

Cyfronet – Centrum komputerowe przyjazne użytkownikom

Centra superkomputerowe tradycyjnie postrzegane są jako miejsca niedostępne, zamknięte przed światem, w których magazynowany jest ciężki sprzęt komputerowy, a niedostępni pracownicy centrów administrują superkomputerami.

Ten wymowny i mało atrakcyjny opis kalkowiec nie odpowiada rzeczywistości wielu centrów, a w szczególności Akademickiego Centrum Komputerowego CYFRONET AGH i jego szerokiej gamie aktywności, poprzez które stanowi ono otwartą przestrzeń rozwoju usług informatycznych dla polskich naukowców.

Pracownicy Cyfronetu to nie tylko administratorzy, ale również wysokiej klasy architekci oprogramowania, programiści, naukowcy oraz osoby wyspecjalizowane w zarządzaniu usługami IT, którzy na co dzień zajmują się rozwojem i utrzymaniem infrastruktury, ale też czynnie wspierają użytkowników w korzystaniu z jej zasobów.

Cyfronet to również inkubator dla rozwoju badań dziedzinowych. To tutaj powstają gridy dziedzinowe – specyficzne usługi, narzędzia i poszerzona infrastruktura dedykowana potrzebom różnych grup naukowców. Dzięki nim buduje się przestrzeń, w której naukowcy we współpracy z ekspertami IT tworzą rozwiązania mogące służyć wielu różnym dziedzinom. Gridy dziedzinowe

to także współpraca naukowców różnych specjalności i adaptowanie sprawdzonych informatycznych rozwiązań, wymiana doświadczeń i wspólne korzystanie z nowoczesnych technologii.

Wielkie moce, czyli od Mega do Peta

Dostarczanie mocy obliczeniowej superkomputerów dla potrzeb nauki to jedna z pierwszych historycznie aktywności Cyfronetu. Pierwszy superkomputer został zainstalowany w Centrum w 1975 roku. Był to CDC Cyber 72 o zawrotnych jak na owe czasy parametrach: mocy obliczeniowej 0,5 MFlopsa i pamięci dyskowej o pojemności 400 MB. Z biegiem lat park superkomputerów zainstalowanych w Cyfroniecie zmieniał się. Warto wspomnieć o Convex 120 – pierwszy komputer wektorowy w Europie Środkowej oraz HP Exemplar SPP1600/XA – sklasyfikowany w roku 1996 na 408 miejscu listy TOP500, najszybszych superkomputerów na świecie, co wówczas było sporym sukcesem.

Od roku 2008 w Cyfroniecie pracuje superkomputer ZEUS, który aktualnie posiada ponad 25 000 rdzeni obliczeniowych o łącznej teoretycznej mocy obliczeniowej 374 Tflops, 60 TB pamięci operacyjnej RAM

oraz pamięć dyskową o pojemności 2,3 PB. Wyposażony jest dodatkowo w ponad 200 kart GPGPU, co stanowi bardzo duże wsparcie dla pewnej klasy obliczeń.

ZEUS od momentu instalacji 10 razy z rzędu był notowany na prestiżowej liście TOP500 jako najszybszy system superkomputerowy w Polsce. Lista ta jest ogłaszana dwa razy w roku. Na liście TOP500 ZEUS zajmował bardzo wysokie miejsca: cztery razy w pierwszej setce, w tym najwyższą na 81 pozycji. W ostatniej edycji TOP500, ogłoszonej w listopadzie 2014 roku na konferencji SC'2014 w Nowym Orleanie, Zeus znalazł się na 211 miejscu zestawienia.

Notowania ZEUSA i jego moc obliczeniowa w poszczególnych latach na liście Top500 były następujące:

- 2010, czerwiec – 161 miejsce – 55 TF,
- 2010, listopad – 84 miejsce – 105 TF,
- 2011, czerwiec – 80 miejsce – 124 TF,
- 2011, listopad – 88 miejsce – 162 TF,
- 2012, czerwiec – 89 miejsce – 271 TF,
- 2012, listopad – 106 miejsce – 333 TF,
- 2013, czerwiec – 113 miejsce – 374 TF,
- 2013, listopad – 145 miejsce – 374 TF,
- 2014, czerwiec – 176 miejsce – 374 TF,
- 2014, listopad – 211 miejsce – 374 TF.

