

GRID: IL CALCOLO SCIENTIFICO NEL 21ESIMO SECOLO

SPERANZA FALCIANO

INFN Sezione di Roma, Roma, Italia



La Grid, nata per facilitare la condivisione di risorse informatiche geograficamente distribuite, ha rivoluzionato il calcolo scientifico e rappresenta di fatto una delle innovazioni tecnologiche più importanti del nostro secolo.

1 Introduzione

È possibile studiare l'evoluzione del clima e il suo impatto sul nostro futuro? Quale è la dinamica dell'interno della Terra? Come si comportano le particelle elementari nelle collisioni ad altissima energia che avvengono nei grandi acceleratori? Come si spiega l'asimmetria materia-antimateria osservata nell'Universo? Che cosa è la materia oscura? Come evolve una stella? Esiste una cura per malattie come il cancro? È possibile studiare in maniera rapida ed approfondita le sequenze genomiche? La risposta degli scienziati a questi interrogativi richiede sempre più spesso l'accesso ad enormi quantità di dati ed elevate potenze di calcolo per complesse simulazioni computazionali. Inoltre i gruppi di ricerca operano sempre più in stretta collaborazione a livello internazionale e necessitano di dati e risorse distribuite, ma anche di una moderna infrastruttura informatica che rappresenti per essi una sorta di luogo d'incontro virtuale. La Grid, il più moderno dei sistemi distribuiti, è nata per facilitare la condivisione di risorse informatiche geograficamente distribuite, rappresentando di fatto una delle innovazioni tecnologiche più importanti del 21esimo secolo.

2 L'evoluzione delle necessità di calcolo nella società e nella ricerca

Nel 20esimo secolo il Web e Internet hanno rappresentato una pietra miliare nella storia delle comunicazioni in quanto hanno consentito a milioni di persone di accedere o scambiare informazioni sparse a livello planetario.

Il 21esimo secolo vede un'altra importante tappa nella storia degli avanzamenti e delle innovazioni nel campo dell'Informatica che va molto oltre le applicazioni già rivoluzionarie del Web e di Internet. In poche parole la Grid, il nuovo strumento a disposizione soprattutto delle comunità scientifiche di tutto il mondo, si presenta come un "servizio" di condivisione efficace di potenza di calcolo e *storage* su Internet.

La rivoluzione tecnologica della Grid nasce da un lavoro di Ian Foster e Carl Kesselman [1] degli anni '90 nel quale viene data la seguente definizione: "A computational grid is a hardware and software infrastructure that provides dependable consistent, pervasive and inexpensive access to high-end computational capabilities" con le condizioni enunciate in tre punti (Foster, 2002): "a. Coordinate resources that are not subject to a centralized control; b. using standard, open, general-purpose protocols and interface; c. deliver non trivial quality of services".

Fino all'avvento della Grid, e in parte ancora oggi per alcune applicazioni specifiche, il calcolo scientifico ad alte prestazioni passa per l'utilizzo dei supercalcolatori, capaci di svolgere operazioni complesse ad alta velocità e le cui straordinarie applicazioni si sono avute in molti campi della ricerca.

Fino a pochi anni fa i supercalcolatori erano macchine con architetture particolari, spesso adattate al tipo di problema computazionale da affrontare. Oggi un supercalcolatore può essere realizzato tramite un "grappolo" di centinaia o addirittura migliaia di CPU organizzate in una griglia computazionale (Grid) distribuita su scala planetaria.

È sempre più evidente negli ambienti scientifici che per rispondere ai numerosi interrogativi che ancora oggi non hanno risposta, ma sono di grande rilevanza per il progresso dell'uomo, l'indagine scientifica può essere condotta solo su larga scala utilizzando risorse di calcolo ad altissime prestazioni, geograficamente distribuite e che coinvolgono grandi quantità di dati. Questo modo nuovo di fare ricerca, detto *e-Science*, permette di ottenere risultati qualitativi e quantitativi in tempi brevissimi, accedendo a risorse di calcolo, di *storage*, di *software* e di strumentazione scientifica praticamente illimitate. E i possibili benefici dell'*e-Science* cominciano ad essere valutati seriamente anche al di fuori delle comunità scientifiche, inducendo quindi finanziamenti mirati e la nascita di strutture organizzative anche di livello internazionale per consolidare e accrescere con continuità nonché coordinare meglio le infrastrutture esistenti allo scopo di renderle disponibili con le migliori prestazioni ad un numero di ricercatori sempre crescente.

L'indagine scientifica che oggi sta cercando di sfruttare le potenzialità dell'*e-Science* riguarda molti settori disciplinari quali la Climatologia e le Scienze della Terra, la Bioinformatica, la Fisica delle Alte Energie, l'Astrofisica e l'Astronomia, le Scienze dei Materiali e molti altri, aprendo nuovi orizzonti applicativi in altrettanti campi come ad esempio la Medicina. Quale esempio delle emergenti necessità di calcolo, basti pensare al dibattito problema dei cambiamenti climatici che investe a livello mondiale i Governi, le industrie e le varie società civili. È opinione diffusa che le attività umane stiano condizionando tali cambiamenti e, di conseguenza, numerose sono le azioni intraprese, anche a livello politico, per mitigarne gli effetti. Per ridurre le incertezze con cui sono note sia le dimensioni del riscaldamento globale sia le

previsioni anche a breve sui cambiamenti climatici a livello regionale, si stima che sia necessario un sistema di calcolo con una capacità di picco dell'ordine dei Petaflop (10^{15} operazioni *floating point* al secondo). Solo con un sistema computazionale di queste capacità si potranno migliorare quei modelli climatici attualmente in uso costruiti spesso su parametrizzazioni pragmatiche, atte a semplificare la descrizione dei fenomeni fisici coinvolti e quindi a ridurre i tempi di calcolo.

