

Опыт использования Globus Toolkit при организации распределенных вычислений на ресурсах междисциплинарного сегмента RGrid

А.В. Жучков, Н.В. Твердохлебов, А.К. Яновский

Докладчик: Яновский Алексей Карлович

Институт Химической Физики им. Н.Н.Семенова РАН,
119991 г. Москва, ул. Косыгина д.4, 117-82-12, alexey@rgrid.ru

Область интересов

Расчеты быстротекущих пространственно-распределенных процессов, например:

- ✓ вычислительное моделирование взрывного горения в замкнутых объемах
- ✓ исследование стохастических моделей формирования загрязняющих соединений при горении в открытых и закрытых объемах

Химия полимеров

- ✓ Моделирование и расчеты физико-химических свойств полимеров

Медико-биологические задачи, например:

- ✓ алгоритм сравнительного анализа нуклеотидных и белковых последовательностей
- ✓ моделирование радиационного повреждения ДНК

Мультидисциплинарность

```
graph TD; A[Мультидисциплинарность] --> B[Поддержка различных виртуальных организаций]; A --> C[Обеспечения разграничения полномочий]; A --> D[Необходимость разработки «технологии гридификации» актуальных задач]; A --> E[Доступ к федеративным базам данных]; A --> F[Невозможность обеспечить эффективность для всех классов задач];
```

✓ Поддержка различных виртуальных организаций

✓ Обеспечения разграничения полномочий

Необходимость ранообразных интерфейсов для «прозрачного» доступа к ресурсам

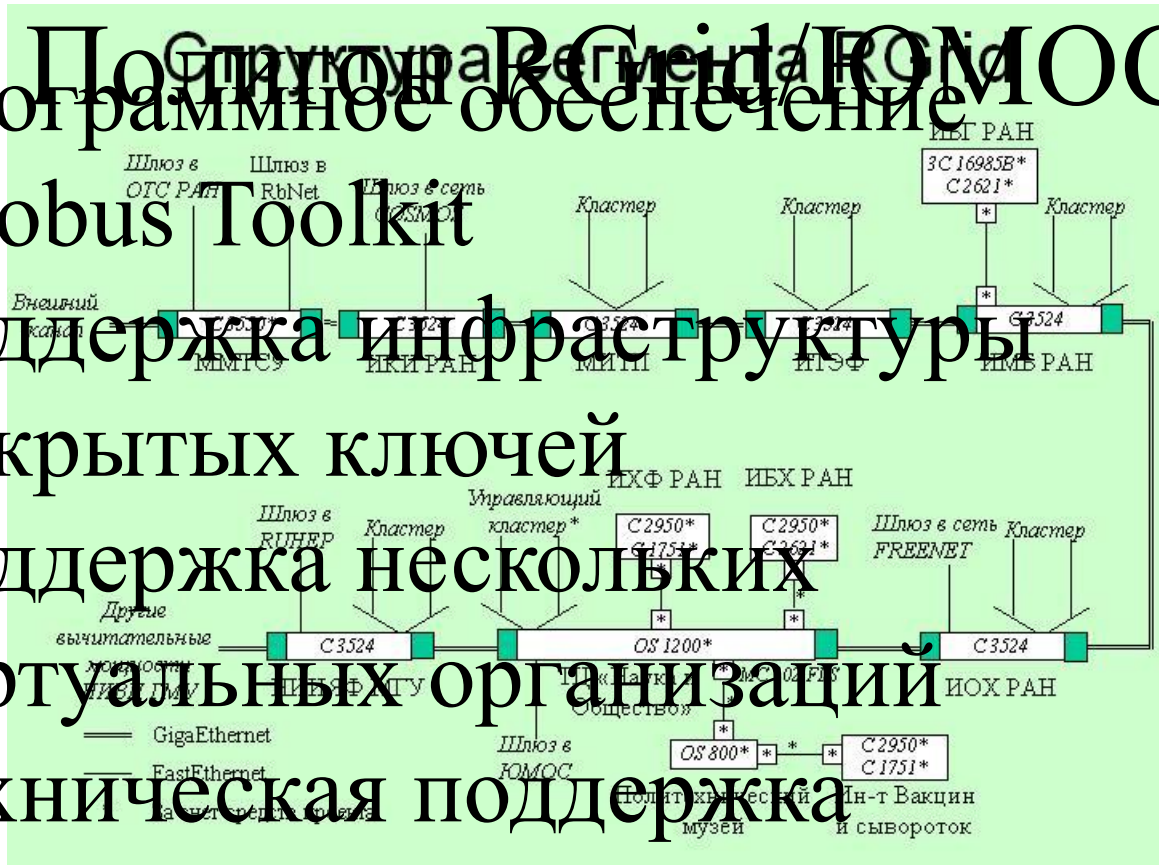
Необходимость разработки «технологии гридификации» актуальных задач

