

SZTAKI Desktop Grid intézmények és vállalatok számára



Kacsuk Péter
MTA SZTAKI
www.lpds.sztaki.hu

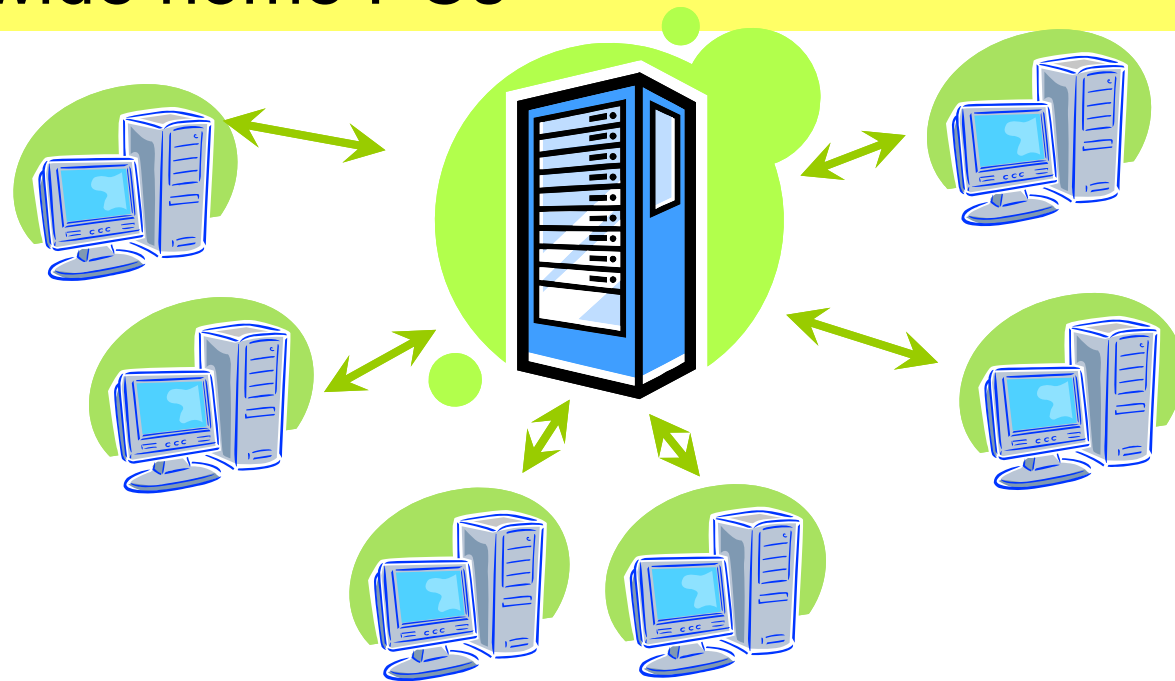
What is our goal?

- To provide a grid environment in which
 1. You can run large applications much faster than before using **someone else's** grid systems
 2. You can easily set up **your own grid** environment without large investment (using your already existing machines)
 3. You can easily **put together your application** based on your existing algorithms
 4. You can easily **run your application** and observe the progress of your application in the grid
 5. You can **create turn-key solutions** that can be commercialized

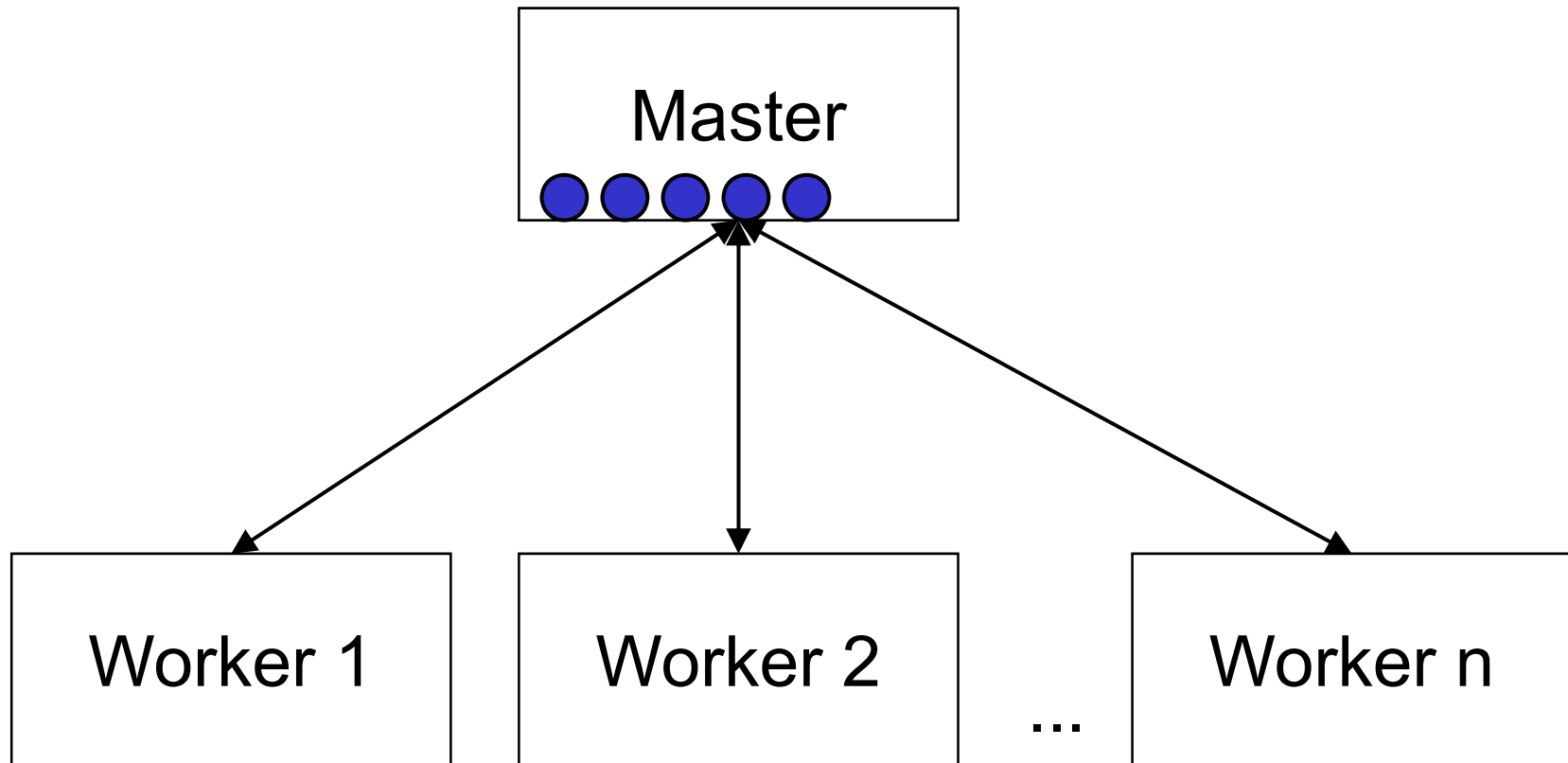
Goal 1- Desktop Grid concept

Goal: exploitation of underutilized IT resources either

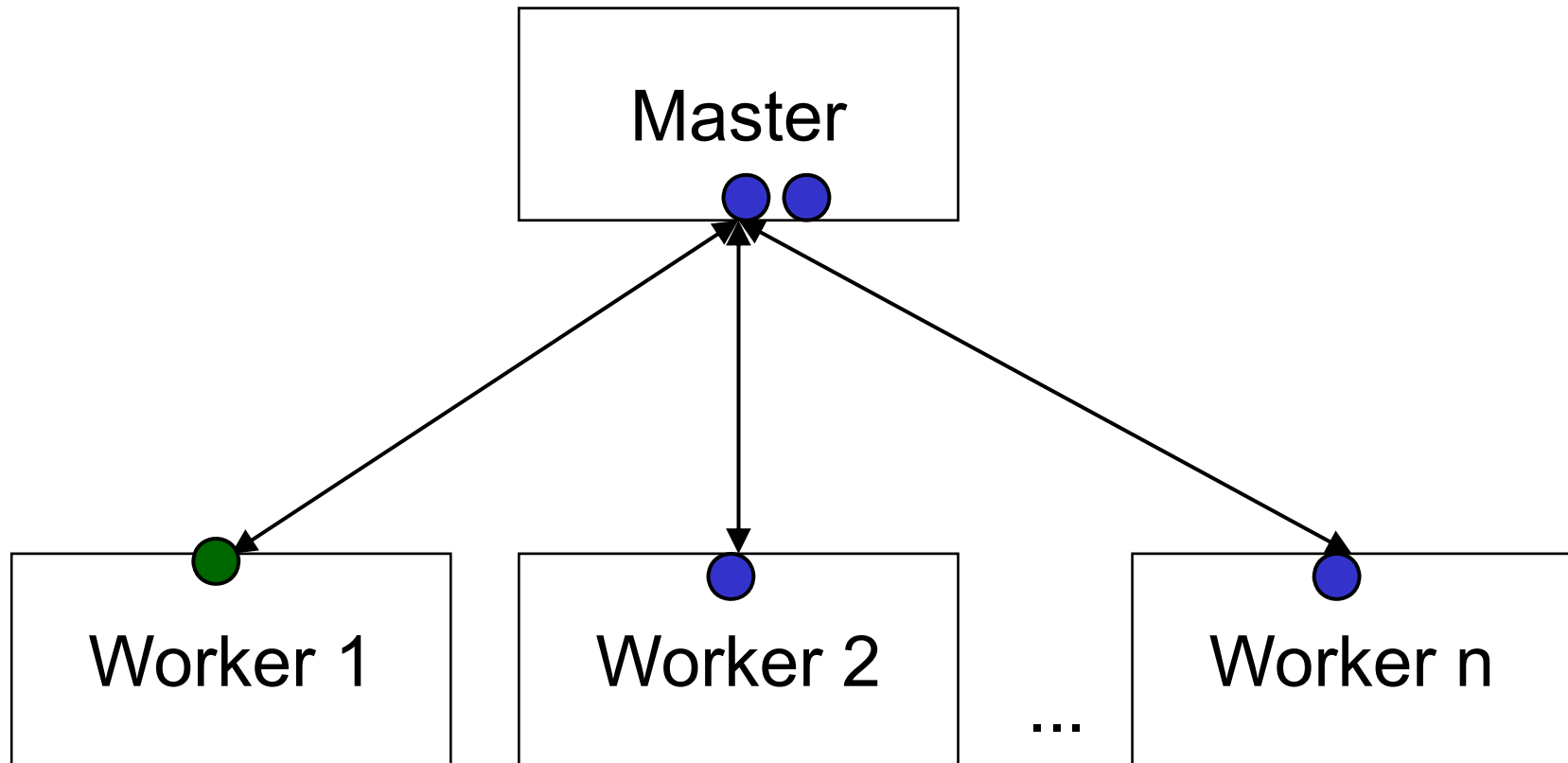
- from your own institute
- from partner institute
- from world-wide home PCs



Farm végrehajtási model



Farm végrehajtási model



Desktop Grid fajtái



- Globális Desktop Grid (DG)
 - Célja nagy horderejű tudományos feladatokhoz donor PC-ket gyűjteni
- Lokális DG
 - Célja, hogy a DG koncepciót bármilyen közösség (kut.intézet, egyetemi tsz., kar, vállalat, város, stb.) tudja használni

SETI@home – egy globális, önkéntes desktop grid

- SETI (Search for ExtraTerrestrial Intelligence):
 - A földönkívüli intelligencia kutatásának témaköre.
- SETI@home
 - Egy technikai megközelítés a rádióhullámok vizsgálata, egy keskeny frekvenciatartományban sugárzott intelligens adás keresése
 - Egy tudományos kísérlet, amely több millió Internetre kapcsolt számítógép kapacitását hasznosítja.
- Az alkalmazás egy sok évig futó adatfeldolgozó alkalmazás.

