

Az OSCAR és a bioinformatika

Az új fürt-telepítő és -irányító eszközökkel egy óra alatt létrehozhatunk és a kutatómunkánk szolgálatába állíthatunk egy 64 csomópontos számítógépfürtöt.

Az OSCAR (*Open Source Cluster Applications Resources*) nyílt forrású fürtöző programkészlet projekt körülbelül négy éve indult. Az elv 2000 januárjában került először előterjesztésre, az első szervezeti találkozóira pedig ugyanez év áprilisában került sor. A csoport felismerte, hogy a fürtök összeállítása meglehetősen időrabló és rutinszerűen ismétlődő tevékenység, ezért a projekt céljává ennek a folyamatnak az önműködővé tételét tűztük ki. A csoport azt remélte, hogy ennek hatására szélesebb körben terjed majd el a fürtök használata, és alkalmassá válik a tudományos életben és a magánszektorban való alkalmazásra is.

Az OSCAR projektet a nyílt tagsággal rendelkező nem hivatalos testület, az OCG (*Open Cluster Group*) tanácsadó csoport felügyeli. Az OCG azért küzd, hogy növelje a fürtözés alkalmazhatóságát a *nagyteljesítményű számítások (HPC, high-performance computing)* kutatásának és fejlesztésének területén. A csoport – az OSCAR projekthez hasonlóan – a tudományos élet és az ipar jelles képviselőinek az irányítása alatt áll. Legfontosabb tagjai közt találjuk a következő intézményeket: *Bald Guy Software, BC Genome Tudományos Központ, Dell, Indiana Egyetem, Intel, Louisiana Műszaki Egyetem, Oak Ridge Nemzeti Laboratórium, Revolution Linux* és a *Sherbrooke Egyetem*.

Az OSCAR-csoport az OCG egyik munkacsoportja. Emellett további projektek is működnek, így a *HA-OSCAR (high-availability, magas rendelkezésre állású)*, *Thin-OSCAR (lemez nélküli)* és *SSS-OSCAR (skálázható)*. Az OCG-ről további információkat a cikkhez tartozó, a világhálón elérhető hivatkozások közt találhatunk.

Az OSCAR legelőször 2001 áprilisában jelent meg, azóta két fő változatot bocsátottunk ki. A kibocsátási ciklus rendszerint egybeesik az évente novemberben megrendezésre kerülő *SuperComputing* konferenciával. Az írás idején aktuális változat a 3.0, amit a *SuperComputing04*-re tervezett 4.0 változat kibocsátása követne.

Az OSCAR célja, hogy a HPC-fürtök telepítésének, programozásának és karbantartásának lehető legjobb eszközt nyújtsa a felhasználók számára. Sok olyan nyílt forrású összetevőt találunk, amely jól működik egy HPC-környezetben, de ehhez szükség van a megfelelő beállítások elvégzésére. Az OSCAR jelenti az összekötő anyagot ezeknek az

összetevőknek egy jól működő eszközkészleté történő egyesítéséhez. A projekt a közepes méretű (50 és afeletti csomópontokból álló) fürtöket célozza meg, mivel a visszajelzések alapján a manapság használt fürtök többsége ebbe a méretkategóriába esik.

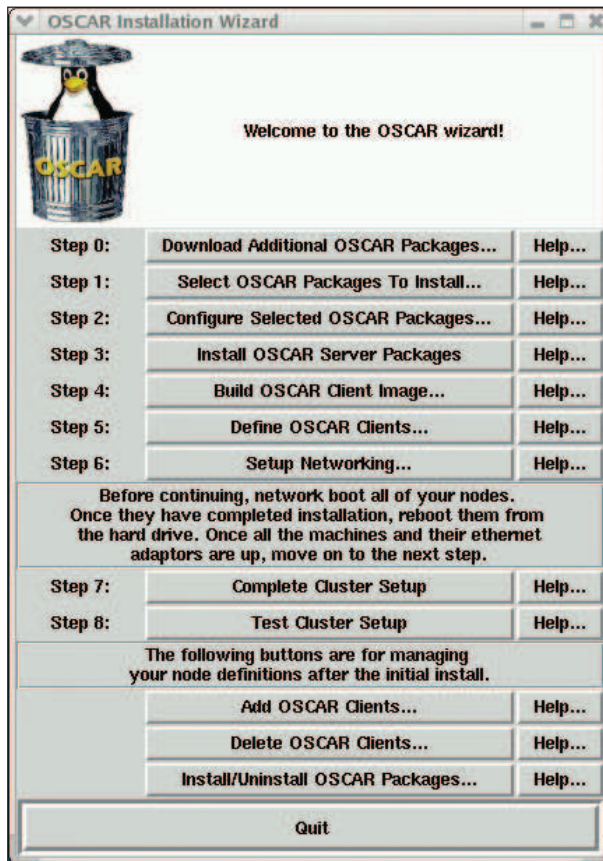
A OSCAR a következő összetevőkből épül fel:

