

## УНИФИЦИРОВАННЫЙ УДАЛЕННЫЙ ДОСТУП К СУПЕРКОМПЬЮТЕРНЫМ РЕСУРСАМ

*А.П. Крюков<sup>1</sup>, Л.В. Шамардин<sup>1</sup>, Н.В. Приходько<sup>2</sup>, А.П. Демичев<sup>1</sup>*

*<sup>1</sup>Научно-исследовательский институт ядерной физики им. Д.В. Скобельцына  
МГУ им. М.В. Ломоносова, Москва*

*<sup>2</sup>Новгородский госуниверситет им. Ярослава Мудрого*

Предложен новый подход к организации удаленного доступа к суперкомпьютерным (СК) ресурсам, который может быть применен как в гридах, так и для прямого доступа пользователей к СК. В настоящее время для запуска заданий в гриде традиционно используются программные шлюзы на основе Globus toolkit, а в случае прямого доступа пользователей – протокол ssh. Оба варианта существенно различаются, что затрудняет использование СК пользователями. Предлагается использовать программный шлюз к СК ресурсам, входной язык описания заданий (workflow) которого разработан и реализован в рамках проекта ГридННС. Это позволит унифицировать запуск заданий как в гриде, так и непосредственно на СК. От пользователя скрывается специфика запуска заданий на конкретном СК, что существенно облегчает работу на нескольких СК одновременно.

Проблема удаленного доступа к вычислительным ресурсам особенно актуальна в случае необходимости использования СК для выполнения исследований. Количество крупных СК установок достаточно мало, и далеко не каждый университет или научно-исследовательский институт может позволить себе иметь собственный СК. Тем более такой, как уникальная вычислительная установка СК «Ломоносов» [1], работающий в МГУ имени М.В. Ломоносова.

Для организации удаленного доступа пользователей к СК установкам используется несколько методов. Это может быть, например, прямой доступ к конкретному СК или доступ через грид. Рассмотрим их более подробно.

Наиболее распространенным в настоящее время методом удаленного доступа к СК ресурсам является предоставление прямого доступа к СК по протоколу ssh. Прямой доступ предоставляет пользователю гибкую возможность использовать средства, имеющиеся на СК. Однако этот способ создает значительные проблемы как для пользователей, так и для системных администраторов СК.

Проблемы пользователей состоят в том, что они должны изучить многие тонкости среды, в которой происходит запуск приложений. Сюда относится система пакетной обработки заданий, установленная на СК, особенности ОС и ее конкретной версии, особенности архитектуры СК и так далее. Например, СК «Ломоносов» имеет неоднородную структуру. Поэтому эффективное использование этого СК возможно только при учете этого факта.

Для системных администраторов проблема удаленного доступа к СК заключается, в первую очередь, в администрировании большого количества пользователей из различных организаций и в обеспечении безопасности СК в этих условиях.

В случае гридов удаленный доступ к СК ресурсам организуется посредством промежуточного ПО, которое устанавливается на специальном сервере-шлюзе. Шлюз обеспечивает согласование грид-среды и среды исполнения конкретного СК.

В этом случае многие указанные проблемы уходят на второй план. Так, например, пользователям не требуется изучения особенностей конкретной среды исполнения,

имеющейся на каждом доступном СК. Система управления заданиями грида автоматически настроит задание пользователя в соответствии с требуемой средой исполнения, особенностями системы управления пакетной обработкой заданий и корректно запустит задачу пользователя.

То же самое относится к проблеме администрирования пользователей и обеспечения безопасности СК. В гриде управление пользователями организовано через механизм виртуальных организаций (ВО), который обеспечивает гибкое управление правами доступа пользователей, а использование цифровых сертификатов стандарта X.509 обеспечивает безопасность доступа к СК. Проблема управления большого количества пользователей решается путем использования ограниченных пулов формальных локальных пользователей, на которые отображаются реальные пользователи на время выполнения заданий. При этом средства шлюза обеспечивают возможность проследить за всеми действиями пользователя (аудит).

В качестве базового ПО, которое используется для построения шлюзов, как правило, применяется Globus Toolkit (GT) [2]. Однако использование GT имеет свои недостатки. Так, GT версии 4 использует сложный в реализации стек стандартов WSRF [3]; GT5 является фактически возвращением к классическому инструментарию GT2 с учетом опыта последних лет.

В ходе разработки промежуточного ПО ГридННС [4] авторами впервые для целей грид были разработаны грид-сервисы [5, 6] с использованием архитектурного стиля REST [7] и протоколом обмена данными JSON [8]. Используя успешный опыт разработки RESTful-грид-сервисов, авторами был разработано промежуточное ПО для шлюза к СК ресурсу, в котором реализован новый подход к разработке подобных сервисов.

