ИПМ им.М.В.Келдыша РАН

Абрау-2017 • Труды конференции

Д.В. Пузырьков, В.О. Подрыга,
С.В. Поляков

**Облачный сервис для масштабных
молекулярно-динамических расчетов:
от идеи до реализации**

Рекомендуемая форма библиографической ссылки

Пузырьков Д.В., Подрыга В.О., Поляков С.В. Облачный сервис для масштабных молекулярно-динамических расчетов: от идеи до реализации // Научный сервис в сети Интернет: труды XIX Всероссийской научной конференции (18-23 сентября 2017 г., г. Новороссийск). — М.: ИПМ им. М.В.Келдыша, 2017. — С. 406-416. — URL: <http://keldysh.ru/abrau/2017/58.pdf> doi:[10.20948/abrau-2017-58](https://doi.org/10.20948/abrau-2017-58)

Облачный сервис для масштабных молекулярно-динамических расчетов: от идеи до реализации

Д.В. Пузырьков¹, В.О. Подрыга¹, С.В. Поляков¹

¹ИПМ им. М.В. Келдыша РАН

Аннотация. Развитие компьютерных технологий существенно расширило возможности вычислительного эксперимента. На современном этапе уже удается изучать свойства и процессы в сложных системах на молекулярном и даже атомарном уровнях. Одним из перспективных методов моделирования свойств различных материалов и их взаимодействия в технических системах является метод молекулярной динамики. В виду того, что изучение реальных свойств веществ требует создания сложных моделей и произведения масштабных вычислений, то необходим инструментарий для проектирования таких структур и учета уже существующих моделей. Кроме того, из-за необходимости использования НРС-систем для таких симуляций, необходима среда управления вычислениями. Для объединения систем решения таких задач хорошо подходит концепция унифицированной облачной среды, разработка которой и является направлением представленного исследования.

Ключевые слова: облачный сервис, молекулярная динамика, управление вычислениями, сервис-ориентируемая архитектура

1. Введение

На текущем этапе развития компьютерных технологий быстрый рост вычислительных мощностей существенно расширил возможности вычислительного эксперимента. Уже сейчас удается проводить детальное многомасштабное моделирование реальных физических процессов, а также изучать свойства сложных систем на молекулярном и даже атомарном уровнях. Наибольший интерес представляют научные задачи, связанные с исследованием сложных технологических процессов в реальных условиях.

Существует множество математических моделей, применяемых для решения таких задач. Это могут быть как модели сплошных сред, так и модели молекулярного и атомного взаимодействия. Одним из перспективных методов моделирования свойств веществ и поведения сложных структур является метод молекулярной динамики (МД) [1].

Метод МД оперирует частицами (молекулами, атомами), динамика которых описывается с помощью законов классической механики. Силы взаимодействия между частицами определяются различными физическими потенциалами. Эти потенциалы взаимодействия могут различаться для разных типов частиц, видов веществ, их состояний, а также физических условий

постановки задачи. Размер исследуемой системы частиц может варьироваться от десятков отдельных частиц до миллиардов частиц, представляющих собой в макромодели целый узел реального устройства. Молекулярно-динамическое моделирование позволяет производить точные расчеты динамики исследуемой системы, например, появление микротрещин в кристалле, или адсорбцию веществ.

Для примера на рис. 1 представлен один из шагов симуляции взаимодействия газа с металлом [2], где в качестве газа рассматривается азот, а в качестве металла – никель. В кадре присутствует срез моделируемой системы площадью $5 \times 5 \text{ нм}^2$ и виден физический эффект адсорбции. Стрелками показано направление движение молекул азота, цветом – их температура. На данном рисунке приведен лишь небольшой участок от всей моделируемой системы, размеры которой составляют $100 \times 100 \text{ нм}^2$, а высота – 1500 нм , что соответствует 8 миллионам атомов металла и 500 тысячам молекул газа.

