

## Computação Científica no CBPF

**Marcelo P. de Albuquerque, Márcio P. de Albuquerque,  
Nilton Alves, Deyse Peixoto Ribeiro e Alexandre Maia**

Coordenação de Atividades Técnicas  
Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas (CBPF/MCT)  
Rua Dr. Xavier Sigaud, 150, Urca - Rio de Janeiro – RJ –Brasil  
CEP: 22290-180

{marcelo, mpa, naj, dpeixoto, amaia}@cbpf.br

***Abstract.** In this paper we present the status of the SSolar Project in the last year in its two main areas: the Cluster and Grid computing. The SSolar Project aims to develop an infra-structure of high performance computers at the Brazilian Center for Research in Physics (CBPF/MCT) for scientific computing. A special attention is dedicated to the Grid Project, presenting the road map to connect the CBPF to the Rio de Janeiro Grid initiative, the Grid Rio.*

***Resumo.** Este trabalho apresenta a evolução do Projeto SSolar no último ano em suas duas áreas de atuação: a computação em Cluster e em Grid. O projeto SSolar tem por objetivo o desenvolvimento de uma infra-estrutura computacional de alto desempenho para cálculo científico. Uma atenção especial é dedicada ao Projeto Grid onde apresentamos as etapas para a integração do CBPF ao GridRio.*

### 1. Introdução

A Física Computacional busca por meio de métodos numéricos e computadores solucionar equações ou modelos teóricos onde a solução não é conhecida. As simulações computacionais constituem uma componente indispensável na física em todos os níveis e desempenham um papel essencial no desenvolvimento de muitas aplicações.

A capacidade de processar grande quantidade de dados, participar remotamente de eventos, compartilhar informações científicas e dados experimentais, é uma característica fundamental para o desenvolvimento da física. No CBPF são utilizados vários métodos computacionais, como: simulação numérica, ajuste matemático de dados experimentais, otimização de funções, cálculos algébricos, integração numérica, solução de sistemas lineares, solução numéricas de equações diferenciais, Monte-Carlo, análise de Fourier, etc. O desenvolvimento de métodos eficientes tem sido o motivo da interação entre a física, a ciência da computação e a análise numérica.

### 2. Aplicações Utilizadas no CBPF

O uso de métodos computacionais envolvendo problemas da física é realizado em áreas, como: cálculo de estruturas eletrônicas, materiais e sistemas magnéticos, modelagem de sistemas naturais e biológicos, física estatística, sistemas dinâmicos, fractais,

computação simbólica, física de altas energias, processamento digital e reconhecimento de imagens, gravitação e cosmologia.

Uma das aplicações que pode ser exemplificada é a pesquisa de novos materiais por meio de simulações de fenômenos magnéticos em filmes finos. Compreender as propriedades magnéticas em tais materiais é, por exemplo, a base para o domínio tecnológico do armazenamento de informações em meio magnético. Este estudo é realizado por meio da representação matemática dos domínios nas interações de longo alcance (interação dipolar) e o seu comportamento na inversão da magnetização. Além disso, técnicas de processamento digital de imagens são utilizadas para extrair medidas quantitativas nas imagens magnéticas simuladas.

Algumas simulações de fenômenos magnéticos empregam o método de Monte-Carlo para otimizar uma função de energia associada ao problema [1]. Este estudo necessita de grande capacidade computacional, pois a simulação tenta reproduzir fenômenos macroscópicos por meio de simulações em escala microscópicas. Na prática, a quantidade de memória necessária para este tipo de simulação está associada diretamente ao tamanho da rede magnética estudada (bi-dimensional ou tri-dimensional). A evolução do sistema é calculada através de uma função custo, determinada por variáveis associadas ao problema estudado (por exemplo, a interação entre os momentos magnéticos) e que exprime um desvio de uma dada solução em relação à solução ótima procurada. A simulação da evolução da magnetização em filmes finos pode ser realizada em ambiente *Grid*, o que permitirá a análise de imagens de dimensões superior a  $4096^2$  ou  $1000^3$  (spins magnéticos).

No CBPF identificamos quatro grupos que desenvolvem atividades computacionais envolvendo métodos numéricos. Cada grupo possui características específicas com relação à sua experiência em programação paralela, necessidade de usar algoritmos paralelos, a intensidade de comunicação entre cada tarefa e se o mesmo desenvolve totalmente ou parcialmente seus programas. Observamos que a maioria dos grupos de pesquisas desenvolve seus algoritmos e necessitam de algoritmos paralelos. No entanto, a maioria não tem experiência com este tipo de programação.