- *Rendszerfelügyelet: System Installation Suite (SIS, rendszertelepítő csomag), Cluster Command and Control (C3, fürtvezérlő parancsfelület)* és az *OPIUM (felhasználókezelő)*.
- *HPC-eszközök*: párhuzamos programozói könyvtárak: *MPICH, LAM/MPI* és a *PVM*; kötegelő rendszerek: *OpenPBS/MAUI, Torque* és az *SGE*; megfigyelő eszközök: *Ganglia* és *Clumon*; és egyéb külső fejlesztésű OSCAR-csomagok.
- *Alapinfrastruktúra/irányítás: OSCAR Database (ODA, OSCAR adatbázis)* és az *OSCAR Package Downloader (OPD, OSCAR csomagletöltő)*.

Az OSCAR fejlesztői egymástól távol dolgoznak, az aktuális fejlesztési kérdéseket heti telefonkonferenciákon vitatják meg. A csoport ezen kívül évente rendez olyan találkozót, ahol a jövőbeli változatokba kerülő új tulajdonságokat találják ki és beszélnek meg. Évente egy tudományos tanácskozás is megrendezésre kerül, rendszerint a *HPCS* (a nagyteljesítményű számítási rendszerek és alkalmazások nemzetközi tudományos tanácskozása) keretein belül, amelyen a felhasználók adhatják elő az OSCAR-ral kapcsolatos tapasztalataikat és a HPC-vel kapcsolatos fejlesztési eredményeiket. A második *OSCAR Symposium* 2004 májusában, a kanadai *Winnipegben* került megrendezésre, az itt készült anyagok bárki számára hozzáférhetőek.

Bevezetés a bioinformatikába

A bioinformatika a biológia és a számítástudomány egyesüléséből keletkezett, gyorsan fejlődő tudományterület, amely nagy lehetőségeket hordoz a HPC területe számára. Egyszerűen megfogalmazva a bioinformatika az olyan biológiai adatok számítógépes eljárásokkal és rendszerekkel történő feldolgozásával foglalkozik, mint a *DNS, RNS*, a fehérjék és egyéb szabályozó alkotóelemek.

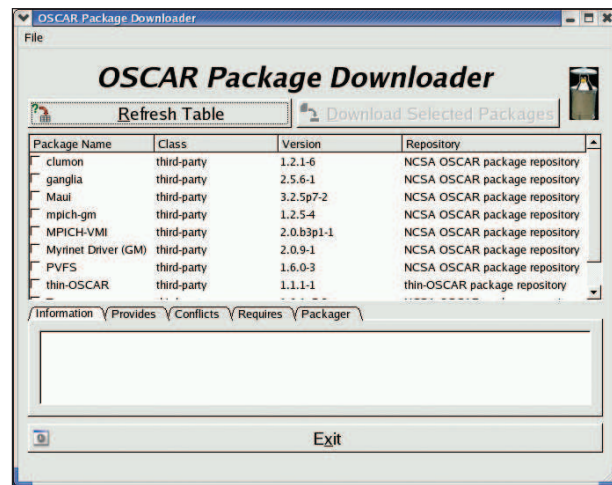


1. kép Az OSCAR telepítésének főmenüje. Kevesebb, mint tíz lépés, és a fürt készen áll a számítások megkezdésére!

