

УДК 004.75

Использование распределенных компьютерных ресурсов для решения вычислительно сложных задач

С.И. Соболев

Аннотация

Статья посвящена использованию системы метакомпьютинга X-Com для организации распределенных вычислительных сред. В статье рассматривается задача виртуального докинга молекул, обсуждаются технологические аспекты ее решения в распределенной среде, приводятся экспериментальные данные и результаты исследований.

Using of distributed computing resources for computation-intensive tasks

S.I. Sobolev

Abstract

The article dedicated to the using of X-Com metacomputing system for creating a distributed computational environments. The article reviews the task of virtual molecular docking, discusses technological aspects of its solving in distributed environment, shows experimental data and investigation results.

Введение

Решение вычислительно сложных задач всегда связано с использованием значительных компьютерных мощностей. Потребность в решении таких задач постоянно растет, работа с ними ведется на грани возможностей компьютерных систем, отсюда и постоянный поиск новых методов решения. Одним из перспективных подходов является использование технологий распределенных вычислений, позволяющих задействовать для решения одной задачи различные вычислительные системы, связанные между собой какими-то каналами связи. Если прикладную задачу можно разбить на множество блоков, которые могут независимо обрабатываться на различных узлах распределенной вычислительной среды, не требуя при этом интенсивного сетевого общения между собой, то такая задача может быть эффективно решена в рамках подобных метакомпьютерных технологий.

Распределенная вычислительная среда обладает целым рядом особенностей, не свойственных традиционным высокопроизводительным системам [1]. Среда может обладать потенциально неограниченными доступными ресурсами, особенно если в качестве коммуникационной среды рассматривать сеть Интернет. Компоненты среды могут быть

значительно удалены друг от друга, что неизбежно приводит к задержкам во взаимодействии между ними. Конфигурация среды может динамически меняться в ходе решения задачи – какие-то сегменты могут подключаться к расчету, а какие-то, напротив, отключаться. Среда может объединять совершенно различные типы ресурсов с точки зрения программно-аппаратной платформы, с различными политиками доступа, определяющими режимы работы данного ресурса в распределенной среде. Поэтому для эффективного решения больших задач в подобных средах необходим специальный инструментарий, учитывающий все перечисленные особенности. Примером такого инструментария может служить система X-Com, разработанная в НИВЦ МГУ [2, 5].

Система метакомпьютинга X-Com

С точки зрения технологии X-Com задача разбивается на две части. Серверная часть отвечает за генерацию вычислительных порций – блоков входных данных для программы. Клиентская часть устанавливается на узлы распределенной среды, она осуществляет запуск прикладной программы, передачу ей входных данных и отправку результатов серверной части. Ядром системы X-Com являются модули, реализующие интерфейсы прикладной программы для клиентской и серверной части и организующие общение между ними.

Для более удобной работы пользователей в системе предусмотрены средства управления заданиями в метакомпьютерной среде. Последовательность задач, уже адаптированные к интерфейсам X-Com, могут образовывать очередь. Система управления заданиями последовательно запускает на счет задачи из очереди на всех доступных ресурсах. Пользователям предоставляются интерфейсы для постановки задания в очередь, удаления из очереди, просмотра текущего состояния очереди. Наиболее функциональным в данный момент является интерфейс командной строки, при этом система также позволяет разрабатывать веб-интерфейсы для запуска приложений с вводом исходных данных для них.

Такая функциональность позволяет не только использовать систему X-Com для организации однократных метакомпьютерных расчетов, но и создавать на ее основе виртуальные метакомпьютерные центры, предоставляющие возможность решения задач на доступных вычислительных ресурсах.

Задача докинга молекул и система X-Com

В НИВЦ МГУ система X-Com применяется, в частности, для решения задачи докинга молекул органических соединений (лигандов) в активные центры белков-мишеней. Эта задача решается при разработке

новых лекарственных соединений, позволяя значительно упростить и ускорить отбор потенциально эффективных соединений. Для решения задачи использовалась программа докинга SOL [3], осуществляющая позиционирование лигандов в активном центре заданного белка, отталкиваясь от трехмерной структуры белка и структуры его активного центра. В этой программе белок описывается жесткой пространственной сеткой значений потенциалов взаимодействия различных типов атомов лиганда с различными типами атомов белка. Основная вычислительная сложность программы докинга заключается в поиске глобального минимума на сложной энергетической поверхности, содержащей большое количество локальных минимумов. Время, затрачиваемое на один лиганд, составляет от нескольких минут до одного-двух десятков часов на одном процессоре в зависимости от лиганда и размера активного центра белка. Стоит отметить, что использованная программа SOL работает медленнее аналогичных программ, которые тратят обычно несколько минут на одно соединение на одном процессоре, но гораздо более аккуратно, причем лучше проводится не только позиционирование лиганда в белке, но и оценивается свободная энергия взаимодействия лиганда с белком [3].

