

클라우드 컴퓨팅 기반 천문 우주 분야 연구 환경 구성

신민수, 오세현, 이창희
한국천문연구원

msshin@kasi.re.kr

<https://astromsshin.github.io>

천문 우주 분야 클라우드 환경 이용 배경

- 천문 우주 연구에서 on-premise 자원에 대한 대안으로서, steady workload가 있는 operational demand가 아닌 **occasional workload가 존재하는 analysis demand**에서 Cloud computing 활용을 가능성 존재.
- Performance보다는 **viability와 usability**를 중심으로 **elasticity**를 가장 중요한 요소로 고려하여, 클라우드 활용의 대표적인 경우 확인 필요.
 - Flexible resource provisioning의 연구 활용 가능성.
- 천문우주 연구에서는 **다양한 software stack 활용 경우가** 존재한다는 사실을 고려.
 - High-Performance Computing and High-Throughput Computing

XSEDE Cloud Survey Report

Survey Finding #1: Top 3 Reasons Researchers and Educators use the Cloud

According to the survey data, the top three reasons researchers and educators use the cloud is:

1. On-demand access to burst resources
2. Compute and data analysis support for high throughput scientific workflows
3. Enhanced collaboration through the rapid deployment of research team web sites and the sharing of data.

Survey Finding #2: Applications Identified as Good Candidates for the Cloud

Survey participants identified several applications and programming models as good candidates for the cloud:

Task queue & database

- *MapReduce* – for processing and analyzing large data sets. MapReduce was cited by the survey participants as the most frequently used special feature available from their cloud service providers that enabled their research.
- *High throughput, embarrassingly parallel workloads* – for analyzing thousands of molecules, particle collisions, etc. Examples include large scale data mining, BLAST searches, Monte Carlo simulations, (Value-at-Risk, supply chain networks, etc.), image analysis (digital pathology, tomography, etc.), and other loosely coupled workloads.
- *Academic labs and teaching tools* – for scaling educational experiences to dozens, hundreds, or even, thousands of students. Cloud-based labs are either always on or provisioned on-demand. Examples are freshman biology students accessing highly visual, interactive cloud-hosted teaching tools to learn population genetics and the mathematics behind it or data management students learning how to write applications or use Hadoop [1], [2]. Benefits noted by faculty included overcoming resource limitations in existing lab environments and preparing students for

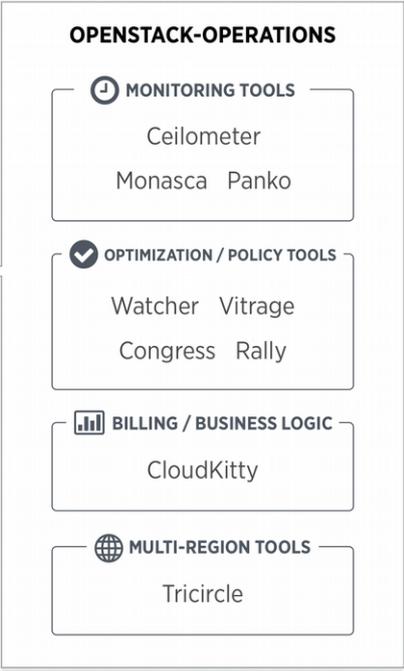
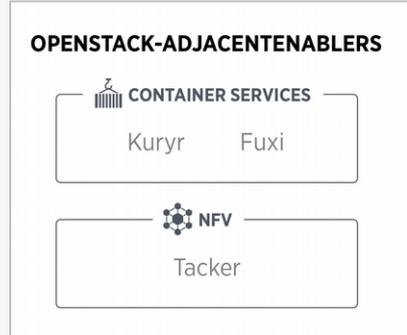
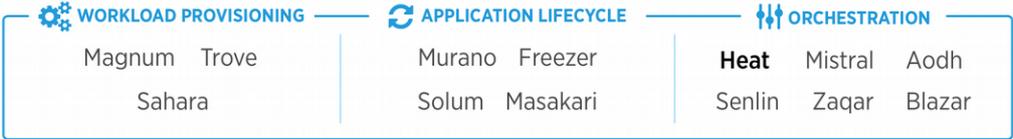
their future in a “cloud computing world.” The convergence of mobile and cloud services will likely accelerate the design and deployment of cyberlearning experiences, e.g., faculty-developed digital textbooks, interactive classroom simulations, MOOCs, etc. **Container & task queue**

