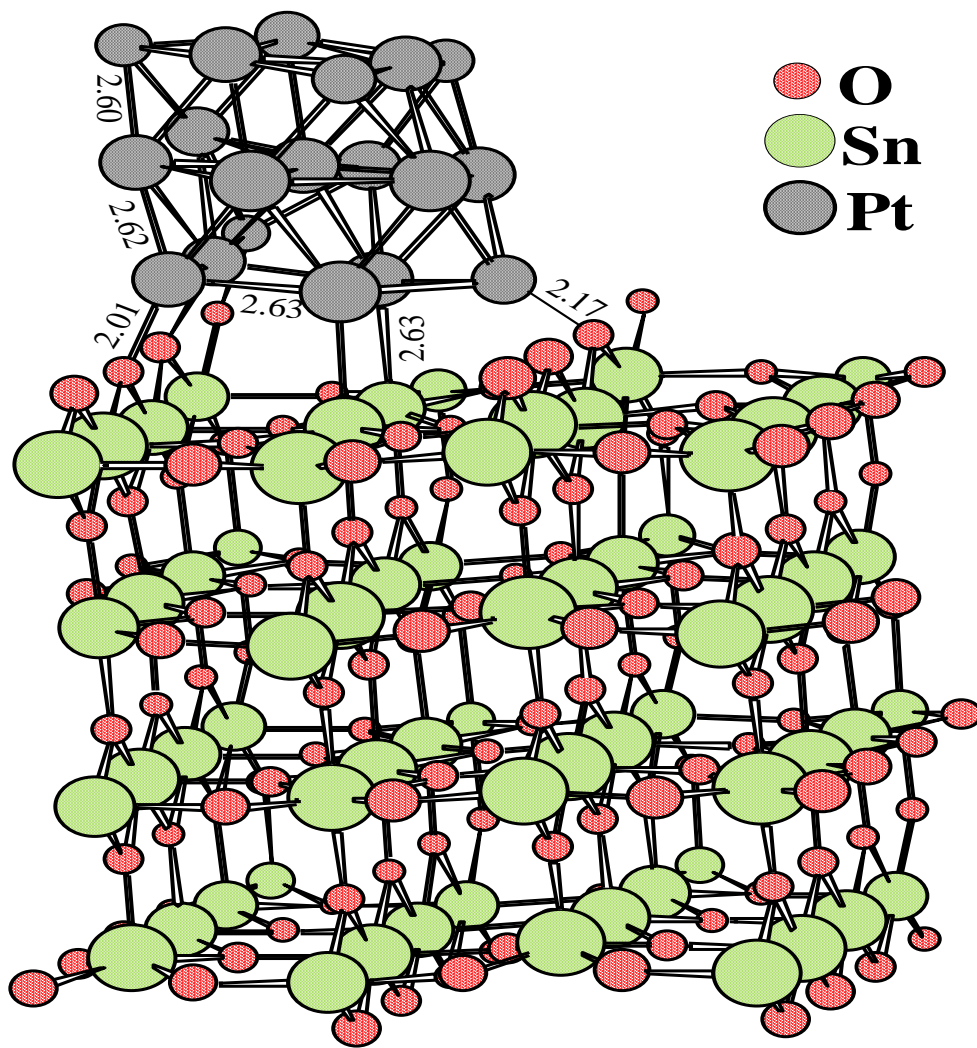


$$\hat{H} = \begin{vmatrix} U(H_2) & ? \\ ? & U(H+H) \end{vmatrix}$$



«Чебышев»: **VASP**, 200 CPU, 15 часов, 10 шагов оптимизации, требуется реально - 100-200 шагов

Структура кластера Pt₁₉ на поверхности SnO₂ (расстояния в Å)



