Всероссийская летняя XXXVII молодежная Школа-конференция по параллельному программированию

г. Новосибирск

09.07.2021

Высокопроизводительные вычисления на базе Desktop Grid

Евгений Ивашко

Центр высокопроизводительной обработки данных
Институт прикладных математических исследований
Карельский научный центр Российской академии наук

Содержание

1. Что такое высокопроизводительные вычисления?

2. Парадигмы высокопроизводительных вычислений

3. Desktop Grid: достоинства и недостатки

4. Desktop Grid: приложения

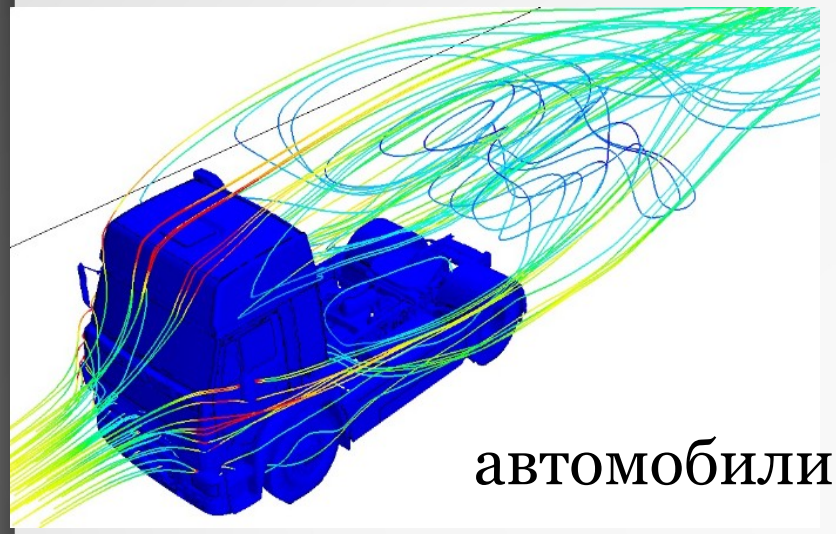
5. Проект SiDock@home (открытые задачи)

6. Архитектура BOINC

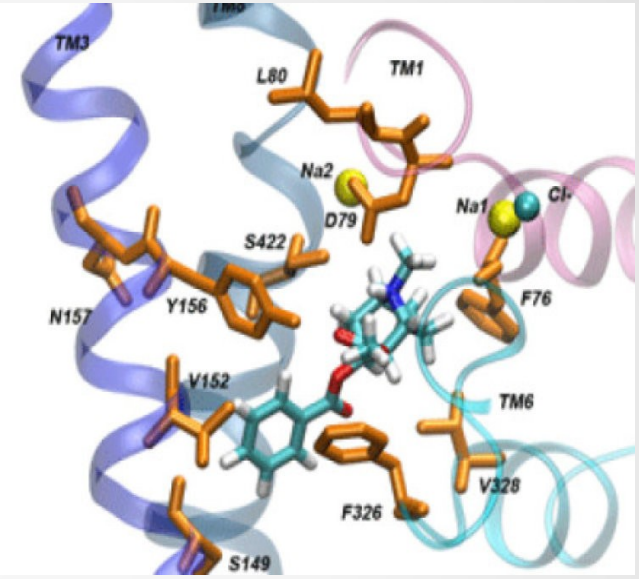
Что такое
высокопроизводительные вычисления?

