

УДК 621.365

Основные научно–технические проблемы применения гибридных высокопроизводительных вычислительных комплексов в материаловедении*

© 2019 г. К. И. Волович[§], С. А. Денисов

*Федеральный исследовательский центр «Информатика и управление»
Российской академии наук,
ул. Вавилова, д. 44, корп. 2, Москва, 119333, Россия*

Аннотация. В статье рассматриваются вопросы применения гибридных высокопроизводительных комплексов для исполнения программных систем, предназначенных для расчета электронной структуры и моделирования материалов на атомном уровне. Современные программные системы, предназначенные для решения задач материаловедения используют для увеличения производительности возможности различных аппаратных ускорителей вычислений. Использование таких вычислительных технологий требуют адаптации программного кода приложений к гибридным вычислительным архитектурам, включающим в себя классические центральные процессоры (CPU) и специализированные графические ускорители (GPU). Применение крупных вычислительных гибридных комплексов требует разработки методов обеспечения загрузки таких вычислительных комплексов, которые позволят эффективно использовать вычислительные ресурсы и избегать простоя оборудования. В первую очередь данные методы должны позволять обеспечивать параллельное выполнение пользовательских приложений, использующих ускорители вычислений. Однако, на практике программные среды, предназначенные для решения прикладных задач не могут быть развернуты в одной вычислительной среде из-за несовместимости программного обеспечения. С целью преодоления этого ограничения и обеспечения параллельного выполнения разнотипных задач материаловедения создание индивидуальных сред исполнения заданий на основе технологий виртуализации и облачных технологий. Развитием технологий виртуализации и предоставления облачных сервисов является построение цифровых платформ. В статье предлагается использование цифровой платформы для размещения научных сервисов материаловедения, которые обеспечивают расчеты с использованием различных прикладных программных систем. Цифровые платформы позволяют предоставить единый интерфейс пользователей к научным сервисам материаловедения. Платформа предоставляет возможности по поиску необходимых научных сервисов, передаче исходных данных и результатов между пользователями, платформой и гибридными высокопроизводительными комплексами.

Ключевые слова: высокопроизводительный вычислительный комплекс, гибридная архитектура, графический ускоритель, electronic structure calculations, quantum–mechanical molecular dynamics, VASP, Quantum ESPRESSO

Введение

Современной тенденцией в науке является возрастающая роль компьютерных расчетов [1]. Современные программные системы, предназначенные для решения задач материаловедения и других областей науки, требуют огромных вычислительных ресурсов [2—5]. Наибольшую эффективность они

проявляют при развертывании в высокопроизводительных комплексах, которые обладают высокой производительностью и позволяют решать задачи за приемлемое время с достаточной точностью [6, 7].

В высокопроизводительных комплексах происходит активное внедрение гибридных архитектур. В вычислительные системы добавляются специальные компоненты — специализированные графические ускорители — GPU, которые позволяют значительно повысить производительность вычислений и сократить время научных расчетов.

Программные системы материаловедения используют графические ускорители для проведения расчетов. В качестве примера можно привести программные системы VASP (*The Vienna Ab initio Simulation Package*) и Quantum ESPRESSO.

Волович Константин Иосифович^{1,§} — канд. техн. наук, старший научный сотрудник, e-mail: KVolovich@frccsc.ru; **Денисов Сергей Анатольевич**¹ — ведущий инженер, e-mail: SDenisov@frccsc.ru

[§] Автор для переписки

* Статья подготовлена по материалам доклада, представленного на I-й международной конференции «Математическое моделирование в материаловедении электронных компонентов», Москва, 21—23 октября 2019 г.

Эти программные системы проявляют наибольшую эффективность при монопольном использовании вычислительных ресурсов: RAM (оперативное запоминающее устройство), CPU (классический центральный процессор), GPU.

Отметим, что при эксплуатации гибридного высокопроизводительного комплекса возникает задача управления ресурсами и разделения их между группой пользователей. Необходимо разработать технологии, которые обеспечивают выделение ресурсов приложениям материаловедения для разных пользователей и научных коллективов.

Современным подходом в организации вычислительного процесса является использование технологий виртуализации и облачных технологий. Облачные технологии позволяют предоставлять пользователям услуги SaaS и PaaS. Целесообразно предоставлять научным командам прикладные системы материаловедения как облачные сервисы.