И.1
-7.23

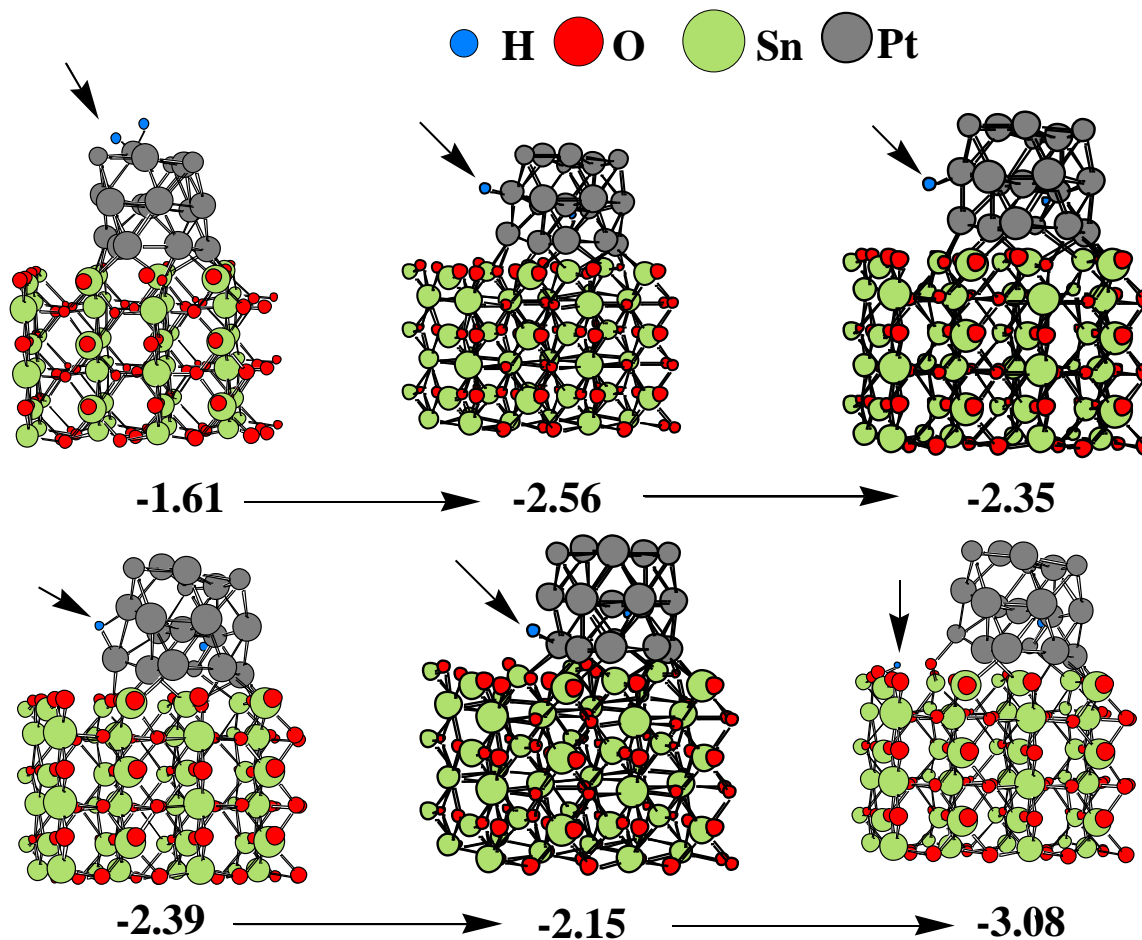
Использован комплекс VASP, предназначенный для проведения расчетов с учетом трансляционной симметрии. Для каждой точки расчета необходимо более, чем сутки работы на 100 процессорах. на ВЦ МГУ. Необходимое количество точек – более сотни.

Прикладной пакет VASP –

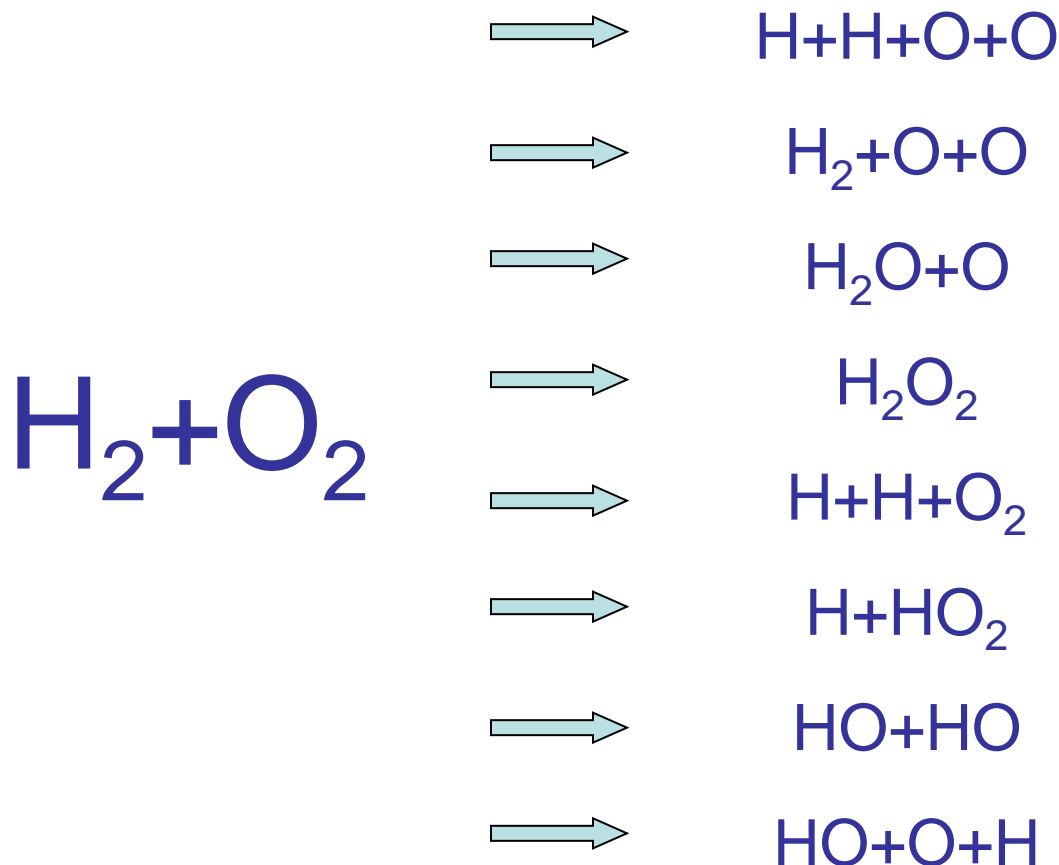
проведение расчетов с учетом эффектов трансляционной симметрии.