Что такое высокопроизводительные вычисления

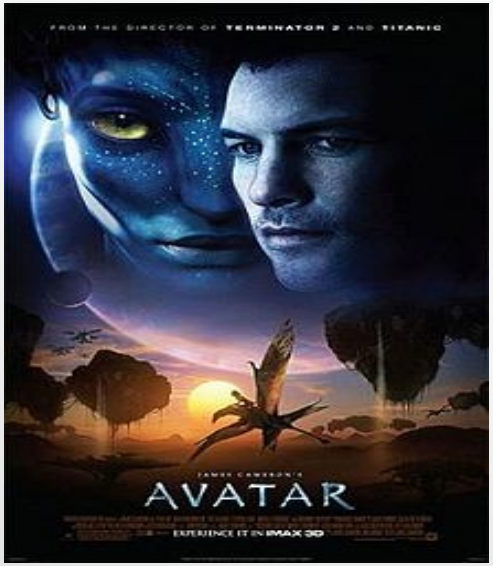
лекарства



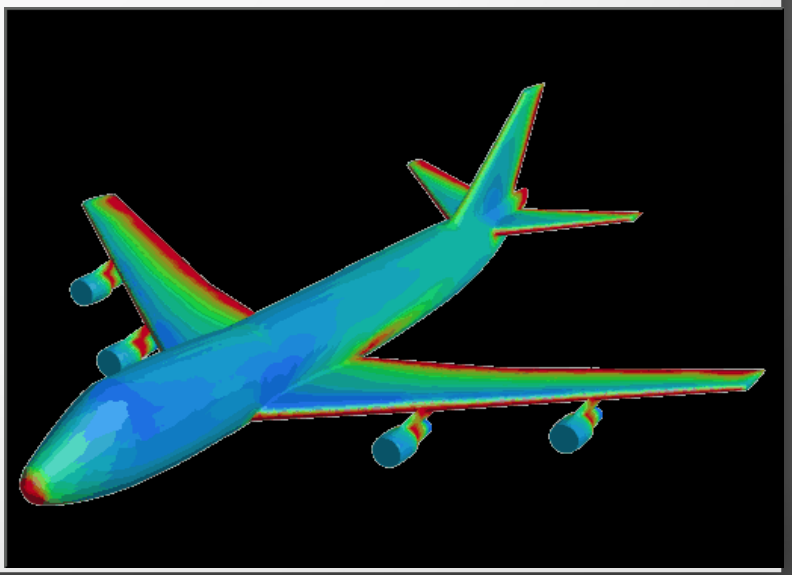
автомобили



фильмы



самолеты



Что такое высокопроизводительные вычисления

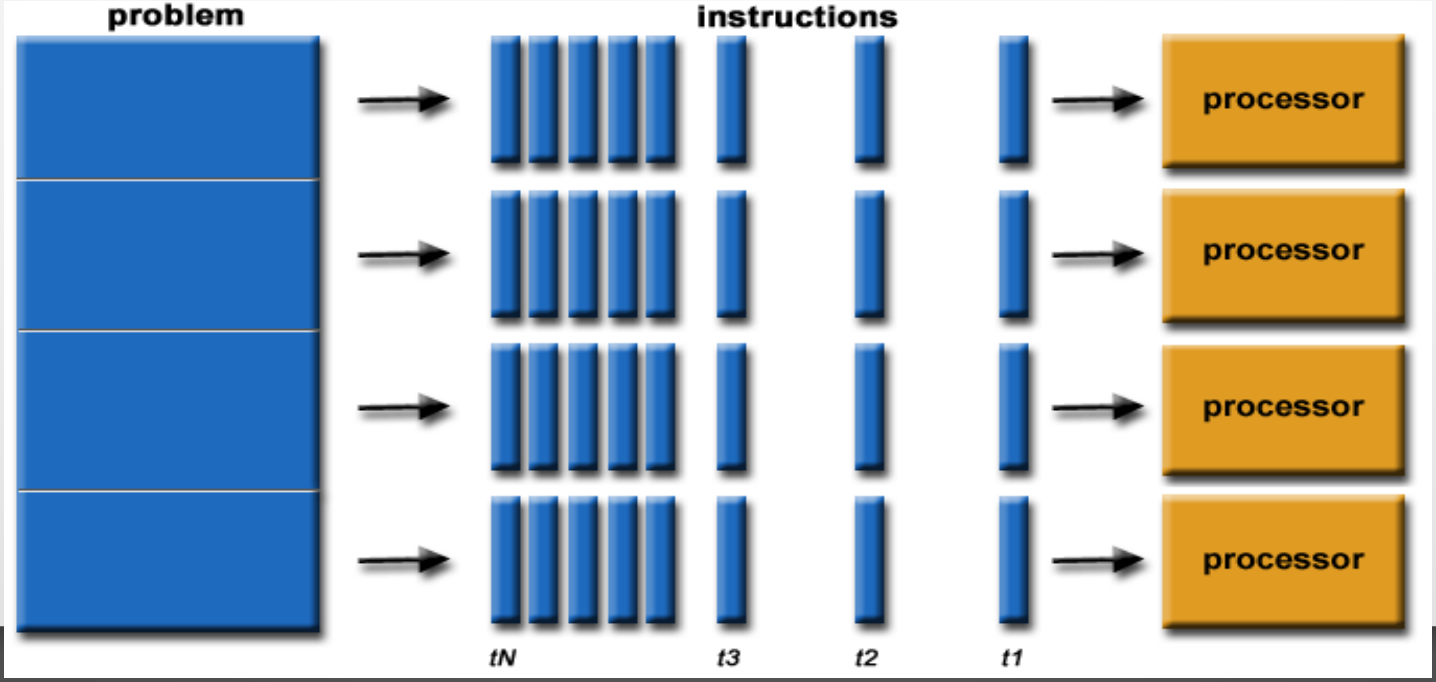
High Performance Computing (HPC) refers to the practice of *aggregating computing power* in a way that delivers *much higher performance* than one could get out of a typical desktop computer in order *to solve large problems in science, engineering, or business*.

High-performance computing is the use of *parallel processing* for running *advanced application programs* efficiently, reliably and quickly.

Параллельные вычисления

В простейшем случае параллельные вычисления – это параллельное использование ресурсов для решения вычислительноёмкой задачи:

- исходная задача разбивается на подзадачи, которые могут быть решены параллельно;
- каждая подзадача разбивается на серию инструкций;
- инструкции разных подзадач выполняются одновременно на разных процессорах;
- в случае необходимости, выполнение подзадачи приостанавливается до получения необходимых данных;
- существует общий механизм управления/координации и пересылки данных.



Парадигмы высокопроизводительных вычислений (решения вычислительноёмких задач)

Паради´гма (греч. «пример, модель, образец») - совокупность идей и понятий, методов и подходов организации вычислений

Парадигмы HPC

Основные парадигмы высокопроизводительных вычислений:

- вычислительный кластер (суперкомпьютер)
- GRID (Грид)
- Desktop Grid

Вычислительный кластер

Вычислительный кластер — это группа вычислителей, объединенных *высокоскоростными каналами связи* и представляющая с точки зрения пользователя единый аппаратный ресурс.

Приложения:

- исследование материалов
- построение полупроводниковых приборов
- генетика
- астрономия
- транспортные задачи
- гидро- и газодинамика
- управляемый термоядерный синтез
- эффективность систем сгорания топлива
- предсказания погоды и климата
- разведка недр
- наука о мировом океане

GRID (Грид)

Грид-вычисления — это форма распределенных вычислений, в которой «виртуальный суперкомпьютер» представлен в виде набора соединенных с помощью сети слабосвязанных компьютеров, работающих вместе для выполнения огромного количества заданий.

Грид — группа географически распределенных вычислителей, объединенных низкоскоростными каналами связи и представляющая с точки зрения пользователя единый аппаратный ресурс.

Грид объединяют мировые вычислительные центры, кластеры, суперкомпьютеры
Самый яркий пример – ***Worldwide Large Hadron Collider Computing Grid,*** *объединяющий более 170 компьютерных центров 42 стран мира.*

Desktop Grid – грид-система, объединяющая *через Интернет неспециализированные вычислители* (персональные компьютеры, ноутбуки, смартфоны) и *использующая их временно свободные вычислительные ресурсы* (idle computing time) для выполнения вычислительноемких расчетов.

Добровольные вычисления (Volunteer computing) — проекты Desktop Grid, в которых вычислительными узлами являются персональные компьютеры добровольцев, объединенные через Интернет.

Мотивация

В мире порядка 2 млрд компьютеров. Потребительские компьютеры имеют пиковую производительность порядка 3 TeraFLOPS (с учетом GPU), что в сумме дает пиковую производительность 6000 ExaFLOPS.

TOP1 Supercomputer Fugaku
0.5 ExaFLOPS

$\sum$(TOP500)=1.7 ExaFLOPS

Около 700 000 устройств активно участвуют в проектах добровольных вычислений — 4 млн. ядер CPU и 560,000 ядер GPU
Производительность - 93 PetaFLOPS.
В среднем, устройство имеет 16.5 CPU GigaFLOPS, 11.4 GB RAM и GPU.