Come per la Climatologia, la ricerca di base e applicata nel settore delle Scienze della Vita necessita sempre più di simulazioni e di correlazione di dati. Ad esempio, nel settore delle Neuroscienze, è diventato importante non solo correlare dati clinici dello stesso paziente in luoghi e momenti diversi da parte degli specialisti, ma anche correlare i dati tradizionali a quelli genomici e molecolari. In questo tipo di ricerche l'accesso a quantità di informazioni statisticamente significative e largamente distribuite a livello geografico, una buona infrastruttura informatica e una modalità di lavoro di tipo collaborativo è ciò che fa la differenza rispetto alle metodologie di indagine clinica e di ricerca del passato. La stessa Bioinformatica, una disciplina recente, analizza miliardi di dati genetici per definire le funzioni di geni e proteine. Il genoma umano è fatto da tre miliardi di basi le cui mutazioni possono causare diverse malattie. Lo studio delle mutazioni richiede enormi risorse di calcolo e può non solo gettare luce sui meccanismi che le producono, ma anche contribuire alle ricerche sui farmaci per la cura delle malattie.

Come si vedrà in seguito per i più diversi settori disciplinari, molteplici sono le applicazioni che necessitano di risorse di calcolo distribuite sempre crescenti, dimostrando come l'*e-Science*, e in particolare la Grid, sia diventata un vero, formidabile strumento d'indagine senza il quale molti progressi della conoscenza non sarebbero più possibili.

3 Nascita e storia della Grid

La Grid è nata a seguito dell'esigenza della comunità scientifica di avere l'accesso e la condivisione di risorse geograficamente distribuite, anche eterogenee, appartenenti a comunità diverse, siano esse pubbliche o private, dinamicamente ridefinibili. Esempi di tali risorse sono i sistemi di calcolo ad alte prestazioni (*High Performance Computing*, HPC) o ad alta capacità (*High Throughput Computing*, HTC), supercalcolatori o *cluster* di PC, *software*, sistemi di archiviazione dati, memoria di massa quali dischi o nastri magnetici, ma anche diversa strumentazione scientifica ovunque essa sia collocata (fig. 1).

Il lavoro originale di Foster e Kesselman sulla Grid conteneva già agli inizi degli anni '90 l'idea che tali risorse di calcolo, per essere utilizzate nelle modalità richieste



Fig. 1 Interconnessione di risorse eterogenee geograficamente distribuite.

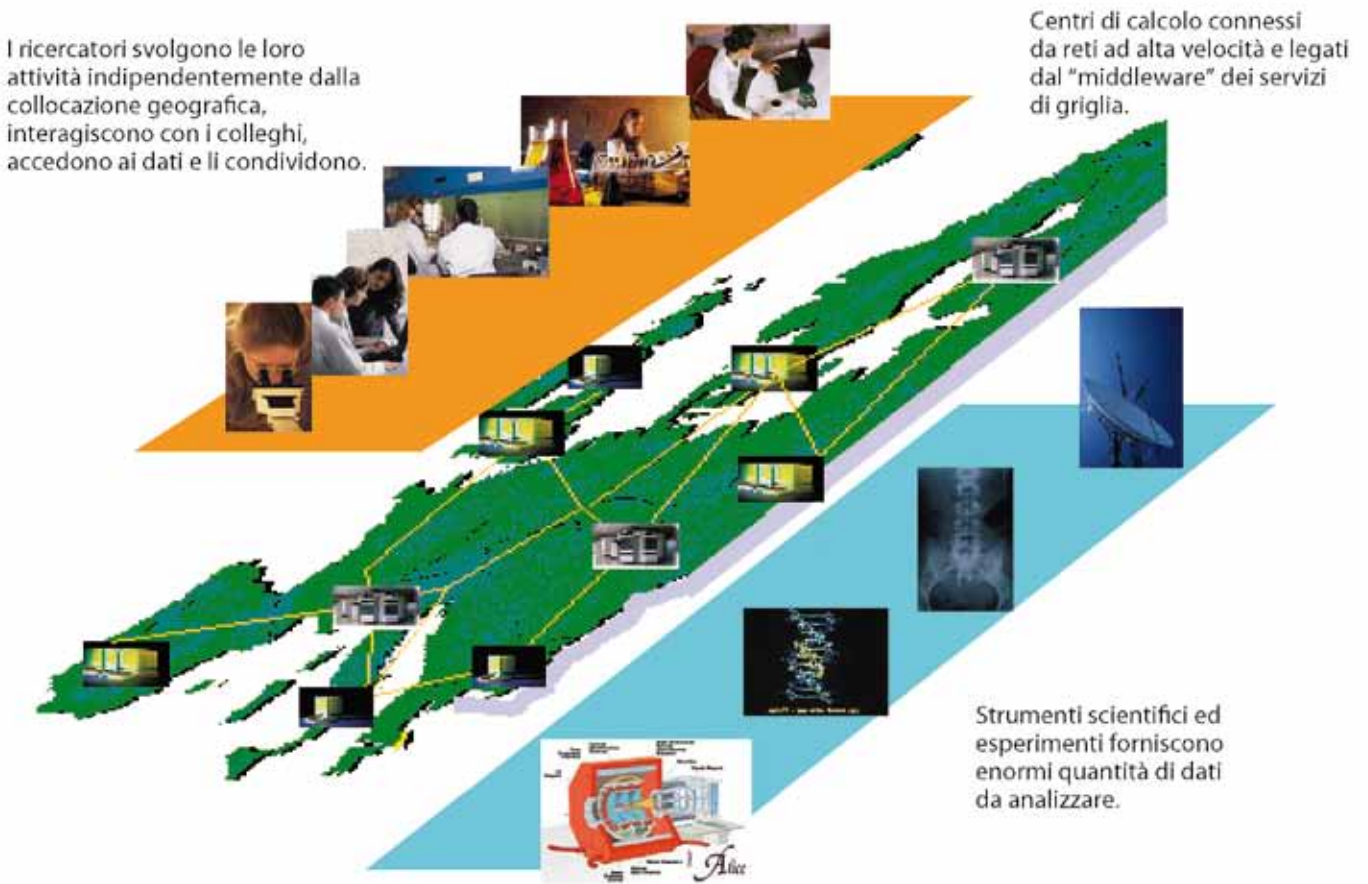
dalla comunità scientifica, dovessero essere aggregate in un'unica infrastruttura senza modificarne le caratteristiche esistenti, ma piuttosto connettendole tramite un *software* possibilmente *standard* in una sorta di "organizzazione virtuale". Tale *software* doveva assicurare non solo l'accesso alle risorse, ma soprattutto delle modalità di autenticazione e autorizzazione degli utenti, nonché dei meccanismi sicuri e robusti di trasferimento dei dati.

