

UA-Grid: Украинская национальная грид-программа

Загородний А.Г.¹, Свистунов С.Я.¹, Белоус Л.Ф.², Головинский А.Л.³

¹*Институт теоретической физики им. Н.Н. Боголюбова НАН Украины,
ул. Метрологическая, 14б, г. Киев, Украина*

²*Физико-технический институт низких температур им. Б.И. Веркина НАН Украины,
пр. Ленина, 47, г. Харьков, Украина*

³*Институт кибернетики им. В.М. Глушкова НАН Украины, просп. Глушкова 40, Киев, Украина*

svistunov@bitp.kiev.ua, belous@ilt.kharkov.ua, golovinsky.andriy@gmail.com

Аннотация. Доклад посвящен результатам выполнения Государственной целевой научно-технической программы "Внедрение и применение грид-технологий на 2009-2013 годы", которые вывели Украину на современный уровень использования грид-технологий, и перспективам международного сотрудничества Украины в рамках Европейской грид-инициативы (EGI) в качестве ее участника NGI-UA.

1 История развития

Для того чтобы можно было оценить тот путь, который прошла Украина на пути формирования грид-сообщества, приведем краткую историческую справку развития грид в Украине [1-4].

Первый в Украине грид-кластер, который был включен в европейскую грид-инфраструктуру, был создан в Харьковском физико-техническом институте НАН Украины в рамках совместных проектов с Объединенным институтом ядерных исследований (г. Дубна, Россия) и Европейским центром ядерных исследований (ЦЕРН) (г. Женева, Швейцария) в 2002 году. Являясь грид-центром уровня Tier-2, по терминологии виртуального сообщества WLCG (Worldwide LHC Computing Grid), НИЦ ХФТИ обслуживает по настоящее время один из основных экспериментов (CMS) Большого Адронного Коллайдера (БАК).

В 2005 году, по инициативе Института теоретической физики им. Н.Н. Боголюбова НАН Украины (ИТФ) и Информационно-вычислительного центра Киевского национального университета имени Тараса Шевченко (КНУ), вычислительные кластеры институтов были подключены к грид-инфраструктуре AliEn-GRID, используемой для обработки данных эксперимента ALICE в ЦЕРНе.

Национальной грид-инфраструктурой эти грид-кластеры назвать еще было нельзя, поскольку они были ориентированы только на решение специализированных задач физики высоких энергий. Но опыт подключения кластеров к европейской исследовательской грид-инфраструктуре позволил специалистам ИТФ и КГУ в конце 2006 года построить первый экспериментальный грид-сегмент в составе кластера ИТФ и КГУ под управлением промежуточного программного обеспечения ARC проекта NorduGrid. Поэтому именно с декабря 2006 года начинается развитие грид в Украине.

Национальная Академия Наук Украины еще в 2005 г. приступила к созданию Национальной Грид-Инициативы (NGI) – координационно-административной инфраструктуры, объединяющей ведущие исследовательские институты и организации Украины, заинтересованные в развитии и продвижении технологий и приложений грид. Главная цель этого проекта - включение Украинского сегмента сети в общую инфраструктуру EGEE (Enabling Grids for E-science in Europe) и обеспечение постоянного ее функционирования как полноценной операционной и функциональной составляющей.

В 2005 году на заседании Координационного Совета по проблемам информатики НАН Украины был рассмотрен вопрос о внедрении грид-технологий в научных учреждениях академии. Распоряжением № 249 Президиума НАН Украины от 25 апреля 2006 г. была утверждена концепция и Программа «Внедрения Грид-технологий и создание кластеров в Национальной академии наук Украины», а также создан Совет Программы, который возглавил первый вице-президент НАН Украины академик А.П. Шпак. Институт теоретической

физики был выбран базовой организацией, отвечающей за выполнение Программы. Этой Программой было предусмотрено создание грид-кластеров в институтах Академии Наук с целью дальнейшего объединения их в первый украинский грид-сегмент.

Главной задачей **первого этапа** было оформление официального статуса НАН Украины в международной Грид-коллаборации WLCG, которая расположена в ЦЕРНе. Эта задача была успешно решена. На заседании управляющего комитета, которое состоялось 26 апреля 2006 г., Украина была принята в члены организации WLCG. Официальным представителем НАН Украины в WLCG был определен первый вице-президент НАН Украины академик А.П. Шпак. В июле 2006 г. академик А.П. Шпак подписал Меморандум о взаимопонимании между WLCG и НАН Украины.

Институт теоретической физики им. Н.Н. Боголюбова был подключен к академической оптоволоконной Интернет-сети УАРНЕТ, что позволило начать на кластере ИТФ реальную практическую работу в AliEn-grid, который является частью общей грид-инфраструктуры WLCG, и обслуживать прежде всего эксперимент ALICE.

Целью **второго** этапа Программы было создание первого в НАН Украины (и вообще в Украине) грид-сегмента в составе Института теоретической физики, Института молекулярной биологии и генетики, Института клеточной биологии и генной инженерии, Главной астрономической обсерватории, Института физики конденсированных систем (г. Львов) и Киевского национального университета им. Тараса Шевченко. На кластере ИТФ была установлена необходимая операционная грид-среда (middleware) для выполнения кластером управляющих функций. Все основные элементы работы в грид-сегменте – авторизация, управление задачами, мониторинг системы и т.д. – были отработаны, и вычислительные грид-кластеры составили единое информационное пространство.

