

Data gram

prosinec 2011

zpravodaj sdružení CESNET

číslo 27

Podzimní semináře

Stalo se již tradicí, že ve druhé polovině roku pořádáme několik tematických seminářů pro odbornou veřejnost. Letos jsme zájemcům nabídli tři akce:

Monitorování kampusových sítí

25. října jsme pozvali zejména správce sítí připojených k infrastruktuře CESNET2 na seminář zaměřený na monitorování datového provozu v kampusových sítích. Musíme přiznat, že jsme podcenili zájem o toto téma, takže byla dostupná kapacita semináře poměrně rychle vyčerpána.

Jednotlivé příspěvky se vedle běžně používaných monitorovacích systémů (Zabbix) věnovaly především prostředkům vyvinutým na půdě CESNETu (FTAS) a jejich uplatnění v páteřní síti i v sítích připojených organizací.

Významná skupina vystoupení byla orientována na síťovou bezpečnost. Zabývaly se různými typy systémů pro detekci útoků, ale i zajímavými aplikacemi obecných monitorovacích nástrojů k vyhledávání vzorců problémového chování v síťovém provozu či v záznamech o využívání síťových služeb.

Většina příspěvků se samozřejmě zabývala *MetaCentrem* – jeho aktuálním stavem, plány pro blízkou budoucnost a návazností na další projekty. Nejvýznamnější představenou novinkou byl nový cluster Západočeské univerzity, který uživatelům *MetaCentra* umožňuje využívat pro výpočty výkonné grafické procesory (architektura CUDA), jež pro určitý typ úloh nabízejí velmi zajímavé výkonnostní parametry.

V sérii příspěvků se představily také další projekty, které s *MetaCentrem* spolupracují nebo spoluprací chystají: *Centrum CERIT-SC*, *IT4Innovations* a projekt datových úložišť sdružení CESNET.

Multimédia

Poslední z podzimních seminářů, konaný 30. listopadu v Praze, se zabýval problematikou multimediálních síťových služeb.

Prezentace lze rozdělit do dvou tematických skupin: První se zabývala multimediálními přenosy s vysokou kvalitou v reálném čase a jejich aplikacemi, zejména v medicíně či při zpracování filmových materiálů.

Druhá skupina příspěvků byla orientována do oblasti IP telefonie. Věnovaly se především otázkám výkonu a bezpečnosti telefonních infrastruktur.



Gridové počítání 2011

Projekt *MetaCentrum*, kterému je věnován hlavní článek tohoto čísla, pořádá uživatelské semináře už řadu let. Ten letošní proběhl 7. listopadu v Brně ve spolupráci s *Centrem CERIT-SC*.

