Superpočítání a gridové počítání

Martin Petřek,[1,2] Petr Kulhánek,[1,2]

Jan Kmuníček[1,3]

petrek@chemi.muni.cz, kulhanek@chemi.muni.cz, kmunicek@ics.muni.cz

1) CESNET z. s. p. o., Zikova 4, CZ-16000 Praha, Česká republika

2) Národní centrum pro výzkum biomolekul, Přírodovědecká Fakulta, Masarykova univerzita, Kotlářská 2, 61137 Brno, Česká republika

3) Ústav výpočetní techniky, Masarykova univerzita, Botanická 68a, 60200 Brno, Česká republika

Obsah

1. Náročné výpočty a aplikace
   - Výpočetní chemie, částicová fyzika, zpracování dat
2. Gridové systémy a práce v nich
   - METACentrum, EGEE2
3. Software pro řazení a správu úloh
   - PBS, gLite/LCG
   - ukázka spouštění jobů
4. Systém CHARON
   - Koncepce systému
   - Použití na klastru a v gridu
   - Správa aplikací

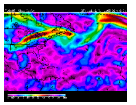
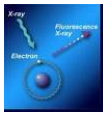
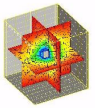
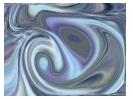
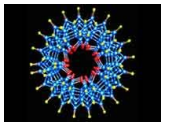
Náročné výpočty a aplikace

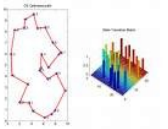
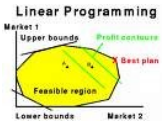
Co jsou náročné výpočty?

- relativní pojem vzhledem k prudkému vývoj výpočetní techniky
- jednotka výkonu – FLOPS (Floating Point Operations Per Second)
- jednotka dat – BYTE
- dnešní Pentium 4, 1GB RAM, 2GHz – výkon několik GFLOPS
- *do náročných výpočtů řadíme aplikace vyžadující*
  - výkon v řádech >=TFLOPS vyšší
  - práce s daty v řádech >=GB
- *„aplikace běžící na superpočítačích nebo rozsálých výpočetních systémech (gridy)“*
- doba běhu na domácím PC by trvala týdny, měsíce, roky, ...

Náročné výpočty a aplikace

Typy aplikací:

- *Matematicko-Fyzikální aplikace*:
  - modely předpovědi počasí (systém Aladin) 
  - simulace experimentů z oblasi částicové fyziky (HEP) 
  - úlohy z oblasti pružnosti-pevnosti, termo-elasticita (FEM) 
  - simulace proudění kapalin (CFD) 
  - materiálové inženýrsví, nanotechnologie 
  - simulace zemetřesení

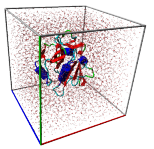
  - NP-těžké úlohy (TSP), optimalizační úlohy 
  - úlohy z lineárního resp. matematického programování 

  - lámání šifer (DES, Enigma [M4 Project]) 
  - hledání prvočísel (GIMPS), ...

Náročné výpočty a aplikace

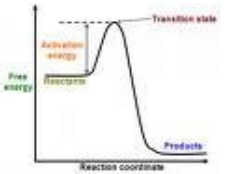
Typy aplikací:

- *Chemické-biologické aplikace*:
  - simulace chování biologických systémů (Molekulová dynamika)



  - návrhy léčiv (studium interakce enzym X léčivo)
  - molekulové dokování a konformační analýza molekul

  - zkoumání reakčních mechanizmů (tranzitní stavy, odhady energetických rozdílů pro reakční cestu, výpočty 'volné energie')



  - protein folding

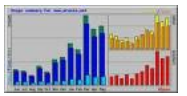
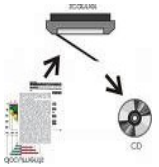
  - simulace chování organismů v prostředí

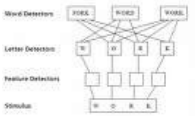
  - šíření epidemií v prostředí

Náročné výpočty a aplikace

Typy aplikací:

- *Zpracování dat:*
  - lékařsví (CT-snímky, NMR, příznakové rozpoznávání)
  - zpracování rozsáhlých statistik
  - analýza a rozpoznávání obrazu
  - HEP - částicové experimenty (ATLAS, CMS, Alice, LHCb)
  - tvorba expertních systémů (AI)
- *Visualizace dat*
  - *renderování náročných scén*
- *Ostatní*
  - simulace sociálních a ekonomických jevů
  - ...a spousta dalších...