Для каждой точки необходимы первые дни расчета на 100 CPU, для требуемого количества точек - **более сотни дней**

Динамика миграции протона на поверхности кластера Pt₁₉



Траекторные расчеты сечений химических реакций



$$\Sigma = S_n / N$$

Начальные условия:

- 4 угла взаимной ориентации
- прицельный параметр
- 2 квантовых колебательных числа
- 2 квантовых вращательных числа
- энергия столкновения
(в системе ц.м.)

Всего 1-10 миллионов независимых траекторий – не менее $2 \cdot 10^6$ CPU часов

Химическая реакция моделируется движением системы по потенциальной поверхности, полученной в результате квантово-химического *ab initio* расчета

Важно №1!

- Для построения многомерных потенциальных поверхностей, адекватно описывающих химические реакции, нужно провести $10^2 - 10^{\text{много}}$ **независимых** *ab initio* расчетов
- Для исследования динамики химической реакции с использованием классических траекторий нужно рассчитать до 10^9 **независимых** траекторий
- Для численного исследования функции $F(x_1, x_2, \dots, x_n)$ в области изменения параметров x_1, x_2, \dots, x_n при разбиении диапазона изменения каждого параметра на 10 ячеек нужно провести 10^n **независимых** расчетов F

Вывод №1

- **Независимые** расчеты можно проводить на географически распределенных ресурсах, т.е. в **GRID** средах
- Необходимо разработать технологию запуска **множества** параллельных приложений на удаленных ресурсах

Важно №2

Для многих новейших релизов квантово-химических пакетов нельзя сформировать статический вариант исполняемого приложения, т.к. необходимо динамическое подключение требуемых системных и специализированных библиотек (LaPack, BLAS, MPI), баз данных и других специфических ресурсов на удаленном ресурсном сайте, чего на непрофильных для химии кластерах может не быть

Вывод №2

Необходимо разработать технологию запуска параллельных приложений на удаленном ресурсе без предварительной установки его и его вычислительного окружения.

Развитие GRID технологий в ИПХФ РАН

2004 - 2007 г. Condor, X-Com

2005 - 2007 г. Globus 3/4

2006 - 2010 г. LCG-2 – gLite (EGEE-RDIG→EGI-[RU-NGI])

2008 - ... Unicore (SKIF Polygon)

2010 - Globus Toolkit 4/5 (GridNNN)

**Квантово-химические приложения,
адаптированные для работы в GRID средах**

Gaussian 03

GAMESS US, Firefly

CPMD

Dalton 2012

NAMD

NWChem

Abinit

GROMACS

VASP

PWScf

- и прочие (LAMMPS, OpenMX и др.);
- авторские программы – например, исследования туннельных свойств гетерогенных структур (нестационарные уравнения Шредингера)

Предложенные к разработке технологии

1. Создание и управление «пулами» («пучками») грид-заданий для работы с большими задачами на равномерных «сетках» данных или параметров (с использованием многопараметрических задач или прикладных пакетов типа GAMESS). Они могут быть представлены в виде объединения большого количества параллельно выполняемых независимых друг от друга задач;
2. «Виртуализация» грид-приложений и использование динамически формируемых «вычислителей» (контейнеров);
3. Технология создания и поддержки виртуальных машин (**VM**) для размещения управляющих и сетевых сервисов ресурсных сайтов грид-полигонов
4. Использование графических высокопроизводительных видеоадаптеров (**GPU**) для значительного повышения эффективности параллельных расчетов в областях квантовой химии и молекулярной динамики

Схема GRID вычислений с использованием высокоуровневого интерфейса для ППП (middleware GridNNN, gLite, Unicore)



Высокоуровневый Web-интерфейс для формирования «пулов» многопараметрических грид-заданий

Остальные параметры

File Edit Vi

http://grid.icp.ac.ru/portal2/login3_3.php

Home My Netscape Search Customize...

