

Дармовой суперкомпьютер

Знаете ли вы, какой процесс из запущенных сейчас на вашем компьютере самый красивый? А самый вежливый? Вопрос неожиданный. Но именно так — «красивый», «вежливый» — можно перевести термин `nice`, которым обозначается показатель приоритета запущенного процесса в Linux. На моем, а также на компьютерах сотен тысяч людей по всему миру «самыми вежливыми» процессами — имеющими наибольшее значение `nice` (а значит самый низкий приоритет) — являются программы распределенных вычислений, использующие все свободное время вверенного им компьютера во благо науки.

Большую часть времени своего пребывания во включенном состоянии среднестатистический современный компьютер просто простаивает, ожидая ввода данных пользователем. Для многоядерных процессоров время между нажатиями клавиш при печати, пока пользователь читает с экрана какой-нибудь текст или ненадолго отошел от компьютера, — целая вечность.

Но, к счастью, такая громадная вычислительная мощь — миллиарды операций в секунду, помноженные на сотни миллионов компьютеров — недолго оставалась невостребованной. В наши дни каждый желающий занять свободное время своего компьютера чем-нибудь полезным вполне может сделать это, присоединившись к одному из проектов распределенных вычислений. Сами распределенные вычисления (далее РВ) — это способ выполнения каких-либо расчетов путем их разделения между множеством компьютеров.

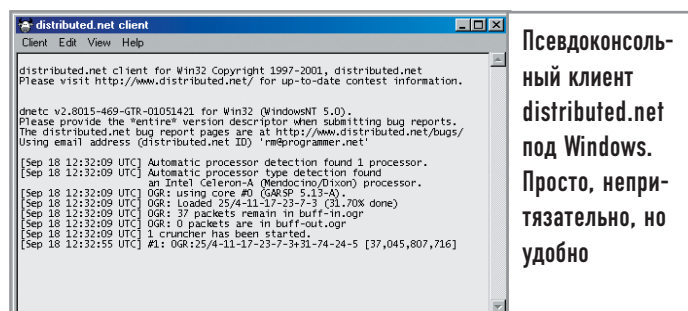
В этой статье речь пойдет о проектах РВ, работающих через Интернет и задействующих компьютеры обычных пользователей (с их ведома, разумеется) для выполнения разного рода сложных научных расчетов. Участвуя в подобных проектах, можно помочь исследовать строение белков и генетических структур, найти лекарство от рака и СПИДа или даже поспособствовать в поиске сигналов внеземных цивилизаций.

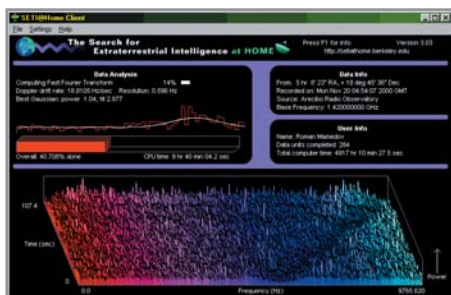
Обычной работе (или игре) на компьютере это абсолютно не мешает — используются только моменты бездействия.

И, конечно же, говорить мы будем только о тех проектах, участие в которых доступно пользователям Linux.

С чего все началось

Можно сказать, что история массовых распределенных вычислений через Интернет началась с проекта `distributed.net`. Самый популярный из его подпроектов — RC5 — занимается взломом зашифрованных одноименным криптоалгоритмом сообщений и обязан своим существованием компании RSA Data Security, которая время от времени с целью продемонстрировать надежность разрабатываемых ею алгоритмов шифрования устраивает публичные кон-

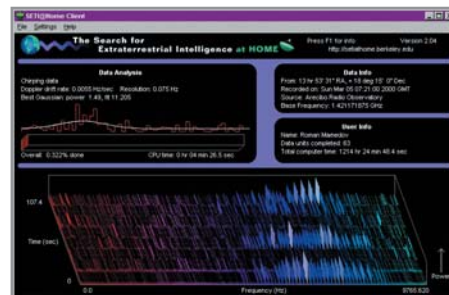




В поисках подобных аномалий на графике фанаты проекта просиживали за мониторами долгие часы



В данном случае мы засекли всего лишь понижение чувствительности приемника на опорной частоте 1420 МГц



А здесь — помехи от интерференции с наземными источниками или спутниками. Хотя, кто знает...

