

# GRID и вычислительная химия

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

В ИПХФ РАН создан и эксплуатируется ресурсный GRID центр, включающий узлы на основе middleware gLite и Unicore, разработаны прикладные программные интерфейсы различного уровня для запуска в распределённой вычислительной среде однопроцессорных и параллельных приложений в области вычислительной химии. Создан метод подготовки широкого класса задач вычислительной химии, включающий технику подготовки, формирования параллельных «пучков» задач, их запуска на распределённых ресурсах и последующей «сборки» результатов. Для многопараметрических задач и пакета GAMESS реализованы пользовательские WWW интерфейсы в составе Web портала GECF (Grid Enabled Chemical Physics, <http://grid.icp.ac.ru>).

## 1. Введение

Современное мировое состояние вычислительной химии характеризуется использованием мощных параллельных и распределённых вычислительных ресурсов для решения задач различных классов. Вычислительная и квантовая химия являются одними из наиболее заинтересованных в GRID вычислениях отраслями науки.

Для проведения крупномасштабных вычислений в области вычислительной и квантовой химии и сопряженных областей (газодинамики экстремальных состояний, моделирования сложных биологических систем, строения вещества, нанотехнологий, разработки новых лекарственных препаратов и т.п.) требуется проведение высокоинтенсивных параллельных и распределённых расчетов. Такие расчеты требуют вычислительных ресурсов, которых не может предоставить ни один из доступных вычислительных центров. Например, некоторые задачи оптимизации молекулярных структур требуют выполнения до  $10^9$  отдельных расчетов. Для подобных задач представляется весьма перспективным развитие и применение технологий GRID в области вычислительной и квантовой химии для организации распределённых, параллельных вычислений.

Крупномасштабные квантово-химические расчеты – одно из основных научных направлений ИПХФ РАН [1,2]. Эти расчеты выполняются с использованием авторских программ, пакетов ПО распространяемых на условиях "open source" (CPMD, Dalton-2, GAMESS-US, NAMD, ABINIT и др.), а также лицензионных программ (Gaussian-98,-03, Morac2002, MolPro). Институт располагает богатейшей в России и постоянно пополняемой библиотекой параллельных квантово-химических и молекулярно-динамических программ. Несколько лет в ИПХФ функционирует ресурсный GRID центр, объединяющий узлы двух распределённых сетей. Работы с системами распределённых и параллельных вычислений в ИПХФ РАН проводились в 2005-2007 гг. в рамках программы № 21 фундаментальных исследований Президиума РАН «Разработка фундаментальных основ создания научной распределённой информационно-вычислительной среды на основе технологий GRID», в 2005-м году в рамках Федеральной целевой научно-технической программы "Исследования и разработки по приоритетным направлениям развития науки и техники" по проекту "Создание комплекса пакетов прикладных программ для моделирования сложных научных и промышленных задач на суперкомпьютерных системах терафлопного уровня и в распределённых вычислительных средах", а также с 2007 года в рамках программы Союзного Государства «СКИФ-GRID».

Основными задачами авторов в последние годы (2005-2008) стало развитие двух основных направлений, позволяющих говорить о создании российского сегмента GRID в области вычислительной химии. Эти направления включают: 1) адаптацию наиболее востребованного российскими пользователями прикладного ПО в области вычислительной (прежде всего квантовой) химии к работе в GRID инфраструктуре и обеспечение широкого доступа пользователей к работе с ними с использованием самых различных методов и технологий; 2) построение и развитие достаточно мощного ресурсного узла GRID, основанного на международных стандартах и выступающего как в роли опытного полигона для проведения вычислительных экспериментов в данной области, так и в роли средства для решения реальных фундаментальных и научно-практических задач.

Выбор данных направлений был обусловлен стратегией развития инфраструктуры GRID как в России, так и в мире, и позволяет наилучшим образом «приблизить» конечного пользователя (прежде всего – ученого-химика) к широкомасштабному использованию распределенных вычислительных ресурсов и обеспечить возможность решения задач, принципиально трудно разрешимых в настоящее время на единичных вычислительных комплексах.

## 2. Основные типы и классы задач вычислительной химии

Квантово-химические расчеты являются важнейшим звеном при проведении исследований в области строения вещества, наноматериалов, физики твердого тела, биофизики и всех научных дисциплин, связанных с исследованием электронной структуры вещества и его строения.

В настоящее время в мире реализуется несколько проектов в области распределенных вычислений. Первый проект представлен ВО GEMS (Grid Enabled Molecular Simulator) и выполняется в рамках EGEE (<http://www.eu-egee.org>). Координационный центр находится в Перуджии (Италия). В проекте решается задача формализации и автоматизации расчета химических процессов, начиная от исследования электронной структуры и кончая получением кинетических и вероятностных характеристик процесса. Второй проект представлен порталом Nimrod (<http://messagelab.monash.edu.au/Nimrod>), специализирующимся на многопараметрическом моделировании, и решает широкий круг задач вычислительной химии, астрофизики, геофизики и т.д.