### 3. Projeto SSolar

A fim de atender a grande demanda por computação científica, o CBPF criou o Projeto SSolar<sup>1</sup>[2] atuando em duas áreas: a implantação de um *Cluster* de computadores e de um ambiente em *Grade* (*Projeto Grid*). Estes projetos têm por objetivo atender aos grupos de pesquisa que utilizam intensamente métodos computacionais tanto para simulações numéricas quanto para o processamento de dados experimentais.

---

<sup>1</sup> <http://mesonpi.cat.cbpf.br/ssolar/>

### 3.1. *Cluster* do CBPF

O CBPF dispõe hoje de uma infra-estrutura central de processamento baseada em um *Cluster* de computadores do tipo Beowulf utilizando sistema de arquivo NFS (Network File System) a fim de permitir o compartilhamento transparente de sistemas de arquivos ou diretórios entre os nós. A fim de obter maior aproveitamento de sua capacidade, utilizamos o sistema de gerência de filas OpenPBS [3] que nos atende parcialmente, sendo possível uma migração para outros sistemas que ofereçam recursos mais avançados (políticas de prioridade, maior capacidade de gerenciar múltiplas políticas, estatísticas detalhadas das tarefas e do sistema, etc.) [4]. Outro recurso amplamente utilizado pela comunidade científica e disponível aos usuários do *Cluster* são softwares comerciais, como por exemplo, o pacote Mathematica que oferece um completo ambiente de programação incluindo a visualização científica de dados em 2D e 3D, cálculo numérico e simbólico.

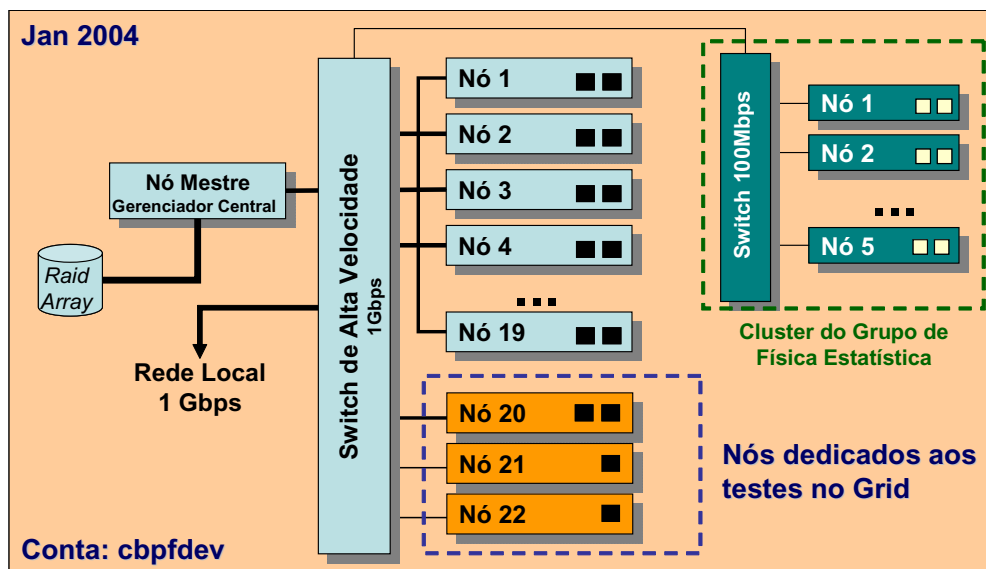
No primeiro ano de operação, o *Cluster* obteve uma média de trinta usuários regulares internos e alguns usuários colaboradores externos. Devemos ressaltar que devido a grande parte dos usuários não terem experiência com algoritmos paralelos, a maioria das aplicações utilizadas atualmente são *Bag-of-Tasks*<sup>2</sup>. Recentemente o grupo de Física Estatística do CBPF adicionou a essa infra-estrutura 10 processadores AMD AthlonMP 2800+, 10GBytes de memória RAM, 200GBytes de disco, interconectados em tecnologia fast-ethernet, para uso exclusivo do departamento (Figural1).

## 4. Projeto *Grid* do CBPF

A necessidade cada vez maior de poder computacional vem proporcionando o desenvolvimento de sofisticadas ferramentas para a computação em *Grid* [5] [6]. Os sistemas baseados em ambiente *Grid* vêm sendo cada vez mais utilizados como ferramentas indispensáveis na solução de problemas da física, como mostram os projetos: iVDGL[7], TeraGrid [8], DataGrid [9], GriPhyN [10], etc. O principal interesse do CBPF na utilização do *Grid* é a solução de problemas da física utilizando uma infra-estrutura computacional maior do que a existente localmente, integrada e compartilhada com grupos colaboradores.

---

<sup>2</sup> Aplicações paralelas cujas tarefas são independentes.