Worldwide Large Hadron Collider Computing Grid
0,9 млн. ядер CPU

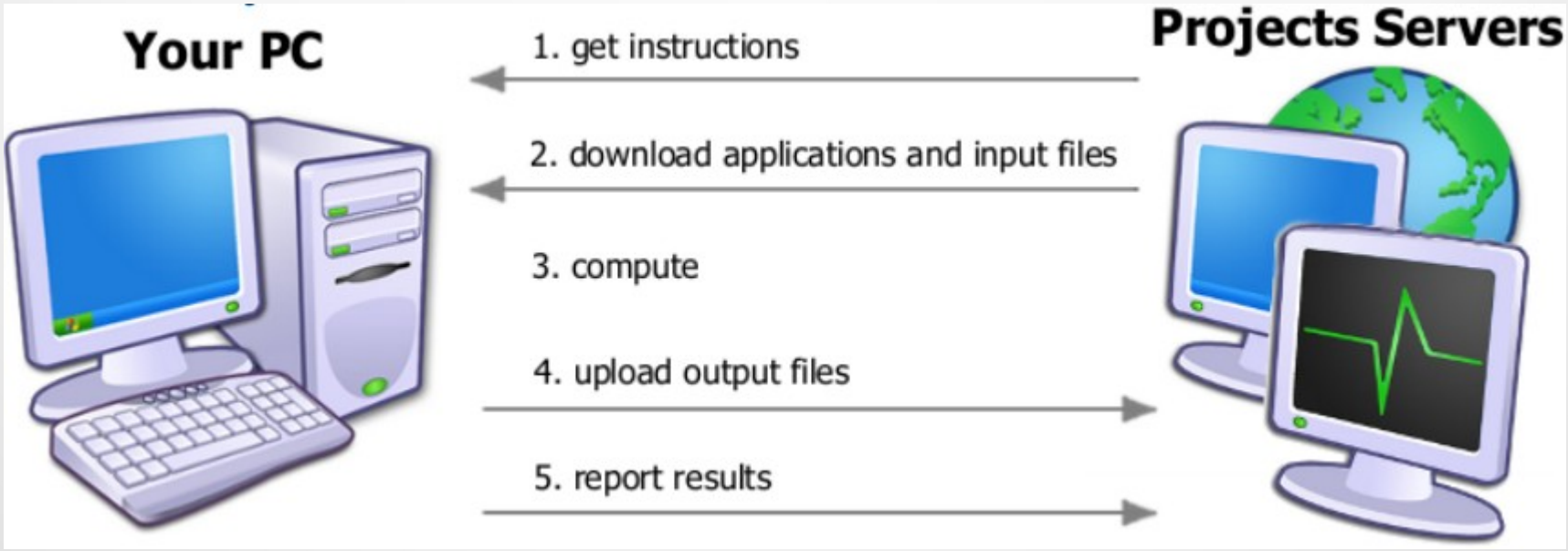
Парадигмы HPC: сравнение

	ПК	Desktop Grid	Cluster	GRID
Источник ресурсов	*ПК*	*анонимные ПК через Интернет*	*высокопроизводительные вычислители*	*вычислительные кластеры*
Выделенные узлы?	*–*	*нет*	*да*	*да*
Объем ресурсов	*малый*	*большой*	*средний*	*большой*
Класс решаемых задач	*не-HPC*	*узкий*	*широкий*	*широкий*
Гетерогенность	*–*	*высокая*	*средняя/ низкая*	*высокая/ средняя*
Доверительность	*высокая*	*низкая*	*высокая*	*высокая*
Сложность	*низкая*	*средняя*	*средняя*	*высокая*
Стоимость	*низкая*	*низкая*	*высокая*	*огромная*
Пользователи	*один пользователь*	*science*	*бизнес/наука*	*крупный бизнес/наука*

хорошо **плохо**

Desktop Grid

Desktop Grid – грид-система, объединяющая через Интернет неспециализированные вычислители (персональные компьютеры, ноутбуки, смартфоны) и использующая их временно свободные вычислительные ресурсы (idle computing time) для выполнения вычислительноемких расчетов.



Desktop Grid: достоинства и недостатки

	Desktop Grid
Источник ресурсов	*анонимные ПК через Интернет*
Выделенные узлы?	*нет*
Объем ресурсов	*большой*
Класс решаемых задач	*узкий*
Гетерогенность	*высокая*
Доверительность	*низкая*
Сложность	*средняя*
Стоимость	*низкая*
Пользователи	*science*

Достоинства:

- высокая пиковая производительность
- низкая стоимость
- простота использования

Недостаток:

- Узкий класс решаемых задач
  - — нет взаимодействия
  - — нет передачи данных

Потенциальная производительность Desktop Grid =
= *10 000•(TOP #1 Supercomputer of the World)!*

Приложения для Desktop Grid

Требования к задаче:

– возможность разбиения на множество независимых подзаданий
– много вычислений, мало обменов данными

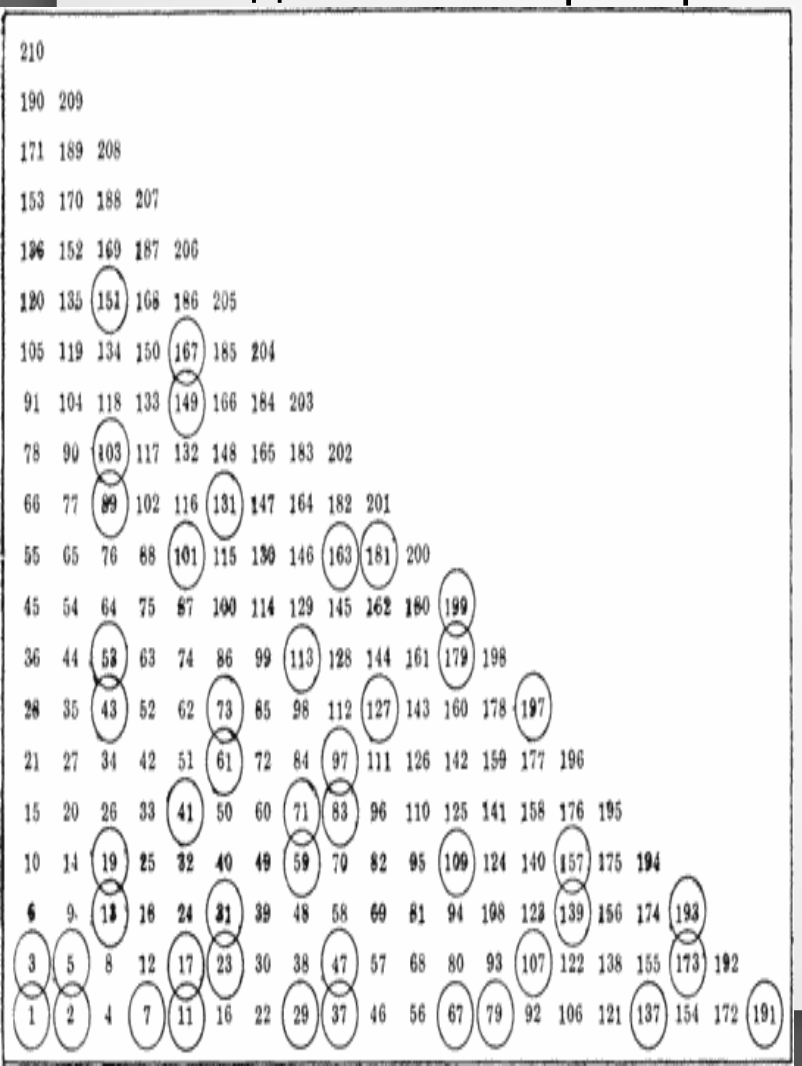
«Идеальные» Грид-приложения:

- переборные задачи;
- проведение моделирования при больших количествах различных наборов исходных данных;
- моделирование методом Монте-Карло

Метод Монте-Карло — общее название группы численных методов, основанных на получении большого числа реализаций стохастического (случайного) процесса, который формируется таким образом, чтобы его вероятностные характеристики совпадали с аналогичными величинами решаемой задачи. Используется для решения задач в различных областях физики, химии, математики, экономики, оптимизации, теории управления и др.