Jednak ważniejsze od rankingów jest intensywne wykorzystywanie Zeusa przez środowisko naukowe, o czym świadczą poniższe dane statystyczne, dotyczące liczby zadań i czasu obliczeń w kolejnych latach:

- 2008 – 603 525 zadań, czas: 207 lat,
- 2009 – 2 227 804 zadań, czas: 876 lat,
- 2010 – 4 009 049 zadań, czas: 990 lat,
- 2011 – 7 557 817 zadań, czas: 5052 lat,
- 2012 – 8 126 522 zadań, czas: 7923 lat,
- 2013 – 7 932 978 zadań, czas: 11 016 lat,
- 2014 – 7 694 224 zadań, czas: 12 980 lat.

Zeus jest heterogenicznym klastrem obliczeniowym. Składa się z czterech klas węzłów, zróżnicowanych pod względem architektury zasobów obliczeniowych, specjalnie dostosowanych do wymagań środowisk naukowych:

- klasycznego klastra serwerów obliczeniowych, z wysoko wydajnymi węzłami CPU wyposażonymi w dwa procesory Intel Xeon i do 16 GB pamięci na rdzeń,



foto: ACCK Cyfronet AGH

Budynek Cyfronetu po remoncie

- klastra serwerów z dużą ilością pamięci – złożonego z tzw. „grubych” węzłów z czterema procesorami AMD i 4 GB pamięci na rdzeń (256 GB na węzeł),
- zestawu serwerów wyposażonych w akceleratory GPGPU i FPGA – zbudowanego z węzłów z procesorami Intel Xeon i dwoma kartami Nvidia M2050 lub ośmioma kartami Nvidia M2090 oraz układami rekonfigurowanymi Xilinx Virtex6/Spartan6,
- „wirtualnego” komputera SMP z dużą ilością pamięci współdzielonej, wykorzystującego dodatkowe oprogramowanie vSMP firmy ScaleMP, które pozwala na uruchamianie się maszyn posiadających do 768 rdzeni i 6 TB pamięci RAM.

Zróżnicowanie rodzajów węzłów umożliwia dopasowanie aplikacji użytkowników do sprzętu, który jest najlepiej dobrany do cech i specjalnych wymagań tych aplikacji. Klasyczne węzły CPU są najczęściej wykorzystywane do realizacji szeregowych i równoległych (MPI) zadań obliczeniowych, podczas gdy tzw. „grube” węzły są dedykowane dla zadań wymagających dużej ilości pamięci operacyjnej. Węzły GPGPU pozwalają niektórym aplikacjom na korzystanie z akceleratorów graficznych, a maszyna vSMP umożliwia uruchamianie zadań wymagających ogromnej pamięci lub pozwala na skalowanie aplikacji, które nie korzystają z żadnej biblioteki komunikacji między węzłami, takiej jak MPI, w celu zrównoleglenia obliczeń.

Coraz większe zapotrzebowanie na obliczenia masywnie równoległe, wykorzystujące dziesiątki tysięcy rdzeni, na potrzeby wielu dziedzin nauki – np. badania nowych materiałów, dedykowanych leków oraz coraz większa liczba danych badawczych wpływająca nieprzerwanie z urzędzeń badawczych – to wyzwania, z którymi będzie mierzył się nowy superkomputer zainstalowany w Cyfronecie – Prometheus, o mocy obliczeniowej ponad 1,7 PFlopsa. Superkomputer zbudowany jest z najnowocześniejszych procesorów Intel Haswell. Prometheus jest szybszy ponad czterokrotnie od Zeusa i ponad 3 miliardy razy od Cybera! Superkomputer będzie dostępny dla użytkowników od kwietnia 2015 r. W odróżnieniu od Zeusa i większości innych superkomputerów do jego chłodzenia jest używana woda, a nie powietrze, jak we wszystkich dotychczasowych rozwiązaniach. Prometheus został zainstalowany w nowej hali komputerowej, wyposażonej w specjalną instalację do jego chłodzenia. Więcej o Prometheusie w artykule pt. „Prometheus – bardzo nowoczesny superkomputer”.

Ważnym elementem składowym superkomputerów są pamięci masowe. Cyfronet



Superkomputer Baribal

zapewnia bezpieczeństwo danych naukowych przechowywanych i analizowanych na superkomputerach znajdujących się w Centrum. Złożoność Systemu Magazynowania Danych odzwierciedlają budujące go elementy: sieć SAN (ang. *Storage Array Network*), macierze dyskowe i serwery różnych typów, serwery usług (wraz z oprogramowaniem usługowym i wirtualizacyjnym), biblioteki taśmowe, szybki Ethernet, sieć InfiniBand oraz dedykowane rozwiązania informatyczne wspierające infrastrukturę IT. Użytkownicy mogą także korzystać z usługi tworzenia kopii zapasowych w oparciu o protokoły FTP, NFS i SCP, a w szczególnych przypadkach używać Systemu Powszechnej Archiwizacji. Umożliwia on zabezpieczenie przestrzeni dyskowej na wielu poziomach, a osoba korzystająca z tej usługi może dodatkowo zabezpieczyć dane szyfrując je przy pomocy certyfikatów.

