

Národní e-infrastruktura v ČR

Luděk Matyska a kolektiv

CERIT-SC a CESNET

Praha 7. listopadu 2012

- Zjednodušeně řečeno: *Komplexní IT zázemí.*
- Virtuální prostředí tvořené technickými (výpočetní a úložné zdroje, aktivní prvky i přenosové trasy sítě, ...) a programovými komponentami, tvořící virtuální prostředí s rozmanitou škálou služeb, které podporují spolupráci a efektivní využití všech svých součástí.
- Významné rysy
 - rozsáhlá
 - univerzální

Složky e-infrastruktury

- Počítačová síť
 - páteř
 - zajišťuje přenos dat (uživatelská i řídicí)
 - kapacita a latence
- Výpočetní kapacity
 - superpočítače
 - menší vzájemně spolupracující systémy (gridy)
 - přístupové body (včetně mobilních)
- Datová úložiště
 - spojená s výpočetními kapacitami (uživatelské úložné prostory, kapacita pro dočasná data během výpočtů)
 - samostatná
 - zálohování
 - archivace (Long Term Preservation)
 - sdílení
- Programové vybavení
 - obslužné a řídicí (middleware, plánování, monitoring, ...)
 - vývojové (překladače, ladící a optimalizační nástroje, ...)
 - aplikační (volně šiřitelné i komerční)

- GEANT – síť
 - celoevropská vysokorychlostní síť
 - páteřní linky až 100 Gbps
- PRACE – superpočítače
 - vrstvená (tiered) struktura
 - nejvýkonnější systémy
- EGI – distribuovaný výpočetní infrastruktura (grid)
 - skládáno z clusterů – uzly
 - různý výkon jednotlivých uzlů
 - postupné propojení s cloud technologiemi
- CDI – Collaborative Data Infrastructure (EUDAT)
 - ukládání a sdílení dat
 - distribuovaný charakter (jako gridy)

Stav v ČR

- Síť

- páteř: CESNET
- koncové propojení: jednotlivé instituce

Nejlépe organizované

- Výpočty

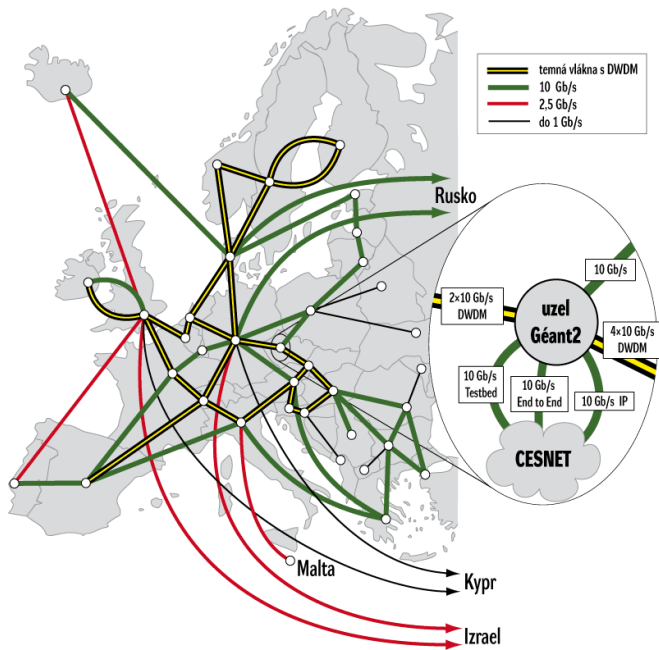
- superpočítání: IT4Innovations, Ostrava
- gridy:
 - koordinace: CESNET (NGI, napojení na EGI)
 - základní zdroje: CESNET
 - vývojově orientované: CERIT-SC
 - další: různé instituce (VŠ)
 - neorganizované > v podstatě každý

