Проблемы использования ресурсов ЦКП при решении больших задач науки и техники

С.В. Поляков, М.В. Якобовский
Институт прикладной математики им. М. В. Келдыша РАН

Особенности и проблемы ЦКП

Особенности российских ЦКП:

- разнородный парк кластеров и суперЭВМ
- небольшие в целом вычислительные ресурсы
- «зоопарк» программного обеспечения
- примитивная дисциплина доступа через SSH
- переизбыток пользователей
- отсутствие постоянно действующей учебной базы
- отсутствие удобных интерфейсов анализа расчетных данных

Проблемы российских ЦКП:

- быстрое моральное и физическое старение компьютерной техники
- недостаток современного программного обеспечения по объему, функциональности и номенклатуре
- неразвитость сетевой инфраструктуры, объединяющей отдельные ЦКП
- дефицит квалифицированных кадров ЦКП

МВСЕ

К100

К60

Решение больших задач с помощью ЦКП

Большая вычислительная задача:

- междисциплинарная тематика
- иерархия разнородных математический моделей
- сложный неоднородный алгоритм решения
- значительный объем вычислений
- многократный запуск конкретного расчета
- многовариантность расчетов
- большие и сверхбольшие промежуточные и результирующие распределенные данные
- сложная пред- и постобработка данных
- повышенные требования к системе визуализации

Проблемы при решении большой задачи:

- на какой платформе разрабатывать ПО?
- где производить расчеты?
- где производить подготовку расчетов?
- как контролировать правильность расчетов?
- где и как хранить большие данные?
- где производить постобработку и визуальный анализ больших данных?
- как использовать рассчитанные данные повторно и многократно?
- …

Решение проблемы – развитие сети ЦКП

Цели и преимущества развития:

- объединение и рациональное использование вычислительных ресурсов
- распределенное хранение больших данных
- унификация дисциплин доступа
- развитие коллективных сервисов обработки больших данных
- интеграция научных и коммерческих расчетных проектов

Интеграция сервисов ЦКП в ИПМ им. М.В. Келдыша РАН

Проект: ВЕБ-Лаборатория с доступом к HPC-ресурсам

С.В. Поляков, Д.В. Пузырьков, Н.И. Тарасов,
С.Н. Маркизов, И.О. Толстов, Е.В. Вихров и др.

Цели проекта:

- Реализация коллективной работы над научными и образовательными проектами
- Единый интерфейс доступа через локальную сеть и Интернет
- Использование всех доступных (локальных и внешних) информационных и вычислительных ресурсов
- Расчеты больших задач на доступных суперЭВМ
- Разработка и эксплуатация сервисов обработки больших распределенных данных
- Интерактивное взаимодействие с расчетными приложениями
- Визуализация произвольной сложности в браузере ПК
- Накопление базы знаний по прикладным тематикам
- Обучение пользователей, в том числе студентов ВУЗов

Проект: ВЕБ-Лаборатория с доступом к HPC-ресурсам

Общие требования:

- Базовая концепция SaaS
- Клиент-серверная архитектура
- Безопасное подключение и авторизация
- Минимальные требования на ПК или мобильное устройство пользователя
- Унифицированный интуитивно понятный вэб-интерфейс
- Кросс-платформность
- Средства разработки приложений
- Средства управления и мониторинга расчетными заданиями на суперЭВМ
- Средства обработки и анализа больших распределенных данных

Прототип решения:

WMCS – управление, мониторинг, приложения
Django + Vue.js – вэб-интерфейс, база данных
ParaViewWeb – визуализация

Модель единой точки доступа

1. Три варианта рабочего стола: разветвленное меню, многооконный веб-терминал, полноценный рабочий стол веб-windows.
2. Все доступные пользователю HPC системы в одной базе данных с одним интерфейсом управления.
3. Запуск задач на доступных ресурсах согласно простому расписанию или информации о квоте.
4. Развертывание и отслеживание пользовательских вычислений.
5. Релокация запущенных вычислений с одного ресурса на другой, если квота истекла.
6. Интерактивное взаимодействие с вычислительной программой.

WMCS (Web Monitoring Control System)

1. Управление, каталогизация, разделение доступа, административные функции, связанные с **вычислительными проектами.**

2. Управление реальными **вычислительными задачами** на реальных суперкомпьютерах.

