



**INSTITUTUL NATIONAL DE CERCETARE-DEZVOLTARE
PENTRU TEHNOLOGII IZOTOPICE SI MOLECULARE**

Str. Donat 67-103, 400293, Cluj-Napoca, ROMANIA
Tel.: +40 264 584037; Fax: +40 264 420042; GSM: +40 731 030060
e-mail: itim@itim-cj.ro, web: <http://www.itim-cj.ro>



RAPORT DE ACTIVITATE

Instalația de Interes Național

RO-14-ITIM Centru GRID de interes în zona de Nord Vest a României

1. Prezentare generală

Sistemul Grid este o infrastructură concepută pentru procesarea rapidă și stocarea masivă a datelor, provenite din experimentele științifice desfășurate în cadrul activităților de cercetare, dezvoltare și inovare.

Centrul GRID al Institutului de Cercetare Dezvoltare pentru Tehnologii Izotopice și Moleculare INCDTIM Cluj Napoca este o astfel de infrastructură, proiectată și dezvoltată pentru asigurarea condițiilor necesare implicării institutului în rețele internaționale de C-D specializate, a susținerii și potențării performanțelor activității de C-D pe plan regional, național și internațional. Infrastructura centrului GRID, bazată pe o arhitectură flexibilă care reunește o gamă largă de resurse de calcul și stocare, constituie un suport puternic al activităților de C-D în domenii prioritare: fizica particulelor, mediu, sănătate, biotehnologii, nanotehnologii, materiale procese și produse inovative.

Centrul GRID RO-14-ITIM a devenit funcțional începând cu anul 2007. Datorită finanțării proprii, a suportului financiar obținut cu ajutorul ANCSI și prin derularea unor proiecte de cercetare care au avut ca obiectiv principal dezvoltarea centrului, acesta se află într-un continuu proces de modernizare, dezvoltare și creștere a fiabilității conform standardelor internaționale.

RO-14-ITIM este un centru GRID atestat TIER 2 (<http://grid.itim-cj.ro/>), parte clusterului „Tier 2 Romanian Federation” și poate oferi servicii de prelucrare și stocare de date pentru toți cei interesați, fiind singurul centru Grid de acest tip din zona de Nord Vest a României.

Centrul GRID al INCDTIM Cluj Napoca este pus la dispoziția tuturor celor care doresc să beneficieze de servicii de stocare și prelucrare de date prin calcul paralel, pentru cercetări din toate domeniile strategice ale economiei naționale.

Centrul GRID al INCDTIM fiind integrat TIER 2, respectă în totalitate cerințele standardelor TIA 942 referitoare la designul interior, alimentarea cu energie electrică, sistemele de iluminare și răcire, prevenirea incendiilor, inundațiilor, efracției etc.

Instalația de Interes Național RO-14-ITIM Centru GRID de interes în zona de Nord Vest a României este înscrisă în portalul www.erris.gov.ro ca infrastructură de cercetare cu denumirea *INGRID – Sistem Grid*.

2. Obiective strategice

Obiectivul strategic al centrului GRID RO-14-ITIM este de a asigura accesul grupurilor de C-D din România pentru utilizarea neîngrădită a infrastructurii de stocare și prelucrare de date în cadrul proiectelor naționale și internaționale pe care aceste grupuri le derulează în domenii strategice ale economiei naționale.

Obiectivele specifice ale centrului GRID dezvoltat la INCDTIM Cluj Napoca sunt defalcate pe două direcții:

(i) Dezvoltarea continuă a Site-ului RO-14-ITIM acreditat și certificat pentru producție, destinat prelucrării datelor furnizate de experimentul ATLAS de la Large Hadron Collider (LHC) CERN Geneva. Angajamentul are la bază semnarea de către INCDTIM a „*Memorandum of Understanding for LCG*”, în calitate de membru al clusterului „*Tier 2 Romanian Federation*”.

În acest moment Site-ul RO-14-ITIM face parte din cloud-ul Tier1 IN2P3Lyon, Franța, unul din cele 13 centre Grid din lume <https://atlas-france.in2p3.fr/cgi-bin/twiki/bin/view/Atlas/FrenchCloud> ce deservește experimentele de la LHC-CERN Geneva.