С точки зрения программы SOL входные данные для задачи представляют собой:

- (а) описание белка – это двоичный файл размером около 200 Мб;
- (б) описания лигандов – это текстовые файлы, имеющие размер порядка нескольких Кб;
- (в) файл дополнительных параметров, отвечающий за точную настройку вычислительного ядра задачи.

Для проведения докинга набора лигандов в заданный белок необходимо вызывать программу для каждого лиганда, используя имя файла его описания в качестве одного из аргументов. Поскольку вычисления по каждому лиганду производятся независимо, а время обработки одного лиганда на одном компьютере составляет часы и даже десятки часов, данная задача может решаться в распределенной метакомпьютерной среде.

В рамках технологии X-Com прикладная задача была разбита на две части – серверную и клиентскую. Серверная часть задачи – библиотека, написанная на языке Си и вызываемая сервером X-Com – обеспечивала подготовку вычислительных порций для клиентов на основе параметров, задаваемых при запуске. В качестве параметров запуска использовался список лигандов для расчета, путь к месту расположения файлов описания лигандов, имя файла с сеткой, описывающей белок, и путь для сохранения результатов. Вычислительная порция представляла собой содержимое файла лиганда с дополнительным блоком служебной информации. Результаты расчета, приходящие от клиентов, размещались серверной частью в указанный каталог.

Клиентская часть, функционирующая на подключаемых узлах, представляла собой набор запакованных в архив файлов: программу SOL, файл дополнительных параметров, вспомогательные утилиты и управляющий скрипт на языке Perl, реализующий логику работы клиентской части. Управляющий скрипт отвечал за подготовку входных данных для программы SOL на основе получаемых порций, запуск программы и формирование результирующих порций, пересылаемых на сервер.

Файлы описания белков ввиду их значительных размеров не включались в состав клиентской части. Поэтому в управляющем скрипте было реализовано несколько стратегий доступа к этим файлам. Если при запуске клиента в его параметрах была указана директория, то файл белка брался из этой директории (этот вариант использовался при размещении файла на общих сетевых ресурсах в различных сегментах распределенной среды). В противном случае файл искался во заданных директориях на каждом узле среды. В случае отсутствия файла в заданных директориях он однократно скачивался на узел с центрального сервера по протоколу HTTP с помощью утилиты wget.

Решение задачи докинга в распределенной среде

Для относительно небольших расчетов с использованием метакомпьютерного варианта программы SOL обычно достаточно ресурсов рабочих станций одной лаборатории, осуществляющих эти вычисления в фоновом режиме. Однако периодически возникает необходимость решения задачи докинга большого числа лигандов с повышенной точностью. В тех случаях, когда мощностей компьютеров одной или нескольких лабораторий явно не хватает, проводятся крупномасштабные вычислительные эксперименты с подключением значительного числа внешних вычислительных ресурсов.

Во время одного из таких расчетов необходимо было осуществить моделирование реакций 5 различных белков (тромбин и 4 модификации ВИЧ-протеазы) с 2123 молекулами из базы данных NCI-Diversity, т.е. требовалось обработать 10615 вычислительных порций. Поскольку реальное время расчета могло быть оценено лишь приблизительно, было принято решение разбить весь расчет на 10 заданий. Для каждого белка сначала должны были просчитаться порции-лиганды, ожидаемое время обработки которых было достаточно невелико, затем на счет поступала остальная часть порций. Задания были сформированы заранее и поставлены в очередь на выполнение с использованием системы очередей X-Com.