A biológiai adatok rendszerint karaktersorozatok, amelyek elemzése rendszerint karakterlánc-műveleteket jelent, ezért a legtöbb bioinformatikus munkaeszközéül a *Perl* nyelvet választotta. Sok nyílt forrású *Perl* programot író programozó járul hozzá a *Bioperl* kifejlesztéséhez, amely a bioinformatikai elemzésekre specializálódott *Perl*-modulok gyűjteménye. A *Java* nyelvet nagyobb, főleg grafikai felületet igénylő projektekhez használják. Megfigyelhető még a területen a *Python* térnyerése is, ahogy egyre több programozó fedezi fel ennek a viszonylag új, de nagyon hatékony nyelvnek a könnyű használhatóságát és jó olvashatóságát. A bioinformatikus közösségben nagyon elterjedt a *Linux* fürtök használata, mivel az elemzések egyre hosszabb ideig futnak és gyakran ismétlődő feladatokat jelentenek. A *Linux* fürtök ideális eszközt jelentenek az ilyen egymástól függetlenül futtatható, párhuzamos feladatok végrehajtására. Ezek nem tekinthetők igazi párhuzamos programoknak, mivel nincs szükségük az *MPI*-hoz hasonló párhuzamos programozói könyvtárakra. A bioinformatika elterjedt eszközét az olyan fürtök jelentik, melyek több parancsfájl és algoritmus futtatnak különböző bemenetekkel, külön címzési tartománnyal rendelkező processzorokon.

Egy jellemző OSCAR-telepítés áttekintése

Egy fürt telepítése az *OSCAR* eszközkészlettel egyszerű folyamat, ha telepítettünk korábban *Linuxot*, nem sok gondunk adódhat.



2. kép Az OSCAR Package Downloader (csomagletöltő) – ebben a menüpontban van lehetőségünk további csomagok letöltésére

Jelenleg az *OSCAR* három hivatalosan támogatott *Linux* rendszercsomagra telepíthető: *Red Hat 8.0*, *Red Hat 9.0* és *Mandrake 9.0*. A *Linux* telepítésnek tartalmaznia kell valamilyen *X* ablakrendszert, amilyen a *KDE* vagy a *GNOME*, ettől eltekintve egy tipikus, programfejlesztő eszközökkel telepített munkaállomás beállításainak megfelelőnek kell lennie.

Miután feltelepítettük és beállítottuk a *Linuxot* a központi csomópont gépén, letölthetjük az *OSCAR* tar-csomagját a projekt honlapjáról és a kicsomagolás után elvégezhetjük a beállító, `make` és `make install` lépéseket.

Alapértelmezésben az *OSCAR* telepítése az `/opt/oscar` könyvtárba történik, de ezt a `configure` parancs `-prefix` beállításával megváltoztathatjuk. Az *OSCAR* telepítését követően elindíthatjuk az *OSCAR* varázslót, amely lépésről lépésre végigvezet a fürtünk beállításán.

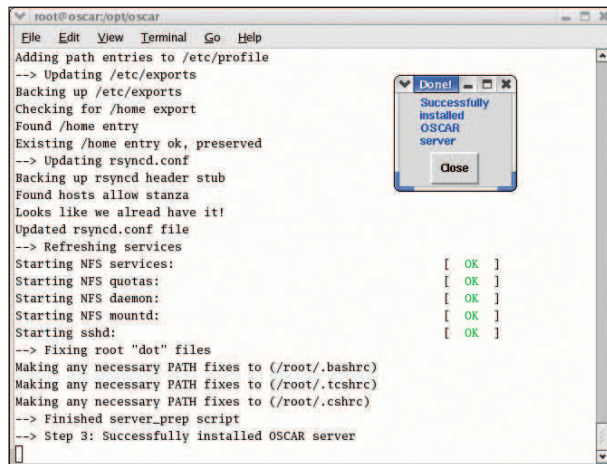
A varázsló indításához lépünk be az `/opt/oscar` könyvtárba majd gépeljük be az

```
./install_cluster ethx
```

parancsot, ahol az `ethx` a fürt hálózatának felületét jelenti. Az *OSCAR* számos előre összeállított csomaggal érkezik. A más gyűjteményből származó csomagok is érdeklődésre tarthatnak számot. Ezek letöltéséhez kattintsunk az *OSCAR* varázsló *Download Additional OSCAR Packages (további OSCAR-csomagok letöltése)* feliratú gombra és válasszuk ki a csomago(ka)t.

