



HELSINGIN YLIOPISTO
HELSINGFORS UNIVERSITET
UNIVERSITY OF HELSINKI

Materiaalitieteen GRID-kokemukset ja tarpeet

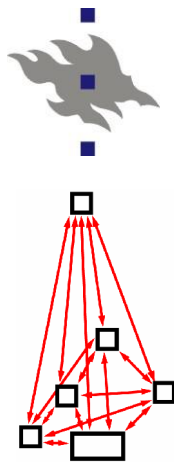
Kai Nordlund

19.8.2005

Matemaattis-luonnontieteellinen tiedekunta

Fysikaalisten tieteiden laitos

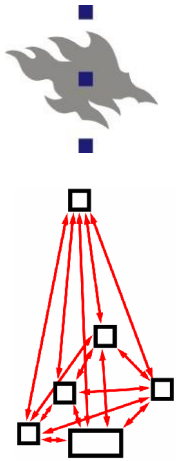
Kiihdytinlaboratorio



MGRID – ensimmäinen suuri GRID Suomessa

- Pohjautuu suomalaisen laskennallisen materiaalitutkimuksen korkeaan tasoon ja toimivaan yhteistyöhön
- Osallisina seitsemän yliopistoa, fysiikan tutkimuslaitos HIP ja CSC
- Rahoittajina Suomen Akatemia infrastruktuurirahoituksella ja yliopistot
- Hankinnan ja koneiden hallinnan koordinoijana CSC
- Tavoitteena GRID-laskentaympäristö keskiraskaan laskennan tarpeisiin
 - Linux-klustereilla hyvä hinta/teho-suhde

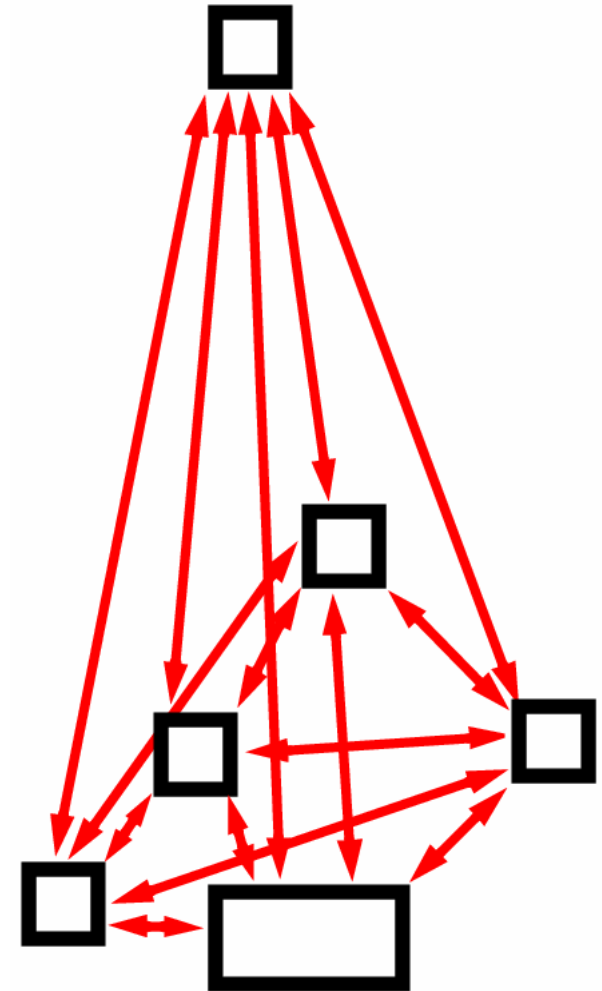


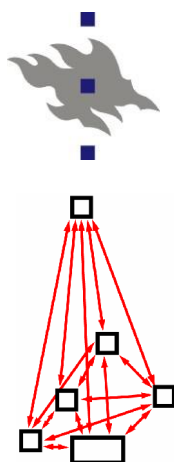


Partnerit

- Helsingin yliopisto
 - Fysiikan ja kemian laitokset
- Teknillinen korkeakoulu, fysi
- Fysiikan tutkimuslaitos HIP
- Jyväskylän yliopisto
 - Fysiikan ja kemian laitokset
- Lappeenrannan teknillinen y
 - Sähkötekniikan osasto
- Tampereen teknillinen yliopi
 - Fysiikan laitos ja tieteelliser
- Turun yliopisto, fysiikan laito
- Oulun yliopisto
 - Biokemian, fysiikan ja kemi
- CSC

36 eri yhteistyöparia!