(ii) Dezvoltarea Sistemului de calcul de înaltă performanță pentru cercetări care necesită volume mari de calcule în domenii cu un puternic caracter interdisciplinar:

- Prelucrarea de date specifice determinărilor de structuri moleculare: calculul de densități de sarcină și a nivelelor energetice în configurații moleculare neutre și ionizate; utilizarea bazelor de date spectrale și de structură care caracterizează clase de compuși contaminanți în diferite matrici din mediul acvatic.
- Prelucrarea de date legată de experimentele în domeniul transportului electronic în structuri nanoscopice (electronica moleculară).
- Prelucrarea de date în fizica izotopilor stabili, rezultate din cercetări legate de ciclul global al carbonului în corelare cu schimbările climatice: surse și consumatori de carbon, factori care influențează mărimea acestor surse, monitorizarea lor pe timp îndelungat și estimarea evoluției lor în timp.
- Prelucrarea de date în modelarea moleculară bazate pe teoria mecanicii cuantice în domeniul fizicii, chimiei și biologiei.

3. Infrastructura

Tehnologia implementată în cadrul centrului GRID, necesară prelucrării și stocării datelor, este una de ultima generație și anume tehnologia Blade.

Centrul GRID al INCDTIM beneficiază de un Data Center echipat conform standardelor în vigoare, având toate facilitățile unui data center modern:

- Alimentare permanentă cu energie electrică furnizată de un UPS APC Symetra de 96kVA care asigură o autonomie de 30 minute pentru echipamentele de calcul și de un generator diesel cu sarcina maximă 220 kVA, cu o autonomie de 8 ore și cu intrarea automată în sarcină în 15 s;
- Sistem industrial de aer condiționat compus din 4 unități Uniflair Leonardo (75 kBTU/unit), care funcționează în regim de 3+1 pentru a menține temperatura internă în domeniul 20-21°C;
- Sistem de monitorizare a parametrilor ambienali din Data Center (temperatura, umiditate) cu alarmare automată prin GSM în caz de avarie, inclusiv sistem de monitorizare video;
- Sistem de stingere a incendiilor cu gaz inert (prag limită de temperatură 90°C);
- Podea tehnică pentru un management ușor al cablurilor și o ventilație optimă.

Centrul GRID al INCDTIM beneficiază de 2 rânduri a câte 5 rack-uri de 42U fiecare cu diferite echipamente de procesare și stocare de date, precum și comunicație. Capacitatea lui în cazul instalării exclusive a Blade-urilor este de 3584 core/6 rack-uri, sau 448 de procesoare, sau 224 de calculatoare quad procesor, restul de 2 rack-uri folosindu-se pentru rețeaua internă INCDTIM și sistemul de backup în caz de cădere a tensiunii electrice de alimentare (Figura 1.).