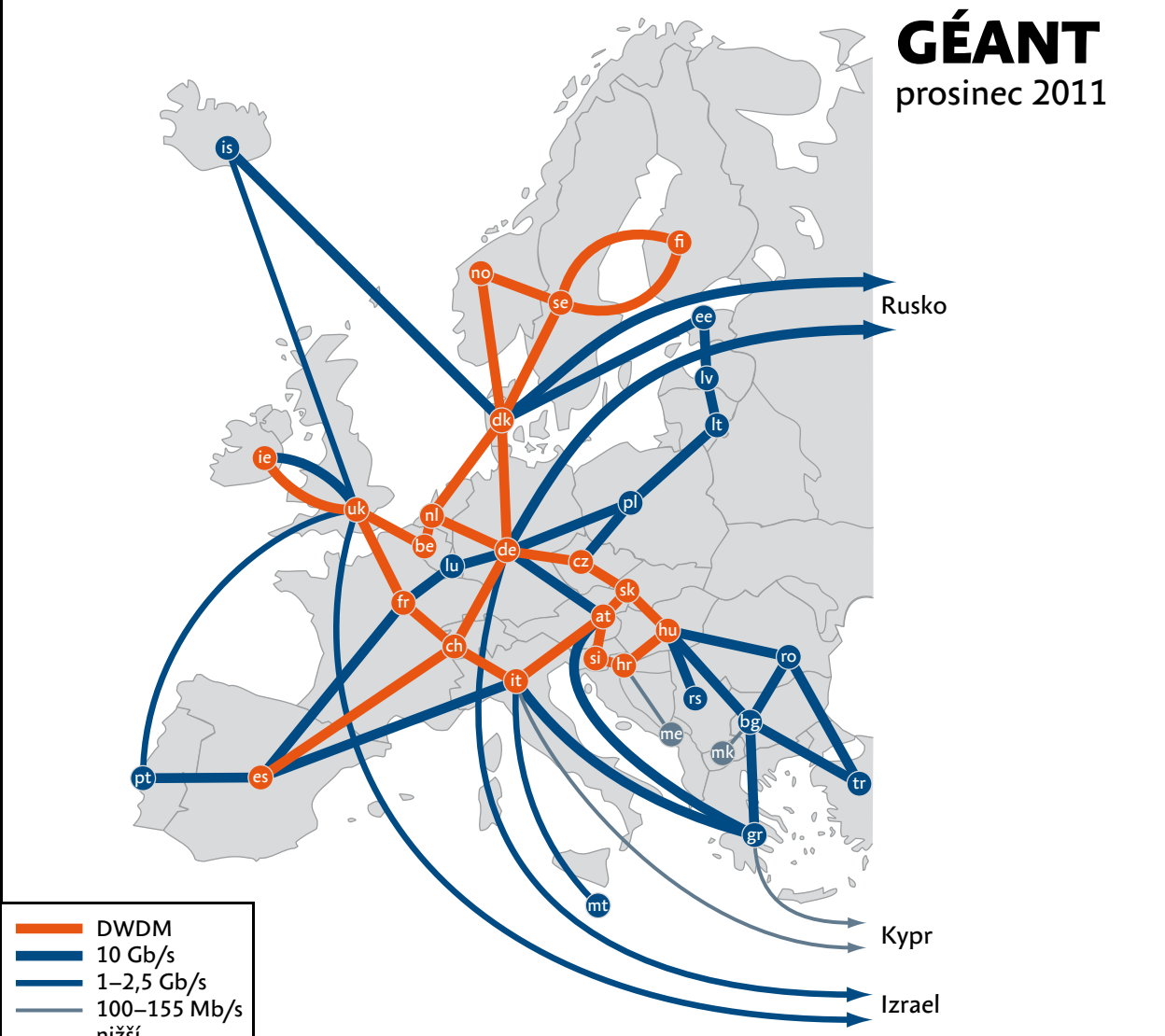
Do programu se snažíme zvát také zástupce výrobců výkonných výpočetních systémů. Tentokrát André Heidekrüger představil strategii a výsledky firmy AMD v oblasti náročných výpočtů.



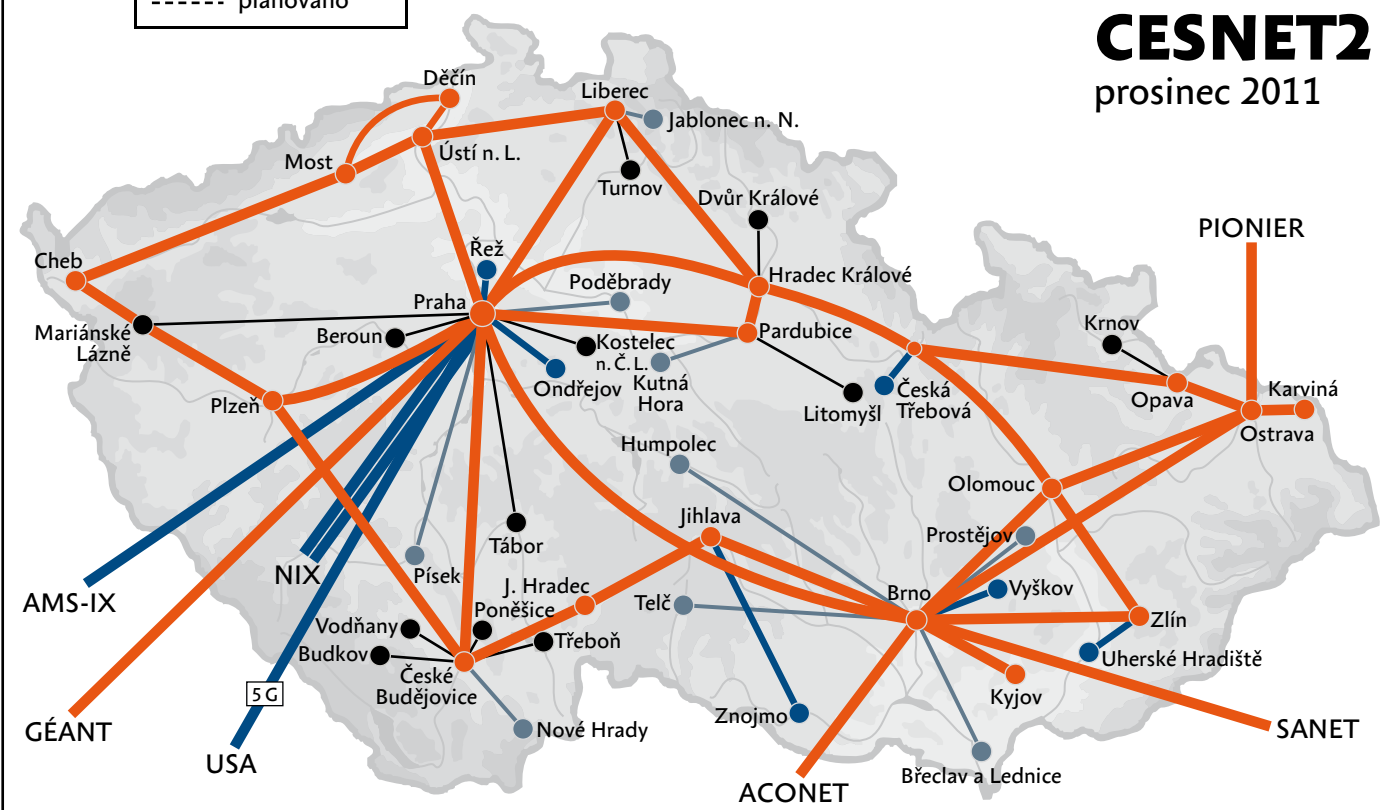
Materiály ze všech uspořádaných seminářů – programy, prezentace a fotografie – najdete na adrese