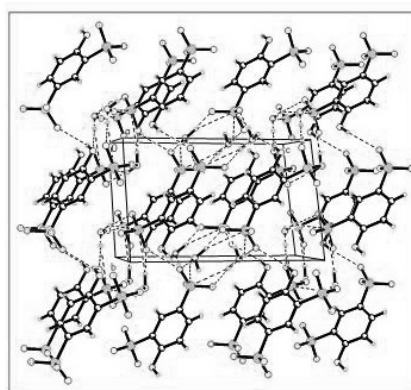
Многолетний опыт проведения подобных расчетов [3-5] позволил разделить квантово-химические задачи на два основных вычислительных типа: 1) задачи, распадающиеся на совокупность практически независимых заданий (рис. 1), 2) задачи, представляющие собой единый вычислительный процесс (рис. 2).

Характерная особенность задач первого типа состоит в том, что, распределяя независимые задания на множество небольших кластеров (каждый кластер – 10-20 процессоров, задание исполняется на нем как параллельное), можно добиться высокой эффективности использования вычислительных ресурсов. При этом возможно использование больших вычислительных полигонов (до  $10^3$  процессоров) как в едином кластере, так и в совокупности удаленных кластеров.

Задачи второго типа представляют собой существенную проблему, т.к. эффективность их решения непосредственно связана с эффективностью распараллеливания вычислительного процесса и высокими требованиями к ресурсам узла. Для программы Gaussian известно эмпирическое правило: масштабируемость пропорциональна кубическому корню из числа процессоров. Для программы GAMESS масштабируемость существенно лучше и для нескольких десятков процессоров остается практически линейной. Для характерных задач исследования наноструктур и молекулярных кристаллов необходимо несколько тысяч процессоров и процессорное время порядка месяца, причем желательно использование кластеров терафлопного уровня.



А – изолированная молекула



Б – наноструктура

Рис.1 Исследование протонной проводимости в наноматериале, используемом для производства мембран твердых топливных элементов. Использовались программы GAMESS и GAUSSIAN-D03. Одна точка расчета энергии протона на пути миграции (А, размытая линия) требует около месяца расчетного времени на 8 процессорах класса Intel ем64t Xeon 3,6 ГГц. Для расчета 500 точек в среде GRID (Б) необходимо около 4000 CPU и месяц расчетов

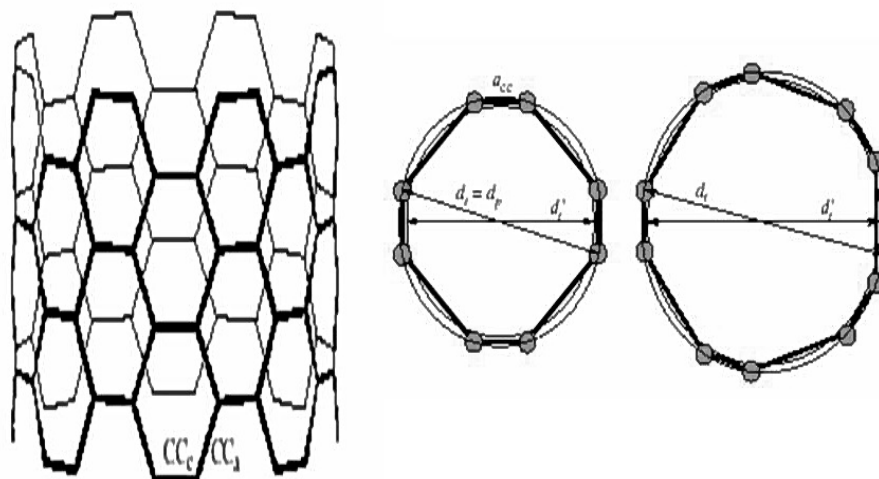


Рис.2 Расчеты нанотрубок как наноструктурных наполнителей, упрочнителей и композитов конструкционного назначения и процессов, проходящих на их поверхности. Использовались программы GAMESS и Gaussian-D03. Расчет нанотрубки (200 атомов) с атомами Pt на поверхности требует около 3-4 недель расчетного времени на 8 процессорах класса Intel EM64T Xeon 3,6 ГГц. Для расчета нанотрубки, содержащей 2000 атомов C + Pt необходим месяц времени и ориентировочно 800 подобных CPU.

### 3. Основные направления работ по применению GRID технологий в химии

#### 3.1 Адаптация стандартных пакетов ПО вычислительной химии и авторских программ к работе в распределенных средах

Нами проводилась экспериментальная проверка и апробация возможности использования ресурсов российского (а в дальнейшем и международного) GRID для реальных расчетов на стандартных пакетах прикладных программ (в том числе и параллельных), используемых в вычислительной химии, таких, как GAMESS, Gaussian, Dalton2, CPMD и других, а также различных авторских программ, разработанных в ИПХФ и НЦЧ РАН. Здесь есть проблемы как лицензионные, так и чисто технические: не каждый Институт РАН химического профиля может выделить достаточные аппаратные и программные ресурсы для обеспечения современного уровня расчетов. Особый интерес имеет возможная адаптация этих программ для распределенных вычислений на максимально доступных ресурсах российской и международной GRID инфраструктуры.

