# Разработка информационного портала параллельных вычислений для проведения научных и инженерных расчетов в режиме on-line

*К.Е. Афанасьев, Н.Н. Окулов, С.В. Стуколов*
Кемеровский государственный университет

*Рассматривается информационно-вычислительный портал КемГУ, основными возможностями которого являются: проведение численных экспериментов, хранение, поиск и обработка информации, получаемой в результате расчетов; сбор, систематизация, методическая обработка информационных образовательных ресурсов, гибкая система поиска ресурсов; информационная поддержка проведения научных конференций. Также рассмотрены важнейшие подсистемы портала, предоставляющие возможность проведения научных и инженерных расчетов.*

## Введение

Стремительное развитие глобальных информационных и вычислительных сетей ведет к изменению фундаментальных парадигм обработки данных, которые можно охарактеризовать как переход к распределенным ресурсам и создание инфраструктуры для свободного доступа к ним. Разрабатываемые технологии должны предоставлять возможности для точного и адекватного удовлетворения потребностей пользователей, обращающихся к информации или вычислительному ресурсу. Комбинация возможности доступа к данным через базу метаданных, службы каталогов, зарегистрированного набора методов обработки данных позволяет решать задачи для создания среды обработки данных и управления вычислительными ресурсами.

Создание информационно-вычислительного портала для работы с высокопроизводительными вычислительными ресурсами (ВПВР) позволит расширить сферу использования ВПВР в научных исследованиях и учебном процессе вузов.

## Информационно-вычислительный портал

Информационно-вычислительный портал является единым пространством для организации учебной и научной деятельности вуза в сфере решения различных задач с использованием вычислительного эксперимента, проведения научных конференций, хранения и работы с

информационными ресурсами, неформального общения в тематических форумах, информировании о событиях, происходящих в учебном заведении.

Портал является основной технологической единицей общей инфраструктуры единой информационной научно-образовательной среды. По сути, Портал – это точка с определенным регламентом доступа к научно-образовательной жизни вуза (информационным ресурсам, научным конференциям, вычислительным экспериментам) независимо от места расположения потенциального пользователя, учебного заведения или места подключения пользователя к сети Интернет.

Основными возможностями портала являются:

- проведение численных экспериментов, хранение, поиск и обработка информации, получаемой в результате расчетов;
- сбор, систематизация, методическая обработка информационных образовательных ресурсов, гибкая система поиска ресурсов;
- информационная поддержка проведения научных конференций.

Учебный информационно-вычислительный портал представляет собой единую точку доступа к следующим компонентам: система безопасности, система удаленного доступа, каталог ресурсов, сервер конференций, система новостных лент, система форумов, инструменты поиска информации, система управления контентом.

Портал объединяет действующие системы: систему новостных лент, систему форумов, включает в себя каталог ресурсов и сервер конференций. В портал также входят система удаленного доступа и управления распределенными вычислительными ресурсами (УД и УРВР), система поддержки учебного процесса (СПУП) и инженерный пакет GiD.

### Система удаленного доступа и управления распределенными вычислительными ресурсами

В современной науке для изучения физических явлений широко используется численный эксперимент. Для получения высокой точности результатов необходимо использовать математические модели, как можно более точно описывающие изучаемые процессы. Чтобы провести численный эксперимент за приемлемое время, необходимо использовать высокопроизводительные вычислительные ресурсы, т.е. ресурсы с параллельной архитектурой.

Поэтому создание системы УД и УРВР, являющейся информационной средой для проведения численных экспериментов и хранения результатов, является актуальной и важнейшей задачей повышения эффективности и удобства использования ВПВР в научных и инженерных исследованиях.

Данная система сочетает в себе возможности удаленного доступа с графическим интерфейсом пользователя, пакетной обработки заданий и мониторинга состояния ресурсов. Для обеспечения заданной функциональности в системе реализованы следующие возможности:

- хранение файлов расчетных программ пользователей ИС в виде исходного и/или бинарного кода, файлов начальных данных, результатов и другой информации, необходимой для проведения научных расчетов;
- создание, удаление и управление пользователем своими объектами (файлами, расчетами);
- хранение информации о доступных вычислительных ресурсах;
- отслеживание состояния доступных вычислительных ресурсов;
- передача команд на удаленные вычислительные ресурсы;
- определение очередности запуска программ в случае существования конкуренции за вычислительные ресурсы;
- предоставление пользователю удобного графического интерфейса для работы с системой в удаленном режиме.

Принимая во внимание распределенный характер обработки информации в данной системе, для нее была выбрана многозвенная клиент-серверная архитектура.

Для работы с системой пользователь использует программу-клиент (браузер), которая выполняет функции отображения данных, т.е. обеспечивает интерфейс.

### Виртуальная лаборатория

Компонент «Виртуальная лаборатория» системы УД и УРВР разработан с целью организации виртуального лабораторного практикума с использованием высокопроизводительных вычислительных ресурсов в удаленном режиме в рамках курсов по высокопроизводительным вычислениям.

Создание информационной системы поддержки учебного процесса с возможностью проведения виртуальных практикумов является акту-

альной задачей информационного обеспечения учебно-научного процесса.

«Виртуальная лаборатория» является компонентом системы УД и УРВР, поэтому построена по аналогичной архитектуре и интегрирована в схему БД системы УД и УРВР. «Виртуальная лаборатория» взаимодействует со СПУП, являющейся частью информационно-вычислительного портала КемГУ.

Преподаватель может создавать два типа лабораторных заданий:

1. *Анализ заданной программы.* Данный тип задания предполагает исследование студентом параметров заранее подготовленной преподавателем программы (например, зависимость эффективности программы от количества вычислительных узлов кластера или зависимость точности вычислений от размерности задачи). Для данного типа задания преподаватель обязан посредством web-интерфейса разместить в системе исходный код программы, указать количество параметров, их имя, тип и диапазон принимаемых значений (например, размерность задачи может указываться параметром SIZE типа INT в диапазоне от 100 до 10000), указать архитектуру и операционную систему вычислительного ресурса, а также компилятор, которым можно откомпилировать данный исходный код. Значения входных параметров будут переданы программе в виде аргументов в той последовательности, как они заданы преподавателем для данной работы.

2. *Разработка программы.* Данный тип задания не требует от преподавателя предоставления готового исходного кода. Студент самостоятельно пишет исходный код, размещает его в системе удаленного запуска заданий на вычислительных ресурсах, запускает задание и анализирует результаты.

### Препроцессор и постпроцессор GiD

Пакет GiD представляет собой универсальное адаптивное средство для подготовки начальных данных и визуализации результатов численного моделирования. Основное назначение GiD – препроцессор для подготовки начальных данных для программ-решателей. GiD идеально подходит для генерации информации для численных расчетов: структурированной и неструктурированной сетки, начальных и граничных условий. Пакет GiD разработан в центре CIMNE при Каталонском государственном университете (Испания), в России GiD представляет кафедра ЮНЕСКО по НИТ Кемеровского государственного университета. Сотрудниками кафедры была выполнена русификация пакета.

Интеграция пакета GiD в структуру информационно-вычислительного портала КемГУ позволила расширить сферу применения портала, а также проводить сложные научные и инженерные расчеты в режиме on-line.