

Российская академия наук
Суперкомпьютерный консорциум университетов России

ПАРАЛЛЕЛЬНЫЕ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ (ПаВТ'2017)

Короткие статьи и описания плакатов

г. Казань, 3–7 апреля 2017 г.

Челябинск,
Издательский центр ЮУрГУ
2017

УДК 004.75

П 18

Параллельные вычислительные технологии – XI международная конференция, ПаВТ'2017, г. Казань, 3–7 апреля 2017 г. Короткие статьи и описания плакатов. Челябинск: Издательский центр ЮУрГУ, 2017. 552 с.

ISBN 978-5-696-04880-2

Данный сборник содержит статьи, включенные в программу Международной научной конференции «Параллельные вычислительные технологии 2017». Конференция проходила 3–7 апреля 2017 года в Казанском (Приволжском) федеральном университете (г. Казань). Подробную информацию о конференции можно найти в сети Интернет по адресу <http://agora.guru.ru/pavt>.

Отпечатано с авторских оригиналов.

Одобрено Советом Высшей школы электроники и компьютерных наук ЮУрГУ

Рецензент:

В.В. Воеводин, член-корреспондент РАН

Ответственные за выпуск:

Л.Б. Соколинский, доктор физ.-мат. наук,

А.С. Порозов

Конференция проводится при поддержке

Российского фонда фундаментальных исследований

ISBN 978-5-696-04880-2

© Издательский центр ЮУрГУ, 2017

Проблемно-ориентированная вычислительная среда для компьютерного моделирования нанокompозитных материалов на базе комплекса веб-ориентированных сервисов*

В.М. Волохов¹, Д.А. Варламов^{1,2}, А.В. Волохов¹, А.И. Прохоров¹

Институт проблем химической физики РАН¹, Институт экспериментальной минералогии РАН²

В ИПХФ РАН создана и успешно применяется вычислительная среда, предназначенная для упрощения решения массовых ресурсоемких задач по суперкомпьютерному моделированию структур и свойств наноматериалов. Вычислительная среда основана на гетерогенных вычислительных ресурсах и комплексе веб-ориентированных вычислительных сервисов и интерфейсов к прикладным пакетам квантовой химии и молекулярной динамики. Среда позволяет упростить решение многих проблем проведения массовых ресурсоемких вычислительных экспериментов в области моделирования нанокompозитных материалов и процессов в них.

Ключевые слова: высокопроизводительные вычисления, нанокompозитные материалы, вычислительная среда, веб-интерфейсы и сервисы, компьютерное моделирование, квантовая химия

1. Введение

В настоящее время задачи вычислительной химии (прежде всего, в области квантово-химического и молекулярного моделирования нанокompозитов и биологических структур типа системы «белок-ингибитор»), как правило, требуют практически обязательного использования высокопроизводительных вычислительных ресурсов тера- и петафлопного класса для решения задач различных классов и различных уровней требуемой вычислительной мощности. Ряд примеров подобных задач был рассмотрен в нашей работе [1].

Опыт работы авторов в области вычислительной химии, в том числе при моделировании нанокompозитов и наноструктурированных объектов показал, что при проведении массовых вычислительных экспериментов помимо использования суперкомпьютерных центров класса «Ломоносов-1,2» или МВС-10000 весьма перспективным является формирование проблемно-ориентированных ресурсов среднего размера, направленных на решение определенных классов задач, и при этом имеющими внешне интуитивные дружелюбные конечному пользователю (часто неискусному в суперкомпьютерных расчетах) веб-интерфейсы, что позволяет во многом решить следующие проблемы:

- 1) объединить в рамках единого пользовательского интерфейса все стадии моделирования – от формирования массивов исходных данных и выбора методов расчетов до получения интерактивных компьютерных моделей и формирования баз данных результатов моделирования;
- 2) предоставить доступ к средствам моделирования как можно более широкому кругу пользователей через организацию интуитивно понятных и дружелюбных пользователю веб-сервисов;
- 3) вовлекать в расчеты большинство доступных вычислительных ресурсов – локальные кластеры, «гибридные» установки, ресурсные сайты распределенных сред;
- 4) по возможности оказывать интеллектуальную поддержку пользователю при выборе стратегии моделирования и использования методов расчетов;

* Проведение работ по данной тематике поддержано грантом РФФИ № 15-07-07867-а, рук. Волохов В.М.).

