



SCB Superpočítačové centrum Brno

Jan Kmuníček

Ústav výpočetní techniky MU & CESNET

scb.ics.muni.cz

- Náplň činnosti
- Struktura a služby
- Personální obsazení
- **Bonus**
- Projekty
- Plány & vize

- **Hlavní poslání**
 - podílet se na tvorbě a dalším rozvoji gridového prostředí v ČR
- **Specifické cíle (vzhledem k MU)**
 - zabezpečit **PROVOZ** výpočetních zdrojů
 - plánovat a zajišťovat **ROZVOJ** výpočetních kapacit
 - poskytovat uživatelům jednoduchý přístup k výpočetním zdrojům za současného skrytí celkové komplexnosti prostředí
 - “Grid” (v současné terminologii), “Metapočítač” (cca před 10-ti roky)
 - podílet se na **ŘEŠENÍ** národních i mezinárodních **PROJEKTŮ** v oblasti náročného počítání

- **Principiální členění SCB**

- **Provoz** technické zajištění provozu hardwaru
- **Uživatelská podpora** komunikace s uživateli a řešení uživatelských požadavků
- **Bezpečnost** zabezpečení výpočetních zdrojů
- **Výzkum a vývoj** vývoj nových služeb a výzkum v oblasti distribuovaného počítání / Gridů
- **Administrativa** správa uživatelů, projektů, ...

- **Stavební kameny SCB**

- unifikovaný autentizační mechanismus podporující „single-sign on“ (SSO)

Kerberos

- sdílený diskový prostor

AFS

- dávkový systém zadávání úloh

PBSPro

- systém pro správu uživatelských identit / účtů

Perun

- uživatelská podpora

- SCB portál

<http://scb.ics.muni.cz>

- METACentrum portál

<http://meta.cesnet.cz>

- RT systém

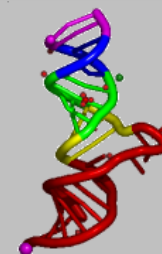
meta@cesnet.cz

- **Výpočetní zdroje - hardware**
 - **clustery**
 - různé procesory Intel Pentium **cca 330 CPUs**
 - **stroje SMP (Symmetric MultiProcessing)**
 - servery SGI a HP **cca 100 CPUs**
 - **malý počet strojů s jinou architekturou**
 - IBM Power4+, AMD Opteron
 - **outsoursované zdroje**
 - cluster perian **cca 72 CPUs**

- **Klíčové aplikační domény - software**

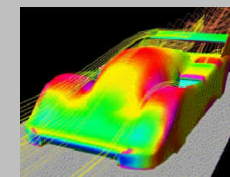
- **počítačová chemie / molekulové modelování**

- Amber, AutoDock, Gamess, Gaussian, Mopac, Spartan, Turbomole



- **technické a materiálové simulace**

- ANSYS (s modulem LS-DYNA), Fluent, MSC.Marc, WIEN2k



- **matematické a statistické modelování**

- Maple, Matlab, SNNS, gridMathematica, R, Vista

- **vývojové nástroje a prostředí**

- PGI CDK, TotalView, Vampir, Paradise, SICStus Prolog

- **Datové služby**
 - **pravidelné zálohy** adresářů /home na pásky
 - nabídka **diskových kapacit** v řádu desítek TB
 - založena na dohodě mezi uživatelskými požadavky a našimi možnostmi
 - naplnění pouze oprávněných požadavků (reálná vědecká potřeba s odpovídajícím publikačním výstupem)
 - zprovoznění dvou **páskových knihoven**
 - každá s kapacitou 200 TB on-line dostupných dat
 - potenciální pomoc uživatelským komunitám, které se potýkají s problémy s jejich lokálními datovými / úložnými kapacitami