курсы по взлому зашифрованных ими сообщений с призами в несколько тысяч долларов. Участники проекта distributed.net уже выигрывали такие конкурсы, успешно подобрав ключ к зашифрованным алгоритмами RC5-56 и RC5-64 сообщениям. В данное время идет соревнование по взлому RC5-72, однако, по некоторым оценкам, из-за возросшей по сравнению с прежними проектами длины ключа получения результата, даже с учетом постоянного роста доступных проекту вычислительных мощностей, придется ждать несколько тысяч лет.

Хотя distributed.net существует очень давно, пределом его мечтаний до сих пор является внимание энтузиастов, либо интересующихся распределенными вычислениями как таковыми, либо криптографией и математикой. А первым проектом, получившим по-настоящему широкую известность и популярность среди обычных пользователей, стал, несомненно, SETI@home. Его руководители предложили всем желающим принять участие в поиске сигналов внеземной цивилизации. Принцип работы прост: радиотелескоп обсерватории в Аресибо постоянно записывает космический шум, ленты с ним пересылаются в «штаб-квартиру» SETI@home в Беркли, где специальные серверы (сплиттеры) нарезают данные на мелкие кусочки и рассылают компьютерам участников для обработки.

Однако высокая популярность — в проекте зарегистрировано более 4 млн ПК — обернулась для SETI@home и головной болью. Дело в том, что рост доступных проекту вычислительных мощностей шел гораздо быстрее, чем увеличение поступающих с телескопа данных для анализа и способностей сплиттеров по их пере-

работке. Поэтому, чтобы не отказывать в регистрации или блоках данных новым участникам, проекту пришлось начать рассылать одну и ту же, уже обработанную, информацию по много раз. По сведениям независимого сайта статистики (www.roving-mouse.com/setiathome), избыточность «классической» версии SETI@home достигала фантастических величин в 50–100 крат.

Куда идем?

Способ использования «лишних» вычислительных мощностей, заключающийся в повторном обсчете информации либо в искусственном и не приносящем особой пользы усложнении обработки одних и тех же данных, не понравился никому, включая самих авторов SETI@home. Гораздо логичнее было бы, если бы проект, у которого на момент обращения компьютера участника за новой порцией данных обсчитывать было бы особо нечего, смог вместо повторной отправки «старой», уже обработанной, порции честно заявить: «Работы сейчас нет, зайдите позже». А клиентская программа участника смогла бы этот ответ понять и переключиться на помощь какому-нибудь другому проекту — тому, которому дополнительные ресурсы в этот конкретный момент времени действительно необходимы. Данный подход и был реализован авторами SETI@home в их новой платформе для распределенных вычислений, получившей название BOINC.

Технические тонкости

Необходимые файлы

Самым большим среди россыпи закачиваемых проектом Rosetta@home файлов является собственно расчетный модуль Rosetta — около 7 Мбайт. Очевидно, что его загрузка потребует лишь при первоначальном подключении к проекту, ну и при выходе его более новых версий. Вторым по размеру является 6-мегабайтный файл с загадочным названием `bbdep02.May.sortlib.gz`, кото-

рый не обновлялся аж с мая месяца (возможно, даже 2002 года) и не собирается, будем надеяться, слишком часто обновляться и в дальнейшем. Такое поведение довольно характерно для распределенных проектов: скачанные при первоначальном подключении файлы в дальнейшем подвергаются повторному использованию настолько часто, насколько это является возможным.