- Data

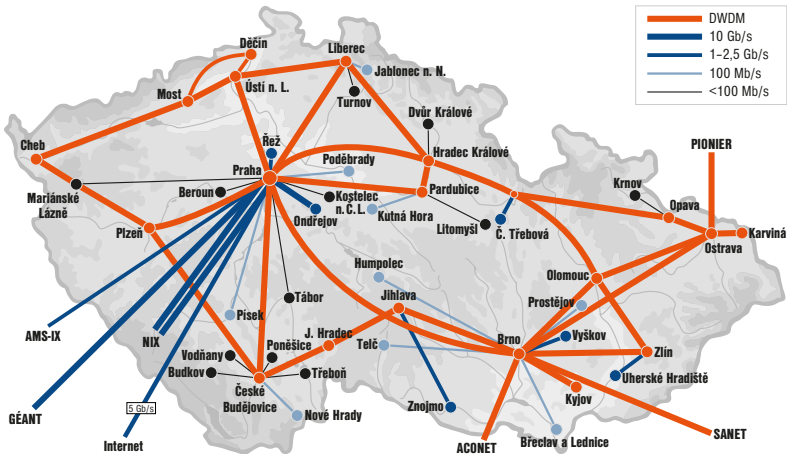
- centrální úložiště: CESNET
- experimentální: CERIT-SC
- spojená s výpočty: CESNET, CERIT-SC, IT4Innovations
- další velká: zpravidla NGS (CEITEC, BIOCEV)
- menší, neorganizované: v podstatě každý

- Software

Síť GEANT



Síť CESNET2

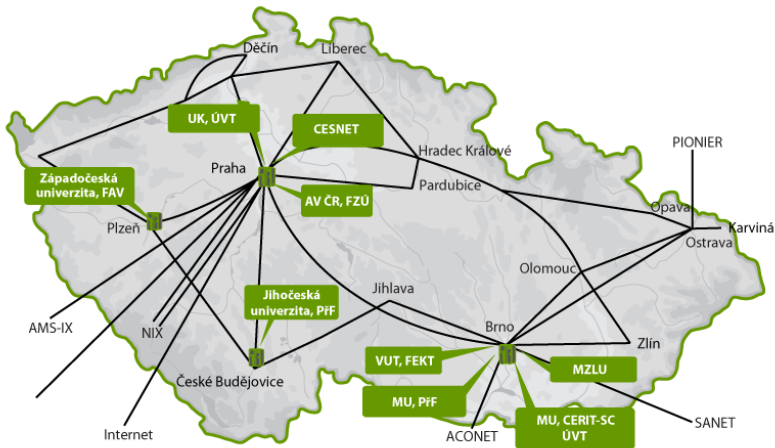


- Hlavní znaky
 - Plošné připojení pracovišť (zpravidla optickým vláknem)
 - Vysoká propustnost páteře
 - vysokokapacitní linky
 - podpora multiplexovaných optických kanálů (lambdy)
 - vysoká stabilita (duální připojení)
- Trvalé sledování provozu
- Bezpečnost a zpracování bezpečnostních incidentů
- Videokonferenční (webkonferenční) infrastruktura, prostředí pro spolupráci
 - velmi rozsáhlá VoIP síť

Gridy

- CESNET a CERIT-SC hlavní „hráči“
- Distribuovaná infrastruktura zapojuje i další organizace (UK, ZČU, JČU, ...)
- MetaCentrum (CESNET)
 - koordinace (NGI)
 - aktuálně 6000 jader, polovina CESNET
 - CEITEC, CERIT-SC, JČU, UK, VUT, ZČU
 - dalších 4000 jader na FzÚ, EGI&WLCG
 - orientace na dávkové úlohy, dlouhé výpočty
- CERIT-SC (ÚVT MU)
 - experimental facility
 - poskytuje zdroje MetaCentrum
 - důraz na interakci a přímou spolupráci s vědeckými týmy (partnery)
 - zapojení do společného vývoje
- „Placení“
 - Poděkování v publikaci, společná publikace

Gridová infrastruktura



Superpočítání

- Nová součást národní e-infrastruktury
- Orientace na nejvyšší výkon
- Dvoufázová realizace
- „Malý“ cluster
 - cca 3000+ jader, 200 uzlů, 64 GB RAM
 - 15 % NVidia GPU
 - home 300 TB, scratch 100 TB'
 - kontejnerové řešení

Vybrán, odvolací řízení

- Superpočítačový cluster
 - plán na rok 2014
 - zahájen předběžný dialog
 - cíleno na první stovky TOP500, GPU akcelerováno

Přístup

- Síť
 - best effort
 - overprovisioning
- Gridová a cloudová infrastruktura
 - best effort
 - priority podle výsledků a intenzity spolupráce
- Superpočítače
 - „grantová“ soutěž, 2x ročně
 - interní, eventuálně externí posouzení
 - speciální „ředitelská“ alokace, průběžně

Data

- Služby
 - zálohy
 - primární data u uživatelů, záloha pro případ úmyslné či neúmyslné ztráty dat
 - archivace
 - cenná primární data
 - menší frekvence přístupů
 - dlouhodobé uchovávání, včetně politik
 - sdílení dat
 - zpřístupnění i velkých objemů dat, omezené i pro veřejnost

