

Грид-системы персональных компьютеров как источник вычислительной мощности для решения научных задач

Посыпкин М. А.

Вычислительный центр им.
А.А. Дородницына ФИЦ ИУ РАН

План доклада

- Распределенные системы
- Грид-системы персональных компьютеров
- Комбинированные распределенные инфраструктуры
 - в науке
 - в образовании

Распределенные системы

Part of the Software applications glossary:

Распределенные вычисления – это модель вычислений, в которой программные компоненты распределены по различным компьютерам с целью повышения эффективности и производительности.

Распределенные инфраструктуры:

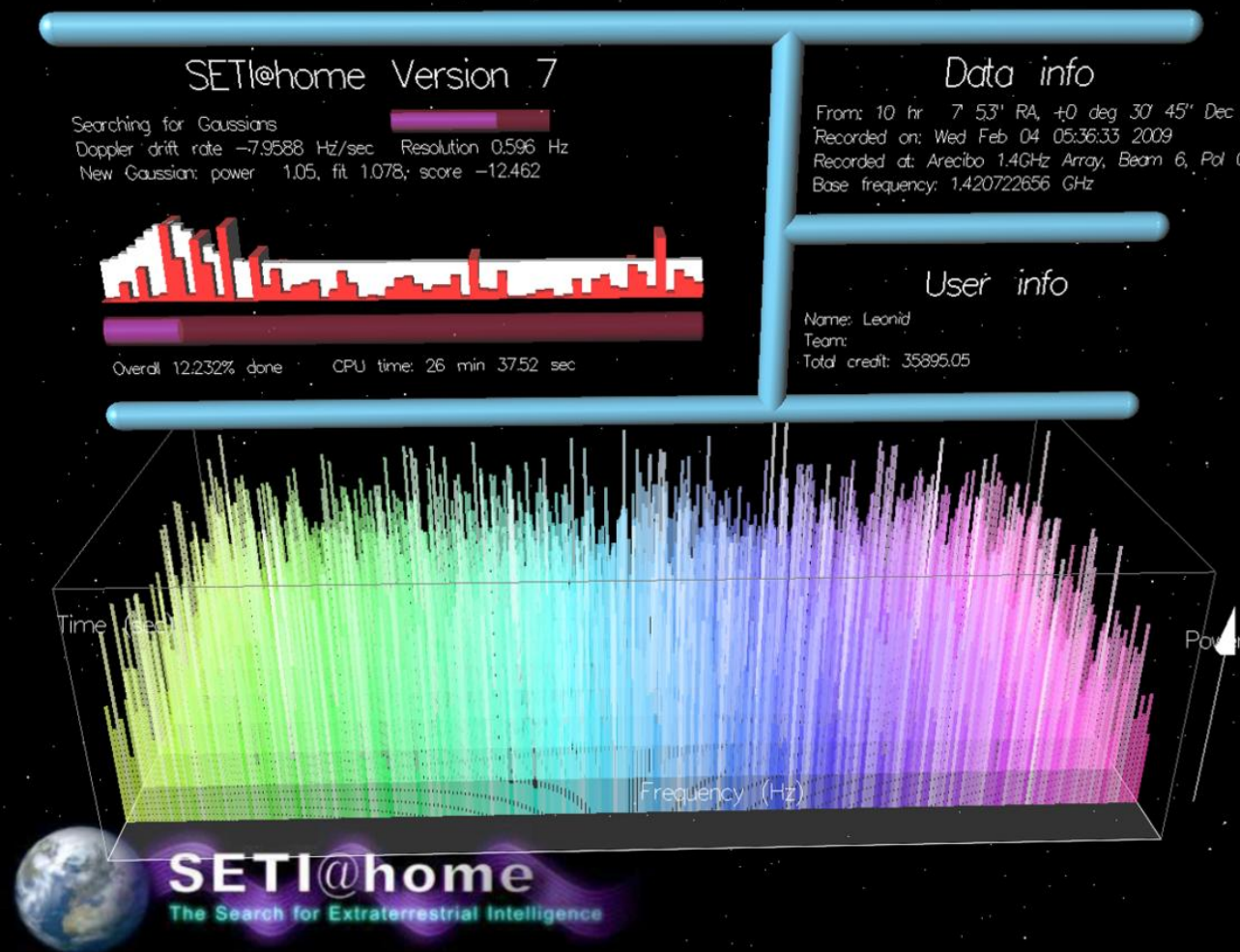
- Сервисные грид-системы
- Грид-системы из персональных компьютеров
- Облачные инфраструктуры

Что такое грид-системы персональных компьютеров?

- ☐ Используются свободные мощности компьютера
- ☐ Глобальность (узлы могут быть в самых разных частях света)
- ☐ Добровольность предоставления ресурсов
- ☐ Слабая связанность узлов



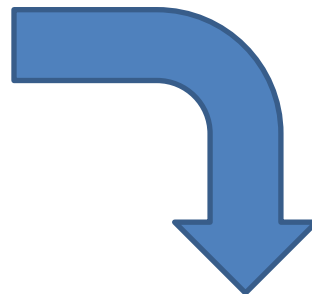
—
) — научный некоммерческий проект добровольных вычислений на платформе BOINC, использующий свободные вычислительные ресурсы на компьютерах добровольцев для анализа радиосигналов, полученных проектом SETI.



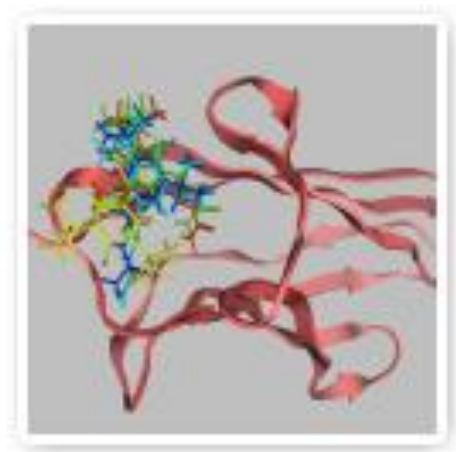
Радиотелескоп Аресибо



данные



Help Fight Childhood Cancer Project



- Поиск лекарств для лечения нейробластомы – одного из наиболее распространенных видов рака у детей.
- С помощью программы AUTODOCK проверяется много возможных лекарств-кандидатов, которые способны деактивировать белки, ответственные за рост нейробластомы.

- В 2014 году в результате проведенного эксперимента удалось найти 7 соединений. Для этого потребовалось перебрать более трех миллионов молекул. Проведение такого эксперимента на одном компьютере потребовало бы 55,000 лет (!).





Einstein@Home

Einstein@Home – поиск слабых астрофизических сигналов от быстро вращающихся нейтронных звёзд (часто называемых пульсары) с использованием данных, полученных от детекторов гравитационных волн LIGO, радиотелескопа Аресибо и Космического гамма-телескопа Ферми.

Добровольцы Einstein@Home уже обнаружили около пятидесяти новых нейтронных звёзд.

BOINC Information

User: Oliver Bock
Team: Albert-Einstein-Institut Hannover
Project Credit: 4977268.60
Project RAC: 15705.58
WU Completed: 51.20 %
WU CPU Time: 00:02:50

Search Information

Ascension: 261.56 deg
Declination: -35.58 deg
DM: 320.00 pc/cm³
Orb. Radius: 0.384 ls
Orb. Period: 6174 s
Orb. Phase: 0.13 rad