Цель работы — рассмотрение основных проблемы и подходов к предоставлению программного обеспечения материаловедения в среде гибридного высокопроизводительного комплекса с использованием облачных технологий.

Аспекты применения облачных технологий в гибридном высокопроизводительном комплексе при выполнении задач материаловедения

Применение облачных технологий является сегодня актуальной тенденцией во всех областях, связанных с информационными технологиями [7, 8]. Предоставление сервисов гибридных высокопроизводительных вычислений в области материаловедения не является исключением.

В настоящее время существует ряд программных систем, выполняющих решение задач в разных областях материаловедения. Такие системы как ABINIT, VASP, Quantum ESPRESSO, LAMMPS, MEER, MPB, OpenFOAM могут выполняться на гибридных высокопроизводительных комплексах, однако требуют подготовки среды исполнения, настройки системы организации вычислительного процесса, организации параллельных вычислений [9].

От вычислительной среды требуется большая гибкость и адаптивность к изменяющимся требованиям со стороны приложений и задач пользователей. При этом можно выделить основные проблемы, возникающие при применении облачных технологий:

- проблема развертывания кода программной системы материаловедения в среде гибридного высокопроизводительного комплекса;
- проблема адаптации программного кода пользователя к гибридному вычислителю;
- проблема создания индивидуальной среды исполнения заданий [10].

Для решения указанных проблем необходима

разработка методов и алгоритмов адаптации и исполнения прикладных задач пользователей на гибридном вычислительном кластере, использующем для выполнения вычислений специализированные ускорители вычислений. Решения по адаптации программного кода на языках различных уровней к целевой платформе гибридного вычислительного кластера, алгоритмы предоставления задачам вычислительных ресурсов в условиях многозадачной среды, а также методы создания адаптированной среды исполнения заданий с использованием технологий виртуализации требуют научной проработки и являются актуальными на сегодняшней стадии развития теории и практики предоставления вычислительных ресурсов гибридной архитектуры научным коллективам.

Применение облачных технологий, с одной стороны, обеспечивает ряд преимуществ, связанных с единым подходом по предоставлению сервисов пользователям, а, с другой стороны, порождает проблемы, вызываемые необходимостью предоставлять широкий спектр услуг и адаптировать исполняющую среду вычислителя к потребностям каждой пользовательской задачи.

Вопросы предоставления ресурсов таких систем и одновременного исполнения различных по научной направленности задач требуют решения с точки зрения разработки эффективных алгоритмов организации вычислительного процесса. Необходимо обеспечить эффективную загрузку гибридного комплекса задачами различного типа, позволяющими минимизировать простои оборудования и сократить время исполнения научных задач.

Отдельной научной проработки требуют вопросы адаптации прикладного программного кода к архитектуре гибридного вычислительного комплекса. Данная задача должна включать классификацию программного обеспечения по степени мобильности, подходы к переводу программного кода на технологии, позволяющие использовать ускорители вычислений и создание индивидуальной среды исполнения научной задачи на ресурсах гибридного вычислительного комплекса.

В результате решения проблем по созданию индивидуальной среды исполнения и развертывания в ней системного программного обеспечения, программного пакета материаловедения и пользовательских приложений могут быть созданы сервисы типа SaaS и PaaS. На рис. 1 показан пример обращения научных коллективов к сервисам материаловедения. Для каждого запроса к сервису создается индивидуальная вычислительная среда, в которой разворачивается программная система для проведения научных расчетов. Технологии виртуализации обеспечивают независимое параллельное функционирование расчетных задач в гибридном высокопроизводительном комплексе.

В качестве основы для развертывания виртуальных сред могут использоваться образы виртуальных машин, содержащих полный комплект программного обеспечения, необходимого для решения прикладной задачи. В этом случае пользователю предоставляется сервис типа SaaS.

Другой возможностью предоставления виртуальной среды является развертывание в ней какого-либо специализированного программного пакета (*framework*) с использованием которого пользователь разворачивает собственное программное обеспечение, предназначенное для решения задач материаловедения. В этом случае пользователь получает сервис PaaS и на его основе создает вычислительную среду для решения прикладной задачи. Отметим, что в дальнейшем на основе таких решений могут разворачиваться сервисы SaaS.