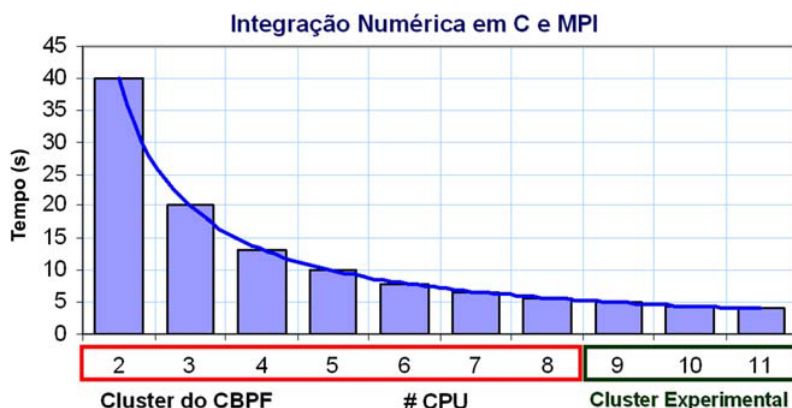
**Figura 1:** Cluster do CBPF- recursos dedicados ao grupo de física estatística e para a operacionalização do *Grid*.

#### 4.1. Cluster e Grid Experimental

Na primeira etapa do projeto *Grid*, foi desenvolvido um *Cluster* Experimental a fim de validar os recursos necessários para computação em *Grid* (Linux Red Hat, gerenciador de filas OpenPBS, Globus Toolkit, NFS/PVFS e MPICH-G2[11] [12]). Durante esta etapa foi importante a integração do escalonador OpenPBS com o Globus e o MPICH-G2 permitindo aos usuários enviar tarefas de forma simplificada, sendo estes monitorados com comandos usuais do PBS. O usuário envia a tarefa sem a necessidade de saber em qual nó será executada.

Na segunda etapa, o *Cluster Experimental* foi colocado em uma rede externa à rede local do CBPF e conectado ao *Cluster* central, formando um *Grid Experimental*. O objetivo foi simular um ambiente *Grid* e solucionar problemas de comunicação entre os *Clusters*. Nesta etapa foi fundamental a configuração das regras dos *firewalls*, como *gatekeeper* (2119/tcp), *gsiftp* (2811/tcp) e *MDS* (2135/tcp), assim como a configuração do arquivo de mapeamento dos usuários do *Grid*.

Por fim, desenvolvemos um programa de integração numérica em linguagem C utilizando a biblioteca MPI para ser usado como teste no *Grid Experimental* sem comprometer as tarefas em execução no *Cluster* do CBPF. Este programa teve a finalidade de testar o *Grid Experimental* (Figura 2) e também difundir e incentivar o uso da programação paralela entre os grupos que desenvolvem aplicações científicas no CBPF.



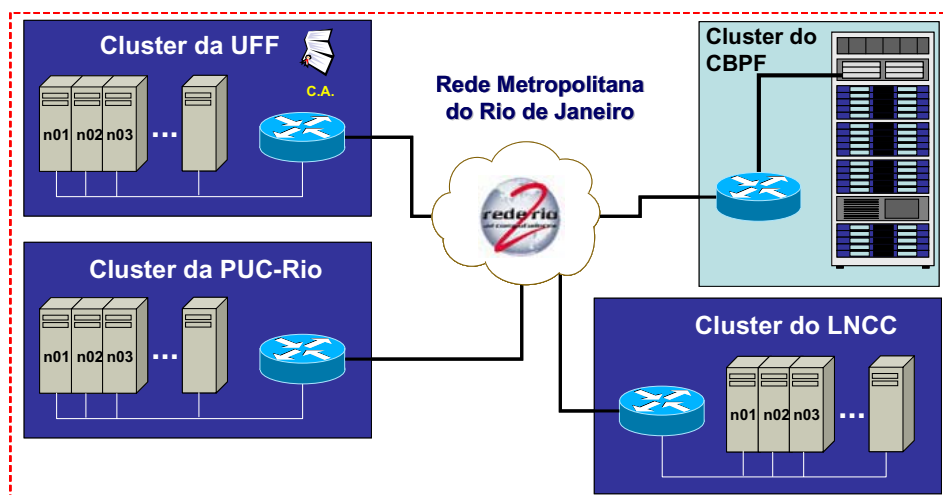
**Figura 2:** Teste de integração numérica no *Grid Experimental*. A figura mostra que o tempo de execução continua diminuindo quando acrescentamos o *Cluster experimental* ao cálculo.