Collatz' Conjecture

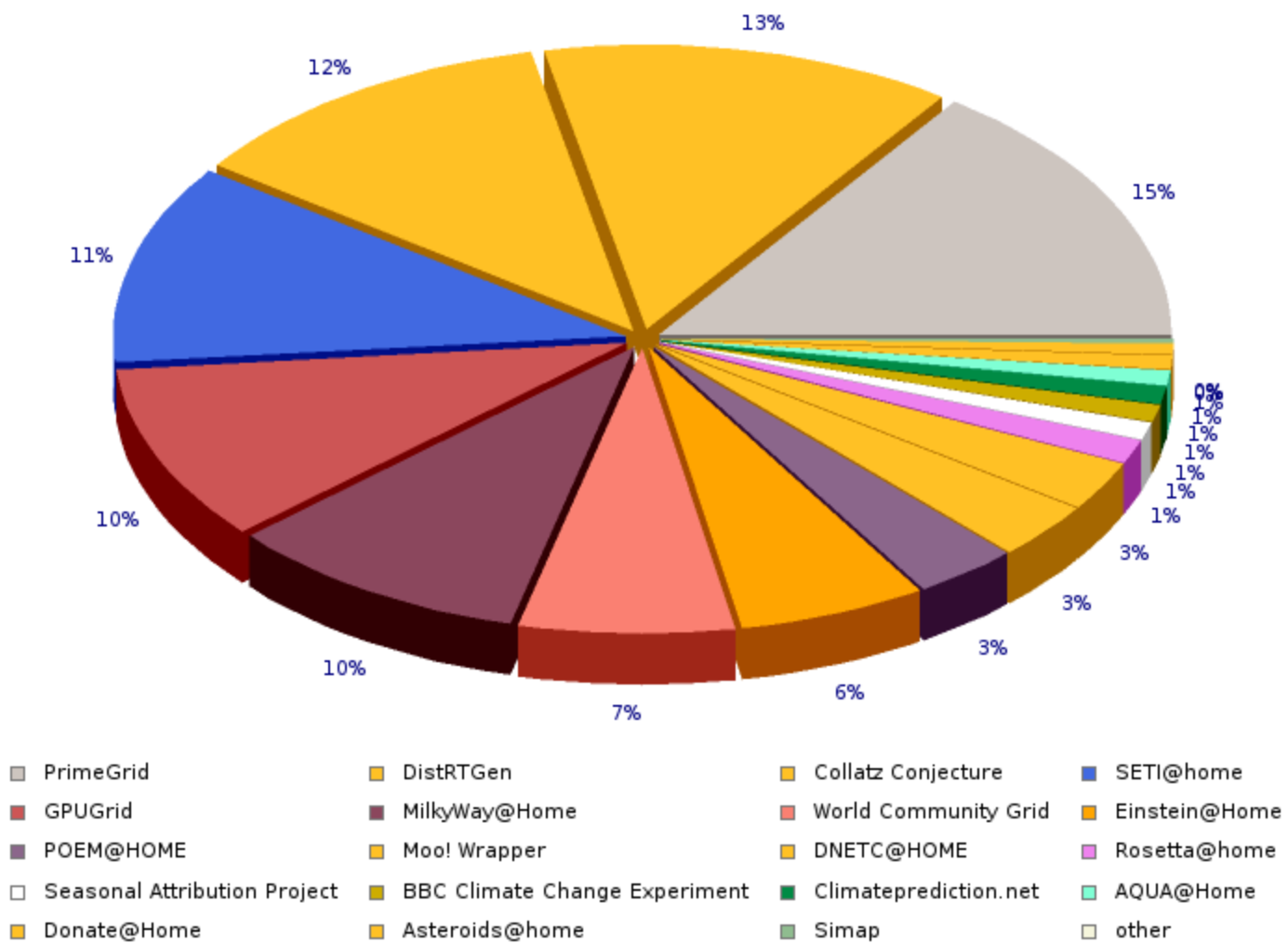
- Проверяет гипотезу Коллатца

Гипотеза Коллатца (1937 год). Для объяснения сути гипотезы рассмотрим следующую последовательность чисел, называемую n -ской последовательностью. Берём любое натуральное число n . Если оно чётное, то делим его на 2, а если нечётное, то умножаем на 3 и прибавляем 1 (получаем $3n + 1$). Над полученным числом выполняем те же самые действия, и так далее. Гипотеза заключается в том, что какое бы начальное число n мы ни взяли, рано или поздно мы получим единицу.

- Средняя реальная производительность **7 PFlops** (по данным <https://boincstats.com>), получаемая в режиме 24x7
- Лучший суперкомпьютер в России (Ломоносов 2) **< 3 PFlops**

BOINC (Berkeley Open Infrastructure for Network Computing)

- Самая популярная платформа для добровольных вычислений
- Поддерживается всеми видами OS и Android
- Средняя суммарная **реальная** производительность всех BOINC-проектов примерно :
23.784 PetaFLOPS
Active: 295,108 volunteers,
7,834,545 computers.



Для каких задач предназначены ГСПК?

- Большой объем вычислений (несколько дней расчетов на ПК и более)
- Слабо-связанные задачи (задача распадается на независимые части, не требующие взаимодействия в процессе расчетов)

Достоинства и недостатки ГСПК

Достоинства

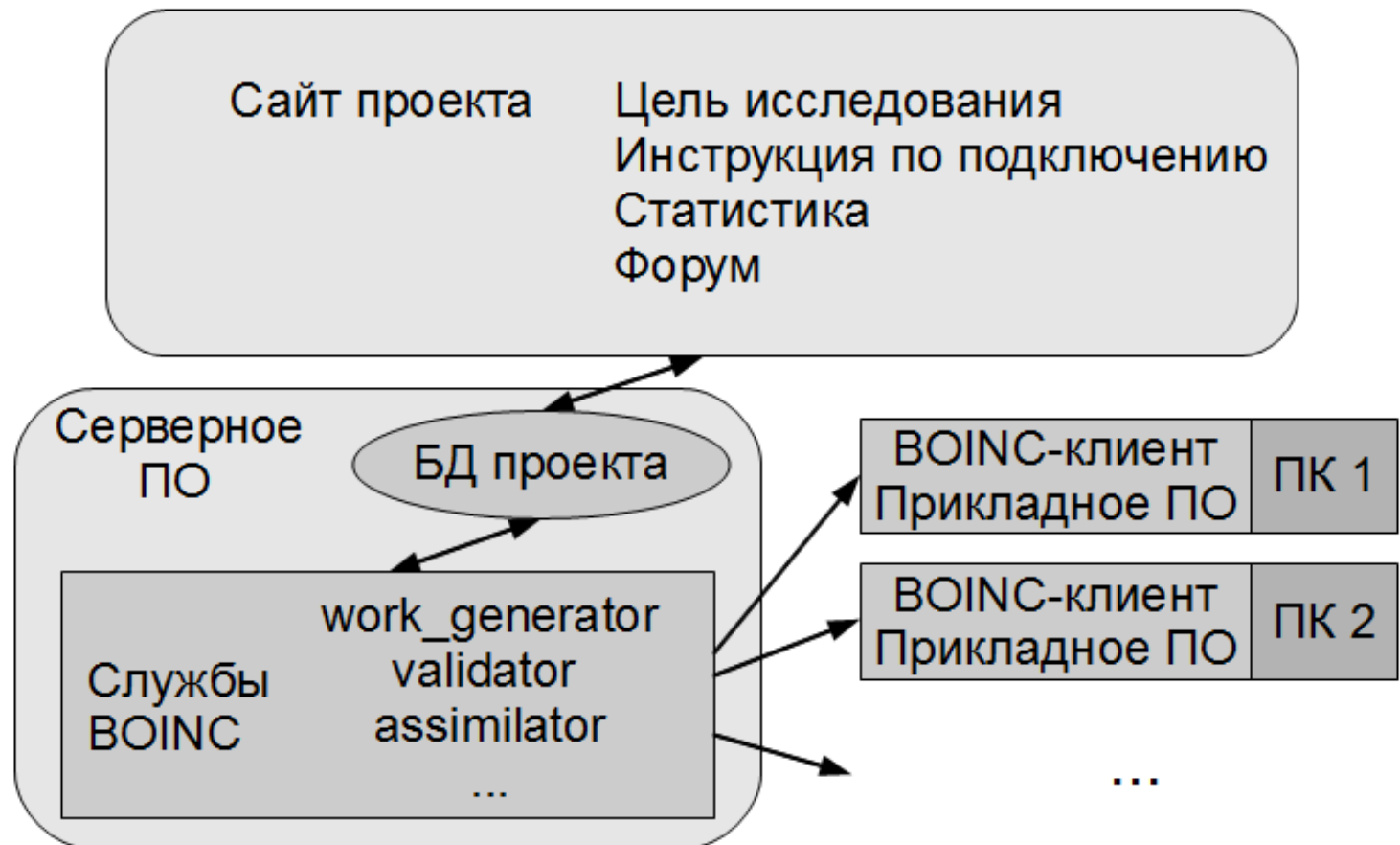
- ☐ Низкая стоимость ресурса
- ☐ Легкость установки и поддержки
- ☐ Использование имеющихся ресурсов
- ☐ Экологичность

Недостатки

- ☐ Относительно узкий спектр применения
- ☐ Достаточно сложная технология разработки и отладки

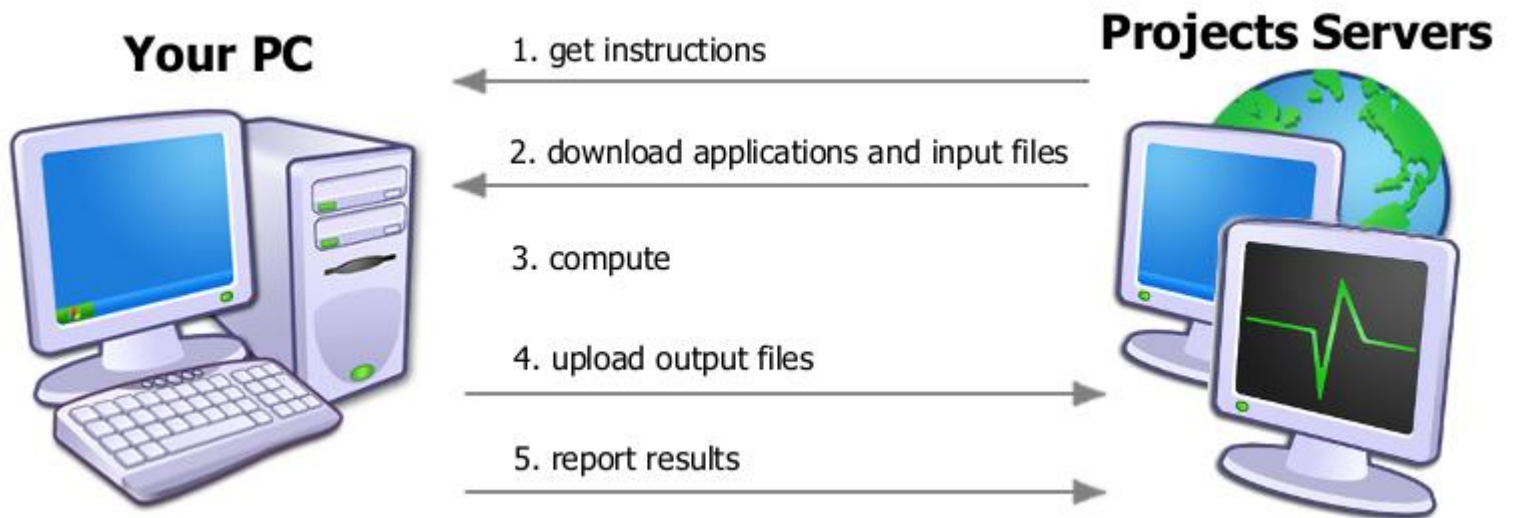
Устройство BOINC

Схема проекта на основе BOINC:

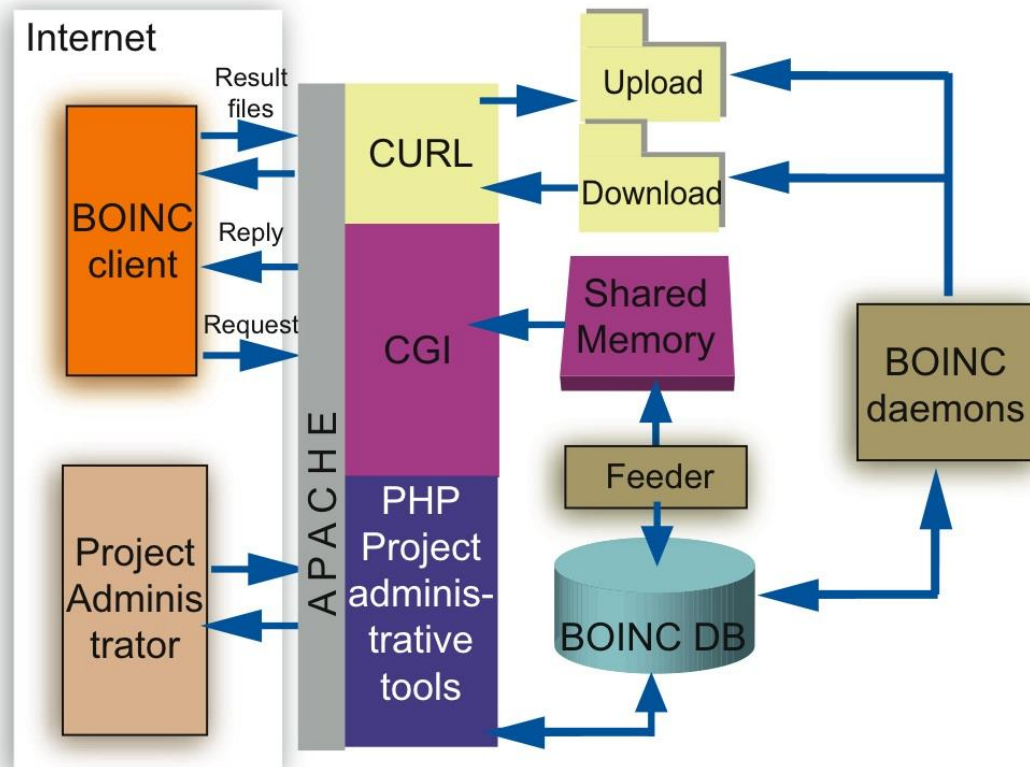


+ система кредитов за вычисления + избыточность

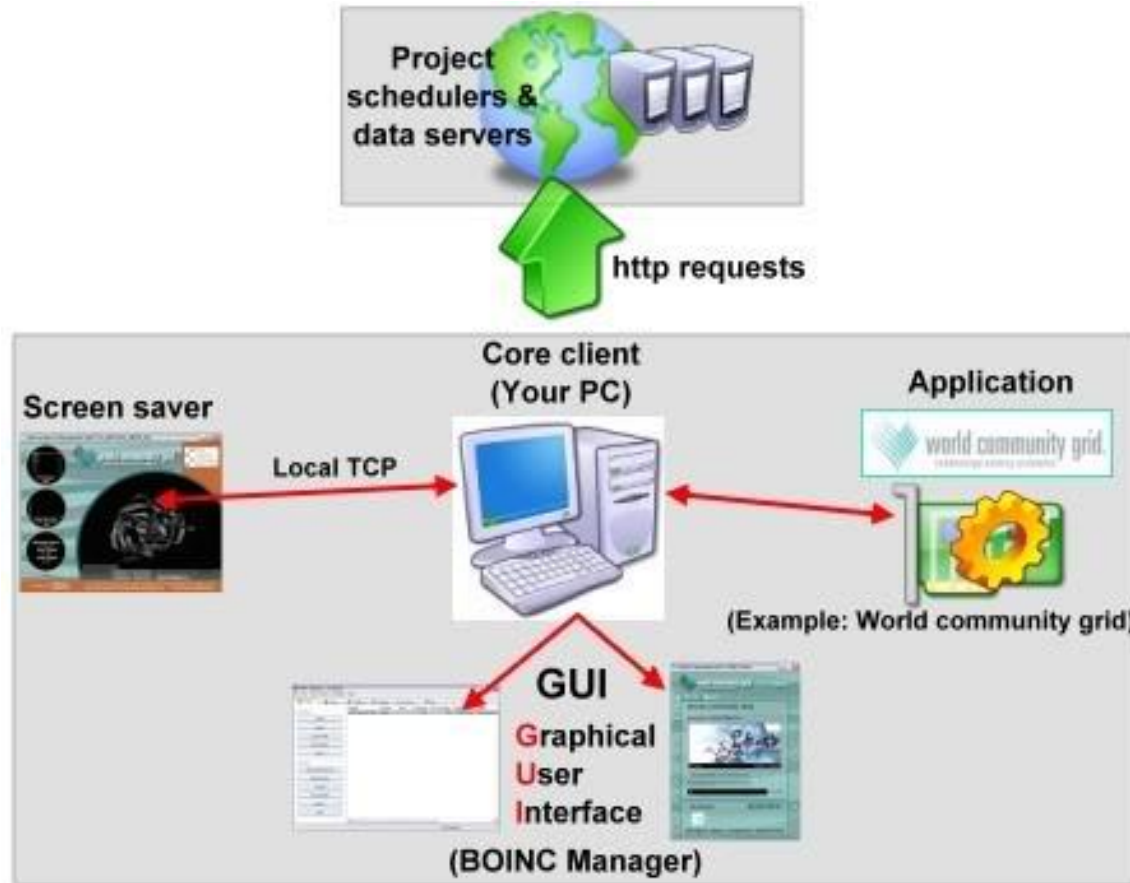
BOINC



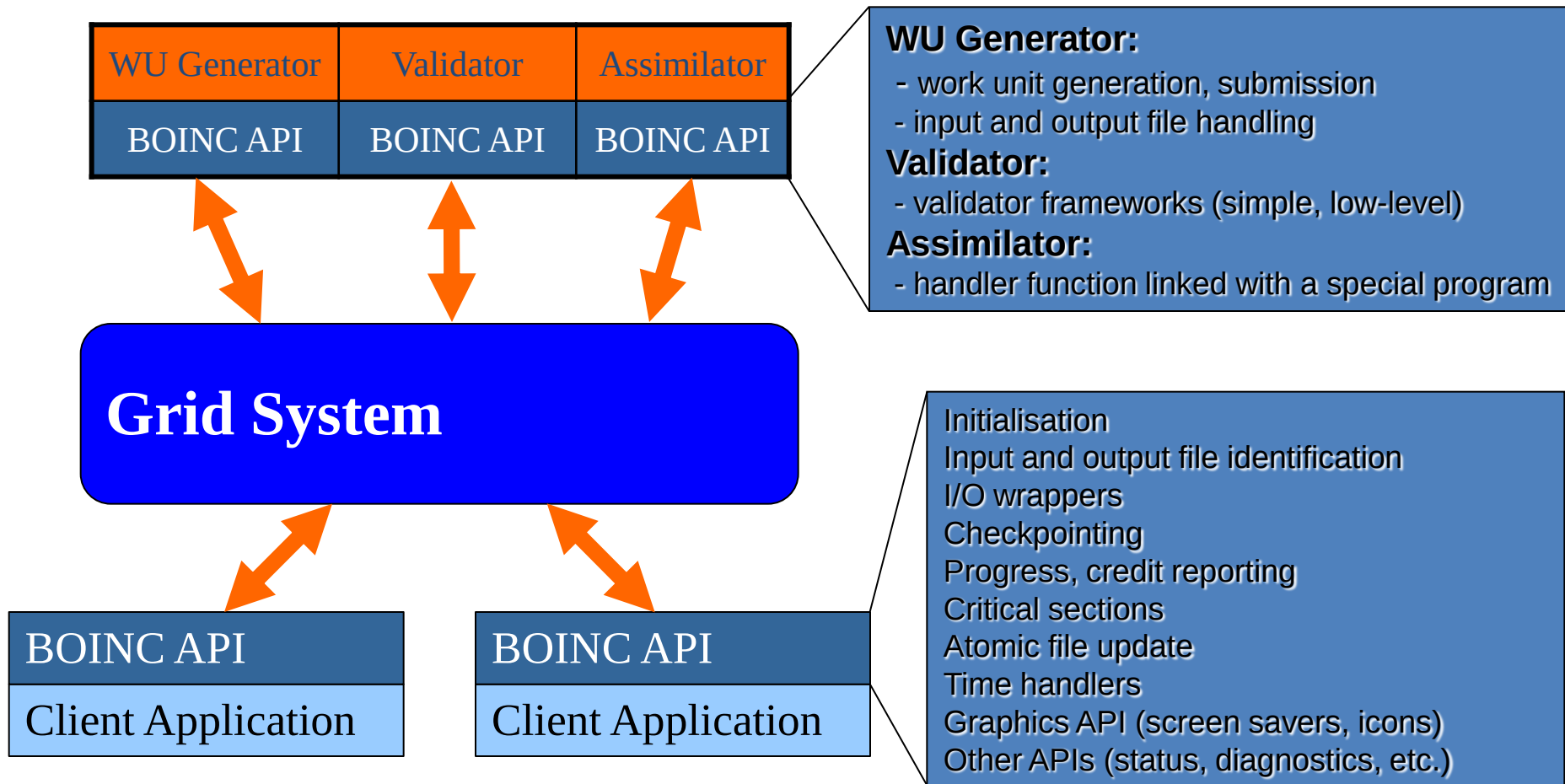
Сервер BOINC



Клиент BOINC

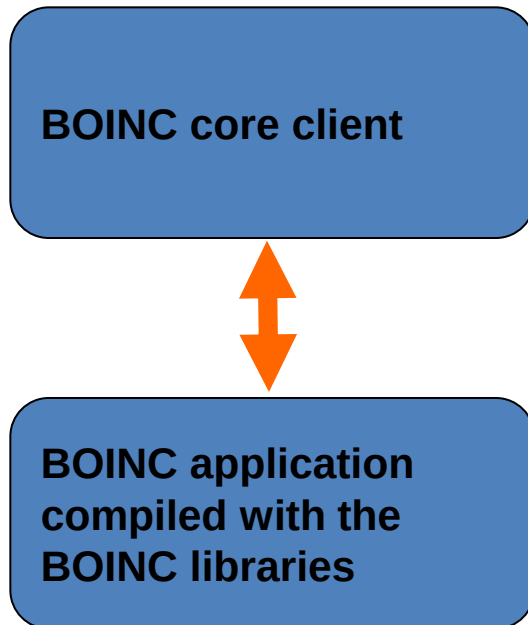


BOINC Native API (команда BOINC)