Целью **третьего** этапа Программы было дальнейшее подключение институтов и лабораторий НАН Украины с их собственными компьютерными ресурсами в украинскую грид-систему, а далее – в европейские и мировые виртуальные организации. На этом этапе планировалось создать основные службы грид-сервиса (службы мониторинга, администрирования и т.п.). Практически важной задачей являлось распространение знаний о грид-технологиях и обучение специалистов работе в грид-сети.

Следует отметить, что с самого начала реализации программы решалось несколько важных задач:

- создание в институтах, которые реально ведут научные вычисления, вычислительных мощностей, необходимых для проведения расчётов. Отсутствие достаточного финансирования науки привело к тому, что таких вычислительных мощностей не было;
- объединение и поддержание тех институтов, которые уже имели вычислительные кластеры;
- привлечение институтов, которые не связаны с физикой высоких энергий, для участия в грид-программе.

К апрелю 2007 г. были построены новые грид-кластеры в Институте клеточной биологии и генетической инженерии (ИКБГИ), в Институте микробиологии и генетики (ИМБГ) и в Главной астрономической обсерватории (ГАО), которые были подключены к грид-сегменту Академии наук Украины. Были усилены и модернизированы кластеры в ИТФ в Институте физики конденсированных систем (ИФКС). В марте-апреле к этому сегменту были подключены Институт кибернетики, выразивший намерение выделить часть ресурсов нового кластера для использования в гриде, Институт космических исследований и Львовский ИФКС.

Благодаря выполнению задач Программы «Внедрение грид-технологий и создание кластеров в НАН Украины» в 2007-2008 годах была построена основа ресурсно-технической базы украинского Академического грида. По состоянию на начало 2008 г. она состояла из 16-ти грид-кластеров, объединенных высокоскоростными оптоволоконными каналами связи в единую грид-сеть.

Стратегический акцент в развитии Украинского академического грида был направлен, прежде всего, на создание инфраструктуры, имеющей в своей основе костяк из мощных суперкомпьютерных центров, в которых эффективность параллельных вычислений достигала бы десятков и даже сотен процессоров на задачу. Тогда любое академическое учреждение Украины или исследовательская группа смогли бы получать необходимые ресурсы для расчетов, а мощность таких центров оптимально использовалась бы на основе преимуществ грид-технологий.

Следует отметить, что одновременно с программой НАН Украины выполнялась Государственная программа "Развитие информационных и телекоммуникационных технологий в образовании и науке на период 2006-2010 годы", фактическим исполнителем которой было Министерство образования и науки. Одним из

результатов выполнения этой программы было развертывание, согласно договоренности с EUGridPMA, Сертификационного центра открытых ключей в Украине, создание кластера в Киевском политехническом университете (КПИ), его подключение к грид-сегменту НАН Украины и начало подготовки пользователей грид в КПИ.

Для построения грид-инфраструктуры Украины было использовано промежуточное программное обеспечение (middleware) ARC (Advanced Resource Connector), разработанное в проекте NorduGrid (<http://www.nordugrid.org/>). Такой выбор был обусловлен сравнительной простотой ARC в инсталляции и использовании, возможностью инсталлировать все пакеты ARC на одном сервере, а главное - отсутствием необходимости выполнения строгих требований проекта EGEE по регистрации и эксплуатации, которые предъявлялись к промежуточному программному обеспечению gLite, ориентированному на обслуживание экспериментов на БАК.

На этом мы завершим историческую справку. К началу 2009 года в Украине был создан грид-сегмент Академии наук, который реально использовался в научных исследованиях. Перечислим только малую часть этих исследовательских работ:

- обработка и анализ экспериментальных данных об адрон-адронных и ядерно-ядерных столкновениях на ускорителе LHC (ALICE, ATLAS и TOTEM эксперименты) и RHIC;
- сравнение теоретических моделей возникновения кварк-глюонной плазмы с ожидаемыми экспериментальными данными;
- моделирование белков и расчеты молекулярной динамики ряда белков, которые могут быть мишенями для разработки новых лекарственных препаратов, в том числе ВИЧ-протеазы и ее мутантов, резистентных к ингибиторам;
- анализ биологических последовательностей, моделирование пространственной структуры и поведения биологических макромолекул, моделирование процессов специфического взаимодействия макромолекул между собой и с низкомолекулярными веществами;
- исследования спектров звезд и субзвездных объектов, которые находятся на разных эволюционных стадиях;
- исследования физики активных процессов на поверхности кометных ядер;
- моделирование процессов формирования и эволюции крупномасштабных структур Вселенной, таких как галактики и ядра галактик (черные дыры), скопления галактик, процессов образования и эволюции звезд.

Следующий этап развития грид-технологий в Украине начался в конце 2009 года, когда постановлением Кабинета Министров Украины № 1020 от 23 сентября 2009 года была утверждена Государственная целевая научно-техническая программа внедрения и применения грид-технологий на 2009-2013 годы (в дальнейшем именуемая **UA-Grid**).

Целью Программы является создание национального грид и широкое внедрение грид-технологий в научную и социально-экономическую сферу. Основными задачами Программы являются:

- создание национальной грид-инфраструктуры с внедрением комплексной системы защиты информации в соответствии с законодательством;
- привлечение украинских ученых к участию в международных уникальных экспериментах с компьютерной обработкой данных;
- внедрение и применение грид-технологий в экономической, финансовой и социальной сферах, в промышленности и медицине, при проведении научных исследований и наблюдений в режиме реального времени;
- подготовка специалистов для работы в грид-среде.

