

## **Studium wykonalności i doświadczenie w korzystaniu z infrastruktury chmury i platformy do obliczeń naukowych**

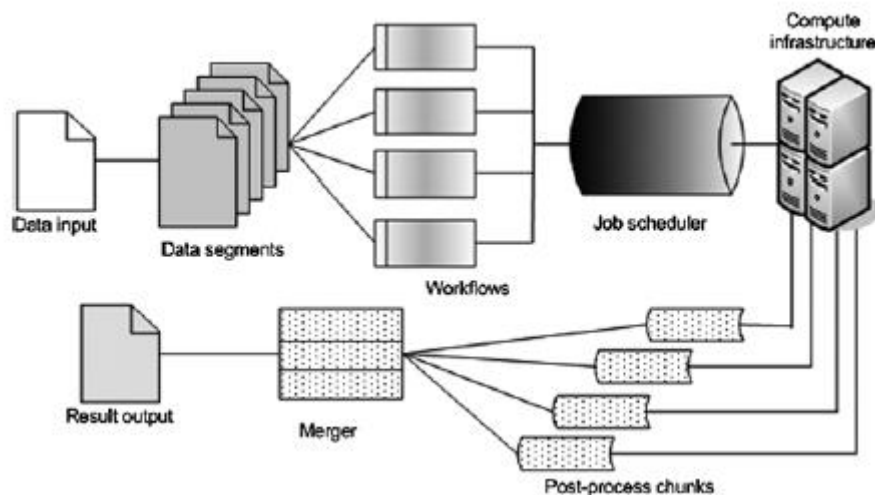
W środowisku akademickim przeprowadzanie eksperymentów, gromadzenie i przetwarzanie danych to trywialne zadania. Jednak w pewnych okolicznościach, na przykład przy przetwarzaniu dużego zbioru danych, sposób wykonania zadania może być trudny i nietrywialny, nie mówiąc już o problematyce. Dane będące wymagało większej mocy obliczeniowej. Niektóre podmioty ze znakomitymi węzłami obliczeniowymi mogą przetwarzać dane bezpośrednio we własnej infrastrukturze. Jednak zapewnienie przyzwoitej infrastruktury do przetwarzania dużych zbiorów danych lub zadań wymagających dużej ilości zasobów może być wyzwaniem dla innych podmiotów. Infrastruktura będąca własnością podmiotu przeprowadzającego obliczenia może być niewystarczająca lub wystarczająca do realizacji zadań powyżej minimalnych wymagań. Powszechną praktyką jednostek badawczych o ograniczonej infrastrukturze w takich sytuacjach jest zlecenie zadań obliczeniowych podmiotowi zewnętrznemu o większej mocy obliczeniowej w celu skrócenia czasu oczekiwania na uzyskanie wyniku przetwarzania danych. Rozwój obliczeń siatkowych umożliwia jednak instytucjom znajdującym się w pobliżu, a nawet oddalonym od siebie w skali globalnej, współpracę i wkładanie swoich zasobów obliczeniowych w budowę lepszej infrastruktury obliczeniowej. Może to zmniejszyć rozbieżność między jednostką mniej nadrzędną i bardziej nadrzędną w przetwarzaniu danych naukowych. Niemniej jednak pogląd, że sieć powstaje w wyniku współpracy kilku instytucji, może utrudniać innemu podmiotowi poza umową o współpracy wykorzystanie lewarowanej mocy obliczeniowej. Podjęto wysiłki w celu zbudowania infrastruktury gridowej, która może być szeroko wykorzystywana poprzez wyartykułowanie zasad ekonomicznych, ale wciąż nie są one dojrzałe. Przetwarzanie w chmurze początkowo pojawiło się jako modne hasło w 2007 roku (Google Trend for Cloud Computing, <http://www.google.com/trends?q=cloud+computing>) i obecnie zyskuje na popularności. Niektórzy uważają to za szum marketingowy zamiast przełomowego przełomu w przetwarzaniu rozproszonym. Niemniej jednak trend pokazuje, że zainteresowanie publiczne przetwarzaniem w chmurze stale rośnie w pierwszych dwóch latach ery przetwarzania w chmurze. Duże przedsiębiorstwa, takie jak Amazon poprzez Amazon EC2 (Amazon Elastic Compute Cloud, <http://aws.amazon.com/ec2/>) i Google z Google App Engine (Google App Engine, <http://code.google.com/appengine/>) stali się głównymi orędownikami wprowadzenia i promowania przetwarzania w chmurze dla szerszego grona odbiorców. Podczas nadejścia chmury obliczeniowej debatowano nad definicją i zakresem przetwarzania w chmurze. W miarę upływu czasu cloud computing zaczyna nabierać kształtu, a kwestie przesuwają się od dyskusyjnych opinii dotyczących interpretacji odpowiednich terminów w nowym paradygmacie do dojrzewiania i pielęgnowania technologii poprzez realizację badań perspektywicznych. Ze względu na różnorodność badań, rozsądne powinno być również oczekiwanie wdrożenia paradygmatu i technik przetwarzania w chmurze w środowisku akademickim, jeśli okaże się, że są one wykonalne i mogą przewyższać lub przynajmniej porównywalne z istniejącym podejściem. W poprzednim artykule podnieśliśmy kwestię wykorzystania chmury obliczeniowej, zwłaszcza chmury korporacyjnej do obliczeń naukowych. Przyjrzelśmy się ogólnej charakterystyce obliczeń naukowych i wyjaśniliśmy powszechne metody stosowane w dziedzinie obliczeń naukowych. Zbadaliśmy, w jaki sposób chmura obliczeniowa oparta na przedsiębiorstwach może również spełniać wymagania obliczeń naukowych i uzupełniać, a nawet zastępować podejście klasyczne. W tym artykule omówimy więcej o obliczeniach naukowych, podsumujemy wysiłki innych badaczy w zakresie obliczeń w chmurze, dodamy nasze doświadczenie w tworzeniu środowiska dla małej chmury wewnętrznej i skalowanie chmury poprzez wykorzystanie zewnętrznej chmury korporacyjnej, a także zalecenie przyjęcia chmury obliczeniowej w realizacji naukowych zadań obliczeniowych.