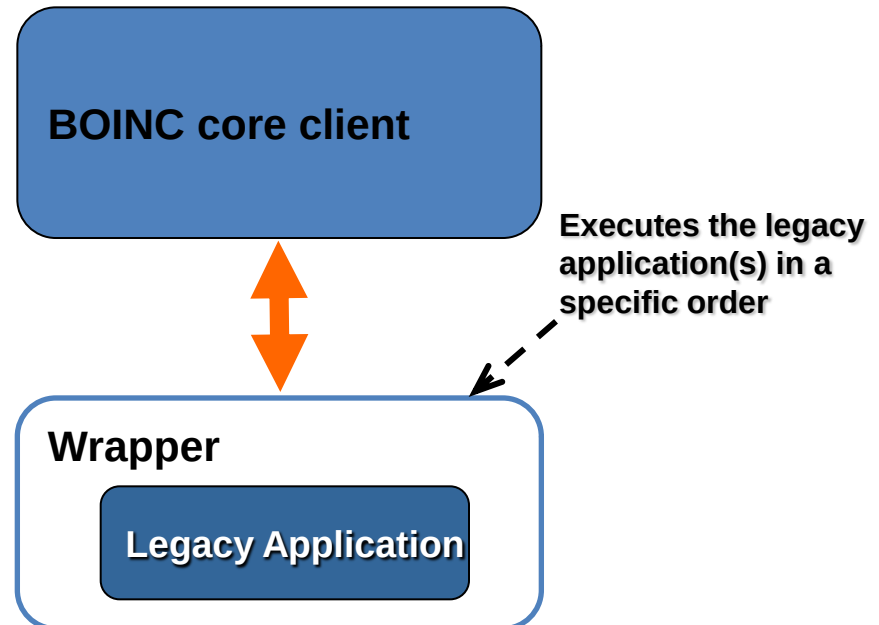


BOINC Wrapper

Without the Wrapper



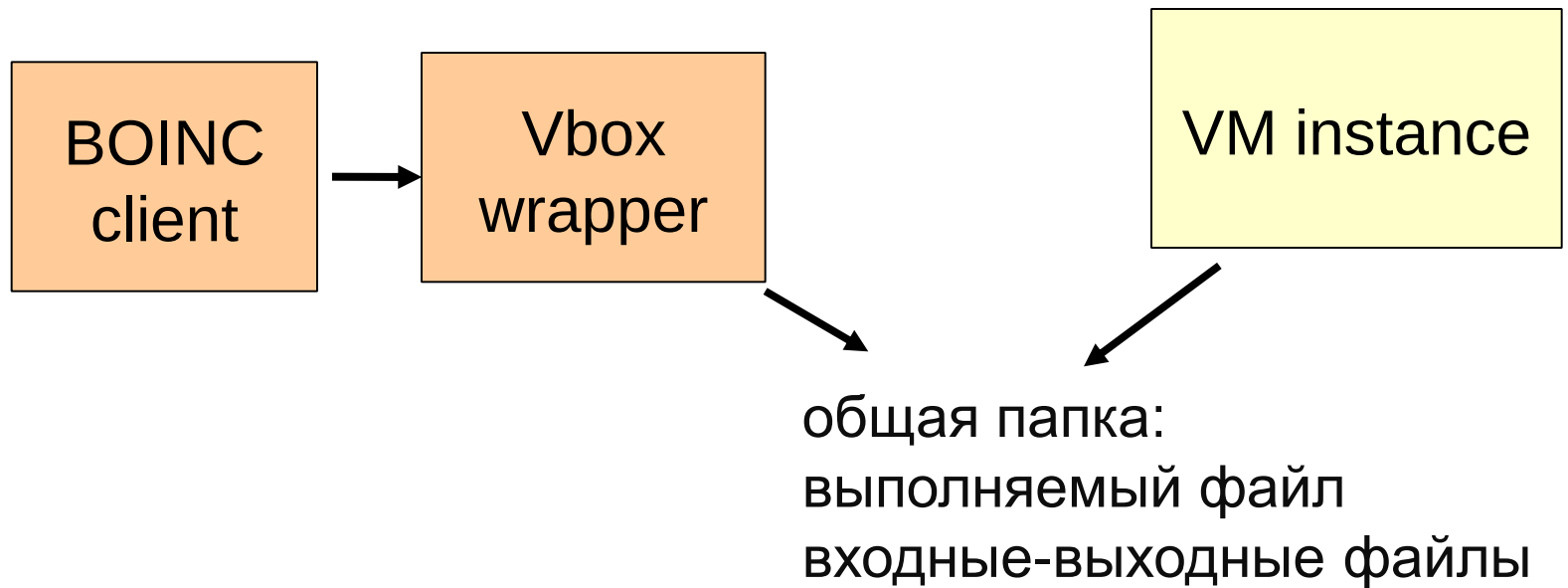
With the Wrapper



VBoxWrapper (BOINC team)

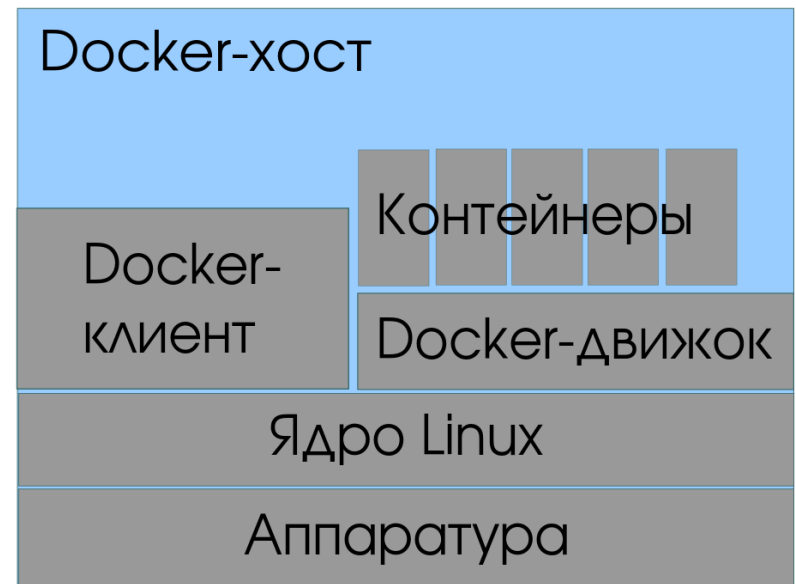
- Разработчики работают в привычной среде
- Приложение состоит из
 - сжатого образа VM (может быть один для нескольких приложений)
 - выполняемый файл приложения
 - BOINC “Vbox wrapper”
- Добровольцы должны установить VirtualBox

VBoxWrapper



BOINC+Docker

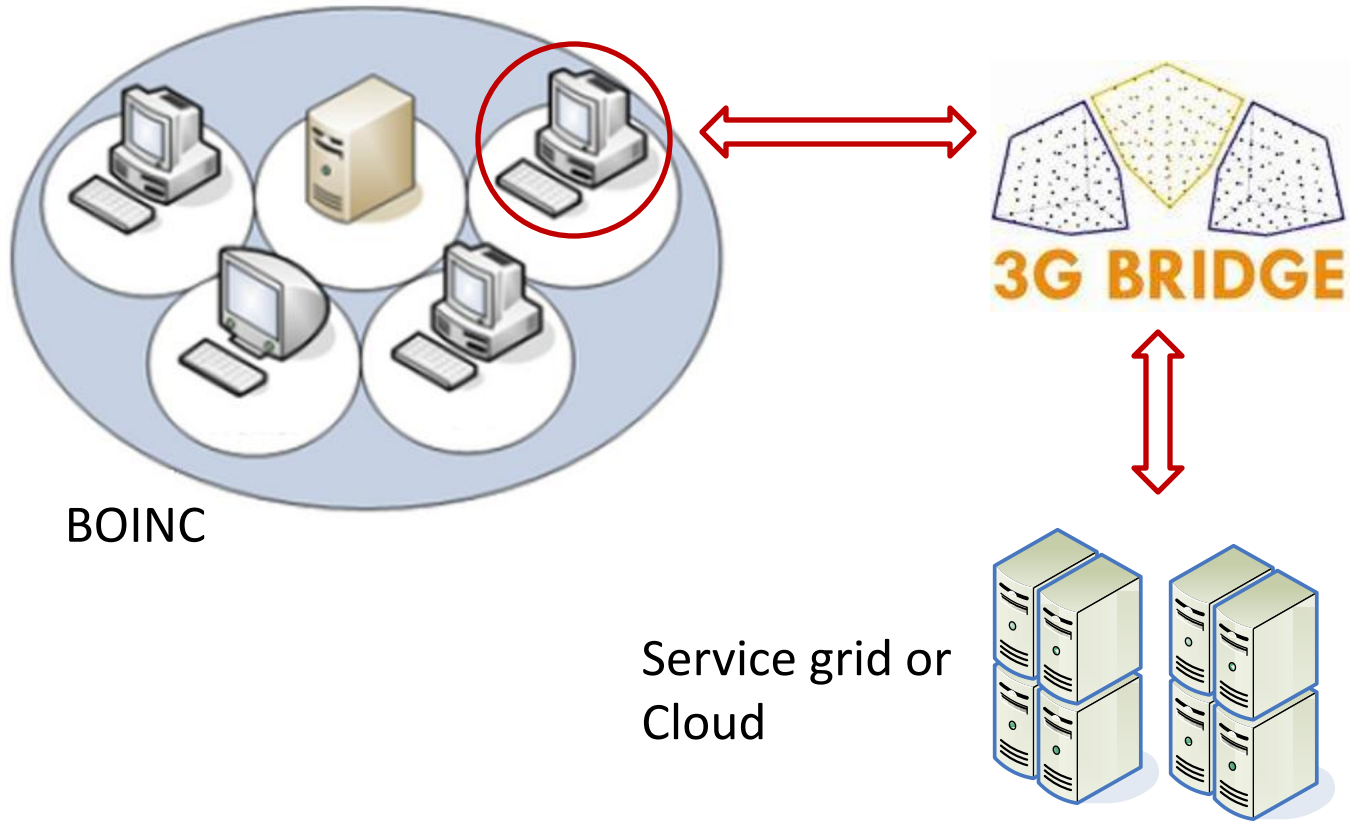
- **Docker** – приложение для автоматизации пакетирования приложений в изолированные контейнеры
- Есть **Docker-Hub**, в котором расположено большое число готовых контейнеров для различных приложений