Основными исполнителями программы были определены Национальная академия наук Украины, Министерство образования и науки Украины и Министерство здравоохранения Украины. Институт теоретической физики им. Н.Н. Боголюбова НАН Украины является головной организацией по выполнению программы, а директор института, академик НАН Украины А.Г. Загородний назначен руководителем программы UA-Grid.

Для дальнейшего удобно рассматривать эту программу как состоящую из двух этапов.

2 Этап 1 — 2009-2010 гг.

До 2011 года продолжалось развитие инфраструктуры Украинского национального грид, в основном за счет увеличения количества устанавливаемых грид-кластеров и так называемых грид-платформ доступа (грид-кластер с минимальными ресурсами, подключенный к грид-инфраструктуре для учебных целей). Именно на первом этапе была создана и в достаточной степени отестирована основная грид-инфраструктура, созданы ресурсные центры, сформировались тематические виртуальные организации, были разработаны грид-сервисы, упрощающие работу ученых со своими прикладными пакетами.

На этом этапе Национальная стратегия внедрения грид-технологий основывалась на многоуровневой межведомственной грид-инфраструктуре с элементами централизованного управления, с учётом особенностей использования грид-технологий в различных сферах науки.

В Украинском грид была использована схема, принятая в упоминавшейся ранее структуре WLCG. Такая структурная организация ресурсов хорошо зарекомендовала себя. Согласно этой схеме вся инфраструктура Украинского академического грида, состоит из трех следующих уровней.

Первый уровень – базовый координационный центр (BCC - Basic Coordination Centre), который руководит всем украинским грид-сегментом в целом, главным образом, через региональные центры.

Второй уровень – региональные ресурсные центры (ROD - Regional Operator on Duty), которые координируют деятельность и взаимодействие грид-сайтов в регионах. Здесь в понятие сайт вкладывается несколько иной смысл, более специальный, нежели связанный с понятием веб-сайт: имеется в виду совокупность ресурсов, зарегистрированная в мировой грид-инфраструктуре под уникальным именем.

Третий уровень – отдельные грид-узлы, или минимальные грид-платформы доступа к грид-сети.

Одним из важных направлений работ в 2009-2010 годах было совершенствование структуры управления Украинским национальным грид как в части взаимодействия ее структурных элементов, так и в части формирования нормативной базы, определяющей правила работы пользователей и структурных составляющих грид-инфраструктуры. Эти нормативные документы должны были соответствовать стандартам EGI для обеспечения системной интеграции элементов национальной грид-инфраструктуры в европейскую и мировую грид-инфраструктуру.

На данный момент централизованное управление национальной грид-инфраструктурой осуществляют Координационный научно-технический совет Программы и образованный им исполнительный орган – Координационный комитет Программы.

Основными составляющими грид-инфраструктуры Украины являются:

- Базовый координационный грид-центр национального уровня (BCC);
- региональные координационные грид-центры (ROD);
- ресурсные центры национального уровня (ИК им. В.М. Глушкова и НТУУ КПИ);
- центр удостоверения цифровых сертификатов с региональными филиалами;
- центр регистрации запросов на цифровые сертификаты;
- центр сертификации грид-сайтов;
- центр регистрации виртуальных организаций и учета членов виртуальных организаций;
- центр мониторинга грид-инфраструктуры;
- центры виртуальных организаций;
- узлы национального грида (ресурсные центры).

Базовый координационный центр выполняет функции Провайдера инфраструктуры грид-ресурсов Украинского национального грида в отношении с Международным грид-сообществом и подписывает международные соглашения в области взаимодействия на операционном уровне, которые вступают в силу после ратификации Координационным Комитетом программы UA-Grid.

Приводимый ниже мониторинг Украинского грид-сегмента со стороны ARC-middleware иллюстрирует успехи программы UA-Grid по привлечению участников.

	BITP ARC Training	11	0+0	0+0
	BITP Cluster	112	0+34	1+0
	CHIMERA	120	0+24	116+0
	CSTU ARC CE	4	0+0	0+0
	DFTI Cluster	112	0+46	1+1
	HPC and FOSS Center	13	0+0	0+0
	IAP Cluster	16	0+16	1+0
	IAPMM Cluster	16	6+0	0+0
	ICMP Cluster	192	9+98	0+0
	ICYB SCIT-3	1036	48+520	2+0
	IEP Cluster	48	0+0 (queue inactive)	0+0
	IFBG Cluster	72	0+24	0+0
	ILTPE ARC UA	88	0+0	0+0
	ILTPE Cluster	88	0+50	0+0
	IMATH Cluster	16	0+0	0+0
	IMBG ARC	148	0+0	0+0
	IMMSP Cluster	40	8+0	6+0
Україна	IMP ARC CE	84	0+64	0+0
	INPARCOM Cluster	8	0+0	0+0
	INPARCOM GPU Cluster	16	0+0	0+0
	IOP Cluster	128	0+128	1+0
	IPM Cluster	44	0+5	1+0
	IPMS Cluster	20	0+0	0+0
	IRE Cluster	64	0+0	0+0
	ISMA cluster	324	0+306	0+78
	ISOFTS Cluster	8	0+0	0+7605
	KIPT IPP	18	0+0	0+0
	KMA Grid Cluster	0		0+0
	KNU ARC	48	1+18	13+0
	KPI training cluster	0		1+0
	LNU Training Cluster	28	0+0	0+0
	MAO Cluster	104	0+48	0+0
	MHI Cluster	120	0+0	0+0
	PIMEE ARC	24	8+5	6+0
	RIAN	16	0+0	0+0
	SRI cluster	4	0+0	0+0