- **Personální členění SCB**

Luděk Matyska

Miroslav Ruda

Daniel Kouřil

Jan Kmuníček

Hana Rudová

Ondřej Krajíček

Aleš Křenek

Zora Sebestiánová

Iva Krejčí

Igor Petrlík

Jiří Denemark

Zdeněk Salvét

Petr Holub

Martin Kuba

Lukáš Hejtmánek

Michal Procházka

výzkum a vývoj

bezpečnost

uživatelská podpora

provoz

administrativa

- **System CHARON – aplikační framework**

- **správa jedné výpočetní úlohy**

- zapouzdření výpočetní úlohy
- minimalizace režie spojené s přímým použitím dávkového systému a / nebo middlewaru
- jednoduché zaslaní a monitorování úlohy během doby jejího života



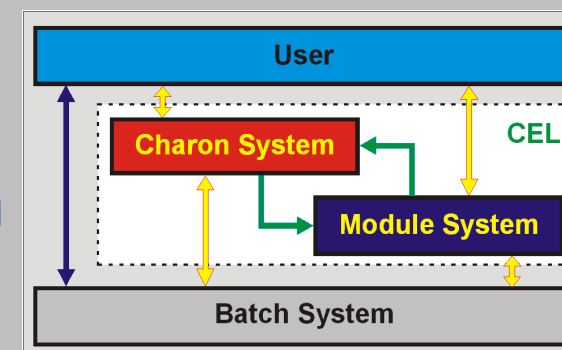
- **správa aplikačních programů**

- komfortní administrace aplikačního softwaru

- současné způsoby využití

- **SCB / METACentrum**
- **EGEE / VOCE**

experimentální použití
prototypové použití

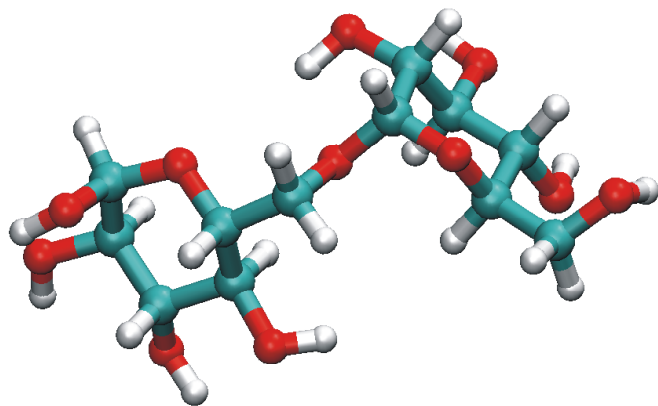


- vstup

```
[jobdir]$ ls
equi.rst  isomaltose.top  myjob  prep.in
```

```
# sander calculation on VOCE
module add amber
sander -O -i prep.in \
        -p isomaltose.top \
        -c equi.rst -o prep.out \
        -x prep.traj -r prep.rst
```

Molekulární dynamika isomaltózy



- **psubmit**

```
[jobdir]$ psubmit voce myjob
```

```
Job name      : myjob
Grid job name : myjob (Job type: generic)
Job directory : skurut4.cesnet.cz:/home/kulhanek/jobdir
Job project   : -none-
=====
Alias         : -none-
Organization  : voce
Profile      : default
-----
NCPU         : 1
Resources    : -job match-
Properties   : -none-
Sync mode    : gridcopy
-----
Start after   : -not defined-
=====
Do you want to submit job to GRID environment (YES/NO) ? YES

Please wait packing data ...
Submitting job ...

Job was successfully submitted to GRID environment.
```

- **pinfo**

```
[jobdir]$ pinfo
```

```
Job name      : myjob
Job ID       : https://skurut3.cesnet.cz:9000/bx06C-R9mB5uquZarwpCPQ
Grid job name : myjob (Job type: generic)
Job directory : skurut4.cesnet.cz:/home/kulhanek/jobdir
Job project   : -none-
=====
Alias         : -none-
Organization  : voce
Profile       : default
-----
NCPU         : 1
Resources    : -job match-
Properties    : -none-
Sync mode    : gridcopy
-----
Start after   : -not defined-
=====
Job was submitted at      : 2005-10-12 14:16:28
  and was queued for      : 0d 00:04:28
Job was started at       : 2005-10-12 14:20:56
  and was running for     : 0d 00:02:12
Job was finished at      : 2005-10-12 14:23:08
```

