

## **УПРАВЛЕНИЕ ЗАДАНИЯМИ В ВИРТУАЛЬНОМ МЕТАКОМПЬЮТЕРНОМ ЦЕНТРЕ НА ОСНОВЕ ТЕХНОЛОГИЙ X-COM**

Соболев С.И., НИВЦ МГУ

119992, Москва, Ленинские горы, НИВЦ МГУ; тел.: (095) 939-23-41; e-mail: sergeys@parallel.ru

Создание метакомпьютерной среды для решения задач большой вычислительной сложности является само по себе нетривиальной задачей. Все особенности метакомпьютерных сред, такие как чрезвычайно большие числовые характеристики, неоднородность, динамичность конфигурации, распределенность и другие, необходимо тщательно учитывать и по возможности эффективно использовать при планировании крупномасштабных расчетов. В настоящее время уже существует ряд технологий и подходов к организации подобных сред различного масштаба – от международных проектов, создаваемых для обработки данных значительных физических экспериментов, и до программных средств, позволяющих запускать задания пользователей на компьютерах локальной сети в моменты их простоя.

Разработанная в НИВЦ МГУ система X-Com (<http://x-com.parallel.ru/>) представляет собой инструментарий для поддержки выполнения вычислительно сложных задач в распределенной неоднородной вычислительной среде. Система проектировалась с учетом упомянутых выше особенностей метакомпьютерных сред, при этом дополнительным требованием было обеспечение простоты организации вычислительной среды на основе имеющихся доступных ресурсов, а также легкой адаптации прикладных программ к выполнению в такой среде. Система построена на основе клиент-серверной технологии. Центральный сервер системы отвечает за распределение заданий на вычислительные узлы системы и сбор результатов от них. На вычислительных узлах устанавливаются клиенты X-Com, которые принимают задания от сервера и осуществляют вычисления. Общение между клиентами и сервером X-Com осуществляется по стандартным интернетовским протоколам. Узлами такой метакомпьютерной среды могут выступать компьютеры учебных классов, офисные компьютеры, мощные рабочие станции, высокопроизводительные серверы, узлы вычислительных кластеров и т.д. Клиенты X-Com могут запускаться на узлах в различных режимах: монопольно, через штатные системы прохождения заданий, по занятости узла.

Однако, будучи инструментарием, система X-Com предоставляет самый нижний уровень работы с распределенными приложениям. В настоящее время на ее основе разрабатывается Виртуальный метакомпьютерный центр (ВМЦ) – сервис высокого уровня, позволяющий в распределенном режиме решать на доступных вычислительных мощностях задачи, уже заранее подготовленные для работы в среде X-Com. Предполагается, что пользователи ВМЦ будут указывать задачу и входные данные для

нее и через некоторое время получать результат, возможно, даже не заботясь о том, какие ресурсы будут задействованы для вычислений.

Основу ВМЦ составляет подсистема управления заданиями `xqserv`, реализованная на основе клиент-серверной архитектуры. Функциональность клиента `xqserv` минимальна, фактически он лишь передает имя пользователя и заданную им команду (параметры, заданные при вызове клиента) серверу и интерпретирует полученный от сервера код возврата. В зависимости от того, с каким именем вызывается клиент, он осуществляет либо подробную выдачу информации для пользователя (при работе в режиме командной строки), либо сокращенную, которая интерпретируется модулем веб-интерфейса. Обмен данными между клиентом и сервером осуществляется через сетевое TCP/IP соединение, т.е. физически они могут находиться на разных машинах (в текущей версии системы дополнительно требуется наличие общей файловой системы для машин, выполняющих клиентский и серверный модули). Оба модуля написаны на языке PHP и рассчитаны на функционирование в среде ОС Linux.

Сервер системы управления заданиями `xqserv`, взаимодействуя с пользователем через клиентский модуль, предоставляет следующие возможности:

- постановку задания в очередь на выполнение;
- отображение текущего состояния очереди;
- удаление собственных заданий из очереди (возможно, с прерыванием текущего расчета);
- административные функции для привилегированных пользователей (удаление любых заданий, блокировка очереди от добавления новых заданий, завершение работы сервера).

