

«ПОГОДЖЕНО»

«ЗАТВЕРДЖУЮ»

**Директор Інституту теоретичної
фізики
ім.М.М.Боголюбова НАН України
академік НАН України
А.Г. Загородній**

**Голова Комісії з питань модернізації
парку наукових приладів та
обладнання НАН України
віце-президент НАН України,
академік НАН України
В.Г. Кошечко**

«__» _____ 20__ року

«__» _____ 20__ року

ПОЛОЖЕННЯ

про

**ЦЕНТР КОЛЕКТИВНОГО КОРИСТУВАННЯ
«РЕСУРСНИЙ ЦЕНТР ДЛЯ ГРІД- ТА ХМАРНИХ
ТЕХНОЛОГІЙ»
ІНСТИТУТУ ТЕОРЕТИЧНОЇ ФІЗИКИ ім.М.М.Боголюбова НАН
України**

1. Загальні положення.

1.1. Центр колективного користування (ЦКК) «Ресурсний центр для грид- та хмарних технологій» створено на базі Інституту теоретичної фізики ім.М.М.Боголюбова НАН України згідно Постанови Бюро Відділення Фізики та Астрономії від 19 червня 2018 року протокол № 5 з метою найбільш раціонального використання унікального та коштовного обладнання: обчислювальний кластер який є ресурсним центром Українського національного грид та включено в Європейську грид мережу проекту EGI.

1.2. Інститут теоретичної фізики ім.М.М.Боголюбова НАН України (далі – ІТФ) має всі можливості для забезпечення умов надійного функціонування центру колективного користування «Ресурсний центр для грид- та хмарних технологій»:

- спеціалізоване приміщення з локальним контуром заземлення, належною системою живлення, системою кондиціонування, мережею інтернет, системою газового пожежогасіння та охоронною сигналізацією;

- висококваліфікованих фахівців, які мають досвід обслуговування серверного обладнання.

1.3. ЦКК «Ресурсний центр для грид- та хмарних технологій» бере на себе зобов'язання забезпечити якісну та безперервну роботу серверного обладнання, його відповідне фахове обслуговування, умови для ефективного використання.

2. Структура, головні завдання і організація роботи ЦКК.

2.1. ЦКК «Ресурсний центр для грид- та хмарних технологій» створено як результат виконання Державної цільової науково-технічної програми впровадження і застосування грид-технологій на 2009-2013 роки, затвердженої Постановою Кабінету Міністрів України від 23 вересня 2009 р. № 1020. За своєю обчислювальною потужності кластер ІТФ є третім в НАН України ресурсним центром який входить в Український національний грид.

Український національний грид (УНГ) є єдиною e-інфраструктурою національного рівня яка об'єднує 39 ресурсних центрів наукових організацій України (з них 29 належать НАН України). Основою УНГ є 12 ресурсних центрів, що координуються національним операційним центром (NGI_UA) і які являють собою інтегровану в європейський простір грид-інфраструктуру. Українська грид-інфраструктура працює 24 години на добу, 7 днів на тиждень, надає для дослідницьких віртуальних організацій вільний доступ до обчислювальних ресурсів та ресурсів зберігання даних. Завдяки інтеграції в європейську грид-інфраструктуру УНГ забезпечує можливість проведення спільних досліджень з міжнародними дослідницькими організаціями та використання європейських ресурсів.

Обчислювальний кластер ІТФ складається з 11 обчислювальних серверів (10 серверів конфігурації HP SL230s Gen8 (2 x Xeon E5-2650 (8-core) / 32GB RAM / HDD 2x500 GB) і один сервер конфігурації HP DL360p Gen8 (2 x Xeon E5-2690 (8-core) / 256 GB RAM / HDD 2x500GB). Кластер був введений в експлуатацію в 2013 році.

На обчислювальному кластері інстальовано ліцензійне програмне забезпечення колективного користування: пакет програм для квантово-хімічних розрахунків - Gaussian; пакет символічних і чисельних розрахунків – Wolfram Research grid Mathematica 2.1; пакет для підвищення продуктивності роботи кластерів з математичними бібліотеками, компіляторами C ++, Fortran і утилітами для паралельного програмного забезпечення - Intel Performance and Cluster Tools; ORCA - програмний пакет для розрахунків методами квантової хімії та інші. NAMD – програмний пакет молекулярної динаміки на атомному рівні. Це дає можливість користувачам Національної академії наук України та учасникам грид-проектів використовувати сучасне програмне забезпечення для виконання наукових розрахунків.

В якості ресурсного центру Українського національного гряду та в рамках виконання Цільової комплексної програми НАН України «Грид-інфраструктура и грид-технології для наукових и науково-прикладних досліджень» на 2014-2016 рр. на кластері ІТФ виконуються наукові розрахунки в рамках наступних віртуальних організацій: MolDynGrid - молекулярна біологія; SysBio - реконструкція мереж генної регуляції; CompuChemGridUA - квантова хімія; VIRGO.UA - космологія і астрофізика; Gaussian - квантова хімія; ALICE - фізика високих енергій; MatModEn - математичне моделювання в задачах енергетики; ВІТР – фізика ДНК.