Рис.1 Мониторинг грид инфраструктуры

На февраль 2013 года в Украинской грид-инфраструктуре зарегистрировано 38 кластеров с общим количеством ядер более 3100 и доступным дисковым пространством 250ТВ. Самым мощным ресурсным центром украинского грид является кластер Института кибернетики им. В.М. Глушкова (г. Киев) с пиковой производительностью порядка 20 Tflops. Конечно, на фоне самого мощного в мире суперкомпьютера Cray XK7 (17,59 Pflops) и подобными же порядками (Pbytes) файловых хранилищ достижения Украины по строительству вычислительной инфраструктуры весьма скромные.

Да, действительно, этими параметрами украинский грид похвастаться не в состоянии. И это, пожалуй, одна из главных причин, по которой украинские грид-кластеры использовались в основном в локальном режиме. Перегруженность локальными задачами практически не позволяла выделять ресурсы для украинских виртуальных организаций, а доступ к зарубежным был технически невозможен.

Но что касается созданной грид-инфраструктуры и программного обеспечения, то украинский грид находится на передовых позициях на всех уровнях, начиная от grid-middleware, прикладных пакетов, виртуальных организаций и заканчивая созданием интегрированных систем управления суперкомпьютерами, которые позволяют пользователям-ученым использовать ресурсы НРС, не вникая в тонкости операционного окружения, включая грид и облачные вычисления.

Важную роль для грид-пользователей играет сайт информационной поддержки виртуальной организации **Infrastructure . VO "Infrastructure"** – (<http://infrastructure.kiev.ua>)

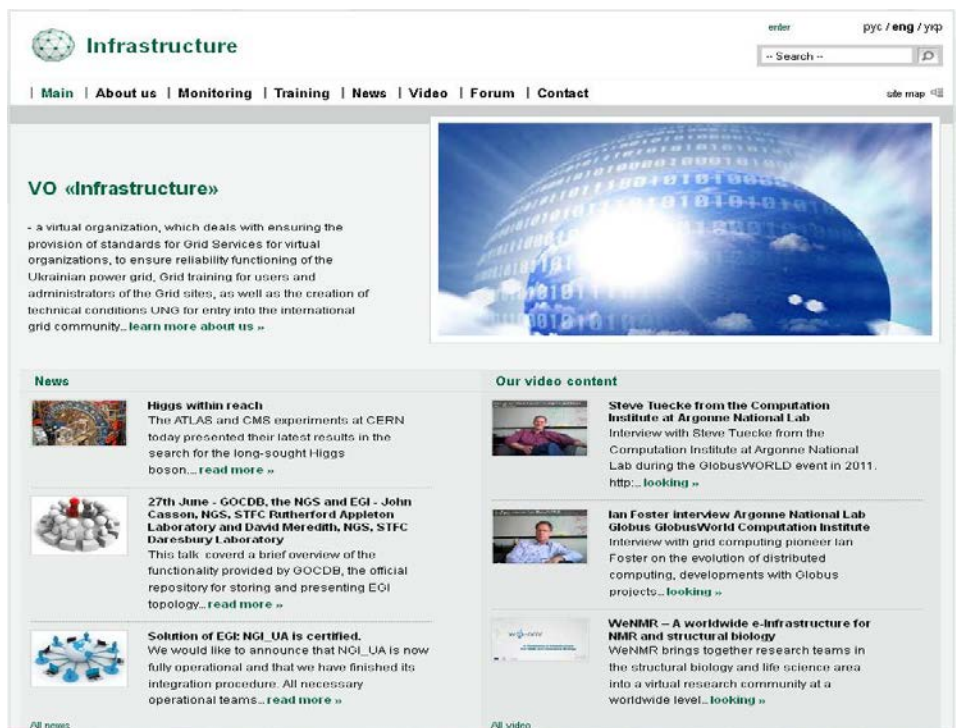


Рис.2 Сайт виртуальной организации **Infrastructure**

Следует отметить еще одну составляющую грид-инфраструктуры — скоростные оптоволоконные каналы. Эту часть работы успешно выполняет УАРНЕТ, который не только создает и эксплуатирует магистральные оптоволоконные каналы (например, Киев—Львов с выходом в Польшу, Киев—Харьков), но и прокладывает оптоволоконные линии до конкретных институтов. Пропускная способность этих каналов составляет 10Гбит/с. Практически этот параметр перестал быть критичным для всех участников Украинского сегмента грид, кроме ННЦ ХФТИ (эксперимент CMS), и участников эксперимента ALICE, поскольку CERN предъявляет им жесткие требования к пропускной способности и надежности канала.

Хотя значение 10Гбит/с может показаться излишним, и действительно, эта скорость обеспечивается сейчас только для межкластерного взаимодействия, но этот параметр обеспечивает эффективность использования файловых грид-хранилищ SE (Storage Element).