Для адаптации в распределенных вычислительных средах с использованием middleware gLite, (<http://glite.web.cern.ch/glite>) рекомендованной консорциумом EGEE-RDIG, были выбраны следующие, наиболее востребованные в ИПХФ, прикладные программные пакеты:

- **GAMESS-US** (<http://www.msg.ameslab.gov/GAMESS/>) – одна из самых популярных программ для теоретического исследования свойств химических систем, уступает по известности лишь комплексу Gaussian, позволяет рассчитывать энергию, структуры молекул, частоты их колебаний, а также разнообразные свойства молекул в газовой фазе и в растворе, как в основном, так и в возбужденных состояниях. Основное направление – развитие методов расчета сверхбольших молекулярных систем;
- **Dalton-2** (<http://www.kjemi.uio.no/software/dalton/dalton.htm>) - позволяет рассчитывать синглет-синглетные возбуждения, а также электронные структуры, вращательные и колебательные спектры молекул, учитывать релятивистские эффекты и эффект сольватации;
- **CPMD** (<http://www.cpmc.org/>) – расчеты в области молекулярной динамики;
- **NAMD** (<http://www.ks.uiuc.edu/Research/namd/>) – хорошо масштабируемая молекулярно-динамическая программа. Одна из наиболее быстрых при параллельном вычислении на большом числе процессоров. Программа активно используется в ИПХФ РАН для расчетов мицеллы (micelle - коллоидная частица, несущая электрический заряд и объединяющая в себе несколько крупных молекул);

- **Gaussian03** (<http://www.gaussian.com/>) - самое популярное средство выполнения квантово-химических расчетов среди основной массы химиков. Основные причины этого - широта охвата реализованных квантово-химических методик, высокая эффективность и удобный интерфейс пользователя. Комплекс программ Gaussian позволяет рассчитывать энергию, структуру молекул, частоты их колебаний, а также разнообразные свойства молекул в газовой фазе и в растворе, как в основном, так и в возбужденных состояниях. Основное направление, в котором развиваются версии, это развитие методов расчета сверхбольших молекулярных систем. Однако, использование пакета в распределенных средах осложнено значительными лицензионными ограничениями.
- **Авторские программы**, включающие многопараметрические задачи из области квантовой химии и молекулярной динамики, параллельные газодинамические программы моделирования (на молекулярном уровне) процесса образования ударных волн, программы по расчету оптимальных параметров для создания установок по выращиванию крупных кристаллов

Для всего выбранного ПО 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 всех выбранных прикладных пакетов созданы и протестированы на реальных задачах низкоуровневые интерфейсы для запуска их в распределенных вычислительных средах (на примере среды gLite). Данные интерфейсы включают набор скриптов по формированию исходящих заданий, запуску (через брокер ресурсов RDIG) на удаленных ресурсах, 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) вариантов указанного ПО. На ресурсном GRID узле ИПХФ, использованном в качестве удаленного распределенного ресурса, проведены запуски указанного прикладного ПО через инфраструктуру BO RGSTEST RDIG с прохождением задач через центральный брокер ресурсов RDIG. Запуски всего адаптированного ПО проводились в разных режимах и конфигурациях (с разным количеством востребованных 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). После ряда вычислительных экспериментов была проведена коррекция созданных низкоуровневых интерфейсов и окончательная оптимизация их для среды gLite. Были скорректированы проблемы запуска и работы параллельных (SMP, сокетные, MPI-1,2) вариантов указанного ПО на различных типах ресурсных узлов (разные пакетные системы PBS и параллельные среды).

Следует отметить, что большинство указанных прикладных пакетов вычислительной химии отличаются сложностью конфигураций и повышенными требованиями к среде выполнения, особенно для проведения параллельных расчетов. Далеко не всегда возможна перенастройка ресурсных узлов распределенных сред под нужды подобных пакетов или предустановка их на ресурсных узлах. Поэтому авторами был разработан метод создания виртуальных «контейнеров», перемещаемых стандартными средствами распределенного middleware и запускаемых на удаленном ресурсном узле распределенной среды. В настоящее время этот метод применим для исполнения на узлах, поддерживающих ОС Linux. В рамках вычислительной химии подобная концепция становится весьма востребованной, поскольку крупные пакеты (типа GAMESS, Gaussian, Dalton, CPMD, NAMD) требуют значительной настройки ОС всех участвующих в вычислениях узлов. Применение таких «контейнеров» позволяет передавать заранее настроенную среду как единое задание, не требующее дополнительного конфигурирования и сложной процедуры установки и настройки, производимых, как правило, вручную администратором кластеров. Так могут быть решены проблемы установки, настройки, несовместимости с операционной системой и другими программами. Решаются конфликты одинаковых приложений. Более детально этот метод описан в статье авторов в этом же сборнике трудов.

Проверка работоспособности низкоуровневых интерфейсов была проведена на нескольких узлах BO RGSTEST RDIG, включая ресурсный GRID узел ИПХФ, используемый как удаленный. На базе созданного ресурсного сайта распределенной среды Unicore (см. ниже) начаты работы по модификации созданных интерфейсов для работы в этой среде как со стороны клиента (исходящие задачи), так и для обработки соответствующих входящих задач.

### 3.2 Работа с «пучками» формально независимых заданий

Существенной частью проведенной работы по использованию ресурсов российского сегмента GRID стало создание метода запуска “пучков” независимых заданий для использования всех доступных ресурсов виртуальной организации для широкого класса многопараметрических задач вычислительной химии. Как уже говорилось, в области химической физики существует класс задач, требующих перебора большого количества параметров. 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. Типичный пример - фундаментальная задача в теории элементарных химических процессов: туннельные реакции под воздействием электромагнитного излучения. Параметрами являются частота и амплитуда излучения. Задача имеет высокую вычислительную сложность, однако вычисления в каждой точке сетки в ней происходят независимо друг от друга, поэтому оказалось возможным разбить область вычислений на множество непересекающихся подобластей и для каждой из них запускать задачу на различных процессорах.