Обчислювальний кластер ІТФ представляє ресурси в Європейську грид інфраструктуру проекту EGI (GRID) (GRID сайт **UA-VITP-ARC**). Доступність та надійність роботи кластеру контролюється європейською системою моніторингу <https://argo-mon.egi.eu/nagios/>. Доступності та надійності роботи грид сайту **UA-VITP-ARC** у 2017 році за даними порталу <http://argo.egi.eu/lavoisier> складала 92,25%.

Для забезпечення наукової і науково-організаційної діяльності в Національній академії наук України в Ресурсному центрі ІТФ у 2015 році була інстальована хмарна інфраструктура під управлінням програмної системи OpenStack. Для побудови хмарної інфраструктури були використані 10 серверів з наступними характеристиками: процесор Intel(R) Xeon(R) CPU E5335 2.00GHz (8 ядер); ОЗУ 8 ГБ, об'єм жорсткого диску 450 ГБ.

На даний час хмарний сайт UA-VITP є єдиним хмарним ресурсом України який відповідає усім вимогам EGI щодо доступності та надійності і включено до хмарних ресурсів EGI Federal Cloud.

Всі обчислювальні кластери перебувають на балансі Інституту теоретичної фізики ім.М.М.Боголюбова НАН України.

2.2. ЦКК здійснює свою діяльність в складі відділу Комп'ютерного забезпечення наукових досліджень і науково технічної інформації, без статусу юридичної особи. ЦКК має назву «Ресурсний центр для грид- та хмарних технологій», яка разом із Положенням про ЦКК затверджена директором Інституту теоретичної фізики ім.М.М.Боголюбова НАН України та затверджена комісією з питань модернізації парку наукових приладів та обладнання Президії НАН України (далі - Комісія).

2.3. Головним завданням ЦКК є надання науковцям НАН України можливості проводити наукові обчислення на грид кластері, які обслуговується кваліфікованим персоналом, здатним підтримувати його в режимі оптимального функціонування, та отримувати консультативні послуги.

2.4. Наказом директора ІТФ виконуючим обов'язки керівника ЦКК призначений завідувач відділом Комп'ютерного забезпечення наукових досліджень і науково технічної інформації. Загальне керівництво роботою ЦКК здійснює заступник директора ІТФ з наукової роботи.

2.5. ІТФ менше одного разу на рік звітує про роботу ЦКК перед Бюро Відділення фізики і астрономії НАН України, а також, у разі необхідності, перед Комісією з питань модернізації парку наукових приладів та обладнання Президії НАН України. В загальному річному звіті дані про роботу ЦКК подаються ІТФ розділом в паперовому та електронному вигляді до Президії НАН України, Бюро Відділення фізики і астрономії НАН України та до Комісії з питань модернізації парку наукових приладів та обладнання Президії НАН України.

3. Умови роботи та відповідальні особи ЦКК „ Ресурсний центр для грид- та хмарних технологій”.

3.1. «Ресурсний центр для грид- та хмарних технологій» - розташовано в приміщеннях №108-110 корпусу Інституту теоретичної фізики ім.М.М.Боголюбова НАН України (вул. Метрологічна, 14Б).

Приміщення містить (обладнано):

- двома незалежними лініями багатожильного оптоволоконного кабелю (10 Гбит/с та 1 Гбит/с), що забезпечує високошвидкісний вихід на зовнішні канали доступу до глобальних інформаційних та наукових мереж, паритетні канали з крупними операторами телекомунікаційних послуг України та світу та високошвидкісне з'єднання з опорними вузлами та користувачами АМОД.
- двома незалежними лініями електропостачання з системою автоматичного переключення, що забезпечує надійність, вимірювану в умовах максимального

(піковою) навантаження вірогідністю безвідмовної роботи на період повного життєвого циклу не менше, ніж величиною 0,997 (99,7%);

- системою безперебійного електроживлення серверного обладнання на базі трьох паралельних джерел безперебійного живлення Master Dialog RM800-35;
- резервним дизель генератором з системою автоматичного переключення - реалізована схема безперервного енергозабезпечення за допомогою джерела аварійного електроживлення - дизельної електростанції (ДЕС) моделі AD 410 виробництва заводу AKSA (Туреччина) потужністю 410 кВА (328 кВт). Для розміщення дизельної електростанції використано відкритий майданчик території внутрішнього двору Інституту теоретичної фізики
- системою кондиціонування та вентиляції. Для забезпечення необхідного температурного режиму встановлено чотири каналних кондиціонера фірми GREE потужністю 50кВт кожний. Система кондиціонування забезпечує: охолодження, нагрів, осушення повітря в приміщенні і очищення повітря від пилу; оптимальний вибір режиму роботи в автоматичному режимі в залежності від температури в приміщенні; автоматичну підтримку заданої температури в приміщенні в режимі охолодження, нагрівання, осушення; автоматичний підігрів теплообмінника зовнішнього блока.
- системою пожежної сигналізації та автоматичного газового пожежогасіння. Підсистема пожежної сигналізації приміщення виконана окремо від пожежної сигналізації будівлі інституту. У приміщенні центру встановлено два типи датчиків : температурні і димові що контролюють загальний простір усіх приміщень.
- комплексною системою відео спостереження та охоронної сигналізації. Система телеспостереження представляє собою комплекс некерованих відеокамер, розташованих по периметру будівлі інституту, підключених до відео регістраторів, які в свою чергу підключені до центрального сервера. Інформація з відеокамер поступає на відео регістратори, які мають можливість відтворювати відеоінформацію в реальному часі, проводити запис відеоінформації, та її передачу на робоче місце оператора.
- Комплексною системою моніторингу критичних параметрів приміщення Ресурсного центру для гід- та хмарних технологій та реагування на інциденти яка призначена для контролю стану інженерних систем та мікроклімату основного приміщення

