

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПЛАЗМОХИМИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ НА ГЕТЕРОГЕННЫХ РЕСУРСАХ GRID С АДАПТИВНОЙ БАЛАНСИРОВКОЙ НАГРУЗКИ ДЛЯ ПАРАЛЛЕЛЬНЫХ СОЛВЕРОВ

В.В. Кржижановская, В.В. Корхов

Численное моделирование является одним из важнейших инструментов в процессе разработки и оптимизации современных технологических установок, обладающих сложной пространственной конфигурацией и множеством определяющих параметров системы. Адекватная физико-математическая модель в таких задачах предполагает учет множества взаимосвязанных разномасштабных физико-химических процессов, таких как плазменный разряд, конвективный и диффузионный тепломассоперенос, объемные и поверхностные химические реакции, конденсация-испарение, адсорбция-десорбция и т.д. Трехмерное компьютерное моделирование процессов столь высокой сложности предъявляет чрезвычайно высокие требования к эффективности применяемых методов и алгоритмов, а также к используемым вычислительным ресурсам. В связи с активным развитием междисциплинарных исследовательских проектов, в которых задействовано несколько организаций, становятся актуальными также вопросы удаленного коллективного использования установок, программных кодов, баз данных, экспертных систем и вычислительных ресурсов.

Одной из наиболее перспективных и быстро развивающихся технологий, отвечающих требованиям таких междисциплинарных распределенных приложений, является Grid. Grid-технологии обеспечивают прозрачный защищенный доступ и средства управления динамически меняющимися распределенными децентрализованными гетерогенными ресурсами и данными. Однако применение этих технологий на практике вызывает ряд затруднений ввиду постоянно меняющихся стандартов, несовершенства систем менеджмента ресурсов, а также отсутствия средств автоматической балансировки нагрузки для параллельных приложений на гетерогенных ресурсах. Кроме того, использование этих технологий тормозится достаточно сложной методикой работы на Grid ресурсах по сравнению с традиционной работой на вычислительных кластерах. В этой связи разработка пользовательских интерфейсов, адаптированных к Grid окружению, является неотъемлемым этапом освоения огромного потенциала Grid технологий.

В рамках представляемого проекта было разработано программное окружение "Виртуальный Реактор" для численного моделирования реакторов плазмохимического осаждения [1,2] в Grid системах. Созданное окружение обеспечивает защищенную передачу и анализ данных и позволяет проводить эффективные исследования влияния различных параметров технологических установок на определяющие характеристики протекающих процессов. Разработанная интегрированная система [3,4] предоставляет пользователю набор сервисов для быстрой инициализации, запуска, контроля и визуализации результатов численного моделирования в распределенной вычислительной Grid системе, без транзитов времени на такие рутинные операции как аутентификация и авторизация в каждом из узлов Grid сегментов, поиск свободных вычислительных ресурсов и сервисов, их регистрация и управление, репликация кода на доступные вычислительные системы, запуск расчетных задач и их мониторинг. Все эти операции выполняются автоматически Grid сервисами, к которым обращается программное окружение.

Разработки велись в рамках RIDgrid проекта [5] на основе экспериментального окружения CrossGrid [6]. Ключевым компонентом использованной Grid архитектуры является Migrating Desktop – Grid портал, разработанный как Web-приложение и являющийся "рабочим столом" пользователя ресурсов Grid. Migrating Desktop предоставляет доступ к локальным и удаленным Grid ресурсам и сервисам с произвольного компьютера, подключенного к Internet и оснащенного лишь Internet-браузером с включенным разрешением на запуск виртуальной машины Java. Заходя в портал Migrating Desktop, пользователь авторизуется в Grid-системе и получает в окне браузера виртуальный рабочий стол с сохраненными настройками, списком доступных Grid ресурсов и сервисов, индикацией текущего состояния выполняемых заданий, архивами результатов и т.д. Портал позволяет запускать как расчетные, так и интерактивные модули, распределенные между географически удаленными сайтами и виртуальными организациями, а также интегрировать модули приложений в несложные потоки задач (workflows).

Созданный распределенный программный комплекс включает в себя: графический интерфейс пользователя, блок для формулировки проблемы, задания начальных данных и расчетных параметров, базы данных физико-химических свойств газов и химических процессов с интерактивными редакторами, генератор многоблочных расчетных сеток, модули расчета плазменного разряда, модули решения уравнений динамики многокомпонентной газовой смеси с химическими реакциями, программы обработки и визуализации результатов расчетов, работающие по ходу исполнения расчетных модулей, а также средства взаимодействия всех вышеперечисленных модулей, запуска и контроля заданий в Grid системе.

Все модули программного комплекса разработаны как платформо-независимые коды, обрабатываемые GNU C++ компилятором. Параллелизм в расчетных модулях реализован с использованием стандарта передачи сообщений MPICH-G2, варианта MPICH, использующего Globus I/O для межпроцессорных коммуникаций и

Globus DUROC для совместного распределения ресурсов. Менеджер ресурсов был разработан в рамках CrossGrid проекта на базе компонентов DataGrid. Интерфейс пользователя разработан с использованием свободно распространяемых графических библиотек GTK+. Модули визуализации написаны на языке Java, а для визуализации в системах трехмерной виртуальной реальности использовались библиотеки VTK.