- 5) соединять в рамках единого комплекса прикладные пакеты, ориентированные на разные аспекты моделирования (нано)объектов – создание своего рода «вычислительных последовательностей», при этом выбирая наиболее приемлемые варианты установки данных пакетов и наиболее подходящие пулы ресурсов для них.
- 6) давать возможность пользователю выбирать формы представления полученных результатов – от наборов «сырых» результирующих файлов размером в сотни мегабайт до интерактивных 3-D образов моделируемых структур.

При этом может быть также во многом решен целый ряд проблем, специфичных для квантово-химических расчетов и молекулярного моделирования и обычно существенно ограничивающих эффективность работы исследователей:

- подавляющее большинство прикладных пакетов квантовой химии и молекулярной динамики в качестве исходных данных требует введения нескольких файлов сложного синтаксиса, содержащих описания до нескольких сот параметров (в том числе весьма неявно связанных между собой) и методов расчетов, многих сотен и даже тысяч первичных координат атомов, полевых потенциалов, определенной иерархии используемых констант, данных и вычислительных процедур, многовариантности построения моделей и т.п. Их подготовка очень трудоемка, требует детального знания синтаксиса входных файлов, тщательной проверки введенных данных и практически затруднена для пользователя (часто ошибки несогласованности данных обнаруживаются на этапе непосредственно выполнения расчетов, при уже большом затраченном времени счета);
- зачастую требуется выполнять многочисленные расчеты задач, отличающихся друг от друга лишь небольшими изменениями параметров («шаги» по температуре, сдвиги координат отдельных атомов, замена сортов атомов и т.п.). На основе хранимых данных весьма желательна возможность создавать массовые «шаблоны» для последующих проектов;
- для построения и хранения мультипараметрических моделей требуется создание и поддержка достаточно объемных структурированных баз данных;
- большие временные затраты на расчет моделей (например, до 40-50 часов на расчетный шаг на СК «Ломоносов» при необходимых 150-200 шагах для расчета транспорта единичного Li-иона через интерфейс «Si-C электрод – полимерный электролит») требуют применения на ресурсах новейших методов проведения расчетов, основанных на использовании «гибридных» и распределенных моделей вычислений;
- прикладные пакеты квантовой химии в результате вычислений создают огромные (вплоть до многих гигабайтов) «сырые» (raw) файлы результатов, требующие постпроцессинга данных, генерализации, упрощения и перевода в другие форматы для наглядной интерактивной визуализации и сопряжения с другими прикладными пакетами;
- как правило, на основе результатов требуется построение 3-D моделей молекулярных структур, позволяющих проводить различные манипуляции с ними и получать наиболее эффективное представление о данных структурах. Кроме того, требуется формировать «на лету» большое количество текстово-табличной и графической информации (бинарные и более сложные диаграммы), позволяющей адекватно оценивать качество созданных моделей в зависимости от входных параметров.

Большинство этих проблем плохо решаемы непосредственно в зоне ответственности суперкомпьютерных центров и даже вычислительных центров конкретных организаций ввиду «всеядности» последних и незаинтересованности их персонала, поэтому очевидна необходимость построения «внешних» проблемно-ориентированных пользовательских «шлюзов» в форме веб-ориентированных высокоуровневых интерфейсов.

В области собственно химии (исключая биохимию и фармацевтику) сейчас почти отсутствуют комплексные решения, позволяющие снять эти проблемы, поэтому разработка современного комплексного компьютерного инструментария для упрощения работы с квантово-химическими и молекулярно-динамическими прикладными пакетами вкупе со значительной интенсификацией расчетов на основе суперкомпьютеров и распределенных сред способна во многом улучшить ситуацию в области молекулярного моделирования нанокompозитных материалов и нанообъектов на их основе.