Netscape Enter Search Terms Search Highlight Pop-Ups Blocked: 46 Form Fill Clear Browser History News Email Weather

New Tab Остальные параметры

Инструкция пользователя

Класс решаемых задач

Анкета пользователя

Войти

Работа с файлами

Загрузка файлов

Формирование задания

Подготовка данных задания

Параметры области расчёта

Остальные параметры

Введите значения параметров:

n1	0
n2	1
n3	1
n4	0
n5	1
n6	1
n7	0
n8	7
n9	7.1
n10	14.1
n11	2.d-2
n12	1.d-3
n13	2
n14	0
n15	1
n16	1
n17	1000

Пояснения:

- Порядок следования первых нескольких групп по три параметра должен строго соответствовать введённому ранее шаблону разбиения расчетной области, т.е. *нижнее значение*[1] *верхнее значение*[1] *шаг*[1] *нижнее значение*[2] *верхнее значение*[2] *шаг*[2]
- Порядок следования прочих параметров определяется пользователем
- В генерируемом файле данных на каждой строке размещается строго один параметр
- Для ввода больших массивов рекомендуется использовать собственные файлы данных, которые следует загружать на сервер

Пуск T. K. H. I. O. D. O. v. C. G. EN 12:06

Схема GRID вычислений по технологии генерации и управления «пулами» заданий (middleware GridNNN, gLite, Unicore)

Сертифицированный пользователь



Прокси сертификат

Входные данные

Результаты, логи

ИКС или Web интерфейс (ПОИ, ВИГ)

Авторизация и сертификация

Загрузка, редакция, хранение входных данных

Генерация пула грид-заданий по сетке, запись в БД

Параллельный, асинхронный запуск заданий

Мониторинг выполнения с использованием БД

Возврат результатов

Формирование окончательных результатов

10^4-10^7 заданий

Инфраструктура грид-полигона

Шлюзы ресурсов

Шлюзы ресурсов

Пул ресурсных сайтов

Запуск параллельных приложений на удаленном ресурсе без предварительной установки его и его вычислительного окружения: метод «виртуального контейнера»

Создается объект - «виртуальный контейнер», включающий в себя:

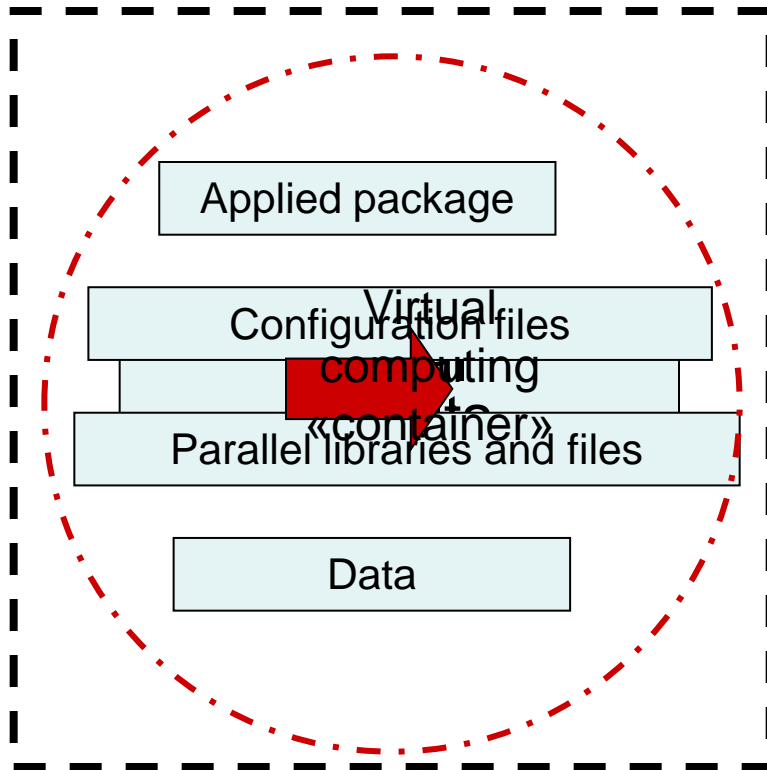
- адаптированный прикладной программный пакет (ППП);
- скрипты развертывания, устанавливающие на удаленном ресурсе сам ППП и создающие для него требуемое вычислительное окружение;
- параллельные библиотеки: варианты MPI;
- Специализированные библиотеки: Lараск, BLAS и др.;
- конфигурационные файлы и файлы входных данных.

Объект запаковывается – ориентировочный объем 10-20 Mb (GAMESS, NAMD).