#### 4.2. Integração do CBPF ao GridRio

O próximo passo foi a integração do *Cluster* do CBPF à iniciativa de *Grid* do Estado do Rio de Janeiro, o GridRio<sup>3</sup> (Figura 3). Nesta fase, em conjunto com as instituições que formam o GridRio e a Rede Rio de Computadores, preparamos e configuramos os sistemas de cálculos e a rede para executar aplicações paralelas em ambiente *Grid* utilizando os recursos disponíveis em cada instituição. Nesta etapa consideramos importante a qualidade do enlace de rede entre as instituições, a verificação de serviços essenciais do *Globus*, a configuração dos nós do GridRio e a disponibilidade dos nós em cada instituição. Vale destacar que todos os nós precisam ter endereços IP's cadastrados no servidor de nomes das instituições participantes da grade.

Nesta etapa também dedicamos quatro CPUs do *Cluster* para que os testes fossem feitos em um ambiente controlado, evitando comprometimento das tarefas em execução dos usuários. A próxima etapa envolve a definição da política de uso e compartilhamento dos recursos, tais como: prioridade dos “jobs”; número de CPUs por instituição; criação de contas; políticas de uso etc.

<sup>3</sup> Nesta iniciativa participam também o LNCC (Laboratório Nacional de Computação Científica), a PUC-Rio (Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro - LabPar Laboratório de Computação), e a UFF (Universidade Federal Fluminense – Instituto de Computação). Para informações adicionais veja: <http://easygrid.ic.uff.br>



**Figura 3:** Iniciativa do GridRio. *Grid* computacional voltado à pesquisa unindo esforços de diferentes instituições no Estado do Rio de Janeiro.

## 5. Conclusão

Neste trabalho apresentamos a evolução do sistema de computação de alto desempenho do CBPF no último ano, o Projeto SSolar. Neste período, o *Cluster* de computadores entrou em operação e seu poder computacional foi aumentado pelo grupo de física estatística. No que concerne ao projeto Grid, o CBPF se integrou ao GridRio a fim de participar do seu desenvolvimento e testar aplicações de física nessa infra-estrutura. Para isso, dedicamos algumas CPUs temporariamente ao projeto permitindo que testes de operacionalização e comunicação fossem realizados.

As próximas etapas envolvem testes de comunicação entre as instituições do GridRio a fim de avaliar o desempenho na execução de aplicações paralelas neste ambiente. Para o desenvolvimento de aplicações paralelas é necessária uma rede (local e metropolitana) estável e segura. As redes de alta velocidade serão certamente decisivas para o sucesso de programas que necessitem de uma troca intensa de mensagens. Finalmente, o CBPF está se empenhando em desenvolver uma aplicação científica adaptada ao ambiente em *Grid* além de colaborar para a sua operacionalização no Estado do Rio de Janeiro.

## 6. Agradecimentos

Este trabalho foi apoiado pelo Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq), pela FINEP/MCT e pela Rede Rio de Computadores. A UFF, o LNCC e a PUC-Rio por disponibilizarem seus recursos para os testes do GridRio.

## 7. Referências

- [1] – Sampaio, L. C., Albuquerque, M. P., Menezes F. S. De, (1996). “Magnetic Relaxation and Fomation of Magnetic Domains in Ultrathin Films with Perpendicular Anisotropy”.
- [2] – Albuquerque, M. P., Albuquerque, M. P., Alves, N. e Peixoto, D., (2003). “Ambiente de computação de alto desempenho do CBPF : Projeto SSolar”, Anais do I Workshop de Grade Computacional e Aplicações, pg.13-18.
- [3] - Smith W., Foster I., and Taylor V., (2000). “Scheduling with Advanced Reservations”, *In Proceedings of the IPDPS Conference*.
- [4] - Foster I., Kesselman C. and Tuecke S. (2001). “The Anatomy of the *Grid*: Enabling Scalable Virtual Organization”, *In Journal of Supercomputer Applications*.
- [5] - Kacsuk P., Kranzlmuller D., Volkert J. and Nemeth Z., (2002). “Distributed and Parallel Systems: *Cluster and Grid Computing*”, *In Kluwer International Series in Engineering and Computer Science*.
- [6] – “International Virtual Data *Grid* Laboratory”.<http://www.ivdgl.org/>
- [7] - <http://www.teragrid.org/>
- [8] - <http://eu-datagrid.web.cern.ch/eu-datagrid/>
- [9] – “*Grid* Physics Network”. <http://www.griphyn.org/>
- [10] – “*Portable Batch System*”. <http://www.openpbs.org/>
- [11] – Karonis N., Toonen B., and Foster I., (2003). “MPICH-G2: A *Grid*-Enabled Implementation of the Message Passing Interface”. *In Journal of Parallel and Distributed Computing*
- [12] – “MPI: Message Passing Interface”, <http://www.globus.org/mpi/>