BOINC+Docker

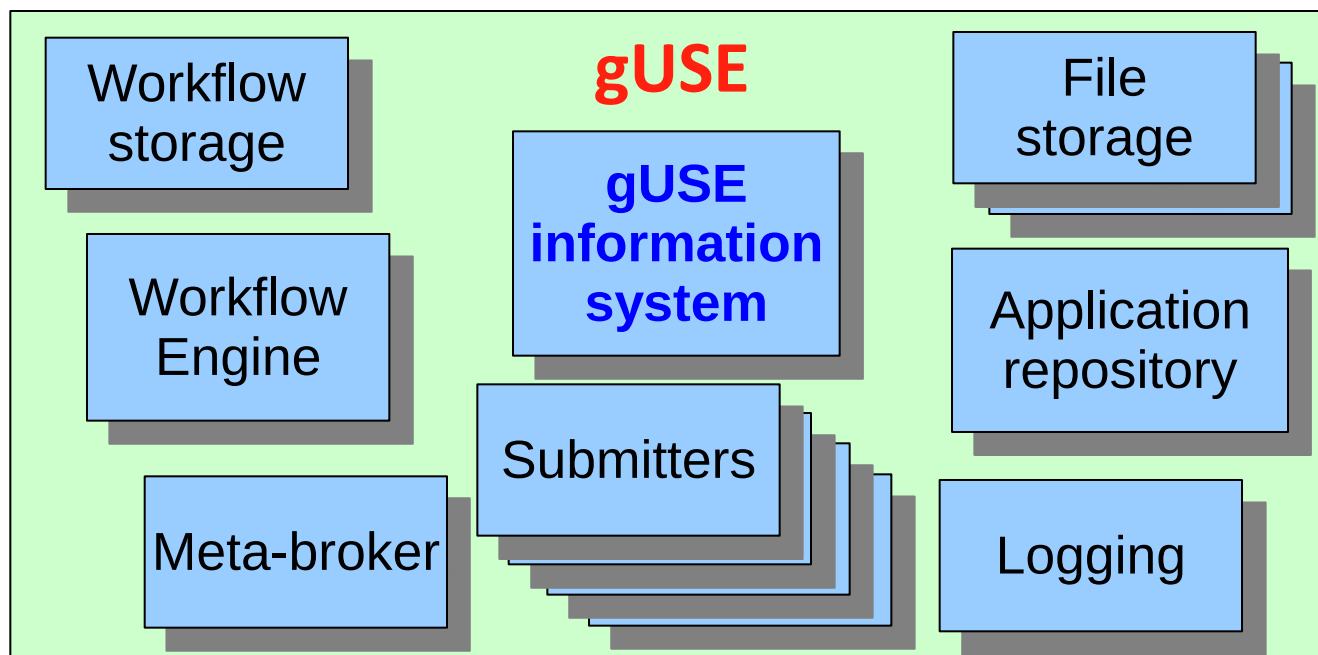
- **boinc-server-docker** – приложение, разработанное Marius Millea, позволяющее с небольшими усилиями запустить boinc-server и создавать задания для него
- фактически пользователю требуется написать команду для docker-а, который при необходимости сам скачает из публичного репозитория нужное ПО (оно там должно быть)

3G-BRIDGE



Среда WS-PGRADE (SZTAKI)

Graphical User Interface: **WS-PGRADE**



Local resources, service grid VOs,
Desktop Grid resources, Web services, Databases

CluBORun

CluBORun (**Cl**uster for **BO**INC **R**un) – совместная разработка ИДСТУ СО РАН и ИППИ РАН (с 2013 года).

Требования:

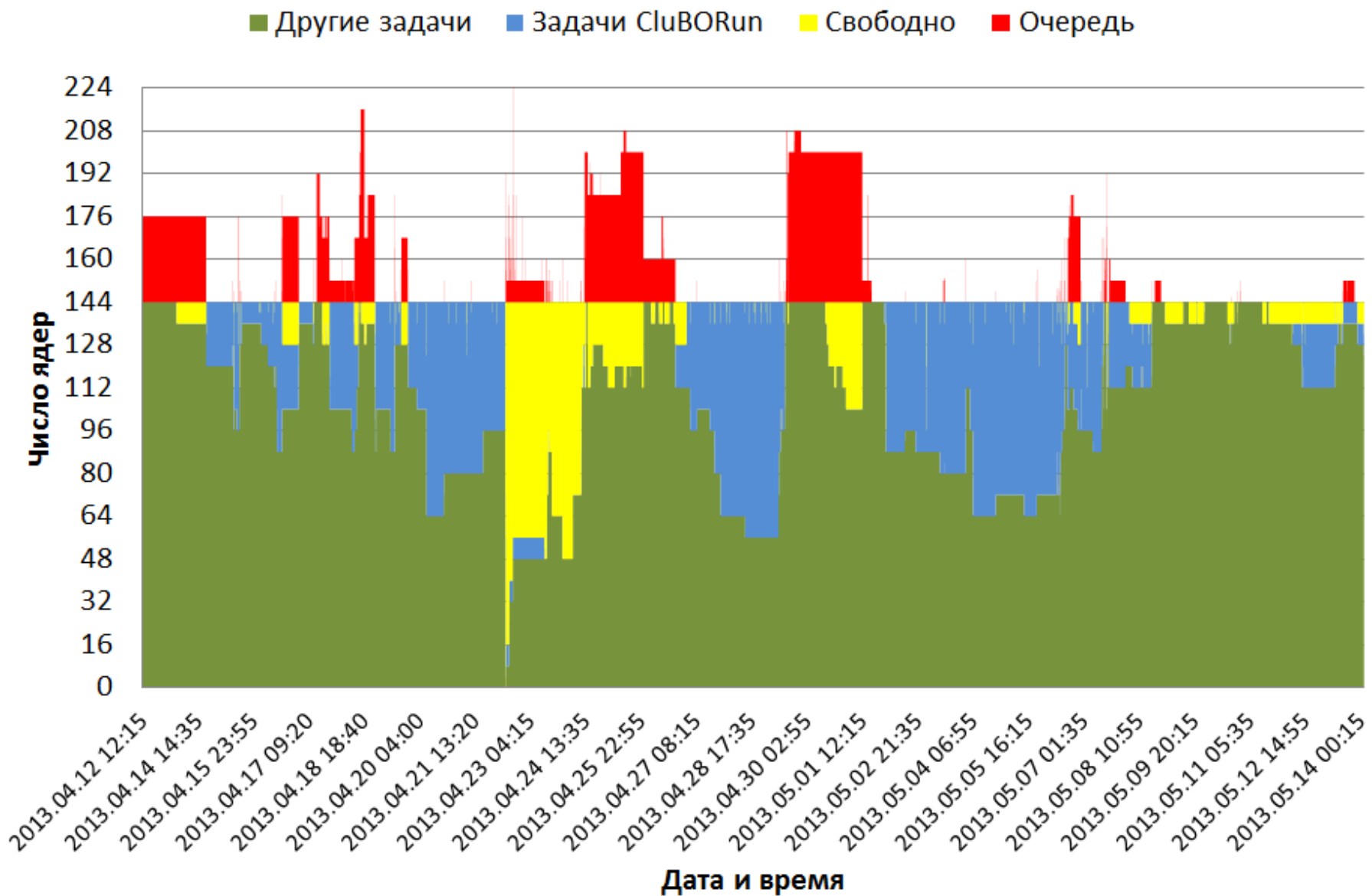
- запускать BOINC-расчеты на узлах кластера;
- делать только то, на что есть права обычного пользователя кластера;
- использовать только свободные ресурсы кластера.

CluBORun задумывался как аналог BOINC-клиента, только для задействования простаивающих ресурсов кластеров, а не ПК.