Для постановки задания в очередь применяются специальные файлы описания заданий. В этих файлах указывается имя задачи, под которым она известна серверу X-Com, а также конкретные входные данные.

Основной цикл работы сервера очередей следующий. При наличии в очереди задания на счет и отсутствии процессов X-Com он прочитывает указанный файл описания задания и на его основе создает файл инициализации сервера X-Com с параметрами, необходимыми для запуска задачи, после чего запускает соответствующие процессы сервера X-Com. Состояние этих процессов постоянно отслеживаются, и по окончании работы сервера X-Com может быть запущено следующее задание. Все запросы к серверу и предпринятые им действия протоколируются в лог-файле.

Еще один дополнительный сервис сервера очередей – возможность переадресации обратившегося к нему клиента X-Com к указанному серверу X-Com. Для этого поддерживается отдельное сетевое соединение. Данная возможность пока не очень востребована, однако она будет очень полезна при наличии в метакомпьютерной среде нескольких одновременно работающих серверов X-Com.

Основной интерфейс работы пользователей с подсистемой очередей – интерфейс командной строки. В рамках ВМЦ разрабатывается веб-интерфейс к системе для более удобного и безопасного доступа к системе. Уже сейчас веб-интерфейс позволяет в удобном виде просматривать состояние очереди и статистику выполненных заданий. Средствами самого сервера X-Com доступен мониторинг хода текущего расчета, предоставляющий сведения о подключенных узлах, прогресс вычислений, оценку производительности среды и другие данные. Эта информация может выдаваться в т.ч. в XML-формате, что позволяет подключать к системе развитые средства визуализации хода расчетов. Для уже завершенных заданий на основе лог-файлов сервера X-Com может быть предоставлена подробная статистика о ходе вычислений и подключенных ресурсах.

Одной из практических задач, решенных в среде ВМЦ, была задача поиска ингибиторов для заданных белков-мишеней. Задачи этого типа активно используются при разработке новых лекарственных препаратов. В проведенном вычислительном эксперименте проводился докинг 2123 молекул лигандов с пятью вариантами белков (тромбин, ВИЧ-протеаза). Таким образом, требовалось обработать 10615 вычислительных порций, при этом время обработки одной порции составляло несколько часов. В распределенном режиме над задачей работало 154 узла (273 процессора), а именно: суперкомпьютерный центр НИВЦ МГУ, вычислительный кластер ЮУрГУ (г. Челябинск), машины компьютерного класса НИВЦ МГУ и отдельные рабочие станции. Расчет проводился с 31 декабря 2005 г. по 11 января 2006 г., т.е. в дни рождественских каникул, когда указанные ресурсы были свободны от других заданий. Суммарное процессорное время расчета по всем узлам составило около 4.8 процессоро-лет – именно столько работал бы над расчетом один компьютер. Общая производительность всех подключенных узлов превысила 1 Tflops. С помощью системы очередей всё задание было разбито на 10 пакетов, чтобы пропустить вначале более быстрые порции, а медленные оставить под конец.

В настоящее время основное развитие ВМЦ сосредоточено на механизмах управления заданиями. Использование мощной подсистемы управления прохождением заданий позволит значительно расширить предоставляемую средствами X-Com функциональность и улучшить эффективность использования ресурсов. В частности, становится возможным разделение общей метакомпьютерной среды на сегменты, каждый из которых будет решать ту прикладную задачу из очереди доступных заданий, которая наилучшим образом будет отвечать требованиям, задаваемым в описании задания. Такими требованиями могут быть частота и тип CPU, объем оперативной и дисковой памяти и т.д. Этот подход позволит, например, пропускать небольшие легкие задачи на относительно слабых вычислительных узлах среды, в то время как мощные узлы будут работать над тяжелыми задачами. Для реализации этих возможностей будут модифицированы протоколы обмена данными между частями системы, разработан формат описания требований к ресурсам, отработан запуск нескольких серверов X-Com на одном физическом сервере.

Работа выполняется при поддержке РФФИ, гранты 05-07-90206, 05-07-90292-в.