Доступ к федеративным базам данных

Невозможность обеспечить эффективность для всех классов задач

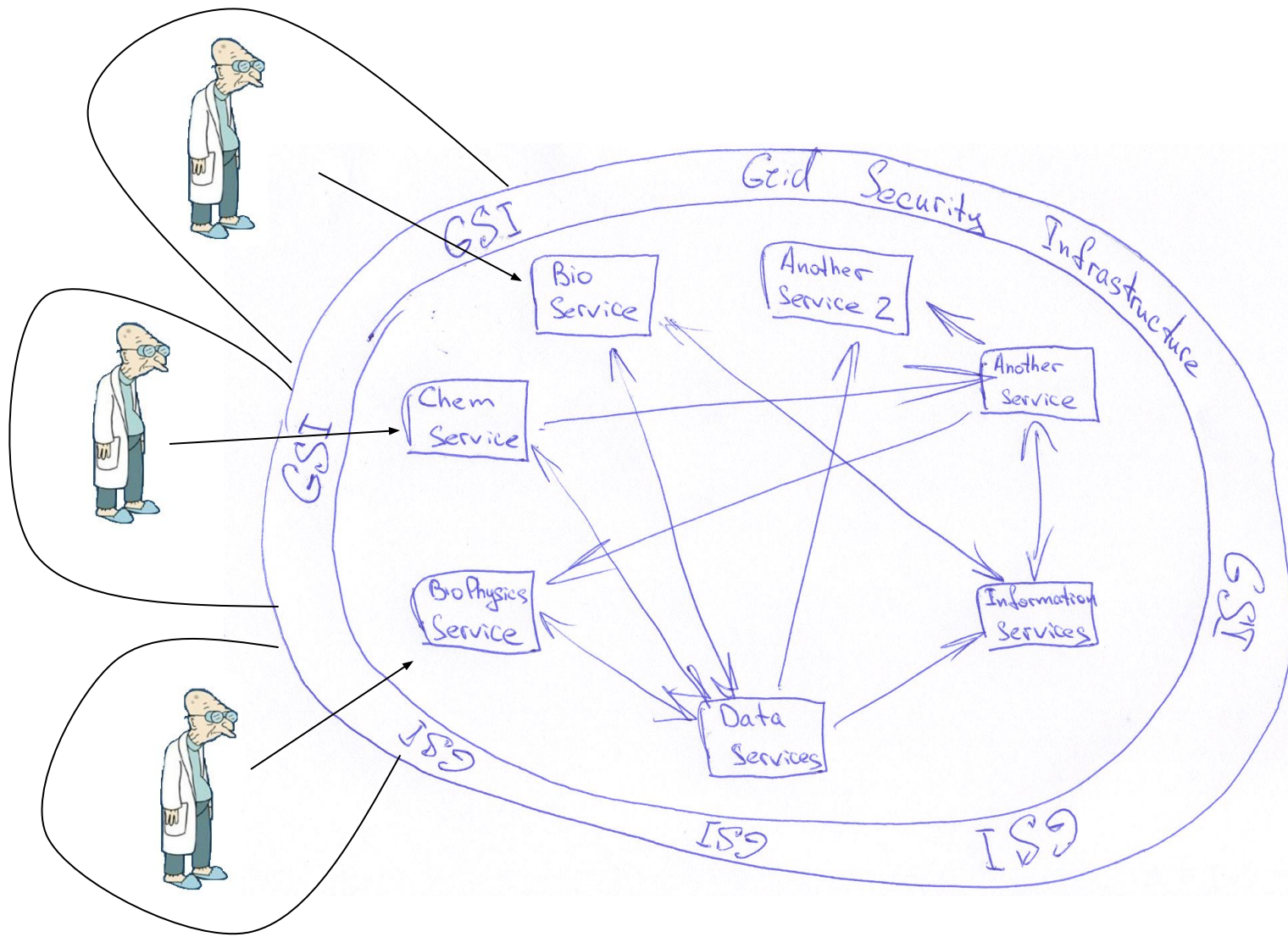
Структура Регистры КОМОС

- ✓ Программное обеспечение Globus Toolkit
- ✓ Поддержка инфраструктуры открытых ключей
- ✓ Поддержка нескольких виртуальных организаций
- ✓ Техническая поддержка
- ✓ Вычислительные ресурсы