Topologie sítě GÉANT a CESNET2

GÉANT prosinec 2011



CESNET2 prosinec 2011



MetaCentrum

Problematicke náročných výpočtů se CESNET věnuje již od svého založení. Do roku 1996, kdy sdružení vzniklo, se datuje i počátek projektu *MetaCentrum*, jehož cílem bylo poskytnout akademickým uživatelům prostředí pro řešení výpočetních úloh přesahujících svou náročností kapacity běžně dostupných počítačů.

Z trojice propojených superpočítačových center Univerzity Karlovy, Masarykovy univerzity a Západočeské univerzity se postupně vyvinul komplexní grid zahrnující dnes stovky strojů a kolem čtyř tisíc výpočetních jader. Napojení na příbuzné národní i mezinárodní projekty možnosti uživatelů *MetaCentra* dále rozšiřuje.

Hardware a software

Výpočetní prostředky *MetaCentra* zahrnují především výpočetní clustery a výkonné SMP stroje.

Výpočetní clustery jsou složeny z velkého počtu strojů, jež svými parametry výrazněji nevybočují z obvyklých mezí. Typický cluster *MetaCentra* zahrnuje několik desítek dvouprocesorových počítačů osazených procesory Intel Xeon nebo AMD Opteron a propojených gigabitovým Ethernetem nebo Infinibandem.

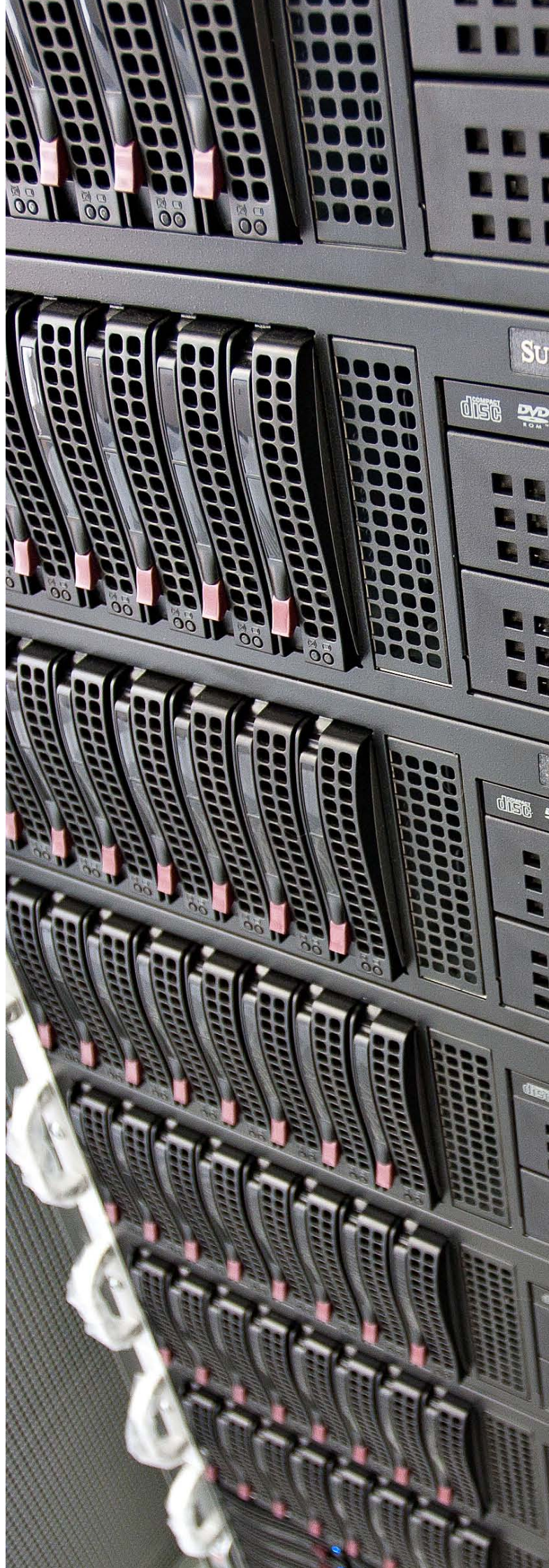
SMP stroje naproti tomu obsahují velké množství procesorů v jednom zařízení. Jejich pořízení je proti clusterům nákladnější, ale komunikace mezi jednotlivými komponentami je rychlejší. Závisí na charakteru řešené úlohy, která z platforem je pro ni vhodnější, a proto jsou uživatelům k dispozici obě alternativy – aktuálně patnáct clusterů a deset SMP strojů.