Объект запускается в среду GRID в качестве единого задания

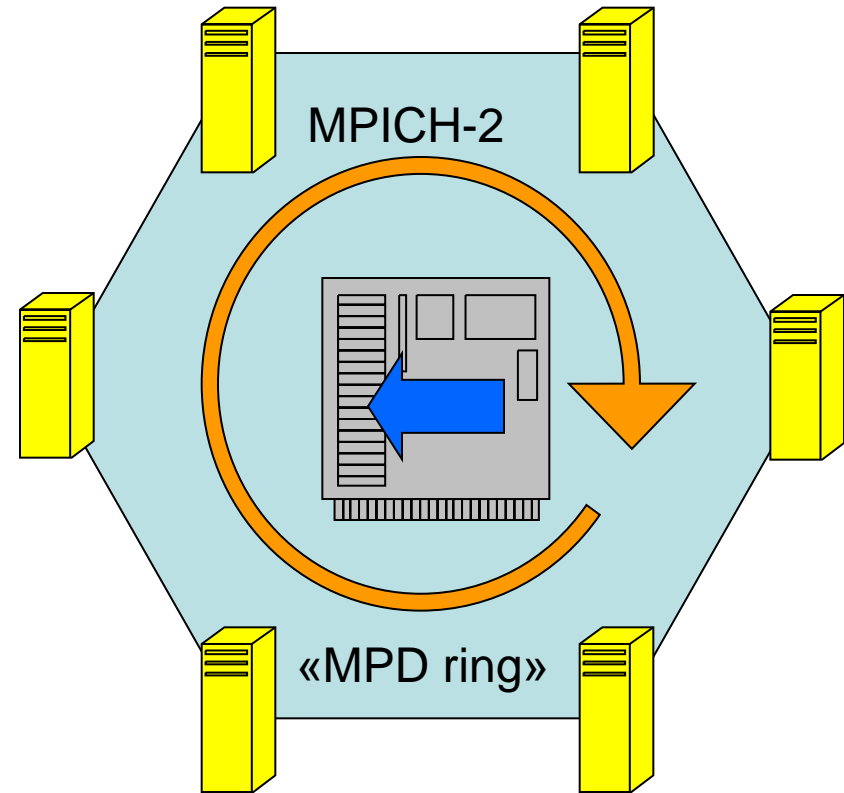
Создание и старт «виртуального контейнера в GRID среде

GECP WWW-portal
<http://grid.icp.ac.ru>



GRID environmnt: (gLite, Unicore, Globus)

Non-customised Linux cluster



Созданы Web-интерфейсы

(<http://nanogrid.icp.ac.ru> , <http://webgrid.icp.ac.ru> – грид-порталы ИПХФ) для работы с квантово-химическими прикладными пакетами **GAMESS-US, Gaussian, NAMD, NWChem, PWscf** в виртуальных организациях **ГридННС** и пилотной зоны российской грид-системы для **высокопроизводительных вычислений**

Дружелюбные конечному пользователю (исследователю) Web-интерфейсы к прикладным программным пакетам значительно снижают трудоемкость работы пользователя с подобными пакетами в условиях распределенных вычислительных сред.

Созданные интерфейсы позволяют пользователю работать через Интернет-браузер и осуществлять следующие действия:

- авторизовать пользователя для запуска комплекса и проводить его сертификацию в виртуальной организации;
- подготовить задание (включая создание и редакцию начальных данных и конфигурационных файлов) в соответствии с требованиями пакета;
- запустить прикладной пакет в инфраструктуре грид-полигона (при необходимости – на произвольном или избранном GRID ресурсе);
- вести мониторинг выполнения задания (включая останов и перезапуск);
- по завершении – получить результаты счета.

Пример модуля web интерфейса для ППП GAMESS (для запуска и редактирования файла данных)

Пользователь: griduser

- Главная
- Инструкция пользователя
- Класс решаемых задач
- Выбрать приложение
- Выбрать проект
- Работа с файлами**
- Подготовка данных
- Запуск задания

Информация
Файл rungmss02onnns.sh успешно загружен.

ППП GAMESS -> Проект demo2 -> Файлы

Удалить	Наименование	Размер(байты)	Дата	Просмотр	
<input checked="" type="checkbox"/>	rungmss02onnns.js	505	13.10.2011 16:19:21	как текст	Скачать
<input checked="" type="checkbox"/>	exam01.inp	1 137	13.10.2011 16:21:50	как текст	Скачать
<input checked="" type="checkbox"/>	rungmss02onnns.sh	4 467	13.10.2011 16:22:56	как текст	Скачать

Загрузка файла
Выберите файл для загрузки:
Введите его новое имя (если необходимо):

https://nanogrid.icp.ac.ru/viewastext.php?f=rungmss02onnns.sh

Модуль web интерфейса для подготовки файла данных и конфигурационных файлов для ППП GAMESS-US для запуска в GRID

Адрес: http://grid.icp.ac.ru/portai/inputaocv.php

Институт проб... GRID Enabled ... GRID Enabled ... Инструкция по... Класс решаем... Работа с файл... Войти Выбор проекта Выбор групп Институт проб... Институт проб... Институт проб... Институт проб... Институт проб...