Была разработана методика запуска задач и получения результатов методом запуска “пучков” заданий на всех доступных ресурсах ВО RGSTEST проекта RDIG (в рамках вычислительной платформы gLite). На базе скриптового языка Perl написан комплекс программ для запуска “пучков” заданий и получения результатов счета с использованием произвольного интерфейса UI системы RDIG. Для решения многопараметрических задач квантовой химии были разработаны методы формирования «пучков» независимых заданий (до  $10^4$ , в перспективе – до  $10^7$  «атомарных» заданий на задачу) для расчета их на распределенных вычислительных ресурсах. Для выбранных областей данных авторскими скриптами производится «нарезка» областей данных, формирование пула независимых заданий, создание очередей запуска и отправки заданий на брокер ресурсов. После запуска периодически запускаемые (средствами ОС) скрипты ведут мониторинг выполнения заданий, контроль таймаутов, перезапуск неудачных заданий и сбор результатов выполненных заданий (с использованием базы данных и таблиц в ней, контролирующих состояние заданий – «ожидание», «запуск», «выполнение» и т.д.). По окончании расчетов проводится сборка «атомарных» результатов в единый выходной файл. Для части задач (требующих значительного числа параллельных независимых расчетов) дополнительно созданы авторские механизмы по разбиению областей данных (или расчетов) на большие независимые подсетки или независимые задания, передачи всех их интерфейсам gLite с последующим запуском на параллельных узлах и «сборки» финальных результатов из множества полученных независимых. Были сформированы и направлены на распределенные ресурсы ВО RGSTEST “пучки” заданий, осуществлен мониторинг их выполнения (с использованием комплекса скриптов и базы данных MySQL), “сборка” результатов с различных ресурсов. Было задействовано до 400 процессоров на различных ресурсных узлах ВО RGSTEST (Москва, Протвино, Харьков, Черногловка). С использованием данных методов на полигоне ВО RGSTEST был решен ряд реальных научных задач, включая: а) поведение низкотемпературных химических реакций под сильным электромагнитным воздействием; б) первичный расчет установок по росту кристаллов; в) ряд газодинамических задач. Данные методы могут быть легко модифицированы для работы в распределенных средах, отличных от gLite (например, Unicore), что и делается в настоящее время.

### 3.3 Ресурсный центр ИПХФ РАН, формирование и развитие

Основой для проведения всех работ с распределенными средами стали реализованные на основе существовавшего вычислительного комплекса ИПХФ РАН ресурсные узлы нескольких распределенных сред. Целью создания ресурсных узлов стало (помимо постоянного проведения текущих расчетов) создание основного опытного полигона по проведению вычислительных экспериментов в российском сегменте GRID по вычислительной и квантовой химии. Основными задачами в рамках этого направления стали: 1) развитие инфраструктуры центра, его вычислительных мощностей и функциональности, 2) разработка и использование системы запуска **исходящих** задач (т.е. запускаемых пользователями на удаленных ресурсных узлах) различного типа в распределенных средах; 3) обеспечение проведения вычислительных экспериментов и расчета

реальных **входящих** задач на собственном ресурсном узле ИПХФ (выступающем в роли удаленного распределенного ресурса и тестового полигона).

В настоящее время интегрированная вычислительная мощность распределенной (локальной) вычислительной сети в Институте достигла 1,5 TFLOPS (пиковая) с совокупным дисковым пространством до 20 ТВ. Количество процессоров (ядер) основного вычислительного ресурса, кластера на процессорах Intel Xeon (с поддержкой 64-битных приложений), достигло 130, что позволило апробировать работу программного обеспечения (как системного, так и прикладного) в условиях работы больших и сверхбольших вычислительных систем и предоставить значительную долю ресурсов для распределенных вычислений. Скорость доступа извне к ресурсному узлу ИПХФ с 2007 года повышена до 155 Мбит/с (с потенциалом для роста до 1 Гбит/с). В аппаратной части выделенный для GRID экспериментов ресурсный узел представлен управляющим комплексом из 6 рабочих станций (класса P-IV 3 ГГц и выше), а также совокупностью рабочих узлов из шести 2-х процессорных станций (на процессорах Xeon 2,4 ГГц с поддержкой Hyperthreading) с пиковой производительностью до 90 GFLOPS. Более детально вычислительный комплекс ИПХФ описан здесь: <http://cc-icp.icp.ac.ru>.

Для созданного ресурсного GRID узла было принято решение о строгом соответствии его международным стандартам распределенных сред для простоты последующей интеграции с международным сообществом. Поэтому, после проведения работ [2,6] по изучению различных распределенных сред (Condor, X-Com, Globus, LCG-2, gLite, Unicore) была использована разработанная в CERN и рекомендованная консорциумом EGEE-RDIG распределенная среда gLite, на базе которой был создан ресурсный узел консорциума EGEE-RDIG. В 2008 году в рамках проекта был также создан ресурсный сайт для работы в среде Unicore. Оба вида ресурсов описаны ниже. Для облегчения доступа пользователей был сформирован WWW портал (<http://grid.icp.ac.ru>, Grid Enabled Chemical Physics – GECF), включающий высокоуровневые пользовательские WWW интерфейсы для работы с рядом задач (GAMESS, многопараметрические задачи) в условиях распределенных сред.

