

УДК: 004.75

Опыт адаптации прикладных программных пакетов для работы в грид-средах

В. В. Кореньков, Н. А. Кутовский^а, Р. Н. Семёнов

Объединенный институт ядерных исследований, Лаборатория информационных технологий,
Россия, 141980, Московская область, г. Дубна, ул. Жолио-Кюри, д. 6

E-mail: ^аnikolay.kutovskiy@jinr.ru

Получено 18 апреля 2012 г.

В данной статье описывается опыт команды Лаборатории информационных технологий Объединенного института ядерных исследований по адаптации прикладных программных пакетов для работы в различных грид-средах. Указаны особенности «гридификации» приложений в зависимости от возможных режимов их запуска и типа подходящих вычислительных ресурсов. Перечислены конкретные приложения и грид-среды, для использования в которых были адаптированы эти пакеты.

Ключевые слова: грид-технологии, распределенные вычисления, прикладные пакеты

An experience of the application software packages adaptation for running in grid environments

V. V. Korenkov, N. A. Kutovskiy, R. N. Semenov

Joint institute for nuclear research, Laboratory of information technologies, Joliot-Curie 6, Dubna, Moscow region, 141980, Russia

Abstract. – This article describes an experience of LIT JINR team in application software packages adaptation for running in different grid environments. Peculiarities of the applications “gridification” depending on their possible launch modes and a type of the matching computational resources are given. The particular applications and grid environments which applications are adopted for are listed.

Keywords: grid technologies, distributed computations, application packages

Citation: *Computer Research and Modeling*, 2012, vol. 4, no. 2, pp. 339–344 (Russian).

Введение

Для ученых во многих областях науки грид уже стал привычным инструментом в их профессиональной деятельности. Преимущества, которые дает использование грид-технологий, привлекает все большее количество пользователей, причем не только представителей науки, но и бизнеса¹. Для того чтобы пользователи могли применять грид для своих нужд, их необходимо обучить работе в этой среде, а также адаптировать для нее прикладные программные пакеты (ППП). Для этих целей, а также для обучения системных администраторов установке и настройке сервисов грид-сайтов, оценки и тестирования различного промежуточного программного обеспечения (ППО), разработки новых грид-сервисов была создана учебно-исследовательская и тестовая грид-инфраструктура с ядром в Лаборатории информационных технологий Объединенного института ядерных исследований – ЛИТ ОИЯИ (более подробное описание этой инфраструктуры приведено в [Кутовский, 2011]).

Адаптация прикладных программных пакетов

На данный момент существует достаточно много ППО, реализующего концепцию Грид (например, Globus Toolkit, gLite, EMI, UNICORE, ARC), каждый из которых предлагает пользователям свой набор сервисов и функциональность. На базе этих ППО строятся различные глобальные (OSG, WLCG), национальные (ГридННС, РГС) и локальные грид-инфраструктуры, предоставляющие пользователям доступ к ресурсам в рамках так называемых виртуальных организаций (ВО). ВО могут создаваться как для выполнения работ по какому-то конкретному эксперименту (например, ВО для экспериментов ATLAS, ALICE, CMS на Большом адронном коллайдере), так и для проведения исследований в рамках целого раздела науки (например, ВО biomed инфраструктуры WLCG).

Набор действий по адаптации конкретного ППО для использования в той или иной грид-инфраструктуре зависит от нескольких факторов, среди которых ключевыми можно назвать следующие:

- 1) средства взаимодействия пользователя с грид-средой для запуска задач;
- 2) тип вычислительных ресурсов, пригодных для работы адаптируемого ППП и представленных в конкретной грид-инфраструктуре.

Оба фактора зависят от ППО, на базе которого построена конкретная грид-инфраструктура.

Как уже отмечалось выше, на данный момент существует достаточно много ППО, реализующего концепцию Грид. Оно различается по используемым языкам программирования, по набору сервисов и предоставляемой функциональности, типу поддерживаемых вычислительных ресурсов и элементов хранения данных, поддерживаемым операционным системам, условиям распространения и использования и т. д.