2. Построение вычислительной среды

В последние годы тенденция на создание проблемно-ориентированных вычислительных RIA-сервисов с дистанционным доступом пользователей является одним из основных трендов развития прикладных вычислений в разных областях науки и должна стать эффективным обязательным научным инструментом для российских исследователей. Развитие же программных и инфраструктурных средств для создания высокоэффективных веб- и грид-сервисов в настоящее время позволяет создавать инструменты, контролирующие все стадии процесса моделирования: от ввода первичных данных до интерактивной 3-D визуализации объектов или процессов. Подобные программно-аппаратные комплексы позволят решать на принципиально новом вычислительном уровне многочисленные «тяжелые» задачи в следующих областях: строение молекул и структур твердых тел, кинетика и механизмы сложных химических реакций, электрохимические превращения, описание процессов образования и модификации полимеров, биологических процессов и систем, а также в области общих проблем химической физики.

Опыт участия авторов в течение 2004-2013 годов в ряде российских грид-проектов [2, 3], как-то: EGEE-RDIG и EGI-RU-NGI, СКИФ-Грид, ГридННС («Национальная нанотехнологическая Сеть»), «Развитие пилотной зоны российской грид-системы для высокопроизводительных вычислений...», различных программ Президиума РАН, ориентированных в том числе на создание проблемно-ориентированных прикладных веб-сервисов в грид-вычислениях, позволил сформировать достаточно оптимальную структуру [1] прикладной компьютерной среды (программно-аппаратного комплекса), направленной (в нашем случае) на эффективное проведение широкомасштабных вычислений в области моделирования наноматериалов через веб-сервисы, обеспечивающие дистанционный доступ (рис.1)