В состав ресурсного узла входит описанный выше комплекс интерфейсов различных уровней для взаимодействия прикладного ПО с распределенной средой GRID, позволяющий запускать целый ряд задач вычислительной химии на распределенных вычислительных ресурсах с возможностью формирования, запуска на удаленных распределенных ресурсах, мониторинга заданий и сбора результатов и статистики.

### 3.3.1 Ресурсный узел на базе *middleware gLite*

После детального изучения особенностей различных распределенных сред на первых этапах работ нами было принято решение о вхождении ИПХФ РАН в российско-европейский консорциум EGEE-RDIG (Enable GRID for E-science и Russian Data Intensive GRID, <http://www.egee-rdig.ru>) и принятии в качестве базового *middleware* среды gLite. При этом часть базовых сервисов возложена на доступные серверы RDIG (включая брокер ресурсов, авторизацию, сертификацию, обеспечение общей безопасности).

В ИПХФ РАН выполнены все процедуры подключения к GRID в рамках RDIG в качестве как пользователя, так и ресурсного центра. В настоящее время проект EGEE (а вместе с ним и его российская составляющая RDIG) использует программное обеспечение, ресурсную и организационную инфраструктуру среды gLite 3.1. Для тестирования собственной GRID-инфраструктуры и проведения достаточно широкомасштабных вычислительных экспериментов ИПХФ РАН стал членом BO RGSTEST (BO RGSTEST создана для экспериментальной работы российских ресурсов и тестирования совместимости прикладного ПО с GRID-инфраструктурой), прошел все стадии тестирования и стал полноценным членом сообщества RDIG (см. рис.3 и <http://rus.egee-rdig.ru>).

Работа в рамках BO RGSTEST обеспечивает доступ к вычислительным мощностям порядка до 800 процессоров (без учета их возможной многоядерности) и дисковым массивам порядка 8-15 терабайт в нескольких географических зонах (Москва, Протвино, Харьков, Черноголовка и др.). Разнородность узлов данной BO позволяет достаточно 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.

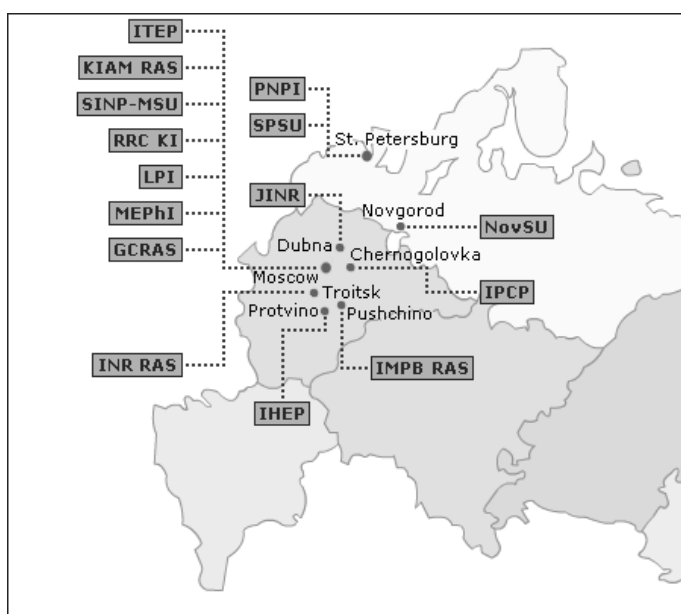


Рис.3. Схема расположения ресурсных узлов консорциума EGEE-RDIG

В ИПХФ были развернуты и настроены основные серверные компоненты базового узла GRID – Computing Element (включая BDI и GIIS) и подчиненные ему Work Nodes, Storage Element и Monitor Box. Данные компоненты используются для решения **входящих** задач и формируют совокупность, называемую ресурсным узлом GRID (в рамках структуры gLite). В качестве остальных обязательных требуемых компонентов такого узла задействованы внешние ресурсы, используемые на нынешнем этапе всем российским сообществом RDIG (узлы НИИЯФ МГУ – как брокер ресурсов, BDI и проху сервера, сервер РИЦ «Курчатовский Институт» – как сертификационный центр и некоторые другие). Кроме того, было установлено соответствующее программное обеспечение для передачи в дальнейшем как минимум части этих функций (в первую очередь – BDI и собственного брокера ресурсов) узлам ИПХФ РАН в рамках создаваемой на базе ИПХФ виртуальной организации по вычислительной химии.

Рассмотрим особенности реализованных серверных компонент проекта. Для пакетной обработки заданий на SE сейчас выбрана система PBS Torque (<http://www.clusterresources.com>). Она полностью охватывает спектр разрабатываемых прикладных задач, позволяя решать как типичные параллельные задачи с непрерывным обменом данными (например, GAMESS), так и генерируемые "пучки" формально независимых задач.

Для сервиса Storage Element (версия SE-DPM) был выбран вариант дискового массива, поскольку он достаточно прост и дешев в реализации. Сейчас под нужды узла выделено около 1 Тб, в конце 2008 года за счет подключения нового дискового массива будет выделено до 6 Тб с применением RAID технологий. Был реализован Monitor Box, который служит двум целям – поддерживает внутренний мониторинг ресурсов узла и предоставляет текущую информацию о состоянии узла и степени его готовности к расчетам внешним брокерам ресурсов сети GRID всех степеней иерархии. Кроме того, в его функции входит поддержка на уровне узла протоколов LDAP и BDI для обеспечения единого адресного пространства GRID. На нем начато тестирование пакета MonAlisa (<http://monalisa.cacr.caltech.edu>) для развернутого удаленного мониторинга узла и его компонентов, рекомендованного RDIG.