### **Naukowe zadania obliczeniowe**

Analiza cech obliczeń naukowych jest jak mapowanie genów. W szerszym zakresie - struktura podwójnej helisy DNA w chromosomie - zauważamy duże powinowactwo zewnętrznej struktury genów. Gdy jednak bardziej skrupulatnie przyglądamy się drobnym szczegółom, można zauważyć, że zadania dotyczące i informacje zawarte w każdym genie są różne. Podobnie zadania związane z obliczeniami naukowymi mogą wydawać się nie do odróżnienia dla osób niepraktykujących, podczas gdy badacze jednocześnie dostrzegają szeroki zakres zadań. Każda dziedzina nauk ścisłych wykonuje różne zadania obliczeniowe z różnymi strategiami obliczeniowymi. Jesteśmy wtedy bardziej zainteresowani tym, jak wybiera się określoną strategię do wykonania naukowego zadania obliczeniowego. Zadania w zakresie obliczeń naukowych są związane głównie z dwoma rzeczami: czasem przetwarzania i wynikiem. Zadanie obliczeniowe, które można wykonać w krótszym czasie, jest ogólnie korzystne. Dzięki szybszemu wykonaniu zadania, inne zadania w kolejce mogą być ustawiane i sekwencjonowane w celu przetworzenia w celu uzyskania końcowego rezultatu. Implikacje wynikające z wyniku końcowego po serii analiz uzyskanych danych określą stan powodzenia odpowiedniego zadania obliczeniowego. Wynik jednak zależy od poprawności podstawowej logiki. Ponieważ logika jest formułowana przez projektanta procesu lub badacza, właściwa i wydajna implementacja logiki da krótszy czas przetwarzania i oczekiwany wynik, biorąc pod uwagę, że logika jest weryfikowalnie poprawna dla zadania. Projektowanie implementacji algorytmów do zadania obliczeniowego może być trywialne. Jednak w niektórych przypadkach istnieją złożoności i sprawiają, że zadanie nie jest trywialne. Złożoność jest spowodowana przede wszystkim dwoma czynnikami: rozmiarem danych wejściowych i algorytmami w bloku przetwarzania. Dane wejściowe do zadania obliczeniowego mogą być ogromne, dlatego czas potrzebny na jego całkowite przetworzenie również się wydłuża. Z drugiej strony blok przetwarzania może również implementować złożone algorytmy, które z kolei wymagają dużej ilości zasobów. Skutkuje to koniecznością najwyższej zdolności obliczeniowej. Ogromne dane wejściowe i złożone algorytmy sugerują intensywne przetwarzanie. Opierając się na intensywności obliczeniowej jako kryteriach, możemy podzielić naukowe zadania obliczeniowe na dwie grupy: zadania wymagające dużej ilości zasobów i zadania wymagające dużej ilości danych. Zadanie intensywnie korzystające z zasobów odnosi się do zadania, które korzysta z dużej ilości zasobów obliczeniowych. Zasobami obliczeniowymi mogą być wejścia/wyjścia, cykle procesora, pamięć, pamięć tymczasowa, a także energia. Przykładami zadań wymagających dużej ilości zasobów w sferze naukowej są modelowanie systemów, renderowanie obrazów (zwłaszcza w 3D) i prognozowanie. Tego rodzaju zadania wiążą się z łańcuchami skomplikowanych obliczeń, które wymagają dużej alokacji zasobów. Nieco inaczej niż poprzednie, zadanie intensywnie przetwarzające dane odnosi się do zadania, które zajmuje się przetwarzaniem ogromnych ilości danych wejściowych. Przykładem zadania mieszczącego się w tej kategorii jest eksploracja ogromnego zestawu danych (dane tęczy w biometrii, dane białkowe w biologii, dane logów dostępu w sieci komputerowej itp.). Jednak w przypadku węzła przetwarzania o ograniczonych zasobach zadanie wymagające dużej ilości danych może również stać się zadaniem intensywnie wykorzystującym zasoby, jeśli nie można zastosować odpowiedniej strategii przetwarzania takich danych. Umożliwienie paralelizmu było strategią stosowaną przy wykonywaniu i realizacji naukowych zadań obliczeniowych, zwłaszcza złożonych. Dzięki równoległości złożone zadanie obliczeniowe, które wymaga ogromnej ilości zasobów, powiedzmy równoważne ze specyfikacjami minikomputera lub komputera mainframe, może zostać podzielone na mniejsze części, z których każdą można zamontować i wdrożyć w mniej wydajnej infrastrukturze, na przykład w obliczeniach klasy PC węzły. Techniki i paradygmat osiągnięcia równoległości również ewoluowały, od klastrowania po przetwarzanie siatkowe, a teraz przetwarzanie w chmurze. W klasycznym klastrowaniu praktycznie lepszy węzeł obliczeniowy, zwany klastrem obliczeniowym, składa się z kilku fizycznych węzłów obliczeniowych, które współdzielą ten sam system oprogramowania. Węzły w klastrze obliczeniowym są również umieszczone blisko siebie i w ogólnym przypadku specyfikacje sprzętowe również są takie same. Stąd klastr obliczeniowy jest w zasadzie

zbudowany na jednorodnych węzłach obliczeniowych. Jednorodność elementów klastra obliczeniowego zmniejsza obciążenie komunikacyjne między węzłami w klastrze. Równocześnie jednak jednorodność zapewnia brak elastyczności w rozszerzaniu możliwości obliczeniowych. Ponieważ wymagania są surowe, przyszłe udostępnianie i konfiguracja węzłów może stanowić problem dla instytucji o ograniczonych zasobach.

