

Вычислительная химия в среде GRID: параллельные и распределенные вычисления

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

Статья описывает применение параллельных и распределенных вычислений (в среде GRID) для задач вычислительной и квантовой химии. Продемонстрированы основные технологии создания распределенной вычислительной среды для подобных расчетов и особенности использования параллельных методов в этой среде. Описаны методология, техника, а также основные проблемы адаптации авторских программ и общепринятых пакетов ПО в области вычислительной химии к параллельным и распределенным технологиям.

1. Введение

ИПХФ РАН представляет собой крупнейший в России академический институт, проводящий фундаментальные и прикладные исследования в следующих областях:

- общие теоретические проблемы химической физики;
- строение молекул и структура твердых тел;
- кинетика и механизм сложных химических реакций;
- химическая физика процессов горения и взрыва;
- химическая физика процессов образования и модификации полимеров;
- химическая физика биологических процессов и систем.

Эти направления научной деятельности института предусматривают проведение крупномасштабных вычислений в области квантовой химии, газодинамики экстремальных состояний, моделирования сложных биологических систем, строения вещества, нанотехнологий, разработки новых лекарственных препаратов и биотехнологий. Для этого требуется проведение большого количества высокоинтенсивных параллельных и/или распределенных расчетов на узлах/кластерах с количеством процессоров более 16 и объемом оперативной памяти до 2-4 GB на процессор, а дисковой до 300 GB на узел. Для расчетов используются лицензионные программы (Gaussian-98, -03, Morac2002, MolPro), программы, распространяемые на условиях "open source" (CPMD, Dalton-2, Gamess-US, NWChem, VASP и др.) и оригинальное авторское ПО. Основным направлением работ вычислительного центра ИПХФ РАН (3 кластера, более 150 процессоров, с интегрированной мощностью до 1,3 Терафлоп в конце 2007 года) являются квантово-химические вычисления, вычисления в области молекулярной динамики и моделирование газодинамических явлений. Для большинства подобных задач представляется перспективным применение распределенных вычислений (в том числе основанных на GRID технологиях), часто представленных параллельными заданиями. Более детально структура вычислительного центра ИПХФ и применяемые там распределенные и параллельные вычисления описаны ранее [1,2]. ИПХФ РАН имеет большой опыт в совместном использовании вычислительных и информационных ресурсов при выполнении параллельных вычислений и метакомпьютинга, обладает развитой высокоскоростной локальной сетью, значительными вычислительными ресурсами и квалифицированными разработчиками в области параллельных вычислений и создания хранилищ информации. В вычислительном центре ИПХФ РАН ежегодно научными коллективами Научного центра в Черноголовке, МГУ (химический факультет), МФТИ, ИХФ РАН, РГУ, КазГУ решается более 300 квантово-механических расчетных задач, по которым публикуется до 200 научных работ.

Работы с системами распределенных и параллельных вычислений в ИПХФ РАН проводились в 2005-2007 гг. в рамках программы № 21 фундаментальных исследований Президиума РАН «Разработка фундаментальных основ создания научной распределенной информационно-вычислительной среды на основе технологий GRID», в 2005-м году в рамках Федеральной целевой научно-технической программы "Исследования и разработки по приоритетным направ-

лениям 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 распределенных вычислительных средах", а также в 2007 году в рамках программы «СКИФ-ГРИД».

Основные типы задач вычислительной химии и применяемые варианты проведения расчетов в распределенно-параллельных средах на базе локальной сети и типовых Грид-интерфейсов (Condor-G и Nimrod-G) были описаны нами в трудах предыдущей конференции [3]. Целью же данной статьи является описание некоторых вариантов адаптации существующего ПО в области вычислительной химии к параллельным и/или распределенным средам.

2. Вычислительная среда

В течение 2005-2007 годов в ИПХФ была создана и эксплуатируется гетерогенная распределенная вычислительная среда на платформе рекомендованного EGEE-RDIG промежуточного ПО LCG-2/gLite-3: сформирован комплекс, включающий ресурсный узел сервисов GRID в рамках базовых требований, предъявляемых как европейским GRID сообществом EGEE, так и его российским отделением RDIG, а также несколько пользовательских интерфейсов (включая WWW порталы) и шлюзов к инфраструктуре GRID.