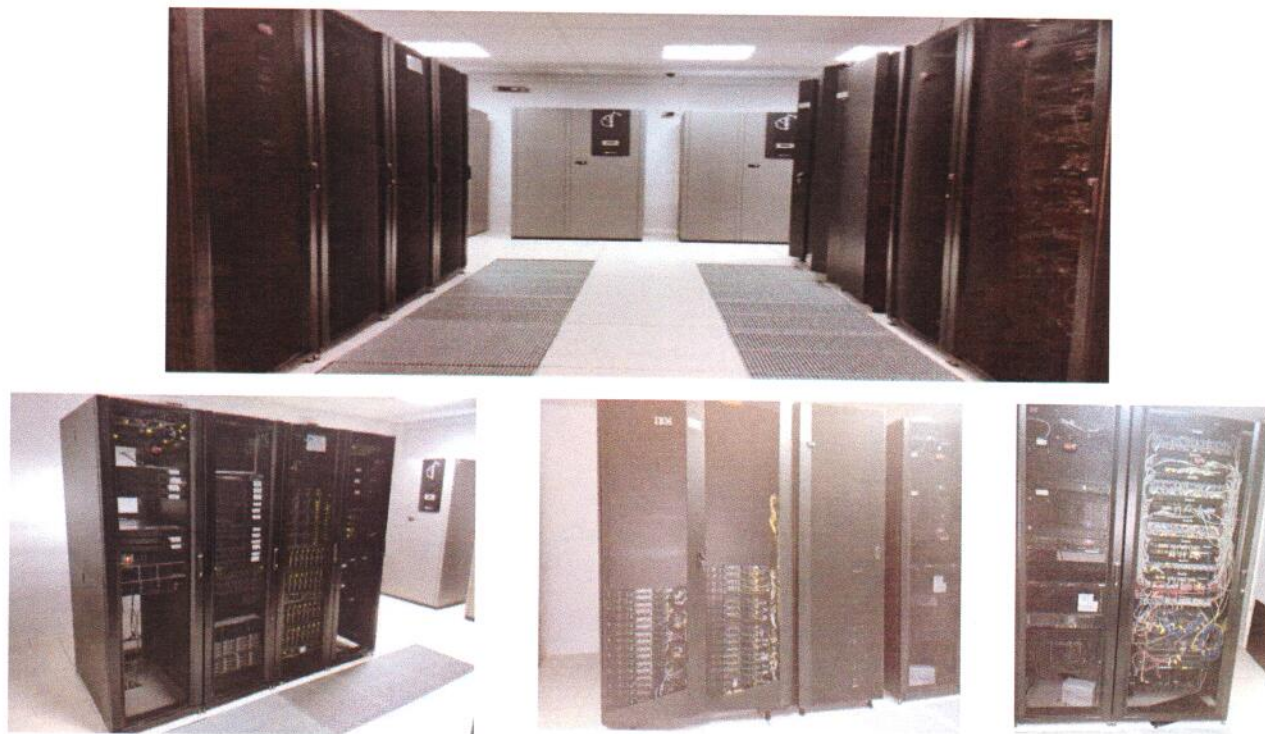


Fig. 1. Centrul GRID RO-14-ITIM

sus: vedere generala; jos: infrastructura ATLAS-GRID, infrastructura HPC și nodul central al rețelei de date.

Conectarea centrului GRID al INCDTIM la rețeaua RoEduNet este realizată printr-o legătură de fibra optică (2 „dark fiber” inchiriate). Lățimea de bandă este de 10 Gbps fiind asigurată de rețeaua de date educațională către RoEduNet. Gateway-ul folosit pentru conectare este un switch layer 3 Cisco Enterprise 6509E, care asigură conectare la viteza de 10 Gbps cu rețeaua RoEduNet, cât și conectarea echipamentelor din rețeaua internă a INCDTIM cu viteze de 100 Mbps și 20 Gbps.

- Sistemul de calcul distribuit ATLAS-GRID, amplasat în 4 rack-uri, cuprinde:
 - Stație de management (ecream.itim-cj.ro);
 - Sistem de stocare dedicat cu stație de stocare incorporată (cn-sel.itim-cj.ro);
 - Stație de monitorizare a activității (cn-eapel.itim-cj.ro);
 - Stații de prelucrare de date (work node-uri): 60 unități.

Principalele caracteristici tehnice:

- Capacitate de procesare: 536 core;
- Capacitate de stocare: 70TB;
- Organizații virtuale: atlas, ops;
- Sistem de operare: Scientific Linux 64 bit, 6.7.
- Sistemul de calcul de înaltă performanță, amplasat în 3 rack-uri, cuprinde:
 - Cluster HPC cu o putere de calcul certificată de 7.95 Gflops, asigurată de o capacitate de prelucrare de 512 core și o capacitate de stocare de 15TB;
 - Clustere MPI Aragon și MPI C3000 destinate aplicațiilor de chimie cuantică: Molpro, Gaussian, Crystal.

4. Exploatare

Funcționarea centrului GRID este asigurată 24/24 ore de personal specializat din cadrul INCDTIM și implică:

- *Administrarea site-ului acreditat RO-14-ITIM*: monitorizarea prin programe specifice (Nagios, Panda, Gstat) a prelucrării joburilor și asigurarea securității în funcționare;
- *Administrarea echipamentelor centrului*: echipamentele sistemului de calcul, instalațiile sistemului de răcire, echipamentele sistemului de alimentare cu energie electrică;
- *Monitorizarea parametrilor mediului de funcționare*: temperatură și umiditate;
- *Mentenanța centrului*: hardware-ul și software-ul sistemului de calcul, echipamentele de climatizare și furnizare a energiei electrice;
- *Remedierea defecțiunilor*: depanare hardware și software;
- *Upgradarea sistemului de calcul*: instalare și configurare echipamente noi și instalare de versiuni noi a software-ului de calcul furnizat de CERN.

Cheltuielile de exploatare a centrului GRID RO-14-ITIM corespunzătoare anului 2016 se cifrează la suma de 496.000 lei, defalcate astfel:

- *Cheltuieli cu personalul*: 192.000 lei (2 norme om/an);
- *Cheltuieli cu materiile prime și materialele*: 166.000 lei cuprinzând:
 - alimentare energie electrica 126.000 lei;
 - piese de schimb: hardware sistem de calcul, modul UPS și climatizare - 40.000 lei.
- *Cheltuieli cu serviciile prestate de terți*: 48.000 lei cuprinzând:
 - inchiriere „dark fiber” pe traseul INCDTIM-RoEduNet Cluj - 36.000 lei;
 - service mentenanță echipamente auxiliare – instalații de climatizare, generator electric și modul UPS al sistemului de back-up - 12.000 lei/an.
- Cheltuieli indirecte: 90.000 lei.

