

# Веб интерфейс и система управления данными для организации высокоинтенсивных вычислений в гетерогенной компьютерной среде

---

В.А. Аулов, И.С. Тертычный

Национальный исследовательский центр «Курчатовский Институт»

## Введение

Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт» включает в себя большое количество разнородных вычислительных ресурсов, в том числе суперкомпьютер, облачную платформу и т.д. Одна из наших задач заключается в том, чтобы предоставить ученым, работающим в областях науки требующих высокопроизводительных вычислений, единое средство доступа к этим ресурсам. В рамках решения этой задачи был реализован веб интерфейс для системы управления потоком задач, а также система управления данными, соответствующий особенностям ресурсов КИ.

## Обзор системы PanDA

В качестве программной основы для интеграции ресурсов была выбрана Production and Distributed Analysis (PanDA) system [1]. Проект PanDA берет своё начало в 2005 году, когда в рамках проекта ATLAS были развернуты различные системы управления потоками задач, такие как LEXOR[2], CAPONE[3] и DULCINEA[4]. В последующие годы PanDA продемонстрировала своё превосходство в эффективности и к моменту запуска БАК в 2009 году была выбрана в качестве основной и единственной системы для нужд ATLAS. На сегодняшний день PanDA продолжает активно развиваться и используется научными группами по всему миру.

PanDA состоит из ряда компонентов, основными из которых являются следующие:

- Сервер. Центральный компонент PanDA, включающий в себя базу данных и систему распределения задач по очередям, соответствующим гетерогенным вычислительным узлам, в соответствии с характеристиками и приоритетами задач и доступностью узлов.
- Фабрика пилотов. В PanDA используются специальные скрипты под названием «пилоты». Пилоты запускаются на вычислительных узлах и оценивают их характеристики, доступность, готовность к обработке задач и т.д. После оценки

узла пилот запрашивает у сервера задачу из соответствующей очереди, которую запускает на узле. Использование такой схемы повышает надежность системы, ее гибкость и универсальность в работе с разнородными ресурсами. Роль фабрики пилотов – запуск пилотов на вычислительных узлах.

- Клиент. Данный модуль отвечает за формирование описания задачи по унифицированному шаблону, отправку ее на сервер и постановку в очередь системы.
- Система управления данными. Включает в себя файловый каталог, хранящий информацию о файлах и их репликах, и систему перемещения данных, перемещающую реплики между различными хранилищами.

Одна из особенностей системы PanDA заключается в том, что она была разработана в рамках проекта ATLAS с расчетом применения для его же нужд. Из-за этого многие компоненты (фабрика пилотов, стандартная система управления данными DDM/Rucio, система сертификатов и т.д.) сильно связаны с программным обеспечением, разрабатываемым специально под нужды ATLAS, что значительно затрудняет применение PanDA за его пределами. По этой причине нашей командой были доработаны эти компоненты или реализованы аналоги, а также разработаны новые модули, упрощающие процесс интеграции полученной системы с научными проектами различных направлений.

## Веб интерфейс

Стандартный клиент PanDA обладает рядом особенностей, таких как:

- Необходимость комплексной предварительной настройки с указанием параметров сервера и других технических данных, которые могут быть недоступны пользователю.
- Для каждой задачи необходимо создавать описание с указанием параметров задачи и сервера. Многие из этих параметров также могут быть недоступны пользователю, либо являются независимыми от задачи, что ставит под сомнение целесообразность необходимости каждый раз задавать их вручную.
- Жесткая привязка к сертификатам CERN.