Были реализованы основные серверные компоненты базового узла GRID, включая Computing Element (CE), Storage Element (SE), Monitor Element (MON), несколько Work Node(s) (WN, семь в текущей конфигурации, 14 процессоров) и несколько User Interface(s) - UI. Данные компоненты используются для решения входящих задач и формируют совокупность, называемую ресурсным узлом GRID (в рамках структуры LCG-2/gLite). Для CE и SE элементов узла были получены необходимые сертификаты, выданные центром RDIG и действительные в рамках всей инфраструктуры. В качестве остальных обязательных требуемых компонентов такого узла использованы внешние ресурсы, используемые на нынешнем этапе всем российским сообществом RDIG (узлы НИИЯФ МГУ – как брокер ресурсов и проху-сервер, сервер Курчатковского РНЦ – как сертификационный центр и некоторые другие). Кроме того, нами установлено соответствующее программное обеспечение для передачи в дальнейшем как минимум части этих функций узлам ИПХФ РАН в рамках создаваемой виртуальной организации по вычислительной химии.

Для пакетной обработки заданий на CE выбраны две системы: Condor (<http://www.cs.wisc.edu/condor/>, версия 6.6.11) и PBS Torque (версии 1.2.6 и 2.1.7, <http://www.clusterresources.com/>). Обе системы в лучшей степени охватывают спектр разрабатываемых задач, позволяя решать как типичные параллельные задачи с непрерывным обменом данными (например, GAMESS), так и генерируемые "пучки" формально независимых задач. Для обработки параллельных задач использованы пакеты MpiCh версий 1 и 2.

Для поддержания непрерывного обновления серверного программного обеспечения (развивающегося в рамках проектов EGEE и Globus) была произведена настройка на использование репозитория CERN, а также созданы (для экономии трафика) внутренние институтские репозитории для LCG-2 и сопутствующего обеспечения.

Были проведены все необходимые тестовые работы:

1. внутреннее тестирование каждого элемента собственными тестами LCG-2;
2. проверка на тестовых задачах взаимодействия элементов узла между собой (передача задач и данных, запуск пакетных заданий, внутренний мониторинг узла);
3. запуск внешних входящих задач как средствами системы Globus (непосредственно, в ручном режиме, без использования инфраструктуры LCG-2), так и через механизмы LCG-2;
4. тестирование и мониторинг системы в рамках виртуальных организаций RGSTEST, RDTEAM и DTEAM;
5. тестирование системы с использованием системы Globus и LCG-2 путем запуска задач на ресурсном узле ИПХФ с внешних UI.

Проведенное тестирование показало полную работоспособность узла в качестве ресурсного для расчета задач вычислительной химии.

Для решения исходящих задач (т.е. задач, формируемых пользователями и решаемых на внешних ресурсах) на часть узлов были установлены User Interface(s) – пользовательские ин-

терфейсы GRID. Они используются для передачи задач и сопутствующих им данных на внешние узлы инфраструктуры GRID и проведения расчетов на внешних ресурсных узлах GRID структуры в рамках различных виртуальных организаций (членами которых являются их сертифицированные пользователи). Для обеспечения комфортной работы пользователя и автоматизации запуска (учитывая сложность подготовки задания для запуска в среде GRID задач по вычислительной химии) UI были интегрированы в WWW-портал <http://grid.icp.ac.ru> (Grid Enabled Chemical Physics – GECP). Данный портал является подбором пилотных пользовательских интерфейсов для запуска ряда авторских задач и прикладных пакетов в области вычислительной химии и роста кристаллов. В перспективе портал предназначен для формирования и запуска задач широкого класса вычислительных задач с последующим сбором и обработкой полученных результатов. В ИПХФ РАН несколько пользователей получили индивидуальные сертификаты (действительные во всем пространстве GRID) и были зарегистрированы в тестовой ВО RGSTEST консорциума RDIG, после чего ими был запущен ряд тестовых и прикладных задач на ресурсных узлах, предоставленных для использования в рамках данной организации. Выполнение данных тестов показало полную работоспособность собственно UI узла ИПХФ для запуска задач на внешних ресурсах инфраструктуры LCG-2 – НИИЯФ и НИВЦ МГУ, ИФВЭ (Протвино) и собственного узла ИПХФ (как внешнего для UI, с использованием внешнего брокера ресурсов) – с использованием до 200 процессоров.