Oprogramowanie naukowe

Jedną z cech odróżniających zwykły komputer od superkomputera jest także obecność na tym ostatnim wysoce profesjonalnego dedykowanego oprogramowania naukowego. Same bowiem moce obliczeniowe bez softwareowych pakietów naukowych byłyby bezużyteczne. Oprogramowanie użytkowane przez Centrum obejmuje szerokie portfolio zdyswersyfikowane pod kątem potrzeb użytkowników. Co ważne, tam gdzie to jest możliwe, oprogramowanie wykorzystuje obliczenia równoległe, tak aby maksymalnie szybko dostarczyć użytkownikowi wyniki obliczeń.

Jednymi z najbardziej wymagających są **obliczenia struktury elektronowej i dynamiki molekularnej** wykorzystywane głównie w chemii i biologii. Na potrzeby tych dziedzin oferujemy:

- Wszechstronne i powszechnie używane programy kwantowochemiczne takie jak Gaussian, GAMESS US, NWChem czy TURBOMOLE.
- Pakiety Molpro, CFOUR i Dalton do analizy systemów molekularnych z dużą dokładnością.
- Pakiet ADF przydatny w szczególności do modelowania własności spektroskopowych.
- Pakiety do obliczeń układów periodycznych. Wśród nich BAND, Quantum ESPRESSO oraz SIESTA.
- Desmond, Gromacs, Amber, LAMMPS, NAMD, CPMD, CP2K i Terachem przeznaczone do symulacji wykorzystujących mechanikę molekularną oraz dynamikę molekularną dla systemów zbudowanych nawet z setek tysięcy i więcej atomów.

Pakiety do masowo równoległego przetwarzania danych: ROOT, RooFit, GooFit przeznaczone do analizy danych wykorzystywane są obecnie głównie na potrzeby fizyki wysokich energii. Biblioteka GooFit wzorowana jest w dużej mierze na dodatku RooFit, który stworzony został w celu ułatwienia procesu dopasowania modeli teoretycznych do eksperymentalnych danych pomiarowych. Pakiet GooFit rozszerza funkcjonalność biblioteki RooFit o możliwość uruchamiania procedur dopasowania na urządzeniach wyposażonych w procesory graficzne zbudowane w oparciu o model masowego równoległego przetwarzania CUDA. Dzięki zastosowaniu biblioteki GooFit możliwe jest przyspieszenie procedury dopasowania od 10 do 1000 razy (w zależności od użytego modelu teoretycznego, który ma zostać dopasowany do danych).

Aplikacje typu CAD (projektowanie wspomagane komputerowo) oraz CAE

(komputerowe wspomaganie prac inżynierskich) stanowią dziś nieodłączną część procesu projektowania i budowy niemal wszystkiego – od części samochodowych po budynki. Dzięki symulacjom komputerowym inżynierowie mogą dokonywać oceny wytrzymałościowej elementów maszyn i konstrukcji, wykonywać liniowe i nieliniowe analizy strukturalne z uwzględnieniem odkształceń, zjawisk kontaktowych, plastyczności, hipersprężystości itp. Istotne miejsce w dziedzinie nauk ścisłych zajmują również symulacje dotyczące: spalania, turbulencji, przepływów wielofazowych, reakcji chemicznych, radiacji i mechaniki płynów. Badanie powyższych zagadnień umożliwia takie pakiety jak ANSYS, FLUENT, ABAQUS, czy OPERA. Obliczenia z wykorzystaniem tych pakietów możliwe są zarówno w trybie wsadowym jak i poprzez rozbudowane środowiska graficzne, dzięki czemu obsługa tych pakietów jak i późniejsza analiza wyników obliczeń jest ułatwiona.

Użytkownicy Cyfronetu mają również dostęp do gamy **programów matematycznych**, wspomagających wykonywanie zaawansowanych zadań z algebry, analizy, kombinatoryki, statystyki, teorii liczb, geometrii jak i innych działów matematyki. Wykonywanie działań takich jak całkowanie, różniczkowanie, obliczenia symboliczne, aproksymacja i interpolacja, Transformata Fouriera i Laplace'a, operacje macierzowe, przetwarzanie sygnałów cyfrowych itp. staje się o wiele łatwiejsze. Przy pomocy odpowiednich narzędzi możliwa jest także wizualizacja wyników działań na zbiorach liczb rzeczywistych i/lub zespolonych. Niektóre programy pozwalają dodatkowo na tworzenie wykresów interaktywnych 2D lub 3D. Wszystkie te funkcjonalności są bardzo istotne, ponieważ w pracy badawczej kluczowe jest często przygotowanie precyzyjnego modelu, jak najdokładniej opisującego analizowane zagadnienie. Przykładami takich środowisk są MATLAB, MATHEMATICA i MAPLE. Moduły rozszerzeń dodatkowo zwiększają funkcjonalność tych pakietów.