Определение является ли число простым

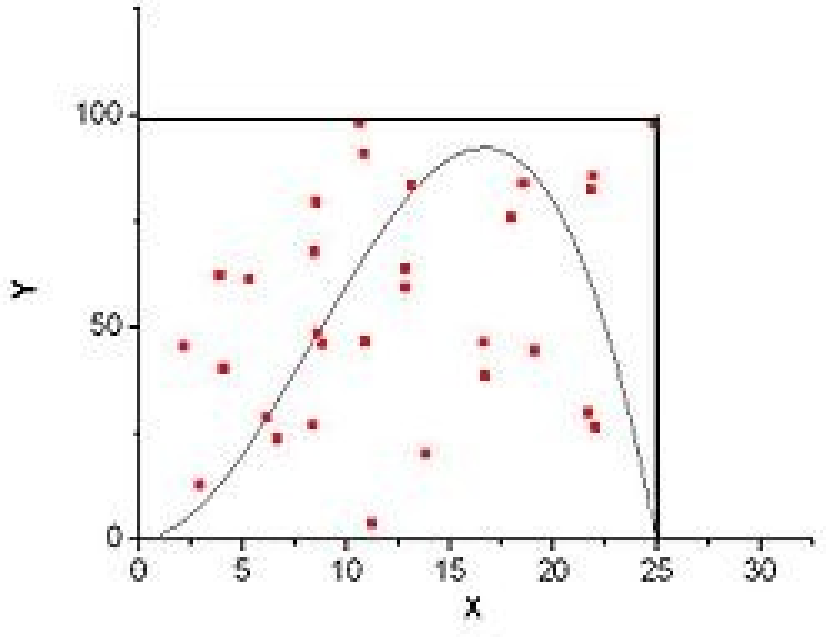
Для проверки является ли число N простым, можно перебрать все числа от 3 до $\sqrt{N}-1$ и проверить делят ли они без остатка исходное число.



Так как результат проверки делимости на конкретное число не зависит от результатов других вычислений, эта работа может быть эффективно проделана с помощью Desktop Grid: каждый вычислительный узел проверяет делимость на конкретное число (диапазон чисел). В случае нахождения делителя, серверу отсылается положительный результат.

Интегрирование методом Монте-Карло

- ограничим функцию параллелепипедом, площадь S_{par} которого легко вычислить;
- «набросаем» в параллелепипед *N* точек (*N* штук), координаты которых будем выбирать случайным образом;
- определим число точек (K штук), которые попадут под график функции;
- площадь области, ограниченной функцией и осями координат: $S = \lim_{N \to \infty} S_{par} \frac{K}{N}$



Для малой размерности производительность метода Монте-Карло интегрирования гораздо ниже, чем производительность детерминированных методов. Однако стохастический метод оказывается более предпочтительным, когда функция задана неявно, в виде сложных неравенств.

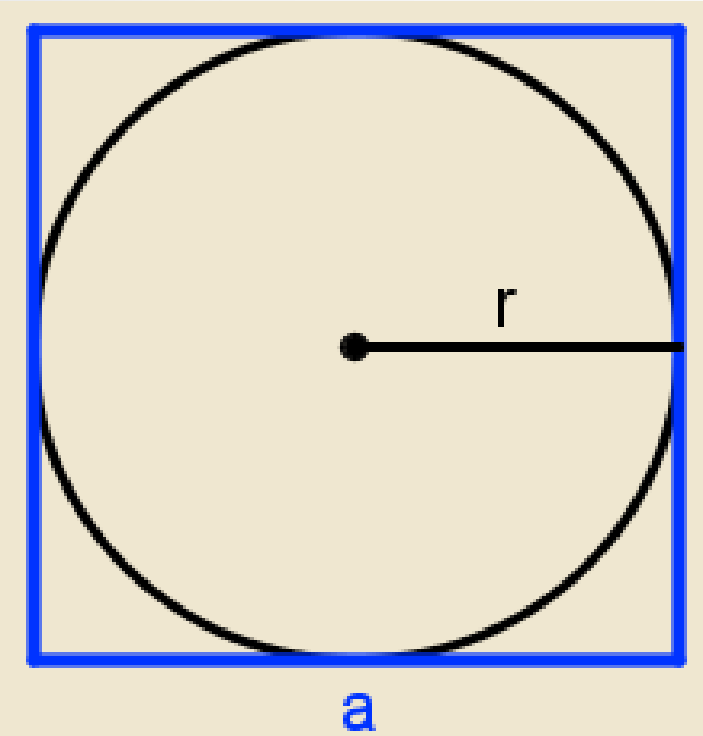
Вычисление числа Пи

Число Пи — отношение длины окружности к длине её диаметра.

Возьмем квадрат со стороной *a* = *2r*, впишем в него круг радиусом *r*. «Набросаем» случайным образом *n* точек внутрь квадрата.

Вероятность *P* того, что точка попадет в круг, равна отношению площадей круга и квадрата:

$$P=\frac{S_{круга}}{S_{квадрата}}=\frac{\pi r^2}{(2r)^2}=\frac{\pi}{4}$$



Пусть в круг попало ровно K точек,

тогда $\lim\limits_{n\to\infty}\frac{4K}{n}=\pi$

При достаточно больших *n* вычисленное значение будет иметь точность до *i*-го знака после запятой, где $i=-\log_{10}\left(\frac{2}{\sqrt{3n}}\right)-1$

$$\pi=3{,}1415926535\ldots$$

Для вычисления числа Пи с точностью до 10 знаков требуется «набросать» 10^{23} точек.

Desktop Grid: приложения

На текущий момент существует 20-30 мировых научных проектов, использующих Desktop Grid.

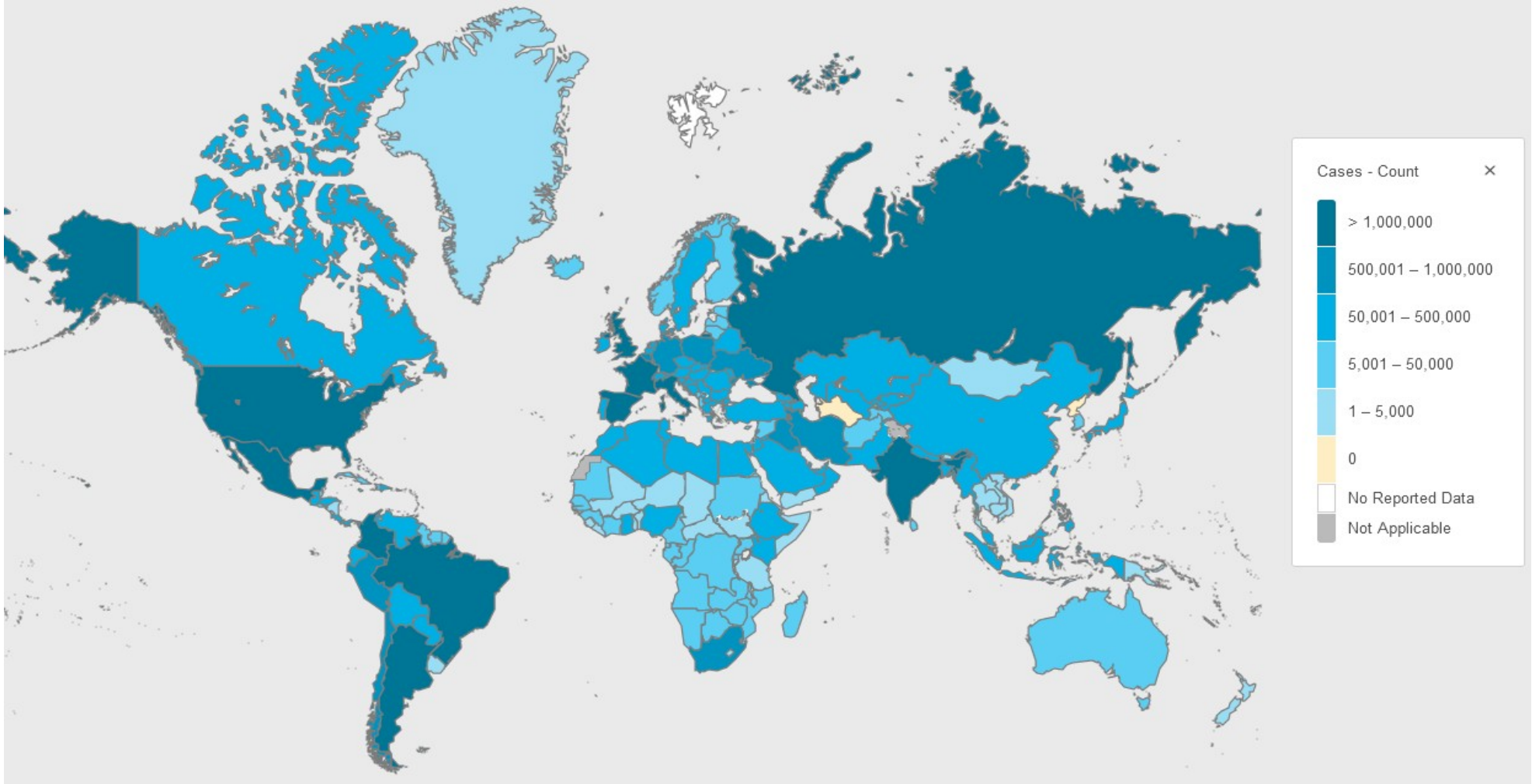
- Астрономия
- Физика
- Химия
- Биология и медицина
- Науки о Земле
- Математика
- другие области