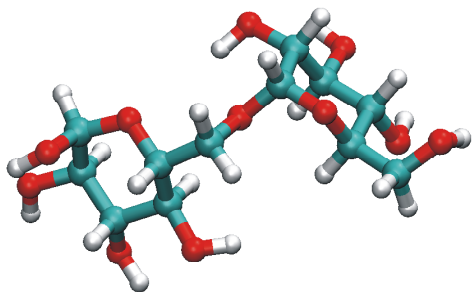
- **psync**

```
[jobdir]$ psync
```

```
Starting synchronization procedure.  
  downloading sandbox ...  
  completing data ...  
  downloading data from SE ...  
  unpacking result archive ...  
  cleaning ...  
Synchronization was successfully finished !
```

- výstup

Molekulární dynamika isomaltózy

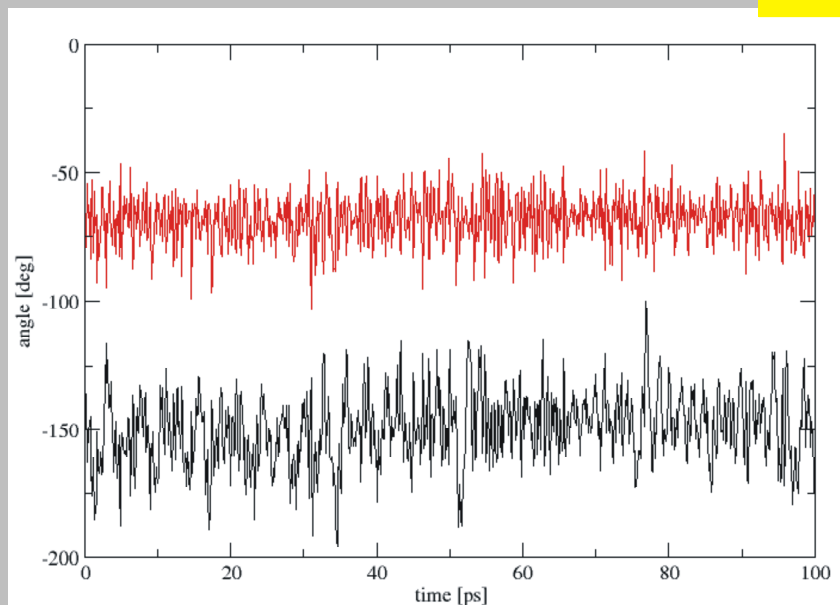


```
[jobdir]$ ls
equi.rst      myjob.ces    myjob.stdout
prep.in       myjob.cesout mdinfo
isomaltose.top myjob.jdl    prep.traj
myjob         myjob.info   prep.rst
              prep.out
```

vstup

kontrola

výstup



- **Projekty s účastí SCB**

- Výzkumný záměr FI / ÚVT
 - Rozsáhlé paralelní a distribuované systémy



- Výzkumný záměr CESNETu

- METACentrum
- EGEE



- Výzkumné projekty rámcových programů EU

- CoreGRID



- Další projekty

- MediGrid



- **SCB „status quo“**
 - SCB součástí „Gridu“ již v pre-Gridovém období
 - kompletní adaptace prostředí pro podporu PKI infrastruktury
 - vybudována virtuální organizace sdružující gridové uživatele ze střeoevropského regionu (VOCE)
 - zájemci z řad uživatelů MU již aktivní !!!
 - podpora systému CHARON pro zjednodušení každodenní rutinní vědecké práce v prostředí SCB / METACentra
 - spoluúčast SCB na tvorbě technického zázemí pro e-learning (zejména zázemí pro videoarchiv MU)

- **Co plánujeme?**
 - integrace s dalšími Gridy (EGEE)
 - další rozvoj infrastruktury
 - investice do SMP stroje se sdílenou pamětí a Linux OS
 - *Blue Gene/L nebo cca 16-ti procesorový stroj*
 - nový cluster na AMD architektuře
 - *dual CPU quad core Opteron*
 - nové síťové řešení
 - *pravděpodobně Infiniband*
 - kontinuální rozšiřování aplikačního portfolia
 - Abinit, ADF, CPMD, Dalton, Linda