În anul 2016 cheltuielile legate de exploatarea Centrului GRID au fost acoperite din următoarele surse de finanțare:

- Programul Instalații de Interes Național: 101.161,70 lei;
- Proiectele din cadrul Programului PNIII Subprogramul 5.2, Modulul CERN-RO: 194.695 lei;
- Regia generală a INCDTIM: 200.143,30 lei.

5. Rezultate

Site-ul Grid RO-14-ITIM, certificat pentru producție începând cu anul 2010, a avut ca principal utilizator organizația virtuală a experimentului ATLAS de la LHC CERN Geneva, în conformitate cu cerințele stipulate de „Memorandum of Understanding for LCG” la care INCDTIM Cluj Napoca, prin apartenența sa la „Tier 2 Romanian Federation”, este parte semnatară. Astfel de la începutul furnizării de date de către detectorul ATLAS și până la finele anului 2016, site-ul RO-14-ITIM a prelucrat un număr de peste 6.184.362 job-uri, ceea ce reprezintă aproximativ 8% din totalul de job-uri prelucrate la nivel național.

Din punct de vedere al eficienței CPU, site-ul a avut o disponibilitate de 103.4 % pe această lungă durată de funcționare, situându-se pe locul 3 la nivel național din punct de vedere al eficienței procesării (Figura 2).

SITE	Total
NIHAM	55.4
RO-02-NIPNE	166.4
RO-03-UPB	87.2
RO-07-NIPNE	95.7
RO-11-NIPNE	93.7
RO-13-ISS	79.6
RO-14-ITIM	103.4
RO-16-UAIC	121.6
Total	87.7

Fig. 2. Eficiența CPU a site-ului RO-14-ITIM în cadrul Federației TIER 2 din România

În anul 2016 site-ul RO-14-ITIM a prelucrat 2,688,867 job-uri ATLAS, adică 22,45% din totalul de job-uri ATLAS prelucrate de site-urile Grid din Romania (Figura 3).

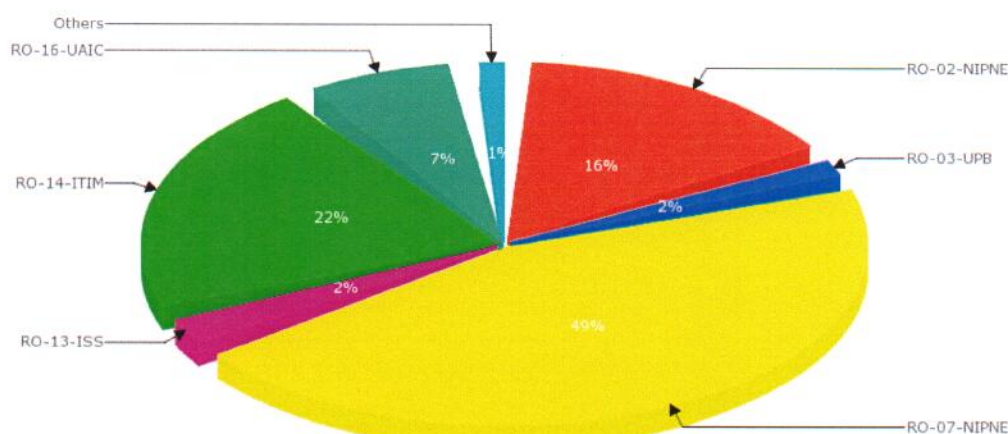


Fig. 3. Repartiția job-urilor ATLAS prelucrate în România în anul 2016

Pentru atingerea gradului de eficiență prezentat mai sus, în anul 2016 activitățile desfășurate au urmărit: stabilizarea capacității de procesare de date prin administrarea eficientă a site-ului grid și obținerea unei fiabilități și disponibilități crescute în prelucrarea job-urilor experimentului ATLAS. Aceste obiective au fost realizate prin:

- Upgradare hardware - achiziționarea a 6 unitati de prelucrare de date care au fost adaugate la cele 54 avute initial in cadrul site-ului Grid. Caracteristicile sistemului sunt: HPE ProLiant BL460c Gen9 E5-v4 10Gb/20Gb FlexibleLOM Configure-to-order Blade Server, 2 x Intel® Xeon® E5-2620v4 (2.1GHz/8-core/20MB/85W) Processor , HP 64GB (8x8GB) Single Rank x8 DDR4-2400, 2x HDD 500GB 6G SATA 7.2K rpm SFF (2.5-inch), LAN 20Gbps 2-port 650FLB FIO Adapter.