Повышение производительности задач материаловедения на основе графических акселераторов

Использование графических ускорителей существенно повышает производительность решения научных задач и снижает время выполнения приложений. Необходимо отметить, что степень повышения производительности зависят от типа ускорителя и типа прикладной задачи [11]. Однако, в общем случае, применение гибридных высокопроизводительных комплексов приводит к повышению качества вычислительных сервисов.

В работе [12] рассматриваются вопросы предоставления высокопроизводительных ресурсов как облачного сервиса, проводится анализ открытых облачных платформ (Amazon, IBM, Google), приводятся подходы к использованию специализированных вычислительных ускорителей для повышения производительности вычислительных комплексов для расширения услуг облачных платформ, что требует применения гибридных архитектур построения вычислительных систем. Применительно к задачам материаловедения, можно отметить, что большинство программных систем, предназначенных для проведения расчетов, используют ресурсы GPU для ускорения вычислений.

Также наблюдается тенденция адаптации алгоритмов решения прикладных задач к условиям выполнения на вычислительных средствах гибридной архитектуры, оснащенных ускорителями вычислений.

Вычислительные алгоритмы отличаются в зависимости от прикладной задачи, но для всех областей характерно использование механизмов гибридных высокопроизводительных комплексов:

– MPI — технология, позволяющая задействовать одновременный параллельный запуск процессов и организовать обмен данными между ними;

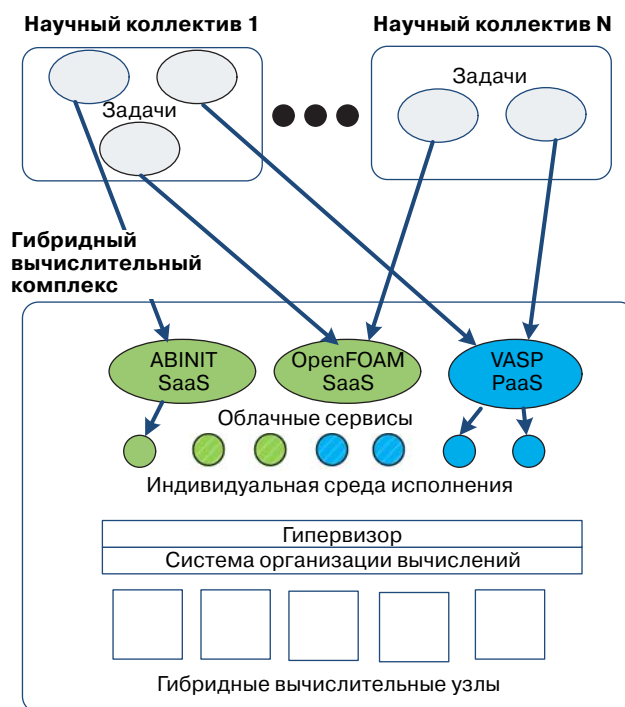


Рис. 1. Облачные сервисы в гибридном комплексе

Fig. 1. Cloud services for materials science in hybrid HPC

– CUDA — технология доступа и выполнения вычислений на графических ускорителях.

Таким образом, имеющиеся у научных коллективов разработки, направленные на решение прикладных задач могут быть перенесены на средства гибридного высокопроизводительного вычислительного комплекса, однако требуется доработка с учетом использования новых технологий.

При доработке, естественно, должен учитываться фактор целесообразности, показывающий, насколько эффективно будет решаться задача с использованием гибридных технологий и каких затрат потребует переработка кодов и алгоритмов.

Однако тенденция внедрения гибридных технологий показывает, что преимущества, предоставляемые гибридными вычислителями настолько велики, что происходит миграция имеющегося программного обеспечения и алгоритмов на эти технологии.

Интеграция сервисов материаловедения с помощью цифровой платформы

Современной тенденцией предоставления вычислительных сервисов являются облачные вычисления и платформенный подход к предоставлению сервисов.

Цифровая платформа для научных исследований представляется собой информационный объект, позволяющий поставщикам услуг размещать информацию о научных услугах предоставлять доступ к этим услугам через единый информационный портал цифровой платформы. Соответственно, потребители научных услуг могут получать информацию

об имеющихся услугах из единого реестра цифровой платформы и осуществлять заказ, исполнение и получение результатов через портал цифровой платформы. Подробно построение цифровых платформ для научных исследований описано в [13, 14].