Pertanto nel 1994 Foster, Kesselman e Tuecke proposero un progetto ambizioso che avrebbe consentito di realizzare collaborazioni scientifiche su scala mondiale al quale diedero il nome eclatante di *Globus Project*. Nella seconda metà degli anni '90 e sino all'inizio del 2000, molti sono stati i progetti che si sono dedicati allo sviluppo di un *software* con gli obiettivi indicati da Foster e Collaboratori, raggiungendo spesso risultati applicativi intermedi di grande interesse in ambito sia

scientifico che economico-industriale.

Il primo sforzo realizzativo nella storia degli sviluppi della Grid, fu lo sviluppo del *Globus Toolkit* [2], un *layer software* (chiamato anche *middleware*) utilizzato nel 1997 da circa 80 siti distribuiti nel mondo, che permetteva agli utenti di eseguire applicazioni computazionali su macchine geograficamente lontane dopo essersi collegati, aver riservato del tempo di calcolo e aver trasferito la propria applicazione. Il successo di questo progetto fu decretato definitivamente quando venne applicato, anche in versione prototipale, in un certo numero di campi, ad esempio quando fu possibile far cooperare un grande numero di ingegneri esperti di problemi di combustione, ma residenti in vari siti americani, sullo studio di possibili migliorie da apportare agli inceneritori industriali.

Sebbene sia stato importante aver concentrato inizialmente quasi tutti gli sforzi di ricerca e sviluppo della Grid su *Globus Toolkit* perché ha



consentito di dimostrare nel giro di pochi anni la fattibilità dell'idea di base della Grid, è stato anche evidente, raggiunta una certa maturità del progetto, che il sistema dovesse evolvere verso un'architettura aperta che lo rendesse facilmente adattabile alle comunità che si affacciavano al suo utilizzo, anche a garanzia di una larga partecipazione di sviluppo, uso e sostegno da parte di comunità scientifiche, accademiche ed economico-industriali.

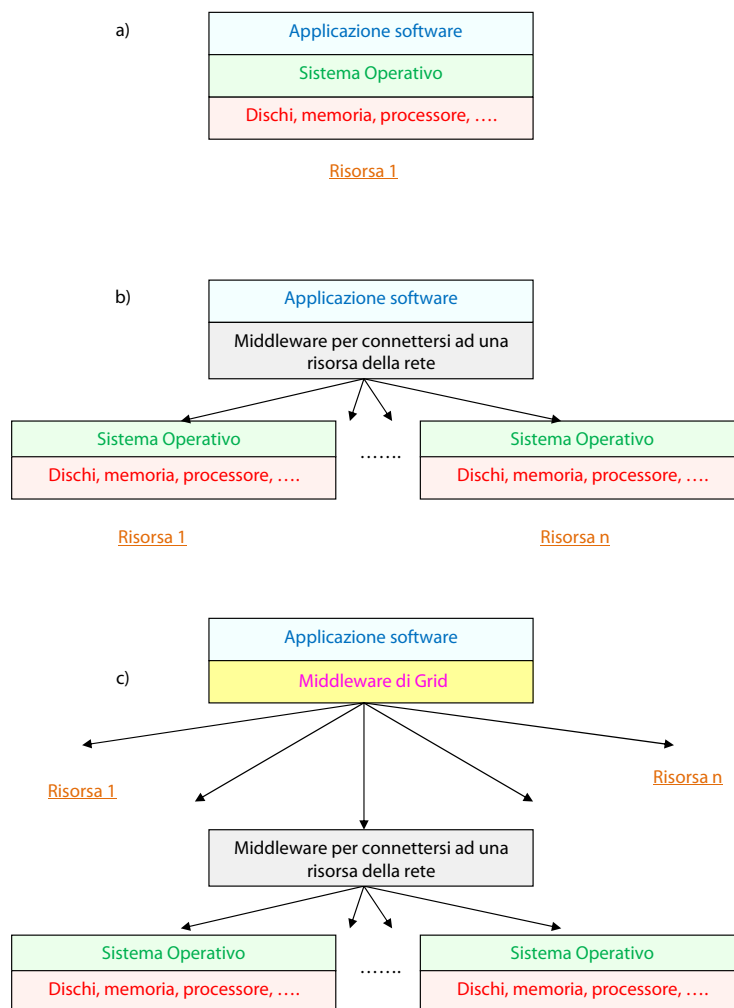
Negli ultimi dieci anni l'interesse per le tecnologie Grid è cresciuto enormemente. In Europa, in particolare, sotto la spinta della comunità della Fisica delle Alte Energie impegnata nella costruzione del grande acceleratore di particelle presso il CERN [3] di Ginevra, il *Large Hadron Collider* (LHC) [4], sono nati numerosi ed importanti progetti che hanno coinvolto nel tempo numerose comunità di diversi settori disciplinari. La Grid si è presentata subito come l'unica possibilità per gestire la mole di dati che saranno prodotti agli esperimenti ad LHC e, influenzata da questa esigenza che coinvolge migliaia di scienziati a livello internazionale, l'Europa ha finanziato per molti anni varie iniziative simili al progetto americano *Globus*. Tra queste va ricordato il progetto EGEE (*Enabling Grids for E-SciEnce*) [5], vedi nel seguito) che ha avuto lunga vita e un ruolo chiave negli

sviluppi tecnologici e applicativi delle griglie computazionali in Europa e nel mondo.