Детали

Ингибитор для вычислений

Помимо рассылки одних и тех же данных для борьбы с «избытком» вычислительной мощности существует и другой способ. Руководители проекта SETI@home внесли в третью версию клиентского ПО новые, гораздо более тщательные и медленные алгоритмы анализа блоков данных. Но, по мнению неко-

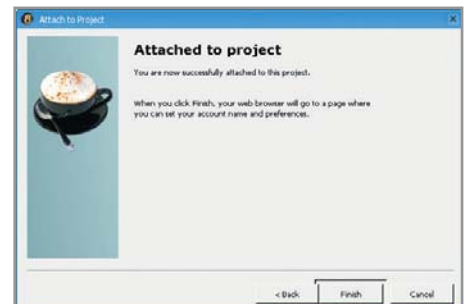
торых, с точки зрения возможности ими что-то обнаружить эти алгоритмы являлись довольно-таки бесполезными. При этом рост вычислительной мощности продолжался, и вскоре проект достиг показателей избыточности, многим уступающим тем, что существовали еще до выхода «замедленной» версии.



Чтобы присоединиться к вычислениям, прежде всего необходимо указать URL главной страницы проекта



Зарегистрировать новый аккаунт теперь можно и из самого клиента — ранее это приходилось делать через сайт



Компьютер готов трудиться во благо науки!

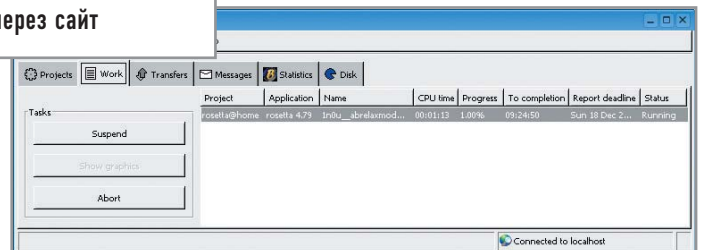
| BOINC | | <http://boinc.berkeley.edu> |

Berkeley Open Infrastructure for Internet Computing (BOINC) — это весьма успешная и уже очень популярная как среди авторов, так и среди участников вычислительная платформа, задача которой — унификация общих по функциональности модулей клиентского и серверного ПО различных проектов. Разработчикам распределенных научных проектов, ученым — специалистам в области биологии, медицины, криптографии и прочих наук — она пришлась по вкусу благодаря тому, что при ее использовании им больше не нужно было разбираться с такими скучными и бесконечно далекими от области их исследований вещами как организация системы регистрации пользователей, разработка системы статистики, отладка взаимодействия клиентского и серверного ПО и т. д. Все уже готово — придумано, написано и отлажено авторами BOINC. Остается брать и пользоваться. Предлагается использовать любое ПО BOINC — от клиентского модуля до серверных PHP-скриптов — в исходниках, под лицензией GNU GPL, а разобраться во всем этом поможет доступная на сайте BOINC подробнейшая документация по созданию на основе этой платформы собственного проекта PB с нуля.

| Rosetta@home | | <http://boinc.bakerlab.org/rosetta> |

Итак, пора перейти от теории к практике. Рассмотрим процесс присоединения к работающему на платформе BOINC проекту на примере запущенного недавно Rosetta@home.

Это научное исследование, проводимое одной из лабораторий Вашингтонского университета, результатами которого должны стать новые методы (алгоритмы), помогающие с высокой точностью заниматься моделированием, предсказанием и дизайном белков. Наличие проверенных алгоритмов моделирования поможет исследователям разрабатывать лекарства для лечения различных болезней, вызываемых нарушениями структуры белка. Своим названием проект обязан лежащему в основе его клиентского ПО модулю Rosetta, который был изначально создан для предсказания трехмерной структуры белка из его аминокислотной последовательности. Со временем в Rosetta появились функции дизайна и предсказания белковых комплексов. Авторы проекта надеются продолжить



Окно BOINC Manager содержит информацию о назначенных данному компьютеру заданиях

постепенно улучшать используемые в Rosetta физическую модель и алгоритмы поиска. А помочь им в этом должны результаты исследований Rosetta@home.