Datová úložiště

- trojice HSM úložišť budovaná CESNETem
 - Plzeň, Jihlava, Brno
 - celková kapacita cca 16 PB
 - Plzeň ve zkušebním provozu
 - Jihlava a Brno výběrová řízení, dodávka Q1/2013
- CERIT-SC jedno MAID HSM
 - 3,5 PB
 - vypínatelné disky (žádné pásky)
- Další plánováno na IT4Innovations i ve velkých projektech (CEITEC)
- Hierarchické systémy
 - různé rychlé/drahe vrstvy
 - „intelligence“ v software
 - automatizovaný systém přesunu mezi vrstvami
 - (téměř) transparentní
 - první přístup k déle nepoužívaným datům pomalejší
- Data trvale zabírají kapacity
 - dlouhodobě jiný model hrazení než výpočty

Software

- Průběžně udržované vývojové prostředí
 - GNU, Intel, PGI, [TotalView](#), [Alinea](#)
- Generický matematický software ([minulý rok](#))
 - Matlab, [Maple](#), [gridMathematica](#)
- Komerční i volný software pro aplikační chemii
 - Gaussian 09, Amber, Gamess, ...
- Materiálové simulace ([posílení tento rok](#))
 - Wien2k, [Fluent](#)
- Strukturní biologie, bio-informatika
 - řada volně dostupných balíčků

Cíle národní e-infrastruktury

- Poskytnout prostředí, které podpoří vědu
 - role **poskytovatele**
- Pomoci s využitím tohoto prostředí a ICT obecně
 - role **partnera**
- Zajistit dostatečné finanční zdroje
 - modely financování
 - centrální financování
 - pay per use
 - projektové financování
 - otázka stability e-infrastruktury
 - financování musí mít kontinuální složku

Spolupráce s vědeckými komunitami

- Posunout vztah „prodávající“ a „kupující“ na **partnerství**
 - společný zájem na rozvoji a využití e-infrastruktury
 - e-infrastruktura nejsou jen technici (správci IT)
- Společné zapojení informatiků a dalších vědeckých komunit do
 - práce na návrhu architektury budoucích e-infrastruktur
 - optimalizace e-infrastruktury
 - optimalizace využívaných nástrojů a aplikačních programů
- Společné projekty
 - financování rozvoje
 - definice oboustranných očekávání a závazků
 - prokázání využití e-infrastruktury
 - nezávislá kontrola smysluplnosti činností

Příklady

- Rekonstrukce genomu jetele
 - abnormálně dlouhá genová sekvence
 - současné nástroje určeny pro menší data, selhávají
 - adaptace programů
 - poskytnutí experimentálního prostředí (dostatek paměti)
 - připravována společná publikace
- Atomární náboje na proteinech
 - publikované metody, nedostatečná implementace
 - reimplementace, optimalizace a paralelizace, práce s velkými datovými sadami
 - řádové zrychlení (z 30 minut na 14 sekund)
- MD simulace extrémně velkého systému
 - dlouhý čas ($50 \mu\text{s}$), velký počet atomů (10^8) existujícími metodami nevládnutelné
 - nové algoritmy, důsledné využití možností e-infrastruktury
- Simulace „smart gridu”
 - miliony senzorů, modelování chybových datových toků, ...

Podpora projektu ELIXIR

- uzel na UOCHB
 - snaha lépe pochopit požadavky této už. skupiny
 - spouštění výpočtů, zpřístupnění dat
 - služby požadované na národním uzlu
 - průzkum bojem - zprovozněn gridový software, námi podporovaný aplikační software, postupně přibývá software podle požadavků uživatelů
 - správa uzlů nebo výpočtů i celková architektura se může měnit podle potřeb ELIXIRU
 - rozšíření základních služeb (další zdroje) může být poskytnuto přes cloud prostředí
 - <http://meta.cesnet.cz/wiki/Elixir>
- ELIXIR-VT v projektu EGI
 - snaha kontaktovat další NGI které podporují ELIXIR
 - snaha o sdílení informací, postupů, sjednocující pohled

Shrnutí

- Rozvinutá národní e-infrastruktura
 - Všechny podstatné součásti zahrnuty
 - Realizována třemi organizacemi
 - Společné vystupování
- Nezbytná dlouhodobá a úzká spolupráce s vědeckými komunitami
 - ovlivnění vývoje e-infrastruktury
 - kontrola jejího využití