Ezután kiválaszthatjuk a telepíteni kívánt *OSCAR*-csomagokat. A csomagok három fő csoportba sorolhatók: központi csomagok, tartozék-csomagok és külső fejlesztésű csomagok. A központi csomagokat mindenképpen telepítenünk kell, ezek kijelölését nem tudjuk törölni. A tartozék-csomagok azok, amelyeket az *OSCAR* fejlesztőcsapata telepítésre javasol, a maradékot pedig a külső forrásokból származó csomagok alkotják.

A csomagok beállításait a *Configure Selected OSCAR Packages (a kiválasztott OSCAR-csomagok beállításai)* menüben változtathatjuk meg.



3. kép Egy beavatkozást nem igénylő lépés: a kiszolgáló csomagjainak telepítése

A következő lépés az *OSCAR* kiszolgáló csomagjainak (*Server Packages*) telepítése. Ez alapvetően a kiszolgálón használt csomagok telepítésére szolgál, és nem igényel felhasználói beavatkozást. A telepítés befejezéséről egy ablak megjelenése tájékoztat.

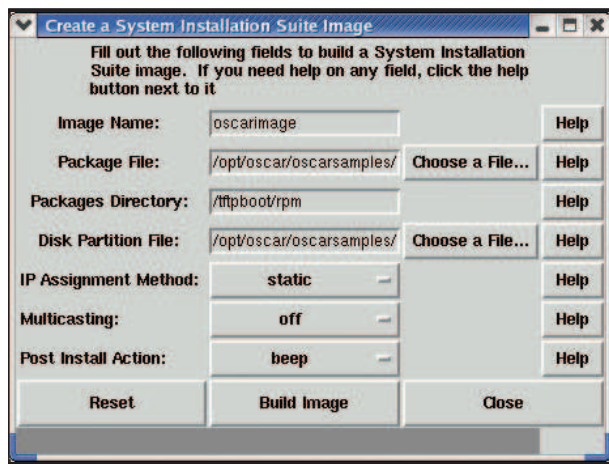
Most következik az érdekes rész. A *Build OSCAR Client Image* lépéssel létrehozhatunk egy ügyfél-képfájlt. Itt beállíthatunk néhány lehetőséget a létrehozandó képfájl számára, majd feltölthetjük a képfájlt az ügyfélcsomópontokra. Megadhatjuk az alapképfájl *RPM*-csomagjainka listáját, eldönthetjük, hogyan legyen a merevlemez particionálva, és elvégezhetjük az IP-cím hozzárendelését. Végül kiválaszthatjuk a képfájl áthelyezését követő műveletet, például a gép újraindítását.

A *Define OSCAR Clients* (az *OSCAR*-ügyfelek megadása) lépésben megadhatjuk a tartománynevet, az ügyfél nevét, a munkafolyamathoz használandó csomópontok számát és egyéb hálózati beállításokat. Az *Add clients* feliratú gombra kattintva érvényesítjük a beállításokat és már majdnem kész is a fürt.

A következő lépés a fürt hálózatának üzembe helyezése. Itt indíthatjuk el az ügyfélcsomópontokon a rendszert a *PXE* vagy floppy segítségével, majd az *OSCAR* központi csomópontja összegyűjti a *MAC*-címekeket, amiket a konkrét gépekhez rendelhetünk. Ezután rögtön megtörténik az ügyfélgépek képfájljainak üzembe helyezése. A merevlemez sebességétől függően ez gépenként 10-30 percet vehet igénybe. Egy fürt üzembe helyezésekor egyszerre több csomóponton is folyhat ez a művelet. Mi rendszerint 10 gépen indítjuk el párhuzamosan, hogy elkerüljük a központi csomópont túlterhelését. Ezzel a fokozatos eljárással egy 64-csomópontos fürt üzembe helyezése nem tarthat tovább egy óránál.

A csomópontok képfájljainak felhelyezése és a gépek újraindítása után folytathatjuk a következő lépéssel, amely *A fürt beállításainak befejezése* (*Complete the Cluster Setup*). Ez megint nem igényel felhasználói beavatkozást, ekkor hajtódnak végre a végső telepítési műveletek és egyéb tisztító folyamatok.