Для работы пользователя в грид-среде ему предоставляется один или несколько интерфейсов. Например, интерфейс командной строки, где взаимодействие пользователя с грид-инфраструктурой осуществляется путем вызова команд с определенным набором параметров. Для запуска задачи посредством такого интерфейса, как правило, пользователь должен предварительно составить файл ее описания на понятном данной грид-среде языке. В качестве примеров таких интерфейсов можно привести интерфейс командной строки ГридННС – ПИКС², интерфейс командной строки gLite или Globus Toolkit. Другим возможным способом взаимодействия пользователя с грид-средой является веб-интерфейс, как, например, ВИГ³ (веб-интерфейс ГридННС). Также есть разработки, предоставляющие пользователям единый веб-интерфейс к различным грид-средами. В качестве примера такового можно привести P-GRADE портал⁴.

¹ Названия некоторых компаний, использующих грид-технологии в своей деятельности, приведены, например, на веб-странице с URL: <http://www.gridcafe.org/Grid-business.html>

² URL: <http://ngrid.ru/ngrid/support/user/ucli>

³ URL: http://ngrid.ru/ngrid/support/user/quick_start

⁴ URL: <http://portal.p-grade.hu/>

Помимо этого, грид-сервисы различных ППО имеют интерфейсы программирования приложений (то, что в английском языке называют application programming interface – API), используя которые можно создать собственные интерфейсы, обеспечивающие необходимую конечным пользователям функциональность для взаимодействия с грид-средой.

Что же касается вычислительных ресурсов, представленных в грид-инфраструктурах, то в них можно условно выделить следующие типы:

1) суперкомпьютеры – высокопроизводительные вычислительные комплексы (в английском языке их обозначают термином «high performance computing», HPC) для решения сильно-связанных параллельных задач, т. е. таких задач, части которых обмениваются между собой данными;

2) кластеры – вычислительные системы для обработки независимых последовательных задач (high throughput computing, HTC);

3) гетерогенные среды, задачи в которых считаются на персональных компьютерах (так называемые DesktopGrid).

В конкретной грид-инфраструктуре могут быть представлены как один, так и несколько или даже все из перечисленных выше типов вычислительных ресурсов.

Ключевым требованием к адаптируемому ППП для использования в грид является возможность его вызова в режиме командной строки (в так называемом «батч»-режиме).

Кроме этого, подходящий тип вычислительных ресурсов (а значит, и процедура его интеграции в грид-среду) для конкретного приложения зависит от возможных режимов его работы, а именно:

1) параллельный, когда выполняющие одну задачу процессоры могут обмениваться между собой сообщениями, например, посредством библиотек MPI;

2) последовательный, когда каждый процессор выполняет независимую часть задачи.

Для использования приложений в параллельном режиме подходят суперкомпьютеры и кластеры с поддержкой счета параллельных задач, тогда как для последовательных задач возможно использование всех типов вычислительных ресурсов, хотя некоторые из них не всегда оптимальны.

Вне зависимости от ППП, для его использования в грид-среде должны соблюдаться несколько условий, приведенных ниже.

1) Пакет должен быть установлен, как минимум, на одном вычислительном элементе (ВЭ) грид-сайта – грид-сервисе, обеспечивающем взаимодействие между непосредственно вычислительным ресурсом (например, кластером или суперкомпьютером) и грид-средой.

2) В информационном сервисе ВЭ, на счетных узлах которого установлен пакет, должны быть представлены данные об этом ППП, а в случае возможности его работы в параллельном режиме на этом ВЭ должны быть указаны данные о конфигурации вычислительного элемента, установленных реализациях и версиях библиотек MPI⁵.

3) Установленный на ВЭ пакет должен быть доступен для использования пользователям соответствующей ВО.

Ниже описан опыт команды ЛИТ ОИЯИ по адаптации приложений на учебно-исследовательской и тестовой грид-инфраструктуре для запуска в различных грид-средах.

gLite

Для запуска в грид-среде gLite были адаптированы следующие пакеты:

1) DL_POLY⁶ – пакет программ общего назначения для моделирования процессов в области классической молекулярной динамики, разработанный в Лаборатории Даресбари И. Т. Годоровым и У. Смитом;

⁵ Message Passing Interface – программный интерфейс для передачи информации, который позволяет обмениваться сообщениями между процессами, выполняющими одну задачу.