- ✓ Хранилища информации
- ✓ Базовые сервисы



Сервис-ориентированная архитектура

Blast service Burn-calc service Ontology design Monte-Carlo modelling ...-service
проблемно-ориентированные сервисы



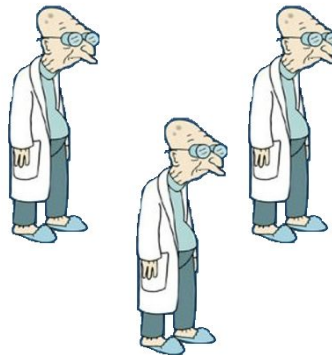
Универсальная
вычислительная
среда Grid

Специализированные
решения

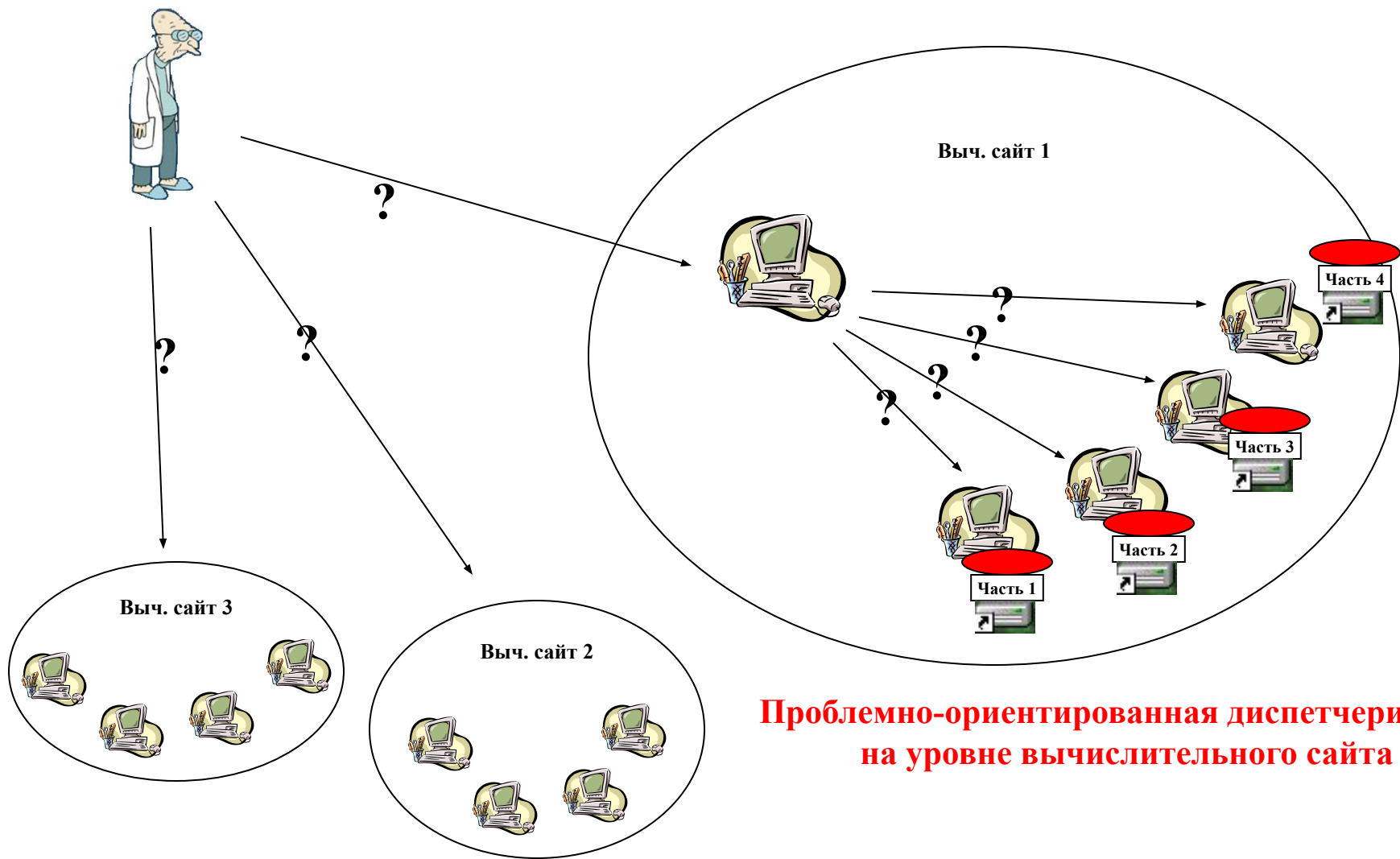
vs.

