

ОСОБЕННОСТИ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ ВНЕШНИХ РЕСУРСОВ ДЛЯ РАСЧЕТОВ НА [FLOWVISION](#)

Синицын А.В., к.т.н, Сушко Г.Б.,
ООО «ТЕСИС», г. Москва, Россия

Введение

В настоящее время вычислительная гидродинамика используется для решения большого количества инженерных задач, причем с каждым годом возможности расчетных пакетов и сложность решаемых задач возрастают. Для выполнения расчета за приемлемое время требуются серьезные вычислительные ресурсы, современное оборудование. В идеале такое оборудование должно иметься непосредственно в распоряжении инженера-расчетчика, в его организации. Однако это не всегда возможно – могут существовать финансовые и иные трудности. А в некоторых ситуациях приобретение дорогостоящего оборудования может быть нецелесообразным – например, если речь идет о единичном расчете. В таком случае возникает идея использования внешних вычислительных ресурсов, представляющих собой высокопроизводительные распределенные вычислительные системы.

Функционирование FlowVision на таких ресурсах и работа пользователя FlowVision при подобных расчетах имеют свои особенности. В данной статье приводится обзор подходов к использованию внешних вычислительных ресурсов, проработка которых произведена или ведется командой разработчиков программного комплекса FlowVision.

1. Использование высокопроизводительных вычислительных кластеров

Первый из возможных подходов заключается в использовании высокопроизводительных вычислительных кластеров, имеющихся сейчас во многих высших учебных заведениях. Администрация таких кластеров после выполнения определенных процедур может предоставить возможность их использования для расчетов. В этом случае солвер FlowVision и другие необходимые компоненты устанавливаются на кластере, запуск солвера осуществляется через очередь задач кластера. Солверы запускаются на узлах кластера, к которым, как правило, нет доступа из внешней сети, поэтому непосредственное подключение к ним ПреПостПроцессора или модуля просмотра результатов невозможно. Работа с FlowVision выглядит так: пользователь готовит проект у себя на компьютере с использованием ПреПостПроцессора, затем файлы проекта вручную пересылаются пользователем на кластер, готовится командный файл солвера и солвер ставится в очередь задач кластера. Пользователь мониторит очередь задач, отслеживая момент начала и ход выполнения расчета. По окончании расчета файлы проекта скачиваются пользователем обратно на клиентский компьютер, где возможен просмотр числовых результатов и графиков в ПреПостПроцессоре. При необходимости визуализации результатов, проект должен быть загружен на солвер, расположенный на клиентском компьютере, что не всегда возможно при большом размере проекта по причине ограниченности памяти. Такой порядок работы имеет следующие недостатки:

1. отличается от стандартного (при использовании на локальном компьютере) порядка работы с программным комплексом FlowVision;
2. не позволяет отслеживать ход расчета средствами FlowVision;
3. усложняет или делает невозможной процедуру визуализации результатов расчета.

Для решения возникающих проблем был предложен следующий подход. На головной машине кластера, которая, как правило, доступна извне, устанавливается солвер-агент FlowVision. Запуск на расчет и доступ к файлам проекта осуществляется через него стандартными средствами. Для обеспечения доступа к работающим на узлах кластера и недоступным извне солверам, используется специально разработанный модуль-ретранслятор. Он устанавливается на головной машине кластера и обеспечивает перенаправление трафика внешнего соединения на указанный узел (рис. 1).