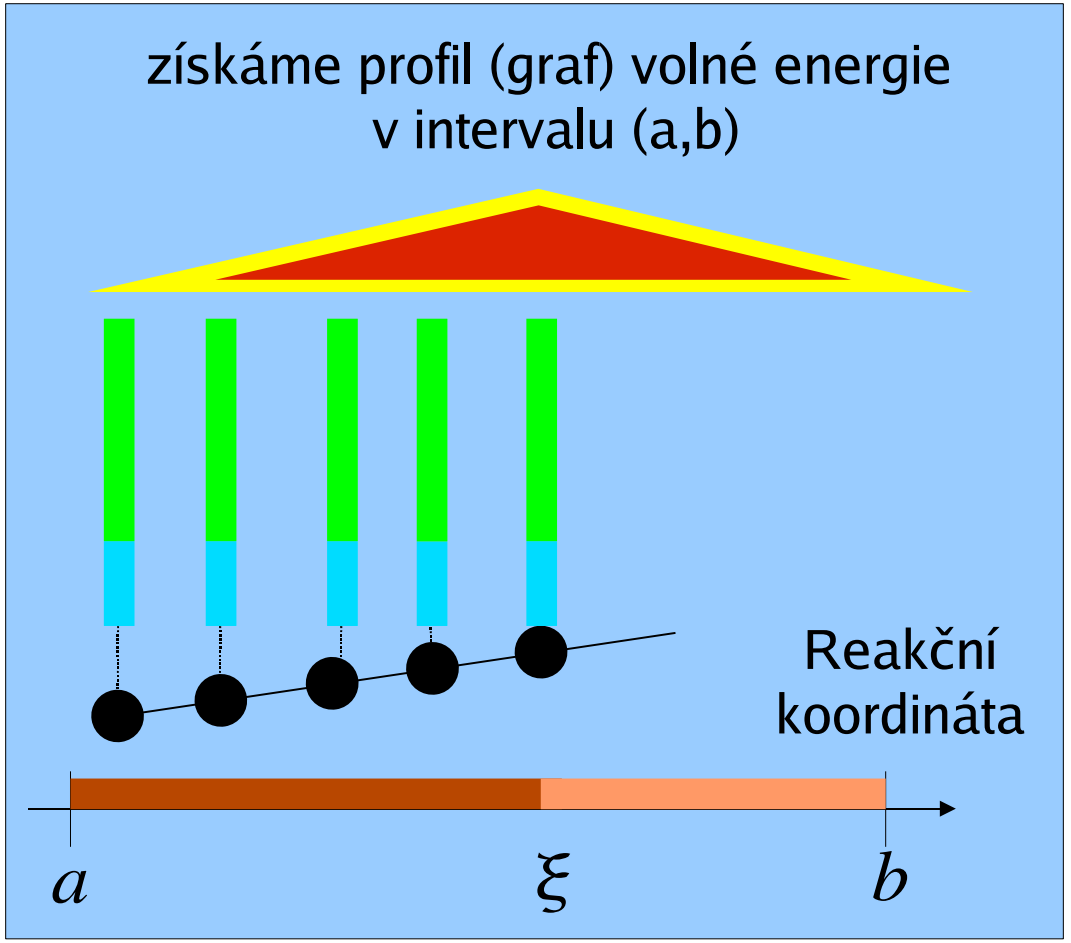







Náročné výpočty a aplikace

Příklad z výpočetní chemie – výpočet volné energie

- hlavní úloha (doba běhu ~ 15h) - generuje mnoho podúloh (stovky)
- podúloha (doba běhu ~ 25 h) (2 CPU)



- na domácím PC (1CPU) by úloha trvala ~ 7 měsíců (24 h denně)
- v METACentru ~ za 3 dny máme výsledky

Náročné výpočty a aplikace

Příklad z výpočetní chemie – výpočet vibračních modů molekuly

- výpočet matice 2. derivací energie podle souřadnic (tzv. Hessian)
- 3*N*2 nezávislých výpočtů gradientu energie (Quant. Mech.)

$$\begin{pmatrix}
\frac{\partial^2 E}{\partial x_1 \partial x_1} & \frac{\partial^2 E}{\partial x_1 \partial y_1} & \frac{\partial^2 E}{\partial x_1 \partial z_1} & \cdots & \frac{\partial^2 E}{\partial x_1 \partial x_n} & \frac{\partial^2 E}{\partial x_1 \partial y_n} & \frac{\partial^2 E}{\partial x_1 \partial z_n} \\
\frac{\partial^2 E}{\partial y_1 \partial x_1} & \frac{\partial^2 E}{\partial y_1 \partial y_1} & & \cdots & & \frac{\partial^2 E}{\partial y_1 \partial y_n} & \frac{\partial^2 E}{\partial y_1 \partial z_n} \\
\frac{\partial^2 E}{\partial z_1 \partial x_1} & & & & & & \frac{\partial^2 E}{\partial z_1 \partial z_n} \\
\vdots & & & \ddots & & & \vdots \\
\frac{\partial^2 E}{\partial x_n \partial x_1} & & & & & & \frac{\partial^2 E}{\partial x_n \partial z_n} \\
\frac{\partial^2 E}{\partial y_n \partial x_1} & \frac{\partial^2 E}{\partial y_n \partial y_1} & & \cdots & & \frac{\partial^2 E}{\partial y_n \partial y_n} & \frac{\partial^2 E}{\partial y_n \partial z_n} \\
\frac{\partial^2 E}{\partial z_n \partial x_1} & \frac{\partial^2 E}{\partial z_n \partial y_1} & \frac{\partial^2 E}{\partial z_n \partial z_1} & \cdots & \frac{\partial^2 E}{\partial z_n \partial x_n} & \frac{\partial^2 E}{\partial z_n \partial y_n} & \frac{\partial^2 E}{\partial z_n \partial z_n}
\end{pmatrix}$$

- N ~ 100 atomů => 600 úloh
- 1 úloha ~ 1 hodina

- na domácím PC (25 dní)
- v METACentru ~ 1hodina

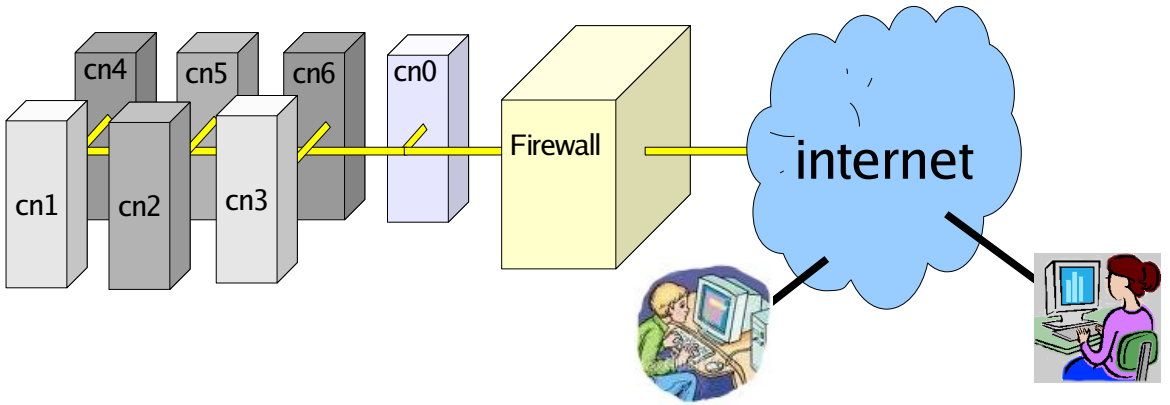
Gridové systémy a práce v nich

- *Computer cluster*
  - několik počítačů spojených pomocí sítě (LAN)
  - lze s nimi pracovat odděleně nebo se můžou navenek (při vzdáleném připojení) jevit jako jeden počítač
  - uvnitř sítě se lze svobodně pohybovat (jednotlivé počítače si navzájem „věří“)
  - lze poměrně levně postavit z běžně dostupných PC a síťových komponent
  - většinou stejné typy strojů (homogenní cluster X heterogenní cluster)
- *Gridový systém*
  - rozsáhlý co do počtu výpočetních strojů, ukládacích kapacit, ...
  - chápán spíš jako výpočetní nástroj než jako jeden počítač
  - spojení několika „clusterů“, různé architektury, heterogenní stroje
  - velký důraz na bezpečnost (dílčí clustery mohou být různě po světě)