Исследуем
релевантность
технологии

?

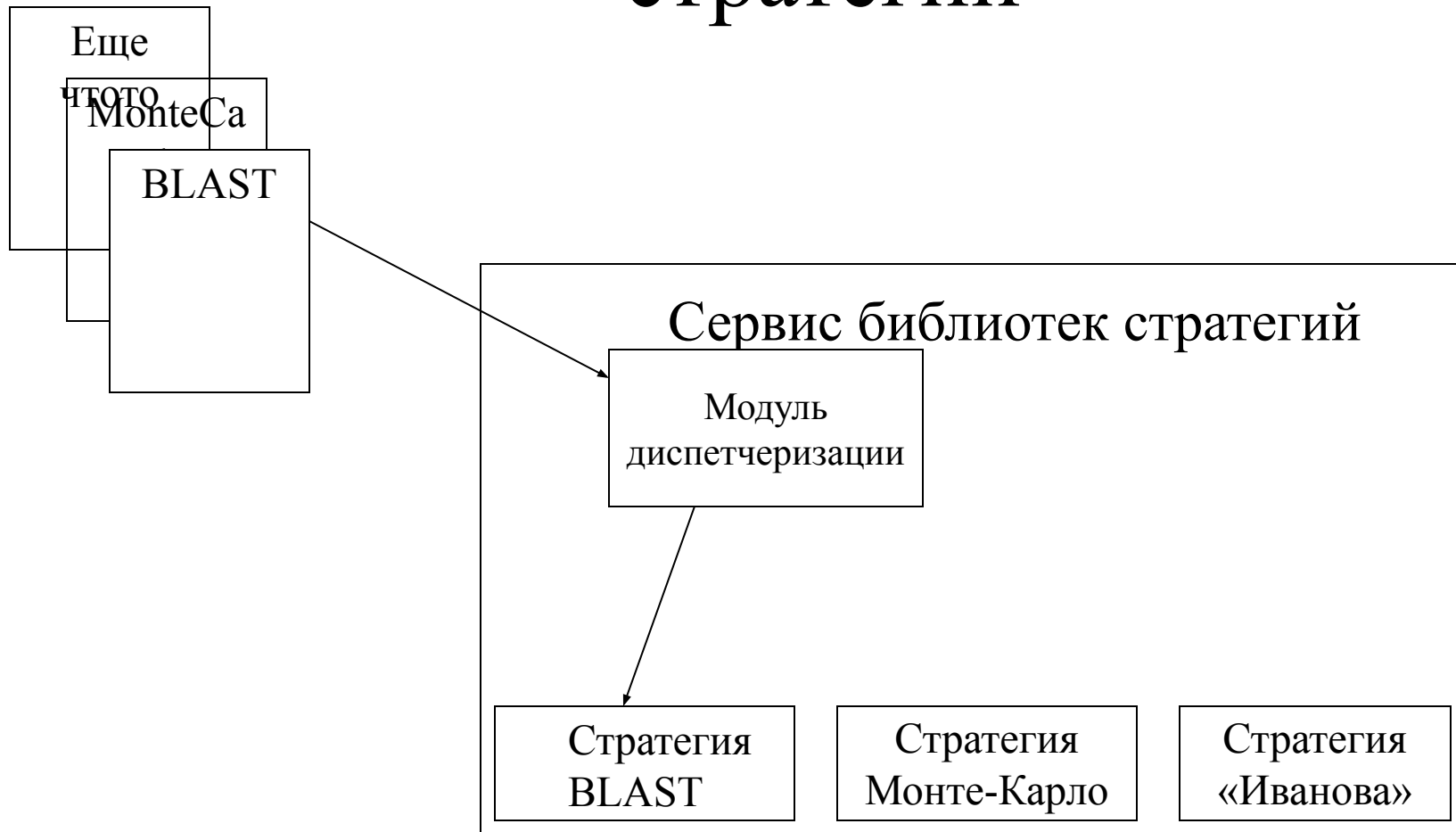


Повышение эффективности за счет двухуровневой диспетчеризации