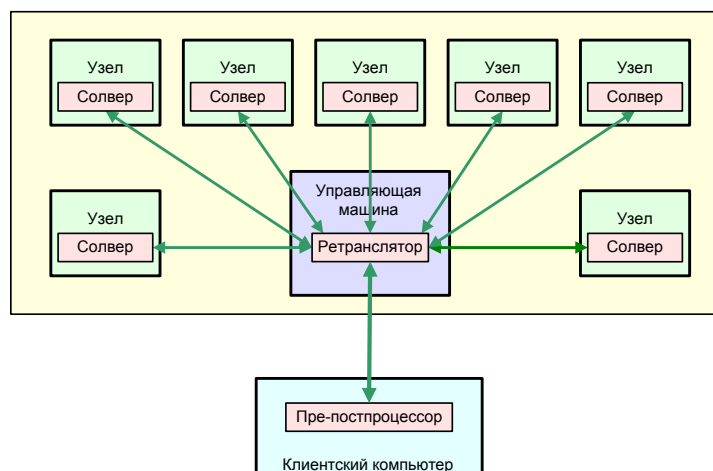


Рис. 1. Использование ретранслятора для доступа к солверам

Параметры ретранслятора указываются в настройках солвер-агента, и он сообщает клиентскому модулю о наличии ретранслятора и настройках соединения с ним. Таким образом, соединение с солвером устанавливается без каких-либо специальных действий со стороны пользователя. При этом работа пользователя с программным пакетом FlowVision выглядит так же, как и в случае локального компьютера, хотя солвер реально работает на одном из узлов вычислительного кластера. Более того, если мы имеем FlowVision на нескольких кластерах плюс на одном или нескольких локальных компьютерах, достаточно указать нужный IP адрес в настройках авторизации ПреПостПроцессора или терминала и работать с выбранным ресурсом. Получается единообразный доступ к различным вычислительным ресурсам независимо от их типа, что само по себе является элементом грид-технологии.

Лицензирование FlowVision в данном случае выполняется с использованием штатного менеджера лицензий, устанавливаемого на головной машине кластера, либо на специально выделенном компьютере, доступном со всех узлов кластера. Однако, при одновременной работе на нескольких кластерах, такой вариант может быть неудобен пользователю, так как потребует от него получения и регистрации лицензий для каждого кластера. В этом случае может быть использована технология «удаленного менеджера лицензий». Имеется в виду менеджер лицензий, установленный в ООО «ТЕСИС» и доступный извне. Пользователь регистрирует на нём одну лицензию, и использует её при работе на любом кластере. Существуют также лицензии специального типа, в которых учитывается время их реального использования и в соответствии с ним выполняется тарификация.

2. Использование коммерческих web-сервисов

Вторым подходом с точки зрения расчетов на внешних ресурсах является использование коммерческих web-сервисов, предоставляющих вычислительные мощности через Интернет. Примером такого сервиса является Amazon Elastic Compute Cloud. Сервис предоставляет в распоряжение пользователя расчетные ресурсы в виде одиночных многоядерных компьютеров (до 8 ядер) или микрокластеров из таких компьютеров (до 16 узлов по 8 ядер) с различными вариациями по количеству оперативной памяти и дисковому пространству. Оплата – почасовая, в зависимости от количества и характеристик запрошенных ресурсов.

Расчетное программное обеспечение устанавливается в виде специально подготовленного образа операционной системы, который может быть выбран пользователем при начале работы с сервисом. Образ операционной системы с предустановленным пакетом FlowVision к настоящему времени подготовлен и доступен для использования.

После загрузки на выделенном ресурсе образа операционной системы мы имеем уже запущенный солвер-агент, к которому можно подключиться из ПреПостПроцессора или терминала, установленного на клиентской машине. Поэтому работа пользователя FlowVision выглядит так же, как и в случае обычного вычислительного кластера, описанном выше – подготовка проекта, запуск на расчет, контроль расчета, анализ результатов выполняются как на локальной машине, только в диалоге авторизации на солвер-агенте указывается IP адрес выделенного ресурса.

Лицензирование в этом случае могло бы быть выполнено путем установки менеджера лицензий в образе операционной системы вместе с остальными модулями FlowVision. Но это не очень удобно, так как лицензия имеет привязку с сетевой карте компьютера, а запуск FlowVision возможен на разных физических компьютерах. Поэтому оптимальным вариантом представляется использование «удаленного менеджера лицензий».