Przetwarzanie siatkowe umożliwia łączenie zasobów z rozproszonych zestawów węzłów obliczeniowych. Zestaw węzłów obliczeniowych może być klastrem komputerów i serwerów dostępnych na rynku lub po prostu pojedynczym węzłem. Inaczej niż w przypadku tradycyjnego klastra obliczeniowego, który opiera się na jednorodności, siatka może być tworzona przez różne systemy. Grid łączy zasoby obejmujące pamięć masową, sieć i obliczenia, które są rozproszone geograficznie i ogólnie są heterogeniczne i dynamiczne. Grid definiuje i udostępnia zestaw standardowych protokołów, oprogramowania pośredniczącego, zestawów narzędzi i usług do wykrywania i udostępniania rozproszonych zasobów komponentowych. Po utworzeniu sieci można zbudować i wykorzystać moc obliczeniową odpowiadającą superkomputerom i dużym dedykowanym klastrom po niższej cenie w porównaniu z zakupem mainframe lub superkomputerów. Istnieją dwa rodzaje sieci oparte na metodzie jej użytkowania, a mianowicie sieć instytucjonalna i sieć społecznościowa. W sieci instytucjonalnej wykorzystanie zasobów w sieci jest możliwe tylko przez instytucje lub osoby fizyczne przekazujące zasoby obliczeniowe do sieci. Z kolei model sieci społecznościowej oferuje również zasoby obliczeniowe użytkownikom publicznym. Niemniej jednak wykorzystanie zasobów jest zwykle związane z umową. Użytkownikowi sieci przydzielana jest pewna ilość zasobów, a alokacja dodatkowych zasobów będzie możliwa po zatwierdzeniu propozycji wniosku o dodatkowe zasoby (Foster i in., 2008). Powszechną techniką wykonywania naukowych zadań obliczeniowych w siatce jest przetwarzanie wsadowe. Ta technika ma na celu głównie rozwiązywanie zadań wymagających dużej ilości danych. Początkowo dane są segmentowane na kilka sekwencji, a przepływy pracy związane z segmentacją są następnie tworzone przez planistę. Następnie wykonywany jest proces wsadowy w celu przetworzenia wszystkich sekwencji i wyprowadzenia wyniku. Cały proces przedstawiono tu



Na zdjęciu przerysowujemy i łączymy wspólne procesy we wdrożeniach wspomnianych w Matsunaga, Tsugawa i Fortes (2008) oraz Liu i Orban (2008). Na zdjęciu harmonogram zadań zarządza procesem przypisywania przepływów pracy do przetwarzania w infrastrukturze obliczeniowej, którą jest siatka. Wynikiem procesu są fragmenty danych, które należy później scalić, aby uzyskać ostateczny wynik. Na

podstawie schematu z rysunku widzimy, że główną ideą jest implementacja zrównoleglania poprzez jednoczesne przetwarzanie danych segmentowanych. Dzięki tworzeniu wielu przepływów pracy i ich delegowaniu do węzłów roboczych/obliczeniowych w siatce, początkowo czasochłonny proces obejmujący duży zestaw danych (zadanie wymagające dużej ilości danych) można zredukować do zestawów mniejszych procesów działających równolegle. W konsekwencji takie podejście skraca czas uzyskania wyniku w porównaniu z przetwarzaniem takich danych w sposób szeregowy.

### **Obliczenia naukowe w chmurze**

Jeśli powrócimy do pytania o możliwość przetwarzania danych naukowych w chmurze, pierwszym pytaniem może być skalowalność chmury do obliczania zadań naukowych, których dynamika może być coraz bardziej złożona. Biurokracja w sieci i przekonanie, że sieć jest eksploatowana na podstawie projektu, mogły utrudnić ten paradygmat, aby stał się bardziej popularny w użyciu. I odwrotnie, takiej przeszkody nie można znaleźć w paradygmacie przetwarzania w chmurze, który oferuje ekonomię skali i zasadę pay-as-you-go. Wykorzystanie zasobów obliczeniowych oferowanych przez dostawców usług w chmurze poprzez podanie jedynie informacji o karcie kredytowej jest kuszące, a jednocześnie atrakcyjne i pociągające. Ponadto dodatkowe zasoby obliczeniowe można natychmiast udostępnić użytkownikowi chmury (wykorzystanie na żądanie), pomijając w ten sposób kłopoty, których mógł doświadczyć użytkownik sieci. Cecha narzędzi obliczeniowych w paradygmacie chmury, polegająca na płaceniu tylko za ilość wykorzystanych zasobów, zapewnia również wygodę, która sprawia, że korzystanie z chmury wydaje się atrakcyjne dla środowiska akademickiego.

### **Architektura chmury jako podstawa nauki opartej na chmurze**

#### **Aplikacje**

Prowadzenie nauki w chmurze nieuchronnie zależy od tego, w jaki sposób architektura chmury może spełnić wymagania obliczeń naukowych. Pomimo różnic w artykulacji definicji chmury obliczeniowej, istnieje powszechność architektury chmury przylegającej do architektury warstwowej, jak pokazano na rysunku.