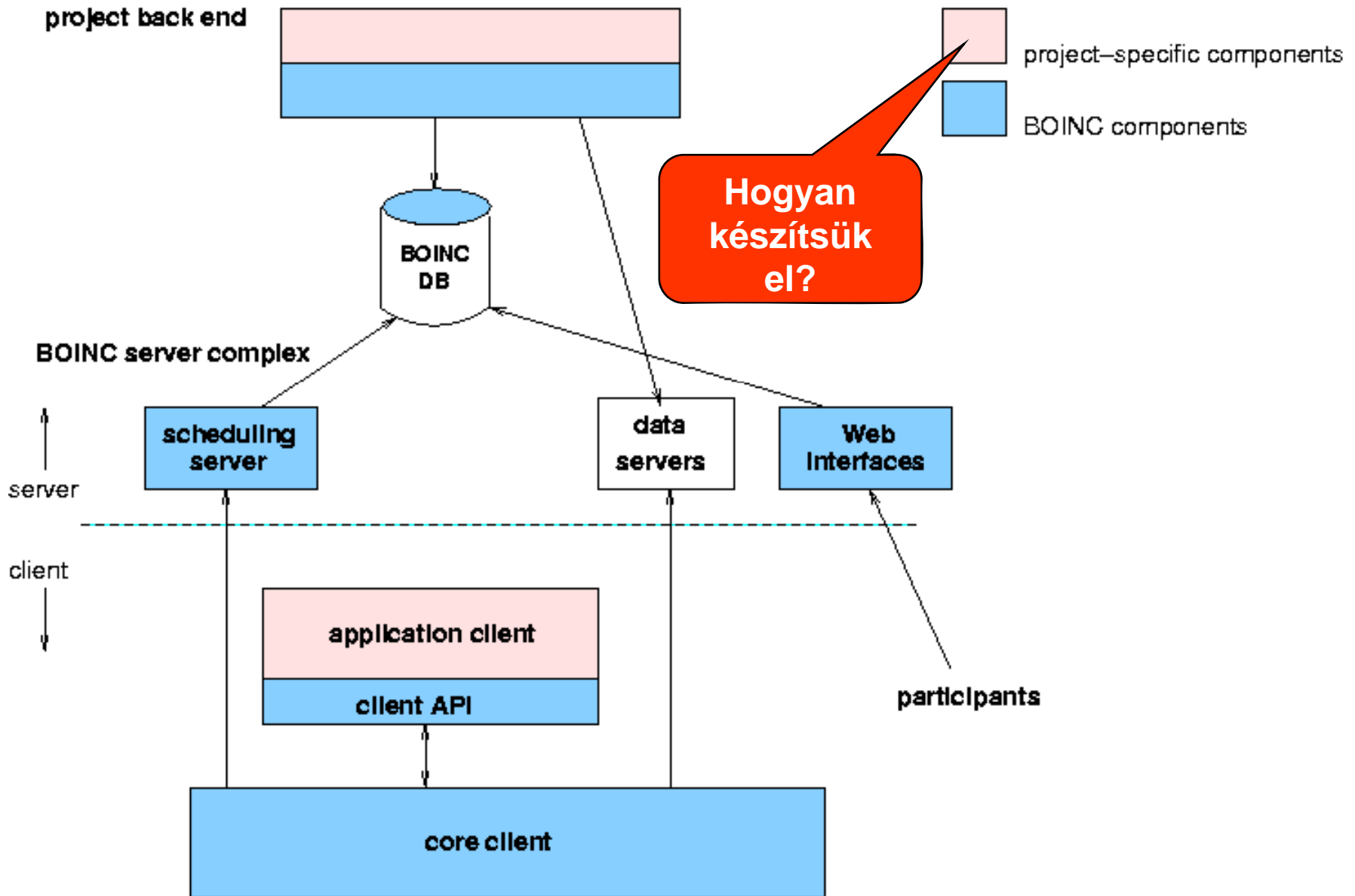
SETI@home

- 35 GB/nap adat a teleszkópoktól
- Az adatok **feldolgozása** lényegében egymástól **független**: két különböző égbolt tartomány jelei függetlenek és az egy helyről érkező különböző frekvenciájú jelek is a keresés szempontjából függetlennek tekinthetők.
- 350 KB-os részekre szabdalt feladatok
- Cél: az égbolt egyharmadának vizsgálata, amely körülbelül 39 TB-nyi adatot jelent
- 1999-ben indult el

SETI és SZDG infrastruktúrája: BOINC

- Berkeley Open Infrastructure for Network Computing
- Általánosított infrastruktúra SETI@home jellegű alkalmazások végrehajtására
- BOINC-alapú projektek:
 - Climateprediction.net, Einstein@home, Predictor@home, LHC@home, SZTAKI Desktop Grid, stb.
- BOINC-alapú projekteknek kb. 80,000 résztvevője van 188 országban, összesen 106 TeraFLOPS számítási kapacitással – messze több bármilyen szuperszámítógépnél (2005 január 19.)

BOINC Architektúra



DC-API (Distributed Computing API)

- Alapvető cél:
 - párhuzamos programozáshoz nem értő fejlesztők,
 - meglévő szekvenciális kódjukból
 - egy többgépes rendszeren futó alkalmazást készíthessenek úgy,
 - hogy ne kelljen az adott rendszer sajátosságaival törődni.
- **Farm számítási feladatokra**

DC-API

- **Mester program műveletei:**
 - Részfeladat létrehozása
 - program megadása
 - bemeneti adatok és paraméterek megadása
 - Részfeladat elküldése végrehajtásra
 - Várakozás eredmény visszaérkezésére
 - **Eredmény feldolgozása (BOINC független)**
 - Részfeladat megszakítása

DC-API (1.0) - 2005

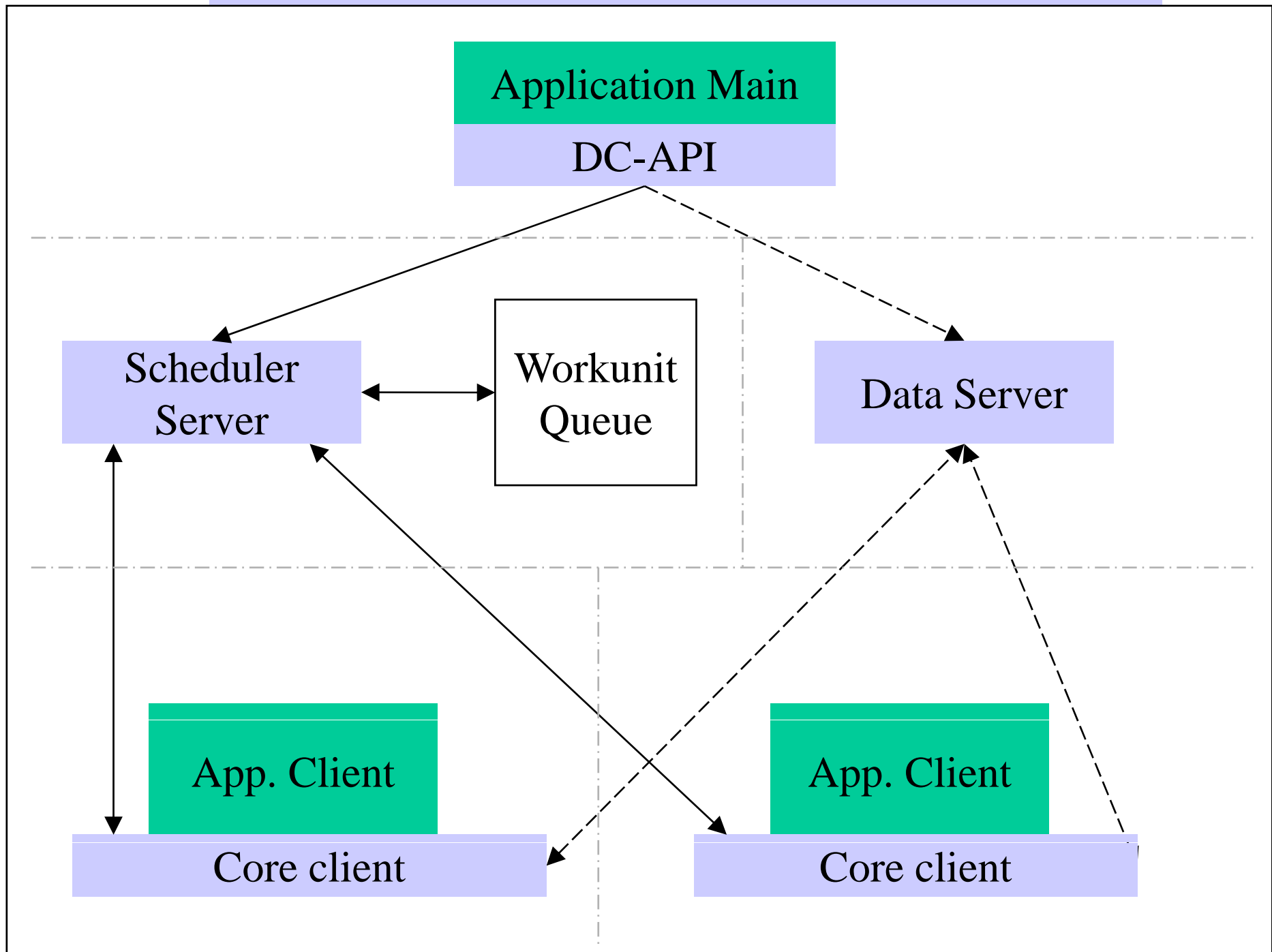
- Alkalmazás inicializálása
dc_init(projektnév, alkalmazásnév, konfigurációs fájl)
- Részfeladat létrehozása
dc_createWU(kliensprogram, argumentum)
dc_setInput(inputfájlok listája)
dc_setPriority(prioritás)
- Részfeladat elküldése végrehajtásra
dc_submitWU(részfeladat)
- Részfeladat megszakítása és törlése
dc_cancelWU(részfeladat)
- Eredményre várakozás (csak ellenőrzés és azonnali visszatérés, vagy blokkolt várakozás addig, amíg nincs eredmény)
dc_checkForResult(timeout idő, eredményfeldolgozó eljárás)
- Részfeladat teljes törlése az alkalmazás memóriájából
dc_destroyWU(részfeladat)

DC-API: előkészületek

- A részfeladatot kiszámító program(ok) önálló végrehajtható állománya(i)nak létrehozása
- Az alkalmazás az egyes részfeladatokhoz a bemeneti adatokat egy (vagy több) input fájlba írja ki
- Eredmény-feldolgozó eljárás fájlból olvassa be az eredményeket
- Ezek szekvenciális BOINC független feladatok
- Grid programozási ismeretek nem kellenek
- **Következtetés:** A DC-API egyszerű interfészt nyújt
 - farm-jellegű alkalmazások létrehozásához
 - szekvenciális programozást igényel
 - és a DC-API hívások elhelyezését a kódban