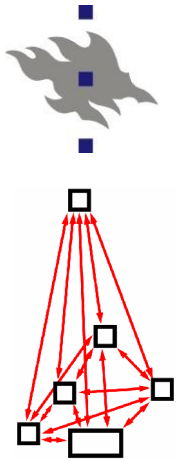




Järjestelmä

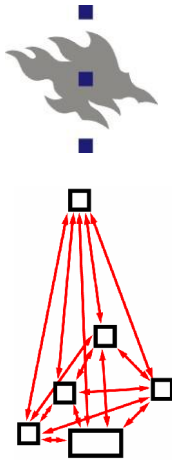
- ”Rauta”:
 - HP Proliant 64-bittinen Opteron
 - 2 x 1 Gbit verkko
- Käyttöjärjestelmä:
 - Linux Red Hat-pohjainen Rocks klusteri-järjestelmä
 - GRID-ratkaisu: NorduGrid ARC
- Kokonaisarvo n. 700 000 EUR
- Yhteensä 443 prosessoria (yliopistot), **uudet 256 nyt CSC:lla**
- Kokonaisteho 2.5 Teraflops
 - vrt. IBM SC 2.2 Teraflops





GRID-käyttö

- Ideana on että kaikki M-grid:in partnerit voivat käyttää kaikkia muita laitteistoja GRID-tekniikan avulla
 - Käyttäjän kannalta ei alun jälkeen olennaisesti vaikeampaa kuin normaalin supertietokoneen käyttö
 - GRID kuten eräajojono: "qsub" vs. "ngsub"
 - Alussa täytyy hankkia käyttöön oikeuttavat sertifikaatit, hiukan hankalampaa kuin tavallinen käyttö lupa mutta se tarvitsee tehdä vain kerran
- GRID-tuotantokäyttö on juuri alkanut



GRID-komentojono vs. PBS-komentojono

```
&(executable=parcas_small)

(JobName=parcas)

(inputFiles=(in/md.in "")
             (in/eam.Cu.Cu.in ""))

(outputFiles=(out/md.out "")
             (out/md.movie ""))

(CpuTime=10)

(memory=64)

(disk=10)

(stdout=stdout.txt)

(stderr=stderr.txt)

(gmlog=debugdir)

(|(architecture=i386)
  (architecture=i686))
```

```
#!/bin/sh
### Job name
#PBS -N parcas
### Output files
#PBS -e parcas.stderr
#PBS -o parcas.stdout
### Mail to user
#PBS -m ae
### Queue name
#PBS -q short
### Number of nodes
#PBS -l nodes=1
### Max time to run
#PBS -l cput=1:00:00

cd $PBS_O_WORKDIR

mkdir /work/$USER
workdir=/work/$USER/parcas.$PPID
mkdir $workdir
cd $workdir

cp $HOME/parcas/parcas .

cp -r $PBS_O_WORKDIR/in .

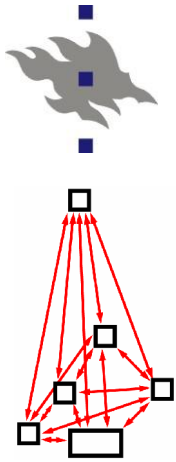
mkdir out

echo Running on host `hostname`
echo Time is `date`
echo Directory is `pwd`

ulimit -s unlimited

./parcas

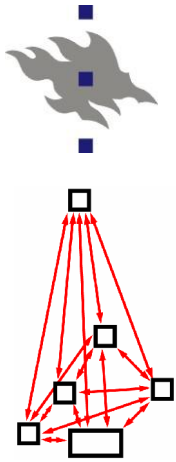
cp out/* $PBS_O_WORKDIR/out/
```



Kokemuksia MGRID-yhteistyöstä

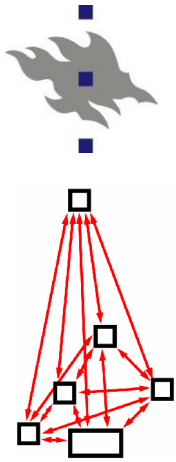
- Uusi toimintamuoto: CSC + paikallinen
 - CSC tarjoaa yhden henkilötyövuoden klusterin ylläpitoon
 - Myös paikallinen panos oltava merkittävä
 - Säännölliset kokoukset sekä sähköinen yhteistyö
- Etähallinta
 - Osoittanut toimivuutensa: Arto Teräs asensi Jyväskylän klusterin edustakoneen Kumpulasta käsin!
- Selkeitä ja merkittäviä synergiaetuja toistaiseksi:
 - CSC:lla vahva ja luotettava ATK-perusosaaminen
 - HIP:illä vahvaa GRID-erityistietämystä
 - Yliopistoylläpitäjät: useilla virtuoosimaista erityisosaamista joissakin asioissa