Gridové systémy a práce v nich

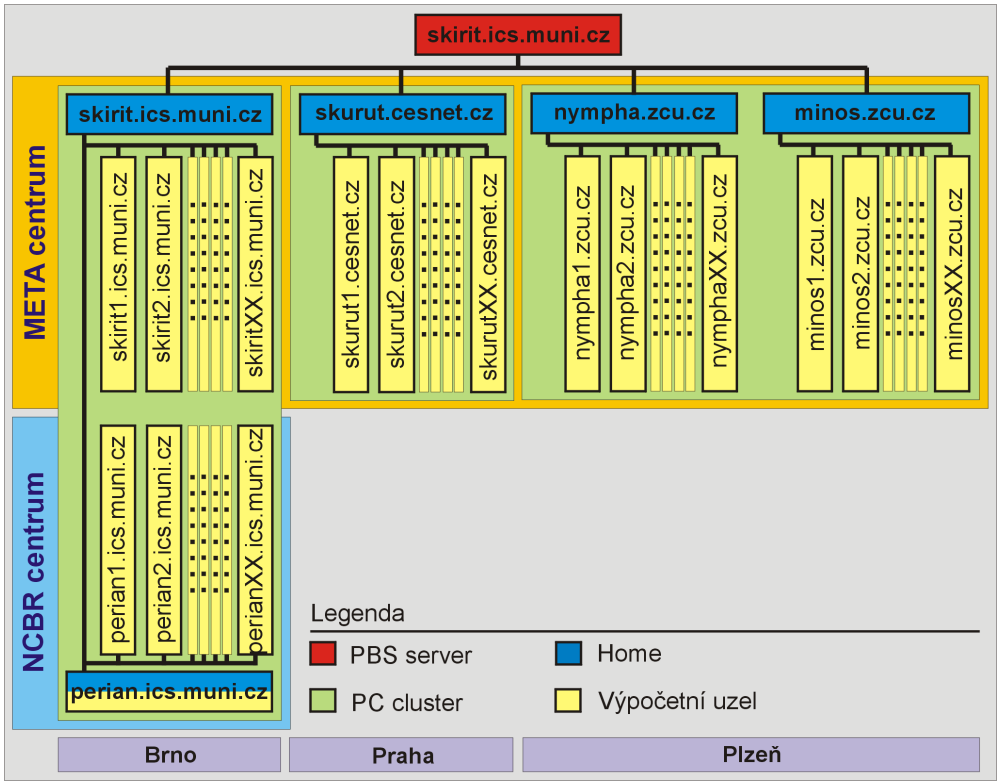
Společné znaky většiny klastrů:

- operační systémy typu UNIX (unix, linux, freebsd, netbsd, ...)
- sdílení souborů v klustru (souborové systémy NFS, AFS, ...)
- systém správy aplikačního softwaru (systém tzv. modulů)
- autentizační systém v rámci klastru (Kerberos)
- aspoň jeden centrální uzel pro přístup zvenčí (SSH, certifikáty,...)
- software pro řazení úloh do fronty (PBS+varianty, NQE, LSF, ...)
- uživatel má účet, domovský adresář přímo v systému
- z centrálního uzlu se lze logovat na jednotlivé stroje bez hesla



Gridové systémy a práce v nich

příklad HPC (high-performance cluster): METACENTRUM



http://meta.cesnet.cz (sdružení CESNET)

- Distribuovaný výpočetní systém
  - Superpočítačové centrum Brno MU (http://scb.ics.muni.cz/static)
  - Superpočítačové centrum UK (http://supercomp.cuni.cz)
  - Superpočítačové centrum ZČU (http://zsc.zcu.cz)

Techinfo: 218 uzlů, 463 CPU

SMP stroje (shared memory), klastry (1-2 procesorové PC)

1Gb/s (GE, Gigabit Ethernet) nebo 2.5Gb/s (Myrinet)

Gridové systémy a práce v nich

příklad HPC (high-performance cluster): METACENTRUM

Programové prostředky:

- distribuovaný souborový systém AFS
- autentizační systém Kerberos (kinit, kauth, SSH protokol)
- systém správy aplikačního software (meta)moduly
- přístup na centrální uzel pomocí SSH
- přístup pomocí hardwarových klíčů (Token s certifikátem)

Software pro řazení úloh (dávkové systémy):

- PBSPro – Portable Batch System, dávkový systém pro PC klastr

Gridové systémy a práce v nich

Specifika Gridů:

- výpočetní zdroje nejsou spravovány centrálně
- administrativní rozdělení gridu na „virtuální organizace (VO)“
  - speciální uzly pro ukládání dat – stroje, které zajišťují služby pro práci se soubory (Storage Elements)
  - služby pro monitorování stavu gridu
  - služby pro plánování úloh (Computing Elements)
  - vlastní výpočetní kapacity (Worker Nodes)
- k propojení VO slouží „grid-middle-ware“ - otevřené standardy

- k přihlášení do gridu slouží několik počítačů (User-Interface)
- autentizace pomocí certifikátů (silné elektronické šifrování)
- uživatel patří do VO, nemá přímý přístup ke zdrojům, ale ke službám

Gridové systémy a práce v nich

příklad gridu: Enabling Grid for E-sciencE (EGEE2)

- http://egee.cesnet.cz (informace o projektu)
- mezinárodní projekt Evropské Unie (CESNET za ČR - VOCE)
- celoevropská gridová infrastruktura pro vědeckou komunitu i průmysl (>30 zemí, 100 organizací)

pilotní aplikace:

- HEP (High Energy Physics) – zpracování a analýza dat z experimentů částicové fyziky (Atlas, CMS, Alice, LHCb, ...)
- výpočetně-chemické simulace biologických systémů
- biomedicínské gridy
- zpracování bioinformatických a lékařských dat

Gridové systémy a práce v nich

příklad gridu: Enabling Grid for E-sciencE (EGEE2)

Techinfo:

- přes 20 000 CPU (7x24h), 5 PB (5 miliónů GB), 1.5 GB/s

Programové prostředky:

- grid-middle-ware: gLite/LCG, EDG, Genius
- bezpečnost:
  - GSI (Grid Security Infrastructure)
  - X.509 certifikáty vydávané národními certifikačními autoritami (CA)
- monitorování stavu gridu: LCG2 Real Time Monitor
- databázové služby (MySQL, Oracle, ...)
- webové služby

Gridové systémy a práce v nich

Ukázka typické práce na klastru:

1) připojení z domácího stroje na centrální uzel klastru
2) příprava úlohy a spouštěcího skriptu
3) odeslání úlohy do fronty
4) monitorování úlohy
5) obdržení výsledků

i) zastavení resp. restart úlohy
ii) přeplánování úlohy, zrušení naplánované úlohy
iii) specifikace zdrojů, kde má úloha běžet
iv) monitoring stavu klastru (volné stroje, výpadky klastru)

- více uživatelů generuje spoustu úloh, kapacita zdrojů omezená

  => **systém pro plánování, řazení a správu úloh**

Software pro řazení a správu úloh

PBS – Portable Batch System (dávkový systém pro klastry)

- *úlohy se řadí do tzv. front*

fronty:

Jméno fronty	Max. doba běhu	Maximum úloh	Maximum/Uživatel
• short	2 hodiny	12	8
• normal	24 hodin	24	12
• long	720 hodin	96	32
• ncbr	720 hodin	120	32
• cpmd	720 hodin	120	16

- *strojům lze přiřadit tzv. vlastnosti (využití v heterogenních clusterech)*

Vlastnosti (meta):

- linux
- praha
- brno
- plzen
- iti

Vlastnosti (ncbr):

- lcc
- ibp
- cpmd

Vlastnosti (obecné):

- p3
- xeon
- athlon

Software pro řazení a správu úloh

PBS – Portable Batch System (dávkový systém pro klastry)

Příkazy pro základní práci s úlohami:

- *zaslání úlohy do fronty (qsub)*
- *vymazání ještě nespuštěné úlohy z fronty (qdel)*
- *informace o běžících úlohách (qstat)*
- *Informace o uzlech (pbsnodes,xpbs)*

v praxi to vypadá přibližně takto:

- *odeslání úlohy do fronty:*

```
[petrek@skirit test]$ qsub -r n -m abe -j oe -o test.out \
                           -e test.err -N "Test cislo 1" \
                           -q normal -l "node=1:brno:xeon" \
                           -v "BACKUPDIR"  test

142606.skirit.ics.muni.cz
[petrek@skirit test]$
```

standardní a chybový výstup

Identifikátor úlohy

proměnné prostředí

fronta a vlastnosti

vlastní skript

Software pro řazení a správu úloh

PBS – Portable Batch System (dávkový systém pro klastry)

- *vlastní skript*

```
[petrek@skirit petrek]$ cat test
```

```
#!/bin/bash

#PBS -W stagein=/scratch/petrek/xxx.com@skirit:test/xxx.com
#PBS -W stageout=/scratch/petrek/xxx.log@skirit:test/xxx.log

# Inicializace modulu a pridani modulu g98:
. /packages/run/modules-2.0/init/sh
module add g98

# zmena pracovniho adresare
cd /scratch/petrek

# Spusteni ulohy:
g98 xxx.com
```

Software pro řazení a správu úloh

PBS – Portable Batch System (dávkový systém pro klastry)

- Informace o úlohách

```
[petrek@skirit petrek]$ qstat
Job id            Name             User            Time Use S Queue
----------------- ---------- ---------- -------- - -----
138034.skirit-f    tri_2fsm    zeleny      68:49:00 Q long
138035.skirit-f    tri_3fsm    zeleny      188:01:0 Q long
138036.skirit-f    tri_4fsm    zeleny      99:39:18 Q long
138195.skirit-f    opt1        jsebera     107:21:3 Q long
139206.skirit-f    jedu        sponer      621:11:3 R ncbr
139731.skirit-f    a2:=24      hornak      531:31:2 R iti
140366.skirit-f    24t5p.run   vrbka       1109:53: R parallel
142457.skirit-f    S011        petrek      05:22:49 C cpmd
142562.skirit-f    m2sr        soliman     28:24:05 R cpmd
142606.skirit-f    test        petrek             0 Q normal
```

režimy úlohy: Q (naplánovaná) => R (running) => E (end) => C (completed)

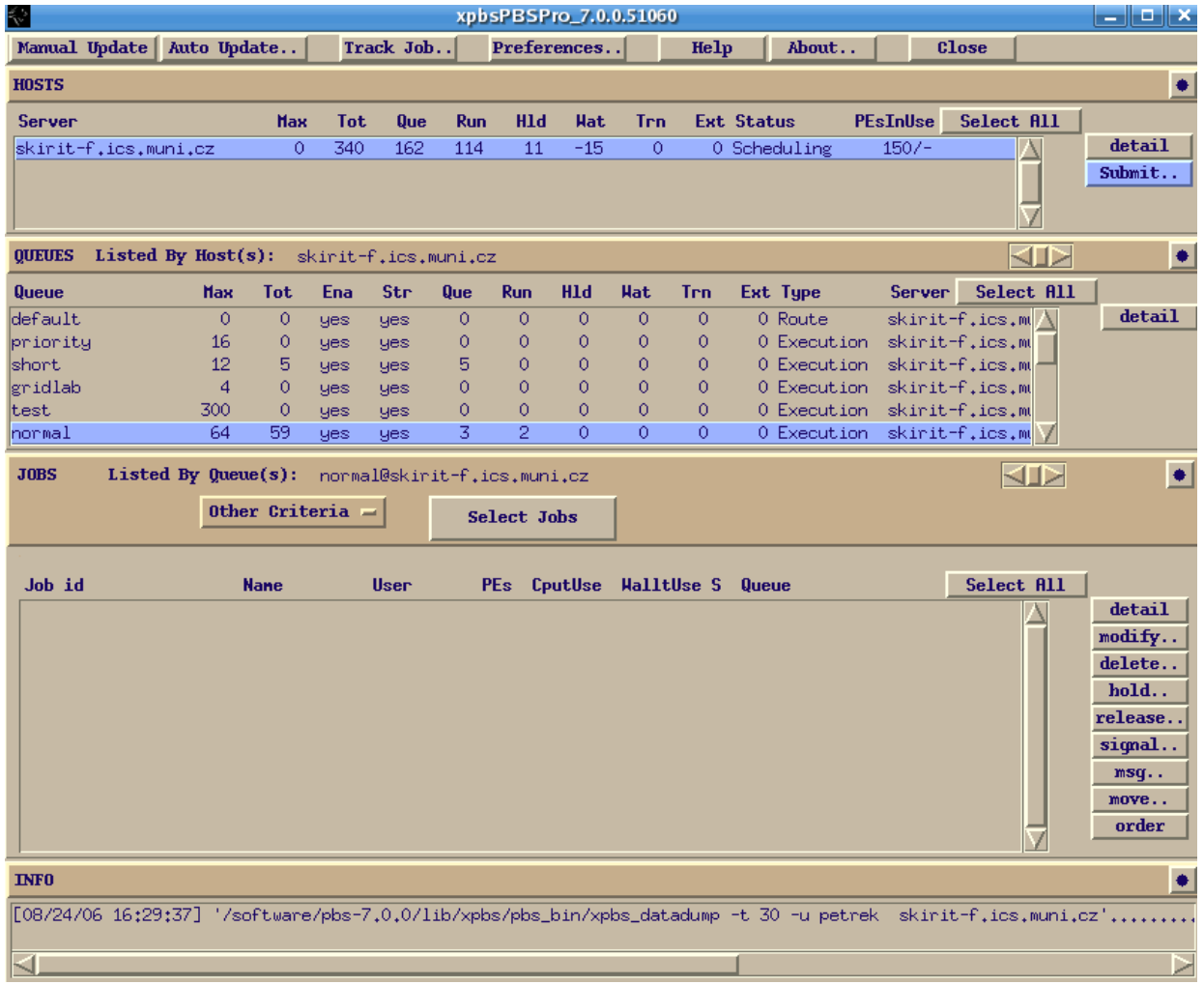
- smazání z fronty ve stavu Q:

```
[petrek@skirit petrek]$ qdel 142606
```