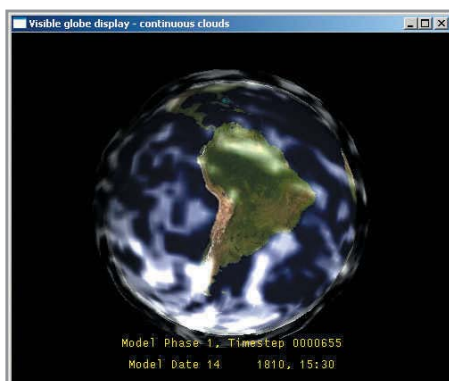
Для участия в проекте нам прежде всего понадобится базовый клиент BOINC. Скачиваем с сайта <http://boinc.berkeley.edu> файл с самой свежей версией — на момент написания статьи это boinc_5.2.7_i686-pc-linux-gnu размером 3,4 Мбайт — и запускаем. Дистрибутив создает в текущем каталоге подкаталог BOINC, куда и распаковывается все свое содержимое, после чего сообщает, что для запуска консольной версии BOINC следует использовать скрипт `run_client`, а для запуска версии с графическим интерфейсом — `run_manager`. Кроме того, он прописывает в этих скриптах полный путь к созданному подкаталогу, так что при необходимости куда-либо его переместить нужно это учесть и соответствующим образом их подправить. Загружаем графическую версию BOINC. Поскольку этот первый за-

Технические тонкости

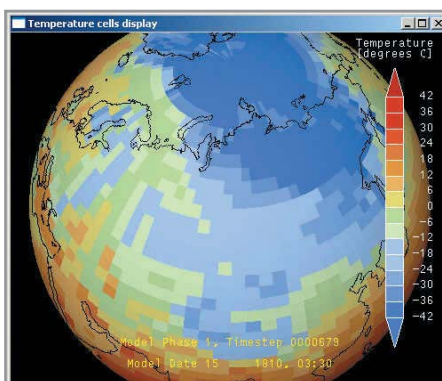
Особенности авторизации

Стоит отметить, что схема авторизации по e-mail и паролю для BOINC относительно нова. Ранее в основанных на нем проектах использовалась авторизация по секретному Account Key, выступавшему одновременно в роли и уникального идентификатора, и пароля на изменение информации. Кое-где такая схема используется и по сей день (в этом случае клиент BOINC

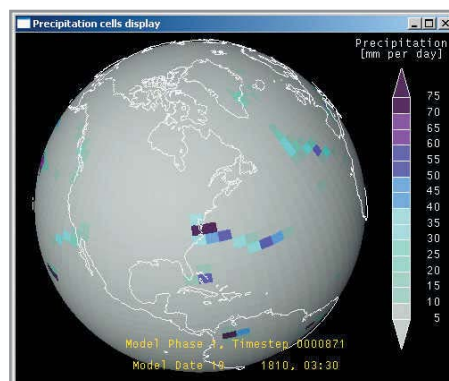
корректно ее обнаруживает, и вместо поля с вводом пароля появляется поле для Account Key). Существенным ее недостатком является отсутствие возможности зарегистрировать новый аккаунт прямо из клиента: необходимо зайти на сайт проекта, зарегистрироваться там, дождаться электронного письма с заветным Account Key и только после этого подключаться к проекту.



Climate Prediction показывает облачность...



...температуру...



...и влажность

пуск, нам будет предложено указать адрес главной страницы проекта, к которому мы желаем присоединиться.

В следующем окне мастера нужно либо указать e-mail и пароль к уже созданному в проекте аккаунту, либо зарегистрировать новый (в этом случае пароль придется ввести дважды).