Несмотря на явную недостаточность финансирования государственной программы, к участию в ней было привлечено значительное количество квалифицированных специалистов во всех основных академических и учебных организациях, которые понимали перспективу новых информационных технологий, среди которых грид-технологии занимают далеко не последнее место.

Не менее важно отметить инициативу ИТФ и НТУУ КПИ по подготовке молодых специалистов в области грид-технологий, по созданию учебных центров, учебных программ и изданию ряда учебных пособий.

Основные достижения, а также научные результаты, полученные партнерами UA-Grid проекта на первом этапе и в начале второго этапа, представлены в сборнике [5].

Однако, основной проблемой, в значительной степени нивелировавшей прилагавшиеся усилия, оставалась изолированность UNG, по причине отсутствия его в мировой грид-инфраструктуре в качестве члена так называемой Национальной Грид Инициативы (NGI).

3 Этап 2 — 2011-2013 гг.

Представление БКЦ в качестве провайдера грид-услуг на Украине позволило начать переговоры с руководством проекта EGI.eu об интеграции грид инфраструктуры Украины на техническом уровне в европейскую грид-инфраструктуру EGI.

Согласованный «Меморандум о взаимопонимании» между EGI.eu и БКЦ, который определил процедуру и последовательность действий по развертыванию сервисов EGI.eu в Украине, был подписан в конце ноября 2011 года.

В середине июля 2012 г. украинская грид-инициатива Украины (NGI-UA) завершила процесс сертификации основных грид-сервисов и стала полноправным членом команды EGI на техническом уровне.

