

# Сравнительный анализ систем управления потоками работ для решения вычислительных задач в распределенной гетерогенной системе

Студент: Муратов Максим Александрович, магистрант 1 курса ММФ НГУ  
Научный руководитель: Городничев Максим Александрович, н. с.  
ИВМиМГ СО РАН

# Актуальность

В научных исследованиях активно используются ресурсоемкие вычисления для решения различных задач. Эти вычисления как правило проводятся на HPC-системах, например, кластерных системах.

Как правило у исследователей имеется доступ к нескольким HPC-системам, которые в каждый момент времени могут иметь разную степень доступа, а также отличаться по программному и аппаратному обеспечению. Выбор наиболее подходящей в моменте HPC-системы является актуальной проблемой оптимизации, которую предполагается автоматизировать.

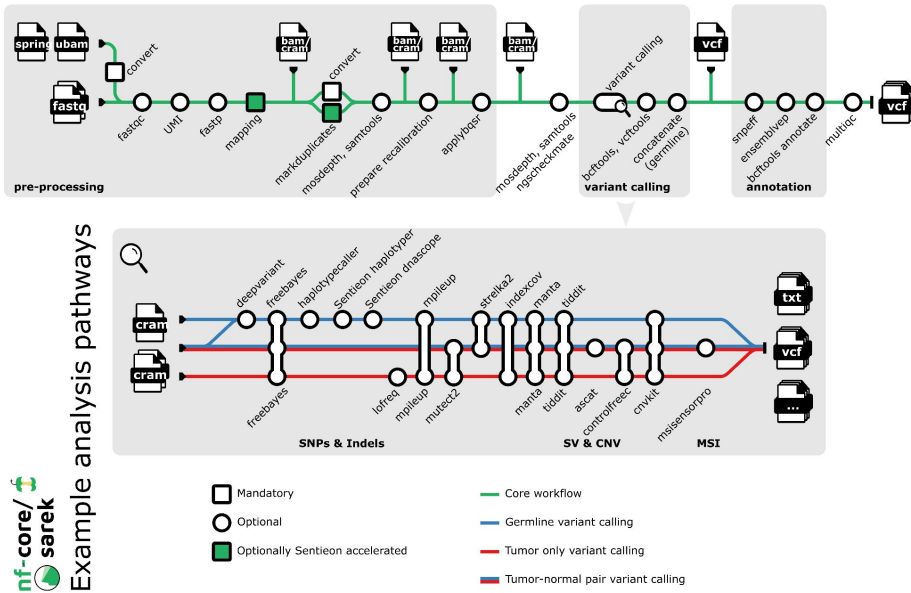
Использование подходящей системы управления рабочими потоками может упростить решение данной задачи.

# Потоки работ и системы управления рабочими потоками

Как правило такие вычисления являются не одной операцией, а их последовательностью, которую можно описать при помощи ациклического ориентированного графа (Directed Acyclic Graph, DAG). Данная последовательность операций называется потоком работ (workflow).

Системы, предназначенные для обработки потоков работ, называются системами управления рабочими потоками (Workflow Management System, WMS). Здесь они также будут называться просто *системами*. Многие из таких систем поддерживают работу с HPC-системами.

# Проблема большого количества систем



На текущий момент существует более 300 систем, каждая из которых обладает своими характеристиками<sup>1</sup>. Такое разнообразие усложняет выбор подходящей системы, потому ранее был проведен предварительный анализ систем.

Рисунок 1 – пример потока работ<sup>2</sup>

1. <https://s.apache.org/existing-workflow-systems>
2. <https://github.com/nf-core/sarek>

# Проделанная ранее работа

Ранее был проведен теоретический и практический анализ следующих популярных систем управления рабочими потоками:

- Apache Airflow
- cwltool
- Dask
- FireWorks
- Galaxy
- Luigi
- Nextflow
- Parsl
- Pegasus
- Snakemake

# Цели и задачи на ЛШ-2025

Цель – выбрать систему, которая лучше всего подходит для оркестрации задач для их запуска на разных кластерных системах.

Задачи:

- Настройка конфигурационных файлов систем для работы с кластерами
- Запуск тестовых потоков работ на кластере без систем для определения времени работы без накладных расходов
- Запуск тестовых последовательностей работ на кластере посредством ранее рассмотренных систем как без контейнеров, так и на контейнерах Docker и/или Apptainer/Singularity
- Оценка накладных расходов (overhead) систем при работе с кластерами
- Выбор наиболее подходящей для дальнейшей работы системы.

# Основной критерий

Основной критерий, по которому оценивались системы – **“поддержка работы в распределённой гетерогенной среде”**. Он состоит из двух частей:

- Распределённая система – части системы могут быть расположены географически в разных местах
- Гетерогенная система – система состоит из различных частей. В данном контексте компонентами могут быть различные типы вычислительных сред: кластеры с разными планировщиками задач, облака и тд.

# Анализ ранее рассмотренных систем

WMS	Поддержка работы в распределённой среде	Поддержка работы в гетерогенной среде	Балансировка нагрузки
cwltool	Нет	Нет	Нет
Apache Airflow	Да	Да	Нет
Dask	Да	Да	Нет
FireWorks	Нет	Да	Ограниченная
Galaxy	Нет	Нет	Нет
Luigi	Нет	Нет	Нет
Nextflow	Нет	Да	Нет
Parsl	Да	Да	Ограниченная
Pegasus	Да	Нет	Нет
Snakemake	Нет	Да	Нет

# LEXIS

LEXIS (Large-scale EXecution for Industry & Society) — это крупный европейский исследовательский проект в рамках программы Horizon 2020. Его основная цель — создать единую платформу, которая объединяет ресурсы нескольких суперкомпьютерных центров (HPC), облачные технологии и инструменты для анализа больших данных (Big Data).

<https://lexis-project.eu/web/lexis-platform/>

# Компоненты LEXIS

Наименование роли	Компонент
Сервис управления данными	<b>LEXIS Data Management / DDI (Distributed Data Infrastructure).</b>
Сервис управления пользователями	LEXIS AAI (Authentication and Authorization Infrastructure)
Сервис управления вычислениями	LEXIS Orchestrator. Поддерживает также динамическую балансировку
Сервис визуализации данных	LEXIS Portal
Сервис приложений	LEXIS Portal

# Результаты

Во время участия в Школе:

- Ранее изученные системы (Apache Airflow, Nextflow, FireWorks и другие) были изучены на предмет поддержки работы в распределенных гетерогенных системах. Было обнаружено, что они либо не поддерживают это совсем, либо поддерживают очень ограниченно
- Был рассмотрена платформа LEXIS, которая не только соответствует данному критерию, но и имеет динамическую балансировку и другие сервисы, которые необходимы для основного проекта, практически полностью закрывая потребности проекта

# Дальнейшие планы

- Изучение компонентов LEXIS, в том числе балансировщика
- Развертка и запуск LEXIS, тестирование работы с доступной кластерной системой