

Создание проблемно-ориентированной среды компьютерного моделирования нанокompозитных материалов на базе комплекса веб-ориентированных вычислительных и инфраструктурных сервисов и интерфейсов*

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

Институт проблем химической физики РАН¹, Институт экспериментальной минералогии РАН²

Для массового проведения вычислительных экспериментов в рамках компьютерного моделирования нанокompозитных материалов различных типов и процессов, происходящих в них, весьма перспективным является создание проблемно-ориентированных ресурсов среднего размера, представляющих комплексы веб-ориентированных вычислительных сервисов для решения определенных классов задач, при этом обладающих интуитивными, дружелюбными конечному пользователю (часто неискушенному в суперкомпьютерных расчетах) интерфейсами, что позволяет во многом разрешить следующие проблемы:

- 1) объединить в рамках единых интерфейсов все стадии моделирования наноматериалов и нанообъектов на их основе – от формирования массивов исходных данных (с поддержкой наиболее часто употребляемых шаблонов задач) и выбора методов расчетов до получения интерактивных компьютерных 3-D моделей наноструктур и баз данных результатов моделирования с поддержкой разнообразных сервисов постобработки весьма объемных массивов результатов;
- 2) предоставить доступ к средствам моделирования максимально широкому кругу пользователей через организацию максимально дружелюбных пользователю веб-сервисов;
- 3) вовлечь в расчеты большинство доступных вычислительных ресурсов – локальные кластеры, высокопроизводительные «гибридные» установки на основе мультядерных сопроцессоров, ресурсные сайты различных распределенных сред (Globus, Unicore и т.п.);
- 4) соединять в рамках единого комплекса прикладные пакеты, ориентированные на разные аспекты моделирования нанообъектов – создание «вычислительных последовательностей» с выбором наиболее оптимальных пакетов и пулов ресурсов для них.

Большинство этих проблем плохо решаемы непосредственно в зоне ответственности больших суперкомпьютерных центров, поэтому очевидна необходимость построения проблемно-ориентированных пользовательских «шлюзов» в форме веб-ориентированных интерфейсов. К сожалению, при наличии в Российской Федерации достаточно мощных вычислительных суперкомпьютерных центров (МГУ, МСЦ, Саров, ИТМО, НГУ, ЮжУрГУ и т.п.) подобные проблемно-ориентированные центры достаточной мощности в области химии в настоящее время в РФ практически отсутствуют.

Опыт авторов по проведению широкомасштабных вычислительных экспериментов в области квантовой химии в течение 2004-2013 годов в ряде российских грид-проектов, 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 сформулировать достаточно оптимальную структуру прикладной компьютерной среды (программно-аппаратного комплекса), направленной на проведение широкомасштабных вычислений в области моделирования наноматериалов (рис.1).

Среда включает: (а) вычислительные сервисы, созданные на высокопроизводительных ресурсах на основе прикладных квантово-химических и молекулярно-динамических пакетов (VASP, CPMD), в том числе на базе GPU- и мультядерных ускорителей; (б) веб-

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

ориентированный инструментарий для пользовательского доступа к этим сервисам в виде комплекса высокоуровневых веб-интерфейсов для формирования, запуска и мониторинга вычислительных заданий; (в) средства размещения, хранения и обработки первичных данных и полученных результатов; (г) средства визуализации смоделированных структур и процессов и обработки полученных данных. В состав веб-сервисов помимо стандартных приемов дистанционной работы с прикладными пакетами вводятся дружелюбные пользователю средства по формированию и тестированию сложных конфигурационных файлов и массивов входящих данных, инструменты анализа и предварительной обработки полученных результатов. Также доступны средства запуска и мониторинга выполняемых заданий.

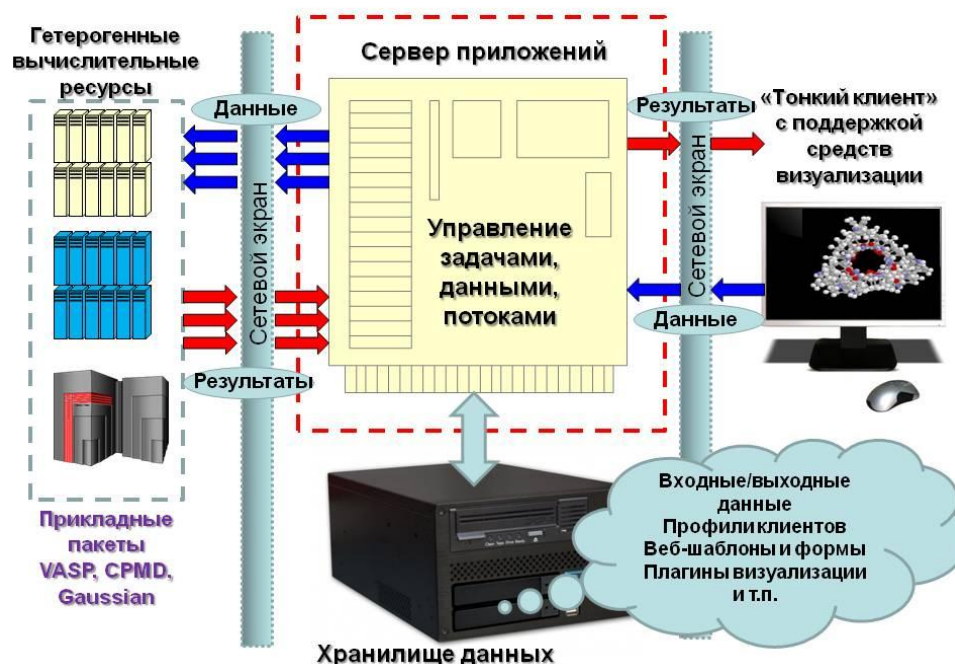


Рис. 1. Структура среды компьютерного моделирования нанокompозитных материалов на базе высокопроизводительных вычислительных ресурсов и веб-ориентированных вычислительных сервисов (интерфейсов) к ним

С использованием комплекса проведено более 200 вычислительных экспериментов в области компьютерного моделирования наноструктурированных компонентов низкотемпературных топливных элементов и литий-ионных источников тока новых типов. [1,2]

Литература

1. В.М. Волохов, Д.А. Варламов, Т.С. Зюбина, А.С. Зюбин, А.В. Волохов, Г.А. Покатович Квантово-химическое моделирование наноструктурированных компонентов низкотемпературных электрохимических топливных элементов // "Параллельные вычислительные технологии (ПаВТ'2014)", труды международной научной конференции (1–3 апреля 2014 г., г. Ростов-на-Дону). Челябинск: Издательский центр ЮУрГУ, 2014, (389 с.), с.235-242
2. В.М. Волохов, Д.А. Варламов, Т.С. Зюбина, А.С. Зюбин, А.В. Волохов, Г.А. Покатович Суперкомпьютерное моделирование транспортных и энергетических процессов в нанокompозитных материалах на основе углерода и кремния // Параллельные вычислительные технологии (ПаВТ'2016): труды X международной научной конференции (28 марта – 1 апреля 2016 г., г. Архангельск, САФУ). Челябинск: Издательский центр ЮУрГУ, 2016. с.105-117