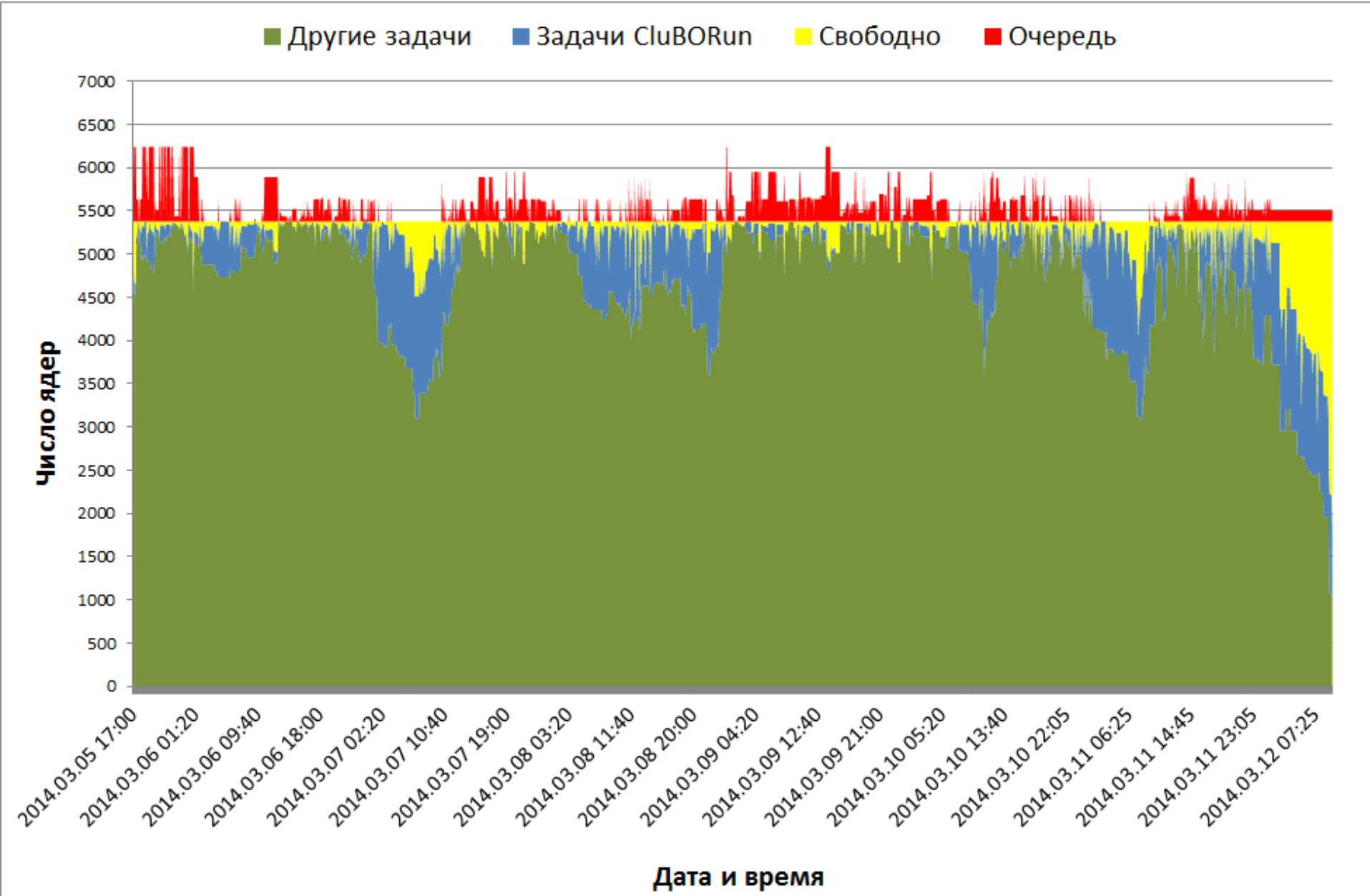
CluBORun

Система CluBORun на данный момент успешно работает со следующими системами очередей:

- Cleo (разработка НИВЦ МГУ)
- СУПЗ (разработка МСЦ РАН)
- SLURM (международная разработка)



Загрузка кластера Blackford ИДСТУ СО РАН с 12.04.2013 по 14.05.2013



Загрузка кластера MBC-100k с 05.03.2014 по 12.03.2014



Main objective: Expand European DCIs into ICPC countries by supporting the creation of new Desktop grids for e-Science in those countries and in Europe and by connecting them using the EDGeS bridge technology. Support applications on this expanded infrastructure, disseminate, promote and provide training about this expanded infrastructure and its usage.

IDGF – международная федерация ГСПК

<http://desktopgridfederation.org>



The screenshot shows the homepage of the International Desktop Grid Federation (IDGF). The header features the IDGF logo and the text "International Desktop Grid Federation". Below the header is a navigation bar with links: Start, Members, News, Documentation, Activities, Events, Technology, and Organisation. The main content area is divided into two columns. The left column has a "Latest news (Start)" section with a search bar and a list of news items. The right column has a "Start" section with a list of links and a "Become a member" section with a list of membership statistics. The footer includes the text "Proud participant of" and the IDGF logo.

IDGF International Desktop Grid Federation

Start Members News Documentation Activities Events Technology Organisation

International Desktop Grid Federation > International Desktop Grid Federation > Start

Latest news (Start)

[IDGF Booth and Tutorial put Crowd computing on the map at EGI CF in Helsinki](#)

6/5/14 1:20 PM

The IDGF booth proved to be a tremendous success at EGI CF 2014. Each day of the event, we counted many visitors with heavy interest in the CloudCase. Many a picture has been taken of this Cloud-in-a-briefcase and quite a lot of in-depth questions had to be answered. The poster with Alexandre Bonvin made people stop and wonder. The IDGF Road Map samples were intensively studied and many...

[Read More »](#)

By [Leslie Versweyveld](#)

[RSS](#) (Opens New Window)

Showing 1 - 1 of 85 results.

Items per Page 1 Page 1 of 85

[First](#) [Previous](#) [Next](#) [Last](#)

Start

The International Desktop Grid federation brings together every one interested in the world in Desktop Grid computing and related technologies.

- General IDGF Crowd Computing flyer
- Read the latest version of the "Desktop Grids for eScience Road map"
- [Apply for membership](#)
- Meet us at the [next events](#)

Become a member

[Join today our:](#)

- 257 Individual members
- 49 Organisational members

Proud participant of **IDGF**

International Desktop Grid Federation | Supported by EGI & DESICC | <http://desktopgridfederation.org>

Российское отделение IDGF

<http://desktopgrid.ru>



Сайт Российского отделения международной федерации грид-систем из персональных компьютеров

[Главная](#) [Информация](#) [Российские проекты](#) [Ссылки](#) [Форум](#)

Поиск

Конференция GRID'2014 в Дубне

Опубликовано 08.04.2014



6-я международная конференция «Распределенные вычисления и Грид-технологии в науке и образовании» пройдет в Лаборатории информационных технологий (ЛИТ) Объединенного института ядерных исследований (ОИЯИ) 30 июня — 5 июля 2014 года в Дубне.

Основная цель Конференции — обсуждение текущего состояния грид-вычислений, облачных технологий, технологий обработки больших объемов данных в России и во всем мире. Конференция предоставляет уникальную возможность для обсуждения новых результатов и развития научной кооперации.

Username:

Password:

☐ Remember Me

Log In

СВЕЖИЕ ЗАПИСИ

- Конференция GRID'2014 в Дубне
- Статья о НСКФ-2013
- Журнал «Суперкомпьютеры» опубликовал статью о конференции BOINC:FAST
- С наступающим 2014 Новым Годом!
- Учебные материалы для студентов МГУ.

Российские BOINC-проекты

Название	Описание	Организатор	Дата запуска
Gerasim@home	Тестирование методов построения логических управляющих систем, комбинаторика	BOINC.ru, Юго-Западный гос. университет	15.08.2010
OPTIMA@home	Решение задач глобальной оптимизации	ИППИ РАН, ВЦ ФИЦ ИУ РАН	12.04.2011
SAT@home	Решение задачи булевой выполнимости	ИДСТУ СО РАН, ИППИ РАН, ВЦ ФИУ ИУ РАН	29.09.2011
NetMax@home	Динамическая маршрутизация сетей	ИППИ РАН	13.11.2014
AndersonAttack@home	Криптоанализ	ИДСТУ СО РАН, ИППИ РАН	6.11.2016
XANSONS for COD	Материаловедение	Курчатовский институт	20.11.2016

Российские BOINC-проекты

Название	Описание	Организатор	Дата запуска
Acoustics@home	По известной скорости звука в слое воды у поверхности будут восстанавливаться значения скоростей звука остальных четырех слоев воды, а также расстояние от источника сигнала до его приемника.	ИДСТУ СО РАН, ИППИ РАН, ВЦ ФИУ ИУ РАН	01.04.2017
USPEX@home	Задачи материаловедения	Сколтех, ИППИ РАН, ВЦ ФИЦ ИУ РАН	04.04.2017

SAT@home: Самый успешный проект ГСПК в России

Проект **SAT@home** – исследовательский проект, нацеленный на решение сложных научных задач, сводящихся к задаче обращения булевых функций

<http://sat.isa.ru/pdsat/>

Средняя производительность – 7.393 TeraFLOPS

ИДСТУ РАН, ИППИ РАН

SAT@home is a research project that uses Internet-connected computers to solve hard and practically important problems (discrete functions inversion problems, discrete optimization, bioinformatics, etc) that can be effectively reduced to **Boolean satisfiability problem**. Currently in the project problems of inversion of some cryptographic functions used in **stream ciphers** are being solved. All cryptographic algorithms under investigation are publicly available. Corresponding tasks are randomly generated and do not contain any confidential information. In the nearest future we are going to launch an experiment for solving **Quadratic Assignment problem** within the project. Project was implemented using **DC-API** library.

SAT@home founded by

- Institute for System Dynamics and Control Theory of Siberian Branch of Russian Academy of Science, laboratory of Discrete Analysis and Applied Logic
- Institute for Systems Analysis of Russian Academy of Sciences, department of Distributed Computing - a founding member of the International Desktop Grid Federation

About

- Project personnel
- Science
- FAQ
- Publications
- Found solutions

Join SAT@home

- Read our rules and policies
- Download, install and launch BOINC client software
- When prompted, enter URL:
<http://sat.isa.ru/pdsat/>
- If you have any problems, [get help here](#)

Information for participants

- Your account - view stats, modify preferences
- Teams - create or join a team
- Certificate
- Applications
- Server status
- Project performance

Community

- Profiles
- User search
- Message boards
- Statistics
- Languages

Proud participant of



International Desktop Grid Federation

Supported by EDGI & DEGISCO

<http://desktopgridfederation.org>



User of the day



UZI

Ich komme aus der Mitte Deutschlands, dem wunderschönen **Erfurt** und betreibe die Partnerbörse

News

SAT@home in Euro Crunch 2012. Post in Science Springs

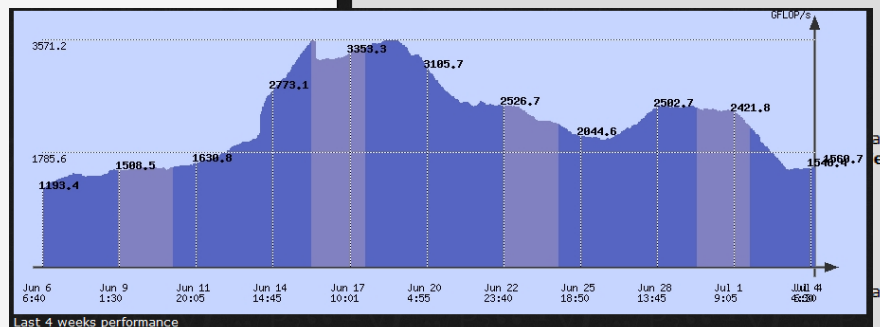
June 8, 2012, 17:25 UTC

- 2012.06.14 - 2012.06.19: EURO Crunch 2012. Stage 2. SAT@home
- Post about several projects (including SAT@home) in Science Springs

New version of application. New experiment

June 4, 2012, 14:12 UTC

- Experiment aimed at solving A5/1 cryptanalysis problems successfully ended May 5, 2012 (it took 6 months).
- New experiment has started. The goal is to find pairs of orthogonal diagonal latin squares of order 9 and 10.
- Version 1.19 was released.