⁶ URL: http://www.stfc.ac.uk/CSE/randd/ccg/software/DL_POLY/25526.aspx

2) Elmer⁷ – универсальная программная система с открытым исходным кодом для анализа методом конечных элементов широкого спектра физических моделей;

3) Molpro⁸ – набор программ *ab initio* для расчета электронной структуры молекул с высокой точностью;

4) Blender⁹ – бесплатный программный пакет с открытым исходным кодом для создания 3D-моделей и работы с ними.

Первые три пакета поддерживают возможность работы в параллельном режиме. Для облегчения запуска задач, вызывающих эти ППП в данном режиме, на рабочих узлах ВЭ одного из грид-сайтов учебной грид-инфраструктуры был установлен пакет *i2g-mpi-start*, который позволяет автоматизировать операции, необходимые для успешного запуска и выполнения подобных задач. Использование этого вспомогательного пакета накладывает определенные требования к составлению файла описания задачи и предполагает обязательное применение дополнительных скриптов (*mpi-hooks.sh* и *mpi-start-wrapper.sh*), в которых определяются соответствующие переменные среды окружения, указываются необходимые к выполнению до и после непосредственного вызова приложения команды с соответствующими параметрами.

Для отправки на счет задач, использующих пакеты DL_POLY, Elmer и Molpro, были составлены файлы описания задач и набор вспомогательных скриптов для каждого из пакетов.

Отличительной особенностью использования пакета Blender в грид-среде от трех других ППП, упомянутых выше, является то, что некоторые ресурсоемкие вычислительные операции в Blender можно разделить на независимые части, у которых нет необходимости обмениваться данными между собой. Например, визуализацию (рендеринг) анимации можно разбить на более мелкие итерации – обработка одного или нескольких кадров и выполнять каждую из них независимо как отдельную задачу в среде грид. Эта особенность позволяет использовать данное приложение на всех трех типах вычислительных ресурсов грид-среды.

Все адаптированные для запуска в среде gLite приложения, описанные выше, запускаются из командной строки интерфейса пользователя.

ГридННС

Цель проекта ГридННС¹⁰ – обеспечение географически распределенных научных и инженерных коллективов (участников национальной нанотехнологической сети (ННС)) возможностью эффективного удаленного использования информационной, коммуникационной и вычислительной инфраструктуры.

Основными вычислительными ресурсами инфраструктуры ГридННС являются суперкомпьютеры и кластеры с поддержкой счета параллельных задач.

Для проведения исследований с использованием молекулярно-динамического моделирования на ресурсах инфраструктуры ГридННС была создана виртуальная организация *moldyn* (сокр. от англ. *molecular dynamics*) и был адаптирован пакет DL_POLY (версий 2 и 3).

Поддержка ВО *moldyn* была организована на ВЭ грид-сайтов ЛИТ ОИЯИ и РИЦ «Курчатовский институт».

Небольшой размер кода и относительно малое время компиляции этого приложения по сравнению со временем выполнения расчетов позволяет производить компиляцию DL_POLY на рабочих узлах ВЭ каждый раз перед непосредственным вызовом приложения, что избавляет от необходимости предустанавливать данный ППП на вычислительных ресурсах грид-сайтов. Такой подход успешно применялся для выполнения задач с этим пакетом как в среде ГридННС, так и в среде gLite.

⁷ URL: <http://www.csc.fi/english/pages/elmer>

⁸ URL: <http://www.molpro.net/>

⁹ URL: <http://www.blender.org/>

¹⁰ URL: http://ngrid.ru/ngrid/about_project

Для запуска из ПИКС был создан файл описания задания и вспомогательный скрипт, выполняющий распаковку архива с исходным кодом DL_POLY, настройку переменных среды окружения, компиляцию и запуск приложения. Кроме того, задания с вызовом данного приложения можно было запускать через ВИГ.

Дополнительная информация по использованию этого ППП в инфраструктурах на базе gLite и ГридННС приведена в [Dushanov, Kholmurodov, Kutovskiy, 2010].

РГС

Одной из задач в проекте создания российской грид-сети (РГС¹¹) для высокопроизводительных вычислений, инициированном Министерством связи и массовых коммуникаций Российской Федерации, с целью облегчения работы пользователей в этой инфраструктуре являлась разработка специализированных проблемно-ориентированных веб-интерфейсов (ПОИ) для набора прикладных пакетов, которые позволяли бы упростить выполнение таких операций, как формирование и запуск счетных заданий, контроль хода их выполнения и получение результатов вычислений.