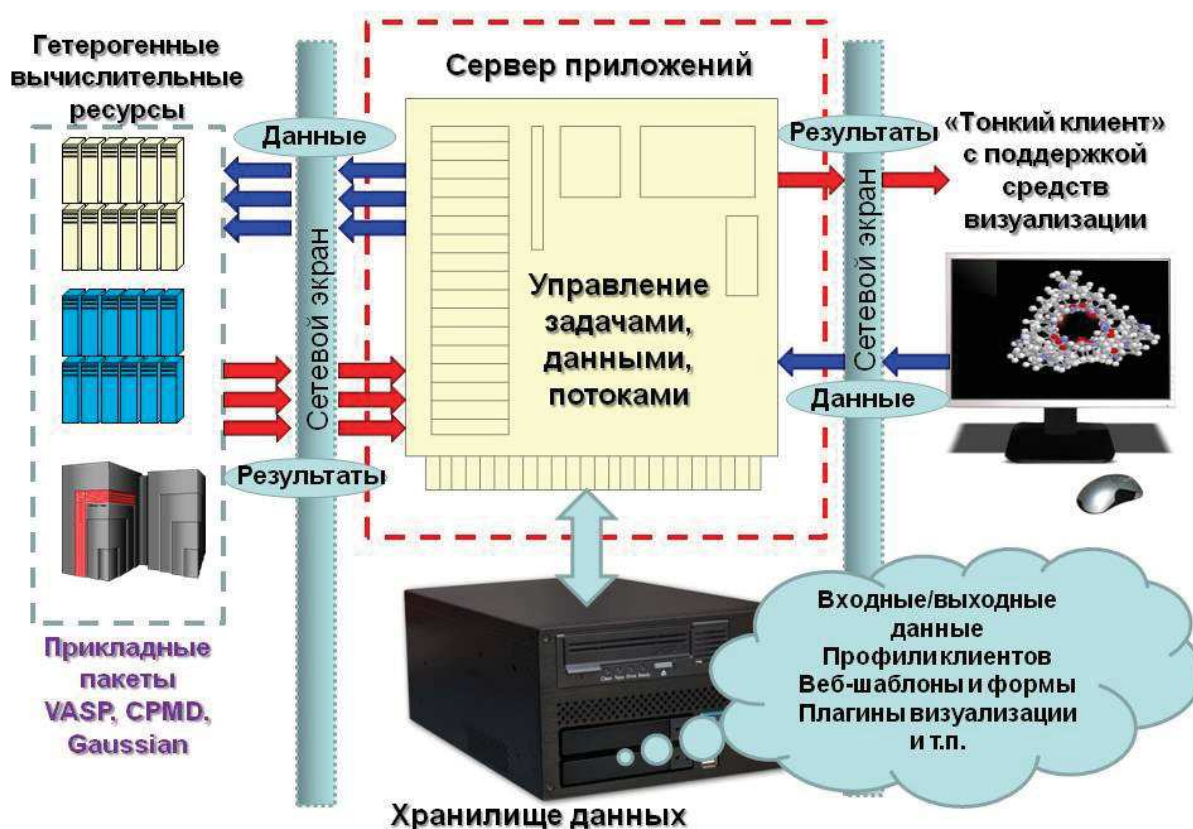


Рис. 1. Структура среды компьютерного моделирования нанокompозитных материалов на базе высокопроизводительных вычислительных ресурсов и веб-ориентированных вычислительных сервисов (интерфейсов) к ним [1]

Подобный комплекс способен работать как в «одиночном» режиме (с вовлечением локальных ресурсов – кластеров, «гибридных» GPU- или мультиядерных установок, многоядерных высокопроизводительных станций), так и с удаленными ресурсами (при условии соблюдения достаточных мер безопасности) и (при установке требуемого грид-полигоном промежуточного Grid-middleware – шлюзы, ресурсные грид-сайты, грид-хранилища) в составе грид-полигонов. При этом доступ к ресурсам, а также управление комплексом осуществляется через высокоуровневые, дружелюбные конечному пользователю веб-интерфейсы. Среда объединяет следующие основные компоненты: (а) вычислительные сервисы, созданные на высокопроизводительных ресурсах на основе прикладных квантово-химических и молекулярно-динамических пакетов (пакеты VASP, CPMD), в том числе с применением «гибридных» технологий расчетов на основе GPU- и мультиядерных ускорителей, и низкоуровневых средств доступа к ним от HTTPD сервера; (б) интернет-ориентированный инструментарий для пользовательского доступа к этим сервисам в виде комплекса высокоуровневых веб-интерфейсов для формирования и запуска задач на базе HTTPD-сервера; (в) средства размещения, хранения и обработки первичных данных и полученных результатов (сервер баз данных, сетевые хранилища; г) средства визуализации смоделированных структур и процессов и обработки полученных данных.

В состав высокоуровневых веб-сервисов помимо стандартных приемов дистанционной работы с прикладными пакетами вводятся упрощенные для пользователя средства по формированию (загрузка и редакция) и тестированию сложных конфигурационных файлов и массивов входящих данных, инструменты анализа и предварительной обработки полученных результатов. Также доступны средства запуска и мониторинга выполняемых заданий (включая упрощенный мониторинг ресурсов).

В настоящее время в ИПХФ РАН реализован работоспособный вариант подобной системы, основанный на локальных ресурсах (кластер на 176 двухпроцессорных узлов HP Proliant производительностью до 15 Тфлопс и «гибриды» установки на базе GPU Tesla C2075 – 2,6 Тфлопс), с поддержкой прикладных пакетов VASP (Vienna Ab initio Simulation Package, <https://www.vasp.at>) и CPMD (Car-Parrinello Molecular Dynamics, <http://cpmd.org>). Система многоуровневых веб-интерфейсов позволяет авторизовать пользователя комплекса, проводить мониторинг доступных ресурсов, подготовить проект вычислительного задания (включая создание и редакцию начальных данных и конфигурационных файлов, в том числе на основе имеющихся шаблонов задач и предыдущих проектов); запустить прикладной пакет в инфраструктуре комплекса на выбранном ресурсе; вести мониторинг выполнения задания (включая останов и перезапуск); по завершении – получить результаты счета, провести их пост-обработку (генерализацию, архивацию, конвертацию в другие форматы) и отправку в хранилище, а также обеспечить визуализацию смоделированных объектов и структур.