BOINC infrastruktúra programozás

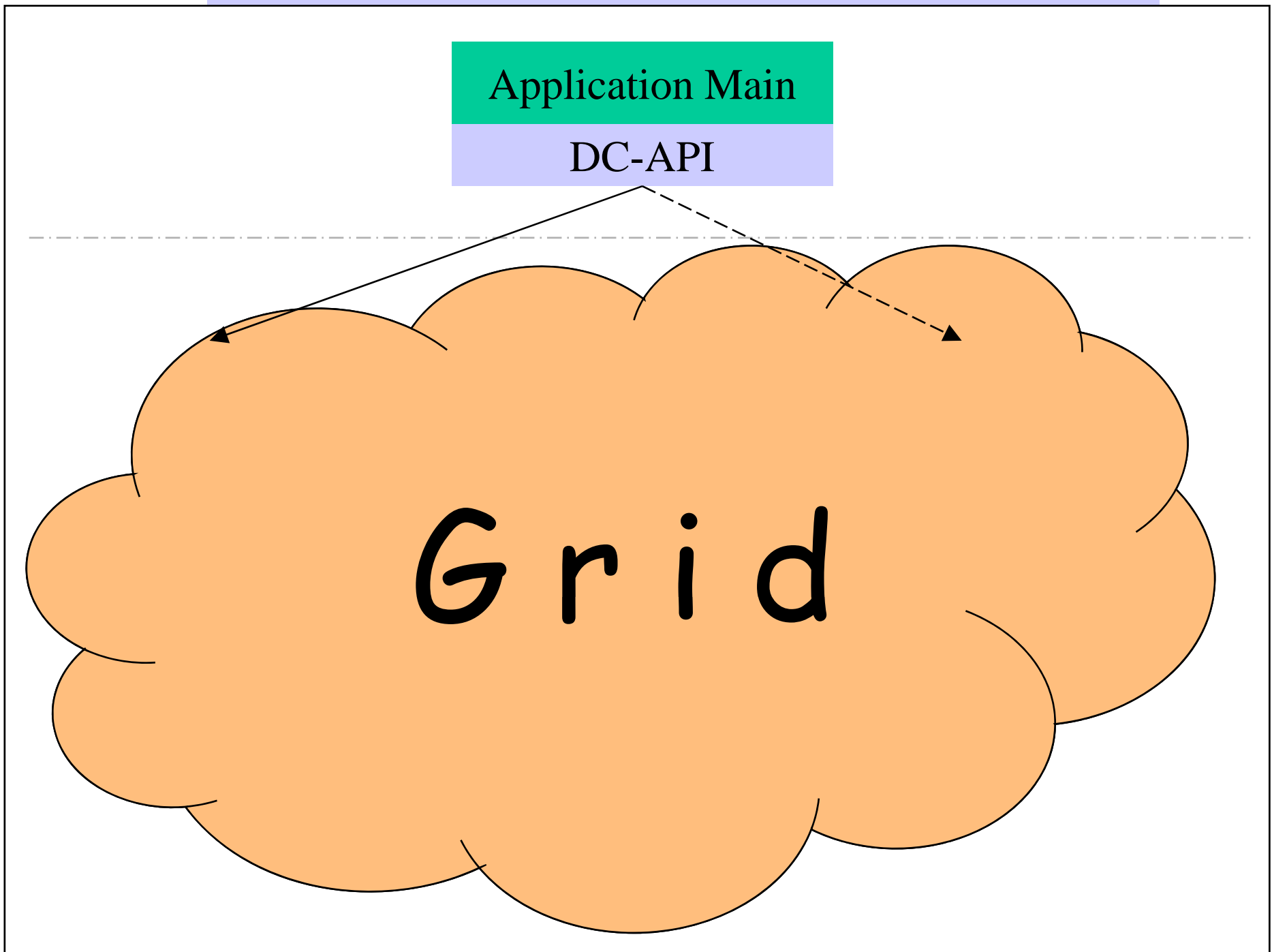
- DC-API nélkül is bárki programozhatja...
 - C++-ban kell a részfeladatokat kezelni
 - MySQL adatbázisban kell turkálni
 - Kézzel vagy szoftverrel kell az adatbázist és a futó projektet menedzselni
- Biztosan
 - **BOINC specifikus lesz az alkalmazás**, és
 - BOINC szerveren kell futnia az alkalmazásnak (Linux)



Application Main

DC-API

Grid



DC-API használata más rendszereken

- A DC-API működik már a
 - BOINC rendszereken
 - ClusterGriden
 - Condor klaszteren
- A DC-API-ban kifejlesztett alkalmazás változtatás nélkül hordozható a különböző rendszerek között
- A DC-API műveleteit bármilyen rendszeren könnyen meg lehet valósítani
 - egy PC-n,
 - BOINC-on,
 - Klaszteren, szuperszámítógépen (helyi feladat-ütemezővel)
 - Grid rendszereken (ClusterGrid, HunGrid stb)

Achieving goal 1

- **Goal 1:**
 - To run large applications much faster than before using someone else's grid systems
- **Achieving goal 1:**
 - You can connect to SZTAKI Desktop Grid (SZDG) global version
 - SZTAKI will help you to create your application on SZDG (based on DC-API)
 - SZDG provides the necessary server for you and collects resources from all over the world to solve your application

Goal 2



To easily set up **your own local grid without large investment (using your already existing machines)**

Local DG example 1: Novartis Enterprise DG

- Containing 2700 PCs for drug design (2004)
- PCs connected at several sites of Novartis
- Performance: 5 TFlop (15th place in TOP-500 list)
- Commercial result: saving 2 million USD
- Planned: connecting 27000 PCs in 2005

Local DG example 2: SZTAKI Desktop Grid

- Based on the SETI/BOINC technology
- Transforms it to local DG
- Extends it with
 - Clusters
 - Hierarchy
 - Programming interface (**DC-API**)
 - Program development environment (**WS-PGRADE portal**)
 - End-user program execution environment (**WS-PGRADE portal**)

Advantages of SZDG

- **Easy installation and maintenance**
 - Lightweight clients + one server
- **Low cost**
 - using spare-time of underutilized computers
 - only one dedicated server (and its maintenance) required
- **Secure (even for biotech companies)**
 - In-house or 'enterprise grid'
- **Easy 'gridification' of applications**
 - DC-API
 - WS-PGRADE Grid portal
- **Support for clusters & hierarchy**

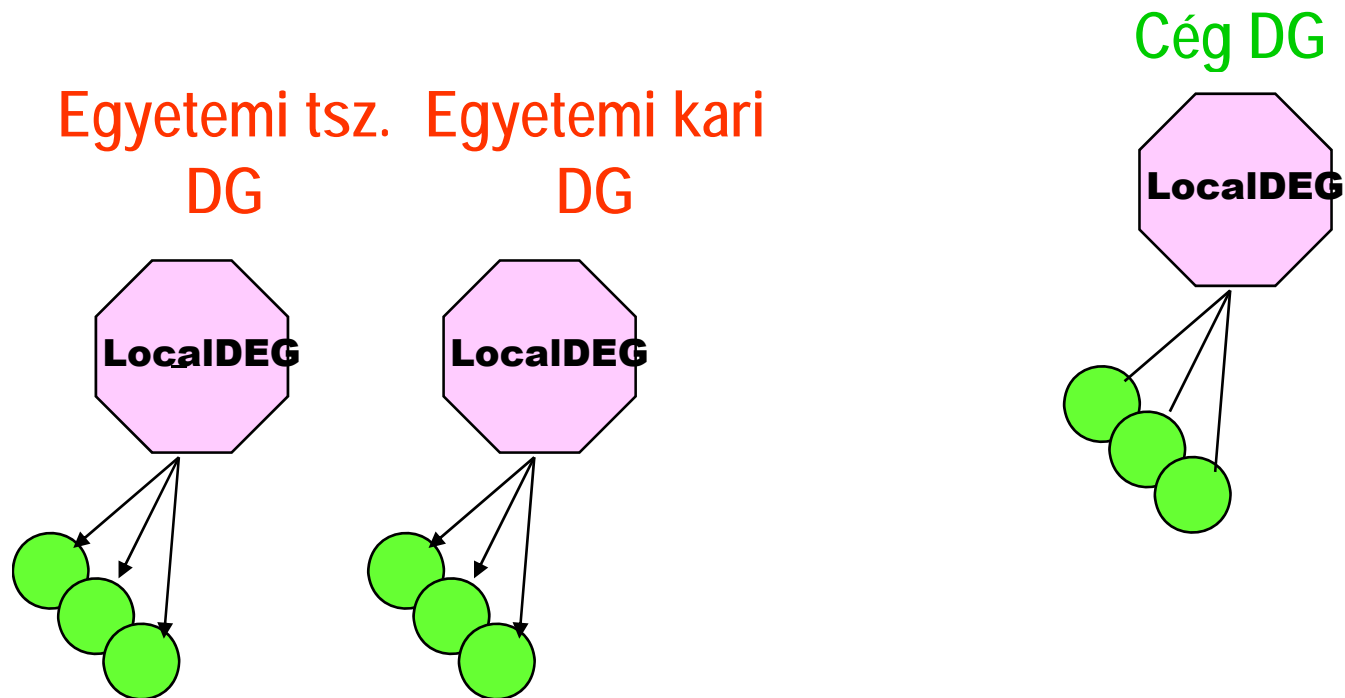
SZTAKI Desktop Grid: jövőképe



- A SZTAKI Desktop Gridben három architektúrális szintet különböztetünk meg:
 - Normál Desktop Grid
 - Vegyes Desktop Grid
 - Hierarchikus Desktop Grid
- Ha már sok szervezet felállította a saját DG rendszerét, akkor a következő lépés ezek összekötése egymással. Ezt támogatja a hierarchikus SZDG

Normál Desktop Grid

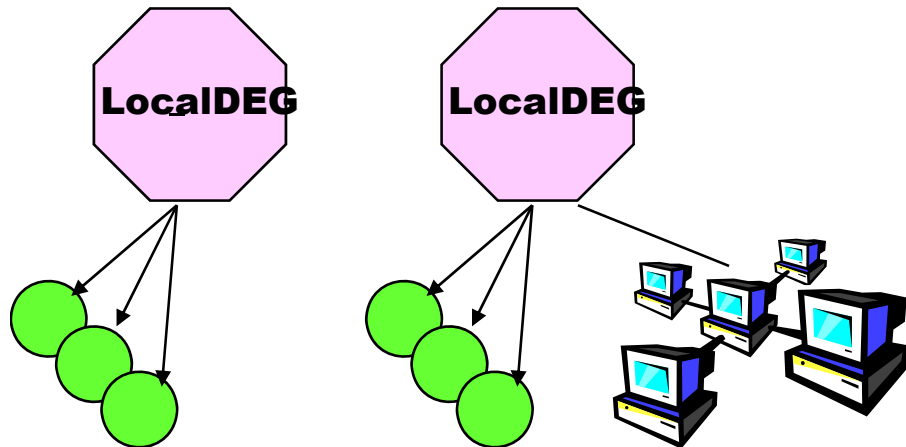
- Minden lokális DG a lokális közösség alkalmazását futtatja (egyetemi tsz., kar, cég, stb.)