Для обеспечения эффективной работы параллельных расчетных модулей на гетерогенных ресурсах Grid был разработан и реализован алгоритм адаптивного распределения нагрузки между процессами параллельного приложения [7]. Объем вычислений, выполняемый каждым из процессоров параллельной задачи, вычисляется на основе замеров доступной мощности процессора и пропускной способности канала к нему, а также на основе данных о требовании приложения к ресурсам, в частности требуемых объемах вычислений и коммуникаций. В общем случае адекватно рассчитать требования приложения достаточно сложно без детальных сведений об использованных алгоритмах и структурах данных, поэтому был разработан механизм последовательной оценки требований с определением параметров распределения нагрузки. Распределение нагрузки может меняться адаптивно по ходу расчета при изменении состояния ресурсов или смене алгоритмов приложения. Адаптивное распределение нагрузки позволило получить ускорение счета в несколько раз (до 250% прироста эффективности параллелизации).

Для более эффективного использования ресурсов Grid был разработан планировщик пользовательского уровня. В отличие от системного Grid планировщика, предоставляемого промежуточным ПО, планировщик пользовательского уровня обладает дополнительными возможностями: он анализирует доступные Grid ресурсы и выбирает наиболее подходящие для данного приложения. Этот выбор осуществляется в ходе расчета на основании данных о требованиях приложения, полученных в ходе балансировки нагрузки. Вычислительные ресурсы, выделенные параллельному приложению, могут динамически добавляться по ходу счета или выводиться из набора используемых ресурсов, например при достижении оптимальной параллельной эффективности, при увеличении загрузки расчетного узла, или при изменении требований приложения. Разработанный алгоритм адаптивного распределения нагрузки был интегрирован в планировщик пользовательского уровня DIANE, разработанный в CERN [8]. Интегрированная система тестировалась на модельном приложении виртуального реактора с варьируемыми параметрами приложения на ресурсах EGEE Grid [9]. На всем диапазоне параметров приложения разработанная система показала преимущество над алгоритмом планировщика, изначально использованном в системе DIANE, со средним ускорением расчетов в 1.5-2 раза [10].

Работа выполнена в тесном сотрудничестве с университетом Амстердама при частичной поддержке РФФИ/NWO грантов N 047.016.007 и 047.016.018 и проекта Virtual Laboratory for e-Science.

ЛИТЕРАТУРА:

1. Ю.Е. Горбачев, М.А. Затевахин, В.В. Кржижановская, В.А. Швейгерт "Особенности роста пленок гидрированного аморфного кремния в PECVD-реакторах" // ЖТФ, 2000, том 70, выпуск 8, С. 77-86
2. V.V. Krzhizhanovskaya, M.A. Zatevakhin, A.A. Ignatiev, Y.E. Gorbachev, W.J. Goedheer and P.M.A. Sloot. "A 3D Virtual Reactor for Simulation of Silicon-Based Film Production" // ASME PVP, 2004, V. 491-2, pp. 59-68
3. V.V. Krzhizhanovskaya, P.M.A. Sloot, Y.E. Gorbachev. "Grid-based Simulation of Industrial Thin-Film Production" // Simulation, 2005, V. 81, N 1, pp. 77-85
4. V.V. Krzhizhanovskaya, Y.E. Gorbachev and P.M.A. Sloot. "A Grid-Based Problem-Solving Environment for Simulation of Plasma Enhanced Chemical Vapor Deposition" // Труды международной конференции "Распределенные вычисления и Грид-технологии в науке и образовании". Издательство Дубна: 11-2004-205, ОИЯИ, 2004, стр. 262-271
5. "High Performance Simulation on the Grid" project: http://ssd.ssc.ru/projectsinfo/nwo_grid.htm
6. The CrossGrid EU Science project: <http://www.eu-CrossGrid.org>
7. V.V. Korkhov, V.V. Krzhizhanovskaya, P.M.A. Sloot. "A Grid Based Virtual Reactor: Parallel performance and adaptive load balancing" // Journal of Parallel and Distributed Computing, 2008, V. 68, N 5, pp 596-608
8. DIstributed ANalysis Environment: <http://cern.ch/diane>
9. F. Gagliardi et al. "Building an infrastructure for scientific Grid computing: status and goals of the EGEE project" // Philosophical Transactions of the Royal Society A, 2005, V. 363, Issue 1833, pp. 1729 - 1742
10. V.V. Korkhov, J.T. Moscicki, V.V. Krzhizhanovskaya. "User-Level Scheduling of Divisible Load Parallel Applications with Resource Selection and Adaptive Workload Balancing on the Grid" // IEEE Systems Journal, Special Issue on Grid Resource Management, 2009, V. 3, N 1, pp. 121-130