Основным подходом к решению поставленной задачи является комбинированное использование большинства современных вычислительных технологий для компьютерного моделирования в области квантовой химии и молекулярной динамики в рамках единой компьютерной среды, дружелюбной конечному пользователю-химику и позволяющей эффективно проводить расчеты в удаленном режиме. Создаваемая вычислительная среда позволяет более эффективно решать "тяжелые", многостадийные задачи в областях молекулярного моделирования наноматериалов и наноструктур, делая их доступными более широкому кругу исследователей. Модульная структура комплекса (вычислительной среды) позволяет достаточно просто вводить новые методы расчетов, выбирать различные варианты сочетания вычислительных сервисов, вводить новые функциональные возможности (в том числе новые прикладные пакеты) без ущерба общей работоспособности комплекса.

3. Результаты применения

С использованием комплекса проведено более 60 вычислительных экспериментов в области компьютерного моделирования компонентов низкотемпературных топливных элементов [4, 5] (нанокompозитные электроды на основе диоксидов переходных металлов и платины и мембраны на основе сложных гетерополиоксидов) и более 200 – при моделировании литий-ионных аккумуляторов новых типов [6-8] (композитные структуры на основе углерода и кремния – нанотрубки, наностержни, структурные кластеры кремния размерностью до 300 атомов, процессы

взаимодействия наноструктур с твердыми электролитами, поведение их в процессах зарядки/разрядки). Примеры смоделированных наноструктур приведены на рис.2