После создания нового аккаунта BOINC предложит задать его параметры, открыв в браузере раздел настроек на сайте проекта. Впрочем, сделать это можно и позже, просто зайдя на сайте проекта в раздел «Your Account» и написав выбранные при регистрации адрес почты и пароль. Там же указывается выделяемое под проекты BOINC место на диске, устанавливается режим работы клиента (допустим, можно сделать, чтобы он работал только в определенные часы), настраивается отображаемая графика (если она есть) и т. д. Во всех проектах BOINC есть не только «личный зачет», в котором участники выстраиваются в порядке количества набранных ими за обработку блоков данных очков, но и командный, где соревнуются образованные ими команды. Поэтому там же, в разделе настроек аккаунта, есть возможность либо присоединиться к одной из команд (например, к «Russia», объединяющей российских участников проекта), либо создать свою.

Вернемся к подключаемому нами проекту. Сразу после присоединения можно открыть закладку «Transfers» и увидеть, что BOINC уже вовсю занялся закачкой модулей, необходимых для участия в Rosetta@home и занимающих около 17 Мбайт. Важно отметить, что подобный объем трафика довольно-таки не типичен для проектов PB. Обычно совокупный размер всех скачиваемых даже во время первоначального присоединения к какому-либо проекту файлов в разы меньше этого значения, а если он посвящен криптографии или математике, вовсе практически равен нулю.

На закладке «Work» уже отображается процесс обработки текущего блока данных (пока нулевой — состояние «Downloading»), затраченное на его обработку время и так называемый дедлайн, то есть финальная дата, до которой нужно обязательно посчитать этот блок и вернуть результат, иначе его отправят на обработку кому-нибудь другому.

К сожалению, каких-либо возможностей визуально оценить процесс моделирования (например, своими глазами увидеть создаваемую модель белка) Rosetta@home в данное время не предоставляет. Относится это не только к данному проекту, но и к большинству других, имеющих версии под Linux. Среди опробо-

ванных мною BOINC-проектов графику под Linux на текущий момент показывает только Einstein@home. Однако в скором времени ситуация наверняка изменится: последняя новость на сайте Rosetta@home сообщает о начавшемся тестировании новой версии скринсейвера (то есть версии расчетного модуля с полноценной графической частью, наверное, и под Linux тоже). От других проектов тоже логично ожидать выпуска в скором будущем Linux-версий с поддержкой визуализации расчетов, ведь в большинстве случаев она написана под OpenGL, который портируется между платформами довольно просто.

Но что-то мы отвлеклись. Возвращаемся к клиенту BOINC и видим, что закачка расчетных модулей Rosetta уже завершилась и проект начал расчеты. Теперь можно свернуть окно BOINC Manager и заняться своими делами. Rosetta, равно как и любой другой современный проект распределенных вычислений, другим запущенным на компьютере программам никогда не мешает. Чтобы удостовериться, можно открыть тор и увидеть, что процесс rosetta_4.79, хотя и занимает 98% CPU, при этом имеет самый низкий из возможных приоритетов, а значит, как только процессор становится нужен любой другой программе, Rosetta тут же в нужном объеме его освобождает.

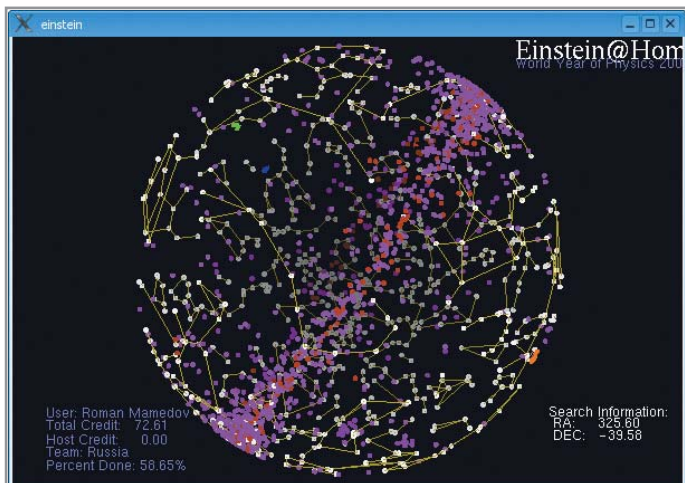
Чтобы воспользоваться основным преимуществом BOINC — динамическим переключением между проектами, — нужно