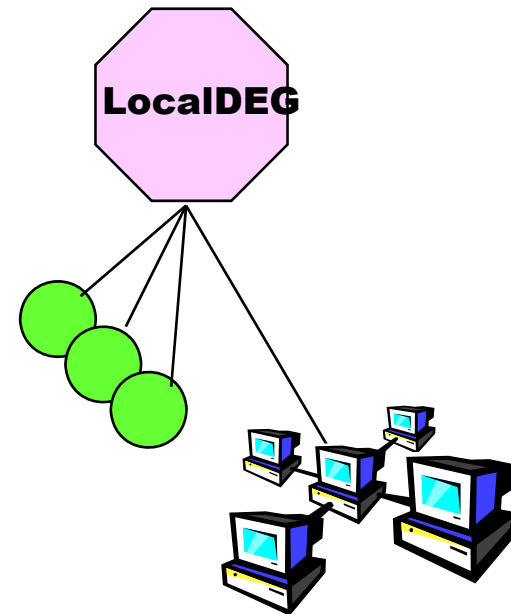
Vegyes Desktop Grid

Lokális DG-k kiterjeszhetők lokális klaszterekkel

Egyetemi tsz. DG
Egyetemi kari DG

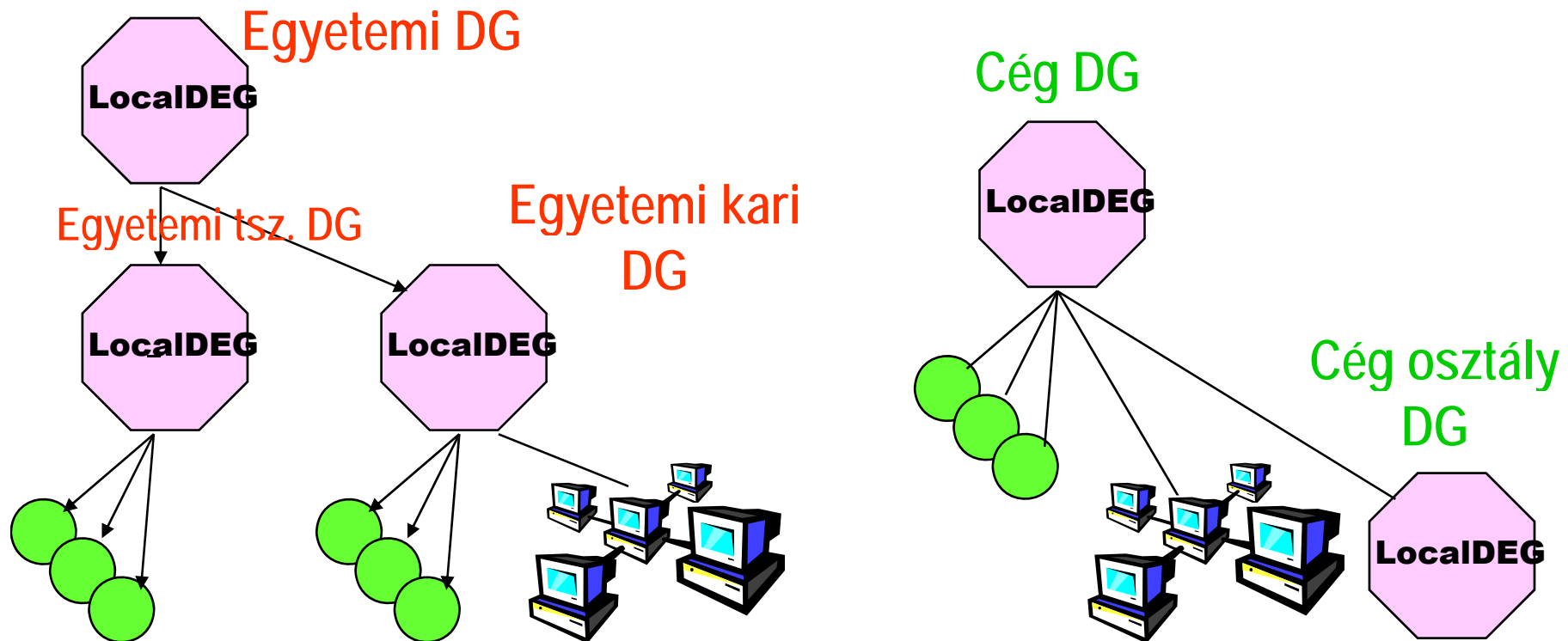


Cég DG



Hierarchikus Desktop Grid

- A hierarchia alsó szintjén lévő lokális DG-k felhasználhatók a magasabb szinten lévő DG-k alkalmazásainak megoldására. (Pl. Egyetemi tsz. és kari DG-k besegíthetnek az egyetemi DG-nek)



Achieving goal 2

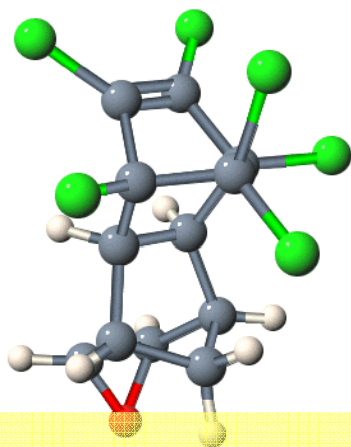
- You can create **your own DG system** based on SZDG local version
- SZTAKI will help you
 - to create your SZDG (**about 1 day work with the help of SZTAKI**)
 - to create your application on this local SZDG (based on DC-API)
- You have to
 - provide the necessary server for your DG
 - and collect resources from your institute to solve your application

Local SZDG alkalmazásai



- ✓ **ADMEToxGrid**
- ✓ **Adatbányászat és gépi tanulás**
- ✓ **Meteorológia, klíma modellezés**
- ✓ **Digitális Jelfeldolgozás (DSP)**

ADMEToxGrid



Partnerek:

- ComGenex Rt.
- ComGrid Kft.

Gyógyszerként használható molekulák vizsgálatának gyorsítása

- ✘ Kémiai instabilitás
- ✘ Biológiai inaktivitás
- ✘ Toxikusság

szempontjából még a kutatási fázis *legelején*

- ✓ a kutatási költségek csökkentése
- ✓ a kutatási idő lerövidítése
érdekében

Adatbányászat és Gépi tanulás



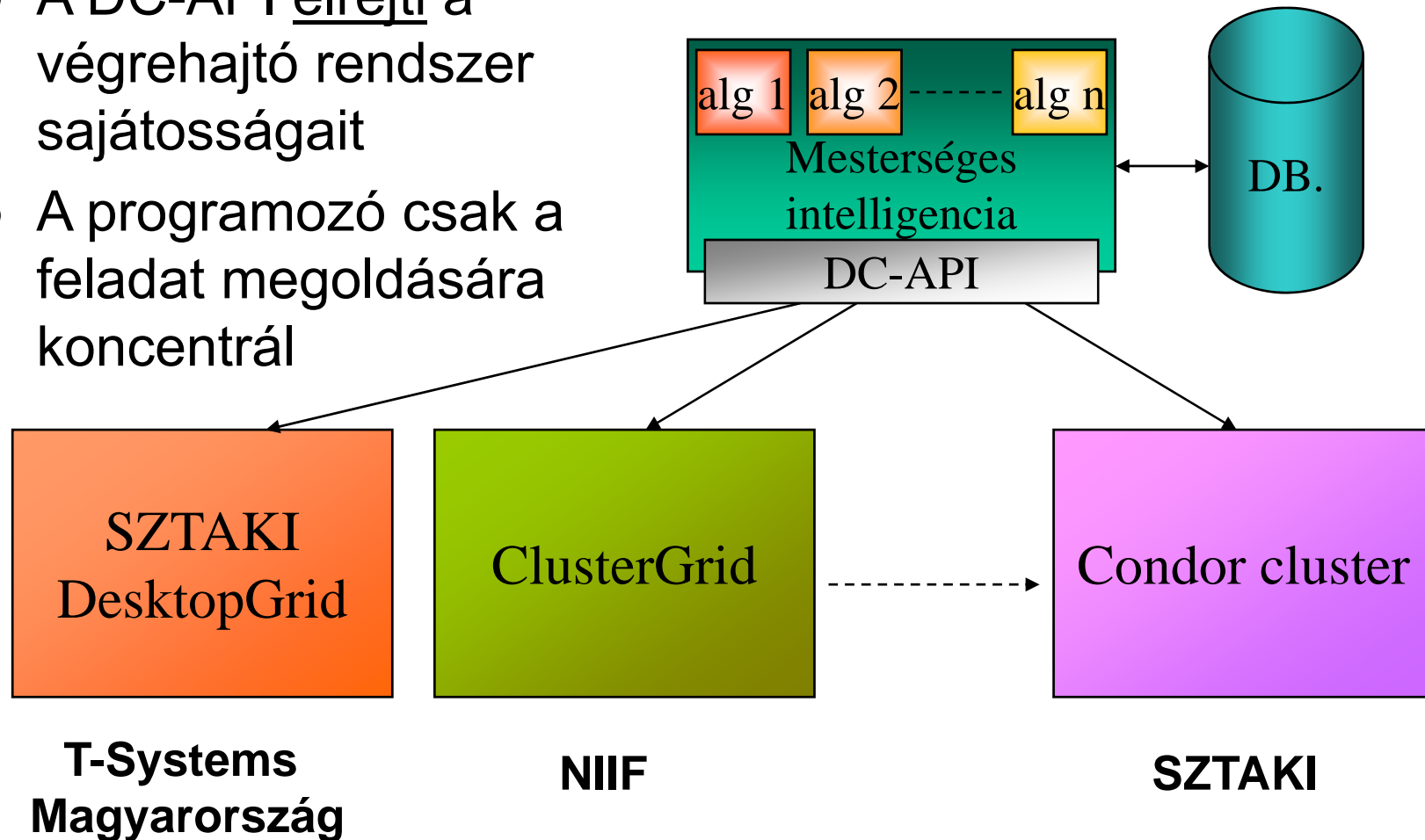
Partnerek:

- MTA SZTAKI Gépi Tanulás Kutatócsoport
- Szegedi Tudományegyetem, Mesterséges Intelligencia Csoport
- AAM Informatikai Tanácsadó Rt.
- T-Systems Magyarország

Adatbányász alkalmazás fejlesztése
a SZTAKI Desktop Grid architektúrára

Hordozhatóság

- A DC-API elrejt a végrehajtó rendszer sajátosságait
- A programozó csak a feladat megoldására koncentrál

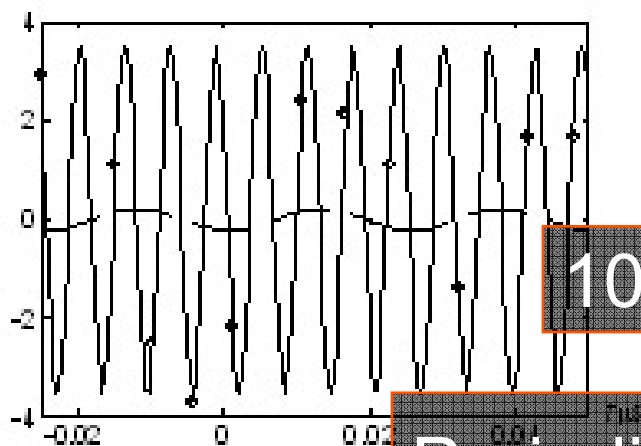


DC-API 2.0

(kiegészítő funkciói)

- **Események kezelése**
 - DC_setMasterCb ()*
- **Feladatok szervezése, azonosítása**
 - DC_getWUNumber ()*
 - DC_getWUId ()*
 - DC_getWUState ()*
 - DC_getWUTag ()*
 - DC_getResultWU ()*
- **Perzisztencia támogatás**
 - DC_serializeWU ()*
 - DC_deserializeWU ()*
- **Infrastruktúra támogatások lekérése**
 - DC_getMaxMessageSize ()*
 - DC_getMaxSubresults ()*
 - DC_getGridCapabilities ()*
 - DC_getResultCapabilities ()*
- **Konfigurációs paraméterek kezelése**
 - DC_getCfgStr ()*
 - DC_getCfgInt ()*
 - DC_getCfgBool ()*
- **Loggolás**
 - DC_log ()*
 - DC_vlog ()*
- **Üzenetküldés**
 - DC_sendWUMessage ()*

Digitális Jelfeldolgozás



Partnerek

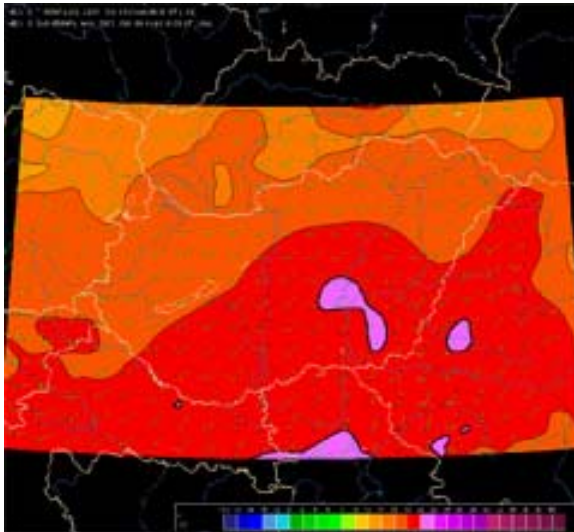
Westminsteri Egyetem, UK
Bruneli Egyetem, UK

100 PC-ből álló Lokális Desktop Grid

Periodikus, nem egyenletes eloszlású

DSP méret	PC	Clustergrid	SZDG
20	~36 33p	~35p	~16 44p
22	~416 53p	~76 23p	~56 4p
24	~7246	~141p	~466 46p

Meteorológia, Klíma modellezés



Partnerek

- econet.hu Informatikai Nyrt.
- Magyar Meteorológiai Szolgálat
- Glia Kft.
- DDC Kft.
- Env-in-Cent Kft.