Эти проекты объединяют порядка 350 тысяч активных волонтеров, около 700 тысяч вычислительных узлов (компьютеров).

Применение Desktop Grid для поиска лекарств от COVID-19

Никитина Наталия Николаевна
Институт прикладных математических исследований карельского научного центра РАН, г. Петрозаводск, республика Карелия

Пандемия COVID-19



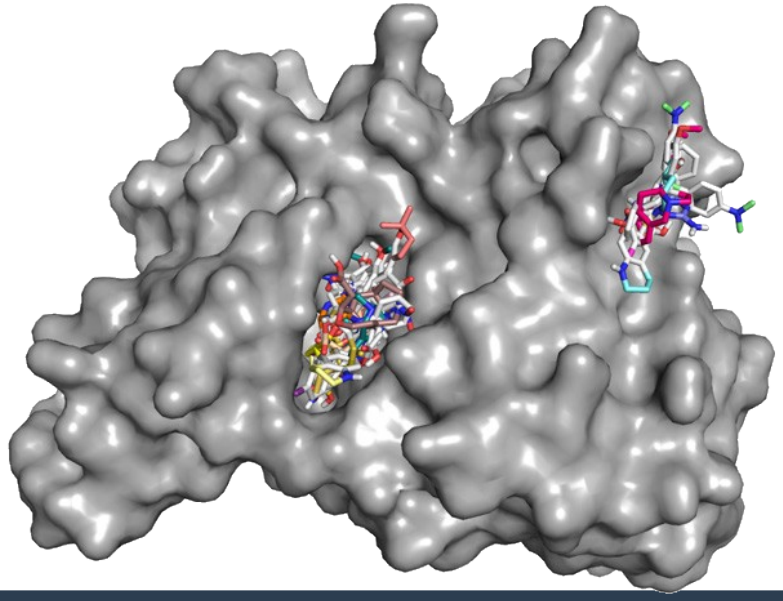
26 ноября 2020 г.: по данным ВОЗ, в мире **60 074 174** подтвержденных случаев COVID-19, в том числе **1 416 292** смертельных. *Источник: https://covid19.who.int/*

Применение Desktop Grid для поиска лекарств от COVID-19

- Задачи понимания и моделирования биологических процессов, происходящих внутри вируса, строения вируса, взаимодействия его белковых комплексов с клетками макроорганизма носителя
- Научные исследования на стыке химии, биологии, биоинформатики, хемоинформатики, математики и других наук
- Технологии высокоточного компьютерного моделирования биологических процессов, их анализа и визуализации
- Применение высокопроизводительных вычислений представляется необходимым для того, чтобы моделировать биологические процессы с высокой точностью за ограниченное время, обрабатывать большие объемы библиотек моделей молекул

Виртуальный скрининг лекарств

- Мишень - биологическая макромолекула, нарушение функции которой приводит к заболеванию.
- Лекарство - химическое соединение, способное взаимодействовать (связываться) со своей мишенью и влиять на протекание заболевания.



Виртуальный скрининг лекарств

Процесс разработки лекарства:

1) Начальный этап разработки

- Идентификация мишени
- Получение множества хитов - молекул, потенциально способных связываться с мишенью и влиять на протекание заболевания
- Поиск среди хитов соединения-лидера, доказанно способного связываться с мишенью и влиять на протекание заболевания
- Оптимизация соединения-лидера с целью повышения активности, уменьшения токсичности и улучшения селективности действия

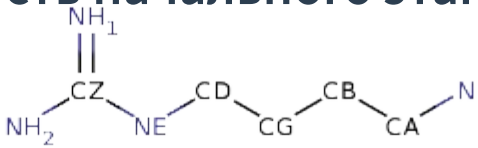
2) Доклиническая разработка

3) Клиническая разработка

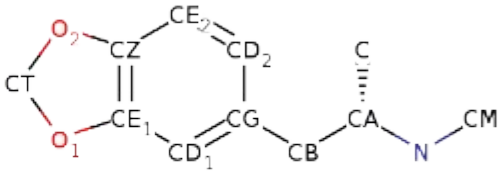
Виртуальный скрининг лекарств

- Виртуальный скрининг - вычислительная процедура, включающая в себя компьютерное моделирование связывания лиганда с мишенью на множестве независимых моделей молекул.
- Результат - список хитов, упорядоченных по предсказанной способности связывания с мишенью.
- Цель - сократить время и стоимость начального этапа разработки лекарства.

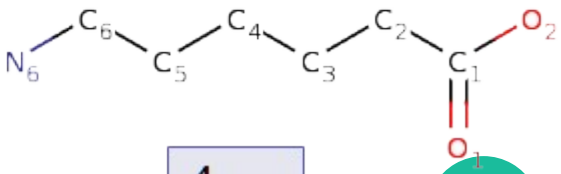
1.



2.



3.



4. ...