Vlastní výpočetní systémy jsou doprovázeny odpovídajícími podpůrnými prostředky, zejména diskovými kapacitami a zálohovacími zařízeními.

Jen asi polovina zařízení zapojených do *MetaCentra* je majetkem CESNETu, k systému připojilo své clustery i několik dalších institucí. Domácí uživatelé na nich mají prioritu, ovšem jsou k dispozici i všem ostatním. Zapojením do *MetaCentra* organizace umožní využívat své prostředky v okamžicích, kdy pro ně sama nemá využití, a naopak je posílit v okamžicích, kdy kapacita nestačí. Také si usnadní správu svého clusteru.

Nabídka dostupných programů je velmi široká – najdete zde jak hotové komerční i volně šiřitelné aplikace, tak vývojové nástroje umožňující vytváření vlastních programů pro specifické úlohy. Dostupné aplikace zasahují do řady různých oborů:

- *chemie*: Amber, Babel, Gaussian/GaussView, Molden, Gromacs, Gamess, deMon, PC GAMESS/Firefly, MolPro, MOPAC, Tinker, NAMD, VASP, Autodock Vina, BEAST
- *biologie*: MrBayes, QUEEN, X-PLOR, CS-Rosetta, TNT, Migrate, Structure, PhyML, PhyloBayes, ACT, Artemis, GARLI, LDDist
- *technické a materiálové simulace*: ANSYS, Fluent, MSC.Marc, WIEN2k, Open Foam
- *matematika*: gridMathematica, Maple, Matlab s řadou toolboxů, R
- *vývojové nástroje*: vývojové prostředí SGI, GCC, Grace, JDK, Lisp-CMUCL, Numpy, PGI CDK, Python, Scientific Python, SciPy, SICStus Prolog, Wine



Softwarová vybava *MetaCentra* rozhodně není uzavřená. Vzniká na základě spolupráce s uživateli a dynamicky se vyvíjí. Například v roce 2011 jsme posílili generické matematické programy. Část licencí také sdílíme s univerzitami. Uvítáme návrhy akademické komunity na další rozvoj programového vybavení, který umožní rozšířit sortiment řešených úloh.

Zařízení *MetaCentra* jsou virtualizována – uživatelé si mohou vytvářet vlastní virtuální stroje se specifickou konfigurací či skladbou programů, pokud to charakter jejich úloh vyžaduje. Vše je řízeno plánovacím systémem Torque, který spravuje uživatelské úlohy a má na starosti přidělování výpočetních prostředků a dalších zdrojů.

Počátkem roku 2012 se chystáme zpřístupnit i cloudové rozhraní, na kterém spolupracujeme s projektem *CERIT-SC*. Jako novou, doplňkovou službu nabídne uživatelům možnost spouštět virtuální stroje z vlastních nebo předinstalovaných obrazů.

Uživatelé

Uživatelem *MetaCentra* se může stát každý člen akademické komunity ČR, včetně zahraničních studentů či zaměstnanců působících v našich institucích. Pro vybrané účely je mohou využívat i zaměstnanci komerčního výzkumu, konkrétní případy je třeba konzultovat se správci systému. Příklady konkrétních uživatelů a jimi řešených úloh najdete v ročenkách, které *MetaCentrum* vydává.

Použití je bezplatné. Ve vznikajících publikacích však požadujeme poděkování *MetaCentru*. Právě publikace a další významné výstupy uvádějící *MetaCentrum* hrají roli určitého neformálního „platidla“ – díky nim může uživatel získat vyšší prioritu pro své úlohy. Místo financí funguje tedy mezi uživateli motivační systém.