- Numerikus időjárás előrejelzés, klímamodellezés a SZTAKI Desktop Grid architektúrán
- Lokális és Globális Desktop Grid létrehozása

Goal 3



**To easily put together your
application based on your existing
algorithms**

Achieving Goal 3



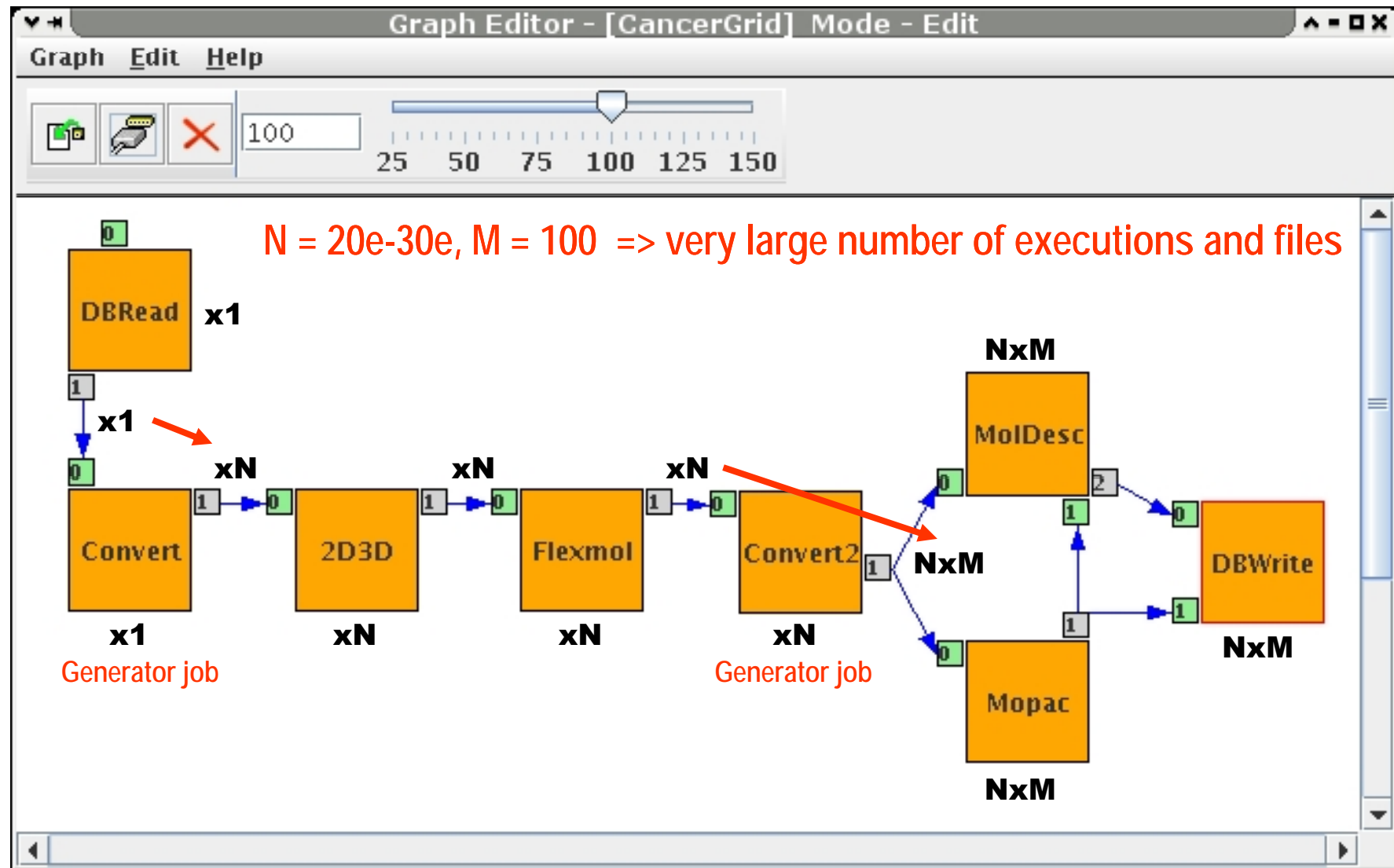
- DC-API:
 - egyedi gridifikálás támogatása
- WS-PGRADE portal:
 - nagyüzemi gridifikálás támogatása

WS-PGRADE portal



- In order to meet goal 3 SZTAKI develops WS-PGRADE portal
- WS-PGRADE enables
 - Fast creation of grid application
 - Graphical workflow creation environment for application development
 - **Repository** to store ready-to-run applications for end-users
 - Execution environment for end-users

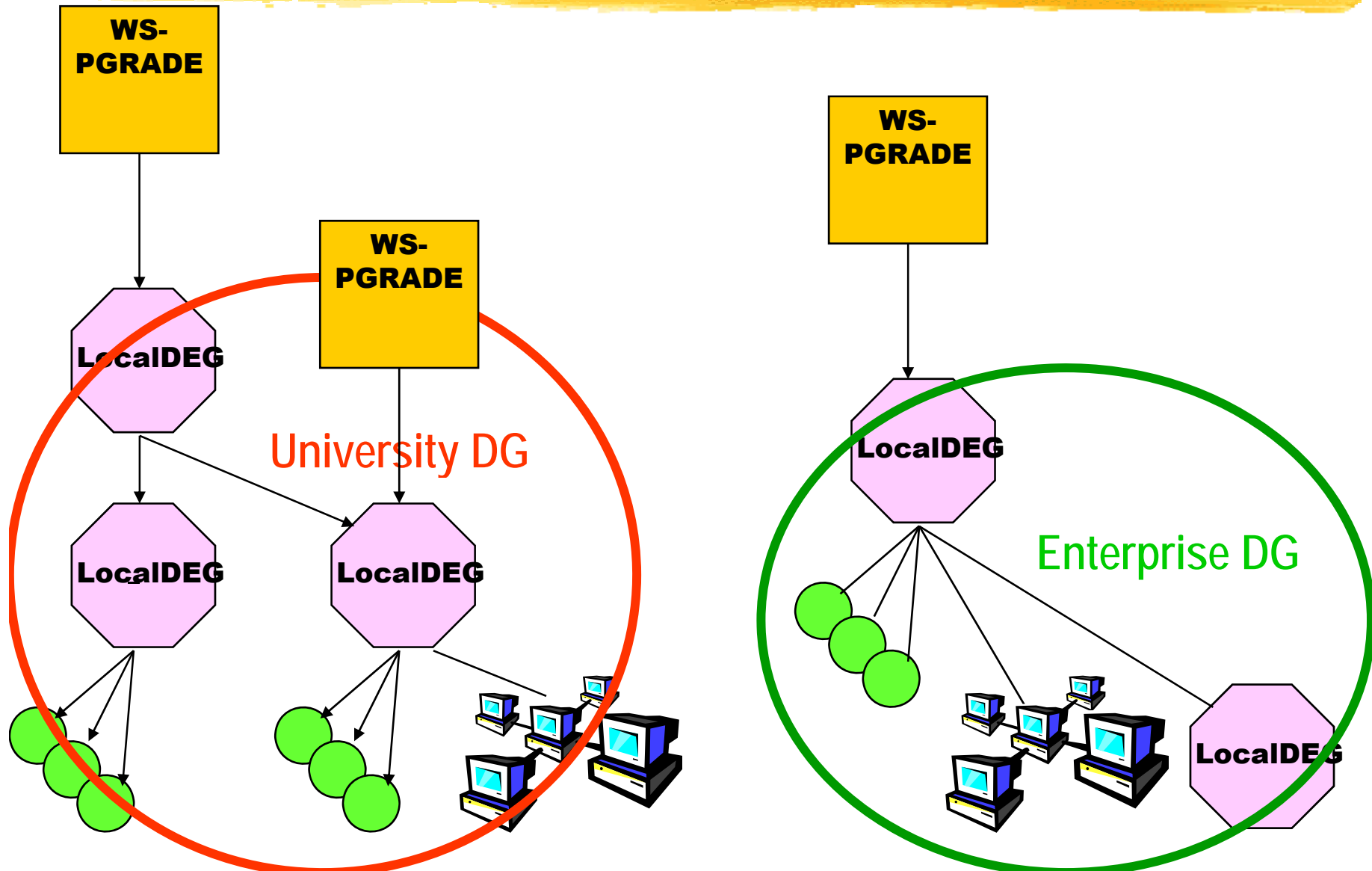
An example CancerGrid workflow



Example CancerGrid workflow properties

Job name	Instances	Total amount of data produced
DBRead	1	10 kByte
Convert	1	300 MByte
2D3D	30000	300 MByte
FlexMol	30000	60 GByte
Convert2	30000	45 GByte
Mopac	3000000	1 TByte
MolDesc	3000000	150 GByte
DBWrite	3000000	-
TOTAL	9090002	1,3 TByte

Install and connect a WS-PGRADE portal to your local SZDG



Goal 4



**Easily run your application and observe
the progress of your application in
the grid**

WS-PGRADE portal



- WS-PGRADE portal provides **repository** to download ready-to-run applications
- User should provide only the actual parameters and can submit the application to the grid
- WS-PGRADE takes care of generating and running all the necessary jobs to complete the application
- WS-PGRADE portal provides graphical interface to monitor the progress of the execution

Observing applications

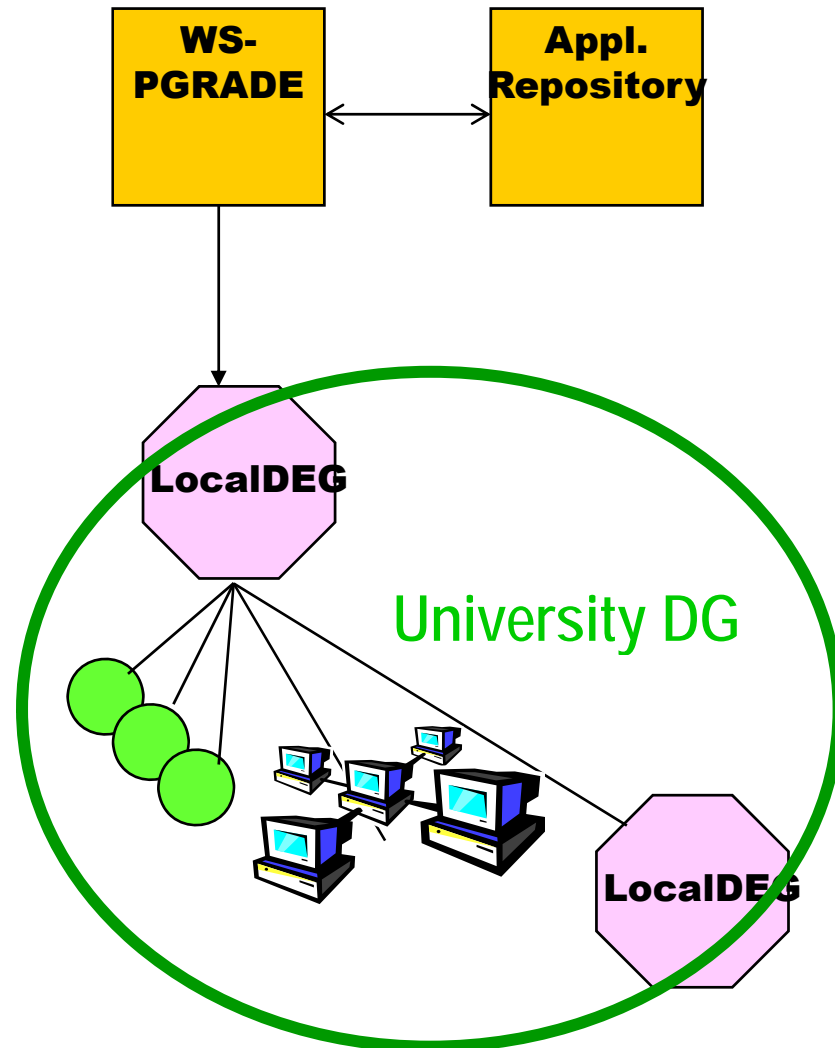
The screenshot displays a web application interface for managing workflows. The main window is titled "Real Workflows" and contains a table of workflow entries. Each entry includes a workflow name, a date, and a status bar with colored segments representing different states: Submitted (yellow), Running (red), Finished (green), and Error (blue). Action buttons like "Configure", "Info", "Details", "Submit", "Abort All", and "Export" are provided for each workflow.