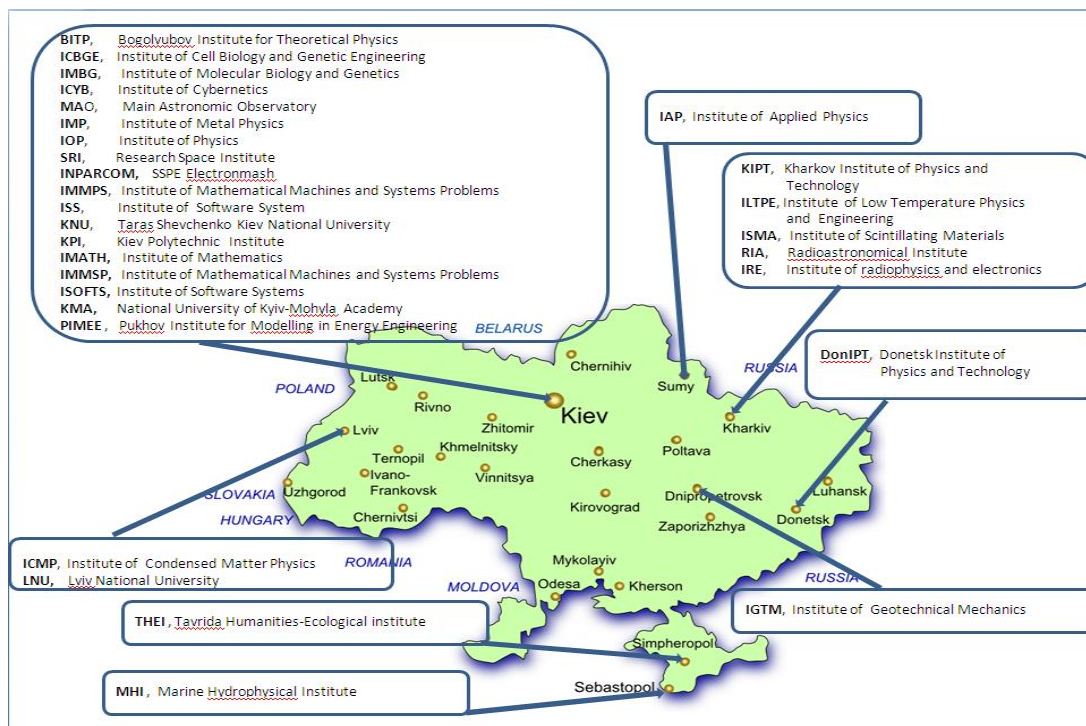


Рис.3 Структурная схемы размещения грид кластеров Украины

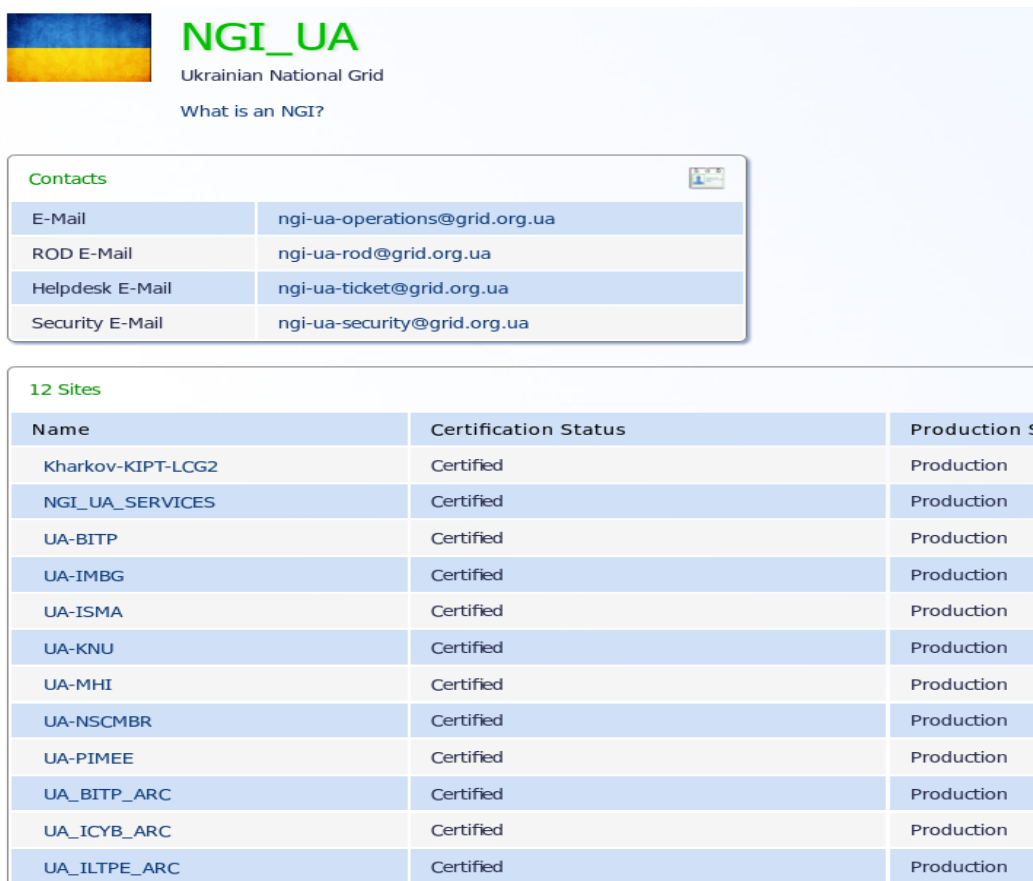
Перечислим основные информационные сервисы по управлению грид-инфраструктурой Украины, которые функционируют в настоящий момент. Сразу отметим, что, учитывая особенности интеграции, NGI-UA использует часть центральных сервисов EGI, а часть из них установлены в ВСС.

К информационным сервисам по управлению грид-инфраструктурой Украины относятся:

- **Операционный портал (Operations Portal).** Операционный портал предназначен для отображения агрегированной информации о функционировании грид-инфраструктуры. На страницах портала представлен перечень ресурсов национальных инициатив, текущее состояние грид-ресурсов, показатели доступности сервисов по ресурсным центрам, отображаются ошибки при прохождении тестов (alarms), а так же другая информация, которую используют операционные дежурные NGI-UA в своей работе. Через портал обеспечивается коммуникация операционных дежурных NGI-UA с администраторами сайтов и персоналом технической поддержки EGI. Операционный портал поддерживается NGI Франции, и NGI-UA получила доступ к его возможностям (<http://operations-portal.egi.eu/http://operations-portal.egi.eu/>).
- **Мониторинг (Service Availability Monitoring Framework).** Сервис мониторинга доступности предназначен для постоянного контроля доступности сервисов ресурсных центров на основе разработанных тестов. Сервис тестирования доступности сайтов и сервисов NGI-UA по тестам EGI **ngi.SAM** (<http://mon-ua.bitp.kiev.ua>) был установлен на сервере ИТФ. Следует отметить, что в NGI-UA подключена система тестов EGI для промежуточных программных обеспечений gLite и ARC-EMI. Неоднородность middleware усложняет сопровождение сайтов – и в этом основное отличие NGI-UA от других национальных инициатив, которые придерживаются однородности промежуточного программного обеспечения. Информация о тестировании грид-сайтов NGI-UA интегрирована и отображается на портале (<https://grid-monitoring.egi.eu/myegi>).
- **Портал Учета (Accounting Portal).** Портал учета использования ресурсов EGI совместно с репозиторием учета предназначен для хранения и отображения в удобном для пользователя виде

данных по использованию ресурсов EGI виртуальными организациями. Портал поддерживается NGI Испании, и информация о грид-сайтах NGI-UA интегрирована и отображается на сайте (<http://accounting.egi.eu/http://accounting.egi.eu/>).