Oggi, allo stato dell'arte, sono disponibili in maniera abbastanza stabile le tecnologie necessarie per trasformare le risorse di calcolo e gli archivi di dati disponibili a livello mondiale, in un'unica infrastruttura (Grid) con protocolli di accesso omogenei ed interoperabili (fig. 2).

4 Che cos'è la Grid

Una Grid, tramite il suo *middleware*, deve realizzare in definitiva quattro importanti funzioni: gestione delle risorse, gestione dei dati, servizio di informazione e monitoraggio delle risorse, gestione della sicurezza. Il *software* per svolgere queste funzioni è stato sviluppato negli anni attraverso numerosi progetti che oggi sono arrivati ad un grado di maturità e sinergia tale da trasformare la Grid in una realtà operativa e consentire agli utenti di non preoccuparsi affatto di dove siano situate le risorse che gli sono state allocate, tantomeno della loro manutenzione. In questo modo, dato un problema computazionale, ci si può concentrare esclusivamente sull'applicazione.



Inoltre, nel mondo della Grid, gruppi di ricerca temporanei o permanenti, unità operative, istituti o intere organizzazioni che condividono un insieme di risorse e informazioni possono costituire una Organizzazione Virtuale (*Virtual Organization, VO*). Le VO possono a loro volta essere parte di altre VO e possono sia fornire risorse che essere un semplice agglomerato di utenti. Le VO utilizzano le risorse secondo delle politiche definite e condivise che ne stabiliscono le regole di utilizzo e garantiscono la sicurezza delle informazioni. Il modo per accedere ad una VO è quello del certificato digitale che garantisce l'autorizzazione e l'autenticazione dell'utente. Le VO normalmente vengono definite per un determinato compito e quindi si sciolgono quando il compito è stato ultimato.

4.1 Il middleware di Grid

Un'applicazione *software* eseguita sul singolo *computer* necessita solo del Sistema Operativo per accedere a risorse quali la CPU, la memoria,

i dischi e altro. In una *Local Area Network* quale la rete di calcolo di un dipartimento di ricerca, la stessa applicazione necessita di un *software* aggiuntivo che possiamo chiamare *middleware* che consente di connettersi alle risorse dei vari *computer* della rete gestiti a loro volta da un Sistema Operativo locale. Se l'applicazione viene eseguita all'interno di un'infrastruttura complessa come una griglia computazionale, è necessario introdurre un ulteriore strato di *software* che si comporta un po' come il Sistema Operativo della griglia, ossia che consente di avere accesso, secondo certe regole e certi protocolli, alle risorse distribuite che vengono viste dal singolo utente come un'unica risorsa (fig. 3).

Il *middleware* di Grid è quindi l'insieme dei servizi *software* creati appositamente per consentire l'automatizzazione dei processi di configurazione e installazione delle applicazioni, la distribuzione bilanciata del carico computazionale in funzione delle richieste (*match-making*) e l'accesso sicuro

Fig. 2 Una rappresentazione schematica del funzionamento della Grid.

Fig. 3 Schematizzazione delle modalità di uso delle risorse di un nodo di calcolo (dischi, memoria, processore, ...) da parte di una applicazione *software* nel caso a) del singolo *computer*, b) di un *computer* appartenente ad una *Local Area Network* e c) di un *computer* della Grid. All'aumentare della complessità della configurazione, sono necessari degli strati *software* aggiuntivi per accedere alle risorse.

alle risorse e ai dati distribuiti che generalmente sono debolmente accoppiati, eterogenei e geograficamente dispersi. L'utilizzo delle risorse, ovunque esse siano sulla rete, viene quindi gestito all'interno del *middleware* da un insieme di programmi ciascuno con un compito preciso. Tra questi, per fare un esempio, il "resource broker" (prodotto nell'ambito di DataGrid/LCG e oggi evoluto nel *Workload Management System* di EGEE/gLite) ha il compito di identificare e caratterizzare dinamicamente le risorse disponibili attraverso dei cataloghi di informazioni residenti sui siti e di allocare all'applicazione che le richiede quelle più adatte. In definitiva il *middleware* deve assicurare che da una parte le richieste dell'utenza vengano soddisfatte al meglio e dall'altra che tutte le componenti della griglia computazionale nello svolgere la loro funzione possano interoperare senza problemi.

Nel corso degli anni sono stati sviluppati nel mondo diversi *middleware*, tra questi i più popolari sono: **gLite** (*Lightweight Middleware for Grid Computing*, il *middleware* europeo più diffuso), **Globus Toolkit 4** (sviluppato negli USA), **GRIA**, **UNICORE6** (*Uniform Interface to Computing Resources*), **OGSA-DAI**, **ProActive/GCM Parallel Suite**, **GReIC**, **Alchemi** (*NET grid computing framework*).

gLite [6], ormai diffusissimo in molte comunità scientifiche e in particolare in Europa, è il *middleware* di EGEE il cui sviluppo si è basato sui risultati ottenuti nei precedenti progetti Grid quali EDG (*European Datagrid*) e *Globus Toolkit*. Per avere un'idea della complessità del *middleware* di Grid si pensi che *gLite* include i seguenti servizi: *Security Services* (*Authorization, Authentication, and Auditing*), *Information & Monitoring Services* (*Information and Application Monitoring*), *Data Management* (*Metadata, File and Replica catalogue, Storage Element, Data Movement*) e *Workload Management Services* (*Workloadmanagement, Computing Element, Job Provenance, Packagemanagement*).

4.2 La Grid europea

Il progetto EGEE, finanziato in tre fasi dalla Comunità Europea nell'ambito del 6° e 7° Programma Quadro a partire dal 2004, ha avuto un ruolo guida per lo sviluppo di un'infrastruttura europea di calcolo e dei servizi di griglia per circa 10000 ricercatori sparsi in tutto il mondo che possono contare su circa 80000 CPU e 25 Petabyte di spazio disco e altrettanto spazio su librerie di nastri magnetici, in grado di eseguire più di 150k *job* in parallelo (circa 330k *job* al giorno), di sostenere un trasferimento dati maggiore di 1.5 Gigabyte/s e una disponibilità dei servizi 24 ore su 24, 7 giorni su 7.