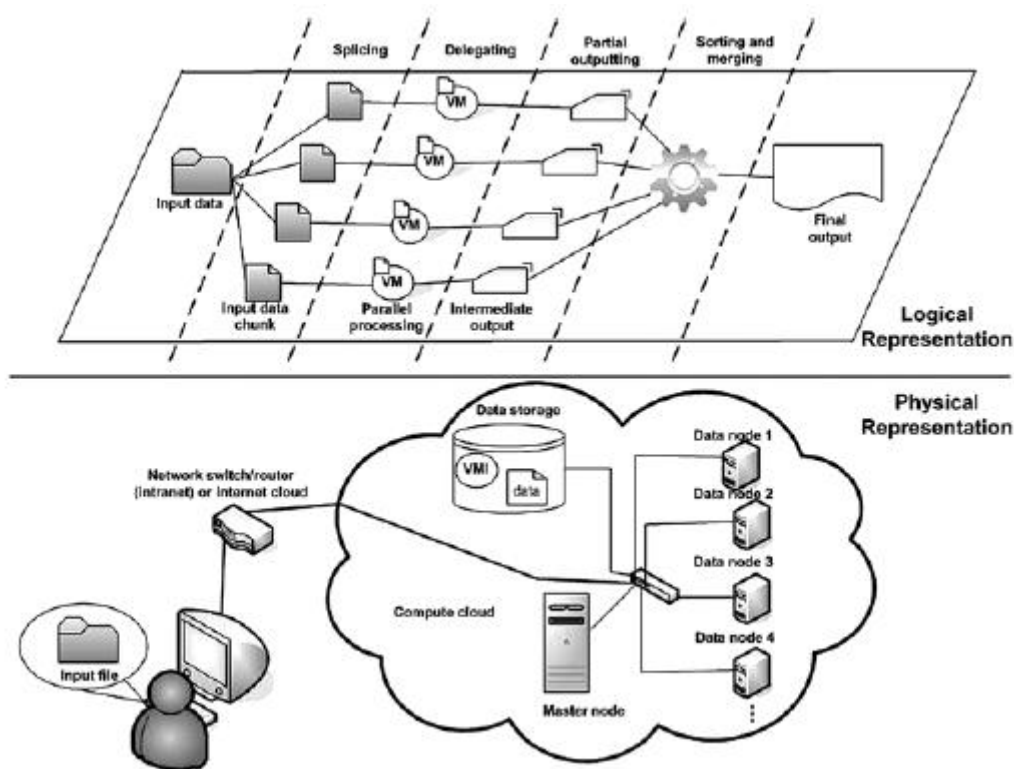


Na rysunku widzimy, że architektura chmury składa się z trzech warstw od dołu do góry: warstwy IaaS (Infrastructure as a Service), warstwy PaaS (Platform as a Service) i warstwy SaaS (Software as a Service). Warstwy odnoszą się również do rodzajów usług oferowanych w chmurze. Poniżej tych trzech warstw istnieje technologia wirtualizacji, która obsługuje logikę przekształcania fizycznego serwera, pamięci masowej i sieci w zwirtualizowane środowisko. Technologie wirtualizacji projektują tworzenie maszyn wirtualnych na infrastrukturze fizycznej, które obsługują nakładające się usługi w chmurze. Wracając do swojej definicji, wirtualizacja jest definiowana jako abstrakcja zasobów logicznych z dala od podstawowych zasobów fizycznych, co w konsekwencji umożliwia abstrakcję sprzężenia między

sprzętem a systemem operacyjnym. Ta definicja jest zamknięta dla wirtualizacji systemu operacyjnego w porównaniu z typami wirtualizacji odnotowanymi przez Sun Microsystems (Cloud Computing Primer. [http://www.sun.com/offers/docs/cloud\\_computing\\_primer.pdf](http://www.sun.com/offers/docs/cloud_computing_primer.pdf)). W środowisku zwirtualizowanym wiele systemów operacyjnych może obsługiwać tę samą infrastrukturę fizyczną i współużytkować zasoby. Jest to możliwe dzięki roli monitora maszyny wirtualizacyjnej (VMM) lub hiperwizora umieszczonego i działającego pomiędzy sprzętem a systemami operacyjnymi (zwanymi również gośćmi VMM). VMM decyduje o dostępie do podstawowego hosta fizycznego i zarządza współdzieleniem zasobów między systemami operacyjnymi gościa. Możliwości związane z wirtualizacją można podzielić na izolację obciążenia, konsolidację obciążenia i migrację obciążenia.

Tradycyjnie system operacyjny uruchamia różne aplikacje w tym samym środowisku systemowym. Izolacja obciążenia umożliwia izolację wielu stosów oprogramowania we własnych maszynach wirtualnych, zwiększając w ten sposób bezpieczeństwo i niezawodność. Tymczasem konsolidacja obciążeń odnosi się do możliwości wirtualizacji w celu konsolidacji poszczególnych obciążeń na jednej platformie fizycznej, zmniejszając w ten sposób całkowity koszt posiadania. Wreszcie, migracja obciążenia umożliwia oddzielenie gościa od aktualnie uruchomionego sprzętu i migrację go na inną platformę. Na pierwszym rysunku sprawdziliśmy, w jaki sposób możemy uprawiać naukę, która polega na przetwarzaniu zadań wymagających dużej ilości danych, w siatce. Jak możemy zauważyć wcześniej, podstawowym pojęciem jest równoległe przetwarzanie porcji danych w węzłach roboczych, a następnie kompilacja częściowego wyniku w celu uzyskania końcowego wyniku. Odnosząc się do architektury chmury na drugim rysunku i roli wirtualizacji, uważamy, że nauka w chmurze realizuje tę samą podstawową zasadę, równoległość, w innej metodologii.

Techniki uprawiania nauki w chmurze również różnią się, generalnie przypominają proces, który przedstawiamy tu



Nawiązując do niego, badacz trzyma w ręku dane wejściowe do przetworzenia. Proces będzie obsługiwany przez określony pakiet aplikacji, które zostaną załadowane do węzłów danych. Przed wdrożeniem dowolnego węzła danych pakiet jest dołączany do obrazu maszyny wirtualnej (VMI), który jest przechowywany w infrastrukturze przechowywania danych w chmurze. Przykładem usługi trwałego przechowywania danych w chmurze korporacyjnej jest Amazon S3 (Simple Storage Service) lub Amazon EBS (Elastic Block Store). W infrastrukturze pamięci masowej może być przechowywanych kilka VMI, dlatego aplikacja lub system zarządzania chmurą powinien zapewniać interfejs do repozytorium obrazów. Sam system zarządzania chmurą może znajdować się w węźle głównym lub być hostowany w innym węźle poza chmurą. Umożliwia dynamiczną listę VMI i zapewnia inne interfejsy do zarządzania chmurą i monitorowania. Jednak w przypadku braku systemu zarządzania chmurą wdrażanie obrazów w węzłach obliczeniowych i odpowiednie konfiguracje powinny być wykonywane ręcznie. Po otrzymaniu listy VMI z interfejsu zarządzania chmurą badacz wybierze odpowiedni VMI, a następnie utworzy odpowiednią liczbę instancji. Jedna lub kilka instancji będzie działać jako węzeł nadrzędny, który połączy dane wejściowe na kilka części i przekaże ich przetwarzanie węzłom roboczym. Węzły nadrzędne kontrolują wykonywanie zadań, zestawiają częściowe wyniki i powiadamiają badacza, gdy wszystkie zadania zostały zakończone, a końcowy wynik jest gotowy do analizy. W szerszym ujęciu przypomina to proces w paradygmacie obliczeń siatkowych. Jest więc zrozumiałe, że niektórzy eksperci twierdzą również, że chmura jest ewolucją sieci. Ostatnie odkrycie Dejun, Pierre i Chi (2009) pokazuje, że wydajność instancji EC2 jest stosunkowo stabilna. Nie można jednak przewidzieć wydajności nowej instancji, mimo że zebrano statystyki wydajności tych samych instancji w pewnym okresie w przeszłości. Konsekwencje tego odkrycia są dwójakie. Po pierwsze, stabilność wydajności instancji maszyny wirtualnej wskazuje na perspektywę prowadzenia długotrwałych obliczeń, ponieważ awaria systemu podczas procesu obliczeniowego może należeć oczekiwać, że będzie minimalny. Wręcz przeciwnie, nowy mechanizm aprowizacji zasobów jest uważany za niezbędny, aby zapewnić, że wdrożony profil maszyny wirtualnej spełnia wymagania zadania obliczeniowego. Biorąc pod uwagę, że wydajność instancji maszyn wirtualnych w korporacyjnej usłudze chmurowej może się różnić nawet dla tych o dokładnie tym samym profilu, może pojawić się pytanie o wykonalność aprowizacji całego zasobu przez pojedynczą chmurę. Sama chmura może różnić się rozmiarem, co oznacza niejednorodność profili, które może tworzyć. Mała chmura z mniej zwirtualizowanymi węzłami może obsługiwać mniejszy zestaw podstawowych profili. Podobnie, większa chmura z większą ilością zasobów jest bardziej zdolna do tworzenia różnych profili. Tymczasem naturalne jest również pytanie o możliwość zintegrowania w razie potrzeby chmury wewnętrznej, prywatnej z chmurą publiczną, korporacyjną, a tym samym stworzenia nowego typu chmury o nazwie chmura hybrydowa lub chmura interoperacyjna. Stosując się do zasady wydajności i ponownego wykorzystania, jednostka lub organizacja ma tendencję do wykorzystywania własnych zasobów, gdy tylko jest to możliwe, zamiast płacenia stronom trzecim za wynajmowanie i wykorzystywanie ich zasobów. Te pytania kończą się badaniem infrastruktury chmury obliczeniowej, platformy i aplikacji, które są natychmiast opisane w następnej sekcji.