Végül nem árt ellenőrizni a fürt beállításait a *Test Cluster Setup* lépéssel. Ez egy teszt sorozatot futtat le a fürt telepítés-



4. kép Ügyfél-képfájl létrehozása a felhasználó által megadott csomaglista és partició tábla alapján

sének és a független csomagok ellenőrzésére. Ha minden jól megy, akkor a tesztek sikeresek lesznek, az üzembe helyezés befejeződött, a fürt készen áll a számítási feladatok végrehajtására.

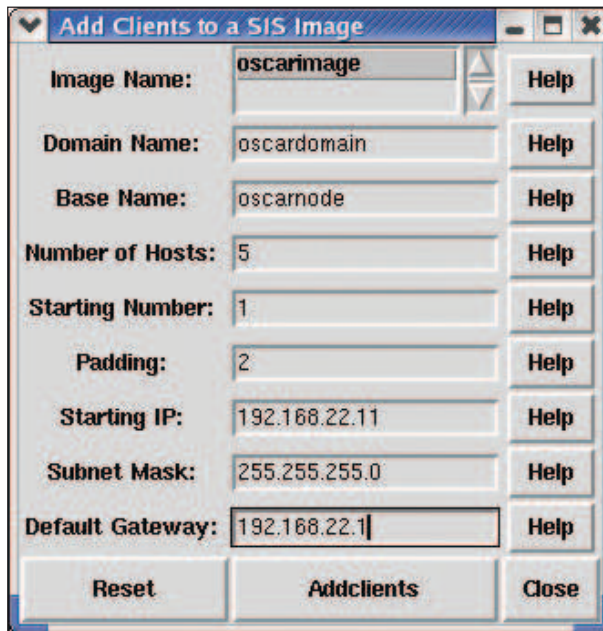
Az *OSCAR* eszközkészlet telepítése egyszerű és általában minden hardveren működik. Ha mégis valamilyen problémával találkozánk, a levelezőlistákon kérhetünk segítséget. A kérdéseket első körben az *oscar-users* listához intézhetjük. A központi csapat nagy része rendszeresen olvassa a listát és a többi felhasználó is a segítségünkre lehet. Ha a fejlesztéssel kapcsolatos kérdés merülne fel, erre az esetre az *oscar-devel* lista áll rendelkezésünkre. Mindkettő lista zárt, fel kell iratkoznunk, mielőtt üzenetet küldhetnénk rájuk.

Az OSCAR 4.0 újdonságai

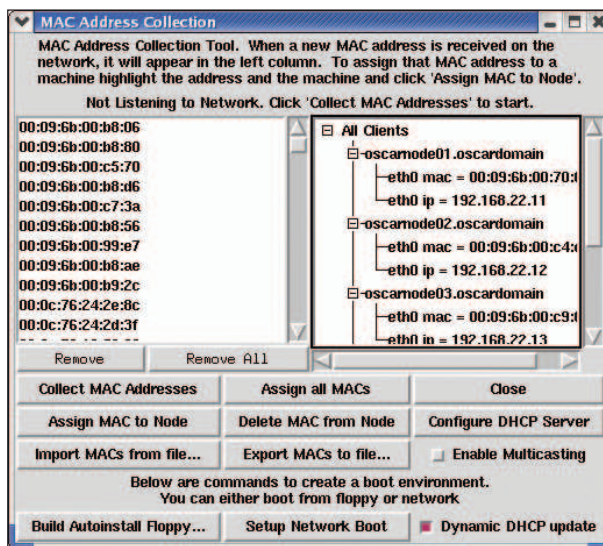
Sok újdonságot tervezünk beépíteni a hamarosan megjelenő új változatba, amelyek négy csoportra oszthatók: *NEST*, csomópont-csoportok, *Linux* rendszercsomagok és *SIS*.