Questi numeri danno la dimensione del lavoro scientifico, tecnologico e tecnico svolto in questi ultimi anni per mettere in opera un'infrastruttura davvero gigantesca alla quale sono connessi attualmente circa 290 siti dislocati in circa 50 Paesi. Il numero di Organizzazioni Virtuali che utilizzano

l'infrastruttura EGEE è circa 200, il numero di utenti registrati circa 17000 e il numero di domini di applicazione più di 15 (Archeologia, Astronomia e Astrofisica, Protezione Civile, Chimica Computazionale, Fluidodinamica Computazionale, Informatica, Fisica della Materia Condensata, Scienze della Terra, Finanza, Fusione, Geofisica, Fisica delle Alte Energie, Scienze della Vita, Scienza delle Comunicazioni, Scienze dei Materiali e ad altri). Il progetto EGEE ha avuto un ruolo chiave per attirare nuovi utilizzatori della Grid, sia a livello scientifico che accademico che commerciale.

Chi volesse rendersi conto di come tutto ciò funzioni, può farlo utilizzando sul proprio *Personal Computer* il cosiddetto *Real Time Monitor* sviluppato nell'ambito del Progetto EGEE (<http://gridportal.hep.ph.ic.ac.uk/rtm/> o, in versione 2D, http://gridportal-ws01.hep.ph.ic.ac.uk/rtm_2D_2008/applet.html) o attivare la *GridGuide* per visitare tramite una mappa interattiva alcuni dei siti Grid che partecipano al progetto EGEE (<http://www.gridguide.org>).

Nel corso degli anni, dopo una lunga e inevitabile, a volte anche difficile, fase di consolidamento dei vari aspetti dell'infrastruttura computazionale (*middleware* e altro), il progetto EGEE ha strategicamente diretto parte delle sue attenzioni anche ai nuovi utenti, all'aumento continuo delle risorse di calcolo e di *storage*, alla preparazione della migrazione delle attuali Grid di produzione basate sui singoli progetti verso una "infrastruttura federata" basata sulle cosiddette *National Grid Initiatives* (NGI). Ciascuna NGI è riconosciuta come una struttura nazionale con i suoi finanziamenti e il suo personale ed ha il compito di garantire il funzionamento delle Grid nazionali.

La Grid europea in un prossimo futuro avrà infatti una nuova organizzazione chiamata EGI (*European Grid Initiative*) che coordinerà in maniera centralizzata le infrastrutture create da EGEE con lo scopo di garantirne la sostenibilità e l'interoperabilità, coordinare l'interazione e l'integrazione delle varie infrastrutture Grid nazionali (NGI), operare la griglia europea di produzione per svariate applicazioni scientifiche secondo standard di qualità molto elevata occupandosi delle interfacce *middleware* e della loro certificazione, curando inoltre gli sviluppi delle nuove applicazioni.

4.3 La Grid italiana

La nuova organizzazione della Grid europea, voluta essenzialmente dai comitati europei eIRG (*e-Infrastructure Reflection Group*) ed ESFRI (*European Strategy Forum for Research Infrastructure*) volti a migliorare lo sviluppo e l'utilizzo di infrastrutture comunitarie, richiede alle varie nazioni un'unica interfaccia nazionale verso l'Europa. L'*Italian Grid Infrastructure* (IGI) si propone come unico soggetto italiano di riferimento a livello europeo, agendo quindi

come NGI. Tale organizzazione nazionale si basa sull'appoggio di tutti i maggiori Centri di Ricerca e di Eccellenza italiani e rappresenta una delle infrastrutture nazionali più grandi del mondo con i suoi 40 siti sparsi in tutto il territorio nazionale (fig. 4). Interconnessi tra loro a larghissima banda grazie alla rete italiana della ricerca GARR, i siti danno vita ad un'infrastruttura distribuita secondo il paradigma della Grid che rende possibile la condivisione di risorse informatiche dislocate su tutto il territorio nazionale.

La Grid italiana (IGI) è coordinata a livello nazionale dall'Istituto Nazionale di Fisica Nucleare, INFN, che è l'ente di ricerca che ha dato maggiore impulso agli sviluppi e alle applicazioni nazionali ed europee della Grid. Parte integrante e cuore dell'infrastruttura Grid italiana è il centro di calcolo INFN-Tier1 del CNAF di Bologna che attualmente mette a disposizione la maggiore quantità di risorse per il calcolo e l'archiviazione di dati. Il centro è utilizzato da numerose comunità scientifiche rappresentative di svariati settori disciplinari, ma dominato dalle comunità di Fisica delle Alte Energie e Fisica Teorica (fig. 5). In un anno di operazione, dal 2008 al 2009, sono stati processati al Tier1 più di 11 milioni di *job*. In Italia un esempio interessante che mostra come la Grid abbia, in qualche maniera, lanciato sviluppi in settori anche molto

