

CUBLIC – ПЛАТФОРМА ДЛЯ УДАЛЁННЫХ И РАСПРЕДЕЛЁННЫХ НАУЧНЫХ ВЫЧИСЛЕНИЙ

А.А. Емельянов, В.Ю. Климашов, С.А. Савихин, А.Б. Терентьев

Представляемая программно-аппаратная платформа CUBLIC призвана максимально приблизить сложные научные вычисления к пользователям-прикладникам, не являющимся специалистами в программировании. Основная цель проекта — повышение доступности высокопроизводительных вычислений, снижение финансовых и временных затрат при решении научно-исследовательских и инженерно-технических задач в различных прикладных областях.

Такое видение вопроса сформировалось из понимания желаний учёных-исследователей, появившегося из-за достаточно плотного общения с ними. Современные исследования в областях физики, медицины, живых систем просто невозможны без обработки больших объёмов данных. Причем, в большинстве случаев, обработка заключается не в воспроизведении какого-либо алгоритма, а, в том числе, в создании некоторого нового метода, который требуется сразу же опробовать. Таким образом, учёным-исследователям нужен простой, удобный инструмент, позволяющий быстро реализовать требуемый алгоритм, настроить его соответствующим образом и быстро получить требуемый результат. При этом, всё должно происходить без привлечения профессиональных программистов, а значит разработка вычислительных приложений должна требовать только понимания используемого математического аппарата и наличия знаний в предметной области научного исследования.

Именно это и стало основным содержанием проекта CUBLIC - создание вычислительной платформы, позволяющей решать вычислительные задачи практически любой сложности без привлечения профессиональных программистов.

Алгоритм вычислительной задачи представляется в виде блок-схемы с функциональными узлами — блоками, связями, указывающими направление передачи данных от блока к блоку и параметрами-настройками, специализирующими вычислительную функцию блока. Каждый блок выполняет определенную элементарную эффективно реализованную вычислительную функцию. Несколько блоков могут быть объединены в модуль — отдельный функционально независимый объект, выполнение которого в основной схеме может происходить несколько раз. Модули могут применяться наравне с блоками на любом уровне вложенности. Интуитивно понятный пользовательский интерфейс представляет собой браузерный редактор алгоритмов, использующий язык разметки HTML5 (поддерживается в браузерах Opera 10.6+, Google Chrome 6.0.4+, Firefox 3.6+, InternetExplorer 9+). Основным плюсом такого подхода является его независимость как от пользовательской аппаратной платформы, так и используемой операционной системы. Собранные схемы-алгоритмы, файлы результатов хранятся на удалённом сервере, что позволяет работать с платформой в любом удобном месте, где есть доступ к сети Интернет. Наряду с редактором был разработан личный кабинет для контроля за постановкой на исполнение, исполнением и завершением исполнения схем алгоритмов, а также за обменом данными между сервером проекта и компьютером пользователя. На рис. 1 представлена схема алгоритма моделирования грозовой активности.

