Интегрированный программный комплекс для поддержки параллельных вычислений в рамках информационно-вычислительного портала

Н.Н. Окулов
Кемеровский государственный университет

Рассмотрен программный комплекс, предназначенный для повышения удобства и эффективности процесса разработки параллельных программ, а также позволяющий решать широкий спектр задач по использованию кластеров, включая обеспечение деятельности вычислительных центров удобной средой для управления учетными записями пользователей, программным обеспечением и вычислительными ресурсами.

Информационно-вычислительный портал и его подсистемы

Информационно-вычислительный портал (ИВП) предоставляет пользователям единую среду для осуществления широкого спектра работ по разработке и оптимизации параллельных программ для высокопроизводительных вычислений и проведения численного эксперимента на различных вычислительных ресурсах, независимо от их программно-аппаратного обеспечения, в удобном и доступном Web-интерфейсе. Также ИВП обеспечивает ряд дополнительных функций, упрощающих разработку параллельных приложений.

ИВП выступает платформой для интеграции нескольких информационных систем, образующих единый программный комплекс, позволяющий пользователю решать широкий перечень задач в сфере параллельных вычислений.

Основой портала является система удаленного доступа и управления распределенными вычислительными ресурсами, обеспечивающая выполнение вычислительных заданий в удаленном режиме, а также управление и хранение пользовательских объектов. Данная система сочетает в себе возможности удаленного доступа с графическим интерфейсом пользователя, пакетной обработки заданий и мониторинга состояния ресурсов.

Информационная система «Виртуальная лаборатория» разработана с целью организации виртуального лабораторного практикума с использованием высокопроизводительных вычислительных ресурсов в удаленном режиме. Данная система может быть использована в научных целях, а также в учебном процессе вузов в рамках курсов по высо-

копроизводительным вычислениям. «Виртуальная лаборатория» предполагает исследование эффективности параллельных программ, реализующих определенный численный алгоритм, и получение сведений для их дальнейшей оптимизации.

Одним из инструментов, существенно сокращающим цикл разработки параллельного приложения, является система отладки, производящая анализ на наличие локальных и глобальных ошибок в MPI-программах.

В портал интегрирована библиотека параллельных программ HydroParaLib, предназначенная для решения задач гидродинамики со свободными границами. Предусмотрен механизм подключения библиотек программ для других областей численных расчетов.

Системы мониторинга и биллинга предназначены для оперативного отслеживания состояния вычислительных ресурсов и учета использованного процессорного времени соответственно и носят служебный характер.

Структура системы УД и УРВР

Структура системы УД и УРВР включает три звена: клиент, сервер и менеджер кластера. В состав серверной части входят: сервер приложений, сервер баз данных и сервер управления кластерами (менеджер вычислительных ресурсов, МВР). Общая структура системы приведена на рис. 1.

Логически систему можно разбить на 2 взаимодействующие части:

– Система удаленного доступа к распределенным вычислительным ресурсам (СУД РВР), обеспечивающая пользовательский интерфейс для размещения своих объектов (файлов исходного кода, исполняемого кода и др.) и управления заданиями, и для обработки результатов. Данная подсистема включает в себя сервер БД под управлением СУБД Oracle, выступающий в качестве хранилища данных, и сервер приложений Tomcat, который осуществляет динамическую генерацию Web-страниц с использованием пакета KemsuWeb. Доступ пользователя к системе осуществляется посредством Web-браузера.

– Система управления распределенными вычислительными ресурсами (СУ РВР). Она отслеживает состояние кластеров, загружает на них новые задания и сохраняет результаты. В эту подсистему входят сервер БД, кластерные агенты, расположенные на главных узлах вычислительных кластеров, и сервер МВР, обеспечивающий передачу файлов и запросов на генерацию исполняемого кода между агентами и хранилищем данных, а также выполнение расчетов.

Взаимодействие менеджера вычислительных ресурсов с сервером БД осуществляется через прикладной интерфейс OCCI (Oracle C++ Call Interface).

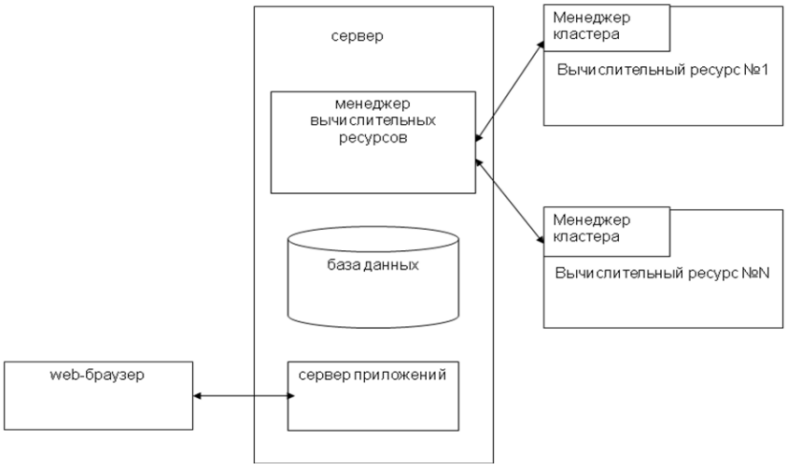

Рис. 1. Структура системы УД и УРВР

Менеджер кластера выполняет следующие функции:

– автоматическая компиляция заданий пользователей на кластере;
– автоматический запуск заданий (параллельных и последовательных) на кластере с последующим возвращением результатов пользователю;
– мониторинг состояния узлов кластера.