Novinkou ve správě uživatelů je jejich povinné navázání na akademickou federaci identit *eduID.cz* (psali jsme o ní v *Datagramu* číslo 21). Pokud je vaše domovská instituce zapojena do *eduID.cz* jako poskytovatel identit, nestojí vašemu zapojení do *MetaCentra* nic v cestě. Stačí vyplnit na webu přihlášku a přidat se k přibližně pěti stům stávajících uživatelů. Není-li vaše instituce dosud do *eduID.cz* zapojena, můžete využít novou službu *hostel*, o které informujeme níže. Do

eduID.cz hostel

Škála služeb, které pro řízení uživatelských přístupů využívají informace z federace identit *eduID.cz*, utěšeně roste. Na druhé straně tím ale vzniká problém pro uživatele pocházející z těch organizací připojených k infrastruktuře spravované *CESNETem*, které se do federace dosud nezapojily v roli poskytovatelů identit.

Pro tyto uživatele jsme uvedli do provozu novou službu – *eduID.cz Hostel Identity Provider*. Zde si může svou identitu založit prakticky kdokoli. Stačí mít adresu pro elektronickou poštu a vyplnit samoobslužný registrační formulář.

Takováto registrace samozřejmě o uživateli mnoho nevyovídá, ve skutečnosti jím může být prakticky

MetaCentra mají přístup jen uživatelé *hostel* s ověřenou identitou.

Určité skupiny uživatelů – například vědci ze stejného oboru nebo řešitelé jednoho projektu – mívají společné zájmy a řeší podobné problémy. Tento typ vztahů odrážejí *virtuální organizace*, do nichž se uživatelé *MetaCentra* mohou sdružovat. Vedle vlastních podporujeme i mezinárodní virtuální organizace v rámci EGI, obvykle spojené s mezinárodními projekty.

Každá virtuální organizace má svého správce, který spravuje její členstvo i případné zdroje, jimiž organizace může disponovat. Z pohledu uživatele není členství omežováno – může vstoupit do libovolného počtu virtuálních organizací.

Návaznost na další projekty

MetaCentrum není samozřejmě jedinou domácí iniciativou směřující do oblasti náročných výpočtů. Má ale statut národní gridové infrastruktury (NGI) České republiky. Z této pozice náš stát reprezentuje v příslušných mezinárodních projektech a na domácí půdě hraje významnou koordinační roli.

V mezinárodním kontextu má za sebou podíl na dlouhé řadě projektů podporovaných několika rámcovými programy EU, jejichž historie sahá až do roku 2001. Patří sem *DataGrid*, série tří navazujících projektů *EGEE* a *EGI DS*, jejichž cílem byl návrh, vytvoření a rozvoj gridové infrastruktury pro evropský výzkum. Tato spolupráce stále pokračuje, aktuálně v podobě projektů *EGI InSPIRE*, *EMI* a *CHAIN*. Vedle rozvoje gridové infrastruktury *MetaCentrum* bylo nebo dosud je zapojeno i do několika aplikačně orientovaných mezinárodních projektů (*MediGrid*, *Ithantet*), či projektů směřujících ke vzdělávání uživatelů (*EUAsiaGrid*, *EPIKH*). Díky těmto aktivitám získávají jeho uživatelé přístup i k zahraničním gridovým infrastrukturám a jejich zdrojům.

Na národní úrovni je pro *MetaCentrum* klíčová spolupráce s relevantními nově vznikajícími velkými infrastrukturami pro výzkum, vývoj a inovace – brněnským *Centrem CERIT-SC* a ostravským *IT4Innovations*. Tyto projekty, jejichž plánované výpočetní výkony *MetaCentrum* výrazně rozšíří, nabídnou po svém uvedení do provozu uživatelům zcela nové možnosti.

Více se dočtete na adrese

<http://www.metacentrum.cz/>

kdokoli. Identity poskytované *hostelem* se proto dělí do dvou kategorií: základní a ověřené. U základních identit počítejte s velmi omezeným sortimentem služeb, protože tito uživatelé jsou de facto anonymní.

Chcete-li využívat *hostel* pro přístup k netriviálním službám, nechte ověřit svou identitu. Znamená to osobní návštěvu u registračního úředníka (v Praze nebo v Brně) s dokladem totožnosti a dokladem potvrzujícím vaši příslušnost k uvedené instituci. Získáte tak regulérní identitu respektovanou ve federaci, i když vaše instituce dosud není poskytovatelem identit.

<http://hostel.eduid.cz/>