Основная задача, которую выполняет шлюз удаленного доступа к СК ресурсу (в дальнейшем просто шлюз), – это регистрация задачи пользователя и трансляция описания задачи в термины среды исполнения конкретного СК с последующей передачей задачи на выполнение на СК. Кратко это можно описать следующим алгоритмом:

- прием описания задачи и регистрация ее в БД шлюза;
- загрузка в домашнюю директорию файлов, необходимых для запуска задачи;
- трансляция описания задачи в термины системы управления пакетной обработкой (СУПО);
- постановка задачи в очередь СУПО и выполнение задачи на СК;
- выгрузка результатов задачи;
- завершение задачи.

Описанный алгоритм обеспечивает выполнение задачи на СК в рамках одной единицы выполнения СУПО СК. Реальные задачи часто требуют выполнения нескольких логически связанных шагов (композиционные задания, workflow), не все из которых должны выполняться в одинаковых условиях запуска в рамках одного шага. Например, задача может включать в себя подготовку входных/выходных данных, интенсивный ввод-вывод, не требующую серьезных вычислительных ресурсов (например, работа с архивами файлов) предварительную компиляцию программы. Последний этап в ряде случаев вообще не может быть осуществлен в момент выполнения основного скрипта задачи из-за ограничений сред исполнения на конкретных СК.

Таким образом, приведенный алгоритм имеет существенные ограничения возможных сценариев использования как в случае грида, так и в случае обращения к конкретному СК через шлюз. Для устранения указанного ограничения было предложено распространить использование композиционных заданий не только в среде грида, но и на шлюзах.

В качестве языка описания был использован язык описания заданий в ГридННС. Этот язык позволяет описать композиционное задание, логика выполнения которого может быть представлена в виде направленного ациклического графа (НАГ). Однако есть одно

существенное отличие. А именно, НАГ содержит не один тип, как в ГридННС, а несколько типов вершин. Первый тип – это вершины, которые предписывают выполнить некоторые действия на СК, например запуск основной вычислительной части программы. Второй тип вершин – это действия, которые будут выполнены непосредственно на сервере шлюза и суть которых полностью определяется и контролируется администраторами шлюза. Примерами таких действий являются пересылка файлов из удаленного хранилища на СК либо работа с архивами файлов. Все такие действия имеют стандартный интерфейс. Для обеспечения безопасности список типов таких вершин определяется администратором шлюза и не может быть расширен пользователем. В качестве формата описания заданий используется формат JSON.

Безопасность шлюза обеспечивается широким комплексом мер. Аутентификация пользователей на шлюзе осуществляется при помощи цифровых сертификатов стандарта X.509. Авторизация осуществляется на основе принадлежности пользователей к той или иной виртуальной организации. Технически это осуществляется при помощи сервиса управления ВО – VOMS [9]. Такое решение обеспечивает большую гибкость управления правами доступа пользователей и, в то же время, не усложняет администрирование СК. Некоторым недостатком этого можно считать необходимость поддержки отдельного сервера управления ВО.

Шлюз может быть использован на СК, которые находятся под управлением СУПО PBS/Torque, Cleo и SLURM, что покрывает практически все СК установки России. В случае использования шлюза для прямого доступа пользователей к СК ресурсу, шлюз обеспечивает единый интерфейс к СК независимо от используемой на нем среды исполнения и особенностей настройки СК.

В настоящее время прототип шлюза проходит комплексные испытания в ГридННС.

Работа поддержана грантом РФФИ (№ 11-07-00434-а) и грантом Президента РФ «Ведущая научная школа» (НШ-3920.2012.2).

### **Литература**

1. Суперкомпьютер Ломоносов – [<http://parallel.ru/cluster/lomonosov.html>].
2. Foster I., Kesselman C. The Globus Project: A Status Report // In Proc. Heterogeneous Computing Workshop. IEEE Press. 1998. P. 4–18.
3. OASIS. Web Services Resource Framework (WSRF) – Primer v1.2, Committee Draft 02 - 23 May 2006. – [<http://docs.oasis-open.org/wsrp/wsrp-primer-1.2-primer-cd-02.pdf>].
4. Грид для Национальной нанотехнологической сети – [<http://ngrid.ru/ngrid>].
5. Демичев А., Ильин В., Крюков А., Шамардин Л. Реализация программного интерфейса грид-сервиса Pilot на основе архитектурного стиля REST // Вычисленные методы и программирование. 2010. Т. 11. С. 62–65.
6. Демичев А., Крюков А., Шамардин Л. Принципы построения грид с использованием Restful-веб-сервисов // Программные продукты и системы. 2009. №4. С. 172–176.
7. Fielding R.T. Architectural styles and the design of network-based software architectures // Doctoral dissertation, University of California, Irvine, 2000.
8. K.Zyp: A JSON Media Type for Describing the Structure and Meaning of JSON Documents. // Technical report, IETF Network Working Group, draft-zyp-json-schema-02, March 2010.
9. VOMS – [<http://vdt.cs.wisc.edu/components/voms.html>].