Таким образом, предоставление услуг гибридных вычислительных комплексов как сервиса цифровой платформы является логичным развитием концепции облачных вычислений и платформенных технологий [15, 16].

В области материаловедения данная модель позволяет пользователю реестр сервисов, обеспечивающих решение прикладных задач в этой области.

На рис. 2 показан пример доступа пользователя к облачным вычислительным ресурсам цифровой платформы материаловедения.

Сервис поиска обеспечивает поиск в реестре готовых сервисов, разработанных по технологии, описанной выше. Возможен доступ к этим сервисам через единую точку входа цифровой платформы с использованием общей аутентификации технологии SSO.

Услуга PaaS очень удобна для *research teams* для развертывания и эксплуатации собственного программного обеспечения на платформе, а также *frameworks* и интегрированных сред.

В качестве примеров использования PaaS в области материаловедения можно привести примеры создания и эксплуатации сервисов расчета

электронной структуры на основе средств Quantum ESPRESSO [17].

В области предоставления научных сервисов ярким примером PaaS является предоставление услуг гибридных высокопроизводительных вычислительных комплексов для выполнения расчетов, требующих больших вычислительных мощностей. Такие расчеты используются во многих областях современной науки и услуги суперкомпьютерных центров востребованы со стороны научных коллективов самых разных областей знания [18]. Оговоримся, что в общем случае услугу суперкомпьютерного центра по предоставлению вычислителей нельзя в явном виде считать PaaS именно в терминах облачных вычислений. Алгоритмы распределения ресурсов, выделения вычислителей и обслуживания пользователей суперкомпьютеров отличаются от классической работы облачных провайдеров. В частности, для ускорения процессов вычислений в суперкомпьютерах не используется виртуализация и параллельная работа одного вычислительного блока в интересах группы пользователей. Используется пакетная обработка заданий, очереди заданий и другие методы организации вычислительного процесса, позволяющие оптимизировать работу супервычислителя [19].

Публикация и предоставление услуг гибридных вычислительных комплексов в цифровой платформе осуществляется путем реализации протоколов информационного взаимодействия, предусмотренных в цифровой платформе. Для этого разрабатываются специализированные интерфейсные модули — адаптеры, позволяющие производить обмен данными между сервисами управления цифровой платформой и вычислительного комплекса. При этом необходимо иметь в виду, что сервис управления цифровой платформой не выполняет функций управления вычислительным процессом, а предоставляет задания на вычисления и исходные данные, полученные цифровой платформой. Также через средства цифровой платформы может осуществляться он-лайн доступ пользователя к инструментальным средствам вычислительного комплекса для выполнения подготовки и тестирования расчетных задач.

Таким образом, пользователь гибридного вычислительного комплекса получает облачные услуги вычислительного комплекса (SaaS, PaaS) через унифицированные