New solution

April 16, 2012, 9:18 GMT

- In current experiment new solution of SAT problem was found by: **eLPeCKo, koll** from **Czech National Team**
- On March 28, 2012 we presented a report about SAT@Home at the conference **Parallel Computational Technologies**, Novosibirsk, Section C

SAT@home

Предназначен для решения вычислительно сложных задач, эффективно сводимых к SAT-задачам.

2009 г. – предыстория, решение 3 задач криптоанализа генератора A5/1 в BNB-Grid

29.09.2011 – запуск проекта.

с 21.12.2011 по 6.05.2012 – решение 10 задач криптоанализа генератора A5/1.

с 3.09.2012 – поиск пар диагональных ортогональных латинских квадратов порядка 10 (найдено 77 новых пар).

Поиск пар ОДЛК порядка 10 в SAT@home

Найдено 77 новых пар ортогональных диагональных латинских квадрата порядка 10. До этого были известны только 3 таких пары, опубликованные в статье 1992 года.

0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
1	2	0	4	3	7	9	8	5	6
7	3	5	9	0	4	8	6	2	1
3	5	6	8	9	0	4	1	7	2
4	9	7	2	6	8	1	5	0	3
5	8	4	6	7	1	3	2	9	0
8	4	9	1	2	3	7	0	6	5
6	7	3	0	1	2	5	9	4	8
9	0	1	5	8	6	2	4	3	7
2	6	8	7	5	9	0	3	1	4

0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
7	5	1	9	2	8	0	4	6	3
1	0	3	4	6	7	5	2	9	8
9	8	4	7	5	2	1	0	3	6
6	7	9	0	8	3	2	1	5	4
4	6	5	1	0	9	8	3	2	7
2	3	8	5	1	6	4	9	7	0
5	2	7	8	3	4	9	6	0	1
3	4	6	2	9	0	7	8	1	5
8	9	0	6	7	1	3	5	4	2

Первая найденная пара ОДЛК порядка 10.

OPTIMA@HOME

About OPTIMA@HOME

OPTIMA@HOME is a research project that uses Internet-connected computers to solve challenging large-scale optimization problems. The goal of optimization is to find a minimum (or maximum) for a given function. This topic is perfectly explained in the Internet. See for example [excellent explanation by Arnold Newumaier](#). Many practical problems are reduced to the global optimization problems. At the moment this project runs an application that is aimed at solving molecular conformation problem. This is a very challenging global optimization problem consisting in finding the atomic cluster structure that has the minimal possible potential energy. Such structures plays an important role in understanding the nature of different materials, chemical reactions and other fields. The details about the problem can be found [here](#). You can participate by downloading and running a free program on your computer.

OPTIMA@HOME is based at [Institute for Systems Analysis of Russian Academy of Sciences](#), department of [Distributed Computing](#) - a founding member of the [International Desktop Grid Federation](#).

- [Project Status](#).
- The project is maintained by the Distributed Computing Department team. For communication please use the **mposypkin :: at :: gmail {dot} com** address.

Join OPTIMA@HOME

- [Прочтите наши правила и политику](#)
- This project uses BOINC. If you're already running BOINC, select Attach to Project. If not, [download BOINC](#).
- When prompted, enter **<http://boinc.isa.ru/dcsdg/>**
- If you're running a command-line or pre-5.0 version of BOINC, [create an account](#) first.
- If you have any problems, [get help here](#).

Returning participants

- [Your account](#) - view stats, modify preferences
- [Teams](#) - create or join a team
- [Certificate](#)

Пользователь Дня

 [\[DPC\] hansR](#)
I am a proud member of the Dutch Power Cows } :C

News

Second experimental data set is submitted
October 03, 2014, 20:00 MSD
We submitted a new series of workunits (12289 wus). Each series of 1000 searches are expected. The precision was set to 0.0

First experimental data set is submitted
October 03, 2014, 20:00 MSD
We submitted a series of workunits (4096 wus). Each series of 1000 searches are expected. The precision was set to 0.0

New application is deployed!
October 03, 2014, 20:00 MSD
OPTIMA@home now hosts new application aimed at solving problems of the differential equations describing motion of atoms in the lattice. Modern potentials used in the simulation determine what concrete material is modeled. For each material The project is aimed at fitting parameter values of the lattice cell, the components of the elastic modulus simulation. To identify potential parameters we solve the problem of properties obtained by using the potential from known approximations, from which further methods local search select tuples with objective values less than the specified

New test set was launched!
July 08, 2014, 20:00 MSD
This is a new test set for the problem of the differential equations

Поиск конфигурации атомов с минимальной энергией взаимодействия

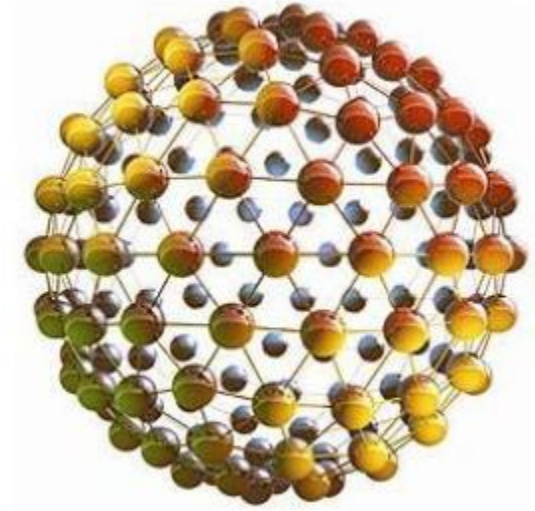
$$F(x) = \sum_{i=1}^n \sum_{j=i+1}^n v(\|x^{(i)} - x^{(j)}\|) \rightarrow \min$$

$\|x^{(i)} - x^{(j)}\|$ - расстояние между атомами i и j ;

$v(r)$ - парный потенциал;

$v_{LJ} = \frac{1}{r^{12}} - \frac{2}{r^6}$ - потенциал Леннарда Джонса;

$v_M = e^{\rho(1-r)} (\rho(1-r) - 2)$ - потенциал Морзе.



Результаты эксперимента

Решалась задача поиска минимума кластера с потенциалом Морзе ($\rho = 14$), 150 атомов. За 10 дней расчетов удалось получить минимум значение -685.809, что соответствует лучшему найденному на данный момент значению с помощью геометрически-обоснованных методов. Улучшены результаты, полученные ранее с помощью методов общего назначения.

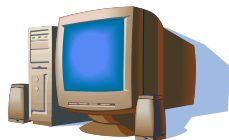
Компоненты приложения

Сервер



Скрипт, осуществляющий генерацию новых заданий и обработку полученных (periodic task)

Клиент



Программа, осуществляющая полу-локальный поиск, интегрированная с boinc-wrapper.

Задачи идентификации параметров модели

$x \in R^n$ – параметры модели

$w_i(x)$, $i = 1, \dots, m$ – набор характеристик

$\bar{w}_i$ – известные эталонные характеристики

Идентифицировать параметры означает минимизировать функцию

$$F(x) = \sum_{i=1}^m (w_i(x) - \bar{w}_i)^2$$

Потенциал Терсоффа

Когезионная энергия E_{coh} системы атомов $E_{coh} = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} V_{ij}$, где

$V_{ij} = f_C(r_{ij}) [f_R(r_{ij}) + b_{ij} f_A(r_{ij})]$ - потенциальная энергия взаимодействия между двумя частицами i и j ,

$$f_c(r_{ij}) = \begin{cases} 1, & r_{ij} < R_{ij}, \\ \frac{1}{2} (1 + \cos(\frac{\pi}{2} (r_{ij} - R_{ij}) / (S_{ij} - R_{ij}))), & R_{ij} < r_{ij} < S_{ij}, \\ 0, & r_{ij} > S_{ij}, \end{cases} \quad \text{- cutoff-функция,}$$

Члены, отвечающие за отталкивание и притяжение:

$$f_R(r_{ij}) = A_{ij} \exp(-\lambda_{ij} r_{ij}), \quad f_A(r_{ij}) = -B_{ij} \exp(-\mu_{ij} r_{ij}),$$

Многочастичный параметр взаимодействия $b_{ij} = \chi_{ij} (1 + (\beta_i \zeta_{ij})^{n_i})^{-1/2n_i}$,

$$\zeta_{ij} = \sum_{k(\neq i, j)} f_C(r_{ik}) g(\theta_{ijk}) \exp(\omega_{ij} (r_{ij} - r_{ik})^3), \quad g(\theta_{ijk}) = 1 + \frac{c_i^2}{d_i^2} - \frac{c_i^2}{d_i^2 + (h_i - \cos \theta_{ijk})^2}$$

Целевая функция для задачи оптимизации

Для регулярной повторяющейся решетки атомов произвести вычисление ряда параметров с помощью потенциала Терсоффа:

$$E_{coh} \text{ -когезионная энергия, константы упругости } C_{ij} = \frac{1}{V} \frac{\partial^2 E_{coh}^{obs}}{\partial \varepsilon_i \partial \varepsilon_j},$$

Целевая функция записывается следующим образом,

$$F(\xi_1, \dots, \xi_M) = \omega_1 (E_{coh} - E_{coh}^{obs})^2 + \omega_2 (C_{11} - C_{11}^{obs})^2 + \omega_3 (C_{12} - C_{12}^{obs})^2 \\ + \omega_4 (C_{13} - C_{13}^{obs})^2 + \omega_5 (C_{33} - C_{33}^{obs})^2 + \omega_6 (C_{44} - C_{44}^{obs})^2 \rightarrow \min$$