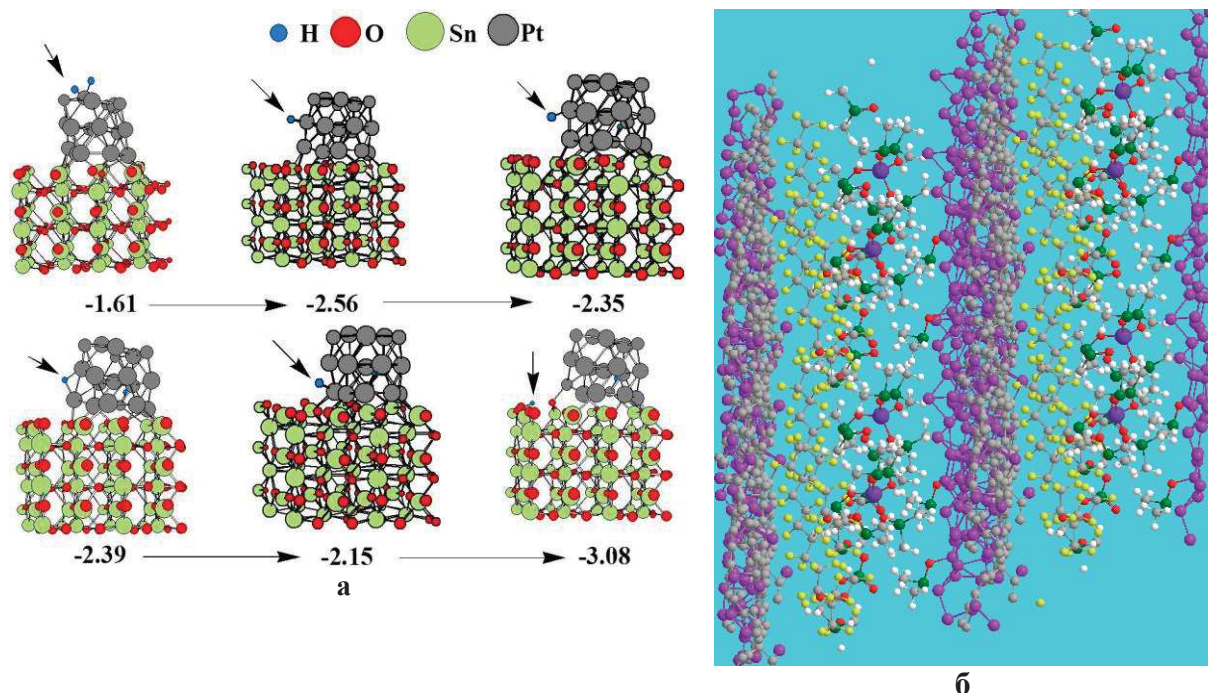


Рис. 2. Примеры результатов компьютерного моделирования с использованием веб-ориентированных вычислительных сервисов: (а) модель динамики движения водорода по кластеру платины Pt_{19} на поверхность диоксида олова $(SnO_2)_{64}$ [5]; (б) модель комплекса полимерного электролита LiNafion*8DMSO и слоев кремний-углеродной «нанобумаги» $Si_{32}C_{38}$.

Среднее эффективное время расчета кластеров Li_jSi_n ($n=2\div350$) и нановолокон $Li_jC_nSi_m$ возрастало с увеличением размерности кремний-углеродного фрагмента до 4 суток (78 часов на основе 4- ядерных процессоров Intel Xeon 5450 с частотой 3 ГГц) и более (с учетом усложнения структуры), время расчета литированных крупных мезоструктур кремния и агрегатов, армированных нанотрубками или нанопроволоками, увеличивается до десятков суток. Наиболее критичным параметром расчетов является объем памяти на ядро, при этом наблюдается эффект убыстрения расчетов при снижении количества выделяемых ядер при увеличении RAM на ядро. Для MD расчетов использовалось до 14000 шагов на расчет (например, разогрев до 400 K за 2000 шагов, выдержка при 400 K в течение 10000 шагов, охлаждение до 10 K за 2000 шагов и оптимизация структуры в стандартном режиме, временной шаг модели 1 фемтосекунда). Расчет комплексных структур типа описанных изображенных на рис.2б требует до 80000 ядрочасов. В целом, опыт применения показал, что происходит интенсификация труда химиков-исследователей (повышается количество проведенных расчетов) и повышение качества интерпретации полученных результатов. Существуют определенные проблемы в обеспечении безопасности как доступных ресурсов, так и пользовательской информации, но они постепенно разрешаются с развитием созданной вычислительной среды.

Литература

1. В.М. Волохов, Д.А. Варламов, А.В. Волохов, А.И. Прохоров, Г.А. Покатович Построение среды компьютерного моделирования нанокомпозитных материалов на базе комплекса вычислительных сервисов и высокоуровневых веб-интерфейсов // Научный сервис в сети Интернет: труды XVII Всероссийской научной конференции (21-26 сентября 2015 г., г.Новороссийск). – М.: ИПМ им. М.В.Келдыша, 2015. с. 63-68