3. Использование грид-сетей

Третьим вариантом внешних ресурсов является использование грид-сетей. Грид-сеть представляет собой «виртуальный суперкомпьютер», состоящий из нескольких реальных суперкомпьютеров (узлов грид-сети), соединенных между собой и рассматриваемых как единый ресурс. Доступ в грид-сеть выполняется через центральный сервер. Пользователь через этот сервер ставит свою задачу на расчет, указывая, какой объем вычислительных ресурсов ему необходим. При этом в общем случае он не знает, на каком конкретно физическом ресурсе будет происходить расчет его задачи. Само расчетное программное обеспечение должно быть заранее предустановлено на всех грид-узлах, либо оно может загружаться при каждом расчете вместе с файлами расчетного проекта.

Нужно отметить, что сама грид-технология в нашей стране сейчас находится еще в стадии освоения и реально работающих грид-сетей очень мало. Одной из них является Национальная нанотехнологическая сеть, создаваемая НИИ ядерной физики МГУ им.М.В.Ломоносова и включающая на данный момент 12 ресурсных центров. Доступ пользователей к работе в грид-сети осуществляется через «виртуальные организации», одну из которых планируется иметь в ООО «ТЕСИС». Предполагается предоставление возможности использования данной грид-сети для расчетов на FlowVision на коммерческой основе.

Особенности использования FlowVision в грид-сети заключаются в том, что в общем случае невозможно организовать доступ извне к запущенным на узлах грид-сети солверам. Поэтому работа пользователя выглядит следующим образом: на клиентской машине готовится проект, затем он загружается в грид-сеть (размещается в определенном подкаталоге дискового пространства) через центральный сервер и запускается на расчет. FlowVision при этом предустановлен на узлах грид-сети и зарегистрирован как один из сервисов. Статус выполнения задачи отслеживается с использованием средств мониторинга грид-сети. По окончании расчета результирующие файлы проекта скачиваются пользователем на клиентский компьютер.

Отдельного решения при этом требуют вопросы лицензирования. Использование стандартного менеджера лицензий здесь не представляется возможным по следующим причинам. Менеджер лицензий по определению должен быть доступен всем солверам. Следовательно, он должен быть установлен либо на каждом GRID-узле, либо на центральном сервере GRID-сети. Второй вариант невозможен по соображениям безопасности. Первый вариант, даже если бы удалось получить разрешение администрации всех GRID-узлов, неудобен для пользователя, так как ему пришлось бы регистрировать свою лицензию на каждом GRID-узле. Вариант использования удаленного менеджера лицензий также не подходит, так как солверы, работающие на GRID-узлах, не имеют доступа во внешнюю сеть.

Поэтому было принято решение отказаться от использования стандартного менеджера лицензий FlowVision при работе в GRID-сети. Каждому пользователю выдается особый сертификат, размещаемый вместе с расчетным проектом. Сертификат идентифицирует пользователя, дает разрешение на работу в GRID-сети и определяет, какие возможности FlowVision могут быть задействованы данным пользователем. Кроме этого, фиксируется машинное время, затраченное на выполнение расчетов, и на основании этого решаются вопросы оплаты.

Выводы

Задача использования внешних ресурсов при выполнении моделирования в программном комплексе FlowVision является актуальной по причине возрастающей сложности и ресурсоемкости расчетов. В настоящее время имеются три основных источника внешних ресурсов:

1. высокопроизводительные вычислительные кластеры высших учебных заведений (университетов);
2. коммерческие web-сервисы;
3. GRID-сети.

Использование FlowVision на таких внешних ресурсах имеет определенную специфику и в ряде случаев требует специальных технических решений, прежде всего, для обеспечения доступа к солверам во время расчета и для организации лицензирования. Работа по адаптации FlowVision к использованию на всех трех типах внешних ресурсов проведена успешно, выполнено тестовое развертывание и расчет тестовых задач. Это позволяет пользователям FlowVision уже сейчас проводить расчеты на доступных им внешних ресурсах и, таким образом, повысить эффективность своей работы.