

ОРГАНИЗАЦИЯ GRID-ИНФРАСТРУКТУРЫ ДЛЯ ПРЕДОСТАВЛЕНИЯ СЕРВИСОВ ВЫСОКОПРОИЗВОДИТЕЛЬНЫХ ВЫЧИСЛЕНИЙ НАУКОЕМКИМ ПРЕДПРИЯТИЯМ

Д.Ю. Астриков, А.Н. Белоусов, Д.А. Кузьмин

Построение своей собственной вычислительной инфраструктуры для предприятий малого и среднего бизнеса, работающих в наукоемких областях промышленности, а так же научных и образовательных учреждений, является слишком затратной статьей. Молодые компании, имеющие в активах инновационные технологические решения, требующие проведения расчетов на высокопроизводительных комплексах, не имеют средств на создание и сопровождение собственных вычислительных центров. В данном случае таким предприятиям необходимо предоставить возможность использования вычислительных ресурсов суперкомпьютерных комплексов удаленно, с использованием специализированных высокопроизводительных сервисов.

Для организации подобного рода инфраструктуры используются разнообразные технические и программные решения, обладающие различными характеристиками в плане эффективности взаимодействия конечных пользователей с вычислительными ресурсами, масштабируемости запускаемых приложений, уровня утилизации суперкомпьютерных комплексов. В рамках проведения расчетов с использованием приложений, использующих технологии параллельного выполнения задач на множестве вычислительных узлов, одним из наиболее эффективных решений является применение GRID технологий, включающее планирование запуска приложений и эффективное распределение нагрузки на вычислительные ресурсы суперкомпьютерных комплексов с помощью специализированных программных решений.

На базе Института космических и информационных технологий СФУ развернут мощный суперкомпьютерный комплекс, использующийся для проведения расчетов студентами, профессорско-преподавательским составом университета, а так же образовательными и научными учреждениями Красноярского края. Расчеты проводятся в области естественных и точных наук, что влечет за собой крайне большие объемы входных и выходных данных, а так же интенсивную нагрузку на вычислительные мощности комплекса. Для повышения эффективности взаимодействия пользователей с высокопроизводительными ресурсами был разработан и реализован комплекс программно-аппаратных решений по организации вычислений с использованием данного суперкомпьютерного комплекса.

В качестве основы заложена концепция высокопроизводительной платформы GRID с использованием стандартных программных решений на базе Globus Toolkit совместно с менеджером ресурсов PBS Torque и планировщиком заданий Maui. Кроме того, разработано порталное решение, позволяющее пользователям наиболее эффективно взаимодействовать с вычислительными ресурсами.

Использование программного обеспечения Globus Toolkit продиктовано следующими требованиями:

- Возможность удаленного доступа к суперкомпьютерному комплексу.

С помощью сервиса Globus Toolkit MyProxy пользователь может получить доступ и полноценно пользоваться ресурсами комплекса удаленно. При этом высокопроизводительная платформа для пользователя остается абсолютно прозрачной.

- Безопасное взаимодействие пользователей с высокопроизводительными ресурсами комплекса.

Пользователи лишены возможности напрямую взаимодействовать с вычислительными узлами комплекса. Все операции проводятся через сервер доступа с использованием сертификатов безопасности на основе стандарта x509.

- Возможность эффективного планирования задач и равномерного распределения нагрузки на вычислительные узлы.

В Globus Toolkit предусмотрена возможность взаимодействия с системами пакетной обработки на базе менеджера ресурсов PBS Torque. Планирование запуска задач осуществляется с помощью программного продукта Maui.

- Поддержка интерфейса передачи сообщений MPI для параллельного выполнения заданий на множестве вычислительных узлов.

Опираясь на технологию MPI можно задействовать совместно с Globus Toolkit проблемно-ориентированное программное обеспечение, такое как GAMESS, ANSYS, AMBER и др.

- Масштабируемость высокопроизводительной платформы.

Менеджер ресурсов Torque предоставляет возможность гибко управлять пулом высокопроизводительных ресурсов – изменять состояние вычислительных узлов, управлять их доступностью. Кроме того, разработав несколько политик очередей для отдельных групп пользователей, использующих в своей работе различное программное обеспечение, можно эффективно управлять уровнем нагрузки на

суперкомпьютерный комплекс в целом, добиваясь максимальной утилизации вычислительных ресурсов.