- *Domain-specific computing environments* – Science as a Service provides researchers with rich web applications and platform components that reduce time to science by hiding platform complexities and by offering special performance features desired by specific research communities, i.e., GPGPUs, shared datasets, etc. For example, Cloud BioLinux provides instant access to a range of pre-configured command line and graphical software applications including a full-featured desktop interface, documentation, and over 135 bioinformatics packages [3].
- *Commonly requested software* – Software as a Service (SaaS) environments such as MATLAB and R provide researchers and educators with economies of scale in software licenses and more optimal execution environments. Globus Online, a software service on XSEDE, uses a set of SaaS components to make it easy to move massive amounts of data without requiring custom end-to-end systems.
- *Science Gateways* – the rapid elasticity of cloud-based gateways can reach large communities of researchers and citizen scientists with on-demand services. Zooniverse, the largest citizen science gateway in the world, uses 700,000 cloud core hours per year and 100TB of data to support nearly a dozen websites on space, climate, and the humanities [4].
- *Event-driven science* – applications that must scale quickly to respond to real-time events are another good candidate for the cloud. California volunteers are helping scientists gather seismic data by hosting hundreds of small seismometers in their homes and offices. During quiescent periods the only data sent over the Community Seismic Network is control traffic; during an event, the ground motion intensity data is substantial [5].

KISTI, DevStack과의 협력 연구 목표 및 내용

- Clouds의 천문 우주 연구에서 on-premise 자원에 대한 대안으로서의 가능성을 파악하고 일반적으로 수요가 많을 것으로 예상되는 3가지 경우에 대해서 실험 수행.
 - **Container** 기술을 활용한 천문우주 자료 분석 클라우드 환경 설계 및 실험
 - **Task queue**를 활용하는 클라우드 환경에서의 대용량 자료 분석 사례 연구
 - Redis와 같은 **database** 활용 R&D를 위한 클라우드 환경 대용량 자료 분석 사례 연구
- **OpenStack**의 여러 요소를 기본 cloud 환경 구성에 활용.
 - 미국 XSEDE의 Jetstream 및 Chameleon.
 - Swedish National Infrastructure for Computing의 Science Cloud.
 - 영국의 IRIS(UKT0)하의 다양한 private cloud 및 Scientific OpenStack