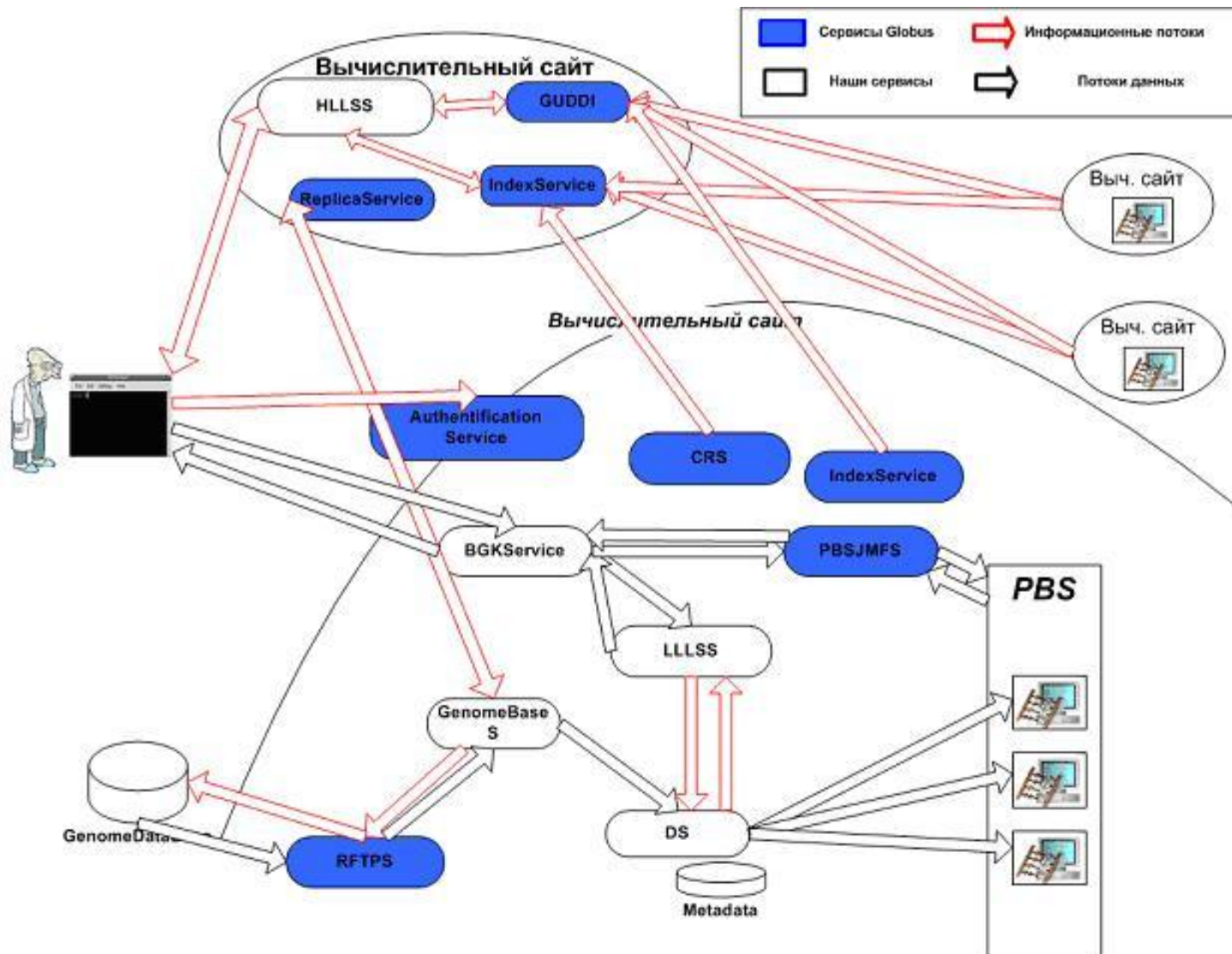
**Проблемно-ориентированная диспетчеризация
на уровне вычислительного сайта**