В течение 2006-2007 годов на основе созданного ресурсного центра проводились работы по созданию прикладных программных интерфейсов (включая высокоуровневые WWW интерфейсы) для запуска в распределенной вычислительной среде однопроцессорных и параллельных приложений в области вычислительной химии. Была отработана методика подготовки вычислительных заданий для широкого класса задач вычислительной химии, включающая технику подготовки задач определенного класса, технологии формирования параллельных «пучков» задач, их запуска на распределенных ресурсах и последующей «сборки» результатов. Был проведен ряд вычислительных экспериментов с использованием для расчетов внешних ресурсов ВО RGSTEST и ресурсного узла ИПХФ (через инфраструктуру GRID), причем были задействованы самые различные варианты заданий: с использованием одно- и многопроцессорных конфигураций, с созданием «пучков» заданий (до 70000 вариантов расчетов), с использованием параллельных вычислений (под управлением MPI-1 и 2). Была проведена первичная адаптация наиболее популярных квантово-химических задач GAMESS (сокетный и параллельный [MPI] варианты), Gaussian и CPMD, а затем проведены запуски (через инфраструктуру GRID) этих адаптированных вариантов с расчетом реальных задач. Для упрощения работы по запуску заданий в системе LCG-2, контролем за прохождением задания и получения результатов расчета был написан комплекс авторских скриптов.

3. Адаптация существующего ПО для работы в параллельных и распределенных средах

3.1 Авторские программы

1. Программы по расчету многопараметрических задач из области квантовой химии: например, расчет процесса туннельного прохождения протона через потенциальный барьер, параметры которого периодически зависят от времени, а параметрами являются частота и амплитуда излучения (создание материалов для оптической сверхплотной памяти). Подобные задачи имеют высокую вычислительную сложность, однако вычисления в каждой точке сетки происходят совершенно независимо друг от друга, что позволило разбить область вычислений на множество непересекающихся подобластей и на каждой из них запускать задачу на подмножестве процессоров. Область решения задачи была разбита на 30 областей по ~4200 точек в каждой. При применении одиночного ПК (класса CoreDuo 2, 3 ГГц) оцениваемое время решения задачи составило бы около 5-6 тысяч часов. Для расчетов на российском сегменте EGEE–RDIG в рамках виртуальной организации RGSTEST были использованы шлюзы: Condor-Globus и авторский. Распараллеливание задачи осуществлялось на User Interface узла ИПХФ авторскими скриптами и средствами среды Condor, задания выполнялись индивидуально и независимо друг

от друга. Бинарный файл программ вместе с входными данными для одной из подобластей, получившихся в результате расщепления области данных помещались во входной “box” и передавались вместе с заданием на внешний брокер ресурсов, который определял свободный SE в VO RGSTEST, на котором и происходили запуск и выполнение единичного задания. Объем передаваемых входных данных для одного задания составлял около 1 Мб, выходных – до 0.5 Мб, таким образом, для расчета типовой задачи происходила передача до 7,5 Гб данных на внешние расчетные узлы. Выходные данные, вместе с файлом результатов, помещались в выходной “box” и передавались на хранение на SE, откуда извлекались командой `edg-job-get-output`. Была показана возможность работа с любым количеством SE в виртуальной организации. Расчет в распределенной системе в среде GRID (с занятием до 100 процессоров) занял около 36 часов.

2. Расчет оптимальных параметров для создания промышленной высокопроизводительной установки (теплового узла) по выращиванию крупногабаритных кристаллов. Двумерная задача предусматривает до 10^9 единичных параллельных независимых расчетов, что делает ее идеальной для решения путем запуска “пучков” задач на распределенных вычислительных мощностях, при этом могут быть использованы и SMP варианты расчетов. Набор авторских скриптов «нарезает» задачу и запускает ее через брокер ресурсов на вычислительных мощностях VO RGSTEST. В настоящее время разрабатывается вариант отправки «областей» рассчитываемой сетки на удаленные SE с «нарезкой» их уже непосредственно на ресурсном узле. Решено несколько упрощенных вариантов задачи, однако, полномасштабный вычислительный эксперимент требует до 1000 процессоров, что возможно лишь в рамках крупных полигонов (например, развиваемого в настоящий момент российского полигона СКИФ-ГРИД, где участвует и ресурсный узел ИПХФ).