PLGrid – infrastruktura, konsorcjum i program

Cyfronet, jako przestrzeń współpracy naukowców z różnych dziedzin, jest otwarty na potrzeby użytkowników. Reagując na zmieniające się sposoby prowadzenia badań naukowych, coraz częściej realizowanych w dużych międzynarodowych konsorcjach, a coraz rzadziej przez pojedynczych badaczy, Cyfronet zainicjował Program PLGrid. Pod przewodnictwem Cyfronetu zostało powołane Konsorcjum PLGrid zrzeszające wszystkie akademickie centra KDM (Kom-

puterów Dużej Mocy) w Polsce: ACK Cyfronet AGH w Krakowie, PCSS Ich PAN w Poznaniu, ICM UW w Warszawie, WCSS PWR we Wrocławiu i TASK PG w Gdańsku.

Pierwszym etapem Programu PLGrid była budowa, jednolitej z punktu widzenia użytkownika, infrastruktury obliczeniowej PLGrid. Budowa zapoczątkowana została projektem „Polska Infrastruktura Informatycznego Wspomagania Nauki w Europejskiej Przestrzeni Badawczej – PL-Grid”. W jego ramach Konsorcjum oddało użytkownikom, w pełni funkcjonalną infrastrukturę obliczeniową. Dostęp do niej, jak i wszystkich jej usług, odbywa się za pomocą jednego hasła do konta użytkownika. Centralnym miejscem dostępu do infrastruktury jest Portal PLGrid. Umożliwia on dostęp do wybranych zasobów, dedykowanego sprzętu i usług.

Drugi etap Programu PLGrid to dostarczenie naukowcom profesjonalnego wsparcia informatycznego poprzez specyficzne środowiska obliczeniowe, czyli usługi i oprogramowanie, jak również wsparcie użytkowników w planowaniu, uruchamianiu i analizie wyników złożonych eksperymentów naukowych. Przygotowanie tych środowisk, nazywanych gridami dziedzinowymi, rozpoczęło się wraz z realizacją projektu „Dziedzinowo zorientowane usługi i zasoby infrastruktury PL-Grid dla wspomagania Polskiej Nauki w Europejskiej Przestrzeni Badawczej – PLGrid Plus” dla 13 pilotażowych gridów dziedzinowych. Kontynuacją tych działań jest kolejny projekt „Dziedzinowe Usługi Nowej Generacji w Infrastrukturze PL-Grid dla Polskiej Nauki – PLGrid NG”, w ramach którego realizowane są usługi dla kolejnych 14. Gridów. Dostęp do usług możliwy jest za pomocą Portalu PLGrid.

Dzięki wieloletniemu zaangażowaniu w rozwój gridowych infrastruktur obliczeniowych, Cyfronet jest obecnie rozpoznawany jako centrum kompetencji w zakresie obliczeń gridowych i cloudowych. W tym obszarze realizowane jest obecnie nowe przedsięwzięcie o nazwie „Centrum kompetencji w zakresie rozproszonych infrastruktur typu gridowego – PLGrid Core”. Jest to kolejny etap Programu PLGrid, mający na celu dostarczenie nowoczesnych platform prowadzenia badań dla naukowców. W jego ramach zostaną udostępnione:

- Superkomputer Prometheus o mocy obliczeniowej 1,7 PF,
- Platforma jednolitego dostępu do rozproszonych danych,
- Środowisko obliczeń w chmurze typu PaS (ang. Platform as a Service),
- Platforma MapReduce dla dużych zbiorów danych.

Platformy te odpowiadają na potrzeby użytkowników dotyczące dostępu, wyszukiwania i analizy dużych ilości danych naukowych gromadzonych przez Centrum.

Miejska Sieć Komputerowa

Dostęp do superkomputerów i danych zmagazynowanych w Centrum, prawidłowe funkcjonowanie infrastruktury PLGrid i współpraca rozproszonych geograficznie grup naukowców – wszystko to nie byłoby możliwe bez sprawnie działającej sieci komputerowej. Sieci, która z jednej strony łączy naukowców z zasobami Cyfronetu i PLGrid, z drugiej zaś dzięki połączeniom międzynarodowym, dedykowanym serwisom i narzędziom umożliwia współpracę naukową z całym światem w ramach dużych projektów badawczych.