A *NEST* (*Node Event and Synchronization Tools, csomópont esemény és szinkronizáló eszközök*) azt biztosítja, hogy a fürt minden csomópontjának beállításai szinkronban legyenek a központilag tárolt adatokkal. Jelenleg új fürt-csomópont telepítésekor az *OSCAR post_install* parancsfájljait minden csomóponton le kell futtatni függetlenül attól, hogy erre ténylegesen szükség van-e. Bár ez a modell a közepes méretű fürtökön működőképes, nyilvánvalóan egy méretbeli korlátozást jelent. A legnagyobb eltérés a *NEST*-ben, hogy a csomag-beállítások a kiszolgálóról töltődnek le, ahelyett, hogy az ügyfelekre töltődnek fel. A műveletek csak szükség esetén hajtódnak végre, ami sokkal elegánsabb megoldás a jelenleg alkalmazott feltétel nélküli végrehajtási sémánál.

A csomópont-csoportok a fürtben lévő csomópontok természetes csoportosítását jelentik. Ezzel az új szolgáltatással lehetővé válik az *OSCAR*-csomagok csoportonként eltérő kezelése. A következő változatban csak a kiszolgáló- és ügyfélcsomópont-csoportokat tervezzük támogatni, de a jövőben a felhasználóknak lehetőségük nyílik majd saját csoportok létrehozására is.



5. kép Itt adhatjuk meg a fűrt csomópontjait és a hálózati jellemzőket



6. kép A fűrt csomópontjain megtörtént a hálózatos rendszerindítás és a MAC-címek gépekhez rendelése

Az OSCAR meghatározó jellemzője a különböző Linux rendszercsomagok támogatása. Az új változattal reményeink szerint megvalósul a *Fedora Core 2 és 3*, a *Red Hat Enterprise Server 3.0* és a *Mandrake 10* támogatása. Ezzel együtt támogatni fogjuk az *IA-64* és *x86-64* rendszereket is. A *System Installation Suite (SIS, rendszertelepítő csomag)* amely magába foglalja a *SystemImager*-t is, az OSCAR képfájljait üzembe helyező programcsomag. Két továbbfejlesztés sorolható ide. Az egyik a lemeztípus önműködő észlelése. Hagyományosan az OSCAR képfájlok egyféle merevlemez-típusra készültek (vagy *IDE* vagy *SCSI*). Ezzel az OSCAR-kiterjesztéssel ugyanazt a képfájlt használhatjuk a különböző felépítésű és merevlemezrel rendelkező gépekhez feltéve, hogy a gép központi felépítése megegyezik.

Másodszor, hozzáférhető egy eszköz, amivel a felhasználók speciális rendszermag-modulokat használhatnak a csomópontok rendszerindításához. Időnként előfordul, hogy az újabb hardvereken nehezebb munkára bírni az OSCAR-t, mivel a SIS rendszermag-indító képfájl nem tartalmazza a támogatott meghajtóprogramokat. Ennek az eszköznek a segítségével használhatjuk a meglévő rendszermagot a biztosan működő modulokkal, és így az ügyfélcsomópontjainkra feltölthető a képfájl. Ez a szolgáltatás részét fogja képezni a *SystemImager* következő változatának és reményeink szerint az OSCAR 4.0 verzióinak is.

Csomagok létrehozása az OSCAR számára

Az OSCAR rendelkezik a megfelelő csomagokkal az általánosan használt, fűrtözött környezetre felkészített programokhoz. Ezek egyszerű RPM-csomagok a megfelelő metafájlokkal és telepítő parancsfájlokkal, amelyeket az OSCAR elsődleges fejlesztőcsapata és a csomagírók készítettek és tartanak karban. Ha van egy olyan programunk, amelyet telepíteni szeretnénk a fűrtre de az OPD-n (*OSCAR Package Downloader, OSCAR csomagletöltő*) keresztül nem találjuk, készítsünk hozzá egy csomagot. Az OSCAR fejlesztőcsapata nyitott a közreműködni szándékozók felé, és esetleg az általunk készített OSCAR-csomagnak is hajlandó helyet biztosítani. A csoport ezt a meghívást a programfejlesztőkre is fenntartja.

