

Národní gridová infrastruktura

Miroslav Ruda

CESNET z.s.p.o.

Praha, 2012



Národní Gridová Infrastruktura (NGI)

- součást e-infrastruktury CESNETu
- národní i mezinárodní aktivity zastřešuje gridové oddělení

Stávající služby gridu

- provoz národního gridu (MetaCentrum)
- integrace do evropské gridové infrastruktury (EGI)

Posílené služby:

- koordinace nákupu aplikačního software
- zpracování rozsáhlých vědeckých dat
- podpora výpočetně náročných projektů

Nové služby:

- HPC cloud

- počátky v propojení superpočítačů (nyní PRACE)
 - i v MetaCentru zůstává podpora při optimalizaci, instalovaný komerční vývojový a aplikační software
- zapojení výpočetních clusterů, HTC výpočty
 - motivací je přenesení nárazové zátěže na volnější zdroje
 - problém autentizace uživatelů z celého světa - certifikáty
- adopce myšlenky částicovými fyziky z LHC (CERN)
 - decentralizace, zpracování PB dat, mezinárodní komunita
- v rámci EGI opět snaha o posílení dalším oborů
 - společný problém **data deluge** pro všechny obory
 - technické pokroky ve virtualizaci usnadňují provoz odlišných služeb
 - technická podstata komerčních cloud řešení
 - pomocí ESFRI projektů a clusterů získávají na síle a slad'ují svoje požadavky

- clustery a výkonné servery, úložné kapacity
 - rozprostřené přes Plzeň, Prahu, Brno, České Budějovice
- cca 3500 jader, 2000 vlastní CESNET
 - clustery CEITEC, CERIT-SC, ZČU, JČU, UK, MU, VUTBR
- přes 300 TB diskových prostor na zpracovávaná data
- centrální správa uzlů, účtů, úloh, aplikačního software
- dalších 3700 jader a 2 PB přes FZU do EGI (LHC projekty)
- orientace na dávkové úlohy, hromadné zpracování, dlouhé vědecké výpočty
- "placení" formou publikací s poděkováním
 - přístup všem akademickým pracovníkům a studentům bez omezení, bez podávání projektů
 - publikace využívány pro určení priority uživatele

- změna z čistého poskytovatele na koordinátora
- nárůst výpočetní kapacity
 - 2x600 jader z prostředků CESNETu
 - 600 jader CERIT-SC
 - tento rok další rozšíření (CESNET i CERIT-SC)
- architektura ovlivněná zájmem uživatelů
 - v loňském roce servery s větší pamětí (256 – 512 GB)
- posílení možností pro zpracování dat
 - nových 2x100 TB na semipermanentní data
 - sdílený "scratch filesystem" (40 TB na dočasná data)
 - výhledově napojení na PB úložiště permanentních dat
- NVIDIA CUDA karty v Plzni

- 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 (zatím jen ZČU)
- strukturní biologie, bioinformatika
 - řada volně dostupných balíků
- hledáme náměty na spolupráci a na programové balíky
 - nutná koordinace s univerzitami, projekty, uživateli
 - smysl má sdílení, licence pokrývající univerzity a AV ČR, nebo alespoň NGI a její registrované uživatele
 - budeme hledat formy spolufinancování

Kontext VI CESNET a eIGeR

- klasické služby NGI
- podpora vzniku nových center - VaVpl, částí ESFRI

Zdroje NGI

- oblast přetečení výpočetních úloh
 - integrace clusteru projektu do NGI (CEITEC)
- pomoc při zapojení do evropských infrastruktur
 - využití "seed resources" pro rychlejší zapojení
 - např. VO Auger, Belle, SuperNemo v EGI
- pomoc při založení vlastního centra
 - centrální správa, řešení bezpečnostních problémů, aplikační software, monitorování, účtování
 - využití zdrojů NGI pro rychlejší založení (ELIXIR)
- ve všech případech se předpokládá, že centrum bude mít i vlastní zdroje
 - zdroje MetaCentra použité pro "urychlení" projektu

- společně s CERIT-SC zprovozněna pilotní instalace
- částečná kompatibilita s Amazon EC2 a S3
- rozhraní přes příkazový řádek i GUI pro snadnější použití
- uživatelé **nespouští úlohy, ale virtuální stroje**
- obrazy virtuálních strojů
 - originální MetaCentrové, možnost si je změnit
 - dodané uživateli, i MS Windows
 - možnost konverze z VMWare, KVM, Virtualbox
 - obrazy připravené mezinárodním projektem
 - v další fázi speciálně zaměřené na některé aplikace
- 10 uzlů (240 jader) a 40 TB z MetaCentra
 - CERIT-SC přidá v létě další kapacity
- zpřístupněno prvním zájemcům
 - jsme otevřeni jednání o větší podpoře při testování

Cloud zaměřený na vědecké výpočty

- možnost vyladit si obraz gridového uzlu a přenést ho zpět do MetaCentra
- podpora pro aplikace, kde dávkový přístup nevyhovuje
 - MapReduce (Hadoop) aplikace
 - složité distribuované prostředí postavené z různých typů uzlů
- propojení pomocí Infiniband QDR
- procesory dedikované virtuálním strojům, ne overcommitting
- uživatelé cloudu chránění před internetem (a naopak)
 - uzly zavřené v privátní síti nebo jsou otevřené jen vyjmenované porty

Děkuji za pozornost



EVROPSKÁ UNIE
EVROPSKÝ FOND PRO REGIONÁLNÍ ROZVOJ
INVESTICE DO VAŠÍ BUDOUCNOSTI