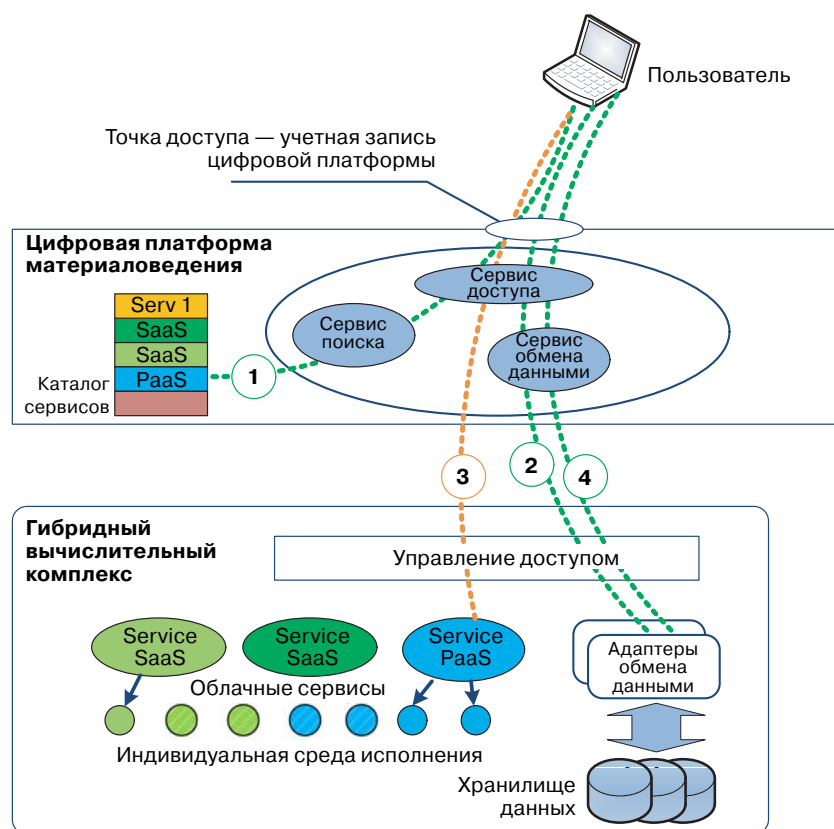


Рис. 2. Доступ к вычислительному комплексу через цифровую платформу
Fig. 2. Access to the HPC cluster through the digital platform

интерфейс цифровой платформы для научных исследований.

Заключение

Программные системы материаловедения требуют больших объемов вычислительных ресурсов. Целесообразно их исполнение в средах гибридных высокопроизводительных комплексов. Современным эффективным решением по выполнению этих программных систем является создание индивидуальных сред исполнения на основе технологий виртуализации. Технологии контейнеров позволяют создать изолированные виртуальные объекты, содержащие все необходимое программное обеспечение для выполнения расчетов системы материаловедения. Пользователю может быть предоставлена полностью готовая среда для выполнения расчетов. В этом случае он получает облачную услугу SaaS, имеет возможность загрузить данные и произвести вычисления. Другим вариантом использования облачной вычислительной услуги является сервис PaaS. В этом случае пользователь получает программную среду, содержащую необходимые программные инструменты. Он разворачивает свое собственное программное обеспечение, предназначенное для расчетов системы материаловедения, производит настройку лицензий, программной среды и выполнение расчетов.

Предпочтительным режимом предоставления ресурсов гибридного высокопроизводительного комплекса для решения задач материаловедения является PaaS на основе технологии контейнеров. В этом случае наиболее полно и гибко могут быть использованы ресурсы кластера, а также возможности программного обеспечения материаловедения по работе с графическими ускорителями [20].