### **Pojawienie się opartych na chmurze naukowych aplikacji obliczeniowych**

Przeanalizowaliśmy kilka projektów i inicjatyw powstałych w postaci aplikacji opartych na chmurze, które są skierowane przede wszystkim do domeny naukowej. Naszym głównym celem jest scharakteryzowanie i kategoryzacja domeny każdej aplikacji, modelu równoległości, platformy bazowej i skalowalności chmury pod kątem wsparcia połączeń i integracji z innymi rodzajami chmury. Istnieje kilka innych aplikacji naukowych opartych na chmurze, których nie wymieniono w tabeli. Jednak elementy umieszczone w tabeli powinny być wystarczająco reprezentatywne, aby przekazać ideę, że cloud computing dotyka multidyscyplinarnych dziedzin. Zaskoczyło nas zainteresowanie badaczy i praktyków spoza dziedziny informatyki rozwiązaniem ich złożonego problemu z

paradygmatem cloud computing. Historie sukcesów tych pionierów mogą w naturalny sposób wzbudzić ciekawość innych stron, aby wdrożyć ten paradygmat, tym samym zwiększając wykorzystanie chmury obliczeniowej, szczególnie w dziedzinie naukowej. Możemy dowiedzieć się, że implementacja MapReduce w Hadoop była ostatnio dominującym podejściem do paralelizacji. Naszym zdaniem jest to spowodowane odpowiednią informacją, dokumentacją, próbkami, studiami przypadków, a także wsparciem korporacyjnym dla MapReduce. Sam model MapReduce został początkowo zaproponowany i wykorzystany przez Google, a Hadoop zapewnia implementację Javy o otwartym kodzie źródłowym. Ten model składa się z funkcji mapowania napisanej przez użytkownika, która pobiera zestaw wejściowych par klucz/wartość w celu wygenerowania zestawu pośrednich par klucz/wartość oraz funkcji redukcji również napisanej przez użytkownika, która łączy wszystkie wartości pośrednie związane z tym samym kluczem pośrednim. Wracając do trzeciego rysunku, funkcja mapowania jest równoważna fazom delegowania i częściowego wyprowadzania, podczas gdy funkcja zmniejszania jest fazą sortowania i łączenia. W implementacji Hadoop MapReduce funkcje mapowania i zmniejszania można zastąpić dowolnym wykonywalnym oprogramowaniem. Ta funkcja jest obsługiwana przez narzędzie o nazwie Hadoop streaming, które jest dostarczane wraz z domyślnym pakietem Hadoop. Na przykład, CloudBLAST używa Basic Local Alignment Search Tool (BLAST) poprzez implementację NCBI BLAST 2 jako funkcji mapy. Ten program wykonuje funkcję mapowania zamiast znajdowania regionu lokalnego podobieństwa między sekwencjami nukleotydowymi lub białkowymi. Innym przykładem jest CrossBow, który ponownie wykorzystuje Bowtie, aby umożliwić szybkie i wydajne pamięciowo dopasowanie krótkich odczytów do genomów ssaków, stąd substytut funkcji mapy. Funkcja Reduce jest również zastępowana przez wywołanie SOAPsnp, którego zadaniem jest dostarczanie wywołań polimorfizmu pojedynczego nukleotydu (SNP) z krótkich odczytanych danych wyrównania. Możliwość ponownego wykorzystania starszego oprogramowania mogła również przyczynić się do szerszego przyjęcia modelu MapReduce i Hadoop do programowania równoległego. W tabeli 23.1 możemy również zauważyć, że środowisko akademickie zaczęło korzystać z infrastruktury i platformy chmurowej oferowanej przez przedsiębiorstwa. Amazon ze swoimi różnorodnymi usługami w chmurze był głównym testerem cytowanym w odpowiednich pracach badawczych. Amazon EC2 i S3 są używane do infrastrukturalnych usług w chmurze, podczas gdy Amazon Elastic MapReduce jest używany jako platforma chmurowa dla aplikacji równoległych opartych na MapReduce. To odkrycie prowadzi nas do dalszych badań wykonalności przetwarzania w chmurze do celów naukowych dzięki naszemu własnemu doświadczeniu w budowaniu i korzystaniu z chmury obliczeniowej.

### **Budowanie infrastruktury chmurowej dla obliczeń naukowych**

W tej sekcji podsumowujemy nasze wcześnie doświadczenia w tworzeniu i korzystaniu z infrastruktury chmury i platformy do obliczeń naukowych. Proponujemy również potencjalne przyszłe wykorzystanie poprzez przekształcenie naszych istniejących systemów w infrastrukturę opartą na chmurze. Dodatkowo dzielimy się naszym doświadczeniem w korzystaniu z chmury korporacyjnej, w szczególności Amazon EC2. Podkreślamy kilka ważnych uwag, które mogą być przydatne dla innych instytucji badawczych, które również są zainteresowane wirtualizacją swojego istniejącego środowiska obliczeniowego lub po prostu testowaniem wody poprzez zastosowanie paradygmatu przetwarzania w chmurze.