2. В.М.Волохов, Д.А.Варламов, А.В.Волохов, А.В.Пивушков, Г.А.Покаатович, Н.Ф.Сурков
Грид-сервисы в вычислительной химии: достижения и перспективы // "Вестник Уфимского
Государственного авиационно-технического университета. Серия «Управление, вычисли-
тельная техника и информатика», 2011, т. 15, № 5 (45), с.161-169
3. Пивушков А.В., Волохов В.М., Варламов Д.А., Волохов А.В. Применение новых вычисли-
тельных технологий для повышения эффективности расчетов в грид-средах // "Вестник
Уфимского Государственного авиационно-технического университета. Серия «Управление,
вычислительная техника и информатика», 2013, т.17, № 2 (55), с.117-124
4. В.М. Волохов, Д.А. Варламов, Т.С. Зюбина, А.С. Зюбин, Г.А. Покаатович, А.В. Волохов
Квантово-химическое моделирование процессов в низкотемпературных электрохимических
топливных элементах // Альманах «Суперкомпьютерные технологии в науке, образовании и
промышленности», М.: изд-во МГУ, 2013, выпуск 5, с.172-176
5. Т. С. Зюбина, А. С. Зюбин, Ю. А. Добровольский, В.М. Волохов Водород на композитном
катализаторе Pt₂₉/SnO₂. Квантово-химическое моделирование // Известия Академии наук.
Серия химическая, 2015, № 4, С.752-758.
6. Зюбин А.С., Зюбина Т.С., Добровольский Ю.А., Волохов В.М. Анодные материалы на ос-
нове кремния и углерода: квантово-химическое моделирование // Журнал неорганической
химии, 2016, 61, 1, с.51–58, DOI:10.7868/S0044457X16010256
7. В.М. Волохов, Д.А. Варламов, Т.С. Зюбина, А.С. Зюбин, А.В. Волохов, Г.А. Покаатович Су-
перкомпьютерное моделирование транспортных и энергетических процессов в нанокompо-
зитных материалах на основе углерода и кремния // Параллельные вычислительные техно-
логии (ПаВТ'2016): труды X международной научной конференции (28 марта – 1 апреля
2016 г., г. Архангельск, САФУ). Челябинск: Издательский центр ЮУрГУ, 2016. с.105-117
8. В.М. Волохов, Д.А. Варламов, Т.С. Зюбина, А.С. Зюбин, А.В. Волохов Суперкомпьютерное
моделирование процессов взаимодействия кремний-углеродных наноструктурированных
электродов и твердых электролитов в Li-ионных источниках тока новых типов // Супер-
компьютерные дни в России: Труды международной конференции (26-27 сентября 2016 г.,
г. Москва). – М.: Изд-во МГУ, 2016. (1128 с.) с.690-699

The problem-oriented computing environment of computer modeling of nanocomposite materials on the basis of complex Web-based services

V.M. Volokhov¹, D.A. Varlamov^{1,2}, A.V. Volokhov¹, A.I. Prokhorov¹

Institute of Problems of Chemical Physics RAS¹, Institute of experimental mineralogy RAS²

At IPCP RAS it is created and successfully applied the computing environment intended for simplification of the solution of mass resource-intensive tasks on computer simulation of structures and properties of nanomaterials. The computing environment is based on heterogeneous computing resources and a complex of the web-based computing services and interfaces to application packages of quantum chemistry and molecular dynamics. The environment allows to simplify the solution of many problems of carrying out mass resource-intensive computational experiments in the field of modeling of nanocomposite materials and processes in them.

Keywords: high-performance calculations, nanocomposite materials, computing environment, web-oriented services and interfaces, computer simulation, quantum chemistry

