

УДК 004.75

ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЙ КЛАСТЕР ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ БИОХИМИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ

Остапенко О.Д. (ИТМО)

Научный руководитель – Клименков С.В. (ИТМО)

Введение. В настоящее время моделирование физико-химических процессов является ключевым инструментом в научных исследованиях, а также в промышленности, медицине и других областях. Однако, с ростом сложности моделей и увеличением объема данных, требуемого для анализа, вычислительная нагрузка становится все более значительной. Это приводит к необходимости использования вычислительных кластеров для обеспечения достаточных вычислительных ресурсов.

В контексте решения проблемы была поставлена задача использовать программный продукт Gromacs. Он является одним из наиболее популярных программных пакетов для моделирования биохимических процессов [1].

В рамках поставленных задач было необходимо проанализировать требования к будущей системе, разработать внутреннюю архитектуру организации кластера на основе этих требований, выбрать соответствующий набор программных продуктов и создать вычислительный кластер из четырех узлов. Далее была проведена проверка работоспособности этого кластера.

Основная часть. Для выполнения поставленной задачи по оптимизации вычислительных ресурсов для биохимического моделирования был создан вычислительный кластер на основе четырех узлов с использованием программного пакета Gromacs.

Кластер был организован с применением архитектуры master-slave, при этом в качестве менеджера задач был выбран планировщик Slurm [2]. Это позволило эффективно распределять вычислительные задачи между узлами кластера, обеспечивая оптимальное использование ресурсов. Для реализации параллельных вычислений была принята реализация интерфейса MPI — OpenMPI, которая соответствовала требованиям совместимости с другими используемыми программными продуктами. Дополнительно к этим компонентам была сконфигурирована система NFS (Network File System) для централизованного хранения обработанных данных. Проведенное тестирование данного кластера подтвердило его работоспособность.

Таким образом, использование Gromacs в сочетании с кластером и планировщиком задач Slurm становится эффективным инструментом для проведения биохимических исследований. Сформированное решение позволило существенно увеличить общую вычислительную мощность системы, обеспечивая быстрое выполнение сложных расчетов.

Выводы. Было предложено комплексное решение, направленное на оптимизацию вычислительных ресурсов и масштабирование системы. Это позволит проводить более масштабные исследования в области биофизики и биохимии в будущем.

Список использованных источников:

1. GROMACS documentation. - URL: <https://manual.gromacs.org> (дата обращения: 21.08.2023).
2. Slurm Workload Manager — Documentation. - URL: <https://slurm.schedmd.com/documentation.html> (дата обращения: 04.09.2023).