Software pro řazení a správu úloh

PBS – Portable Batch System (dávkový systém pro klastry)

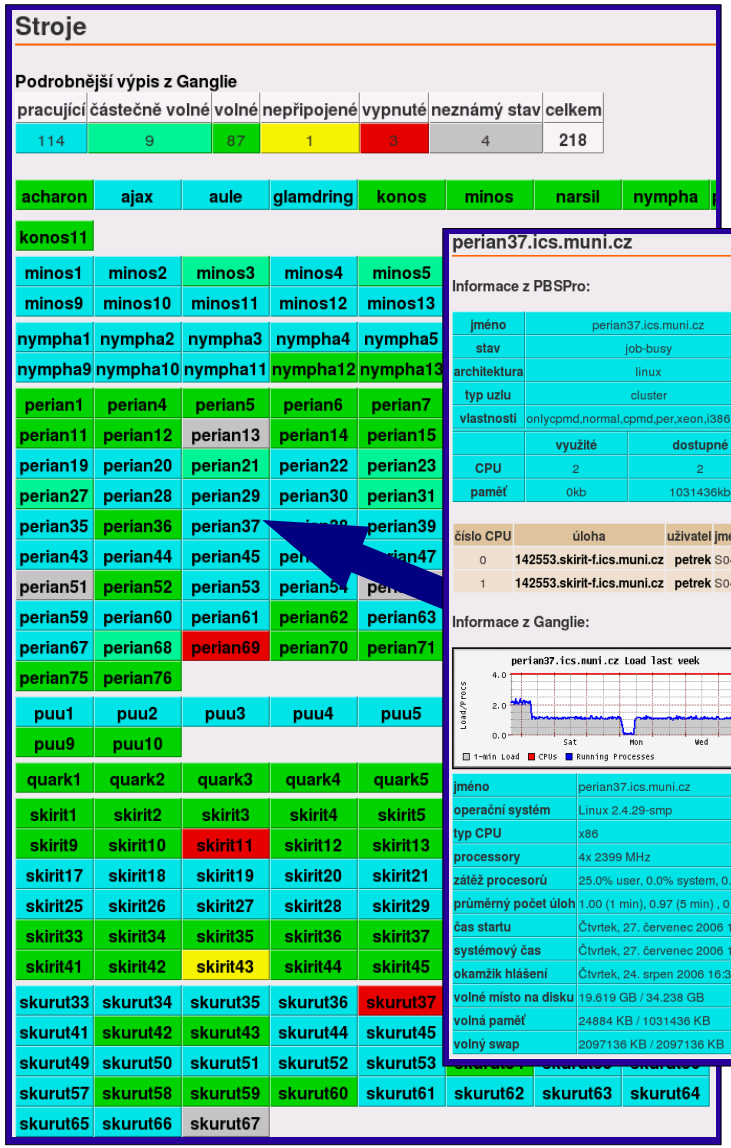
- *Monitoring úloh:* xpbs



METACENTRUM

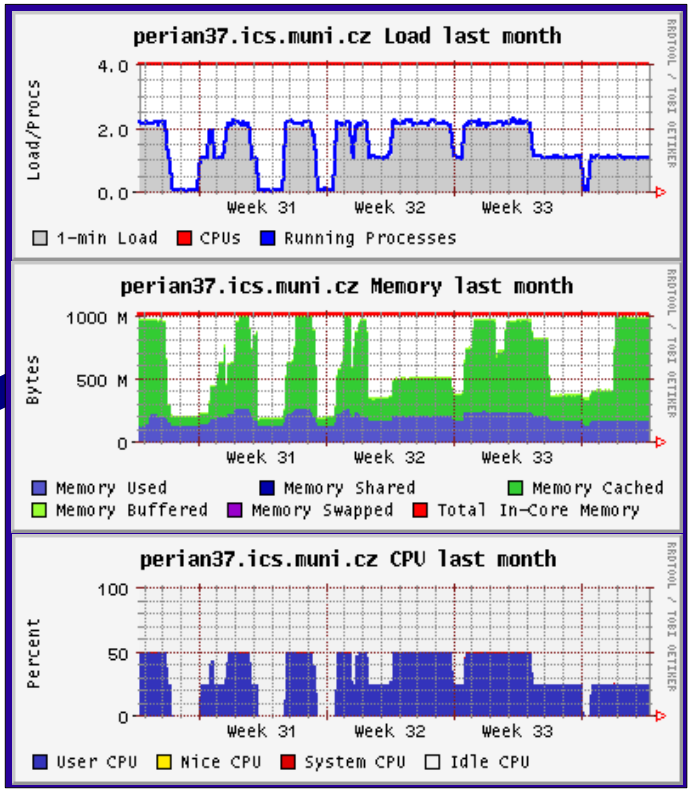
Software pro řazení a správu úloh

PBS – Portable Batch System (dávkový systém pro klastry)



- *přehled vytížení strojů:*

http://meta.cesnet.cz/pbsmon/nodes.do

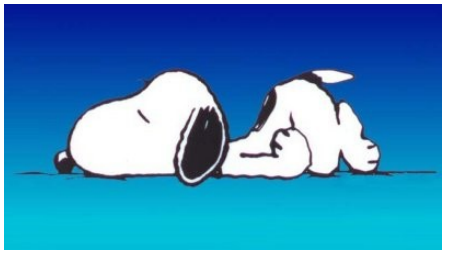


Software pro řazení a správu úloh

Nevýhody přímého použití dávkových systémů:

- nutná znalost front, vlastností
- uživatel musí znát poměrně dost informací o systému
- **kopírování vstupních dat na výpočetní uzel a stažení výsledku musí zajistit váš skript :-(**
- paralelní úlohy - speciální volby ve spouštěcím skriptu ohledně architektury (shmem, p4, mpich-gm)
- **nastavení cest k software – uživatel musí opět znát, co je kde nainstalováno, jakou architekturu použít**

  => různé skripty pro různé architektury :-(
- informace o úloze svázané s identifikačním číslem jobu => při velkém množství úloh neúnosné



Software pro řazení a správu úloh

Služby v gridových systémech: middleware gLite/LCG

Certifikáty: (bez nich nelze na gridu existovat)

- soubor s informacemi o vaší identitě; má omezenou platnost, údaje šifrované

příkazy pro práci s cert.:

- pro dlouhodobější úlohy => MyProxyCertifikát

příkazy pro operaci se soubory:

- lcg-cp, ...

příkazy pro práci s úlohou:

- edg-job-submit, ...

příkazy pro službu s VOMS (Virtual Organization Membership Service):

- edg-voms-proxy-info

Software pro řazení a správu úloh

Služby v gridových systémech: middleware gLite/LCG

práce na gridu:

1) připojení z domácího stroje na User Interface (gsissh)
2) Inicializace certifikátů (myproxy-init-sc, myproxy-get-delegation)
3) Nahrátí vstupních dat na storage element (lcg-cp)
   - služba vrátí identifikátor souboru na SE
4) Sestavení popisovacího skriptu pro úlohu (*.JDL)
5) Vlastní odeslání úlohy do gridu (edg-job-submit)
   - služba vrátí identifikátor jobu
6) Sledování stavu úlohy (edg-job-status)
7) Stáhnutí výsledku ze storage elementu (lcg-cr)

Software pro řazení a správu úloh

Služby v gridových systémech: middleware gLite/LCG

4) Sestavení popisovacího skriptu pro úlohu (*.JDL)

```
# JDL Test.jdl
Type = "Job";
JobType = "Normal";
Executable = "Test";
StdOutput = "Test.stdout";
StdError = "Test.stderr";
InputSandbox = {"in1.xml","in2.xml"};
OutputSandbox = {"out1.xml",”out2.xml”};
Environment = {
 "AMBERPATH=/var/amber",
 "BIGFILE1=guid:645c2af0-498e-4657-8154-8295380b349e"
 };
Arguments = "";
RetryCount = 1;
```

předává se s spolu s úlohou

identifikátor souboru na SE

5) Vlastní odeslání úlohy do gridu (edg-job-submit)

```
$ export  VOCONFIG=edg_wl_ui.conf
$ edg-job-submit --config-vo $VOCONFIG -o JID test.jdl
```

Software pro řazení a správu úloh

Nevýhody přímého použití API gridu:

- JDL jazyk
- Správa identifikátoru pro soubor
- **kopírování vstupních dat z SE na výpočetní uzel (WN) a nahrátí výsledků na SE musí zajistit váš skript :-(**
- speciální volby v popisovacím JDL skriptu ohledně par. architektury, délky jobu
- **software – je třeba kopírovat s úlohou nebo předávat informace, odkud lze spouštět (není známé obecně na gridu)**
- informace o úloze svázané s identifikačním číslem jobu, místo souborů identifikátory na SE

  => při velkém množství úloh opět neúnosné

Software pro řazení a správu úloh

„Kdo si tohle objednal?“

I.I. Rabi (1946-1947)

„Naštěstí existují nádstavby
nad přímým použitím dávkových systémů“

=> systém CHARON

(další možnosti: UNICORE, GENIUS portál, ...)

Systém CHARON

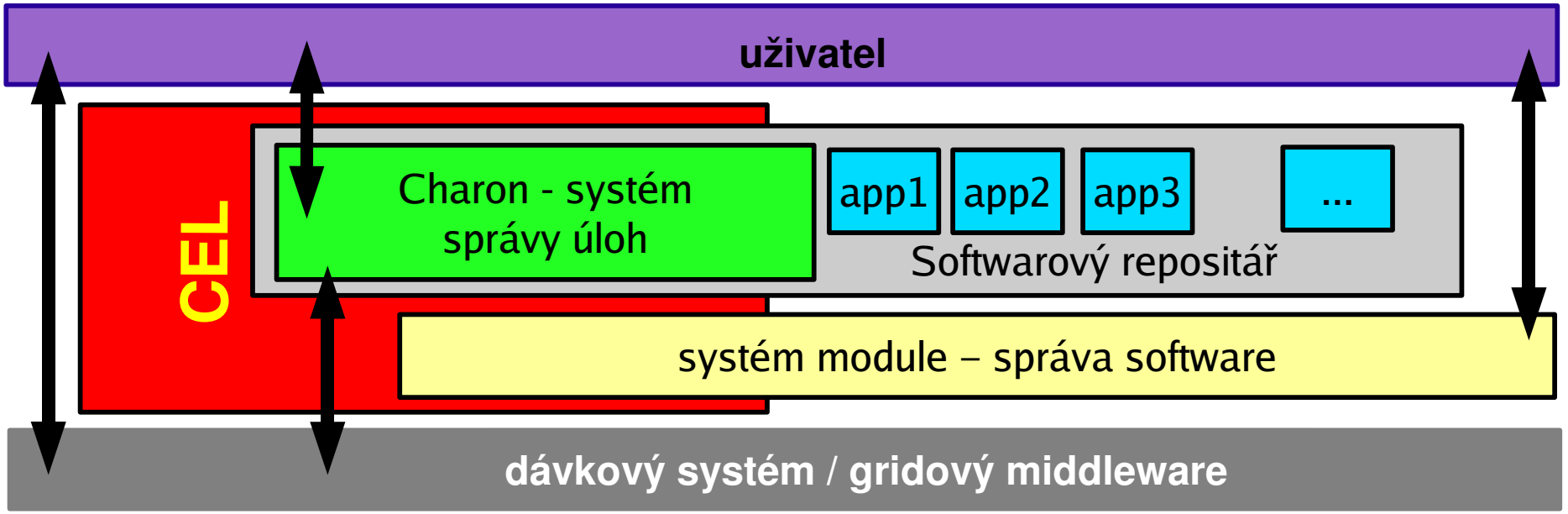
Co je CHARON?