Для элементов узла CE, SE, MON получены необходимые сертификаты, выданные центром RDIG (через собственного Certification Authority, авторизованного в Сертификационном Центре RDIG на базе РИЦ Курчатовский Институт) действительные в рамках всей инфраструктуры EGEE (при вступлении в соответствующие BO, сейчас – это российская BO RGSTEST).

Проведенное тестирование показало полную работоспособность узла в качестве ресурсного для расчета задач вычислительной химии. Были проведены запуски многопараметрических задач с ис-

пользованием наиболее важных и ресурсоемких пакетов – GAMESS (в параллельных сокетном и MPI вариантах), Gaussian (в SMP варианте), Dalton2, CPMD, NAMD. Была проведена регистрация узла в базе GOCDB (Великобритания), центральной для EGEE проекта (<http://goc.grid.sinica.edu.tw/gstat/ru-Chernogolovka-IPCP-LCG2>, <https://goc.gridops.org/site/list?id=353>) и начат его постоянный мониторинг. На ноябрь 2008 г. в рамках ВО RGSTEST, включая узел ИПХФ РАН, пользователям было доступно до 800 CPU в Протвино, Дубне, Харькове, МГУ, Черногловке и до 15 Тб дисковых ресурсов.

Второй основной составляющей узла gLite стала разработка системы запуска **исходящих** задач (т.е. запускаемых на удаленных ресурсных узлах). Она включает в себя установку и настройку нескольких User Interface (UI) системы gLite 3 и WWW-портала, сопряженного высокоуровневыми интерфейсами с данными UI. WWW-портал предназначен для автоматизации запуска исходящих пользовательских задач и создания дружественных пользователю интерфейсов для запуска типовых задач вычислительной химии (см. ниже).

UI используется для формирования заданий, настройки пакетов и среды, граничных условий и т.п., передачи заданий и сопутствующих им данных на внешние узлы инфраструктуры GRID, проведения расчетов на ресурсных узлах GRID структуры в рамках различных виртуальных организаций (членами которых являются их сертифицированные пользователи), а также мониторинга заданий. UI является системой доступа к ресурсам GRID путем индивидуальной сертификации пользователей. В ИПХФ РАН несколько пользователей получили индивидуальные сертификаты (действительные при условии регистрации в соответствующих виртуальных организаций во всем адресном пространстве GRID) и были зарегистрированы в тестовой ВО RGSTEST RDIG. Заметим что: (1) количество UI в организации может быть произвольным; (2) каждый пользователь ДОЛЖЕН использовать свой собственный индивидуальный сертификат, выданный сертификационным центром RDIG или EGEE и зарегистрированный в соответствующей ВО. Расчеты производились на узлах НИИЯФ и НИВЦ МГУ, ИФВЭ (Протвино), Харьковского политехнического университета и собственного узла ИПХФ (как внешнего для UI, с использованием внешнего брокера ресурсов).

Для сертификации пользователей была введена должность Certification Authority (CA). Для обеспечения работы с новыми сертификатами было установлено и настроено соответствующее программное обеспечение (в рамках требований RDIG-EGEE), произведена проверка на ряде тестовых сертификатов, а затем получено несколько рабочих пользовательских и серверных сертификатов. Заметим, что собственно созданием и занесением в базу данных GOC сертификатов в рамках RDIG занимается центр при РНЦ «Курчатовский институт», задачей же CA является контроль использования и целостности сертификатов в рамках подчиненной ему организации. Параллельно была также создана возможность выпуска собственных (self-made) сертификатов для работы с GRID-службами (например, средствами Globus) вне инфраструктуры gLite.

### 3.3.2 Ресурсный узел на базе middleware Unicore

В 2008 году в ИПХФ был также создан ресурсный сайт категории «А» на базе промежуточного ПО Unicore (<http://www.unicore.eu>) для работы в рамках создаваемого в России крупномасштабного вычислительного полигона СКИФ-Полигон, <http://skif-grid.botik.ru>. В составе сайта реализованы все базовые компоненты (Gateway; UAS, Unicore Atomic Services; TSI, Target System Interface; XUADB, Unicore User Database), к которым на базе системы пакетной обработки заданий PBS Torque различными способами подключены 6 расчетных двухпроцессорных узлов. Для этого использованы как перенастройка систем очередей Torque расчетных узлов существующего узла GRID (введено их дополнительное подчинение отдельному Torque менеджеру сервера Unicore), так и создание виртуальных машин на базе расчетных узлов gLite. Заметим, что в отличие от gLite, для Unicore не требуется установки специфичного ПО на расчетных узлах, только небольшая их реконфигурация. Ресурсный сайт доступен для сертифицированных пользователей через собственные интерфейсы middleware Unicore и по внешнему web-интерфейсу <https://unicorgw.icp.ac.ru:8080>. Авторами были получены серверные сертификаты (действительные для работы в СКИФ-Полигоне) для базовых компонент и пользовательские – для тестирования клиентского интерфейса Unicore на базе подобных вычислительных полигонов. Настроен клиентский интерфейс и подготовлены пилотные варианты задач для запуска в среде Unicore. Проведены успешные запуски их через внешний брокер ресурсов на ресурсных узлах ИПС (Институт программных систем Российской академии наук) и собственном ресурсном сайте ИПХФ (выступающего в роли удаленного), что продемонстрировало работоспособность как ресурс-



ного сайта, так и клиентского интерфейса среды Unicore. Сайт позволяет проводить вычислительные эксперименты на полигонах, поддерживающих среду Unicore, с использованием входящих и исходящих распределенных задач вычислительной химии.