GRID Enabled Chemical Physics (GECIP)

Пользователь: griduser

- Главная
- Инструкция пользователя
- Класс решаемых задач
- Анкета пользователя
- Выбрать приложение
- Выбрать проект
- Работа с файлами
- Подготовка данных**
- Запуск задания

This page with the following input strictly corresponds to GAMESS User's Guide as prepared at Department of Chemistry Iowa State University Ames (IA 50011) (revised 10 Mar 2006).

The order of this section is chosen to approximate the order in which most people prepare their input (\$CONTROL, \$BASIS/\$DATA, \$GUESS, and so on). After that comes run type related input, then properties input, input for two different solvation models, integral related input, and finally CI/MCSCF input. Further this page contains a list of all possible input groups, in the order in which they can be found in this section.

Name	Function	To Group Page
Molecule, basis, wavefunction specification:		
CONTRL	chemical control data	Go
Potential energy surface options:		
STATPT	geometry search control	Go
Interpretation, properties:		
LOCAL	localized molecular orbitals	Go
Solvation models:		
EFRAG	effective fragment potentials	Go
Integral and integral modification options:		
ECP	effective fragment potentials	Go
Fragment Molecular Orbital method:		
FMO	define FMO fragments	Go
MCSCF and CI wavefunctions, and their properties:		
CIINP	control over CI calculation	Go

You may Preview/Edit generated Input File or Save it with proper name.

Preview Save as

Input Philosophy

4 192.168.1.245 0 байт 1494М 14

пуск Т. В. Т. I. 7. п. I. N H 3. Адрес: EN 15:51

Модуль web интерфейса для выбора ресурсов ППП GAMESS-US для запуска в GRID

The screenshot shows a Mozilla Firefox browser window displaying the 'Список ресурсов' (Resource List) page. The browser's address bar shows the URL 'https://nanogrid.icp.ac.ru/jobrun3.php'. The page header includes the title 'Ресурсный центр ИПХФ РАН ГридННС' and the user name 'Пользователь: griduser'. A left-hand navigation menu contains several items, with 'Доступные ресурсы' (Available Resources) highlighted in green. The main content area is titled 'ППП GAMESS -> Проект demo2 -> Список доступных ресурсов' and lists five available resources. Below this, a section titled 'Список ресурсов с заявленным ППП GAMESS:' lists two resources. At the bottom, there is a form with a dropdown menu set to 'nmsgw.icp.ac.ru/PBS-batch' and a 'Запуск' (Launch) button. The footer of the page contains copyright information: 'copyright © 2011 Отдел вычислительных и информационных ресурсов ИПХФ РАН'.

Список ресурсов - Mozilla Firefox

Файл Правка Вид Журнал Закладки Инструменты Справка

Список ресурсов x Мониторинг и учет :: Ресу... x Новая вкладка

icp.ac.ru https://nanogrid.icp.ac.ru/jobrun3.php

SMS Translate LOR OpenNet KinoClub Fallout extech.ru RAS other HHC

Ресурсный центр ИПХФ РАН ГридННС

Пользователь: griduser

Главная

Инструкция пользователя

Класс решаемых задач

Выбрать приложение

Выбрать проект

Работа с файлами

Запуск задания

Работа с сертификатами

Доступные ресурсы

ППП GAMESS -> Проект demo2 -> Список доступных ресурсов

- tb06.ngrid.ru/Cleo-main
- hp-cl.escience.ifmo.ru/PBS-batch
- gt6.phys.spbu.ru/PBS-unic
- tb06.ngrid.ru/Cleo-mvapich
- nmsgw.icp.ac.ru/PBS-batch

Список ресурсов с заявленным ППП GAMESS:

- hp-cl.escience.ifmo.ru
- nmsgw.icp.ac.ru

Выберите ресурс : nmsgw.icp.ac.ru/PBS-batch Запуск

copyright © 2011 Отдел вычислительных и информационных ресурсов ИПХФ РАН ВБЕРХ

[SSecretar - Thunderbird] rukovodstvoProgrammista... Список ресурсов - Mozilla ... [Terminal]

Модуль web интерфейса для мониторинга работы ППП GAMESS-US в GRID среде

Статус задания - Mozilla Firefox

Файл Правка Вид Журнал Закладки Инструменты Справка

Статус задания

icp.ac.ru https://nanogrid.icp.ac.ru/jobrun5.php

Arcanum

SMS Translate LOR OpenNet KinoClub Fallout extech.ru RAS other NHC

Ресурсный центр ИГХФ РАН ГридННС

Пользователь: griduser

- Главная
- Инструкция пользователя
- Класс решаемых задач
- Выбрать приложение
- Выбрать проект
- Работа с файлами
- Подготовка данных
- Запуск задания
- Работа с сертификатами
- Доступные ресурсы
- Статус заданий**