Szkielet Krakowskiej Miejskiej Sieci Komputerowej obsługiwanej przez Cyfronet zbudowany jest z ponad 120 km łączy światłowodowych. Światłowody są ułożone w rejonie Starego Miasta, w okolicach kampusu AGH, docierają do Bronowic, Krowodrzy oraz do Czyżyn i Nowej Huty. Zrealizowane są przyłącza odległych instytucji w Prokocimiu, w rejonie Borku Fałęckiego oraz na terenie III Kampusu Uniwersytetu Jagiellońskiego w Pychowicach.

W warstwie rdzeniowej sieci miejskiej zastosowano nowoczesne przełączniki wyposażone w interfejsy 1 i 10 Gb Ethernet. Wszystkie urządzenia warstwy rdzeniowej są połączone przynajmniej z dwoma lub trzema sąsiednimi, co pozwala automatycznie przełączyć ruch w przypadku awarii jednego z urządzeń lub awarii linii światłowodowej. Warstwę dystrybucyjną sieci oparto o przełączniki, z których każdy jest wyposażony w dwa interfejsy 1 Gb Ethernet (przyłączenie do warstwy rdzeniowej) oraz szereg interfejsów ethernetowych typu 10/100/1000 Mbps służących do przyłączenia użytkowników końcowych.

Krakowska Miejska Sieć Komputerowa jest połączona z akademicką siecią kręgosłupową PIONIER w kierunku Warszawy, Katowic, Bielska-Białej i Rzeszowa łączami sieci o przepustowości 2x10 Gb/s, a wkrótce o przepustowości Nx100 Gb/s. Za pośrednictwem sieci PIONIER realizowana jest komunikacja z wieloma ośrodkami krajowymi oraz zagranicznymi. Łączność zagraniczna odbywa się poprzez europejską naukową sieć GEANT.

Miejska Sieć Komputerowa to nie tylko szybkie łącza. Integralną jej częścią są również usługi sieciowe. Należy do nich poczta e-mail, serwisy news, www, ftp czy oddany niedawno dysk sieciowy. Pracownicy na-

ukowi mają również możliwość skorzystania z usług EduRoam, dzięki czemu możliwa jest łączność w każdym miejscu na świecie objętym zasięgiem EduRoam'u, przy użyciu jednego autoryzowanego konta.

Konferencje

Współpraca z wieloma zespołami badawczymi owocuje organizowaniem przez Cyfronet konferencji naukowych: Konferencja Użytkowników Komputerów Dużej Mocy – KU KDM i Cloud-Grid Workshop – CGW. Konferencje te zapewniają możliwość prezentowania osiągnięć szerokiemu gronu odbiorców z różnych dziedzin nauki, a także są ważnym forum wymiany doświadczeń i rozwoju współpracy. Są też okazją do dyskusji wyników prac badawczych w gronie ekspertów.

Warto nadmienić, że Cyfronet promuje osiągnięcia naukowe młodych badaczy. Corocznie organizowany jest konkurs na najlepszą pracę doktorską wykonaną w oparciu o zasoby komputerowe ACK Cyfronet AGH. Laureaci, oprócz nagród rzeczowych, otrzymują możliwość zaprezentowania swych prac doktorskich podczas sesji naukowej odbywającej się w trakcie Dnia Otwartego ACK Cyfronet AGH.

– Cyfronet powstał w marcu 1973 roku, jako pierwsze w Polsce centrum superkomputerowe. Nasza historia to ukształtowanie profesjonalnej kadry i profesjonalnych usług, ale także zobowiązanie do ciągłych, intensywnych prac nad unowocześnianiem naszych zasobów i usług. Pracownicy Cyfronetu, wspierani przez Radę Użytkowników, starają się jak najlepiej odczytywać potrze-

by obliczeniowe środowiska naukowego. W tych pracach liczymy na naszych Użytkowników, na wspólne dyskusje o potrzebach naukowców i o kierunkach rozwoju Cyfronetu. Za tę współpracę bardzo dziękujemy i prosimy o dalszą aktywność na tym polu. Chcemy, aby nasza dewiza „Cyfronet przyjazny użytkownikom” była jak najlepiej wypełniana! – mówi prof. Kazimierz Wiatr, Dyrektor Naczelny Cyfronetu.

Mariusz Sterzel
Agnieszka Szymańska
Robert Pająk