### **Konfiguracja i eksperymentowanie na infrastrukturze i platformie Tiny Cloud**

Nasze laboratorium badawcze posiada różne typy węzłów obliczeniowych, począwszy od urządzeń mobilnych, takich jak PDA, komputery stacjonarne i stacje robocze. Na stacjach roboczych uruchamiamy kilka programów serwerowych, a pulpity wykorzystujemy do osobistych celów badawczych. Chcieliśmy ocenić poziom trudności stworzenia małej chmury składającej się z niewielkiej liczby węzłów obliczeniowych. Wskazując na liczby, stacje robocze sumują łącznie do 20 rdzeni.

Jesteśmy zaznajomieni z używanymi przez nas systemami operacyjnymi (niektóre dystrybucje GNU/Linux i Windows) i samodzielnie zarządzamy i administrujemy naszą infrastrukturą. Naszym zdaniem, jeśli utworzenie małej chmury nie zajmuje zbyt wiele czasu i wysiłku, inne instytucje badawcze niezwiązane z dziedziną informatyki/inżynierii komputerowej mogą również samodzielnie przekształcić swój dotychczasowy system w chmurę. Ponieważ jesteśmy zainteresowani MapReduce, eksperymentowaliśmy na naszych stacjach roboczych, instalując i konfiguruując Hadoop w sieci, a następnie uruchomiliśmy kilka aplikacji opartych na MapReduce. Chcieliśmy ocenić trudności z samodzielną instalacją Hadoop w klastrze i jego wydajność podczas uruchamiania niektórych aplikacji MapReduce. Z naszego doświadczenia wynika, że instalowanie i konfigurowanie Hadoop w klastrze może zająć trochę czasu, ale nie powinno przynosić wielu problemów technicznych. Istnieje dystrybucja Hadoop firmy Cloudera Hadoop Distribution (<http://www.cloudera.com/hadoop>), która usprawnia instalację pakietów i zależności za pomocą programu yum. Wyzwaniem może być skonfigurowanie połączenia między węzłem głównym a węzłem podrzędnym. Ponieważ Hadoop wymaga połączenia SSH z węzłem podrzędnym z dostępem na poziomie root, aby uruchomić swoje demony i inne skrypty startowe, mogą wystąpić trudności z konfiguracją uprawnień i skalowaniem infrastruktury w poziomie w sieci chronionej przez NAT. Ponadto istnieją pewne obawy dotyczące bezpieczeństwa dotyczące konfiguracji sieci klastra. Włączenie zdalnego logowania do konta root może potencjalnie spowodować naruszenie bezpieczeństwa, jeśli na komputerze zainstalowano różnorodne oprogramowanie. Niektóre programy mogą mieć luki w zabezpieczeniach lub błędy, dlatego gdy zostaną wykorzystane, mogą wpłynąć na cały system. Wirtualizacja może odizolować obciążenie, zwiększając w ten sposób bezpieczeństwo. Poprawia również wykorzystanie bezczynnych zasobów, ponieważ kilka maszyn wirtualnych jest wywoływanych jednocześnie. Jednak nasze odkrycie wskazuje, że nadal istnieją duże trudności w przekształceniu istniejącej infrastruktury w całkowicie zwirtualizowaną. Interesuje nas hiperwizor typu 1, taki jak Xen Hypervisor. (<http://xen.org>), który działa bezpośrednio na sprzęcie komputerowym i zarządza wszystkimi systemami operacyjnymi gościa. Istnieją dwa tryby systemu operacyjnego działającego jako gość Xen, tryby dom0 i domU. W trybie dom0 system operacyjny zostanie przypisany jako główny system operacyjny gościa z większymi uprawnieniami. System operacyjny gościa dom0 zarządza również i kontroluje komunikację między Xen a innymi systemami operacyjnymi gościa. W trybie domU system operacyjny gościa ma mniejsze uprawnienia i ogranicza się odpowiednio do bezpośredniego dostępu do sieci i we/wy. Głównym problemem była natywna obsługa systemu operacyjnego Xen jako oprogramowania do wirtualizacji. Chcieliśmy użyć wersji Fedory Linux jako gościa dom0, ale ponieważ Xen wymaga modyfikacji jądra Linuksa, nie było możliwe uruchomienie Xen bez ręcznego załatania jądra lub przejścia na starszą wersję systemu operacyjnego, którego jądro nadal obsługuje tryb dom0. Jest to poważna przeszkoda, zwłaszcza jeśli łatanie jądra ma być przeprowadzane przez kogoś z minimalnym doświadczeniem w administrowaniu systemem. Ponadto opcja obniżenia wersji systemu operacyjnego powoduje problem z niekompatybilnością innego oprogramowania i procesu tworzenia oprogramowania. Poza trudnościami technicznymi zauważyliśmy, że Hadoop może być wykorzystywany jako platforma do szerszych zastosowań naukowych. Oprócz funkcji przesyłania strumieniowego Hadoop zapewnia również wbudowany interfejs sieciowy do analizowania logów wykonanych zadań wraz z jego konfiguracją. Może to ułatwić zbieranie danych dziennika do dalszej analizy. Na przykład w jednym z naszych eksperymentów uruchomiliśmy zadanie PatternRecog, które policzyło wystąpienie określonego wzorca w kilku plikach wejściowych. Za pośrednictwem interfejsu internetowego można zobaczyć całkowity czas wykonania wraz z bardziej szczegółowymi informacjami, takimi jak czas wykonania i szczegóły każdej fazy, takie jak fazy mapowania i redukcji. Pomogło nam to nie tylko w analizie i rozwiązywaniu niektórych problemów wymagających dużej ilości danych, ale także w poznaniu, co działo się w każdym węźle obliczeniowym.



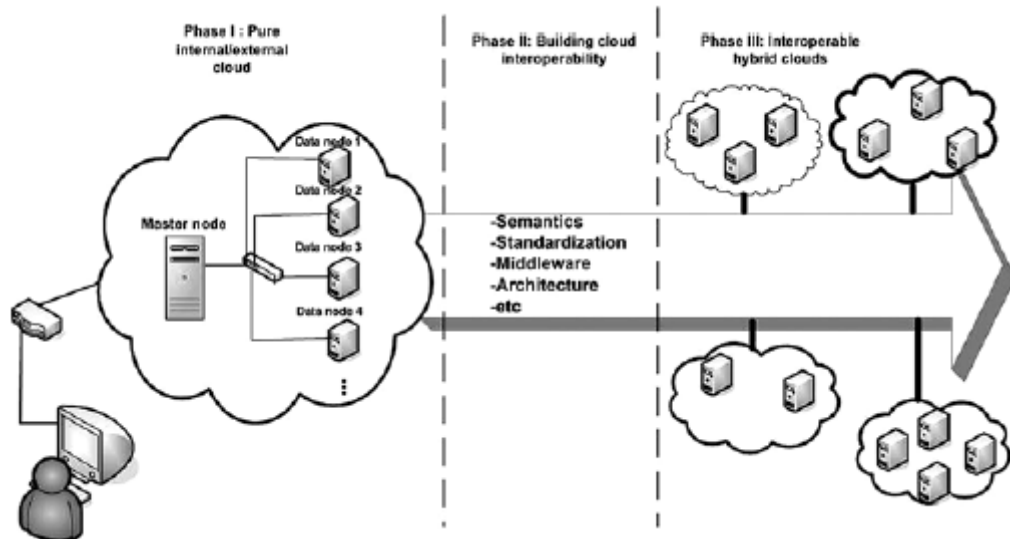
## O ekonomicznym korzystaniu z Enterprise Cloud