- Возможность разработки собственных высокопроизводительных GRID сервисов в дополнение к стандартному пакету поставки.

Программное обеспечение Globus Toolkit позволяет разработчикам находить и воплощать в жизнь собственные программные решения в области безопасности системы, планирования задач, распределения нагрузки на вычислительные ресурсы.

- Стандартизация используемого программного обеспечения для последующего сотрудничества с другими суперкомпьютерными комплексами в рамках Российской Федерации либо за её пределами.

Программное обеспечение Globus Toolkit является стандартом де-факто для большинства суперкомпьютерных GRID платформ во всем мире.

Для реализации проекта разработана политика предоставления вычислительных ресурсов конечным пользователям, включающая порядок взаимодействия пользователей с суперкомпьютерным комплексом, порядок распределения нагрузки и планирования запуска задач, а так же требования к безопасности передачи данных в ходе произведения расчетов с использованием высокопроизводительных ресурсов.

На рисунке 1 представлена общая структурная схема реализованного решения по организации доступа пользователей к высокопроизводительным ресурсам комплекса.

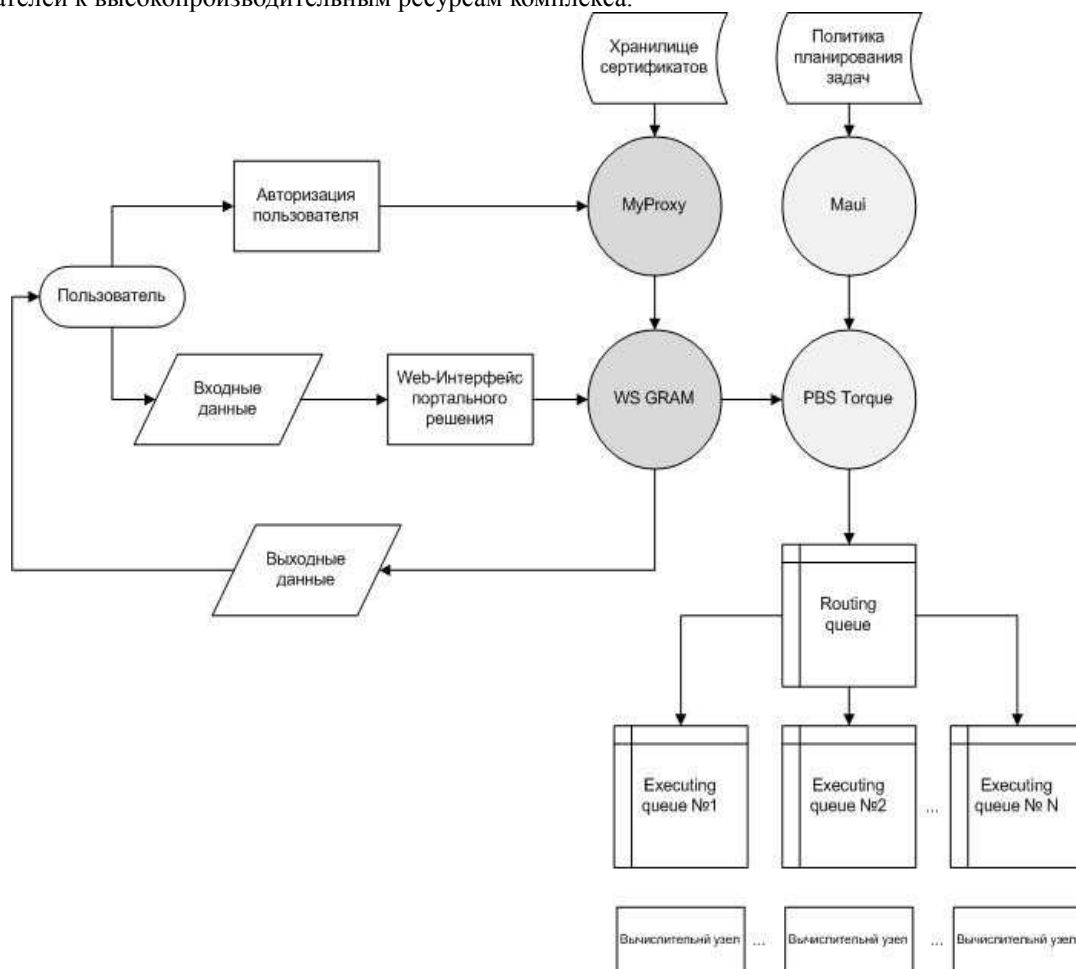


Рис. 1. Структурная схема программного решения по взаимодействию конечных пользователей с высокопроизводительными ресурсами суперкомпьютерного комплекса СФУ.

Авторизация пользователей в системе осуществляется сервисом MyProxy, запущенным на сервере доступа к суперкомпьютерному комплексу. Подобное решение позволяет достичь прозрачности высокопроизводительной платформы – пользователь не знает, каким образом организовано взаимодействие между сервером доступа и вычислительными узлами. Кроме того, использование данного сервиса подразумевает автоматическую выдачу и проверку полномочий пользователей, что повышает общий уровень безопасности высокопроизводительной платформы в целом.

Загрузка пользовательских задач происходит с использованием разработанного порталного решения. Тем самым, отпадает прямая необходимость в использовании сервиса GSI FTP, предложенного Globus Toolkit. Данные передаются с использованием защищенного соединения. После чего, задача передается на выполнение.

Постановка задачи в очередь осуществляется сервисом WS GRAM, который используется в связке с