Применение Desktop Grid для поиска лекарств от COVID-19

Rosetta@home: (+ Ralph@Home)

- моделирование конечного (свернутого) состояния белков
- точное предсказание структуры шиповидного белка SARS-CoV-2 за несколько недель до его описания с помощью данных криоэлектронной микроскопии
- данные для проектирования *de novo* пикомолярных минибелковых ингибиторов SARS-CoV-2
  (Science, DOI: https://doi.org/10.1126/science.abd9909)
- веб-интерфейс для запуска задач, связанных с поиском лекарств, в открытом доступе
- ~414 Терафлопс (ноябрь 2020 г., BOINCstats)

Применение Desktop Grid для поиска лекарств от COVID-19

Folding@home:

- моделирование процесса свертывания (“фолдинга”) белков
- обнаружена потенциальная область для воздействия лекарства на белке вируса Эбола, который ранее считался “undruggable” *(BioRxiv, DOI: https://doi.org/10.1101/2020.02.09.940510)*
- исследования белков SARS-CoV-2 и виртуальный скрининг
- результаты исследований в открытом доступе
- ~2,4 Экзафлопс (апрель 2020 г., собственная оценка)
- ~120 Петафлопс (ноябрь 2020 г., собственная оценка)

Применение Desktop Grid для поиска лекарств от COVID-19

World Community Grid:

- OpenPandemics: COVID-19 – проект, нацеленный на поиск потенциальных ингибиторов белков SARS-CoV-2 при помощи виртуального скрининга
- ПО для молекулярного докинга AutoDock Vina
- реализован ряд новейших технологий виртуального скрининга
- платформа для быстрого старта научных исследований при других возможных эпидемиях
- 70 соединений для тестирования в лаборатории
- ~820 Терафлопс (ноябрь 2020 г., собственная оценка)

Применение Desktop Grid для поиска лекарств от COVID-19

IberCIVIS:

- COVID-Phym: проект, направленный на виртуальный скрининг существующих лекарств для белков-мишеней SARS-CoV-2
- поиск соединений, способных блокировать механизм репликации коронавируса SARS-CoV-2
- исследование механизмов причин, почему клинические исследования показали лишь частичную эффективность ремдесивира и тенофовира
- результаты молекулярного докинга – основа для последующих разработок лекарственных комплексов на основе тенофовира *(**препринт**, DOI: 10.22541/au.160133726.63184055)*
- ~14 Терафлопс (апрель 2020 г., Wikipedia)

Применение Desktop Grid для поиска лекарств от COVID-19

Corona-AI:

- авторское ПО DreamLab для добровольных вычислений на мобильных устройствах
- поиск лекарств для целого комплекса белков-мишеней методами ИИ
- база данных существующих лекарств и пищевых молекул
- цель - сформулировать рекомендации по лечению и диете
- ~140 000 мобильных устройств

Применение Desktop Grid для поиска лекарств от COVID-19

GENE@HOME

GEne Network Expansion

- проект на основе платформы TN-Grid
- исследования генных регуляторных сетей человека для белков, служащих рецепторами SARS-CoV-2 и других вирусов

Quarantine@Home:

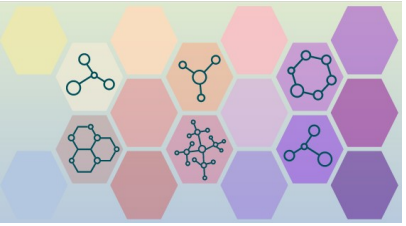
- виртуальный скрининг для ряда белков-мишеней
- молекулярный докинг на основе ПО AutoDock
- авторская платформа добровольных вычислений

Применение Desktop Grid для поиска лекарств от COVID-19

COVID.SI:

- проект гражданской науки по поиску лекарств от COVID-19
- основан в январе 2020 г. (Словения)
- виртуальный скрининг для белков, играющих различные роли в жизненном цикле вируса (59 белков-мишеней)
- авторская платформа добровольных вычислений
- авторская библиотека малых молекул (1 000 000 000)
- ПО для молекулярного докинга RxDock
- 70 активных компьютеров (ноябрь 2020 г.)

Проект COVID.SI: расширение на основе BOINC



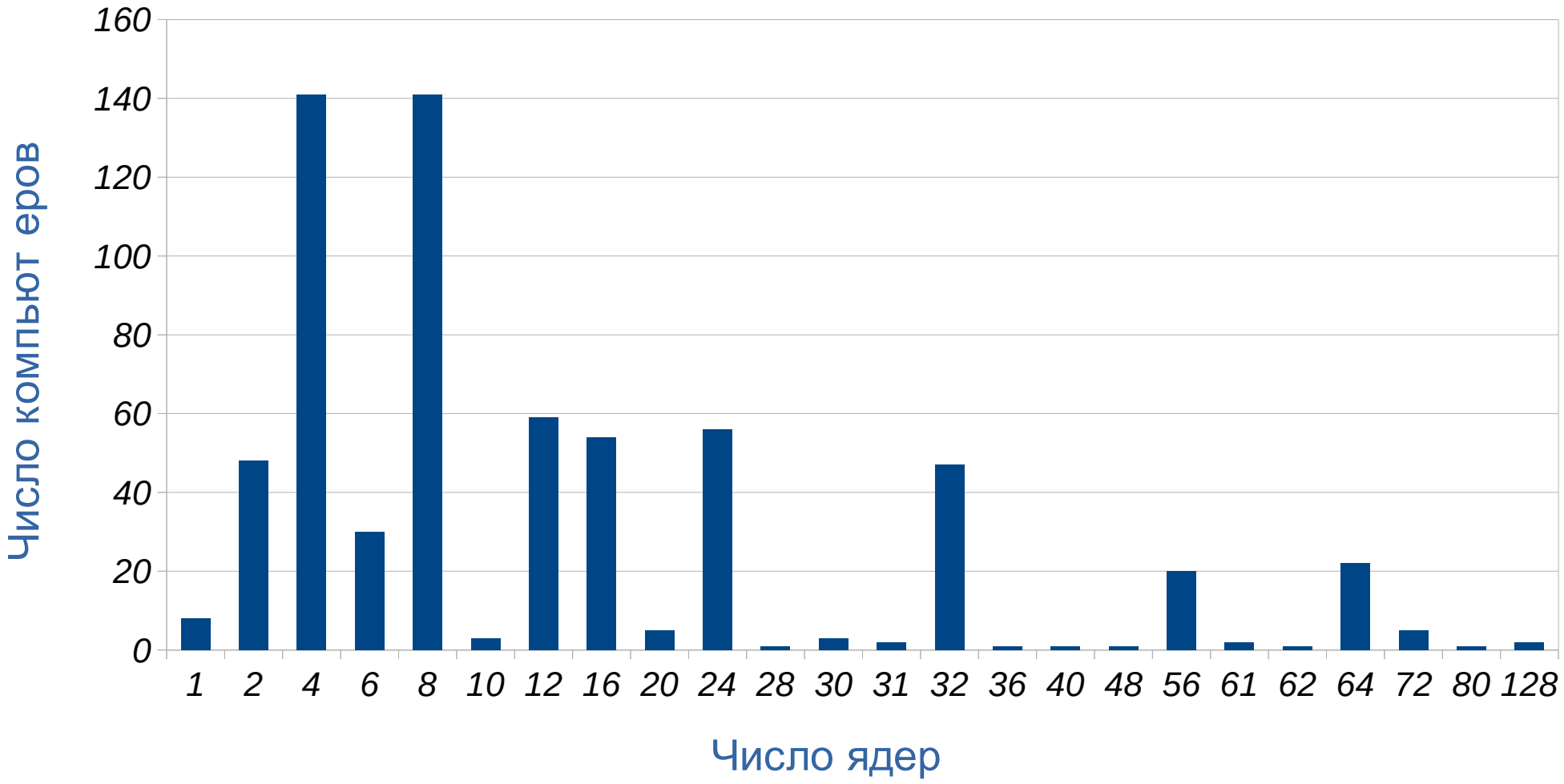
SiDock@home [test]:

- основан в октябре 2020 г. совместно с авторами COVID.SI
- авторы проекта RakeSearch: Наталия Никитина (КарНЦ РАН), Максим Манзюк (Интернет-портал BOINC.Ru)
- популяризация проекта COVID.SI в BOINC-сообществе
- увеличение вычислительных мощностей COVID.SI
- уникальные результаты виртуального скрининга
- ~7,2 Терафлопс (ноябрь 2020 г., оценка BOINC)

SiDock@home [test]: первые результаты

- 26 ноября 2020 г.: проведен виртуальный скрининг 33% библиотеки лигандов для первого белка
- приложение RxDock адаптировано для выполнения в среде BOINC (при помощи BOINC wrapper)
- приложения для Windows 64bit, Linux 64bit, MacOS 64bit
- 7.2 Терафлопс (по оценке платформы BOINC)
- 240 зарегистрированных участников (203 активных)
- 750 зарегистрированных компьютеров (646 активных)

SiDock@home [test]: вычислительные ресурсы



SiDock@home [test]: вычислительные ресурсы

https://fightcovid.boinc.ru/sidocktest/

Задачи:

1. Разработка и реализация экранной заставки для проекта добровольных вычислений SiDock@home

Задача: разработать и реализовать экранную заставку для проекта по поиску лекарств, анимированную и отображающую суть и текущий прогресс вычислений программы с открытым исходным кодом, для платформ Windows, Linux, MacOS.

2. Разработка и реализация графического интерфейса для программы молекулярного докинга CmDock

Задача: разработать и реализовать графический интерфейс для программы молекулярного докинга с открытым исходным кодом, в том числе на основе существующих утилит с открытым исходным кодом.

3. Разработка и реализация Android-версии приложения для проекта добровольных вычислений SiDock@home

Задача: разработать и реализовать версию приложения молекулярного докинга с открытым исходным кодом для платформы Android на базе программы для добровольных вычислений BOINC.

4. Разработка и реализация пакета обновлений для программы молекулярного докинга CmDock

Задача: разработать и реализовать пакет обновлений для программы молекулярного докинга CmDock с открытым исходным кодом. (несколько мелких задач)

5. Разработка и реализация подсистемы назначения заданий в BOINC на основе искусственного интеллекта и машинного обучения

Задача: разработать и реализовать подсистему назначения заданий в BOINC на основе искусственного интеллекта и машинного обучения на основе истории использования устройства.

Никитина Наталия Николаевна,
научный сотрудник Карельского научного центра РАН, e-mail nikitina@krc.karelia.ru

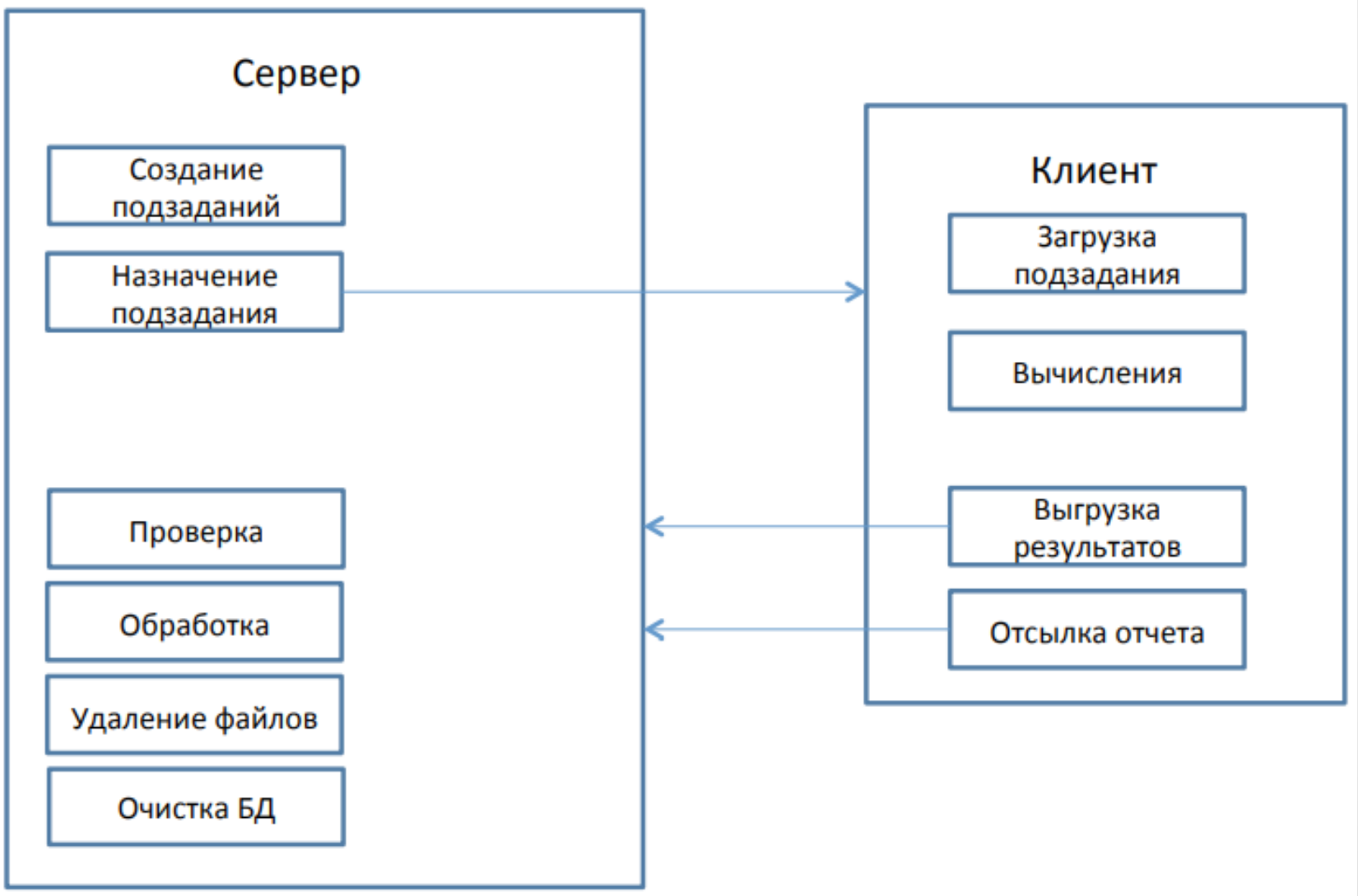
ПО управления Desktop Grid

BOINC — The Berkeley Open Infrastructure for Network Computing (BOINC, University of California, Berkeley) — свободно распространяемое ПО для организации Desktop Grid (Volunteer computing). Изначально разработано для проекта SETI@home, затем — стало общей платформой для Desktop Grid.