Jeśli przetwarzanie siatkowe było uśpione w obronie szerszego przyjęcia w środowisku akademickim, uważa się za konieczne zastanowienie się, czy przetwarzanie w chmurze może mieć miejsce w przypadku naukowej platformy obliczeniowej. Pierwsze pytanie może brzmieć: „Jak łatwo i efektywnie można prowadzić naukę w chmurze?” Kiedy przychodzi na myśl wydajność i oszczędne wykorzystanie zasobów, pytanie można później zadać pytaniem „Jak opłacalne jest prowadzenie nauki w chmurze?” Przedstawimy naszą perspektywę w oparciu o doświadczenia z korzystania z usług chmurowych Amazon. Termin pay-as-you-go może być kuszący dla instytucji o niewystarczających zasobach infrastrukturalnych, ale chętniej do skorzystania z infrastruktury korporacyjnej oferowanej w niskiej cenie jednostkowej. U Langmeada koszt poniesiony na analizę danych genomu ludzkiego z klastrami 320-CPU w EC2 wyniósł 85 USD. Według autorów takie podejście jest korzystne, ponieważ skondensowało 1000 godzin obliczeń do kilku godzin bez konieczności posiadania lub obsługi klastra komputerowego, który w przypadku zakupu kosztuje znacznie więcej. Zarówno zgadzamy się, jak i nie zgadzamy się z tą opinią i wyjaśniamy leżące u jej podstaw argumenty. Istnieją dwie usługi oferowane przez Amazon, które mogą być związane z zadaniami obliczeń naukowych, Amazon EC2 i Amazon Elastic MapReduce. Amazon Elastic MapReduce jest dostosowany do aplikacji zbudowanych w oparciu o model MapReduce. Badacze i programiści mogą wygodnie testować i wdrażać swoje aplikacje oparte na MapReduce na platformie i skalować ilość wykorzystywanych zasobów tylko za pomocą interfejsu internetowego. Istnieją jednak również inne aplikacje naukowe, które nie są oparte na modelu MapReduce. Aby wdrożyć takie aplikacje w chmurze, wymagane jest łączenie i pakowanie od podstaw. Obraz zawierający aplikacje i system operacyjny kontenera powinien być tworzony i przywoływany za każdym razem, gdy uruchamiana jest nowa instancja maszyny wirtualnej. W przypadku braku odpowiednich obrazów użytkownik powinien ręcznie skonfigurować podstawowe VMI oferowane przez dostawcę. Po utworzeniu instancji użytkownik powinien ręcznie pobrać pliki binarne aplikacji lub zbudować źródła i powiązane zależności, gdy pliki binarne nie są dostępne lub występuje problem z kompatybilnością. Ponieważ chmura działa na zasadzie narzędziowej, pobieranie plików binarnych lub źródeł i praca zdalna w celu skonfigurowania maszyny wirtualnej jest uważane za korzystanie z infrastruktury dostawcy, dlatego użytkownik jest obciążony kosztami transferu danych. Na przykład w przypadku Amazon EC2 do stycznia 2010 r. standardowa duża instancja systemu Linux w Północnej Wirginii (7,5 GB pamięci, 2 wirtualne rdzenie, 850 GB lokalnej pamięci masowej, architektura 64-bitowa) kosztowała 0,34 USD/h, a transfer danych zaczynał się od 0,15 USD. GB i stopniowo maleje oraz bezpłatnie do 0,1 USD/GB jednostkowej ceny transferu danych. Użytkownik, który korzysta z instancji przez jeden dzień (24 godziny) z 1 TB danych wejściowych i 1 TB danych wyjściowych, powinien zapłacić 158,16 USD, w tym 8,16 USD za instancję obliczeniową opłata i opłata za transfer danych w wysokości 150 USD. Jeśli aktywność użytkownika polega na konfigurowaniu standardowej maszyny wirtualnej, mógł nie przewidzieć, że zostanie on również obciążony opłatą za aktywność, która potencjalnie może w znacznym stopniu przyczynić się do ostatecznej kwoty, którą musi zapłacić. Gdy będzie musiał skonfigurować przyzwoitą liczbę maszyn wirtualnych, koszt się zwielokrotni, co jest jeszcze większe, gdy wystąpi awaria kilku instalacji, dlatego konfigurację trzeba wykonać kilka razy. W konsekwencji ten dodatkowy koszt może zmniejszyć korzyści ekonomiczne wynikające z wykonywania obliczeń w chmurze. Mówiąc szerzej, obecna oferta dostawców chmury jest atrakcyjna, ale ukryty koszt może utrudnić szersze wykorzystanie w środowisku akademickim. Obecne aplikacje oparte na chmurze wykorzystują chmurę prywatną lub publiczną. Jeśli skalowanie można przeprowadzić bardziej dynamicznie poprzez zintegrowanie na żądanie zasobów zwirtualizowanych w chmurze prywatnej z chmurą publiczną, można poprawić efektywność kosztową. Ponadto powinna istnieć przyzwoita liczba VMI obsługujących różne aplikacje naukowe oraz mechanizm, który może samodzielnie opisywać

aplikacje zawarte w VMI. Następnie w następnej sekcji proponujemy pomysł i bieżące wysiłki na rzecz integracji i interoperacyjności chmury.

### W kierunku integracji prywatnego i publicznego środowiska chmurowego przedsiębiorstwa

Jako nowy paradygmat obliczeniowy, przetwarzanie w chmurze jest perspektywiczne dla różnych rodzajów badań. Jednym z trudnych badań związanych z przetwarzaniem w chmurze jest dynamiczne skalowanie chmury na żądanie. Jak widać na rysunku obecnie chmura jest pojedynczą jednostką.