Workflow details:

Workflow name	Submitted	Running	Finished	Error	Action
A1 2007-6-7	1	0	0	0	Configure, Info, Details, Submit, Abort All, Export
AxB_PS_seegrid 2007-5-9	2	0	1	0	Configure, Info, Details, Submit, Abort All, Export
AxB_PS_seegrid_2 2007-7-27	1	0	0	0	Configure, Info, Details, Submit, Abort All, Export
AxB_PS_seegrid_dumm 2007-5-30	0	0	0	0	Configure, Info, Details, Submit, Delete, Export
AxB_PS_seegrid_masnap 2007-5-10	2	0	1	0	Configure, Info, Details, Submit, Abort All, Export
AxB_PS_vegyes 2007-5-10	0	1	3	0	Configure, Info, Details, Submit, Abort All, Export
AxB_PS_vegyes2 2007-5-10	0	0	2	0	Configure, Info, Details, Submit, Delete, Export
AxB_WF_GliteGilda 2007-5-9	1	0	1	1	Configure, Info, Details, Submit, Abort All, Export

Navigation and controls: "Submit ALL" and "Refresh" buttons are located at the top left of the workflow list. A sidebar on the left contains a "Back" button and a list of "Workf" items. The bottom of the browser window shows the URL: <http://www.lpds.sztaki.hu/pgportal/>

Components of the whole infrastructure



Goal 5



To create turn-key solutions that can be commercialized

Solution:

- Develop your application by WS-PGRADE
- Upload your application into WS-PGRADE application repository
- Sell as a package:
 - SZDG
 - WS-PGRADE (with repository that contains the application)

Goal 5

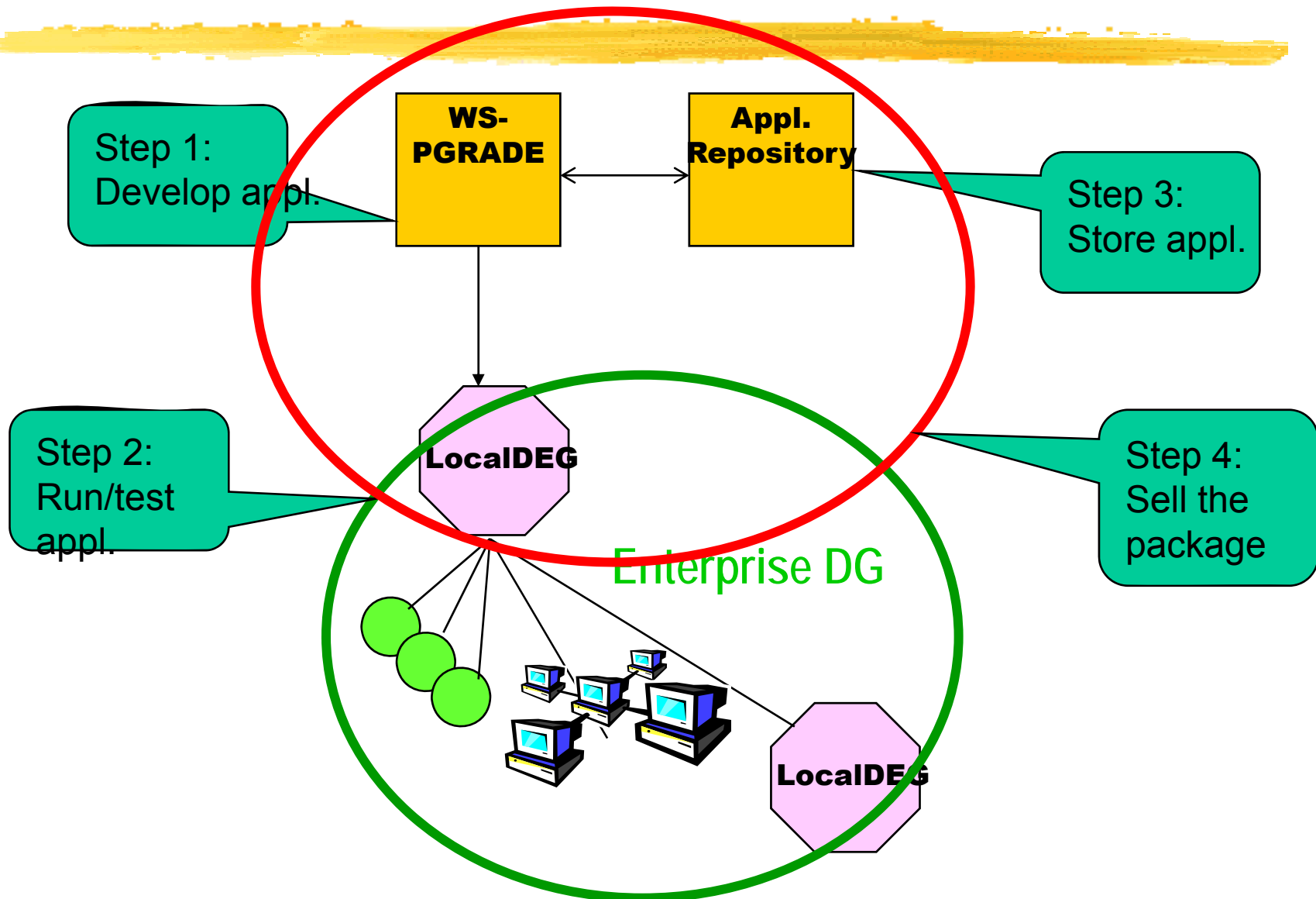


End-users (companies) can run the application under WS-PGRADE on their local SZDG using their local PCs.

You can develop new application and sell for the customers (but this time you sell only the application in the repository).

The customer can develop his own application if he buys the development license, too.

Steps of developing a commercial turn-key application



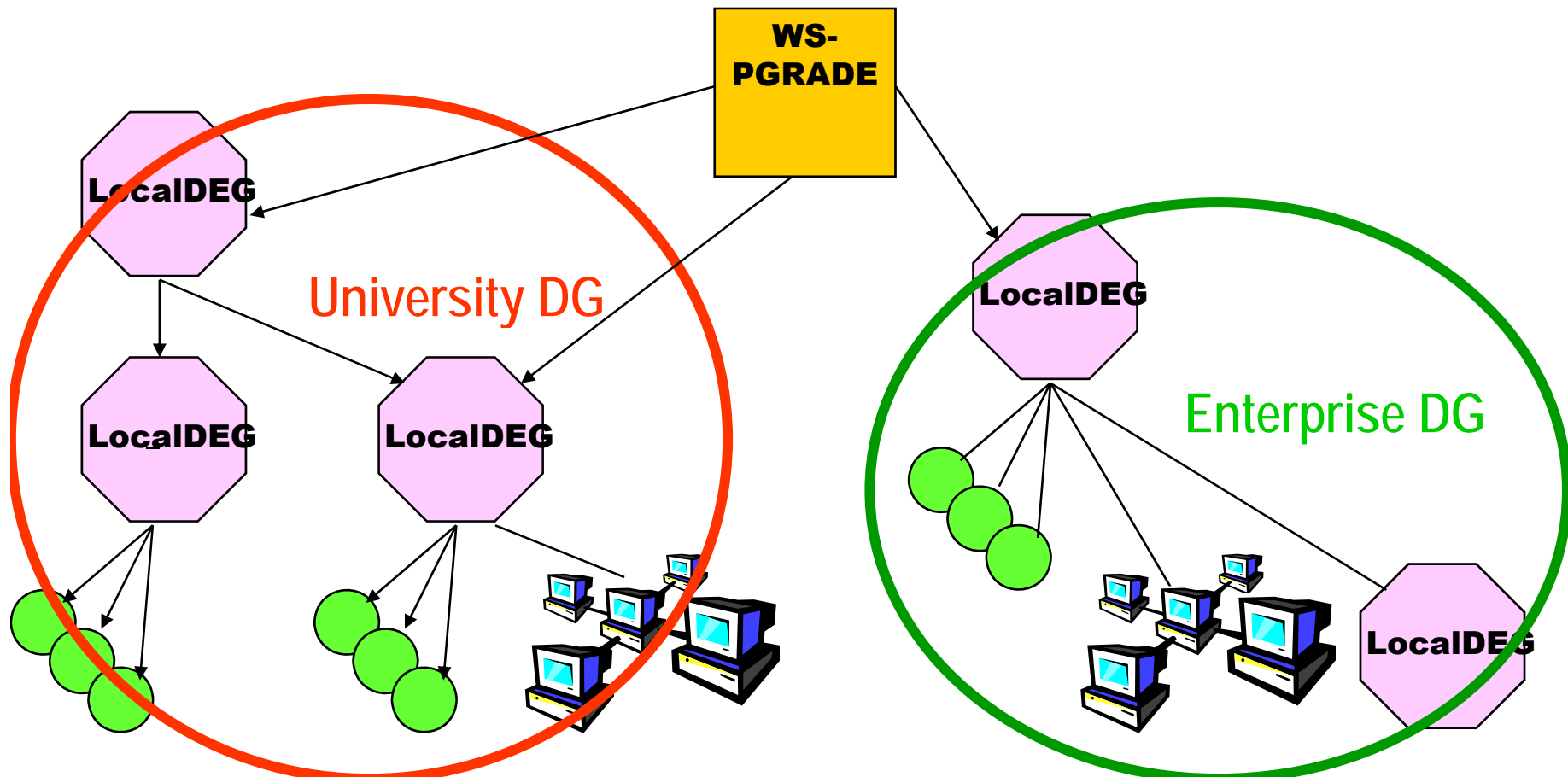
Extra feature: Collaborative usage of local SZDGs