Расчет проводился в дни рождественских каникул. На это время удалось подключить к расчетам следующие компьютерные ресурсы:

- 101 узел суперкомпьютерного комплекса НИВЦ МГУ, в составе:
 - 13 узлов кластера LEO (2x Intel Xeon 2.6 ГГц, RAM 2 Гб, RedHat Linux);
 - 14 узлов кластера AQUA (2x Intel Pentium III 1 ГГц, RAM 1 Гб, RedHat Linux);
 - 74 узла кластера ANT (2x AMD Opteron 248 2.2 ГГц, RAM 4 Гб, SUSE Linux);
- 18 узлов вычислительного кластера Infinity ЮУрГУ, г. Челябинск (2x Intel Xeon 64DP 3.2 ГГц, RAM 2 Гб, SUSE Linux);
- 5 рабочих Windows-станций НИВЦ МГУ (Intel PIV 2.8-3.6 ГГц, RAM 1-2 Гб, Windows XP);
- Linux-сервер НИВЦ МГУ (2x Intel Xeon 2.8 ГГц, RAM 2 Гб, ОС Debian Linux);
- 29 Windows-машин компьютерного класса НИВЦ МГУ (Intel PIV 2.4 ГГц, RAM 1 Гб, Windows XP).

В качестве центрального сервера использовался головная машина вычислительного комплекса НИВЦ МГУ (2x Intel Pentium III 850 МГц,

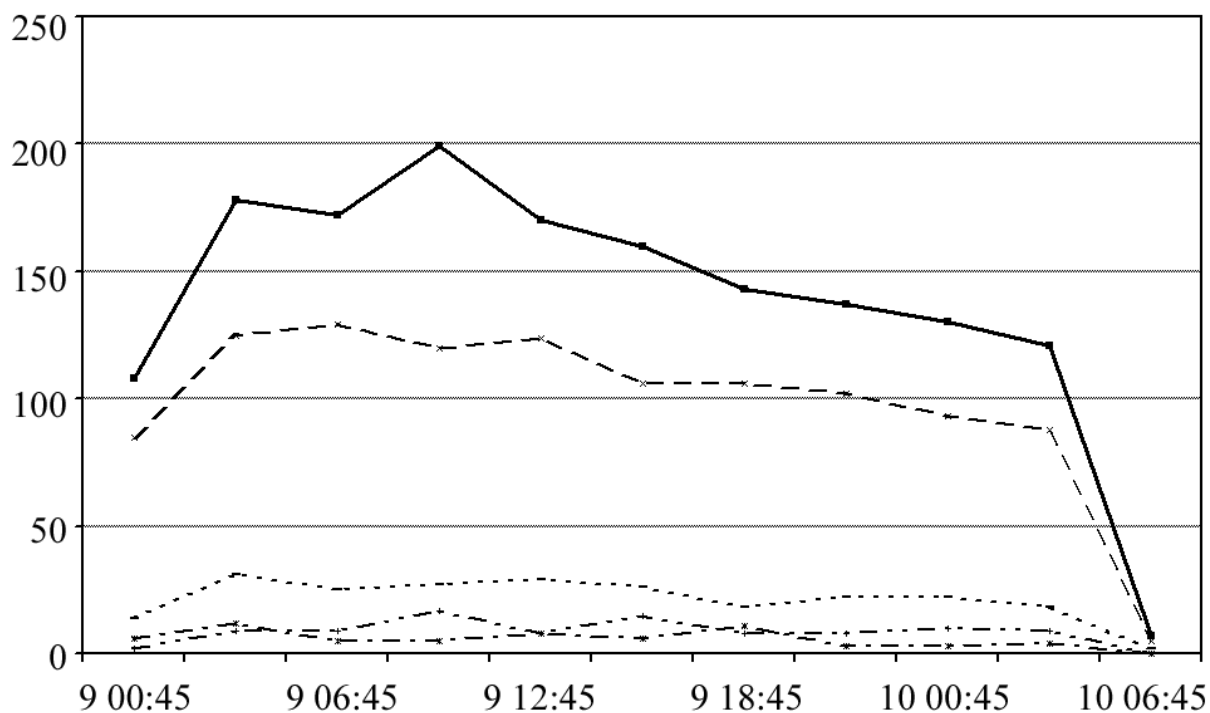


Рис. 1. График активности процессоров

RAM 1 Гб, RedHat Linux). У всех компьютеров, за исключением узлов кластера Infinity, был прямой доступ к сети Интернет, и клиенты, запускаемые на этих машинах, были настроены на прямое взаимодействие с сервером. Узлы же кластера Infinity прямого выхода в Интернет не имели, поэтому на головной машине кластера был запущен прокси-сервер

simpleпроху, через который осуществлялся обмен трафиком между узлами и центральным сервером.