Сервис локальных библиотек стратегий

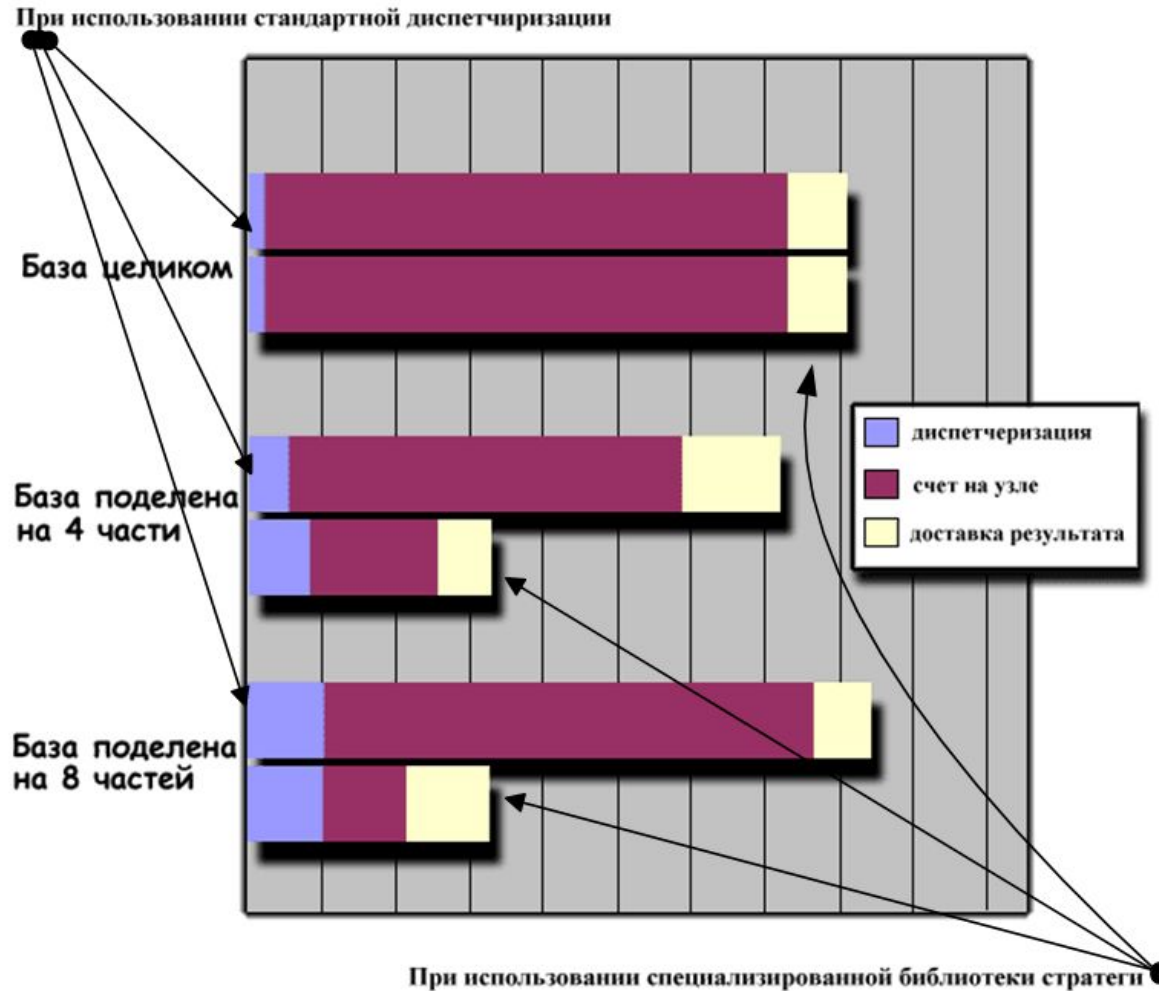


Специализированная диспетчеризация достигается посредством сервиса локальных библиотек стратегий