Jest albo prywatny, albo publiczny. Skalowanie chmury zależy od całego rozmiaru chmury. Użytkownik w prywatnej instytucji badawczej z małą chmurą prywatną może mieć trudności z zapewnieniem większej ilości zasobów, jeśli określone zadanie obliczeniowe staje się coraz bardziej złożone i zwiększa rozmiar danych wejściowych. Aktualną opcją w przypadku wystąpienia takiej sytuacji jest przeniesienie całości obliczeń do chmury publicznej obsługującej więcej zasobów. Zmniejsza to przede wszystkim użyteczność i skuteczność przekształcania dotychczasowego systemu w środowisko chmury. Integrację i interoperacyjność w chmurze można osiągnąć kilkoma metodami. Chcielibyśmy podkreślić kilka kluczowych metod, które mogą wspierać integrację i interoperacyjność. Semantyka budowania jest jedną z metod uznanych za niezbędne. Obecnie każdy dostawca chmury kroczy własną drogą w definiowaniu abstrakcji dla zasobów. Amazon, na przykład, używa manifestu XML do opisanie obrazu maszyny wirtualnej, który nazywa się Amazon Machine Image (AMI). Dzięki zachowaniu zgodności z określoną semantyką możliwe jest utworzenie usługi katalogowej zawierającej listę VMI od różnych niezależnych dostawców oprogramowania (ISV) znajdujących się w różnych domenach wraz z opisem każdego obrazu. Pomoże to we włączeniu automatycznego wykrywania i wdrażania VMI w wielu organach. Pomysł ten jest podobny do WSDL i rejestru usług w SOA usługi sieciowej. Ważnym aspektem do rozważenia jest również normalizacja. Usługi w chmurze u każdego dostawcy korzystają z różnych interfejsów, dlatego bez pomocy oprogramowania pośredniego lub brokera usług w chmurze trudno jest zintegrować heterogeniczne usługi. Obecnie Open Grid Forum (OGF) podejmuje wysiłki w celu standaryzacji interfejsów dla obiektów chmury obliczeniowej IaaS (OGF Open Cloud Computing Interface Working Group, <http://www.occi-wg.org/doku.php>). Standaryzacja obejmie rozwój interfejsów API dla konsumentów chmury, integratorów, agregatorów, dostawców i dostawców. Wczesne wysiłki na rzecz integracji można zaobserwować w rozwoju oprogramowania pośredniczącego. Eucalyptus (Nurmi et al., 2009) i OpenNebula (Vozmediano, Montero, Llorente, 2009) to próbki oprogramowania pośredniego do zarządzania chmurą. Eucalyptus zapewnia te same

narzędzia i interfejsy co Amazon EC2. Składa się z kontrolera węzłów, który steruje wykonywaniem, inspekcją i kończeniem instancji maszyn wirtualnych, kontrolera klastra, który gromadzi informacje i harmonogramuje wykonanie maszyn wirtualnych oraz zarządza siecią instancji wirtualnych, kontrolera pamięci masowej, który zapewnia mechanizm przechowywania i dostępu do VMI oraz danych użytkownika, i kontroler w chmurze do podejmowania decyzji dotyczących planowania na wysokim poziomie i wyświetlania informacji o zasobach. Eucalyptus jest w zasadzie oprogramowaniem pośredniczącym do zarządzania infrastrukturą chmury prywatnej, ale niedawny rozwój umożliwia zarządzanie infrastrukturą chmury hybrydowej. Z drugiej strony OpenNebula stara się zapewnić jednolitą warstwę zarządzania chmurą opartą na typie usługi. Jego podstawową zasadą jest oddzielenie dostarczania zasobów od zarządzania usługami. Wdrażając tę zasadę, umożliwia elastyczną wydajność klastra poprzez wdrażanie na żądanie lub wyłączenie wirtualnych węzłów roboczych, które mogą być zlokalizowane w chmurze prywatnej lub publicznej, partycjonowanie klastra poprzez segregację i izolację węzłów roboczych na podstawie typu usługi oraz heterogeniczne konfiguracje, które umożliwiają usłudze posiadanie wielu konfiguracji oprogramowania. OpenNebula obsługuje różne technologie wirtualizacji, w tym Xen, KVM i VMWare, które są zwykle używane w chmurze prywatnej i interfejsach do publicznej chmury IaaS, takiej jak AmazonEC2 i ElasticHosts. Mimo to istniejące wysiłki mogą przyspieszyć postęp, jeśli istnieje powszechna zgoda co do architektury systemu przetwarzania w chmurze. Ponieważ przetwarzanie w chmurze jest obecnie w dużej mierze napędzane przez przedsiębiorstwa, nieuniknione jest obserwowanie różnych systemów chmurowych, w których każdy implementuje różne interfejsy, abstrakcje, warstwy i schemat zarządzania. dostarczanie zasobów i wymiana usług będą bliższe.

## **Wniosek**

Rosnące zainteresowanie przetwarzaniem w chmurze rodzi pytania dotyczące wykorzystania tego paradygmatu obliczeniowego w dziedzinie nauki. W tym artykule poruszono ten problem, podkreślając cechy i cechy obliczeń naukowych oraz sposoby ich realizacji w ramach paradygmatu przetwarzania w chmurze. Opisano kilka aplikacji naukowych zbudowanych na infrastrukturze chmury oraz nasze doświadczenia w tworzeniu chmury prywatnej i wykorzystaniu infrastruktury chmury publicznej. Bazując na naszym doświadczeniu, organizacja może przekształcić swoją infrastrukturę w środowisko chmurowe i czerpać korzyści z lepszego wykorzystania zasobów, ale powinna też mieć świadomość, że można napotkać pewne trudności. Ponadto instytucje z restrykcyjną polityką wydatków budżetowych powinny zachować ostrożność, decydując się na masowe obliczenia w chmurze publicznej. Ze względu na stan niemowlęcy, istnieje wiele badań do przeprowadzenia w chmurze obliczeniowej. Za jeden z najważniejszych uważamy badania nad interoperacyjnością w chmurze. Przedstawiamy pewne prognozy i zalecenia oparte na naszych odkryciach, które mogą być przydatne dla innych badaczy o podobnych zainteresowaniach