- **If you want you can create a joint SZDG with your partners**

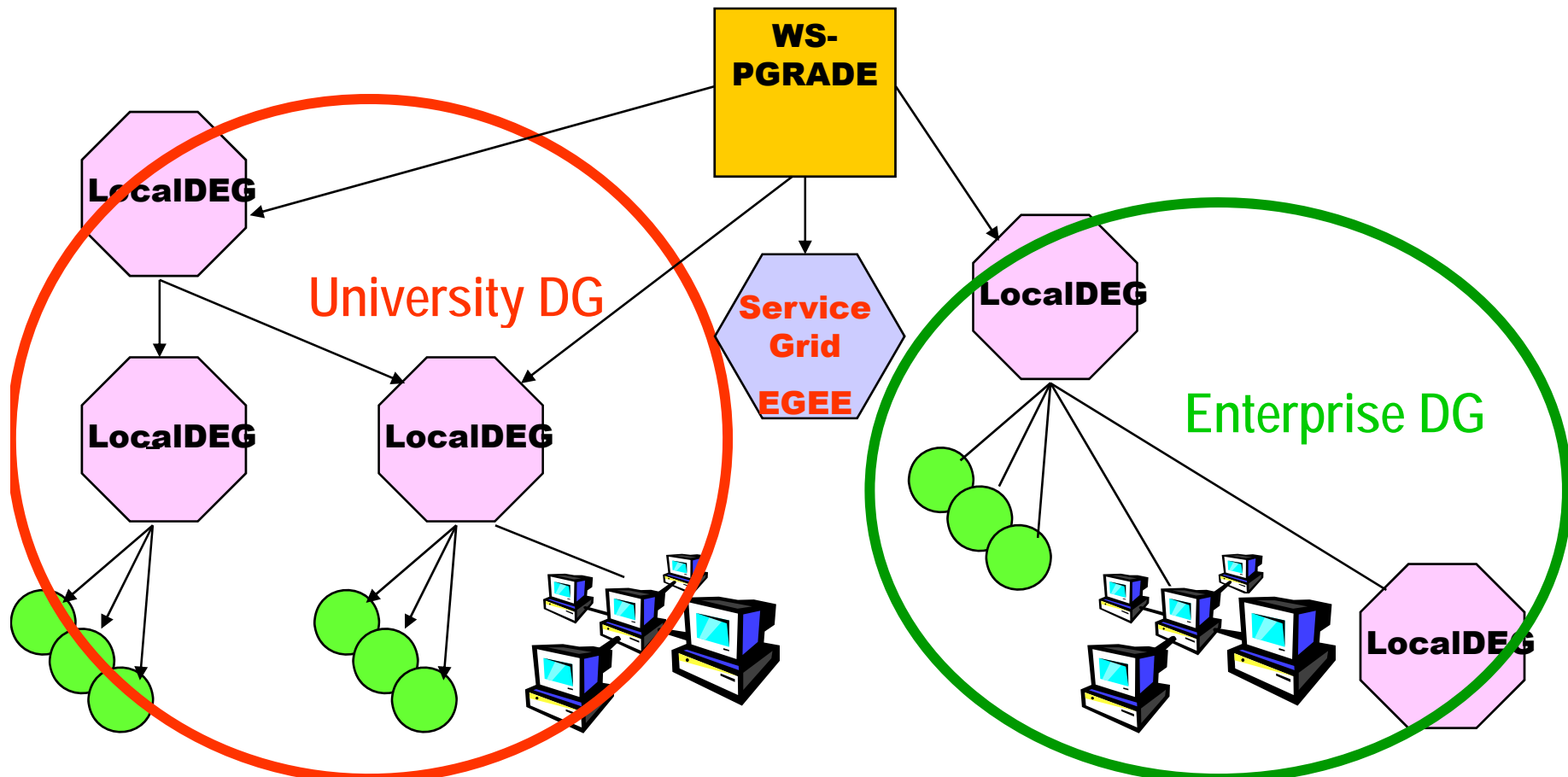
Collaborative usage of SZDG

- You can run your application in your institute's local DG and simultaneously in your partners' local SZDG via the WS-PGRADE portal



Collaborative usage of SZDG

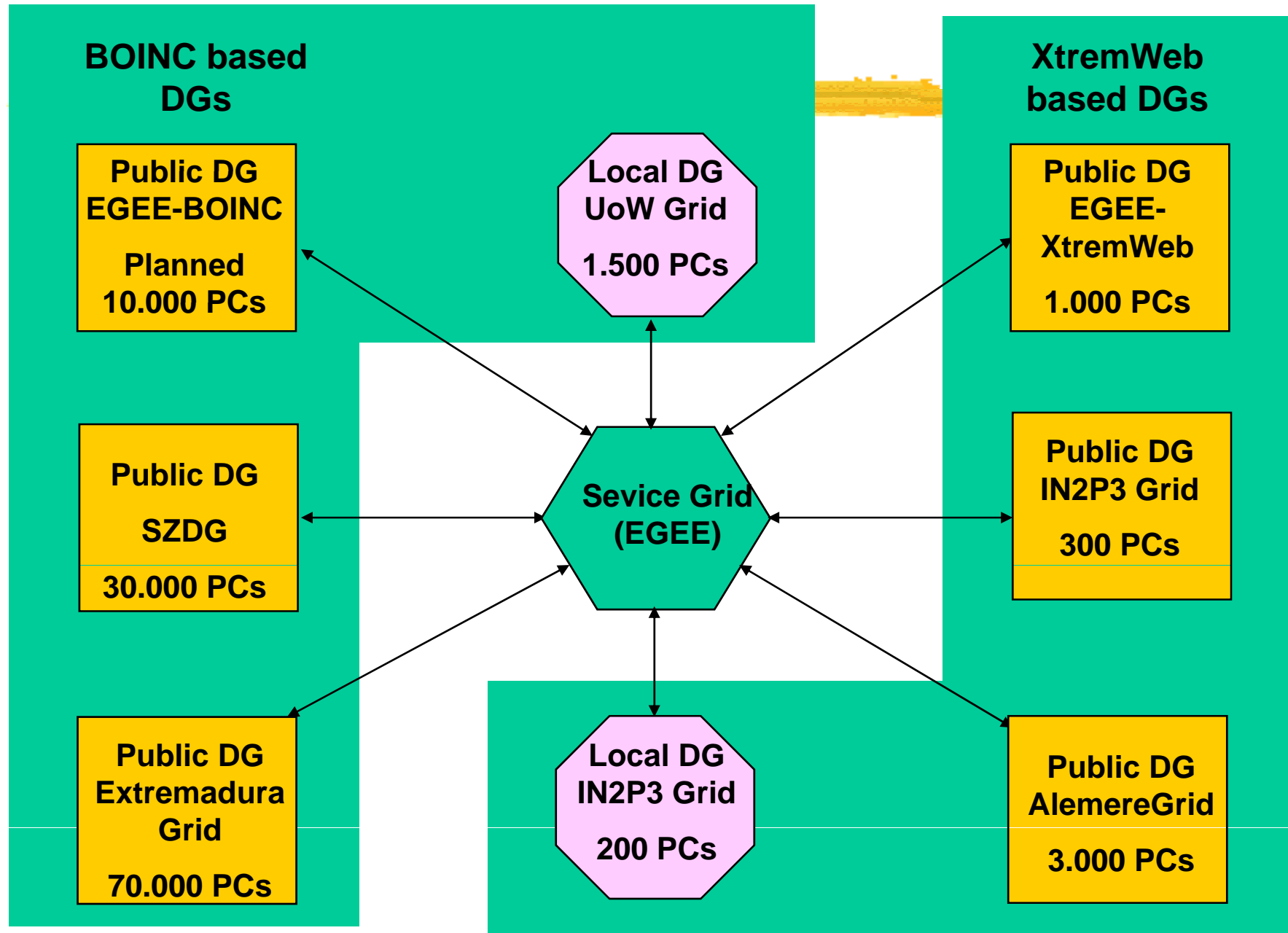
- You can run your application in your institute's local DG and simultaneously in **service grids** via the WS-PGRADE portal



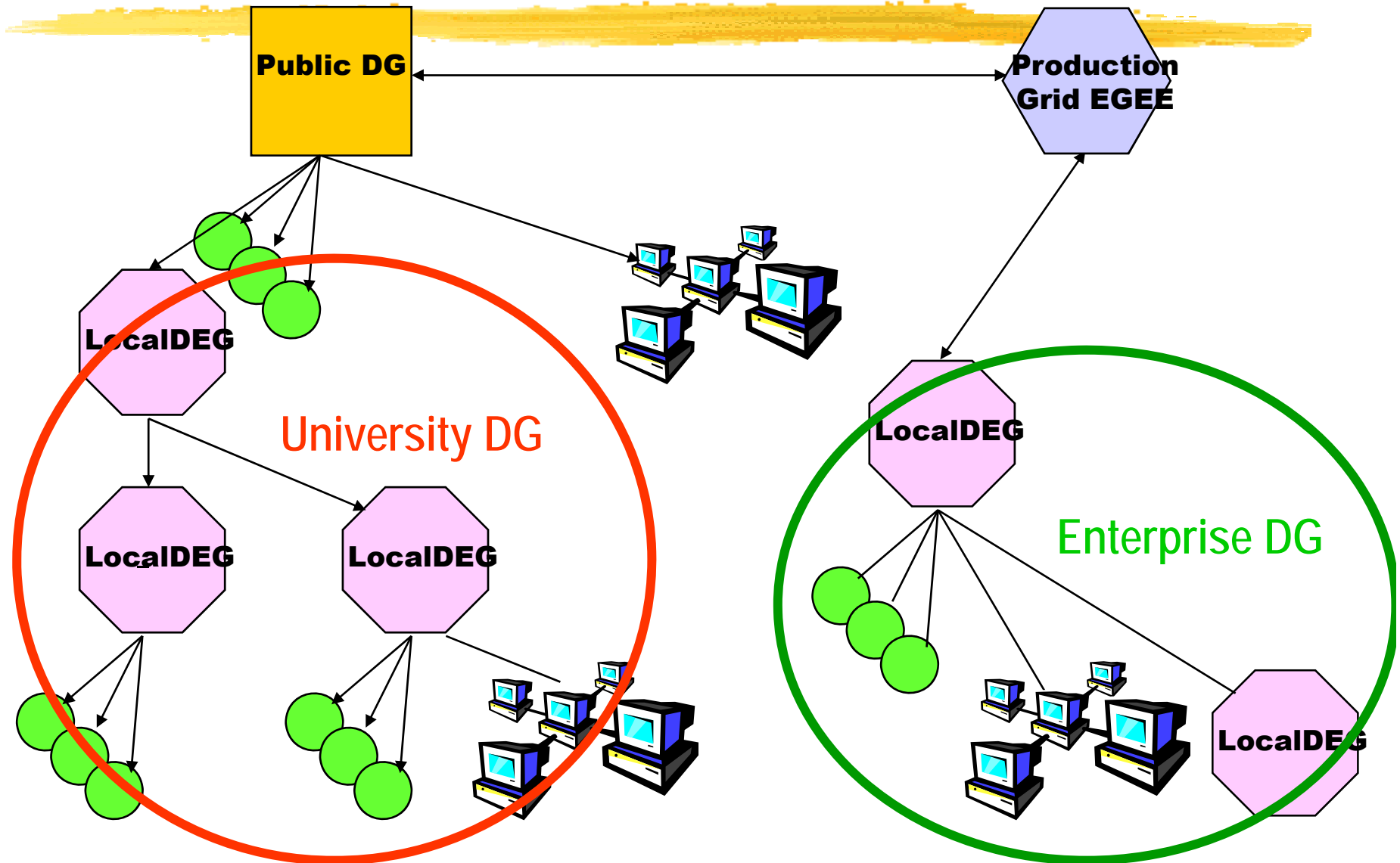
Enabling Desktop Grids for e-Science (EDGeS)

- New FP7 project started on the 01/01/2008, project coordinator: SZTAKI
- **Goals of the project:**
 - To integrate EGEE and DGs to attract new scientific communities that needs very large number of computing resources
 - To involve new type of user and resource provider communities beyond the scientific communities (school students, citizens of cities, companies)
 - To provide APIs and Grid application development tools for the new scientific user communities in order to adapt their applications for the integrated EGEE-DG e-infrastructure
 - To adapt the identified applications for the integrated EGEE-DG e-infrastructure
 - To contribute to the establishment of a sustainable Grid infrastructure in Europe