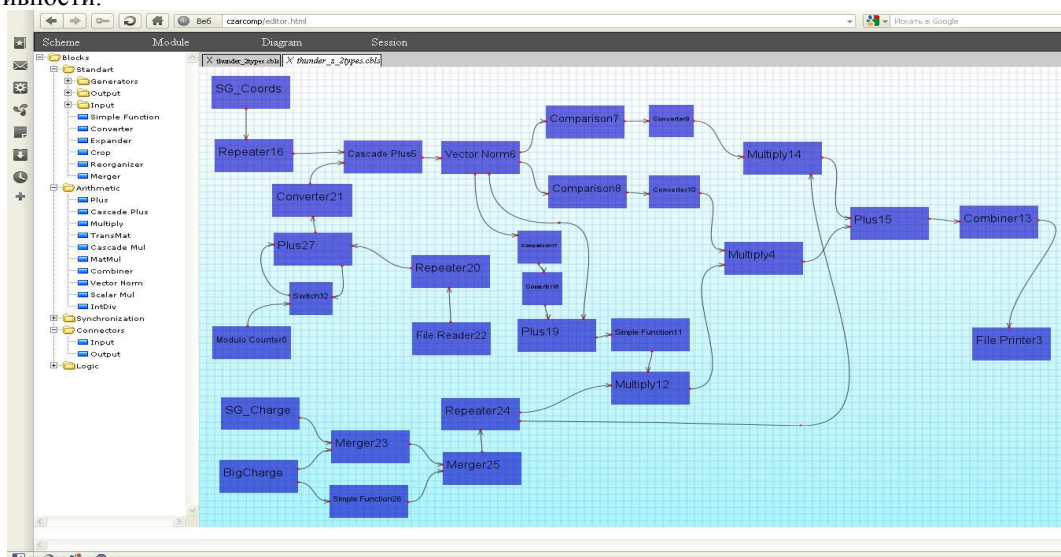


Рис.1 Схема алгоритма моделирования грозовой внутриоблачной активности.

В системе реализованы следующие виды элементарных блоков: блоки синхронизации, вектор-матричных операций, ввода или генерации исходных данных, элементарных функций, визуализации, аналитических функций и блоки специализированных высокоуровневых алгоритмов. На базе вышеперечисленных блоков, реализуются модули, которые можно применять в решении сложных предметных задач.

Процесс низкоуровневого распараллеливания задачи (разделения общей задачи на независимые функциональные части, распределения их по вычислительным узлам, передача данных и синхронизация памяти) скрыт от пользователя и выполняется автоматически в рамках среды выполнения, в соответствии с конфигурацией вычислительного комплекса, доступностью аппаратных ресурсов, пользовательских привилегий. Таким образом, для решения прикладной задачи от специалиста-предметника требуется только владение основами математического моделирования.

При разработке проекта максимально использовались широко распространённые, открытые библиотеки, стандарты и протоколы: REST/JSON, MPI, X.509, OpenCL, boost и т. д. Кроме того, был разработан целый ряд собственных оригинальных решений по разбиению и распределению задач, распределения ресурсов, синхронизации процессов и данных.

Проект CUBLIC предполагает эффективное использование на аппаратных комплексах, как локальных, так и в распределённой кластерной или grid-конфигурации, в том числе и на гибридной аппаратной платформе. Программная платформа включает в себя (1) комплекс инструментальных средств, обеспечивающих быструю сборку вычислительных приложений пользователем-непрограммистом, владеющим только основным математическим аппаратом в своей области, (2) промежуточное программное обеспечение среды исполнения композитных пользовательских приложений, обеспечивающее эффективное выполнение вычислений на недорогой общедоступной аппаратной платформе, как в рамках традиционных кластеров, так и масштабируемых гетерогенных grid-сетях второго поколения, и (3) набор прототипов (шаблонов) прикладных функциональных модулей (компонентов) для использования в составе пользовательских композитных приложений, а также в качестве примеров. В настоящее время в качестве аппаратной платформы используются классические x86-процессоры и многоядерные GPU NVidia и AMD.

Проект CUBLIC уже успел пройти первичную апробацию конечными потребителями. Совместно со специалистами, занимающимися изучением биологических процессов головного мозга, с помощью CUBLIC были решены следующие задачи: моделирование внутреннего взаимодействия в нейрональных сетях, динамики роста нейрональных сетей, межнейронного взаимодействия с учётом периода рефрактерности, длины аксона, пластичности, а также реализованы алгоритмы исследования зависимости параметров нейрональной сети от структуры её внутренних связей. В рамках исследований в сфере атмосферного электричества собраны схемы моделирования внутриоблачной активности на первичных стадиях грозových разрядов, расчёта фрактальной размерности грозových облаков, симуляции роста проводящего кластера. В рамках совместных НИР проводятся реальные расчёты в областях физики живых систем, атмосферного анализа, акустики. В ходе совместных работ со специалистами-предметниками также разрабатываются высокоуровневые алгоритмы, которые в дальнейшем могут быть использовать при решении других задач.

Сайт проекта: <http://www.hopcomp.net>

Ознакомительная версия CUBLIC: <http://host1.hopcomp.net>.