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

3.2 Стандартные прикладные пакеты в области вычислительной химии

К изученному ПО относятся пакеты GAMESS, Gaussian, Dalton, CPMD, VASP, MolPro. Большинство из них поддерживает работу в SMP средах собственными средствами, однако, их ресурсоемкость требует использования и независимо-параллельных (сокетных и MPI) вариантов, а также возможности запуска на удаленных ресурсных узлах. Пока для распространения этих пакетов на расчетные узлы GRID возможна только ручная их установка и настройка, что связано со сложностью установки как самих пакетов, так и требуемого ими окружения, а размеры пакетов (сотни мегабайт) не дают возможности их передачи на узлы в качестве единого задания. Однако, в рамках создаваемой VO данные проблемы будут решены. Опишем реализации параллельных и распределенных методов для некоторых из них.

1. Пакет GAMESS (General Atomic and Molecular Electronic Structure System). Для пакета GAMESS в среде GRID авторами была создана среда, позволяющая проводить его распараллеливание как сокетным способом, так и посредством протокола MPI (пакет `mpich2-1.0.3`). Сокетный параллельный вариант отличается существенно более простой реализацией и повышенным быстродействием, однако, при запуске через GRID инфраструктуру имеет ряд недостатков: неправильно оценивает необходимые процессорные ресурсы, требует фиксированного числа процессоров и обязательного явного указания стартующего узла, не позволяет точного мониторинга задач. В условиях избыточных вычислительных мощностей этот вариант приемлем, однако, для лимитированных ресурсов его использование пока проблематично. MPI вариант реализован только для среды `Mpich-2`, поскольку пакет GAMESS требует передачи огромного числа переменных окружения и параметров (чего не дает “стандартная” реализация MPI). Он более применим для GRID среды, т.к. требует определения только минимального числа доступных процессоров, не «завязан» на стартующую машину, не нуждается в явном описании расчетных узлов. Были проведены успешные запуски ряда заданий для расчетов по программе GAMESS в тестовой VO RGSTEST, а затем и проведены масштабные расчеты на нескольких

десятках процессоров с получением результатов расчетов на конкретном UI. В настоящее время заканчивается отладка WWW интерфейса для упрощения формирования и запуска задач, их мониторинга и получения результатов, поскольку квантово-химический комплекс GAMESS отличается очень обширным количеством входных данных. Все данные делятся на 114 групп, которые содержат в совокупности более 500 простых параметров и параметров-массивов, и их «сборка» и запуск вручную – весьма трудоемкий процесс.

2. Пакет Gaussian. Для Gaussian-D03 был сформирован пакет скриптов для запуска заданий посредством GRID технологий на SMP серверах (при условии предварительной установки) и успешно просчитан ряд реальных задач, запущенных через UI интерфейс. Далее будет изучена возможность его распараллеливания между узлами с использованием пакета Linda (под управлением PBS Torque). Однако наибольшую проблему вызывают вопросы лицензионных ограничений использования данного коммерческого ПО в рамках распределенных сред.

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

Перечисленные примеры – лишь небольшая часть задач вычислительной химии и примыкающих к ним по структуре вычислений задач из других областей химии, которые могут быть адаптированы к решению в рамках инфраструктуры GRID. Исследования, проведенные в рамках проекта, продемонстрировали огромные возможности параллельных и/или распределенных технологий в среде GRID в области вычислительной химии. Существенные трудности, связанные с установкой различного middleware (LCG-2, Condor, Xcom – и в ближайшем будущем, gLite) многократно перекрываются новыми возможностями и перспективами в решении масштабных задач.

Литература

1. С.М. Алдошин, Д.А. Варламов, В.М. Волохов, Г.А. Покатович, Н.Ф. Сурков, А.И. Станиславский 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
2. 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: изд-во ОИЯИ, 2006, Д11-2006-167, 419 с., с.243-254
3. Д.А. Варламов, В.М. Волохов, Г.А. Покатович, Н.Ф. Сурков, А.В. Пивушков Параллельные квантово-химические вычисления в среде GRID // Международная научная конференция "Параллельные вычислительные технологии" (ПаВТ'2007), труды Международной научной конференции (Челябинск, 29 января - 2 февраля 2007 г.). – Челябинск, изд-во ЮУрГУ, 2007. – т.2, 297 с., с.3-14