=> Ollut oppimisprosessi joka suuntaan



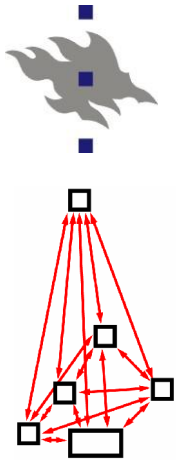
Riskejä (M)GRID-yhteistyössä

- Riski 1: sekavuus
 - Vasen käsi ei tiedä mitä oikea tekee
 - Vältettävissä koordinoinnilla
- Riski 2: konfliktit johtuen eri mieltymyksistä
 - Uskonsodat...
 - Välttämisessä tärkeintä luottamus ja henkilökohtainen tuntemus: helpompi hyväksyä kaverin kuin tuntemattoman vaihtoehtoinen ratkaisu
- Riski 3: komiteatoiminnan yleiset riskit
 - ”Kun on monta kokkia ei synny soppaa”
- Kaikista on MGRID:issä näkynyt merkkejä, mutta mikään ei ole aiheuttanut merkittäviä ongelmia
 - Koneita on käytetty helmikuusta lähtien ~ 100% teholla



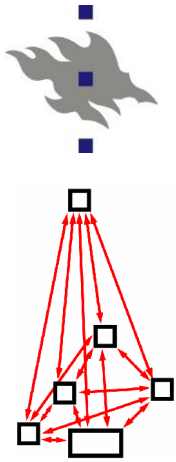
“Contact GRID”

- Kaikkiaan yhteistyö MGRID:issä on toiminut loistavasti
- Asennukseen ja tekniseen kehitykseen osallisina 2-6 henkilöä joka yliopistosta sekä n. 5-10 CSC:ltä
- Tiivis yhteydenpito sekä sähköisesti että tapaamisilla
 - Hyvä kontaktiverkko ja henki muodostunut, “Contact GRID”
- Ryhmä tehnyt paitsi rutiiniinomaista asennus ja sovitustyötä, varsinkin CSC tehnyt merkittävää GRID-ympäristön kehitystä ja testausta
 - ⇒ Suomalainen kontribuutio kansainväliseen GRID-kehitykseen
- Myös tutkijoiden kontaktit parantuneet
 - Parempi tuntemus muiden käyttämistä ohjelmistoista ja menetelmistä



Suomalainen malli verkkolaskennalle?

- CSC peruskivi johon tukeudutaan
- HIP:illä edelläkävijän rooli GRID-teknologiassa ainakin n. vuoteen 2010 asti
- Kussakin yliopistossa pieni (3-10 hlöä) keskittymä GRID-osaajia ja vähintään 1 GRID-klusteri
 - Ongelma: useimmat tietotekniikkaosastot eivät kovin innostuneita ainakaan vielä; jatkuvuus ei taattu
- Eri kuin esim. Ruotsin täysin hajautettu malli



Materiaalifysiikan tarpeet

■ Materiaalitiede tarvitsee:

■ Todellisia supertietokoneita Grand Challenge-ongelmiin

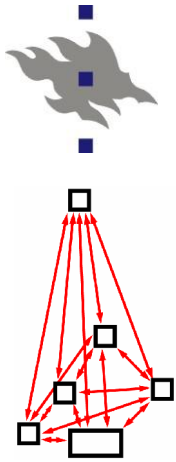
- CSC luonteva tarjoaja

■ Klustereita high throughput-laskentaan

- Ei täydy olla GRID
- Mutta GRIDit kokonaiskustannuksiltaan edullisin vaihtoehto
- GRID:it myös vapauttavat kapasiteettia supertietokoneissa Grand Challenge-ongelmiin

■ GRID tarjoaa myös loistavat mahdollisuudet tieteenalojen välisiin synergia-etuihin

- Esim. Kumpulassa erinomainen yhteistyö Fysiikka - Kemia - HIP joka on hyödyttänyt kaikkia osapuolia



Yhteenveto

- MGRID on
 - Antanut edullisen ympäristön massiviseen high-throughput-laskentaan
 - Antanut mallin GRID-laskennalle yliopistoissa
 - Edistänyt GRID-teknologioiden kehitystä
 - GRID-teknologiassa eturintaman hanke kansainvälisestikin katsottuna
- Laskennallinen materiaalitiede tarvitsee massiivista laskentakapasiteettia jota kustannustehokkaimmin palvelee
 - Supertietokone Grand Challenge-laskentaan
 - GRID-klusterit high throughput-laskentaan