ППП GAMESS -> Текущий проект demo2

Задания пользователя (по всем проектам и ППП)

Refresh

ППП	Проект	URI задания	Удалить	Статус задания	Результат	X
GAUSSIAN	demoGAUSSIAN	https://tb01.ngrid.ru:5053/jobs/uRzwfeoT/	<input type="checkbox"/>	Выполняется	<input type="checkbox"/>	
GAMESS	demo2	https://tb01.ngrid.ru:5053/jobs/xxvtb6p9/		Завершено успешно	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
GAMESS	demo2	https://tb01.ngrid.ru:5053/jobs/WlRqWxoR/		Завершено успешно	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>

copyright © 2011 Отдел вычислительных и информационных ресурсов ИГХФ РАН

ВВЕРХ

Англ

Пт., 14 окт., 00:39

Виртуализация грид-ресурсов

Физические узлы (1-2) с установленным гипервизором KVM

Изолированные друг от друга Виртуальные Машины (до 4-5 на 1-й физической)

Сетевые и управляющие
грид-сервисы

Ресурсный сайт
ГРИД-среды 1

Ресурсные сайты
ГРИД-сред 2, 3, ...

Грид-кластер

ОС Scientific Linux 5.4
менеджер заданий
PBS/Torque
(3 экземпляра)



Прикладное ПО

- GAMESS-US
- Gaussian-03
- NAMD-2
- PWscf
- CPMD
- Dalton-2

УЧАСТИЕ ИПХФ В ГРИД-ПРОЕКТАХ

Федеральные целевые программы

1. Государственный контракт № 07.514.11.4019 от 23 сентября 2011 г. с ИПХФ РАН в рамках ФЦП «Исследования и разработки по приоритетным направлениям развития научно-технологического комплекса России на 2007-2013 годы» по теме «Разработка технологии проведения высокопроизводительных расчетов в области вычислительной химии в различных распределенных средах с применением методов виртуализации приложений и ресурсов» – основной исполнитель
2. ФЦП "Развитие инфраструктуры наноиндустрии в Российской Федерации на 2008-2011 годы", проект «Создание Национальной нанотехнологической сети (ГридННС)», государственный контракт № 16.647.12.2031 от 13.05.2011 г. – соисполнитель

Федеральные целевые программы (продолжение)

3. Государственный контракт в рамках ФЦП на тему «Развитие пилотной зоны российской грид-системы для высокопроизводительных вычислений, в том числе в интересах федеральных ядерных центров», тематика: «Адаптация пакетов прикладных программ для работы в пилотной инфраструктуре грид-системы. Разработка методов проведения грид-вычислений с использованием динамически формируемых сред исполнения грид-заданий» – соисполнитель
4. Государственный контракт в рамках ФЦП на тему «Использование суперкомпьютеров и распределенных вычислительных сред для проведения научных исследований коллективами научно-образовательного центра и научно-исследовательских лабораторий Института в области компьютерного моделирования стабильности, каталитических и транспортных свойств композитных наноструктурированных электрокатализаторов на основе благородных металлов и полупроводниковых оксидов и подготовка высококвалифицированных специалистов»

Программы фундаментальных исследований Президиума РАН

1. Программа № 13 фундаментальных исследований Президиума РАН на 2004-2012 годы «Проблемы создания национальной научной распределенной информационно-вычислительной среды на основе развития GRID технологий и современных телекоммуникационных сетей», проект «Исследование методов виртуализации вычислительных сред и приложений в области вычислительной химии. Динамическое формирование параллельных программных сред на распределенных ресурсах»;
2. Программа № 27 фундаментальных исследований Президиума РАН на 2009-2012 годы «Основы фундаментальных исследований наноматериалов», проект «Самоорганизация наноразмерных материалов и процессы их взаимодействия с адсорбируемыми соединениями: компьютерное моделирование в параллельных и распределенных GRID средах терафлопного уровня»

Гранты Российского Фонда фундаментальных исследований

1. Грант РФФИ № 11-07-00686-а «Разработка методов динамического формирования параллельных вычислительных сред на различных типах грид ресурсов (на примере приложений квантовой химии)»

Участие ИПХФ в работе полигона EGEE-RDIG (2005-2010)

Описанные выше технологические разработки: методы «пучков» и «виртуальный контейнер» были впервые созданы и опробованы в рамках виртуальной организации **Rgstest** на полигоне **EGEE-RDIG** (сейчас **EGI-[RU-NGI]** – **European Grid Infrastructure**, российский сегмент) .

Rgstest в течении ряда лет был прекрасной площадкой для проведения технологических разработок и их тестирования, предоставляя до 400-500 CPU и 8-10 Тб на основе middleware LCG2/gLite.

