

Uso di Grid per il calcolo parallelo: il progetto TheoMPI per applicazioni di Fisica Teorica

Roberto Alfieri¹, Silvia Arezzini², Alberto Ciampa², Roberto De Pietri¹, Enrico Mazzoni²

¹ INFN Parma e Università di Parma, Viale G.P. Usberti 7/A Parma

² INFN Pisa, Polo Fibonacci Largo B. Pontecorvo, 3 - 56127 Pisa

1. Introduzione

Negli ultimi anni Egee [1] ha dimostrato di essere una infrastruttura Grid robusta e scalabile per il calcolo scientifico seriale, mentre il calcolo parallelo, benché supportato fin da subito dal Grid Middleware, è stato utilizzato fino ad ora quasi esclusivamente a scopo dimostrativo o di valutazione.

La situazione è cambiata a seguito del documento di Raccomandazioni che l'MPI Working Group di EGEE [2] ha rilasciato nel Giugno 2010, in cui vengono proposti nuovi attributi per il Job Description Language (JDL) che consentono all'utente di poter selezionare la granularità dei Job Slot allocati per le applicazioni parallele e l'adozione di meccanismi (mpi-start) in grado di rendere flessibile e trasparente per l'utente l'esecuzione di Job MPI.

Questa recente evoluzione ha convinto la comunità dei Fisici Teorici dell'INFN [3] ad avviare un progetto (TheoMPI) che prevede l'attivazione di risorse di calcolo parallele accessibili solo attraverso le infrastruttura di Grid, sia per il calcolo massivamente parallelo che per il calcolo multi-thread, che sfrutta le architetture multicore dei nodi computazionali. Questo ha portato all'installazione iniziale di un grande cluster parallelo nazionale a cui si integrano progressivamente altri cluster, fino a formare una infrastruttura distribuita per il calcolo parallelo su Grid che integra tutte le risorse disponibili.

In questo intervento verranno discussi i risultati ottenuti e le modalità di accesso e di distribuzione dei dati dal punto di vista dell'utente. Si discuterà inoltre il lavoro fin qui svolto verso un utilizzo multi-disciplinare di questa architettura, attraverso la collaborazione con altre Organizzazioni Virtuali (VO).

2. Descrizione del lavoro

Il progetto TheoMPI ha avuto lo scopo di fornire gli strumenti e le attrezzature di calcolo per eseguire attraverso l'interfaccia Grid applicazioni parallele basate su diversi modelli computazionali quali il puro MPI, il multi-thread e la programmazione ibrida (MPI/openMP), tenendo in considerazione anche la "CPU Affinity", necessaria per supportare l'architettura NUMA oramai largamente diffusa sui nodi di calcolo.

Diverse applicazioni parallele per la fisica teorica sono state facilmente portate in questa nuova infrastruttura e in breve periodo hanno prodotto importanti risultati. Tra queste applicazioni citiamo la Chroma Library per la teoria di Gauge su Reticolo, l'Einstein Toolkit per la relatività numerica ed applicazioni per la teoria delle perturbazioni numerico stocastiche.

Nella prima fase delle attività (estate 2010) è stato installato il cluster nazionale parallelo della comunità dei Fisici Teorici dell'INFN. Il cluster, denominato CSN4cluster [4], è stato installato presso la sede INFN di Pisa ed è gestito dal personale del locale servizio di

calcolo scientifico [5]. L'installazione include 128 nodi di calcolo (1024 cores), basati su processori Opteron e con connessione veloce Infiniband. Le applicazioni dispongono di un'area di Storage da 10 Tera Byte accessibile dai nodi di calcolo mediante tecnologie ad alte prestazioni (GPFS over Infiniband) e da Grid (protocollo SRM).

Parallelamente, in collaborazione con gli sviluppatori delle componenti coinvolte del Middleware (Cream CE [6] ed mpi-start [7]) sono stati definiti i requisiti necessari per il supporto del parallelismo e, successivamente, sono state sviluppate ed installate sul cluster le patch preliminari. Queste estensioni a supporto del calcolo parallelo verranno integrate nelle prossime distribuzioni ufficiali del nuovo middleware Grid (EMI).

La seconda fase del progetto si è focalizzata sulla generalizzazione del modello mediante l'installazione di un secondo cluster parallelo presso l'INFN di Parma. Il cluster, pur disponendo di prestazioni inferiori, ha permesso di creare una infrastruttura in grado di fornire all'utente Grid un accesso trasparente a diverse risorse parallele distribuite su più siti. In particolare sono state definite policy comuni di accesso per regolare la convivenza con i job sequenziali e criteri specifici nella configurazione dei job manager per ottimizzare l'utilizzo dei job slot.

La fase attuale del progetto è rivolta ad una ulteriore generalizzazione: mediante la collaborazione con la comunità scientifica Comput-er.it [8] si intende estendere il modello verso un infrastruttura multi-VO e quindi multidisciplinare.

3. Conclusioni

Il progetto TheoMPI, nato per risolvere un problema di ottimizzazione dell'utilizzo delle risorse nell'ambito della comunità dei Fisici Teorici dell'INFN, ha portato alla realizzazione di una infrastruttura Grid distribuita, trasparente e flessibile, per l'esecuzione di applicazioni massivamente parallele, data intensive e con supporto per il multi-thread. La realizzazione del progetto ha fornito un contributo importante per la definizione del supporto al calcolo parallelo all'interno del Middleware gLite/EMI.

La collaborazione con Organizzazioni Virtuali di altre discipline scientifiche è in corso per la definizione di una rete comune di risorse HPC all'interno delle Infrastruttura Grid Nazionale (IGI) [9] .

4. Riferimenti

[1] <http://www.eu-egee.org/>

[2] <http://www.grid.ie/mpi/wiki/WorkingGroup>

[3] <https://web.infn.it/CSN4/>

[4] <http://wiki.infn.it/cn/csn4/calcolo/csn4cluster/home>

[5] http://wiki.infn.it/strutture/pi/datacenter/cluster_gruppo_iv/csn4cluster/home

[6] <http://grid.pd.infn.it/cream/>

[7] <https://devel.ifca.es/mpi-start/>

[8] <http://www.comput-er.it/>

[9] <http://www.italiangrid.org/>