менеджером ресурсов PBS Torque и планировщиком заданий Maui. Главное достоинство этого подхода – возможность гибкого масштабирования пула вычислительных ресурсов. В частности, применена технология маршрутизирующих очередей, направляющих пользовательские задачи в очереди, наиболее подходящие для их выполнения. Кроме того, используется привязка очередей к конкретным видам расчетов – в области естественных и точных наук и др. и соответствующая компоновка аппаратных ресурсов.

Вышеозначенный подход к предоставлению вычислительных ресурсов конечным пользователем хорошо зарекомендовал себя в рамках сотрудничества с предприятиями-представителями наукоемкого производства, а так же научными и образовательными учреждениями Красноярского края. Проводятся расчеты в области гидро- и газодинамики, геодезии, точных наук. На базе реализованной высокопроизводительной GRID платформы планируется будущее сотрудничество с подобными суперкомпьютерными комплексами на федеральном уровне.

ЛИТЕРАТУРА:

1. Д.Ю. Астриков. Система управления задачами пользователей на суперкомпьютере ИКИТ СФУ / С 73 Суперкомпьютерные технологии: разработка, программирование, применение (СКТ-2010) // Материалы Международной научно-технической конференции. Т.1. – Таганрог: Изд-во ТТИ ЮФУ, 2010. – 324 с. ISBN 978-5-8327-0383-1 с. 190-194.
2. А.П. Бугай, С.В. Маколов, Д.А. Кузьмин. Создание кластерного грида на базе высокопроизводительных ресурсов СФУ принят в качестве стендового доклада на Международную суперкомпьютерную конференцию "Научный сервис в сети Интернет-2010: суперкомпьютерные центры и задачи".
3. А.П. Бугай, С.В. Маколов, Д.А. Кузьмин. Програмные средства управления распределенными кластерными системами./ Молодежь и современные информационные технологии: VIII Всероссийской научно-практической конференции студентов, аспирантов и молодых ученых / Институт "Кибернетический центр" Томского политехнического университета, г. Томск, 2010 г, с. 22-23.
4. Д.А. Кузьмин, М.В. Носков, А.П. Бугай, Ю.В. Валиулина, С.В. Маколов, Е.В. Павлов. Организация комплекса высокопроизводительных вычислений СФУ/ Пленарный доклад Проблемы информатизации региона ПИР-2009 С. 16-18.
5. А.П. Бугай, С.В. Маколов. Создание комплекса высокопроизводительных вычислений Сибирского федерального университета. /Высокопроизводительные параллельные вычисления на кластерных системах: материалы Девятой международной конференции-семинара/ Владимирский государственный университет, г. Владимир, 2009 г, с.64-65.