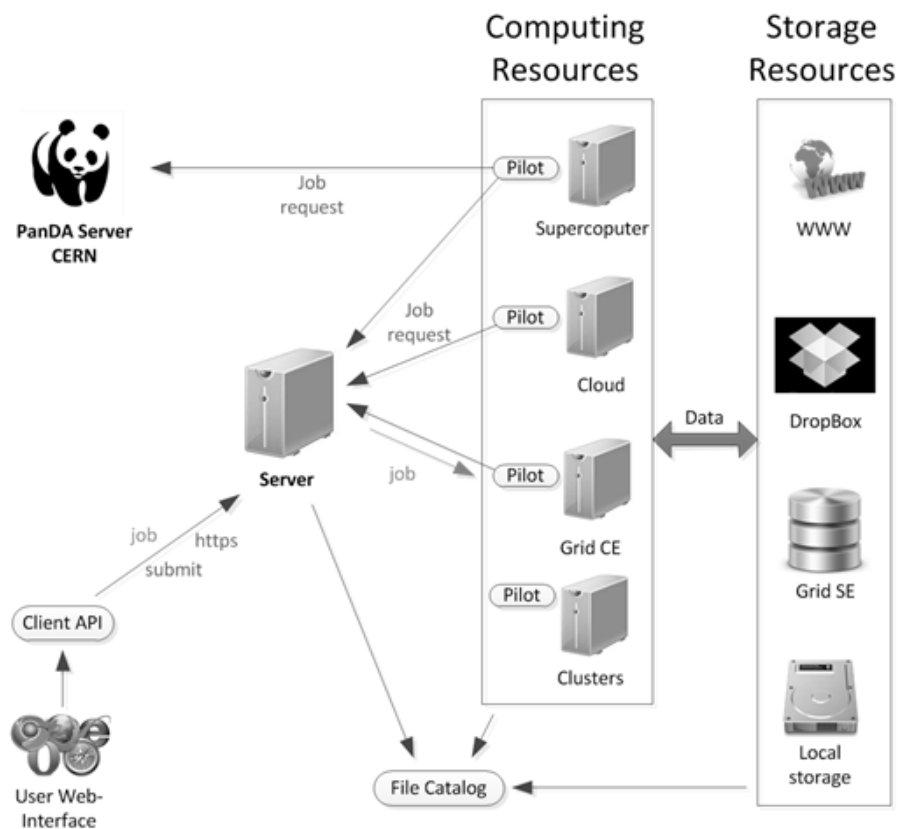
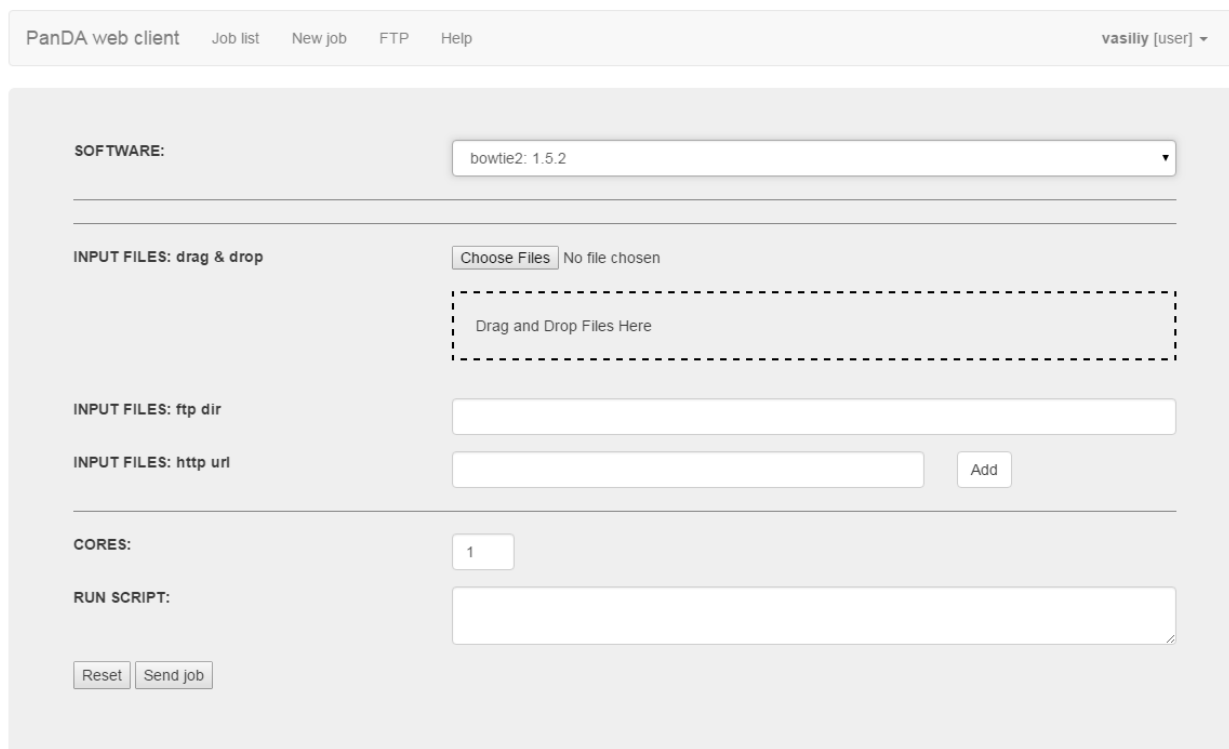