Визуализация в Linux

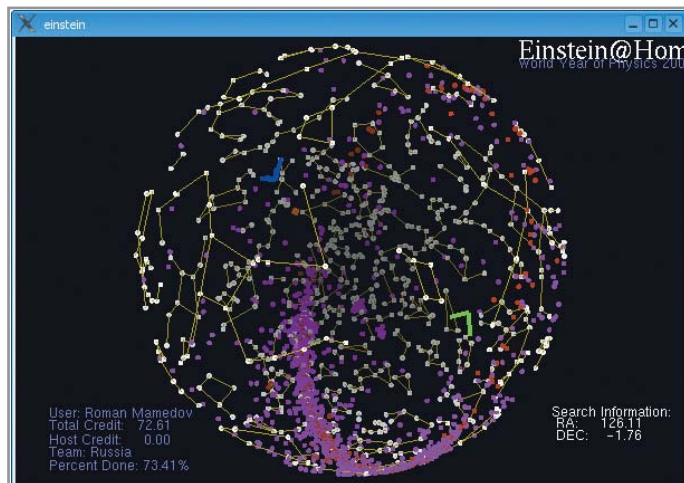
Временные недостатки

К сожалению, Linux-версии многих расчетных модулей основанных на BOINC проектов не предоставляют пока никакой возможности визуально оценить процесс расчета (покрутить модель молекулы, узнать погоду на виртуальном глобусе Земли, полюбоваться на пики графика с космическим шумом). В общем случае Windows-версия проекта имеет красивую визуализацию, а в Linux кнопка BOINC-менеджера «Show graphics» отключена. Это от-

носится к LHC@home, Climate Prediction и SETI@home и связано не только и, наверное, даже не столько с полным вниманием к Linux-версиям со стороны авторов, сколько с совсем недавним переходом BOINC со старой, четвертой, на новую — пятую версию платформы. По сообщениям участников, в четвертой версии BOINC графику показывали гораздо больше проектов, а в пятой кое-где ее нет даже под Windows.



Точки — это звезды, а полоса поперек сферы — Млечный путь



Видны два из трех маркеров, символизирующих позиции зенитов для собирающих информацию приборов

присоединиться еще хотя бы к одному проекту, а лучше к нескольким. Не знаю, кому как, но, по-моему, участвовать одновременно в нескольких проектах гораздо интереснее, чем в каком-то одном, тем более что ничего сложного в этом нет: процесс подключения у всех идентичен описанному на странице Rosetta@home.

Climate Prediction | www.climateprediction.net |

Проект Climate Prediction, как следует из его названия, занимается моделированием и предсказанием климата на Земле. Упрощенно можно сказать, что результатом работы проекта должен стать «прогноз погоды» на 50 лет вперед. Его руководители хотят определить, насколько точны существующие методы долгосрочного предсказания погоды и насколько сильно на их точность влияют погрешности в исходных данных.

Работающий на платформе BOINC вычислительный модуль проекта занимается моделированием долгосрочных изменений климата Земли. Все участвующие компьютеры получают немного разные входные данные, поэтому итог работы каждого из них будет уникальным. Руководители проекта выберут среди полученных результатов наиболее точно отражающие произошедшее до 2000 года и сделают вывод о наиболее вероятных изменениях, ожидающих нас в будущем.

Этот проект является, несомненно, рекордсменом по количеству скачиваемых при подключении данных. Сразу после присоединения BOINC-закладка «Transfers» проинфор-

мировала меня о том, что проект climateprediction.net заказал получение файлов общим объемом аж в 44 Мбайт! Поэтому, если вам трафик дорог как память, возможно, стоит от участия в этом проекте отказаться. Справедливости ради стоит сказать, что единожды закачанный блок данных «Climate Prediction» будет считаться очень долго — как минимум месяц, и это на довольно быстром компьютере, причем работающем в круглосуточном режиме. А при расчете последующих блоков скачивать большую часть уже полученных данных повторно не требуется.