Рис. 1. Визуализация шага симуляции взаимодействия газа (азот) с металлом (никель) методом молекулярной динамики

В виду того, что метод МД подразумевает расчет взаимодействия частиц "каждая с каждой", расчет такого типа становится вычислительно сложным. Существует некоторое количество методов оптимизации вычислений. Например, рассматривать взаимодействие не каждой с каждой, а каждой частицы с отобраным для нее множеством частиц, входящих в радиус взаимодействия. Под радиусом взаимодействия понимается такое расстояние, когда вклад в общую силу, действующую на текущую частицу со стороны частиц, не попавших в этот радиус, считается малым и не учитывается. Однако, эта задача все равно представляет собой полный перебор всех частиц, расчет расстояний между ними и определение частиц, попадающих в радиус

отсечения, а после вычисление сил взаимодействия, что в результате приводит к большим затратам процессорного времени.

Вышесказанное показывает, что для моделирования масштабных задач требуется использование высокопроизводительных вычислительных систем различного вида. Таковыми системами в данный момент являются суперкомпьютеры и GRID-системы. В большинстве случаев, НРС-системы представляют собой совокупность вычислителей со своей памятью и своим процессором (или несколькими), объединенных высокоскоростной сетью и предоставляющих MPI для расчетных приложений. Очевидно, что для проведения расчетов на таких системах требуется существенная модернизация расчетного кода, а именно параллелизация расчетов, как по памяти, так и по данным. Для метода МД такой модернизацией является пространственная декомпозиция расчетной области. В этом случае различным вычислителям НРС-системы назначается расчет небольшого участка всей исследуемой области, и обмен данными происходит только между "соседними" вычислителями.

2. Проблемы масштабного МД-моделирования

Рассмотрим цепочку действий ученого, необходимых для решения некой абстрактной задачи методом МД. Рассмотрим ее в подробностях, позволяющих выделить те моменты, которые требуют времени, усилий и внимания пользователя для успешного выполнения. Формально, такие действия можно разделить на 4 категории, соответствующие взаимодействиям исследователя с различными изолированными базами знаний или программными системами. Порядок перехода между такими категориями обычно соблюдается согласно тому, как они описаны ниже.

В качестве первой категории можно обозначить действия, связанные с взаимодействием пользователя и некой абстрактной базы знаний о строении и структуре материалов. В процессе работы с ней исследователю требуется:

- определиться с физическими свойствами и структурами частиц, которые будут участвовать в моделировании (материал, распределение частиц в нем);
- поставить физические условия, для которых будет проводиться моделирование;
- на основе предыдущих пунктов выбрать потенциалы взаимодействия частиц и найти подходящие под физические условия параметры структуры выбранного материала.

В случае сложной многокомпонентной модели такие взаимодействия подразумевают поиск подходящих параметров из уже проведенных ранее исследований. Такие изыскания остро ставят проблему повторного использования данных. Из-за того, что исследуемые системы могут содержать в себе миллиарды частиц и более, их моделирование может занимать очень

продолжительное время. Поэтому разумно использовать при исследовании новой системы частиц результаты ранее проведенных расчетов, полученных для систем меньшего размера при сходных физических условиях. Для реализации такой возможности требуется система учета, которая позволит накапливать и использовать в дальнейшем базу данных исследованных моделей и физических условий, соответствующих проведенным расчетам. В идеале такая система учета должна быть тесно интегрирована с вычислительной или управляющей средой, для того чтобы пополняться новыми результатами расчетов различных микросистем.

Вторая категория действий связана с проектированием геометрии расчетной области. Для этого используются визуальные редакторы или прямое описание структуры в файле метаописания. В основном работа с таким программным средством сводится к:

- описанию физической геометрии для каждой зоны, соответствующей различным материалам;
- описанию вспомогательных структур (термостаты, баростаты);
- описанию правил генерации атомистических данных для каждого материала, основанных на данных полученных из категории 1;
- описанию потенциалов взаимодействия для пар материал-материал, полученных из категории 1.

Существующие симуляторы предоставляют различные средства для решения этой задачи, и все они заключаются в создании специального файла, на основе которого в дальнейшем симулятор строит свое внутреннее представление данных. Однако, физическая геометрия исследуемой системы частиц может быть очень сложной. Не каждый МД-симулятор предоставляет средства для описания такой геометрии, и во множестве случаев задача распределения частиц физически правильным образом ложится на плечи сторонних приложений. Возникает вопрос о способе проектирования такой системы. В частности, для создания файлов метаописания геометрии и физических условий требуется специальный редактор, который позволит создавать необходимую геометрическую модель и погружать в нее необходимые конгломераты частиц. Если желаемая система является масштабной, то есть оперирует миллиардами частиц, то ее описание в файловом виде может занимать множество гигабайт дискового пространства. Этот факт ставит перед исследователями проблему параллельной генерации исходных данных на стороне расчетной программы.