- **Служба поддержки пользователей (Helpdesk).** EGI предоставляет поддержку пользователям и операционному персоналу через систему GGUS – распределенную справочную службу с центральной координацией. GGUS – центральный инструмент, который имеет полный интерфейс с несколькими локальными справочными службами. Команда операционных дежурных NGI-UA использует систему GGUS в своей работе (<http://helpdesk.egi.eu/http://helpdesk.egi.eu/>).
- **База данных конфигурации (GOCDB).** База данных GOCDB – содержит общую информацию о ресурсных центрах, которые составляют грид-инфраструктуру. К GOCDB получают доступ конечные пользователи, менеджеры, команды поддержки и менеджеры VO. Информация по топологии грид-инфраструктуры, хранящаяся в базе данных GOCDB, используется в качестве конфигурационных параметров в промежуточном программном обеспечении. Информация о грид-сайтах NGI-UA находится в базе данных (<https://goc.egi.eu/https://goc.egi.eu/>).
- **Центральные грид-сервисы EGI.** Они включают сервисы промежуточного программного обеспечения, необходимые для работы грид-пользователей, использующих инфраструктуру EGI, NGI-UA использует только небольшую часть общих сервисов: сервис VOMS (Virtual Organizations Management Service) и управление членством VO для инфраструктурных VO (DTEAM, OPS); Top-BDI и WMS. В настоящее время в состав NGI-UA в состоянии «сертифицировано» (промышленная эксплуатация) входят грид-сайты:
 - Kharkov-KIPT-LCG2 - Национальный научный центр «Харьковский физико-технический институт» (ННЦ ХФТИ) (gLite-EMI);
 - UA-BITP - Институт теоретической физики им.Н.Н. Боголюбова НАН Украины (gLite-EMI);
 - UA-IMBG - Институт молекулярной биологии и генетики НАН Украины (ARC-EMI);
 - UA-ISMA - Институт сцинтилляционных материалов НАН Украины (gLite-EMI);
 - UA-KNU - Киевский национальный университет им. Тараса Шевченко (gLite-EMI);
 - UA-MHI - Морской Гидро-физический институт НАН Украины;
 - UA-BITP-ARC - Институт теоретической физики им. Н.Н. Боголюбова НАН Украины (ARC-EMI);
 - UA-ICYB-ARC - Институт кибернетики им. В.М. Глушкова НАН Украины (ARC-EMI);
 - UA-ILTP-ARC - Физико-технический институт низких температур им. Б.И. Веркина НАН Украины (ARC-EMI);
 - UA-PIMEE – Институт проблем моделирования в энергетике им. Г.Е. Пухова НАН Украины (ARC-EMI);
 - UA-NSCMBR – Национальный научный центр медико-биотехнических проблем НАН Украины (ARC-EMI).



The screenshot shows the NGI_UA website. At the top left is the Ukrainian flag. To its right is the text "NGI_UA" in green, followed by "Ukrainian National Grid" and "What is an NGI?". Below this is a "Contacts" section with a table of email addresses. Further down is a "12 Sites" section with a table listing site names, certification status, and production status.

Name	Certification Status	Production St
Kharkov-KIPT-LCG2	Certified	Production
NGI_UA_SERVICES	Certified	Production
UA-BITP	Certified	Production
UA-IMBG	Certified	Production
UA-ISMA	Certified	Production
UA-KNU	Certified	Production
UA-MHI	Certified	Production
UA-NSCMBR	Certified	Production
UA-PIMEE	Certified	Production
UA_BITP_ARC	Certified	Production
UA_ICYB_ARC	Certified	Production
UA_ILTPE_ARC	Certified	Production

Рис. 4. Состав национальной инициативы Украины NGI_UA

Процесс подключения украинских грид-сайтов в грид-инфраструктуру EGI продолжается.

Для обмена информацией и поддержки администраторов и членов команды оперативных дежурных был открыт сайт Регионального операционного центра (<http://grid.org.ua/wiki/>). Этот сайт размещен в Киевском национальном университете им. Тараса Шевченко и содержит информацию об операционной работе NGI_UA: инструкции, расписание дежурств, советы по исправлению ошибок.

Можно констатировать, что Национальная Грид-Инициатива Украины (NGI_UA) функционирует как полноправный член международного грид-сообщества. Открыт путь использования общей инфраструктуры и интеграции на уровне виртуальных организаций. Виртуальная организация (Virtual Organization - VO) является динамическим сообществом людей и/или учреждений, которые совместно используют вычислительные ресурсы в соответствии с согласованными между ними правилами.

4 Международное сотрудничество

Как можно заметить, международное сотрудничество началось с самого начала существования украинского грида (как уже ранее упоминалось, с 2002 года), когда ННЦ ХФТИ, а затем ИТФ НАН Украины и ряд других академических и учебных заведений стали членами коллаборации по физике высоких энергий WLCG.

Но за прошедшее время, как бы незаметно, грид-технологии проникли практически во все области знаний в виде того, что называется электронной наукой (e-science). Отражением этого расширения грид-инфраструктуры являются, прежде всего, виртуальные организации.

Коротко перечислим основные виртуальные организации, которые созданы в Украине, а также те, в которых украинские ученые принимают участие:

MolDynGrid – молекулярная биология (<https://moldyngrid.org>);

Medgrid – медицинская грид-система для популяционных исследований в области кардиологии (<http://medgrid.immsp.kiev.ua/http://medgrid.immsp.kiev.ua/>);

SysBio – реконструкция сетей генной регуляции (<http://infrastructure.kiev.ua/ru/monitoring/56/>);

MatModEn – математическое моделирование в задачах энергетики
(<http://infrastructure.kiev.ua/ru/monitoring/59/>);

CompuChemGridUA — квантовая химия;

Multiscale - решение широкого спектра научно-прикладных задач, которые требуют многоаспектного подхода, начиная от квантово-химических расчетов и заканчивая мезоскопическим уровнем моделирования (<http://www.icmp.lviv.ua/multiscale/>);

GEOPARD – Вычисление трехмерных сейсмических полноволновых моделей в грид-среде, исследования радиационно-стимулированных процессов, фазовых превращений и изоморфных замещений в минеральных структурах в связи с решением задач нано- и радиационной минералогии (<http://vo.igmof.org.ua/http://vo.igmof.org.ua/>);

VIRGO.UA - космология и астрофизика (<http://grid.virgo.org.ua/>);

CMS, ALICE - физика высоких энергий — коллаборация ЦЕРН;

Gaussian — квантовая химия (<http://egee.grid.cyfronet.pl/Applications/gaussianvo>);

WeNMR — создание мировой инфраструктуры для ЯМР-спектроскопии и структурной биологии (<http://www.wenmr.eu/>);

5 Направления развития NGI_UA

Сейчас достаточно сложно сказать как будет развиваться Украинское грид-сообщество в целом и грид-инфраструктура, как технологическая платформа этого сообщества. Но у нас есть впечатляющий образец для подражания – Польская грид-инициатива, которая создавалась в рамках проекта PL-Grid (2009-2012) и получила дальнейшее развитие в проекте PL-Grid PLUS.