3.2. Для супроводження проведення обчислення на кластері призначено відповідальних осіб, які зобов'язані:

- вивчити всі можливості обчислювального кластеру та його функціональні особливості;
- надавати повноцінні та своєчасні консультації користувачам;

- ознайомлювати (під особистий підпис) клієнтів із правилами користування обчислювальним кластером, що містяться в інструкції з його експлуатації, здійснювати особистий контроль за виконанням цих правил;
- забезпечувати інформаційний сайт ЦКК (<http://horst-7.bitp.kiev.ua/>) своєчасними матеріалами щодо встановленого програмного забезпечення та обчислювальних можливостей кластеру.

3.3. Режим роботи обчислювальних кластерів в ЦКК – цілодобово (24 години) та 7 днів на тиждень. Обчислювальні кластери працюють цілодобово без вихідних и доступні для виконання завдань користувачів з мережі інтернет.

4. Порядок надання послуг.

4.1. Інформація про ЦКК «Ресурсний центр для грід- та хмарних технологій» міститься на web-сторінці ЦКК сайту Інституту теоретичної фізики ім.М.М.Боголюбова НАН України (<http://www.bitp.kiev.ua>).

4.2. Наукові установи та організації НАН України, які мають потребу в проведенні наукових обчислень на кластері подають у письмовому вигляді на ім'я директора ІТФ лист від імені організації із запитом на використання комп'ютерних ресурсів.

У листі необхідно вказати:

- тематику, в рамках якої виконуватимуться роботи;
- керівника робіт;
- орієнтовний обсяг процесорного часу;
- перелік осіб, які будуть безпосереднє проводити обчислення.

Лист потрібно надіслати у від сканованому вигляді на e-mail і по можливості передати оригінал.

4.3. Директор ІТФ затверджує перелік осіб, які будуть безпосереднє проводити обчислення, та надає розпорядження керівнику ЦКК щодо забезпечення роботи.

4.4. Керівник ЦКК, відправляє особам, які будуть безпосереднє проводити обчислення, бланк Реєстраційної Форми користувача кластеру, яку кожний користувач заповнює особисто.

4.5. Отримав заповнену Реєстраційну Форму користувача кластеру Керівник ЦКК створює особистий обліковий запис користувача на кластері та забезпечує його роботу.

4.6. Доступ користувача до власного облікового запису здійснюється з мережі Інтернет в будь-який час. Відправлене завдання користувача розміщується в загальній черзі на кластері та буде виконано автоматично по командам локальної системи керування кластером.

4.7. Платні послуги з використанням «Ресурсний центр для грид- та хмарних технологій» для потреб інших замовників надаються згідно чинного законодавства України.

4.8. ІТФ забезпечує всі витрати, пов'язані з використанням серверного обладнання «Ресурсний центр для грид- та хмарних технологій».

4.9. Користувачі наукових установ та організації НАН України, які входять до складу віртуальних організацій зареєстрованих в грид інфраструктури України, отримують доступ до обчислювальних ресурсів ЦКК без надання додаткових запитів.

5. Зміна базової установи, закриття ЦКК.

5.1. У разі недотримання вимог даного Положення, неналежної організації роботи «Ресурсний центр для грид- та хмарних технологій» з боку ІТФ із забезпечення колективного користування обчислювальним кластером для потреб науковців НАН України або виникнення інших форс-мажорних обставин Бюро Відділення фізики і астрономії НАН України подає Комісії пропозиції щодо передачі закріпленого за ІТФ «Ресурсний центр для грид- та хмарних технологій» іншій науковій Установі НАН України з відповідною зміною назви ЦКК і місця його розташування.

5.2. Комісія з питань модернізації парку наукових приладів та обладнання Президії НАН України розглядає пропозиції Відділення фізики і астрономії НАН України згідно з розділами 1 і 2 даного Положення, приймає рішення про зміну базової наукової установи або закриття ЦКК і подає його на затвердження Президії НАН України.

**Керівник ЦКК «Ресурсний центр для грид-
та хмарних технологій»
к.т.н.**

С.Я.Свістун