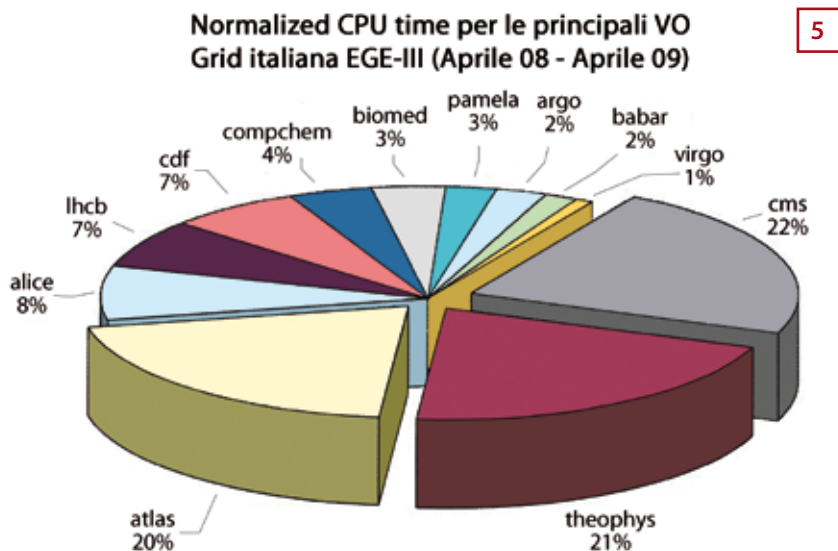
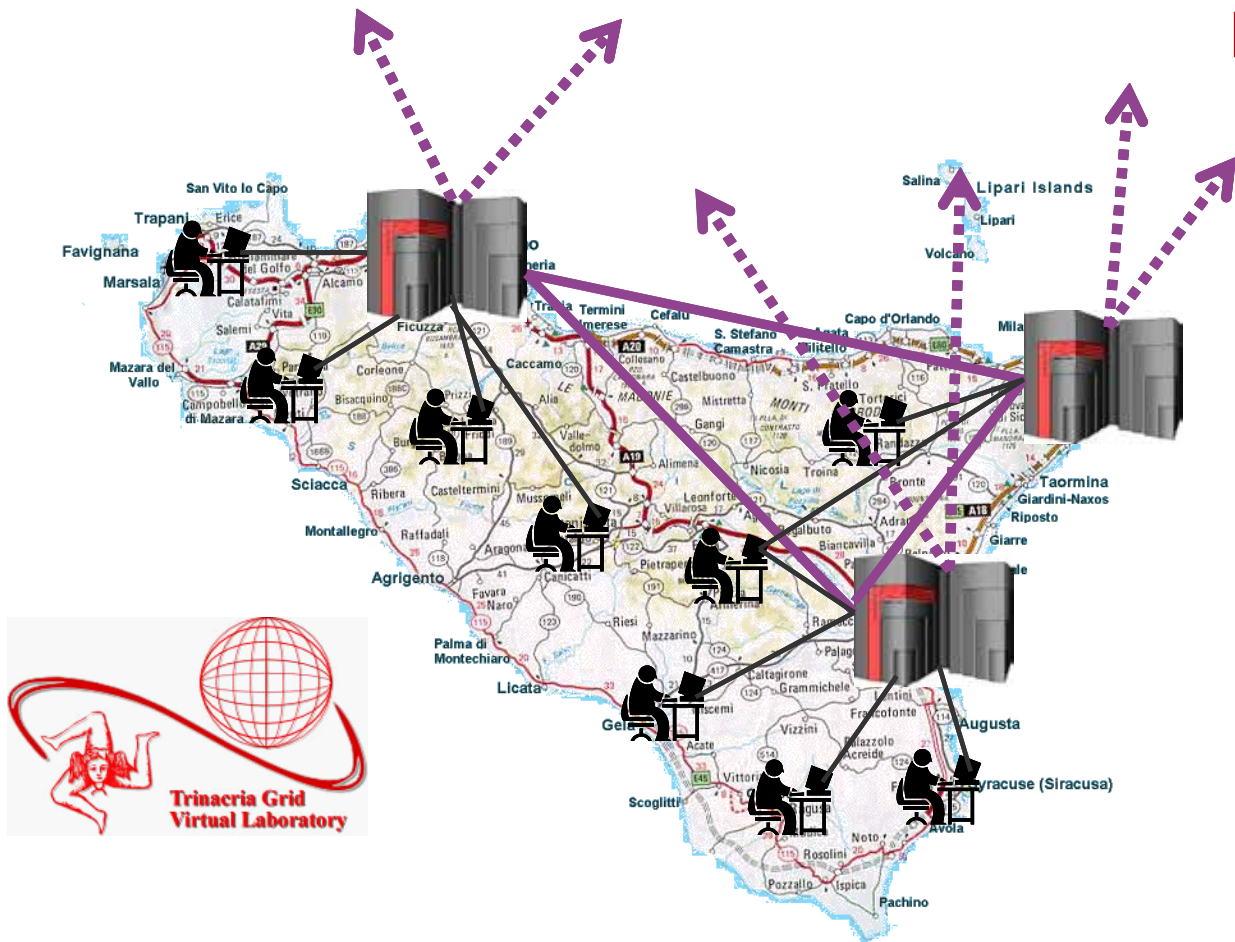


Fig. 4 La Grid italiana.

Fig. 5 Ripartizione del carico computazionale tra le varie comunità scientifiche attive a livello italiano.

6



distanti tra loro è l'esempio della Grid siciliana (fig. 6) che si è sviluppata sui due progetti PI2S2 ("Progetto per l'implementazione e lo sviluppo di una infrastruttura in Sicilia basata sul paradigma della Grid") finanziato dal MIUR e *TriGrid Virtual Laboratory* finanziato dalla Regione Siciliana, nati dalla collaborazione tra le Università di Catania, Palermo e Messina, gli Enti Pubblici di Ricerca INFN (Istituto Nazionale di Fisica Nucleare), INAF (Istituto Nazionale di Astrofisica) e INGV (Istituto Nazionale di Geofisica e Vulcanologia) riuniti nel Consorzio COMETA, il Consorzio S.C.I.R.E., Apindustrie Catania e alcune piccole e medie industrie siciliane (HBS Network, Hitec 2000, Italcompany Group, Nice, Microsol, Unico Informatica, Seasoft). Tale infrastruttura computazionale di dimensione regionale, ma connessa alla Grid italiana, europea e mondiale, è stata creata con l'intento di dotare la Regione Siciliana di un Laboratorio Virtuale per usi scientifici e industriali, favorendo gli *spin-off* nell'area delle Tecnologie dell'Informazione e della Comunicazione (ICT), creando una rete di competenze di elevata professionalità e canali di alta formazione per migliorare la competitività sia a livello scientifico che industriale delle piccole e medie imprese operanti sul territorio.