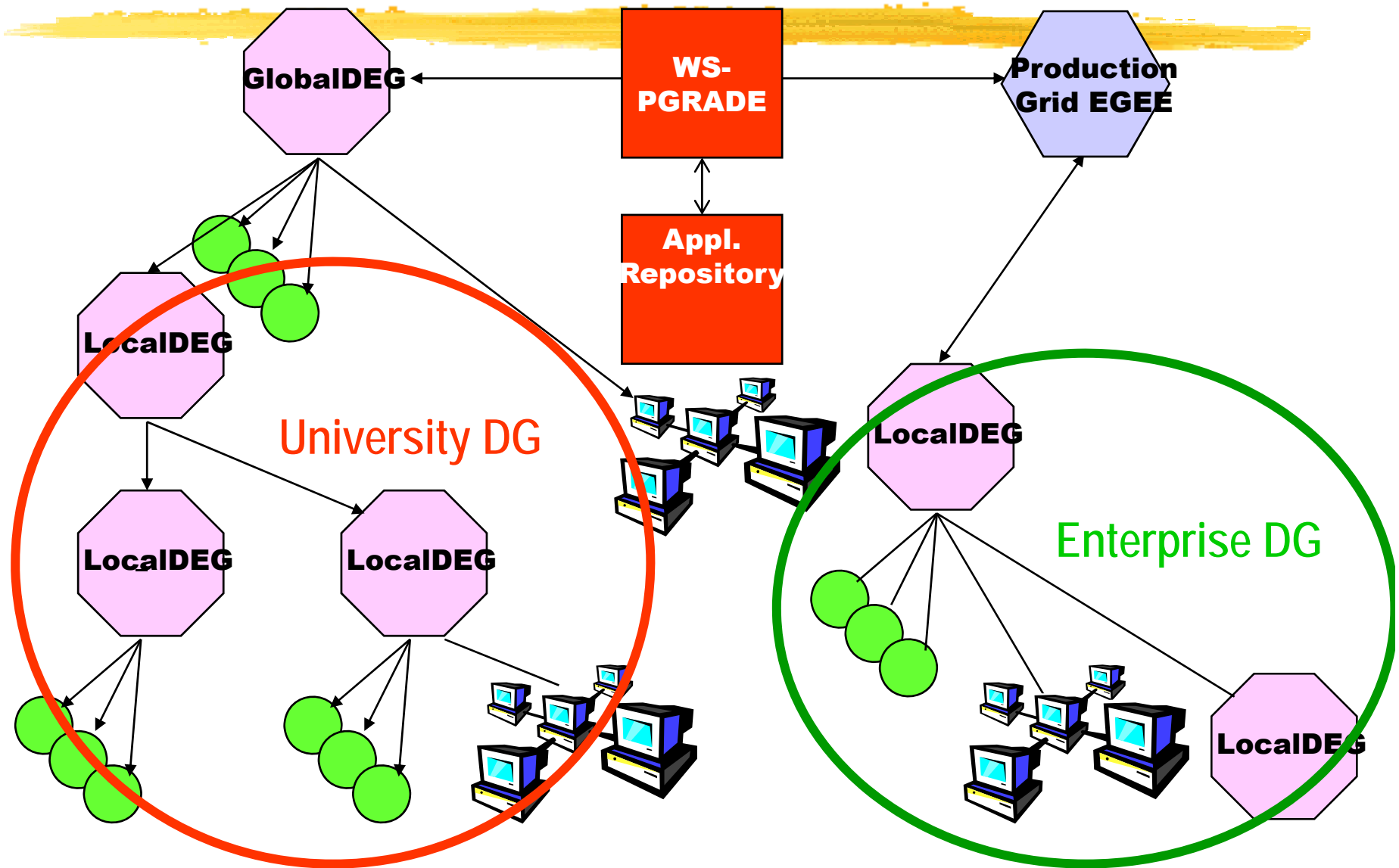
The EDGeS infrastructure



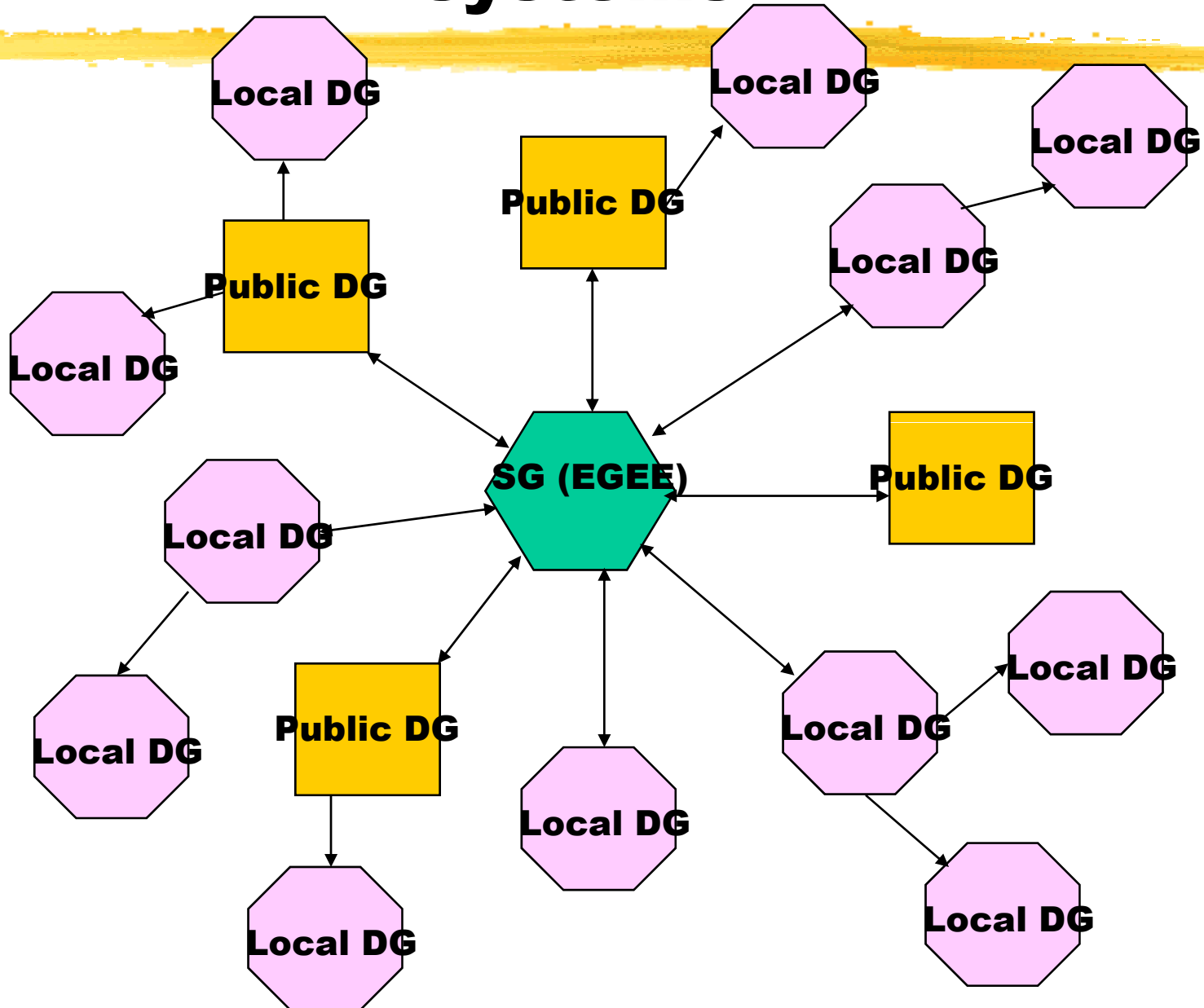
Direct connection of EGEE and local and global DG systems



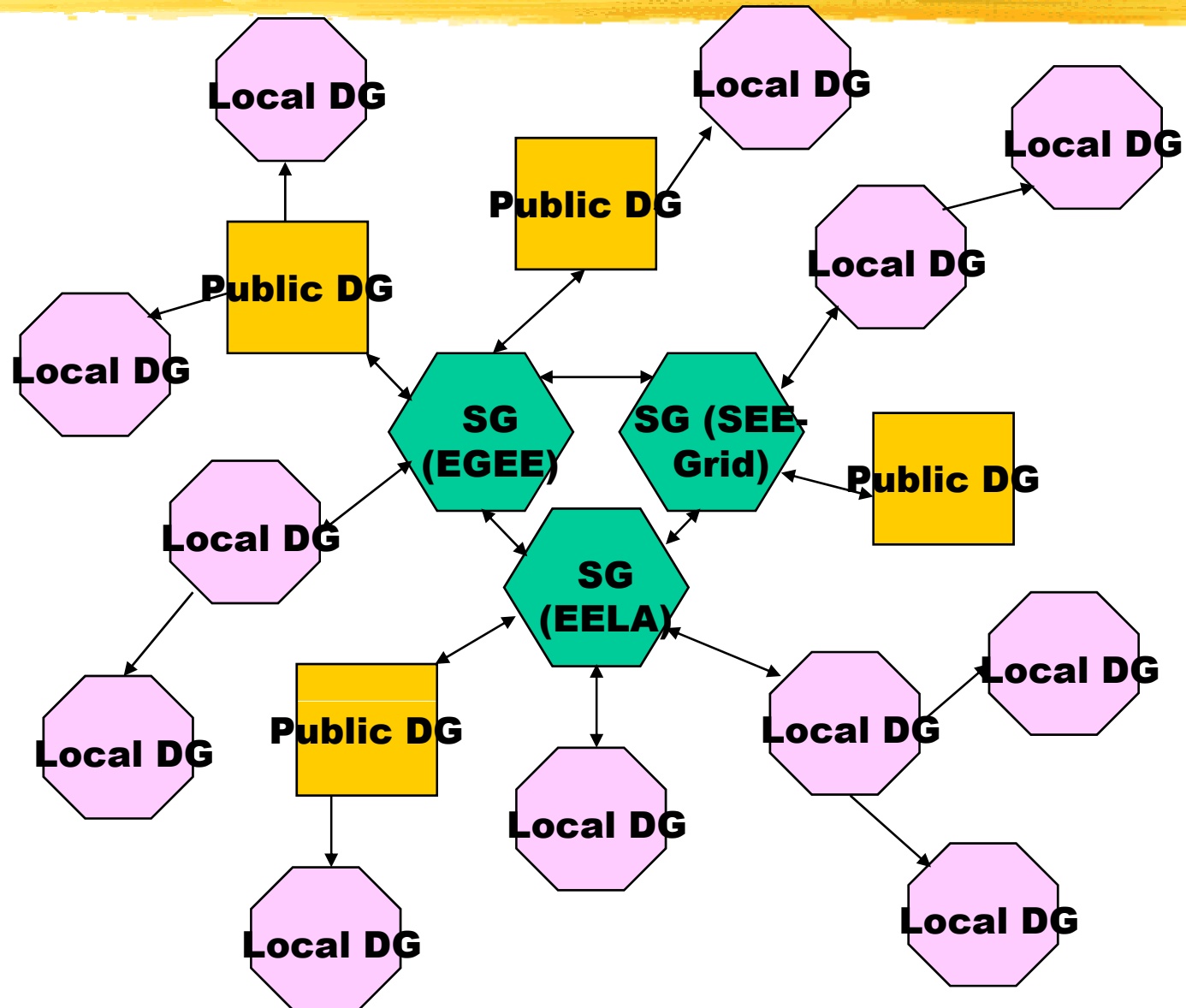
Indirect connection of EGEE and global DG systems via WS-PGRADE



Interoperability of EGEE with DG systems



Towards unlimited Grid resources



Konkluzió

- **Az SZDG lehetővé teszi:**
 - a Grid rendszerek építésének társadalmasítását
 - Grid építését olyan intézmények számára is, ahol
 - nincs klaszter
 - nincs Grid építési tapasztalat
 - nincs elég anyagi forrás drága nagyteljesítményű rendszerek vételére
 - a Grid magyarországi elterjedését a különböző közösségek számára (pl. városok, egyetemek, vállalatok)
- **A SZTAKI segít**
 - DG rendszerek telepítésében a különböző közösségek számára
 - DG alkalmazások létrehozásában

<http://www.desktopgrid.hu/>

<http://www.lpds.sztaki.hu/szdg/>