Создание инфраструктуры PL-Grid не только расширило количество вычислительных ресурсов, предоставляемых в польском научном сообществе – более 230 Тфлопс вычислительной мощности и более 3600 ТБ дискового пространства – но и реально привлекло большое количество пользователей к эффективному использованию этих ресурсов путем предоставления инновационных услуг сети и удобных инструментов, а также обеспечивая постоянную техническую поддержку.

Если в части ликвидации фантастического отставания в части суперкомпьютерных мощностей для NGI_UA достаточно сложно что-либо планировать, то по части использования грид-инфраструктуры и ее развития можно выделить следующие основные задачи:

1. Поддержка функционирования центральных сервисов NGI_UA, выполнение всех требований EGI по обновлению промежуточного программного обеспечения (уже летом 2013 года будет выполняться переход на новую версию EMI-3), расширение числа грид-сайтов, входящих в состав NGI_UA.
2. Внедрение в практику использования в NGI_UA так называемых SLA («Соглашение об уровне предоставления сервиса») – контрактов, призванных обеспечить надежное и гарантированное предоставление сервиса Виртуальным организациям.
3. Налаживание международных связей с целью участия в совместных международных проектах.
4. Разработка удобных и простых в изучении средств использования НРС-технологий для широкого привлечения ученых-непрофессионалов в области программирования и использования операционных сред.

Только восемь месяцев грид-сайты, входящие в NGI_UA, начали работать по правилам европейского грид-сообщества, и нам сейчас понятны ближайшие практические шаги в развитии Украинского грид, которые необходимо сделать. Но европейское гри-сообщество постоянно развивается.

В конце 2012 года EGI-InSPIRE опубликовало программный документ «EGLEU transition plan to ERIC» (План перехода от EGI.eu - фонда к консорциуму European Research Infrastructure Consortium) [6].

В этом документе анонсирован переход от грид-инфраструктуры, основанной на исследовательских проектах, к построению устойчивой общеевропейской e-инфраструктуры (pan-European e-Infrastructure), которая будет поддерживать функционирование грид-инфраструктур, состоящих из ресурсов обеспечивающих высокопроизводительные вычисления (High-Performance Computing), и вычислительных ресурсов с высокой пропускной способностью (High Throughput Computing).

Представлен также план перехода к 2015 году к новой модели управления грид-инфраструктурой, которая должна обеспечить устойчивое долгосрочное функционирование единого рынка равномерных транснациональных грид-сервисов, которые необходимы исследователям в цифровом Европейском исследовательском пространстве (European Research Area - ERA). Эта инфраструктура получила название Цифровая Исследовательская Инфраструктура - Digital Research Infrastructure ERIC (DRI ERIC).

Предполагается сохранить принцип subsidiarity в организации ERIC: национальные фонды и органы власти продолжают финансировать поддержку и развитие национальной e-инфраструктуры.

А вот что касается управления Digital Research Infrastructure ERIC, состава участников (члены, наблюдатели и пользователи), членства - тут планируются существенные изменения. Даже предварительный анализ этого документа показывает, что простые пользователи (некоторая аналогия с участием Украины в проекте EGI) не освобождаются от оплаты за использование грид-инфраструктуры DRI ERIC.

Совершенно очевидно, что до 2015 года время еще есть и сам указанный документ будет корректироваться, но уже сейчас нужно отслеживать тенденции развития европейского грид-сообщества, чтобы Украина была достойно представлена в будущей Цифровой программе Европы.

Литература

- [1] Ю.В. Бойко, М.Г. Зиновьев, О.О. Судаков, С.Я. Свистунов: Український академічний Грід: досвід створення й перші результати експлуатації- Математичні машини і системи.:№1, 2008 р. стр. 67-84..
- [2] А.Загородний, Г. Зиновьев, Е. Мартынов, С.Я. Свистунов: Украинский академический грид - Українсько-македонський науковий збірник.: Випуск 4 ,Київ 2009, Вид. Національна бібліотека України імені В.І.Вернадського, с.140-150.
- [3] E.Martynov, G.Zinovjev, S.Svistunov: Academic segment of Ukrainian Grid infrastructure - System Research and Information Technologies. : 2009. № 3., pp. 31–42.
- [4] S.Svistunov: Ukrainian Grid Infrastructure. Current state - Proceedings of the XXIII International Symposium on Nuclear Electronics & Computing (NEC'2011), Varna, Bulgaria, Sep. 12-19, 2011: Dubna, JINR, 2011, pp.246-252.
- [5] На шляху до європейського грид, Издательство НТУУ КПИ ВПК «ПОЛИТЕХНИКА», 2012 г., 392 стр.
- [6] EGI.EU transition plan to ERIC - <https://documents.egi.eu/public/RetrieveFile?docid=1339&version=11&filename=EGI-D2.11-1339-V3.pdf>.