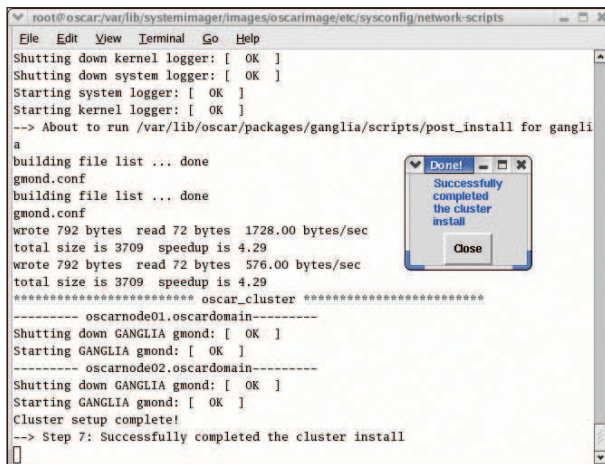
Az OSCAR-csomagok olyan decentralizált webhelyeken elhelyezkedő csomag-gyűjteményekben foglalnak helyet, amelyeket a csomagok szerzői biztosítanak a csomagok fájljainak tárolására. A tárhelyek címei egy központi tárhelylistán érhetőek el.

Az OSCAR-csomagok létrehozása általában egyszerű folyamat. Ha rendelkezésünkre áll egy kész RPM-csomag, a feladat felével már nem is kell foglalkoznunk, mindössze a csomag és RPM-fájlok metaadatait tartalmazó fájlokat kell létrehozunk és néhány olyan parancsfájlt, amely gondoskodik a beállításokat tartalmazó fájlok terítésével a fűrtön belül. A feladat végrehajtása viszonylag egyszerű, mert egy OSCAR-fűrtön belül sok feltétel már eleve adottnak vehető. Amennyiben nem áll rendelkezésre megfelelő RPM-csomag, a folytatás előtt magunknak kell létrehozunk az alkalmazás RPM formátumú alakját. Az RPM-csomag létrehozása a program összetettségétől függően lehet könnyű, de bonyolult is. Készítenünk kell egy leírófájlt és létre kell hoznunk az RPM fájl(oka)t és a hozzá tartozó SRPM forráscsomagot.

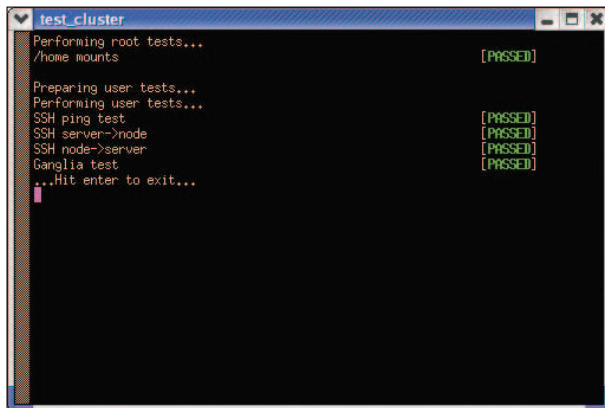
A GSC (*Genome Sciences Centre, Génkutató Központ*) által kiadott első OSCAR-csomag a *Ganglia* csomagja volt, amely egy fűrtmonitorozó rendszer. Már dolgozunk a második csomagunkon, amely a *Sun Grid Engine* nevű, a *Sun Microsystems* által támogatott nyílt forrású parancsfájl-ütemező rendszer. Ez a későbbiekben elérhető lesz majd az OSCAR letöltő rendszerén keresztül a GSC OSCAR tárhelyén.

Bioinformatikai alkalmazások és az OSCAR-fűrt

A legelterjedtebben használt bioinformatikai program a genetikai kódsorok keresésére és illesztésére használt *BLAST*. A genetikai adatbázisban több genetikai kódsor keresése jól párhuzamosítható feladat, a folyamat nagyon könnyen



7. kép Beavatkozást nem igénylő lépés: végső telepítési beállítások és tisztító folyamatok végrehajtása



8. kép Minden rendszer működik, a fürt bevetésre kész

olyan alfeladatokra bontható, amelyek mindegyike a bemenetek egy adott csoportjával hajtja végre a keresést. Léteznek is szoftveres megoldások ennek a feladatsztérválasztásnak a megvalósítására, ezek közül leginkább a nyílt forráskódú *mpiBLAST* és a kereskedelmi úton terjesztett *Parcel* érdemel említést. A *BLAST* párhuzamosított megoldásaival igen jó eredményeket lehet elérni, de természetesen elérhetünk egy olyan pontig, ahol már egyszerűen a csomópontok számának növelésével nem tudjuk tovább növelni a teljesítményt, mivel a kezdeti feladatsztérválasztás munkatöbblete felemészti az így nyert teljesítményt.