### 3.3.3 WWW портал Grid Enabled Chemical Physics (GECP) ИПХФ РАН

В настоящее время активно ведутся работы по созданию современных графических интерфейсов к GRID-приложениям и системам, которые в своём прошлом использовали интерфейс командной строки. Особенное развитие получили интерфейсы, основанные на web-технологиях, поскольку они являются наиболее простыми, доступными и дешёвыми.

Стремительное развитие и расширение функциональных возможностей GRID-сервисов нового поколения требует перевода графических интерфейсов на качественно новый уровень для интеграции с GRID-инфраструктурой. Доступ к ресурсам и сервисам является одним из наиболее важных компонентов GRID системы, так как он является ключевым связующим звеном между GRID средой и конечным пользователем.

GRID портал – объединение GRID и Web сервисов. Наиболее современный интерфейс, позволяющий более эффективно использовать все преимущества GRID, продуктивно работать, экономить время и ресурсы. Это среда, которая позволяет пользователям получить доступ к обширным GRID ресурсам и сервисам, вызывать и настраивать их с помощью простого web-браузера, который в наше время установлен на каждом компьютере.

Портальный интерфейс также очень важен потому, что с помощью него пользователь даже начальной подготовки и уровня знаний может без проблем начать работу в GRID. Архитектура GRID портала основана на идее, что порталная система является контейнером для пользовательских интерфейсов (инструментов, клиентов), обеспечивающих работу с GRID службами. Преимущество данной архитектуры в том, что она является очень гибкой и удобной в разработке и развитии порталов, позволяет встраивать в портал интерфейсы новых GRID служб и изменять существующие. Портальные сервисы контролируют и визуализируют пользовательский интерфейс. Все информационные материалы, представляемые пользователю, поступают от web сервисов из разных источников.

Первоначально авторами был разработан пилотный Web-интерфейс, который позволил наработать ряд методик по разработке высокоуровневых интерфейсов к распределенным средам. Затем портал Grid Enabled Chemical Physics (GECP, <http://grid.icp.ac.ru>) в ИПХФ РАН был существенным образом переработан и усовершенствован, объединив несколько Web-интерфейсов по подготовке данных для формирования задач, запуска заданий, их последующего мониторинга и сбора полученных результатов.

В отличие от немногочисленных аналогичных разработок в мире, которые являются самостоятельными приложениями, требующими установки на локальном компьютере пользователя, Web-интерфейс подготовки данных портала GECP является полностью интерактивным и требует наличия у пользователя лишь доступа в Интернет и графического Web-браузера с поддержкой JavaScript.

В настоящее время Портал объединяет интерфейсы приложений двух видов :

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

Данные интерфейсы позволяют определять входные параметры и условия (включая загрузку данных и конфигурационных файлов), формировать сложные первичные файлы запуска, производить (при условии сертификации пользователя) запуск данного ПО в распределенной среде (пока с использованием среды gLite), осуществлять мониторинг выполнения заданий и сбор результатов. Интегрирована также технология работы через web-интерфейс с «пучками» независимых заданий на «нарезаемых» областях данных.

Для создания и работы высокоуровневых web-интерфейсов создана соответствующая программная среда, включающая HTTP сервер, сервер баз данных MySQL, набор web-ориентированных языков программирования (Perl, PHP, Python) и шлюзы между данной средой и выбранной распределенной вычислительной средой как на уровне ресурсов, так и на уровне пользовательских интерфейсов. В состав среды включены авторские шлюзы для нарезки областей данных и запуска «пучков» незави-

симых заданий с последующими мониторингом «пучков» и сбором результатов с использованием базы данных MySQL.

Поскольку квантово-химический комплекс GAMESS создавался большим количеством независимых разработчиков, то он выделяется очень обширным количеством параметров, которые могут быть включены в файл входных данных. В настоящее время все данные делятся на 114 групп, которые содержат в совокупности более 500 простых параметров и параметров-массивов. В 2008 году программное обеспечение портала GESP для пакета GAMESS было дополнено многостраничными формами, позволяющими вводить еще 10 групп, относящихся к 1-ой категории групп данных – управляемых ключевыми словами, псевдо-именами в свободном формате. Выбор групп, включаемых в подготовку данных, основан с одной стороны на принципе нисходящей частоты использования, а с другой – на необходимой полноте, чтобы сформировать файл данных, не требующий дальнейшего ручного редактирования. Тем не менее, при необходимости пользователь имеет возможность использовать соответствующий сервис – редакцию полученного конфигурационного файла. В текущем состоянии web-интерфейс подготовки данных для пакета GAMESS включает в себя 42 основные группы, покрывающие более половины параметров, которые используются наиболее часто. Было проведено тестирование, которое показало практическую идентичность конфигурационного файла GAMESS, создаваемого через web-интерфейс таковому файлу, создаваемому пользователем вручную.

Важное отличие от аналогов разработанного Web-интерфейса подготовки файлов входных данных заключается в том, что содержание отдельных страниц портала дословно соответствует Руководству пользователя GAMESS, из которого *все* описания параметров, пояснения и замечания включены в соответствующую форму полностью. Дальнейшего обращения к данному Руководству в процессе работы больше не потребуется.