Скриншоты приводятся из Windows-версии этого клиента; Linux-графика, когда она появится (по слухам, для некоторых типов расчетных блоков она уже доступна), вряд ли будет сильно отличаться.

Einstein@home | <http://einstein.phys.uwm.edu> |

Проект Einstein@home занимается составлением для всего неба атласа излучаемых звездами-пульсарами гравитационных полей. Такой атлас должен помочь в проверке гипотезы Эйнштейна, предсказывающей теоретическую возможность существования гравитационных волн, возникающих при столкновениях черных дыр и взрывах звезд. Пока никому из ученых обнаружить эти волны не удалось.

Данные для анализа будут поступать из Лазерной интерферометрической гравитационно-волновой обсерватории (LIGO). Рабочая часть задействованной в проекте обсерватории LIGO состоит из двух точнейшим образом установленных зеркал и путешествующего между ними луча лазера. При наличии волн в гравитационном поле путь лазера чуть-чуть отклоняется, что позволяет ученым замечать и измерять эти волны. Большее расстояние между зеркалами означает большую чувствительность интерферометра, поэтому зеркала LIGO установлены на расстоянии четырех километров друг от друга. Это позволяет фиксировать изменения положения луча лазера вплоть до одной стомиллионной диаметра атома водорода.

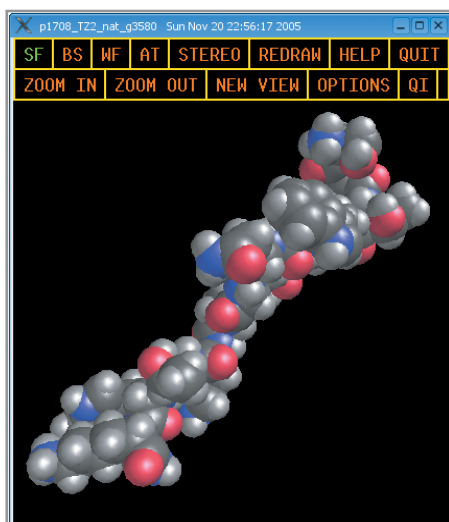
Этот проект, как упоминалось выше, на сегодняшний момент является единственным, имеющим полноценное отоб-

Цитата

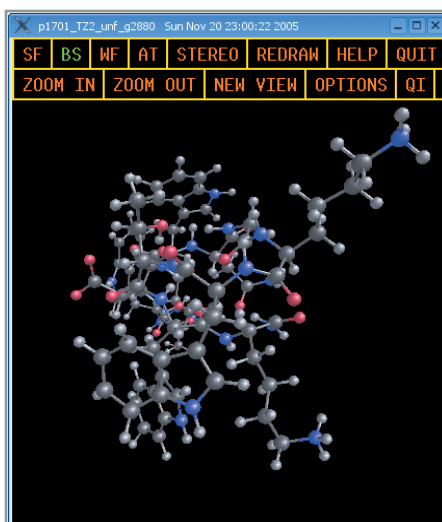
Дэйв Фрейм о Climate Prediction

«Мы хотим исследовать не-большие изменения в общей модели, — говорит координатор проекта, доктор Дэйв Фрейм из Оксфордского университета. — Единственный способ сделать это — провести очень много эксперимен-

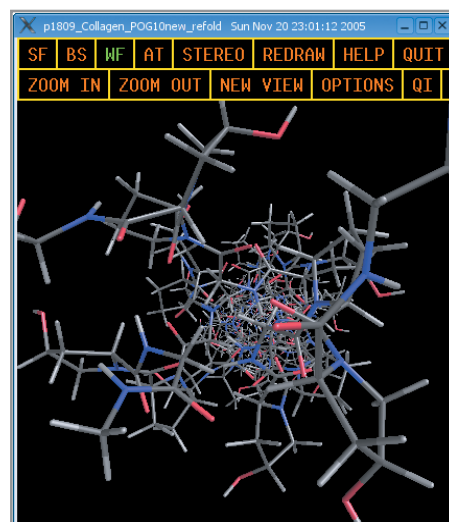
тов, проверить все возможные варианты. То есть сделать то, что заняло бы у суперкомпьютера несколько тысяч лет. Но, решая это как распределенную задачу, мы сможем сделать все гораздо быстрее».