WMCS имеет также возможности создания вычислительных **ПРИЛОЖЕНИЙ** и **СЦЕНАРИЕВ** взаимодействия приложений в рамках конкретных расчетных заданий.

Django и Vue.js (Back-end и front-end)

Django один из Python-фреймворков для создания расширяемых серверных приложений, обеспечивающий:

- взаимодействие с базой данных через Python-классы
- использование всех возможностей Python в рамках серверной логики

Vue.js JavaScript - фреймворк для разработки веб-интерфейсов:

- реактивный подход к программированию
- быстрая разработка и прототипирование
- одностраничный рендеринг

Сервисы веб-лаборатории

Система реализована с помощью Docker-Compose.
Docker-Compose позволяет создавать сложные серверные структуры,
как с внешним так и с внутренним взаимодействием.
Структура взаимодействия компонент веб-лаборатории с пользователем:

Мультисерверная архитектура

Пользовательский сервер

- Хранит данные пользователей
- Обеспечивает аутентификацию пользователей
- Отвечает за пользовательский интерфейс

Ресурсный сервер

- Хранит данные приложений
- Обеспечивает подготовку и запуск приложений (с помощью WMCS) на удаленном ресурсе

Разработка приложений и сценариев

В системе принята модель разработки Приложение-Сценарий
Пользователи из группы **Разработчики**
- Разработка приложений и/или сценариев внутри или вне системы
- Погружение приложений в систему посредством интерфейса GitLab
- Контроль версий
- Автоматизированное хранение и регистрация приложений в системе
- Автоматизированное хранение и регистрация сценариев
- Разработка документации и обучающих материалов

Приложение это репозиторий с кодом, который содержит в себе:
- Паспорт приложения
- Скрипты сборки
- Дополнительные зависимости

В случае, если приложение использует сторонний программный пакет, в репозитории хранится только паспорт.

Сценарий - репозиторий с кодом на языке Python, использующий специальную библиотеку-интерфейс к WMCS для работы с приложениями, зарегистрированными в системе. Фактически содержит вызов(ы) конкретных приложений с параметрами.

Подсистема визуализации на основе ParaViewWeb

WMCS посредством WebSocket и ParaViewWeb позволяет создавать интерактивные страницы, содержащие визуализацию научных данных.
В данном случае серверная часть пакета ParaView готовит данные для визуализации во время расчета на суперкомпьютере.
ParaViewWeb передает эти данные через WebSocket браузеру или перехватывающему данные приложению.

Рабочий стол пользователя

Главная страница

Возможные действия:

- Навигация по сайту
- Переход к странице проекта
- Добавление расчета к проекту
- Создание нового проекта
- Переход к странице расчета
- Редактирование и удаление существующих проектов и расчетов

Рабочий стол пользователя

Добавление проекта

Рабочий стол пользователя

Формирование расчета

Подготовка приложения

Исходный код ?

Сборка приложения ? echo

Запуск приложения ? python hello.py

Входные параметры ?

Имя	Описание	Тип	Формат
q	q	Аргумент	integer

Выходные данные ?

Имя	Тип	Путь
output.txt	file	Введите относительный путь

Принять Отменить

Рабочий стол пользователя

Мониторинг расчета

Возможные действия:

- Подготовка приложения (формирование расчета)
- Запуск приложения
- Изменение входных параметров
- Отслеживание результатов выполнения:
  - Stdout, stderr
  - Просмотр выходных файлов

Рабочий стол пользователя

Пример визуализации результатов расчета

Заключение

1. Рассмотрена проблема решения больших задач с помощью ресурсов ЦКП
2. Общее решение – развитие сетей и сервисов взаимодействия различных ЦКП
3. Приведен пример системы интеграции ресурсов ЦКП в ИПМ им. М.В. Келдыша РАН
4. Основные преимущества и новации системы интеграции:

- Кросс-платформа и облачная архитектура
- Веб-доступ к различным ресурсам
- Интерактивное взаимодействие с запущенными на удаленных системах приложениями
- Распределенная и интерактивная обработка и визуализация больших данных
- Возможность разработки приложений внутри системы

Спасибо за внимание!