Повышена функциональность интерфейсов, главным образом в части формирования задач (расширены классы вводимых параметров расчетов, добавлены новые выборки условий и методов расчетов, добавлены специализированные форматы данных – в соответствии с новыми возможностями пакета GAMESS). Была добавлена возможность учета доступных пользователю ресурсов, явного выбора ресурсного узла для счета, расширены возможности мониторинга выполнения заданий (особенно для «пучков» заданий). Для последних реализована возможность записи состояний заданий в базу данных. В ней хранятся не только пользовательские данные (а в перспективе и результаты), но и динамически формируемые таблицы, связанные со статусом запущенных заданий (что особенно важно для запуска «пучков» заданий – при их количестве до  $10^4$ ). Данная технология облегчает проведение непрерывного мониторинга заданий, включая контроль таймаутов, перезапуск неудачных заданий и т.п. (см. выше)

Начато создание высокоуровневых WWW интерфейсов и к среде Unicore (запуск и сбор результатов), показана возможность их сосуществования на едином пользовательском UI совместно с gLite интерфейсами в рамках единого web-портала. В дальнейшем пользователь сможет выбрать доступную ему распределенную среду.

Заметим, что основная часть программного кода web-интерфейсов не связана напрямую с выбранной распределенной средой, поэтому они могут быть подключены и к нескольким вариантам таковых сред. Данные интерфейсы значительно снижают трудоемкость работы пользователя в части формирования задач и работы с первичными данными. Они также значительно облегчают работу с пакетами в распределенных средах, особенно для неподготовленного пользователя.

## 4. Заключение

Работы, проведенные авторами, позволили создать в рамках технологий GRID вычислительную среду для проведения крупномасштабных расчетов в области вычислительной химии. В рамках проекта достигнут новый уровень проведения расчетов в области вычислительной химии:

- был создан комплекс адаптированных к среде GRID прикладных программных пакетов вычислительной химии с интерфейсами различного уровня (вплоть до web-портала),
- разработаны новые методики вычислений (включая применение широкого спектра средств виртуализации) в распределенных и параллельных средах применительно к прикладному ПО вычислительной химии;

- создан ресурсный центр для проведения различных вычислительных экспериментов в этой предметной области, объединяющий как вычислительный узел для входящих задач, так и пользовательские интерфейсы к различным распределенным средам.

В результате выполнения всего проекта создан вычислительный центр, позволяющий проводить масштабные расчеты в области вычислительной химии в распределенных средах на крупномасштабных полигонах (в перспективе до  $10^4$  CPU на узлах многотерафлопного масштаба). Как составная часть ВЦ создан ресурсный узел GRID вычислений ИПХФ РАН. Он позволяет в полной мере использовать технологии распараллеливания и виртуализации для различных задач вычислительной химии и смежных областей науки. На ряде реальных задач продемонстрирована применимость созданных ресурсов для решения крупномасштабных химических задач на высокопроизводительных вычислительных полигонах (типа RDIG и СКИФ-ГРИД). Это позволяет ставить и решать вычислительные задачи фундаментального и прикладного характера в области химических наук, ранее не доступные из-за ограниченности возможностей вычислительных ресурсов. Основные научные области применения – химическая физика, квантовая химия, исследование наноструктур, молекулярная динамика, фармацевтика, разработка топливных элементов и прочие близкие отрасли наук.

Проведенные крупномасштабные вычислительные эксперименты продемонстрировали огромные возможности применения параллельных и/или распределенных технологий в области вычислительной химии. Существенные трудности, связанные с установкой соответствующего ПО различного уровня многократно перекрываются новыми возможностями и перспективами в решении крупномасштабных химических задач.

## Литература

1. 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
2. С.М. Алдошин, Д.А. Варламов, В.М. Волохов, Г.А. Покатович, Н.Ф. Сурков, А.И. Станиловский *GRID и вычислительная химия в ИПХФ РАН* // «Научный сервис в сети Интернет: технологии параллельного программирования», Труды Всероссийской научной конференции, М.:, изд-во МГУ, 2006, с.91-93
3. 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", 3<sup>rd</sup> Int. Conf., Дубна, изд-во ОИЯИ, 2008, с.120-122
4. С.М. Алдошин, В.М. Волохов, Д.А. Варламов, А.В. Пивушков *Вычислительная химия в среде GRID: параллельные и распределенные вычисления* // Вторая международная конференция «Суперкомпьютерные системы и их применение» SSA'2008, Минск, октябрь 2008; Минск, ОИПИ НАН Беларуси, с.114-118
5. Волохов В.М., Алдошин С.М., Варламов Д.А., Пивушков А.В. *Использование GRID технологий для исследования структуры и свойств наноматериалов* // Сб.тр.: "Distributed Computing and Grid-Technologies in Science and Education: Extended Proceedings of the 3rd Intern.Conf.", Дубна, изд-во ОИЯИ, 2008, 410 с., с.131-136
6. Варламов Д.А., Волохов В.М., Покатович Г.А., Сурков Н.Ф., Пивушков А.В. *Российский сегмент GRID в области вычислительной химии* // В сб.: «Распределенные вычисления и Грид-технологии в науке и образовании, Труды второй международной конференции (Дубна, 26–30 июня 2006 г.)», Дубна: ОИЯИ, 2006, Д11-2006-167, 419 с., с.243-254