- komplexní nadstavba na dávkovými/gridovými systémy, zajišťující sjednocený přístup k využívání výpočetních zdrojů
- nástroj pro správu a údržbu aplikací v těchto systémech
- nástroj pro sjednocené odesílání a sledování úloh

Proč CHARON?

- složitost dávkových a gridových middle-ware přesahuje uživatelsky únostnou mez
- v této oblasti Charon nabízí maximální zjednodušení práce
- způsob práce na gridu, resp. na klastrech je pro uživatele jednotný (přenositelnost úloh)

Systém CHARON – koncepce systému



- správa aplikací
  - spouštění úloh pro více procesorů (paralelní úlohy) bez nutnosti modifikace hlavního skriptu úlohy
- správa úloh
  - Jednoduché odeslání jobu, monitoring a obdržení výsledků
- příkazový řádek (Command Line Interface)

Systém Charon – použití na klastru

1) připojení na centrální uzel klastru (SSH, Putty)

```
[petrek@joplin ~]$ hostname
joplin.chemi.muni.cz
[petrek@joplin ~]$ ssh test1@wolf.chemi.muni.cz
test1@wolf.chemi.muni.cz's password:
Last login: Wed Aug 23 14:30:31 2006 from joplin.chemi.muni.cz

             *** Welcome to WOLF cluster ***
============================================================
 You are logged on host : wolf.chemi.muni.cz
 Its architecture is    : i786
|------------------------------------------------------------|
|          Charon Extension Layer (CEL) is enabled.          |
|    If you have any problem with this system you should     |
|     contact authors. (More information at WWW portal.)     |
|                           ***                              |
| http://troll.chemi.muni.cz/whitezone/development/charon    |
|------------------------------------------------------------|

[test1@wolf ~]$
```

Systém Charon – použití na klastru

2) vytvoření adresáře s úlohou (nakopírování přes SCP)

```
[test1@wolf ~]$ scp -r petrek@wolf:job1 .
petrek@wolf's password: ******
job1.run                      100%   49     0.1KB/s   00:00
input1.pov                    100% 3347     3.3KB/s   00:00
```

3) vytvoření spouštěcího skriptu pro úlohu

```
[test1@wolf ~]$ cd GridComputing/01.simple/job1
[test1@wolf job1]$ ls
input1.pov  job1.run*
[test@wolf job1]$ cat job1.run
#!/bin/bash

# activate povray package
module add povray

# render scene
povray -W800 -H600 input1.pov
```

Systém Charon – použití na klastru

4) odeslání úlohy

```
[test1@wolf ~]$ psubmit long job1.run
Job name       : job1.run
Job title      : job1.run (Job type: generic)
Job directory :
wolf.chemi.muni.cz:/home/test1/GridComputing/01.simple/job1
Job project    : -none-
Cluster name   : WOLF (Driver: pbs)
================================================
Alias          : -none-
Queue          : long
Profile        : wolf
------------------------------------
NCPU           : 1
Resources      : nodes=1:ppn=1:node
Sync mode      : sync
------------------------------------
Start after    : -not defined-
================================================
Do you want to submit job with pbs driver (YES/NO)?
> YES

Job was successfully submitted to PBS queue system.
```

Systém Charon – použití na klastru

5) vzniklé kontrolní soubory

```
[test1@wolf job1]$ ls
input1.pov  job1.run*  job1.run.ces* job1.run.info
```

6) stav úlohy

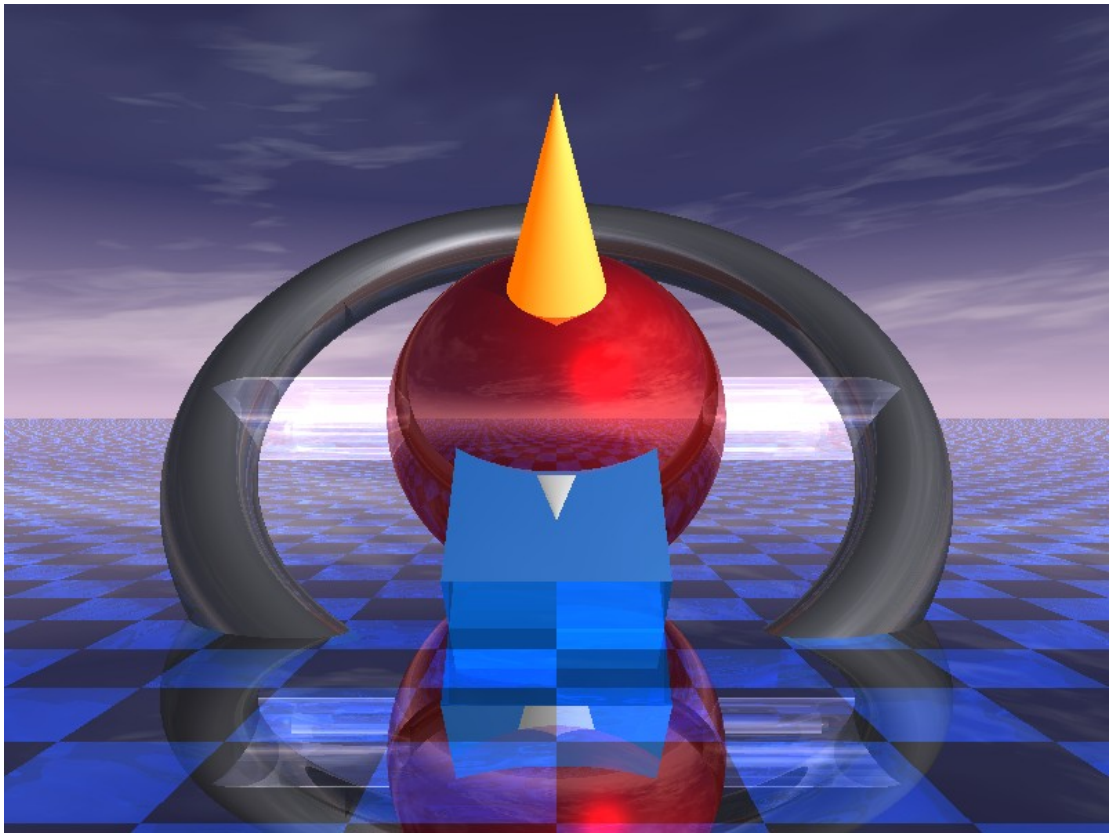
```
[test1@wolf job1]$ pqstatl

wolf.chemi.muni.cz:
                                                          Req'd  Req'd   Elap
Job ID  Username  Queue  Jobname SessID NDS TSK Memory Time  S Time
------- -------   ------ ------  ------ --- --- ------ ---- -- ----
700.wol test1     long  job1.run  9873   1  --    --   168:0  R  0:0
```