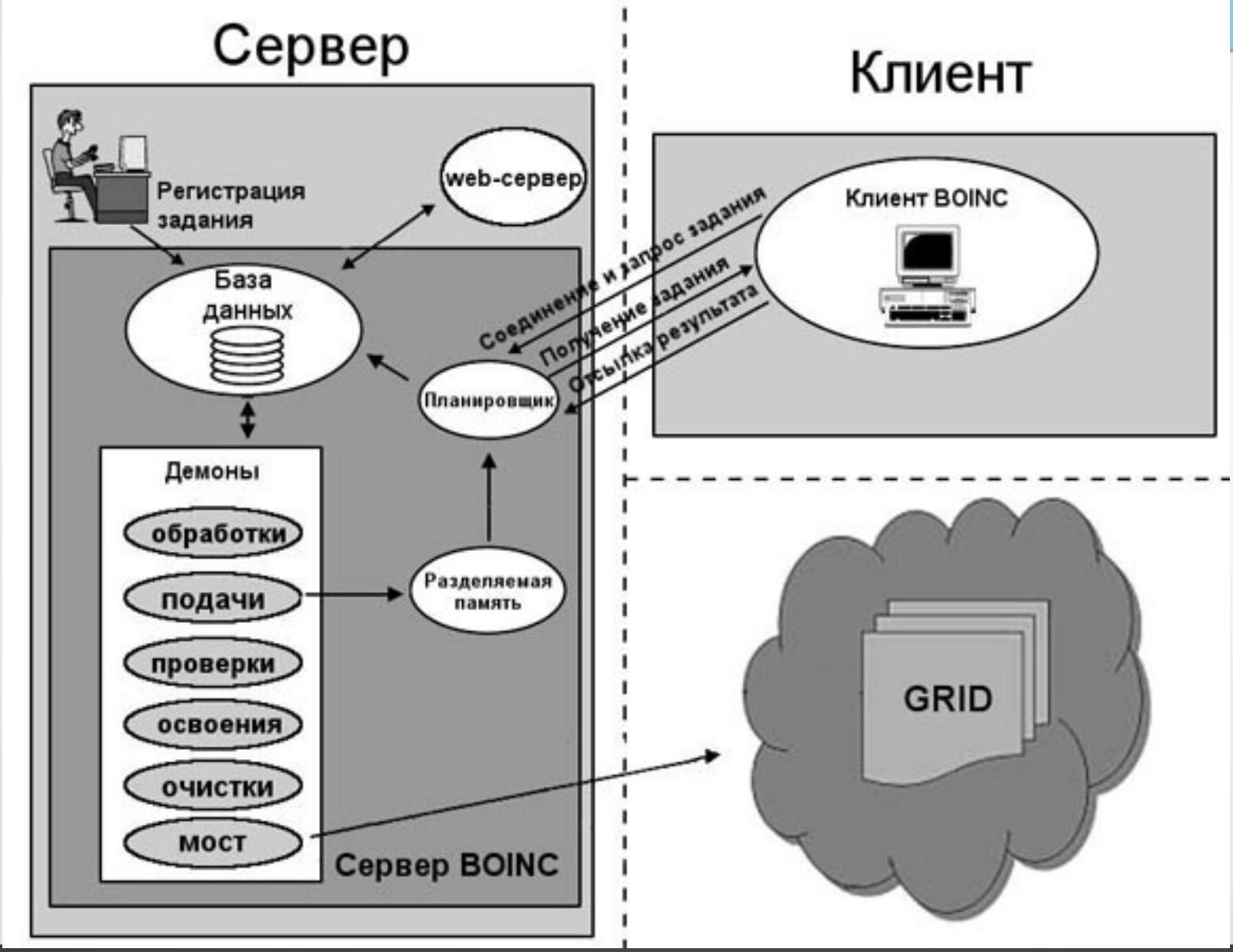
HTCondor — свободно распространяемое ПО для организации Desktop Grid уровня организации. Разработан в University of Wisconsin–Madison, начиная с 1988 г..

Другие — **XtremeWeb**, **Entropia**, **Alchemi**, **SZTAKI Desktop Grid**, др...

Жизненный цикл задания



Архитектура BOINC



Службы BOINC - 1

Служба обработки состояния подзадач (Transitioner)
Предназначена для обработки состояния вычислительных подзадач и результатов их решения; проверяет текущее состояние подзадачи в базе данных и обновляет соответствующие поля, когда подзадача готова перейти в новое состояние.

Служба подачи (Feeder)
Выполняет вспомогательную функцию – загружает необработанные подзадачи (в терминах BOINC — подзадачи, для которых еще не получен канонический результат) из базы данных в сегмент разделяемой памяти.
Эта предварительная работа выполняется для повышения производительности системы BOINC в целом с помощью ограничения числа запросов к базе данных.

Служба проверки результатов (Validator)
Назначение службы – организация проверки полученных результатов.
Служба обработки проверяет текущее состояние подзадачи в базе данных и обновляет соответствующие поля, когда подзадача готова перейти в новое состояние; также выполняет проверку на правдоподобность результатов.

Службы BOINC - 2

Служба освоения (Assimilator)
Периодически проверяет наличие завершенных подзаданий.
Администратор проекта должен создать функцию, которая определяет, что необходимо сделать с проверенными результатами. Например, их можно архивировать и отсылать по электронной почте или автоматически запускать пост-обработку данных, выделяя интересующие фрагменты и записывая их на устройство хранения.
Подзадача помечается как завершенная только после прохождения через службу освоения.

Служба удаления файлов (File deleter)
Служба удаления файлов – это «сборщик мусора» проекта BOINC, она просто проверяет наличие завершенных и освоенных подзадач, а при нахождении таковых очищает входные и выходные файлы сервера, связанные с этими подзадачами.

Службы BOINC - 3

Планировщик (Scheduler)
Планировщик – это CGI-программа, которая запускается, когда к серверу проекта подсоединяется клиент и запрашивает порцию заданий.
Вместо запроса к БД планировщик получает задания из сегмента разделяемой памяти, в который задания загружает служба подачи.
Планировщик имеет возможности по самостоятельному назначению подзадач клиентам, так как не все клиенты имеют одинаковые настройки и компьютеры.

Мост (Bridge)
Служба, обеспечивающая связь и совместную работу над проектом инфраструктуры BOINC и стандартной GRID
Приложения BOINC специально разрабатываются под архитектуру BOINC. Они вызывают функции BOINC через интерфейсы, реализованные в клиенте и выполняющие такую специфическую работу как, например, разрешение имен файлов. Как следствие, подзадачи проекта BOINC не могут быть напрямую запущены для расчета на инфраструктуре Grid.
С другой стороны, Grid не может, подобно клиенту BOINC, без посредника соединиться с планировщиком проекта и запросить подзадачи для расчета.

Возможности разработки приложений для BOINC:

C++ API

BOINC native API — полноценный API, позволяющий контролировать ход вычислений, сохранение состояния, общение с сервером.

DC-API — упрощенный API, требует минимальных модификаций исходного расчетного приложения.

Wrappers — специальные «оболочки», не требующие модификации исходного расчетного приложения

BOINC Wrapper

GenWrapper

Virtualized Wrappers — виртуализованные «оболочки», предоставляющие единую среду исполнения, не зависящую от программно-аппаратного обеспечения компьютера.

BOINC VBox Wrapper

GBAC

Содержание

1. Что такое высокопроизводительные вычисления?

2. Парадигмы высокопроизводительных вычислений

3. Desktop Grid: достоинства и недостатки

4. Desktop Grid: приложения

5. Проект SiDock@home (открытые задачи)

6. Архитектура BOINC

Спасибо за внимание!

Евгений Ивашко
ivashko@krc.karelia.ru

Центр высокопроизводительной обработки данных
Институт прикладных математических исследований
Карельский научный центр Российской академии наук