Значительную часть времени компьютеры работали над задачей в монопольном режиме. Исключение составил первый день расчета, когда узлы вычислительных кластеров МГУ подключались к вычислениям по ходу завершения задач, запущенных на них через штатную систему очередей. Были сложности с подключением учебного класса НИВЦ – практически в самом начале эксперимента из-за неполадок головной машины класса, обеспечивающей их выход в Интернет, связь с классом была потеряна. Ее удалось восстановить только в последний день, однако к тому моменту из расчета уже был выведен челябинский кластер Infinity.

Не считая центрального сервера, непосредственно в расчете было задействовано 273 процессора в 154 узлах, из которых 120 узлов работали под управлением ОС Linux, остальные 34 – под управлением ОС Windows.

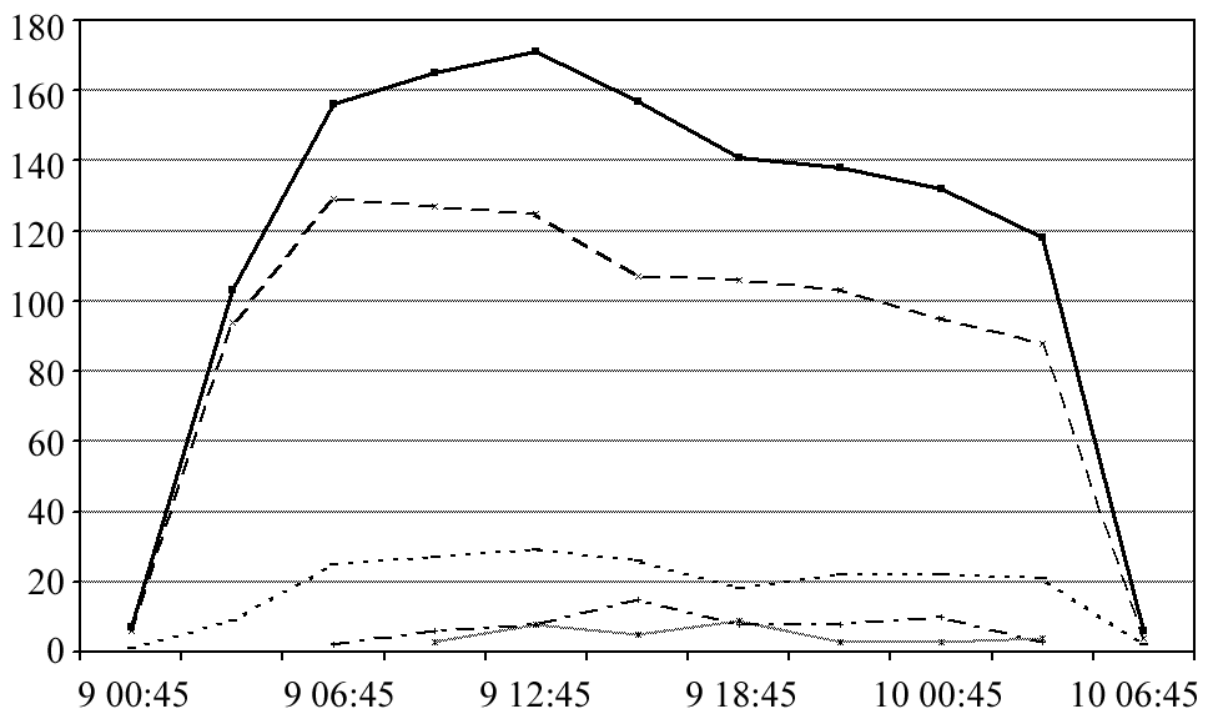


Рис. 2. График возвращения результатов расчета

На рис. 1 представлен график активности процессоров в ходе решения одного из этапов задачи. По оси X отложено время расчета, по оси Y – число процессоров. Верхняя линия отражает суммарную активность процессов, т.е. запросов на получение новых порций в интервале времени, линии ниже нее – активность процессов отдельных сегментов среды. Низкие значения в левой части графика объясняются тем, что часть узлов продолжала обрабатывать порции предыдущего этапа и подключалась к новому постепенно. Снижение суммарного графика после пика вызвано достаточно большими значениями времени обработки порций – узлы были заняты и не запрашивали новых порций.