Внешнюю структуру белка проще всего оценить в режиме fpd по умолчанию



Второй режим позволяет лучше рассмотреть его внутренние связи



Исследуемые структуры часто бывают весьма сложными

ражение визуализации расчетов как под Windows, так и под Linux. Русский перевод описания того, что означают различные элементы этой визуализации, можно найти по адресу <http://distributed.ru/?einstein.starsphere>.

| Folding@home |

| <http://folding.stanford.edu> |

Можно сколько угодно говорить о текущем глобальном переходе на BOINC, однако существуют как участники, так и разработчики PB, которым BOINC по разным причинам либо не нравится, либо просто не приносит, по их мнению, никакой пользы по сравнению с «традиционной» архитектурой проекта. Особенно в том случае, если последняя уже давно запущена и успешно функционирует.

Среди таких проектов наиболее примечательным является Folding@home. Его разработчики сразу же после появления BOINC заявили, что никаких преимуществ от перехода на эту платформу они не видят, а когда увидят — просто создадут дополнительную BOINC-версию своего клиента, оставив наравне с ней и первоначальную. Кстати, на данный момент BOINC-версия клиента этого проекта все-таки уже существует и проходит бета-тестирование.

Цель Folding@home — получение более точного представления о болезнях, вызываемых дефектными белками. Изучаются белки, имеющие отношение к болезни Альцгеймера, Паркинсона, диабету типа II, коровьему бешенству и рассеянному склерозу. Поняв, почему возникают дефекты в белках одного типа, ученые смогут выяснить, каким образом это происходит и с другими белками. Все желающие имеют свободный доступ к результатам. На сайте выкладываются все публикации, ролики смоделированных процессов и т. п.

Клиент состоит из двух частей — оболочки и расчетного ядра. Некоторые из расчетных ядер оптимизированы под расширенные наборы инструкций — SSE и 3DNow! либо SSE2. Но руководители проекта на этом останавливаться не собираются. Исследуется возможность создания версии клиента, использующей для расчетов графический процессор видео-

платы, и даже разрабатывается версия, задействующая специальную плату-ускоритель PCI.

На сайте <http://folding.stanford.edu> под Linux предлагается только консольная, без всякой графики, версия клиента. Однако для Folding@home существует несколько очень красивых сторонних программ для визуализации расчетов (работающих в том числе и под Linux), например fpd (<http://home.comcast.net/~wxdude2/rph/fah.html>).

| Другие проекты |

К сожалению, в рамках статьи невозможно описать и половины всех работающих на BOINC проектов, не говоря уже о гораздо более многочисленных, имеющих «традиционную» архитектуру.

Если тема распределенных вычислений вас заинтересовала, но описанного здесь показалось недостаточно, советую посетить официальный сайт BOINC (<http://boinc.berkeley.edu>), на котором перечислены все проекты, использующие в работе эту платформу. Например, стоит зайти на сайт <http://distributed.ru>, где можно найти русскоязычные описания наиболее популярных проектов, новости о них и довольно активный форум; и, конечно же, монструозный ресурс <http://distributedcomputing.info>, где есть краткие описания, наверное, всех проектов — функционирующих сейчас, когда-либо существовавших, а также еще только планируемых к запуску.

В общем, присоединяйтесь! |

Сущность Rosetta

О расчетном ядре

Ядро Rosetta — это физическая модель макромолекулярных взаимодействий и алгоритмов поиска структуры с наименьшей энергией для заданной аминокислотной последовательности (при предсказании структуры белка),

комплекса «белок-белок» (при расчете стыковки белков), а также поиска аминокислотной последовательности с наименьшей энергией для заданной белковой структуры или комплекса «белок-белок» (при дизайне белков).