7



5 Applicazioni scientifiche

La Grid si presenta ad oggi come lo strumento migliore, a volte insostituibile, per affrontare problemi computazionali in molte discipline, da quelle fisiche a quelle ambientali, da quelle mediche a quelle economico-industriali e altre ancora come riportato nel seguito. Tra queste applicazioni scientifiche, quelle in Fisica delle Alte Energie hanno dato l'impulso maggiore agli sviluppi della Grid. Organizzandosi in VO, i ricercatori possono accedere a un insieme di risorse condivise, in particolare ogni settore disciplinare normalmente contempla molte VO anche accedendo alla stessa infrastruttura.

5.1 Fisica delle Alte Energie

La comunità di Fisica delle Alte Energie ha sempre avuto necessità di notevoli risorse di calcolo e spesso anche di sviluppi innovativi nel campo del calcolo e delle reti per far fronte ad esigenze sempre crescenti di simulazioni, ricostruzione e analisi degli eventi prodotti soprattutto negli esperimenti presso gli acceleratori di particelle. Con la costruzione di LHC al CERN di Ginevra è stata subito evidente la necessità di un salto di scala nelle infrastrutture di calcolo esistenti per far fronte all'enorme quantità di dati prodotti dai grandi apparati sperimentali collocati sulla nuova

macchina acceleratrice una volta entrata in funzione. Questa esigenza ha dato grande impulso, a livello europeo e mondiale, agli sviluppi della Grid che si presentava come l'unico strumento tecnologico potenzialmente in grado di gestire i 15 milioni di Gigabyte (15 Petabyte) di dati aspettati ogni anno (pari alle informazioni immagazzinate in una torre di CD di 20 km, fig. 7) e necessari ad una comunità di ricercatori di circa 140 istituzioni di 40 nazioni. Ciò ha dato vita alla *LHC Computing Grid* (LCG) prima e al *Worldwide LHC Computing Grid* (WLCG) [7] dopo, che hanno portato alla definizione di modelli di calcolo innovativi per gli esperimenti, lo sviluppo delle interfacce *software* per il *middleware* di Grid, la messa a punto delle infrastrutture di calcolo dei singoli esperimenti, quelle nazionali e del CERN.

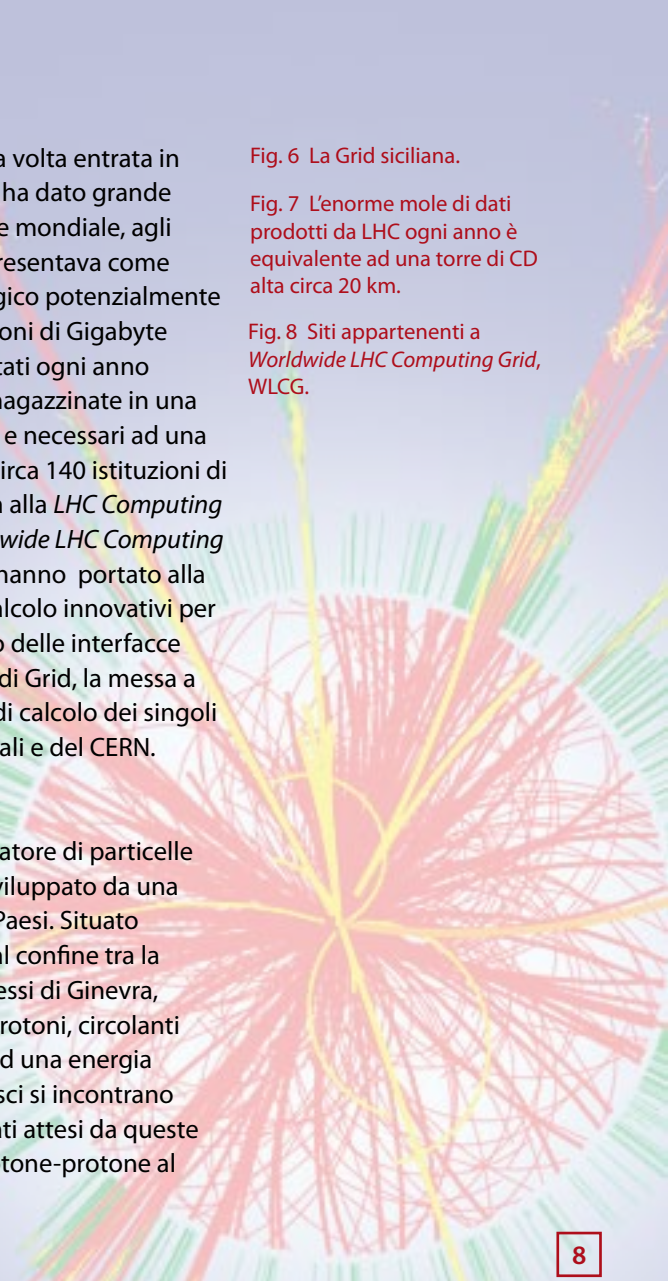
5.1.1 Il calcolo LHC

LHC è il più grande acceleratore di particelle mai costruito dall'uomo, sviluppato da una collaborazione di oltre 50 Paesi. Situato in un tunnel lungo 27 km al confine tra la Svizzera e la Francia nei pressi di Ginevra, LHC accelera due fasci di protoni, circolanti in direzioni opposte, fino ad una energia di 7 TeV per fascio. I due fasci si incontrano ogni 25 nanosecondi e i dati attesi da queste collisioni (10^9 collisioni protone-protone al

Fig. 6 La Grid siciliana.

Fig. 7 L'enorme mole di dati prodotti da LHC ogni anno è equivalente ad una torre di CD alta circa 20 km.

Fig. 8 Siti appartenenti a Worldwide LHC Computing Grid, WLCG.