На рис. 2 приведен соответствующий этому же этапу график возвращения результатов расчета. По оси X отложено время расчета, по оси Y – число порций. Верхняя линия – общая сумма полученных сервером порций за интервал времени, линии ниже – порции, получаемые от каждого сегмента среды.

Время обработки одной порции во всем расчете варьировалось от 50 минут до 20 часов, в среднем оно составляло 3-4 часа. Всего в общей сложности эксперимент продолжался 232 часа, при этом суммарное процессорное время составило 42774 процессоро-часа, т.е. 4,8 процессоролет. Суммарная производительность распределенной вычислительной среды в основное время расчета превысила 1 Tflops.

Результаты расчетов и перспективные направления работ

На основании проведенного расчета для тромбина были выбраны наиболее перспективные кандидаты в ингибиторы, 30 из которых были заказаны в Национальном Институте Рака (США) и получены для проведения экспериментов. Измерения всех этих 30 соединений в Гематологическом Научном Центре РАМН (лаборатория Ф.И. Атауллаханова) выявили среди них 8 новых ингибиторов тромбина, два из которых имели высокую ингибирующую активность [4].

На основе системы X-Com и программы SOL в настоящее время разрабатывается веб-ориентированная система Keenbase, предоставляющая удобный пользовательский интерфейс и доступные вычислительные ресурсы для поиска ингибиторов заданных белков-мишеней [4].

Продолжаются работы и над самой системой X-Com. Создано модульное средство визуализации хода текущего расчета, позволяющее продемонстрировать в различных режимах состояние распределенной среды и степень выполнения прикладной задачи в ней. Разрабатывается многопоточная система очередей, которая позволит запускать в распределенной среде одновременно несколько заданий, причем каждому узлу среды будет назначаться задание, наилучшим образом отвечающее его характеристикам.

Отдельным и очень перспективным направлением работы является исследование свойств самой распределенной среды. В настоящее время создается тестовый комплекс, позволяющий оценить накладные расходы системы метакомпьютинга при работе в той или иной среде, определить пропускную способность каналов связи между сервером и различными сегментами среды, получить информацию о характеристиках вычислительных узлов, входящих в среду. Комплекс подобных тестов, запущенный перед выполнением серьезного масштабного расчета, позволит выявить особенности и узкие места доступной вычислительной среды. Эта информация может быть использована для повышения

эффективности расчета за счет точной настройки параметров системы X-Com и прикладной задачи.

Литература

1. Воеводин Вл.В., Филамофитский М.П.; Суперкомпьютер на выходные, Открытые системы, 2003, №5, с. 43-48.
2. М.П. Филамофитский; Система поддержки метакомпьютерных расчетов X-Com: архитектура и технология работы, Вычислительные методы и программирование, 2004, т. 5, с. 123-137.
3. Сулимов В.Б., Романов А.Н., Григорьев Ф.В., Кондакова О.А., Луцкекина С.В., Соболев С.И.; Оценка энергии связывания белок-лиганд с учетом растворителя и программа докинга SOL: принцип работы и характеристики, Сборник материалов XIII российского национального конгресса "Человек и лекарство" 3 апреля 2006 г., 2006, с. 37.
4. В.Б. Сулимов, А.Н. Романов, Ф.В. Григорьев, О.А. Кондакова, А.В. Сулимов, С.Н. Жабин, С.И. Соболев; Веб-ориентированная система молекулярного моделирования Keenbase для разработки новых лекарств, Труды Всероссийской научной конференции "Научный сервис в сети Интернет: Технологии параллельного программирования" (г. Новороссийск, 18-23 сентября 2006 г.), 2006, с. 170-172.
5. Система метакомпьютерных расчетов X-Com; Интернет-ресурс, <http://x-com.parallel.ru/>

Научный руководитель работы: зам. директора НИВЦ МГУ, чл.-корр. РАН, д.ф.-м.н. Вл.В. Воеводин