Az *FPC* egy másik általunk sokat használt alkalmazás, amelyet ujjenyomatok képének összeillesztésére, szerkesztésére és vizsgálatára használunk. Ennek első párhuzamosított változatát a *GSC* fejlesztette ki, ez azonban még nem támogatta a kötegelte feldolgozást. A közelmúltban építettük össze a párhuzamosított *FPC*-t a *Sun Grid Engine*-nel, így a felhasználók egyszerűen igényelhetnek bizonyos számú csomópontot a program futtatásához.

Dolgozunk egy bioinformatikai szolgáltatásokat megosztó egyenrangú alkalmazás, a *Chinook* kifejlesztésén is. Jelenleg ez még fejlesztési fázisban van, a saját fürtünkkel próbáljuk összeépíteni. Segítségével lehetőség nyílik majd a hálóok összekapcsolására és ezzel a *Globus* eszközkészlet kiváltására.

Jelen pillanatban a 200 csomópontos fürtünk teljesítményét az emberi génállomány feltérképezése és osztályozása köti le. Az emberi génállomány hozzávetőlegesen 30.000 génből áll, az egyes géneket különféle algoritmusok segítségével vizsgáljuk. A géneket 1500-as csoportokba foglaljuk, amelyek egyszeri vizsgálata körülbelül négy napot venne igénybe egy 2 GHz-es *Opteron* gépen. Fürtök alkalmazása nélkül nem lenne lehetőség az ilyen kutatások folytatására.

Összegzés

Az *OSCAR* eszközkészlet hosszú utat tett meg az első kiadása óta. Egyre többen fedezik fel könnyű alkalmazhatóságát és egyszerű használatát s így egyre szélesebb körben élnek a fürtözés technológiájával. A bioinformatika mind nagyobb mértékben alkalmazza a nagyteljesítményű számításokat. Valószínű, hogy a bioinformatikus közösség számára egyre elérhetőbbé válik egy olyan megoldás, amely minden eszközt magában foglal majd a párhuzamos bioinformatikai alkalmazások egyszerű telepítéséhez és futtatásához.

Köszönetnyilvánítás

Köszönetet szeretnék mondani *Mark Mayonak*, *Asim Siddiquinek* és *Steven Jonesnak* a lehetőségért, hogy a *GSC Linux*-fürtjén dolgozhattam és felismerhettem az *OSCAR*-ban rejlő lehetőségeket. Köszönet illeti továbbá az *OSCAR* fejlesztőcsapatát, a külső fejlesztőket és a felhasználókat, akik létrehozták ezt a nagyszerű közösséget a nagyteljesítményű számításokkal kapcsolatos tudás és információk megosztására. Végül, de nem utolsósorban hálámat fejezem ki az *NCSA* munkatársainak, akik rengeteg időt és fáradságot fektettek az *OSCAR* projekt fejlesztésébe. Személyes köszönetemet fejezem ki *Jeremy Enosnak*, *René Warrennek* és *Martin Krzywinski*nek a cikkhez fűzött értékes megjegyzéseikért és tanácsaikért.

Linux Journal 2004. november, 127. szám



Bernard Lee, a nagyteljesítményű számításkok szakértője, a kanadai Michael Smith Génkutató Központ munkatársa, ahol feladata a Linux-fürtök kezelése és a bioinformatikai alkalmazások párhuzamos futtatási lehetőségeinek kidolgozása. Tagja az *OSCAR* központi fejlesztőcsapatának és rajongója a *Sun Grid Engine*-nek. A bli@bcgsc.ca címen érhető el.

KAPCSOLÓDÓ CÍMEK

- ➔ oscar.openclustergroup.org
- ➔ www.csm.ornl.gov/oscar04
- ➔ www.bcgsc.ca
- ➔ www.bcgsc.ca/gc/bomge/chinook