

A HunGrid bemutatása és alkalmazása levegőszennyezés előrejelzésére

*Patvarczki József**, *Debreczeni Gergely***, *Lovas Róbert**, *Lagzi István****, *Kacsuk Péter**, *Turányi Tamás****

*MTA SZTAKI

{patvarcz, kacsuk}@sztaki.hu

**MTA KFKI RMKI

dgergo@rmki.kfki.hu

***ELTE

lagzi@vuk.chem.elte.hu, turanyi@garfield.chem.elte.hu

Ez a cikk az EGEE projekt keretén belül létrehozott Magyar Virtuális Szervezet, a HunGrid-et mutatja be. A cikk röviden ismerteti a jelenlegi EGEE Grid infrastruktúrát, ami több mint 9000 processzorával jelenleg a világ legnagyobb Grid rendszere. Bemutatásra kerülnek az EGEE Grid middleware (LCG-2) legfontosabb komponensei. A cikk külön kitér a virtuális organizációk (VO) szerepére és szervezési módjukra, majd részletesen ismerteti a magyar VO kialakításának módját, a HunGrid felépítését, ill. a résztvevő intézmények infrastruktúráját.

A HunGrid nem egyszerűen az LCG-2 egyik virtuális organizációja, hanem több is annál, mivel olyan új elemeket tartalmaz, amik az eredeti LCG-2 rendszerben nem szerepelnek. Ilyen bővítő elemek a P-GRADE Grid portál és a Mercury Grid monitor. A P-GRADE Grid Portál a HunGrid WEB alapú belépési pontját teremti meg, melyen keresztül kényelmesen, az amúgy hosszú és bonyolult szöveges parancsok megtanulása és alkalmazása nélkül is használhatóvá válik a HunGrid. A portál lehetővé teszi komplex workflow alkalmazások kényelmes definiálását és futtatását a HunGriden. A Mercury Grid monitor segítségével a párhuzamos Grid alkalmazások processz-szintű monitorozása valósulhat meg.

A cikk ismerteti a potenciális felhasználók számára a HunGrid alkalmazásba vételének lépéseit, beleértve a szükséges Grid jogosítvány megszerzésének módját is. A HunGrid dinamikusan bővíthető bármely egyetemi, vagy akadémiai erőforrással. A cikk leírja a csatlakozni kívánó intézmények számára a csatlakozás módját is. Az aktuális tervnek megfelelően, egy általános kép bemutatásán keresztül szeretne információt nyújtani a jövőbeli HunGrid felépítéséről, megteremtve a teljes magyarországi LCG-2 alapú Gridet, amely nyitott mindazok számára, akik tudományos kutatómunkát vagy éppen oktatási tevékenységet folytatnak.

A GRID rendszerek ebben az évtizedben egyre inkább népszerűvé válnak a természettudomány területén, melyekben nagyszámú heterogén erőforrást köthetnek össze, hogy komplex problémákat oldjanak meg velük. Az egyik hazai projekt – a „Kémiai Grid és alkalmazása légszennyezettség előrejelzésére” – egyik legfontosabb célja, hogy megvizsgálja a Gridet, mint nagy számítási kapacitást biztosító infrastruktúrát és gyakorlati megoldásokat találjon a kémia területén.

Az MTA SZTAKI egy olyan fejlesztőeszköz családot dolgozott ki, a P-GRADE-et, a P-GRADE portált és a MERCURY-t, melyek magas szintű grafikus megközelítésük segítségével hatékony támogatást nyújtanak a szekvenciális és a már elkészített alkalmazások újratervezéséhez, továbbá az alkalmazások teljesítményvizsgálatához és végrehajtásához akár párhuzamos, akár GRID platformokon. Újdonság, hogy komplex programokat hajthatunk végre különböző GRID-eken, mivel ezek az eszközök támogatják az ún. workflow-k létrehozását. A bemutatott eszközök a magyar egyetemek és akadémiai intézetek számára elérhetőek, így könnyen párhuzamosíthatják a nagy számítási igényrel rendelkező szekvenciális szimulációkat, majd GRID rendszereken futtathatják azokat, mint pl. az új HUNGRID-en.

Az MTA SZTAKI és az ELTE Fizika-Kémiai Tanszékének közös eredményeként, a P-GRADE-et, a P-GRADE portált és a MERCURY monitorozó rendszert már sikeresen alkalmazták a kémiai Grid projektben, hogy Griden futtathatóvá tegyenek egy már korábban reakció-diffúzió-advekción rendszerhez készített kémiai szimulátort. A kifejlesztett alkalmazás a P-GRADE portálon keresztül érhető el, ahol minden egyes összetevő (párhuzamos vagy szekvenciális job) képes együttműködni a Gridben a P-GRADE workflow koncepciójára alapozva, hogy hatékony légszennyezettség előrejelzést biztosíthasson, pl. radioaktív nuklidok terjedése esetén.

Továbbá a cikkben röviden bemutatjuk a reakció-diffúzió-advekción rendszerek alapjait, valamint részletesen ismertetjük ezek szimulációját a P-GRADE programozási környezet és a P-GRADE portál segítségével; kezdve a tervezéstől a teljesítményanalízisen át a végrehajtási fázisig. Továbbá beszámolunk a HUNGRID-en történt kísérleti futtatások eredményeiről is demonstrálva a P-GRADE portál hatékony felhasználási lehetőségeit.