Activitățile de cercetare-dezvoltare realizate în cadrul centrului GRID RO-14-ITIM s-au desfășurat în cadrul a trei proiecte de colaborare internațională Romania-CERN respectiv Romania-JINR Dubna:

- Experimentul ATLAS de la LHC, PN3/Subprogramul 5.2, Modulul CERN-RO, Contract de finanțare nr. 8/16.03.2016;
- Contribuția națională la dezvoltarea gridului de calcul LCG pentru fizica particulelor elementare, PN3/Subprogramul 5.2, Modulul CERN-RO, Contract de finanțare nr.6/16.03.2016;
- Developments of the GRID facilities at LIT-JINR and INCDTIM-Cluj, Tema 05-6-1119-2014/2016 pozitia 88 din Ordinul IUCN nr. 96 din 17.02.2014.

Sistemul de calcul de înaltă performanță a avut ca principal utilizator grupul de calcul paralel în domeniul biomolecular și nano-structuri din INCDTIM Cluj Napoca. Au fost realizate un număr important de modelări și simulări, numărul job-urilor prelucrate ajungând la 7782. Aceste job-uri au necesitat un timp mare de prelucrare deoarece au la dispoziție un număr mai mic de unități de procesare care rulează programe specifice acestor aplicații: Material Studio, Vasp, Siesta, Gaussian, Crystal etc.

În anul 2016 o parte din rezultate au fost diseminate prin prezentarea unor lucrări în cadrul unor Conferințe internaționale:

- M.R.C.Trusca, Nagy Jefte, F. Farcas, Current status and future upgrade at ITIM Grid site, RO-LCG 2016 International Conference, Bucharest, Romania
- M.R.C.Trusca, F. Farcas, S. Albert, M.L. Soran Improving of the Grid computing system efficiency RO-LCG 2016 International Conference, Bucharest, Romania.
- S. Albert, R. Trusca, L. Soran, Application for temperature and humidity monitoring of Data Center environment, PIM 2015 International Conference , Cluj-Napoca, Romania, AIP Conference Proceedings 2015, 1700, doi: 10.1063/1.4938450.
- I Buimaga, I. C. Morari, C. Varodi, Formation and stability of structural defects in the crystalline structure of lead dioxide: a DFT study, The 7th International Conference "Distributed Computing and Grid-technologies in Science and Education" (GRID 2016), Dubna, Rusia
- A. Bende, C. Varodi, T.M. Di Palma, HPC design of ion based molecular clusters, The 7th International Conference "Distributed Computing and Grid-technologies in Science and Education" (GRID 2016), Dubna, Rusia

6. Upgrade

Pentru anii următori principalul obiectiv al Centrului GRID RO-14-ITIM este definit astfel: „Cresterea fiabilității și performanțelor în exploatare”, lucru perfect realizabil prin:

- Extinderea capacității de procesare și stocare a site-ului Grid RO-14-ITIM;
- Creșterea fiabilității prin dezvoltarea unor sisteme de monitorizare hardware;
- Îmbunătățirea sistemului de climatizare a Data Centerului gazdă al Centrului GRID.

Upgradările propuse au ca scop susținerea angajamentelor asumate de către INCDTIM Cluj Napoca prin semnarea „Memorandum of Understanding for LCG”, în calitate de membru al clusterului „Tier 2 Romanian Federation”, dar și de a deschide calea spre procesări complexe pentru proiectele experimentului ATLAS de la LHC CERN. Astfel este nevoie de creșterea semnificativă a capacității de stocare a site-ului la minimum 400 TB, efortul financiar fiind estimat la circa 765.000 lei.

Programul de upgrade a Centrului GRID, INCDTIM Cluj Napoca se va baza și în anii următori pe finanțarea asigurată de proiectele derulate în cadrul programelor bazate pe statutul României de țară membră a CERN și prin atragerea altor fonduri, în principal prin aplicarea pentru finanțare în cadrul Axei 1 POC Acțiunea 1.1.2 Mari infrastructuri de CD - Proiecte de tip Grid.

Reprezentant legal
Director General
Dr. Ing. Adrian Bot



Intocmit Responsabil IIN
Ing. Gabriel Popeneciu