Библиографический список

- Абрамов С. М., Лилитко Е. П. Состояние и перспективы развития вычислительных систем сверхвысокой производительности // Информационные технологии и вычислительные системы. 2013. № 2. С. 6—22.
- Журавлев А. А., Ревизников Д. Л., Абгарян К. К. Метод дискретных элементов с атомарной структурой. Материалы XXI международной конференции по вычислительной механике и современным прикладным программным системам (ВМСППС'2019). Москва, 2019. С. 59—61.
- Микурова А. В., Скворцов В. С. Создание обобщенной модели предсказания ингибирования нейраминидазы вируса гриппа различных штаммов // Биомедицинская химия. 2018. Т. 64, Вып. 3. С. 247—252. DOI: 10.18097/BMCS20186403247
- Микурова А. В., Скворцов В. С., Раевский О. А. Компьютерная оценка селективности ингибирования мускариновых рецепторов M1–M4 // Biomedical Chemistry: Research and Methods. 2018. Т. 1, № 3. С. e00072. DOI: 10.18097/BMCRM00072
- Vouzis P. D., Sahinidis N. V. GPU-BLAST: using graphics processors to accelerate protein sequence alignment // Bioinformatics. 2011. V. 27, Iss. 2. P. 182—188. DOI: 10.1093/bioinformatics/btq644
- Горчаков А. Ю., Малкова В. У. Сравнение процессоров Intel Core-i7, Intel Xeon, Intel Xeon Phi и IBM Power 8 на примере задачи восстановления начальных данных // International Journal of Open Information Technologies. 2018. Т. 6, № 4.
- Volkov S., Sukhoroslov O. V. Simplifying the use of clouds for scientific computing with Everest // Procedia Computer Science. 2017. V. 119. P. 112—120. DOI: 10.1016/j.procs.2017.11.167
- Волович К. И., Зацаринный А. А., Кондрашев В. А., Шабанов А. П. О некоторых подходах к представлению научных исследований как облачного сервиса // Системы и средства информ. 2017. Т. 27, № 1. С. 73—84. DOI: 10.14357/08696527170105
- Горчаков А. Ю. Использование OPENMP для реализации многопоточного метода неравномерных покрытий // Перспективные информационные технологии (ПИТ 2018). Тр. Международной научно-технической конференции. Самара: Изд-во Самарского научного центра РАН, 2018. С. 613—616.
- Волович К. И., Денисов С. А., Мальковский С. И. Формирование индивидуальной среды моделирования в гибридном высокопроизводительном вычислительном комплексе // Материалы I международной конференции «Математическое моделирование в материаловедении электронных компонентов. МММЭК-2019». М.: МАКС-Пресс, 2019. С. 21—24.
- Afanasyev I., Voevodin V. The comparison of large-scale graph processing algorithms implementation methods for Intel KNL and NVIDIA GPU // Supercomputing. RuSCDays 2017. Communications in Computer and Information Science. Springer, Cham, 2017. V. 793. P. 80—94. DOI: 10.1007/978-3-319-71255-0_7
- Ding F., Mey D., Wienke S., Zhang R., Li L. A Study on today's cloud environments for HPC applications // Third International Conference, CLOSER 2013. Cloud Computing and Services Science. Berlin (Germany): Springer, 2014. P. 114—127. DOI: 10.1007/978-3-319-11561-0_8
- Zatsarinny A. A., Gorshenin A. K., Kondrashev V. A., Volovich K. I., Denisov S. A. Toward high performance solutions as services of research digital platform // Procedia Computer Science. 2019. V. 150. P. 622—627. DOI: 10.1016/j.procs.2019.02.078
- Зацаринный А. А., Горшенин А. К., Волович К. И., Колин К. К., Кондрашев В. А., Степанов П. В. Управление научными сервисами как основа национальной цифровой платформы «Наука и образование» // Стратегические приоритеты. 2017. № 2. С. 103—113.
- Кондрашев В. А., Волович К. И. Управление сервисами цифровой платформы на примере услуги высокопроизводительных вычислений // Материалы Международной научной конференции. Воронеж, 2018.
- Карцев А., Мальковский С. И., Волович К. И., Сорокин А. А. Исследование производительности и масштабируемости пакета Quantum ESPRESSO при изучении низкоразмерных систем на гибридных вычислительных системах // Материалы I международной конференции «Математическое моделирование в материаловедении электронных компонентов. МММЭК-2019». М.: МАКС-Пресс, 2019. С. 18—21.
- Berriman G. B., Deelman E., Juve G., Rynge M., Vöckler J.-S. The application of cloud computing to scientific workflows: a study of cost and performance // Phil. Trans. R. Soc. A. 2013. V. 371, Iss. 1983. DOI: 10.1098/rsta.2012.0066
- Якобовский М. В., Бондаренко А. А., Выродов А. В., Григорьев С. К., Корнилина М. А., Плотников А. И., Поляков С. В., Попов И. В., Пузырьков Д. В., Суков С. А. Облачный сервис для решения многомасштабных задач нанотехнологии на кластерах и суперкомпьютерах // Известия ЮФУ. Технические науки. 2016. № 12. С. 103—114. DOI: 10.18522/2311-3103-2016-12-103114
- Горчаков А. Ю., Посыпкин М. А. Сравнение вариантов многопоточной реализации метода ветвей и границ для многоядерных систем // Современные информационные технологии и ИТ-образование. 2018. Т. 14, № 1. С. 138—148. DOI: 10.25559/SITITO.14.201801.138-148
- Положение о ЦКП «Информатика». URL: <http://www.frccsc.ru/ckp> (дата обращения: 22.01.2020).

Работа выполнена при частичной поддержке РФФИ (проекты №№ 18-29-03100, 19-29-03051).

Эксперименты по разворачиванию индивидуальных сред исполнения для программных пакетов материаловедения проведены с использованием вычислительных ресурсов ЦКП «Информатика» ФИЦ ИУ РАН.