OPENSTACK



Bold represents **Core Functionality**

Version 2018.06.01

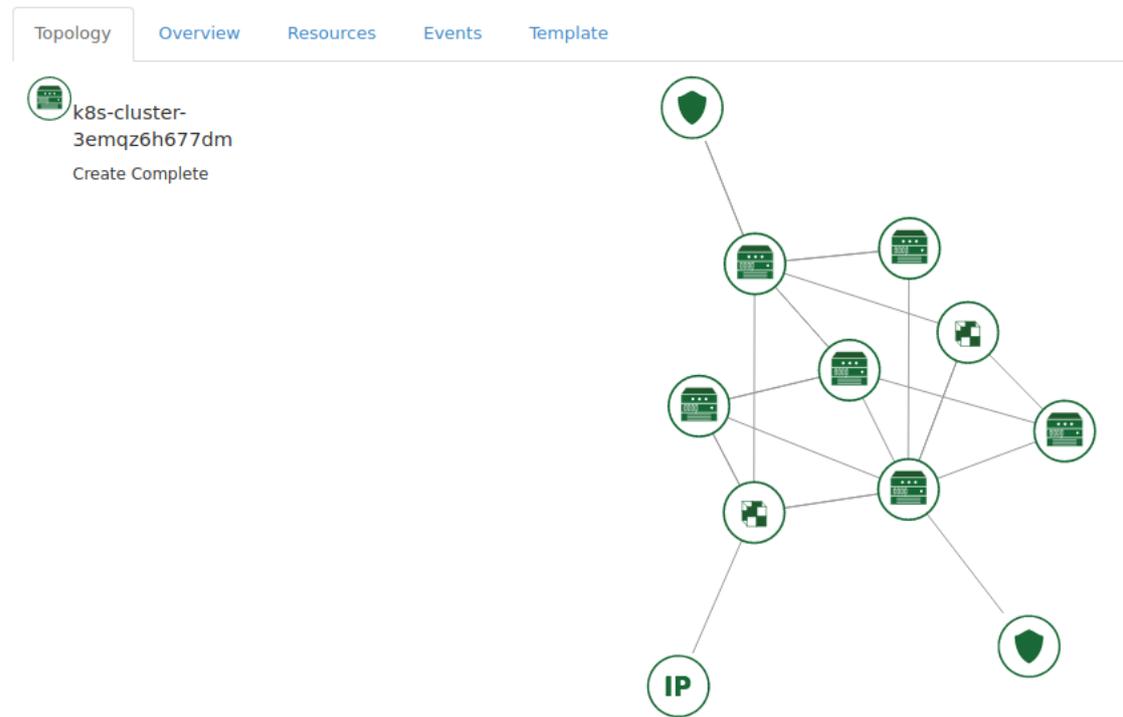


대표 활용 시나리오 1

- Container 활용: MPI를 활용하며 다른 여러 라이브러리 역시 이용하는 프로그램으로 Docker container를 활용하여 배포하고 실행 (오세현, 신민수).
 - 현재 전파 관측 자료 분석 MPI + X 소프트웨어의 Docker container image 활용 실험.
 - 대용량 시뮬레이션 자료 분석 MPI + X 소프트웨어 실험도 수행.
 - OpenStack VM과 Kubernetes 활용.

OpenStack/K8s + Docker (MPI + X)

Stack Resource	Resource	Stack Resource Type
etcd_lb	975ff090-b6c8-49de-a0f3-9ab9d6dad4ec	file:///openstack/venvs/magnum-17.0.6/lib/python2.7/site-packages/magnum/drivers/common/templates/lb.yaml
kube_masters	d4d96606-e5bf-40e1-b063-ce0561580eb3	OS::Heat::ResourceGroup
network	b8c933f3-d631-4526-a110-8c932226def0	file:///openstack/venvs/magnum-17.0.6/lib/python2.7/site-packages/magnum/drivers/common/templates/network.yaml
api_lb	38b08f6f-69ef-4a1e-ae67-bfbe10263298	file:///openstack/venvs/magnum-17.0.6/lib/python2.7/site-packages/magnum/drivers/common/templates/lb.yaml
secgroup_kube_minion	4483b3c1-6859-4019-9d0d-a1bffd1b8e89	OS::Neutron::SecurityGroup
nodes_server_group	c737c60b-3bef-4128-86d1-2bc986bd0f07	OS::Nova::ServerGroup
secgroup_kube_master	f7ad13cf-eda9-456a-97e8-98171390d90d	OS::Neutron::SecurityGroup
kube_minions	a3977fc1-0030-4247-98e6-661d10c2b276	OS::Heat::ResourceGroup
api_address_floating_switch	f0810624-b00c-47ee-a31e-6dc5c7081a2a	Magnum::FloatingIPAddressSwitcher
api_address_lb_switch	2d1e1808-aedb-41e8-a585-8d49e605230b	Magnum::ApiGatewaySwitcher
etcd_address_lb_switch	2c833c6d-c770-459b-b57b-b6e481d72f2c	Magnum::ApiGatewaySwitcher



천문 우주 연구자의 부담

- **Docker container image 제작**
 - MPI를 포함하지 않는 경우: 일반적인 다른 Docker image 제작과 다르지 않음.
 - MPI를 포함하는 경우: 기존 MPI cluster 환경 구현 Docker image를 base image로 제작 vs. 최소 수정한 일반 Docker image + OpenStack/K8s script.
- **Docker container image 제작 없이 기존 것 활용**
 - 현재 천문 우주 분야 Docker container image는 제한적으로 존재.

대표 활용 시나리오 2

- File I/O이 빈번하게 요구되며 high-throughput이 요구되는 경우로, asynchronous task queue를 활용하며 on-demand로 구성 변화가 가능한 환경을 활용 (신민수, 이창희).
 - Task queue가 더 범용성이 크며, analysis demand에 일반적으로 적합.
 - 현재 Dask queue 환경 실험 완료.
 - Dask queue는 기존 SLURM 기반 HPC 환경에서도 성공적으로 활용된 적이 있음.
 - Celery queue 실험 완료 계획.