В инфраструктуре РГС, как и в ГридННС, в качестве вычислительных ресурсов используются суперкомпьютеры и кластеры с поддержкой счета параллельных задач.

Командой ЛИТ ОИЯИ были разработаны ПОИ к таким прикладным программным пакетам, как DL_POLY (молекулярная динамика), Elmer (инженерные расчеты) и GEANT4-DNA (моделирование биологических повреждений, вызванных ионизирующей радиацией на клеточном или субклеточном уровне). Для выполнения этих работ на учебно-исследовательской и тестовой грид-инфраструктуре был установлен ВИГ, в виде плагинов к которому и разрабатывались ПОИ для указанных приложений, а также развернут тестовый грид-сайт полигона РГС.

Пример снимка экрана для разработанных ПОИ приведен на рис. 1.



Рис. 1. Пример проблемно-ориентированного веб-интерфейса

Разработанные ПОИ позволяют пользователю задать название задания (по умолчанию ПОИ автоматически генерирует в соответствующем поле название, состоящее из имени пакета, текущей даты и времени), указать требуемое окружение на вычислительных узлах, задать не-

¹¹ URL портала РГС: <http://grid.voskhod.ru>

обходимое количество процессоров (только для DL_POLY и Elmer, способных работать в параллельном режиме), выбрать архив входных данных, которые должны быть подготовлены теми же средствами, как и при работе с пакетом вне грид-среды, указать имя файла для архива с выходными данными (если имя в поле «Архив выходных данных» пользователем не задано, тогда будет использоваться имя output.tar.gz). После того как обязательные поля заполнены, для запуска задания в РГС пользователь должен нажать на ПОИ кнопку «Запустить». Результат данной операции будет отражен в окне «Журнал работы». Отслеживание статуса отправленных заданий осуществляется в пункте «Запуск и контроль» основного меню.

Заключение

Развитие грид-технологий делает задачу адаптации существующих приложений для их использования в той или иной грид-инфраструктуре все более востребованной. Командой ЛИТ ОИЯИ накоплен определенный опыт в этом направлении, а также создана учебно-исследовательская и тестовая грид-инфраструктура, в том числе и для так называемой «гридификации» приложений.

По окончании начатой интеграции сегмента для распределенных вычислений на базе персональных компьютеров в полигон, функционирующий на основе ППО gLite/EMI¹², в учебно-исследовательской грид-инфраструктуре будут представлены все основные типы вычислительных ресурсов, описанные выше.

Помимо этого, с целью более эффективного использования аппаратных ресурсов и облегчения управления всей учебно-исследовательской и тестовой грид-инфраструктурой, количество виртуальных машин в которой в зависимости от круга текущих задач варьируется от нескольких десятков до сотни, ведутся работы по созданию локального «облака» на базе программного продукта OpenNebula¹³ с последующей миграции в него всей инфраструктуры, для чего был разработан драйвер гипервизора OpenVZ¹⁴ для этой «облачной» платформы.

Более того, в связи интенсивным развитием распределенных вычислений в сторону так называемых «облачных» вычислений, планируется создание полигона для адаптации приложений в облачные среды.

Также рассматривается вопрос о приобретении сервера с GPU и его интеграции в учебно-исследовательскую грид-инфраструктуру с целью разработки и портирования приложений для графических процессоров.

Список литературы

- Кутовский Н. А.* Учебно-исследовательская и тестовая грид-инфраструктура / Труды XV-ой научной конференции молодых ученых и специалистов ОИЯИ (14–19 февраля 2011, Дубна), ОИЯИ, Дубна, Россия, 2011. С. 241–244.
- Dushanov E. B., Kholmurodov Kh. T., Kutovskiy N.* Some experience in running molecular dynamics simulation application in Grid / Proceedings of the 4th international conference «Distributed Computing and Grid-technologies in Science and Education» (Dubna, June 28 – July 3, 2010), ISBN 978-5-9530-0269-1, Dubna, Russia, 2010. P. 90–92.

¹² EMI (European Middleware Initiative) – это программная платформа для высокопроизводительных распределенных вычислений (URL: <http://eu-emi.eu>), выступающая базой для построения европейской грид-инфраструктуры и в рамках которой сейчас происходит развитие ППО gLite.

¹³ URL: <http://opennebula.org>

¹⁴ URL: <http://openvz.org>