*Статья поступила в редакцию
26 декабря 2019 г.*

Izvestiya vuzov. Materialy elektronnoi tekhniki = Materials of Electronics Engineering. 2019, vol. 22, no. 4, pp. 262—267.
DOI: 10.17073/1609-3577-2019-4-262-267

The main scientific and technical problems of using hybrid HPC clusters in materials science

K. I. Volovich^{1,§}, S. A. Denisov^{1,§}

¹ Federal Research Centre “Information and Control” of the Russian Academy of Sciences,
44 Vavilov Str., Moscow 119333, Russia

Abstract. The article discusses the use of hybrid HPC clusters for the execution of software designed to calculate the electronic structure and atomic scale materials modeling. Modern software systems, which are designed to solve the problems of materials science, use the capabilities of various hardware computing accelerators to increase productivity. The use of such computing technologies requires the adaptation of application program code to hybrid computing architectures, which include classic central processing units (CPUs) and specialized graphics accelerators (GPUs).

The use of large computing hybrid systems requires the development of methods for ensuring the workloading of such computing systems that will allow efficient use of computing resources and avoid equipment downtime.

First of all, these methods should allow parallel execution of user applications using computational accelerators. However, in practice, software environments designed to solve application problems cannot be deployed in the same computing environment due to software incompatibility. In order to overcome this limitation and ensure the parallel execution of diverse types of materials science tasks, the creation of individual task execution environments based on virtualization technologies and cloud technologies.

The continuation of virtualization technologies and the provision of cloud services is the construction of digital platforms. The article proposes the use of a digital platform for hosting scientific materials science services that provide calculations using various application software systems. Digital platforms make it possible to provide a unified user interface to scientific materials science services. The platform provides opportunities for finding the necessary scientific services, transferring source data and results between users, the platform and hybrid high-performance clusters.

Keywords: high-performance computing cluster; hybrid architecture; graphics accelerator; electronic structure calculations, quantum-mechanical molecular dynamics, VASP, Quantum ESPRESSO