В третью категорию следует отнести разворачивание и доставку исходных данных для симуляции на целевую НРС-систему. В общем случае включает следующие операции:

- копирование исходных кодов симулятора на целевую систему;
- компиляция расчетной программы;
- копирование исходных данных (бинарных или файлов описания);

- запуск процедуры генерации исходных данных на целевой системе по файлам описания.

В зависимости от выбранной исследователем расчетной программы, часть шагов может быть пропущена, однако задача все равно остается релевантной: подготовка исходных данных на доступной для расчета НРС-системе.

Способы и полнота доступа к различным суперкомпьютерным системам могут существенно различаться. В локальных сетях небольших организаций реализуется полномасштабный прямой и/или удаленный доступ ко всем вычислителям. В случае же использования больших вычислительных систем коллективного доступа возможности рядового пользователя, наоборот, сильно ограничены. Такое разнообразие способов доступа требует от пользователя знания, понимания и умения работы с множеством протоколов передачи данных и систем управления, таких как SLURM. Кроме того, процедура создания начальных данных и запуска расчетного приложения может иметь пошаговый характер, где каждый шаг может выполняться существенное время. Это означает дополнительную нагрузку на пользователя с точки зрения простоты управления задачей и увеличивает вероятность ошибок, которые приводят к существенным потерям времени.

К четвертой категории пользовательских действий относятся запуск расчета и его непрерывный мониторинг. МД-метод при неверно заданных параметрах может привести к физически некорректному результату, или к состоянию системы, которое было бы неожиданным для исследователя. Например, в случае симуляции кристаллической структуры неверно заданные параметры потенциала взаимодействия могут привести к ситуации, когда кристаллическая структура «рассыпается». Такие ситуации детектируются постоянной проверкой макропараметров моделируемой системы. При использовании больших НРС-систем общего доступа кроме мониторинга состояния расчета так же требуется мониторинг состояния самой НРС-системы, в виду того что в таких системах пользователям предоставляются учетные данные и квота на дисковое пространство и процессорное время. В результате пользователю, выполняющему масштабный расчет, не уместающийся на ресурсе по какой-либо квоте, приходится самостоятельно следить за использованием квот и в ручном режиме перезапускать задачи и сохранять рассчитанные данные по сети в доступное хранилище. При наличии у пользователя доступа к нескольким удаленным вычислительным системам ему приходится перемещать расчетные данные с одного ресурса на другой и перезапускать расчеты также в ручном режиме.

3. Средства проектирования, учета и слежения как единый сервис

Исходя из вышеописанных проблем, можно сформировать требования, предъявляемые к облачному сервису, нацеленному на решение задач масштабного МД-моделирования. Главная идея такого программного комплекса - дать конечному пользователю простую и универсальную систему

для проведения МД-симуляций. Основной задачей сервиса будет предоставление пользователю интерфейса для создания сложной геометрии, заполнения ее известными или новыми материалами, запуска расчета с использованием одного из поддерживаемых симуляторов и сохранение результатов в базу данных молекулярно-динамических расчетов (БДМР).

Эту задачу можно решить, если объединить в одну общую среду:

- редактор геометрии;
- набор приложений для генерации начальных данных;
- генератор файлов описания задачи для различных МД-симуляторов (LAMMPS, GROMACS и т.д.);
- базу данных молекулярно-динамических расчетов;
- средства управления вычислительными задачами.

Термин "облачный" в данном контексте понимается как многопользовательский web-сервис, который также должен предоставлять пользователям единую точку доступа как к БДМР, так и к доступным вычислительным ресурсам, поддерживающим процесс моделирования.