7) výsledné soubory

```
[test1@wolf job1]$ ls
input1.png input1.pov job1.run* job1.run.ces* job1.run.info
job1.run.stdout
```

Systém Charon – použití na klastru

8) výsledek (input1.png)



Systém Charon – použití na klastru

Paralelní úlohy v systému CHARON na klastru

```
[test1@wolf job1]$ cd ~/GridComputing/02.parallel/job1
[test1@wolf job1]$ ls
hello* job1.run*
[test1@wolf job1]$ cat job1.run
#!/bin/bash
module add mpichrun
mpirun -np $CH_NCPU hello

[test1@wolf job1]$ psubmit long job1.run 4
[test1@wolf job1]$ pinfo
:
-----------------------------------
NCPU           : 4
Resources      : nodes=4:ppn=1:node
Properties     : -none-
Sync mode      : sync
:
```

Systém Charon – použití na gridu

- stejné příkazy i způsob práce (přenositelnost úloh mezi klastry a gridy)
- potřeba certifikátu
- „2 příkazy navíc“ (inicializace gridového modulu, inicializace certifikátu)

/C=IT/O=GILDA/OU=Personal Certificate/L=Masaryk University/CN=ncbr tester/Email=ncbr@atlas.cz

```
cd ~/GridComputing/04.gilda/job1
module add gilda-wolf
voms-proxy-init --voms gilda
voms-proxy-info --all
psubmit gilda job_script
pinfo
psync
```

- úlohy: ~/GridComputing/04.gilda/job1

Systém Charon – správa aplikací

Příkazy systému Modulů

- příkaz **'module -h'**

module [akce] [modul1 [modul2]]..

- hlavní příkaz systemu modulů

akce:

add (nahrátí), remove (odpojení)
avail, list*, active, exported, versions, realizations
disp, isactive

* výchozí akce

modconfig

- konfigurace systému modulů (visualizace, výchozí moduly, ...)

příklad: module realizations amber

Systém Charon – správa aplikací

- systém modulů – příkaz **'module -h'**
- aplikace jsou řazeny do hierarchické struktury

jméno_programu:verze:architektura:paralelní_mod

realizace

- systém automaticky doplňuje možnosti (tabulator)
- nastavení výchozí realizace (default realization)
- **amber amber:8.1:auto:auto amber:8.1:ipn3:single**

```
abinit-mp
   * abinit-mp:04.12.14
        + abinit-mp:04.12.14:i686:node
        + abinit-mp:04.12.14:i686:p4
amber
   * amber:9.0
        + amber:9.0:noarch:none
        + amber:9.0:pn3:single
   * amber:8.1
        + amber:8.1:noarch:none
        + amber:8.1:pn3:single
```

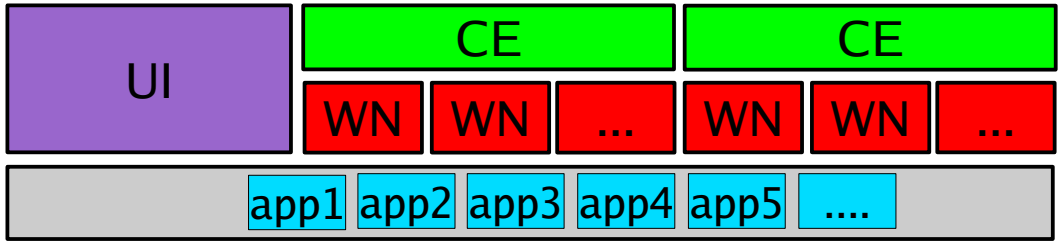
- o konkrétní realizaci se rozhoduje až když je úloha spušťěná na výpočetním uzlu
- systém se snaží vybrat optimální realizaci, pak postupuje hierarchicky

Systém Charon – správa aplikací

- dva modely „úložiště aplikací“

Model I: METACentrum, vetšina klastrů

- v klastru (resp. gridu) existuje sdílený disk společný všem výpočetním uzlům

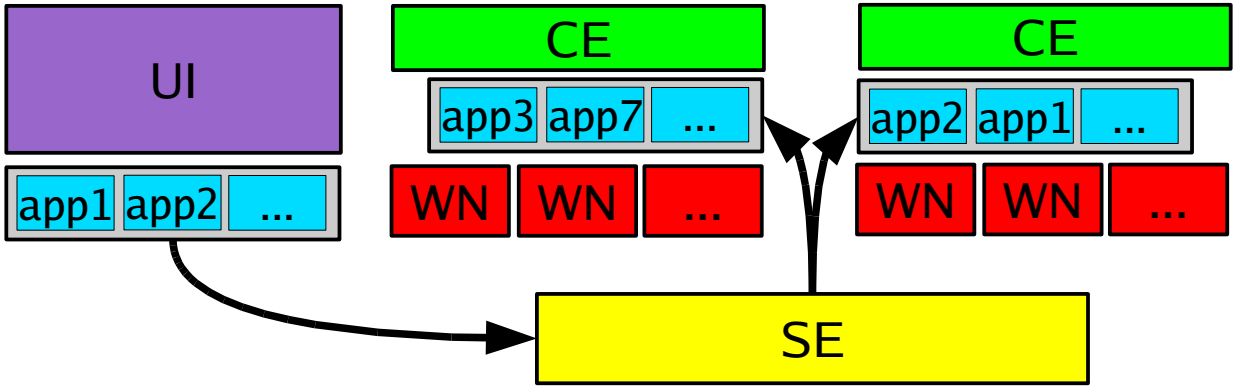


Legenda:

UI	- přístupový počítač
CE	- výpočetní element
SE	- úložiště dat
WN	- výpočetní uzel
app	- aplikace

Model II: EGEE2 GRID

- sdílený disk neexistuje, aplikace se kopírují jednou za čas ze společného SE



Poděkování

- Luděk Matyska (CESNET, ICS)
- Jaroslav Koča (NCBR)
- Evropská komise
  - EGEE II (číslo kontraktu RI-031688)
  - EGEE (číslo kontraktu IST-2003-508833)
- MŠMT (MSM0021622413)
- GAČR (204/03/H016)

Prostor pro dotazy