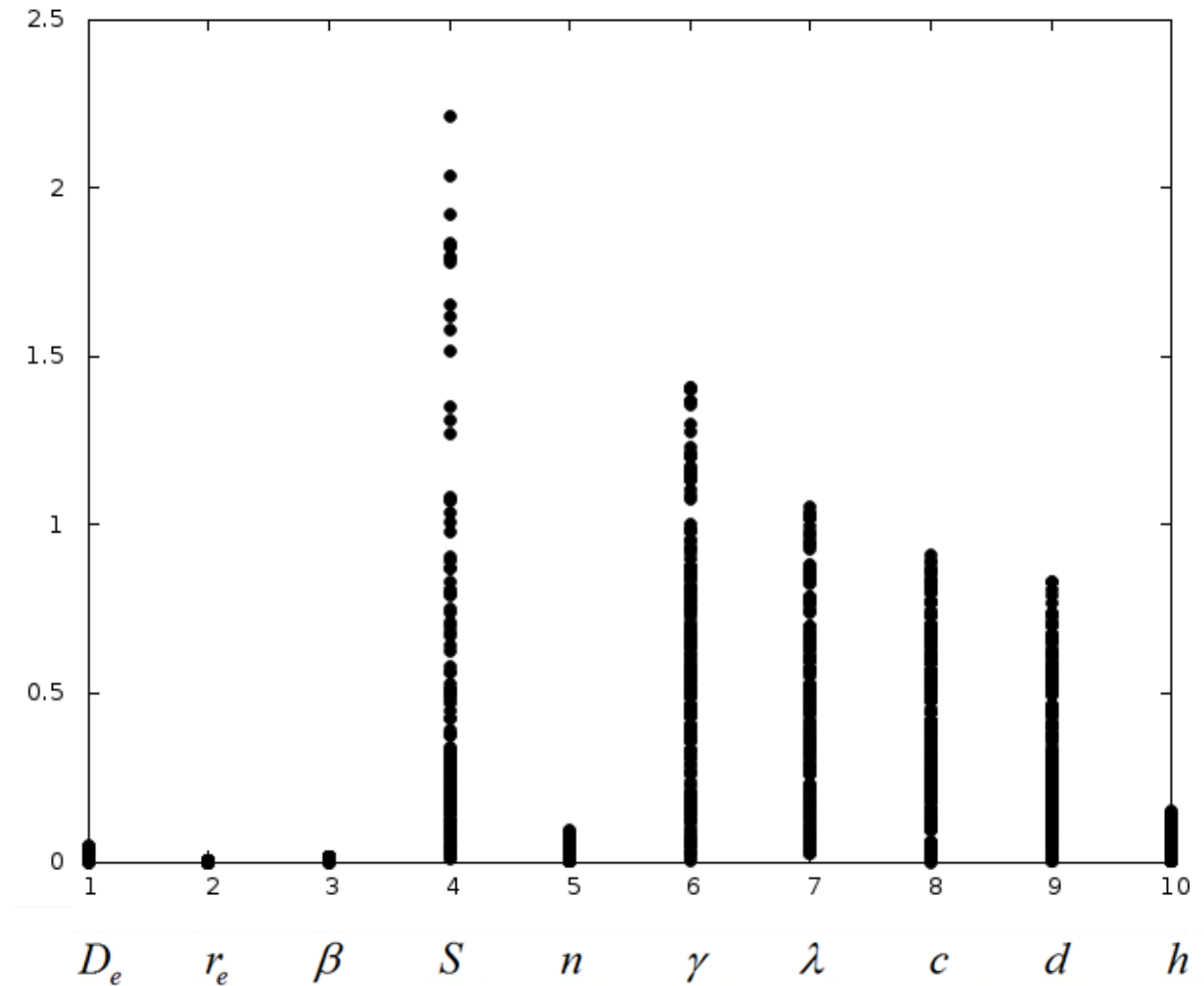
где $\xi_1, \dots, \xi_M$ - свободные параметры потенциала Терсоффа

Результаты эксперимента

$$F(x) \leq 10^{-5}$$

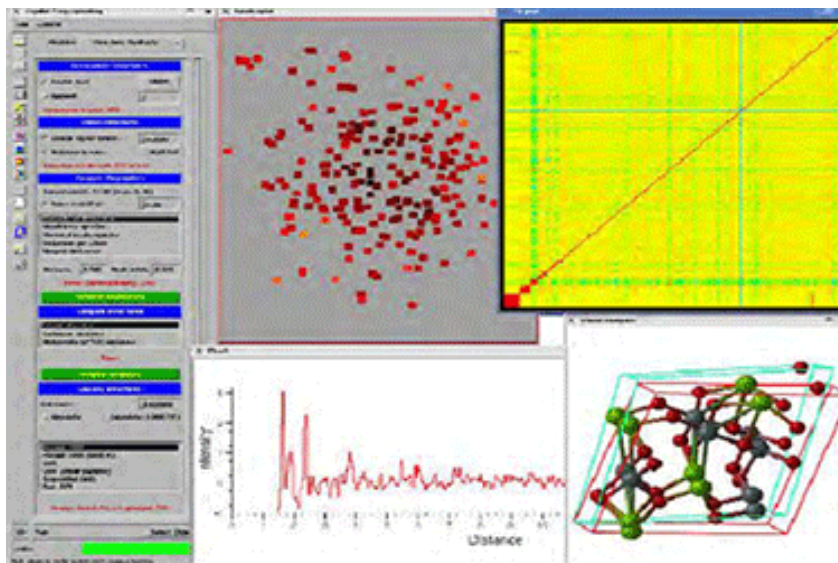
193 точки

3 дня расчета
OPTIMA@home



USPEX@home

Одним из самых эффективных методов компьютерного дизайна материалов является эволюционный алгоритм USPEX (Universal Structure Predictor, название алгоритма было выбрано как созвучное с русским словом УСПЕХ). Данный алгоритм может быть использован для предсказания структуры наночастиц, полимеров, 2-мерных кристаллов и веществ при сверхвысоких давлениях.



**Разработан в лаборатории
Артема Оганова**

<http://www.uspex-team.org>

USPEX@home

Совместный проект с группой Артема Оганова
(Skoltech, Stony Brook)



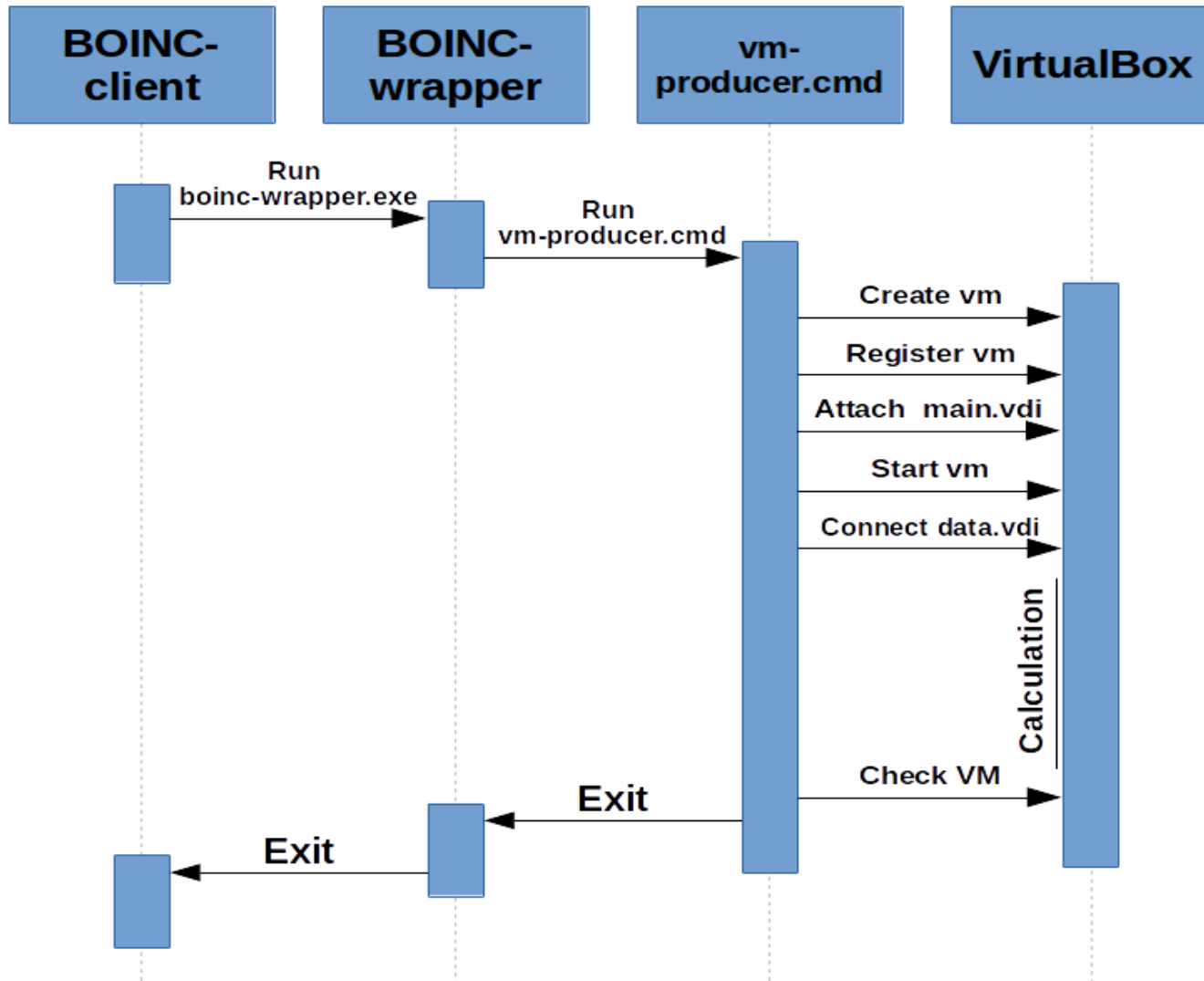
USPEX@HOME

is a research project that uses Internet-connected computers to do research in the field of computational materials design. You can participate by downloading and running a free program on your computer.

USPEX@home

- Результат совместной деятельности Сколтех, ИППИ РАН и ВЦ ФИЦ ИУ РАН
- Разработано нетривиальное техническое решение, основанное на технологии виртуализации, позволяющее защищать проприетарное программное обеспечение (VASP) от взлома при работе на стороне клиента.

USPEX@home



Спасибо за внимание!

BOINC-FAST в Петрозаводске, 2017



BOINC-FAST 2017 ждет участников!

<http://boincfast.ru>

**Труды в SCOPUS, Special issue of
Open Engeneering (WoS, SCOPUS)**