В виду технического назначения такой программной среды требуется описать некоторые предположения относительно связей ее компонент и их предполагаемой работой. Во-первых, редактор геометрии и метаданных должен строиться на CAD (computer-aided design) принципах. Упомянутая выше система учета должна быть автономным модулем, который в перспективе превратится в БДМР, содержащую данные о свойствах различных материалов. Для удобства пользования таким модулем требуется его тесная интеграция с общей расчетной средой. Данная интеграция позволит пополнять БДМР новыми результатами расчетов различных микросистем, а также файлами метаданных, созданными в редакторе геометрии. При этом должны быть обеспечены просмотр и визуализация всех компонент БДМР, в том числе, файлов метаданных, заданных этими файлами систем частиц, их геометрии и результатов моделирования. Кроме того, необходимы программы преобразования метаданных, полученных из редактора геометрии, в реальные расчетные структуры. Они должны быть универсальными и не зависеть от выбранной программы-симулятора. Очевидно, что все эти приложения должны поддерживать параллельную модель работы и уметь создавать распределенные данные, как того требует метод пространственной декомпозиции.

Если принять во внимание необходимость создания файлов метаданных, расчетной геометрии и ее наполнения на основе заранее рассчитанных распределенных данных, то возникает проблема доступа к различным файловым хранилищам, содержащим части БДМР. Части, из которых можно будет собрать требуемую систему частиц, могут иметь размер данных вплоть до десятков гигабайт и распределенную файловую структуру, что накладывает свои особенности на алгоритмы работы с такими данными.

Кроме поставленных вычислительных, проектировочных и учетных задач, возникает еще задача управления доступными вычислительными

ресурсами и автоматизированным запуском задач в доступной пользователю среде.

Требуется это для того, чтобы максимально эффективно и просто со стороны пользователя использовать НРС-системы, и предоставить ему единую точку доступа к множеству таких вычислителей.

4. KIAM MolSDAG – облачный сервис для решения задач МД

Удобным подходом к проектированию облачной среды предоставляющей необходимый функционал является подход сервис-ориентированной архитектуры. Каждая из подсистем среды, за исключением генераторов исходных данных (хотя они тоже хорошо ложатся на этот способ дизайна приложений), должна представлять собой отдельное приложение и инкапсулировать всю логику работы, предоставлять наружу только документированный API, позволяющий взаимодействовать с этим сервисом.

На рис. 2 представлена схема проектируемого облачного сервиса в общем виде. Стрелками показаны направления вызовов и опросов API зависимых сервисов.

Рис. 2. Общая структура облачного сервиса

Графический конструктор геометрии представляет собой CAD-like приложение с использованием WebGL (Web-based Graphics Library) для отрисовки трехмерной расчетной области. В его функции входит, прежде всего, построение геометрической модели проектируемой микросистемы. Для этого предлагается использовать иерархический подход, основанный на манипуляциях геометрическими примитивами. Клиент CAD-сервиса взаимодействует с серверной частью посредством вызовов API, построенного поверх HTTP протокола. Сообщения передаются в формате JSON. Так как вся информация об используемом пользователем материале хранится на стороне сервера, то при проектировании геометрии для МД-расчета систем частиц CAD-клиент уточняет у сервера различные параметры геометрической области, например, размеры, зависящие от длины элементарной ячейки. Также он запрашивает у сервера доступные материалы, способы генерации и поддерживаемые генераторы данных. Фактически, клиентское приложение является оберткой над серверным функционалом, не выполняющей ничего кроме функции пользовательского интерфейса. Серверная часть CAD-сервиса представляет собой набор методов редактирования геометрии, таких как создание, удаление или изменение геометрических примитивов. Кроме этого там присутствуют алгоритмы модификации геометрии в зависимости от свойств материала, например, длины ребра кристаллической решетки заданного материала. Этот сервис имеет прямую связь с БДМР, которая позволяет ему использовать метаданные уже существующих в базе материалов.

Помимо приложения для проектирования микросистем также требуется наличие готовой БДМР, хранящей в себе свойства, параметры и структуры уже когда-либо рассчитанных систем частиц. Основное предназначение такой базы данных - уменьшение времени, требующегося на генерацию и расчет типовых геометрий и микросистем. Например, для задачи приведения к термодинамическому равновесию микросистемы, имеющей форму микроканала с квадратным или круглым внутренним сечением, стенки которого состоят из никеля, а внутри заполнен азотом, в качестве начальных данных можно использовать уже приведенные к термодинамическому равновесию элементы этой микросистемы по отдельности. Такой подход помогает существенно сократить время, требующееся для моделирования, особенно если данная система имеет большой размер. Говоря “база данных” в данном контексте имеется в виду комплекс программ для учета различных геометрий, бинарных файлов и метаописаний материалов. Основными компонентами этого сервиса являются сама БДМР, система управления, предоставляющая API для взаимодействия с базой, и набор модулей для доступа к распределенным данным. Система управления данным сервисом реализует API, позволяющее через обмен сообщениями по протоколу HTTP модифицировать, перечислять и создавать новые записи. Она также следит за целостностью данных, их доступностью и корректностью. В ее задачи входит еще и управление визуализатором и упрощенный мониторинг состояния расчета (через цепочку