References

1. V.M. Volokhov, D.A. Varlamov, A.V. Volokhov, A.I. Prokhorov, G.A. Pokatovich Postroenie sredy komp'yuternogo modelirovaniya nanokompozitnykh materialov na baze kompleksa vychislitel'nykh servisov i vysokourovnevnykh veb-interfejsov [Creation of the environment of computer simulation of nanocomposite materials on the basis of a complex of computing services and high level web interfaces] // Nauchnyy servis v seti Internet: trudy XVII Vserossiyskoy nauchnoy konferencii (21-26 sentyabrja 2015, Novorossiysk) [Scientific service on the Internet: Proc. XVII All-Russian scientific conference (September 21-26, 2015, Novorossiysk)], Moscow, Keldysh Institute of Applied Mathematics, 2015, p.63-68
2. V.M. Volokhov, D.A. Varlamov, A.V. Volokhov, A.V. Pivushkov, G.A. Pokatovich, N.F. Surkov Grid-servisy v vychislitel'noj himii: dostizheniya i perspektivy [Grid services in computational chemistry: achievements and perspectives] // "Vestnik Ufimskogo Gosudarstvennogo aviacionno-tehnicheskogo universiteta. Serija «Upravlenie, vychislitel'naja tehnika i informatika»" ["Bulletin of the Ufa State aerotechnical university. "Control, ADP Equipment and Informatics" series"], 2011, v.15, No 5(45), p.161-169
3. A.V. Pivushkov, V.M. Volokhov, D.A. Varlamov, A.V. Volokhov Primenenie novykh vychislitel'nykh tehnologij dlja povysheniya jeffektivnosti raschetov v grid-sredah [Use of new computing technologies for increase in efficiency of calculations in the grid-environments] // "Vestnik Ufimskogo Gosudarstvennogo aviacionno-tehnicheskogo universiteta. Serija «Upravlenie, vychislitel'naja tehnika i informatika»" ["Bulletin of the Ufa State aerotechnical university. "Control, ADP Equipment and Informatics" series"], 2013, v.17, No 2(55), p.117-124
4. V.M. Volokhov, D.A. Varlamov, T.S. Zyubina, A.S. Zyubin, G.A. Pokatovich, A.V. Volokhov Kvantovo-himicheskoe modelirovanie processov v nizkotemperaturnykh jelektrohimicheskikh toplivnykh jelementah [Quantum-chemical modeling of processes in low-temperature electrochemical fuel cell] Al'manah «Superkomp'yuternye tehnologii v nauke, obrazovanii i promyshlennosti [Almanac "Supercomputer technologies in science, education and industry"], Moscow, Publishing of the Moscow State University named Lomonosov, 2013, vol. 5, p. 172-176
5. T. S. Zyubina, A. S. Zyubin, Yu. A. Dobrovol'skii, and V. M. Volokhov Quantum chemical modeling of hydrogen migration on the Pt₂₉/SnO₂ composite catalyst // Russian Chemical Bulletin, 2015, 64(4), pp.752-758 DOI: 10.1007/s11172-015-0931-5

6. A. S. Zyubin, T. S. Zyubina, Yu. A. Dobrovol'skii, and V. M. Volokhov Silicon- and Carbon-Based Anode Materials: A Quantum-Chemical Modeling // *Russian Journal of Inorganic Chemistry*, 2016, Vol.61, No.1, pp.48–54 DOI: 10.1134/S0036023616010241
7. V.M. Volokhov, D.A. Varlamov, T.S. Zyubina, A.S. Zyubin, A.V. Volokhov, G.A. Pokatovich Superkomp'yuternoe modelirovanie transportnyh i jenergeticheskikh processov v nanokompozitnyh materialah na osnove ugleroda i kremnija [Supercomputer simulation of transport and energetic processes in nanocomposite materials on the basis of carbon and silicon] // "Parallel'nye vychislitel'nye tehnologii (PaVT'2016)": trudy mezhdunarodnoj nauchnoj konferencii (28 marta – 1 aprelja 2016 , Arkhangel'sk) [Parallel Computational Technologies (PCT'2016): Proceedings of the International Scientific Conference (28 March – 1 April 2015, Arkhangelsk)], Chelyabinsk, Publishing of the South Ural State University, 2016, p. 105-117
8. V.M. Volokhov, D.A. Varlamov, T.S. Zyubina, A.S. Zyubin, A.V. Volokhov Superkomp'yuternoe modelirovanie processov vzaimodejstviya kremnij-uglerodnyh nanostrukturirovannyh jelektrodov i tverdyh jelektrolitov v Li-ionnyh istochnikah toka novyh tipov [The supercomputer simulation of processes of interaction silicon-carbonic nanostructured electrodes and solid electrolytes in new types of Li-ion power sources] // Superkomp'yuternye dni v Rossii: Trudy mezhdunarodnoj konferencii (26-27 sentjabrja 2016, Moskva) [Russian Supercomputing Days 2016. Proceedings of the International Scientific Conference 26-27 September 2016, Moscow], Moscow, Publishing of the Moscow State University named Lomonosov, 2016, p. 690-699