References

1. Abramov S. M., Lilitko E. P. Current state and development prospects of high-end HPC system. *Information Technologies and Computation Systems*, 2013, no. 2, pp. 6—22. (In Russ.)
2. Zhuravlev A. A., Reviznikov D. L., Abgaryan K. K. The method of discrete elements with an atomic structure. In: *Proceedings of the XXI international conference on computational mechanics and modern applied software systems (VMSPSPS'2019)*. Moscow, 2019, pp. 59—61. (In Russ.)
3. Mikurova A. V., Skvortsov V. S. A generalized prediction model of inhibition of neuraminidase of influenza virus of various strains. *Biochem. Moscow Suppl. Ser. B*, 2018, vol. 12, pp. 322—329. DOI: 10.1134/S1990750818040054
4. Mikurova A. V., Skvortsov V. S., Raevsky O. A. Computational evaluation of selectivity of inhibition of muscarinic receptors M1–M4. *Biomedical Chemistry: Research and Methods*, 2018, vol. 1, no. 3, p. e00072. (In Russ.). DOI: 10.18097/BMCRM00072
5. Vouzis P. D., Sahinidis N. V. GPU-BLAST: using graphics processors to accelerate protein sequence alignment. *Bioinformatics*, 2011, vol. 27, no. 2, pp. 182—188. DOI: 10.1093/bioinformatics/btq644
6. Gorchakov A. Yu., Malkova V. U. Comparison of Intel Core-i7, Intel Xeon, Intel Xeon Phi and IBM Power 8 processors using the example of initial data recovery. *International Journal of Open Information Technologies*, 2018, vol. 6, no. 4, pp. 12—17. (In Russ.)
7. Volkov S., Sukhoroslov O. V. Simplifying the use of clouds for scientific computing with Everest. *Procedia Computer Science*, 2017, vol. 119, pp. 112—120. DOI: 10.1016/j.procs.2017.11.167
8. Volovich K. I., Zatsarinnyy A. A., Kondrashev V. A., Shabanov A. P. Scientific research as a cloud service. *Sistemy i Sredstva Inform.*, 2017, vol. 27, no. 1, p. 73—84. (In Russ.). DOI: 10.14357/08696527170105
9. Gorchakov A. Yu. Using OPENMP to implement the multithreaded method of uneven coatings // *Advanced Information Technologies (PIT 2018). Proceedings of the International Scientific and Technical Conference*. Samara: Izdatel'stvo Samarskogo nauchnogo tsentra RAN, 2018. 613—616. (In Russ.)
10. Volovich K. I., Denisov S. A., Malkovsky S. I. Formation of an individual modeling environment in a hybrid high-performance computing complex. In: *Proc. of the I Intern. Conf. “Mathematical Modeling in Materials Science of Electronic Components. MMMEK-2019”*. Moscow: MAKS-Press, 2019, pp. 21—24. (In Russ.)
11. Afanasyev I., Voevodin V. The comparison of large-scale graph processing algorithms implementation methods for Intel KNL and NVIDIA GPU. In: *Supercomputing. RuSCDays 2017. Communications in Computer and Information Science*. Springer, Cham, 2017, pp. 80—94. DOI: 10.1007/978-3-319-71255-0_7
12. Ding F., Mey D., Wienke S., Zhang R., Li L. A Study on today's cloud environments for HPC applications. In: *Third International Conference, CLOSER 2013. Cloud Computing and Services Science*. Berlin (Germany): Springer, 2014, pp. 114—127. DOI: 10.1007/978-3-319-11561-0_8
13. Zatsarinnyy A. A., Gorshenin A. K., Kondrashev V. A., Volovich K. I., Denisov S. A. Toward high performance solutions as services of research digital platform. *Procedia Computer Science*, 2019, vol. 150, pp. 622—627. DOI: 10.1016/j.procs.2019.02.078
14. Zatsarinnyy A. A., Gorshenin A. K., Volovich K. I., Kolin K. K., Kondrashev V. A., Stepanov P. V. Management of scientific services as the basis of the national digital platform “Science and Education”. *Strategicheskie priority*, 2017, no. 2, pp. 103—113. (In Russ.)
15. Kondrashev V. A., Volovich K. I. Service management of a digital platform on the example of high-performance computing services. In: *Materials of the International Scientific Conference*. Voronezh, 2018. (In Russ.)
16. Kartsev A., Malkovsky S. I., Volovich K. I., Sorokin A. A. Research of the performance and scalability of the Quantum ESPRESSO package in the study of low-dimensional systems on hybrid computing systems. In: *Proc. of the I Intern. Conf. “Mathematical Modeling in Materials Science of Electronic Components. MMMEK-2019”*. Moscow: MAKS-Press, 2019, pp. 18—21. (In Russ.)
17. Berriman G. B., Deelman E., Juve G., Rynge M., Vöckler J.-S. The application of cloud computing to scientific workflows: a study of cost and performance. *Phil. Trans. R. Soc. A*, 2013, vol. 371, no. 1983. DOI: 10.1098/rsta.2012.0066
18. Yakobovskiy M. V., Bondarenko A. A., Vyrodov A. V., Grigoriev S. K., Kornilina M. A., Plotnikov A. I., Polyakov S. V., Popov I. V., Puzyrkov D. V., Soukov S. A. Cloud service for solving multiscale nanotechnology problems of on clusters and supercomputers. *Izvestiya YuFU. Tekhnicheskie nauki*, 2016, no. 12, pp. 103—114. (In Russ.). DOI: 10.18522/2311-3103-2016-12-103114
19. Gorchakov A. Yu., Posypkin M. A. Comparison of variants of multithreading realization of method of branches and borders for multi-core systems. *Modern Information Technologies and IT-Education*, 2018, vol. 14, no. 1, pp. 138—148. (In Russ.). DOI: 10.25559/SITITO.14.201801.138-148
20. Regulations on the of the Center for Shared Use «Informatics». URL: <http://www.frccsc.ru/ckp> (accessed: 02.12.2019). (In Russ.)

Acknowledgements. The research is partially supported by the Russian Foundation for Basic Research (projects Nos. 18-29-03100, 19-29-03051). The experiments on the deployment of individual runtime environments for software packages of materials science were carried out using computing resources of the Center for Shared Use “Informatics” of FRCCSC.

Information about authors:

Konstantin I. Volovich^{1,§}: Cand. Sci. (Eng.), Senior Researcher (KVolovich@frccsc.ru); Sergey A. Denisov¹: Lead Engineer (SDenisov@frccsc.ru)

§ Corresponding author

Received December 26, 2019