взаимодействий БДМР-Диспетчер-Мониторинг). Реализованная таким образом БДМР объединяет различные файловые хранилища. В качестве основных элементов хранения в них выступают файлы геометрии (служащие каркасами для микроструктур) и метафайлы описания рассчитанных микроструктур в текстовом и бинарном форматах, в общем случае состоящие из нескольких независимо хранящихся частей. CAD-приложение также имеет доступ к БДМР и позволяет пользователям выбирать подходящий материал из имеющихся в ней на данный момент.

В виду возможной масштабности создаваемой микросистемы, на этапе проектирования геометрии расчетной области никаких реальных процедур генерации и заполнения области частицами не происходит (данные процедуры инициируются на старте МД-вычислений). После того, как пользователь завершил редактирование структуры, на выходе у редактора получается текстовый удобный для чтения человеком файл в формате YAML, который и называется метафайлом. Данный файл содержит метаописание спроектированной микросистемы, включая все необходимые для ее генерации и расчета свойства и параметры. Этими параметрами являются данные геометрических объектов, имена и параметры материалов, ссылки на процедуры обработки данных на разных этапах моделирования. Используя этот файл, система управления генераторами комплекса KIAM MolSDAG инициирует процесс создания сценария генерации начальных данных. Для создания сценария генерации используется специальный модуль сервиса. Его задачей является подготовка полного комплекта данных, необходимых для правильного создания микросистемы на стороне вычислительного узла. На выходе у этого модуля получается архив со скриптовым файлом сценария и данными, которые невозможно получить с вычислительного узла. Этими данными являются программы-генераторы структуры вещества, используемые в данном сценарии, ссылки на бинарные файлы описания веществ, либо сами файлы, если таковые невозможно загрузить со стороны вычислительной программы.

Для фактической генерации большой микросистемы на основе метафайла, полученного от CAD-сервиса, используется набор параллельных приложений. Из соображений расширяемости системы для генерации кристаллических решеток и других атомистических данных (координаты, начальные скорости частиц и др.) был выбран подход на основе микро-приложений. На основе этих микро-приложений строится специальный конвейер, где каждый блок геометрических элементов обрабатывается отдельным приложением – ступенью конвейера, соответствующей типу элементов. Например, для металла в твердом состоянии вызывается блок генерации кристаллических решеток, а для газа вызывается генератор, реализующий равномерное пространственное распределение молекул по заданному объему. На выходе каждого микро-приложения получается файл с описанием сгенерированной микросистемы, располагающейся в соответствующей геометрической области. Полученные

бинарные файлы микросистем обрабатываются другими микро-приложениями, задача которых состоит в объединении всех микросистем в единое целое с учетом соответствующих правил фильтрации. В виду того, что предполагается поддержка разнотипных вычислительных узлов, то программы-генераторы поставляются либо в скриптовом виде, либо в виде исходных кодов. Отсюда следует, что первым шагом выполнения файла сценария всегда является компиляция этих приложений.

Диспетчером задач в программном комплексе KIAM MolSDAG является отдельный сервис, предоставляющий пользовательский API для генерации сценариев и управлением ими на стороне расчетной программы. Он взаимодействует с системой управления задачами KIAM Job_Control [3-6] и инкапсулирует в себе логику многопользовательской работы с системой. Фактически, он создает прослойку между пользователем и системой управления заданиями, позволяя по упрощенной схеме взаимодействовать с системой генерации сценариев. Основное предназначение этого сервиса - создание файла описания работы для KIAM Job_Control, загрузка задания в эту систему и отслеживание результатов его выполнения через доступный программный интерфейс.