Все данные в систему передаются через NFS в виде управляющих файлов и файлов данных. В случае если менеджер кластера не запущен, то после его запуска произойдет считывание файлов команд и запуск заданий. При этом менеджер вычислительных ресурсов должен равномерно распределить нагрузку между кластерами, так как после запуска менеджера кластера он запускает все новые задания сразу. Файлы выходных данных сохраняются в NFS, затем передаются на сервер и далее клиенту по его запросу. Также возможен запрос промежуточных результатов. При этом серверу будут отправлены файлы, образовавшиеся в ходе работы программы, включая файл, в который перенаправляется стандартный вывод.

Система мониторинга состоит из агента сервера, агентов, расположенных на управляющих узлах кластера, и SNMP процессов, запу-

щенных на узлах кластера. Данные с узлов собираются агентом на хост-узле, вычисляются средние значения и отправляются агенту сервера. Далее они могут быть агрегированы и обработаны для последующего распределения нагрузки внутри кластера.

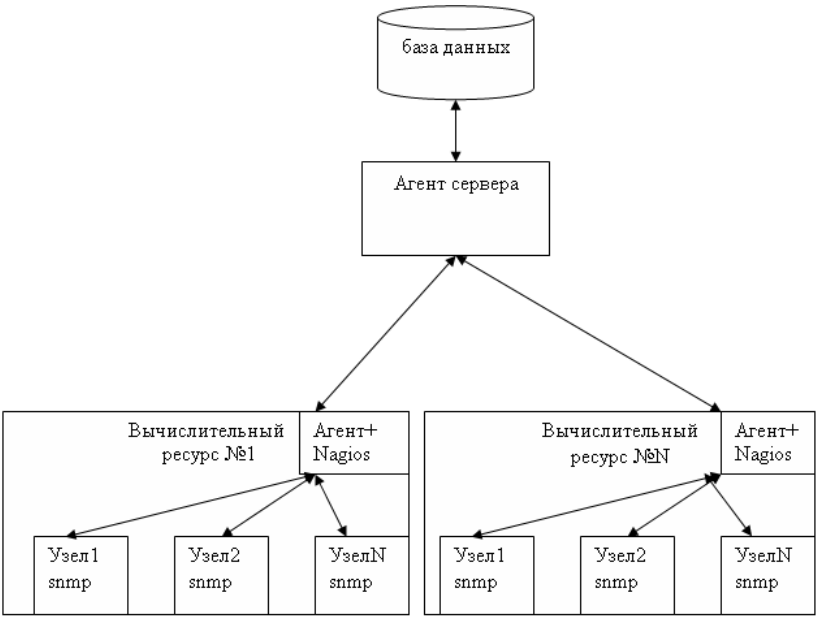

Рис. 2. Общая схема сбора статистики

В целях визуализации параметров мониторинга была выбрана система Nagios, способная предоставлять мгновенные значения параметров.

Система «Виртуальная лаборатория»

Система «Виртуальная лаборатория» предназначена для решения двух основных типов задач, определяющих возможность ее применения как в образовательной, так и в научной сферах:

1. Проведение серий вычислительных экспериментов с целью получения сведений для повышения эффективности параллельной реализации алгоритма, включая определение зависимости времени выполнения программы от задаваемых

пользователем параметров задачи; вычисление показателей ускорения и эффективности исследуемого параллельного кода, а также оценку и прогноз времени, необходимого для выполнения расчета.

2. Организация виртуального лабораторного практикума студентов на высокопроизводительных вычислительных ресурсах.

Основным пользовательским объектом в системе является лабораторная работа, которая содержит набор входных параметров работы и список проектов. Поддержка создания нескольких проектов в рамках лабораторной работы необходима для обеспечения возможности запуска лабораторной работы на вычислительных ресурсах с различным программно-аппаратным обеспечением (имеют значение вычислительная архитектура кластера, операционная система, используемые компиляторы). Значения входных параметров работы (например, количество итераций или размер матрицы) можно варьировать при запуске.

Для определения степени влияния параметров на время выполнения используются методы корреляционного анализа. В случае нескольких независимых входных параметров исследования решается уравнение множественной регрессии. Коэффициенты детерминации, полученные в результате применения данного метода, отражают степень зависимости времени выполнения программы от каждого из исследуемых параметров запуска.

Для оценки предполагаемого времени выполнения программы с заданными значениями параметров применяется интерполяция и экстраполяция на основе данных, полученных при предыдущих запусках.

Сформированные системой сведения пользователь может применить для повышения эффективности своей параллельной программы, а также предварительно оценить расчетное время выполнения своей программы. Благодаря возможности создания нескольких проектов для одной лабораторной работы и запуска на различных вычислительных ресурсах, пользователь также может сравнить между собой данные времени выполнения и выбрать оптимальную среду для запуска своей программы.

Литература

1. **Окулов Н.Н.** Разработка информационного портала параллельных вычислений для проведения научных и инженерных расчетов в режиме on-line / К.Е. Афанасьев, Н.Н. Окулов, С.В. Стуколов // Пя-

тая Сибирская конференция по параллельным и высокопроизводительным вычислениям. – Томск: Изд-во Том. ун-та, 2010. – С. 10 –14.
2. **Григорьева И.В.** Система удаленного доступа и управления распределенными вычислительными ресурсами / И.В. Григорьева, А.В. Демидов // Вычислительные технологии. – 2008. – Т. 13. – Специальный выпуск 5. – С. 28–32.