В настоящее время таких общедоступных площадок нет, что создает серьезные проблемы для разработчиков.

ИПХФ приступает к созданию своей площадки, но ввиду ограниченности ресурсов сторонних пользователей не будет.

ВЫВОД: GRID сообщество должно озаботиться созданием такого ресурса общего пользования.

**Научно-техническая программа Союзного государства
РФ-РБ 2007-2010 годы, "Разработка и использование
программно-аппаратных средств Грид-технологий
перспективных высокопроизводительных
(суперкомпьютерных) вычислительных систем
семейства "СКИФ"**

Был создан Ресурсный сайт СКИФ-Полигона (категория «А»)
на базе Unicore 6.2 Middleware

Обеспечен доступ (на время проекта) к 10-12 ресурсам (ИПС
РАН, Cyberia Томск, СевКазГУ, Нижегородский ГУ – всего
до 120 CPU)

Адаптированы квантово-химические пакеты, апробированы
все разработанные технологии («пучки», «контейнеры»,
виртуализация ресурсов и приложений)

Национальная Нанотехнологическая Сеть и Виртуальные Организации (VO) в области вычислительной химии

ИПХФ созданы и поддерживаются 3 Виртуальные организации "NanoChem", "Games", "Gaussian" для нужд вычислительной химии (<http://nanogrid.icp.ac.ru/virtual.php>, <http://ngrid.ru/ngrid/gridnnn/volist>)

Участники ГридННС

- НИВЦ МГУ («Чебышев»)
 - НИИЯФ МГУ
 - ОИЯИ (Дубна)
 - РНЦ «Курчатовский Институт»
 - Казанский НЦ РАН
 - ПИЯФ
 - **ИПХФ РАН**
 - ИМСС УрО РАН (Пермь)
 - СПбГУ
 - ВЦ ДВО РАН (Хабаровск)
 - СПИИРАН
- и другие ВУЗы, НИИ РАН, инновационные и коммерческие предприятия

Пул ресурсов

До 10000 CPU, 40-50 Tflops,

Квантово-химические пакеты (VO)

- Gaussian 03
- GAMESS US, Firefly
- CPMD
- Dalton 2012
- NAMD
- NWChem
- Abinit
- GROMACS
- VASP
- PWScf

Апробированы все разработанные технологии

Необходимо создавать Российский GRID в области вычислительной химии

Причины:

1. Вычислительная химия предъявляет высокие требования к аппаратно-программному оснащению GRID ресурсов: RAM на ядро > 4 Gb, HDD на узел > 1 Tb, специализированные библиотеки и компиляторы.
2. Непрофильные GRID ресурсы некомпетентны в области организации квантово-химических и молекулярно-динамических расчетов.
3. Только устойчиво и долговременно работающая химическая ВО может привлечь пользователей, погрязших в выполнении краткосрочных грантов.

Глобальные трудности создания Российского GRID

- Неготовность исследователей (отвечаю за химиков) к постановке и решению масштабных задач, требующих GRID вычислений;
- Отсутствие стратегических заказчиков в лице государства и бизнеса. Не путать с хорошо финансируемыми, но краткосрочными проектами.

Деньги нужны для постоянной поддержки GRID
ПОЛИГОНОВ

Наше представление о путях решения проблем

Государственная политика стимулирования создания и поддержки GRID ресурсов

- Финансирование долгосрочных программ создания и постоянной поддержки GRID полигонов (суперкомпьютеры, кластеры средних масштабов, высокоскоростные каналы связи и т.п.);
- В области образования:
 - подготовка специалистов в области GRID технологий
 - обучение инженеров, химиков, физиков и т.д. основам GRID технологий
- Стимулирование разработки отечественного прикладного ПО;

Выводы

В ИПХФ РАН разрабатывается ряд вычислительных грид-технологий, направленных на увеличение эффективности проведения расчетов в области вычислительной химии в грид-средах. Введение подобных технологий:

- Существенно ускоряет проведение квантово-химических расчетов и их масштабируемость
- повышает эффективность использования грид-ресурсов
- упрощает их администрирование
- значительно повышает надежность управляющих узлов
- понижает расходы на поддержку грид-инфраструктуры.

Разрабатываемые технологии защищены в качестве основных компонентов объекта интеллектуальной собственности **«Специализированный проблемно-ориентированный пакет вычислительных сервисов различного уровня для решения задач вычислительной и квантовой химии в распределённых сетях ГРИД»**, авторское свидетельство №

Заключение

В рамках Ресурсного GRID Центра ИПХФ, интегрированного в ряд российских грид-полигонов, обеспечен доступ через низкоуровневые и проблемно-ориентированные высокоуровневые веб-интерфейсы к ряду квантово-химических и молекулярно-динамических прикладных пакетов для проведения интенсивных вычислений в области химии.

СПАСИБО ЗА ВНИМАНИЕ