В качестве МД-симуляторов пока предполагается использовать модули молекулярной динамики программного комплекса GIMM_NANO [7-9], а также пакет молекулярного моделирования LAMMPS [10]. Предлагаемая архитектура разрабатываемого сервиса позволяет в будущем расширить механизм создания исходных данных для использования с любым средством МД-моделирования.

5. Заключение

В работе представлены идея и прототип реализации облачного сервиса KIAM MolSDAG, предназначенного для проектирования в графическом режиме микросистем большого объема. Целью создания таких микросистем является детальное молекулярно-динамическое исследование процессов их эволюции и проявляемых при этом свойств. Процесс проектирования в рамках облачного сервиса предполагает как создание (генерацию) микросистем на основе новых данных, так и их компоновку на основе ранее сгенерированных и исследованных микроструктур. Основной задачей сервиса является предоставление пользователю интерфейса для генерации метаописания масштабной микросистемы, а затем подготовку исходных данных для ее численного анализа с помощью различных МД-симуляторов, например, таких как МД-модули GIMM_NANO или пакет LAMMPS. Новизна предлагаемого решения состоит в том, что разработанная технология генерации микроструктур поддерживает распределенное хранение готовых элементов и сборку из них микросистем еще большего размера. В перспективе разрабатываемый сервис будет содержать множество генераторов микроструктур и программ заполнения областей сложной формы частицами различных типов. Отдельные элементы сервиса уже реализованы и подтвердили эффективность общей концепции сервиса.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований, проекты 15-07-06082-а, 15-29-07090-офи_м.

Литература

1. Frenkel D., Smit B. Understanding Molecular Simulation. From Algorithm to Applications. — New York: Academic Press, 2002. — 638 p.
2. Подрыга В.О., Поляков С.В., Пузырьков Д.В. Суперкомпьютерное молекулярное моделирование термодинамического равновесия в микросистемах газ-металл // Вычислительные методы и программирование. — 2015. — Т. 16, Вып. 1. — С. 123-138.
3. Puzyrkov D., Podryga V., Polyakov S., Iakobovskii M. KIAM_JOB_CONTROL task management environment and its application to cloud and GRID computing // Selected Papers of the 7th International Conference Distributed Computing and Grid-technologies in Science and Education (GRID 2016), ed. by V. Korenkov, T. Zaikina, F. Nechaevskiy (July 4-9, 2016, Dubna, Russia). — CEUR Workshop Proceedings, 2017. — Vol. 1787. — P. 416-422.
4. Пузырьков Д.В., Подрыга В.О., Поляков С.В. Распределенная обработка данных в задачах моделирования термодинамического равновесия в микросистемах газ-металл методами молекулярной динамики // Вестник УГАТУ. — 2016. — Т. 20, № 1 (71). — С. 175-186.
5. Puzyrkov D.V., Podryga V.O., Polyakov S.V. Parallel processing and visualization for results of molecular simulations problems // Proceedings of the Institute for System Programming. — 2016. — Vol. 28, Issue 2. — P. 221-242.
6. Puzyrkov D., Polyakov S., Podryga V. Visualization for Molecular Dynamics Simulation of Gas and Metal Surface Interaction // EPJ Web of Conferences. — 2016. — Vol. 108. — Art. 02037 (6 p.).
7. Бондаренко А.А., Поляков С.В., Якобовский М.В., Косолапов О.А., Кононов Э.М. Программный комплекс GIMM_NANO. // Международная суперкомпьютерная конференция "Научный сервис в сети Интернет: все грани параллелизма", 23 - 28 сентября 2013 г., г. Новороссийск, CD-proceedings, 1-5 pp.
8. Подрыга В.О. Параллельная программа расчета на ГПУ термодинамического равновесия в микросистемах газ-металл GIMM_APP_MD_GPU_Gas_Metal программного комплекса GIMM_NANO, версия 1. Свидетельство о государственной регистрации программ для ЭВМ № 2015618972, 20 августа 2015.
9. Подрыга В.О., Поляков С.В. Параллельная программа расчета на ЦПУ термодинамического равновесия в микросистемах газ-металл GIMM_APP_MD_CPU_Gas_Metal программного комплекса GIMM_NANO, версия 1. Свидетельство о государственной регистрации программ для ЭВМ № 2015618870, 19 августа 2015.
10. LAMMPS. — URL: <http://lammps.sandia.gov/>.