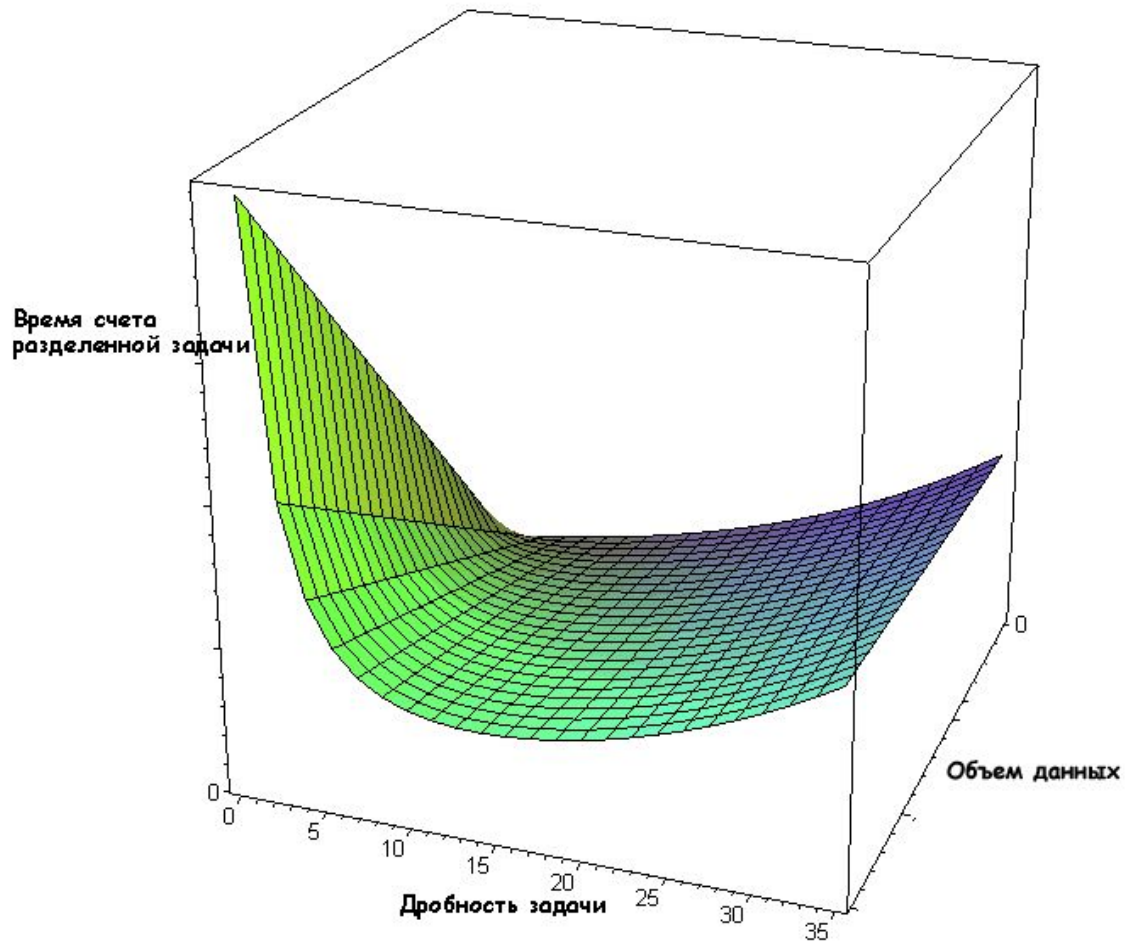
Сервис вычислений BLAST



Результаты



Результаты 2



Заключение

Технология Grid релевантна, но надо создавать пути
повышения эффективности



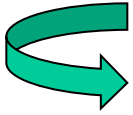
Необходимо создавать специализированные
вычислительные сервисы

Необходимо создавать специализированные библиотеки
стратегий

Необходимы библиотеки стратегий разных уровней.



OGSA релевантна, но надо создавать пути повышения эффективности



Необходимо создавать специализированные вычислительные сервисы

Необходимо создавать специализированные библиотеки стратегий

Необходимы библиотеки стратегий разных уровней.



Globus - проблемы с преемственностью версий

Актуальная задача Computation Grid – технология гридификации существующих задач: создание спец. Интерфейсов; создание лок. Библиотек стратегий

Взаимодействие разработчиков и накопление сервисов.