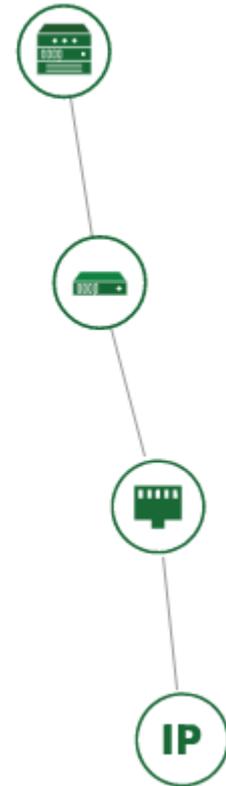


DASK-again

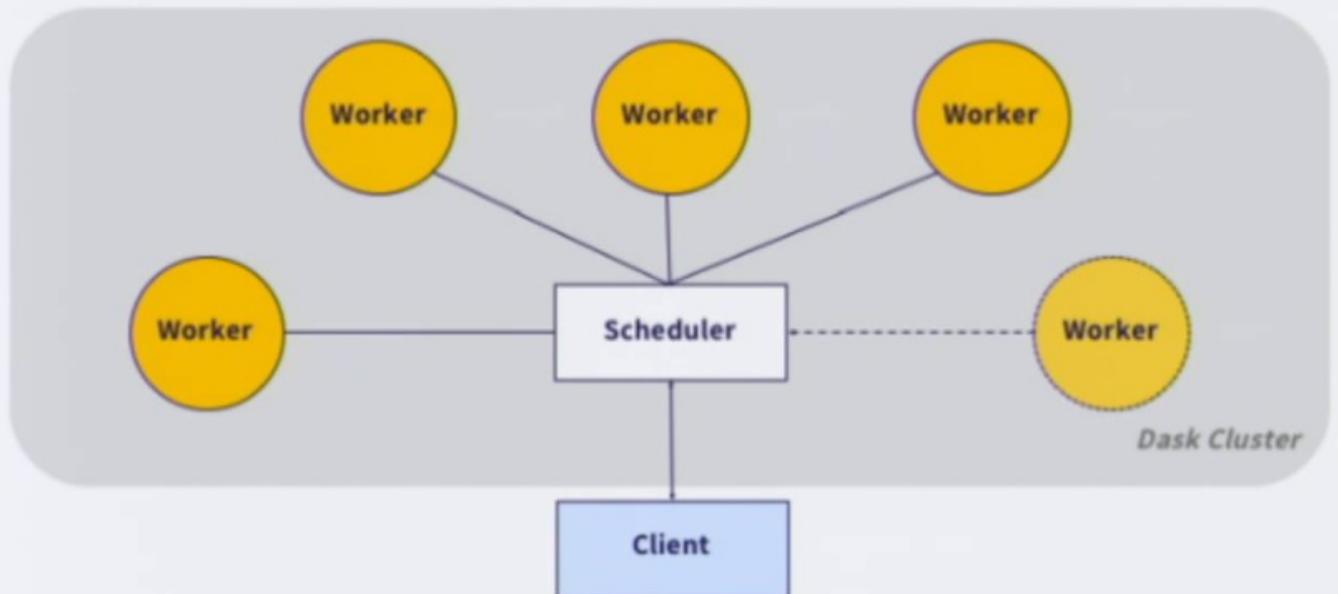
Create Complete

Stack Resource	Resource	Stack Resource Type
workers	9909cd48-8090-40c1-8422-abc2a5939515	OS::Heat::ResourceGroup
scheduler_public	27c721e5-a1bb-427f-b187-fba10dab3473	OS::Neutron::FloatingIP
scheduler	80610ce0-ba49-4e5a-b910-8d2a4a0d8ea8	OS::Nova::Server
scheduler_port	70fb94b0-7726-4fc7-8dee-4e4bed68a578	OS::Neutron::Port