Рисунок 1. Общая схема работы системы

Для облегчения работы пользователей нами был разработан веб интерфейс, являющийся надстройкой над исходным клиентом, позволяющей значительно упростить процесс формирования задачи:

- Настройка общих технических параметров осуществляется автоматически.
- Запуск задач производится с использованием робот-сертификата. Вместо требования наличия сертификата CERN у каждого пользователя осуществляется локальная аутентификация пользователей средствами КИ.
- Конечные пользователи могут формировать задачи, используя графическую оболочку вместо командной строки и текстового редактора. Для работы с научными коллективами, разрабатывающими свои собственные программные средства описания задач, интерфейс включает в себя API.
- Поддержка работы с различными файловыми источниками и хранилищами, такими как FTP, HTTP и различными коммерческими продуктами, которые могут использоваться для загрузки в систему входных данных и/или получения результатов.

- Наличие интуитивно-понятной системы мониторинга, позволяющей пользователям видеть состояние своих задач.



The screenshot shows the PanDA web client interface. At the top, there is a navigation bar with links for 'PanDA web client', 'Job list', 'New job', 'FTP', and 'Help', and a user profile 'vasilii [user]'. The main content area is a form for creating a new job. It includes a 'SOFTWARE:' dropdown menu set to 'bowtie2: 1.5.2'. Below this are three input sections: 'INPUT FILES: drag & drop' with a 'Choose Files' button and a dashed box for file upload; 'INPUT FILES: ftp dir' with an empty text input; and 'INPUT FILES: http url' with an empty text input and an 'Add' button. Further down is a 'CORES:' input field with the value '1', and a 'RUN SCRIPT:' text area. At the bottom left, there are 'Reset' and 'Send job' buttons.

Рисунок 2. Создание новой задачи

На рисунке 2 показан общий вид интерфейса в процессе создания новой задачи. Пользователь выбирает необходимый пакет ПО, который он будет использовать для обработки данных, указывает источник входных файлов и задает команды ПО, которые необходимо выполнить.

## Система управления данными

Стандартная система управления данными DDM/Rucio рассчитана на централизованное использование в проекте ATLAS и развертывание собственного экземпляра за его пределами сопряжено со значительными сложностями, поэтому нами был реализован собственный файловый каталог. В процессе формирования описания задачи файлы с входными данными загружаются в хранилище данных, регистрируются в файловом каталоге, и в дальнейшем перемещаются на рабочие узлы, выделенные для задачи, по запросу пилота.

## Апробация системы и интерфейса

Первичное тестирование работы системы проводилось на программном пакете сборки и выравнивания древних ДНК The PALEOMIX pipeline[5]. На данный момент

были успешно обработаны тестовые данные и идет подготовка к запуску расчетов на реальных данных.

В дальнейшем планируется расширить область применения интерфейса – к примеру, ведутся работы по интеграции с системой CLAVIRE[6] для работы с цепочками задач.

## Заключение

Разработанные веб интерфейс и система управления данными были успешно применены для запуска и выполнения задач по обработке биологических данных. Дальнейшие шаги включают в себя увеличение объема ресурсов КИ, адаптированных для взаимодействия с разработанными модулями, расширение спектра приложений по обработке биологических данных, а также реализацию возможности работы с цепочками задач.

## Литература

1. <https://twiki.cern.ch/twiki/bin/view/PanDA/PanDA>
2. De Salvo, A., Negri, G., Rebatto, D., & Vaccarossa, L. (2004). LEXOR, the LCG-2 Executor for the ATLAS DC2 Production System. *CHEP'04*.
3. Mambelli, M., & al. (2004). ATLAS DATA CHALLENGE PRODUCTION ON GRID3. *CHEP'04*.
4. Sturrock, R., & al. (2004). Performance of the NorduGrid ARC and the Dulcinea Executor in ATLAS Data Challenge 2. *CHEP'04*.
5. <https://github.com/MikkelSchubert/paleomix>
6. Knyazkov, K. V., & al. (2012). CLAVIRE: e-Science infrastructure for data-driven computing. *Journal of Computational Science. Vol. 3. №. 6.*, pp. 504-510.