

УЧЕБНЫЙ ГРИД-ПОЛИГОН С ДОСТУПОМ К ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОМУ КЛАСТЕРУ ИЗ РАЗЛИЧНЫХ ГРИД-СРЕД

Д.С. Кастерин, М.М. Степанова, К.С. Шефов

Работы в области распределённых вычислений, проводимые на кафедре вычислительной физики с 2005 года, направлены как на использование грид-технологий в образовательной и научной деятельности, так и на изучение и экспериментальную проверку новых технологических решений [1]. Одним из результатов этой деятельности является создание многофункционального вычислительного комплекса, который основан на кластерных ресурсах физического факультета СПбГУ. Комплекс предназначен для обучения студентов технологиям параллельных и распределённых вычислений. Кроме поддержки учебного процесса вычислительные ресурсы используются для научных расчетов.

В данной работе представлено описание интегрированного полигона, ключевой особенностью которого является одновременное подключение одного вычислительного кластера к различным грид-средам. Это позволяет отойти от типичной схемы, в которой доступные аппаратные ресурсы разбиваются на несколько кластеров, каждый из которых имеет свою конфигурацию и подключается к одной грид-среде. Предлагаемое нами решение обеспечивает более высокую динамичность и эффективность использования вычислительных ресурсов. В практическом плане оно не требует существенных затрат на ресурсы и позволяет студентам получить реальный опыт работы с современными системами распределённых вычислений.

Основой полигона является вычислительный кластер из 12 узлов 2xIntel Xeon 3GHz Dual Core HT / 4GB RAM, работающий под управлением системы очередей PBS Torque 3.0.0. На все узлы установлена ОС Scientific Linux 5.4. Для обеспечения наилучшего контроля за ресурсами при работе параллельных приложений на кластере применяется сборка PBS Torque с патчами, позволяющими системе очередей использовать механизм cpuset, и утилита OSC Mpiexec, заменяющая стандартные утилиты mpirun и mpiexec. Система обеспечивает запуск MPI- и OpenMP-приложений, а также работу с параллельными версиями прикладных научных пакетов Firefly (PC GAMESS), LAMMPS, CPMD, ABINIT.

Доступ к кластеру из разных грид-сред обеспечивается посредством установки виртуальных шлюзов для каждой из них. В настоящее время функционируют шлюзы для промежуточного программного обеспечения NorduGrid, UNICORE, ГридННС, и идет работа по интеграции последней версии gLite. Все сайты поддерживают работу с пользовательскими сертификатами, выданными RDIG CA.

Сайт Nordugrid собран на базе ППО ARC NorduGrid 0.8.3. На шлюзе работают сервисы grid-manager, gridftp, grid-infosys и grid-monitor. Дополнительно есть возможность работы с системой хранения данных (элемент SSE).

Сайт UNICORE сделан на основе ППО UNICORE 6.3.1. Он включает базовые сервисы Gateway, UNICORE/X, XUUDB, работающие на шлюзе, а также интерфейс к системе очередей TSI, установленный на управляющем узле кластера. Это позволяет не использовать NFS на шлюзе.

Для подключения к ГридННС установлен грид-шлюз версии 1.0. ППО обеспечивает работу с системой очередей и сервис gridftp. В текущей реализации необходимо использование общей файловой системы между грид-шлюзом и кластером.

Кроме указанных систем сейчас ведется работа по интеграции с gLite сайтом RU-Phys-SPBU на основе ППО gLite3.2.

Инфраструктура полигона включает сервера удаленного доступа с пользовательским интерфейсом командной строки для каждой грид-среды, а также Web-интерфейс для работы с ГридННС. Контроль функционирования всех сервисов обеспечивается единой системой мониторинга на основе Nagios и Ganglia.

На базе грид-полигона проводятся практические занятия в рамках спецкурса по распределенным вычислительным технологиям для студентов физического и математико-механического факультетов СПбГУ. Такие семинары позволяют студентам получить навыки непосредственной работы с различными грид-системами и помогают лучше усвоить теоретический материал. Особое внимание уделяется запуску прикладных задач и выполнению самостоятельной работы, которая включает в себя разработку собственных приложений с использованием технологий MPI и OpenMP, их компиляцию, отладку и запуск в грид-среде.

Вычислительный кластер используется не только в учебном процессе, но и для научных расчетов. Основную часть загрузки составляют задачи молекулярной динамики и квантовой химии. В частности, последние полгода решаются задачи, связанные с исследованиями процессов поглощения и испускания водорода гидридами металлов, а также исследуется влияние примесей и дефектов кристаллической решетки на поведение атомов водорода на поверхности кристалла.

Для крупномасштабного молекулярно-динамического моделирования используется потенциал ReaxFF из пакета LAMMPS. Оптимизация параметров потенциала ReaxFF выполняется с помощью MPI-программы собственной разработки, которая реализует однопараметрическую подгонку по данным подгоночного набора.

Этот набор включает полученные из квантово-химических расчетов энергии связи и геометрии небольших кластеров, зависимости энергии от объема ячейки кристаллических решеток и ряд других параметров. Квантово-химические расчеты проводятся методами теории функционала плотности. Для расчета неперидических систем использовались программы Firefly, для структур периодических кристаллов - ABINIT.

Практически все расчеты в программах LAMMPS, Firefly и ABINIT производились в параллельном режиме. Время расчета оптимальной структуры с использованием 4 ядер для молекулы Al_8H_{24} составило 24 часа, а для кристаллов AlH_3 - 46 часов. Время молекулярно-динамического моделирования больших структур ($\sim 10^6$ атомов) зависит от задаваемого времени моделирования (числа шагов) и на 32 ядрах составляет от получаса до нескольких суток.

ЛИТЕРАТУРА:

1. M.M. Stepanova, A.N. Makarov, S.L. Yakovlev. Grid-systems in process of research and teaching at faculty of physics of SPbSU. Distributed Computing and Grid-Technologies in Science and Education: 3rd Intern.Conf. (Dubna, June30-July 4, 2008). – Dubna: JINR, 2008, pp.113-114.