Displaying 4 items



Dask distributed architecture

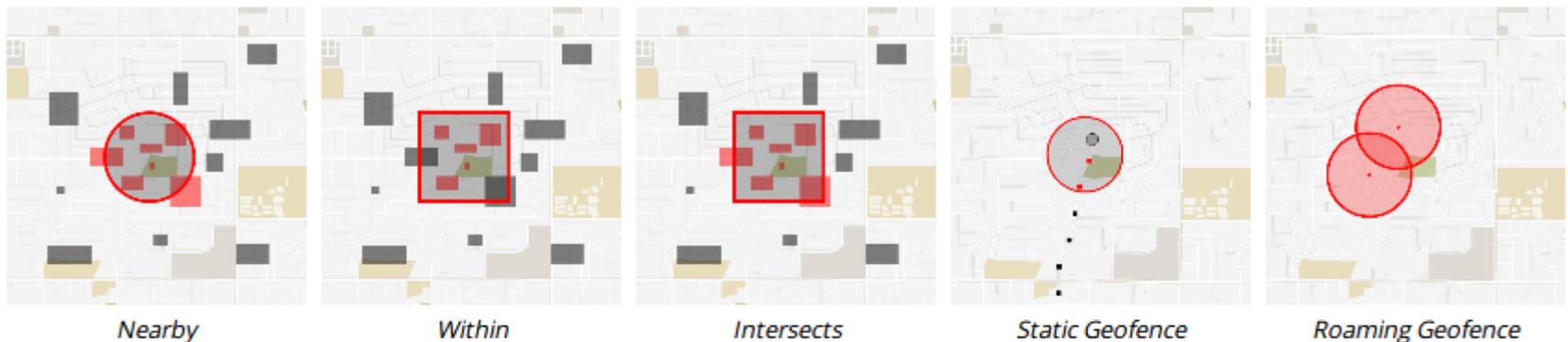


대표 활용 시나리오 3

- **Database query**이 주로 요구되며 앞서와 같이 asynchronous task queue를 활용 (신민수, 이창희).
 - XSEDE의 Wrangler 참고.
 - Redis 활용 실험은 완료.
 - Redis를 수정한 것과 Tile38를 수정한 것을 활용한 실험 진행 중: Geolocation 자료 형태 지원 기능을 활용한 하늘의 천체 위치에 대한 분석 실험.

Spatial-temporal variability 분석

- In-memory DB (Redis, Tile38, Aerospike, etc.)를 활용하여 빠르게 대용량 자료로부터 위치 변화나 밝기 변화 분석.
- 예: 이동 천체들의 이동 경로 추출에 in-memory DB의 빠른 응답 속도 (micro~ms) 활용.



```

def run_single_magphys(input_data):
    # for version 3.5.x
    try:
        # This wrapper function uses the subprocess
        module
        #
        https://docs.python.org/3.5/library/subprocess.html
        # Key ingredients of using this API are
        # standard input, output, error
        # environmental variables
        # current working directory (cwd)
        # NOTE: input is equivalent to standard input.
        run_result = subprocess.run(EXEC_MAGPHYS,
input=input_data, \
    universal_newlines=True, \
    stdout=subprocess.PIPE, \
    stderr=subprocess.PIPE, \
    check=True, \
    cwd = DIR_MAGPHYS, \
    env={'MAGPHYS': DIR_MAGPHYS, \
        'FILTERS':
DIR_MAGPHYS+'/filters/FILTERBIN.RES', \
        'OPTILIB':
DIR_MAGPHYS+'/libs/OptiLIB_cb07.bin', \
        'OPTILIBIS':
DIR_MAGPHYS+'/libs/OptiLIBis_cb07.bin', \
        'IRLIB': DIR_MAGPHYS+'/libs/InfraredLIB.bin', \
        'USER_FILTERS':
DIR_MAGPHYS+'/eg_user_files/filters.dat', \
        'USER_OBS':
DIR_MAGPHYS+'/eg_user_files/observations.dat', \
        'NO_STOP_MESSAGE': 'yes'})

```

```

use_value = use_output[3].strip().split() +
use_output[4].strip().split() + \
    use_output[6].strip().split() +
use_output[8].strip().split() + \
    use_output[10].strip().split()
use_redis =
redis.StrictRedis(host='localhost')
use_redis.rpush(use_key,
*use_value)

```

입력: (network shared) file system
 출력: Redis in-memory database
 per VM or pod

천문 우주 연구자의 부담

- **Virtual machine image 제작**
 - KVM에 활용될 수 있는 QCOW2 format 이미지 제작.
 - VirtualBox나 virt-manager GUI 환경 활용은 용이.
 - virsh를 활용한 CLI 활용도 가능.
- **Virtual machine image 제작 없이 기존 것 활용**
 - 현재 천문 우주 분야 image는 제한적으로 존재하며 AWS와 같은 특정 cloud 환경 용으로 제작되어 공유 (e.g., STScI-Hubble-Public-Data in AMI community market place).

결론: 앞으로 무엇이 필요한가?

- Container나 VM의 효과적인 활용이 필수적으로 요구되며, **연구자의 수준에 따른 적절한 training and education**이 필수적.
 - 다수의 구체적인 사례 별 **VM 혹은 container image** 구성, 공유, 배포 노력 필요.
- **초기 사용자에게 최소한의 필수 정보 노출**이 과다 정보 노출보다 효율적.
 - 구체적인 사례 별 **활용 가능한 자원, 요구되는 연구자의 역할** 등이 정리되어 제공될 필요 존재.
 - 빈번히 발생하는 작업들에 대한 **automated tool 제공**의 중요성 존재.
- **Persistent shared block storage volume**이 데이터 접근, 분석, 활용에 필요한 기술적이 요소나 분석 소프트웨어 변경을 최소화 할 것으로 예상.
 - 해외의 OpenStack + Ceph-based block storage 사례들 참고.

- Serverless computing 기술 활용 가능성에 대한 탐색 필요.
 - AWS Lambda와 유사한, OpenStack Qingling.
- GPU 활용 천문 우주 연구를 위한 OpenStack 기반 클라우드 활용 환경 탐색 역시 요구됨.