8

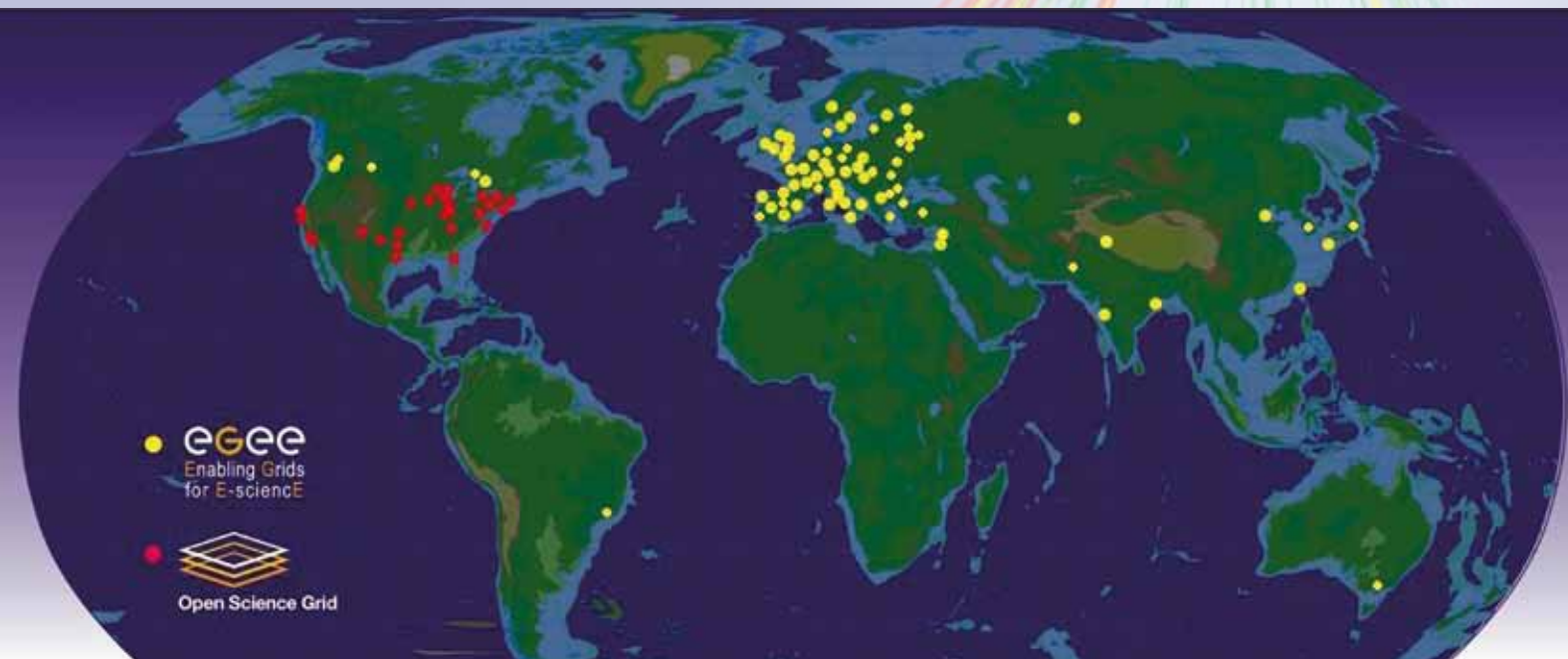
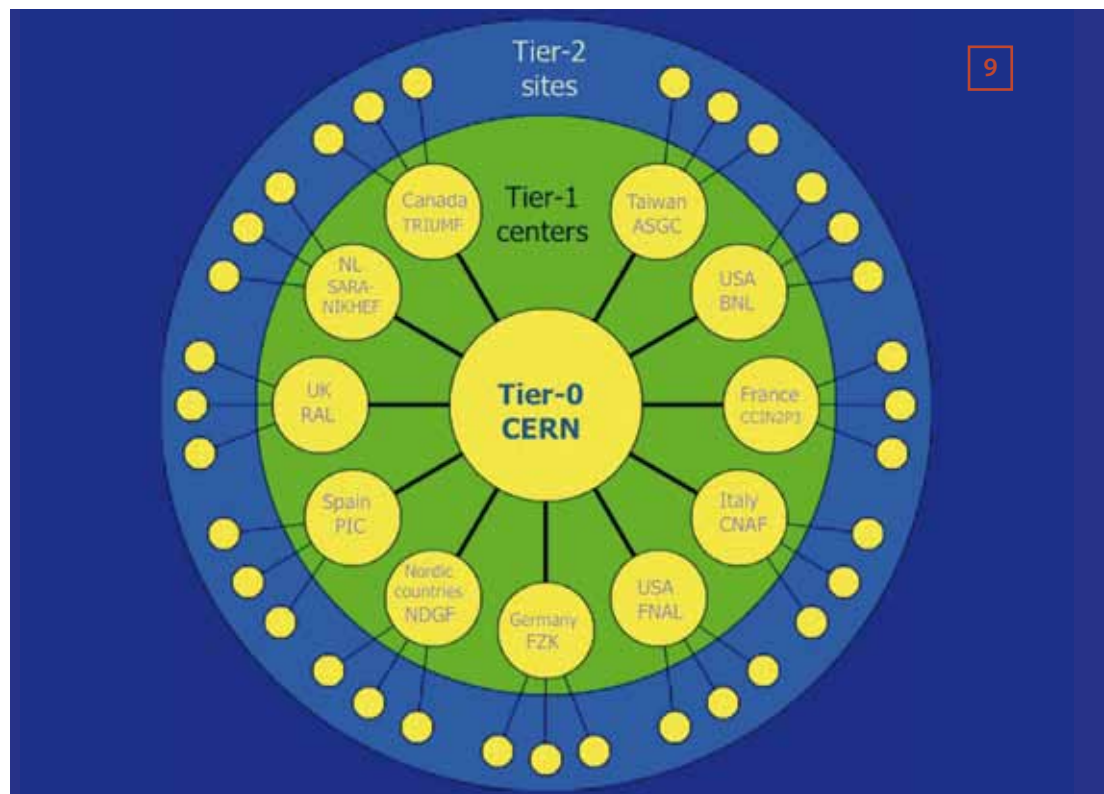


Fig. 9 Il modello di calcolo degli esperimenti LHC.

Fig. 10 I Tier-1 di Worldwide LHC Computing Grid, WLCG.

Fig. 11 Il funzionamento di WLCG nei vari siti e le percentuali di uso delle risorse.

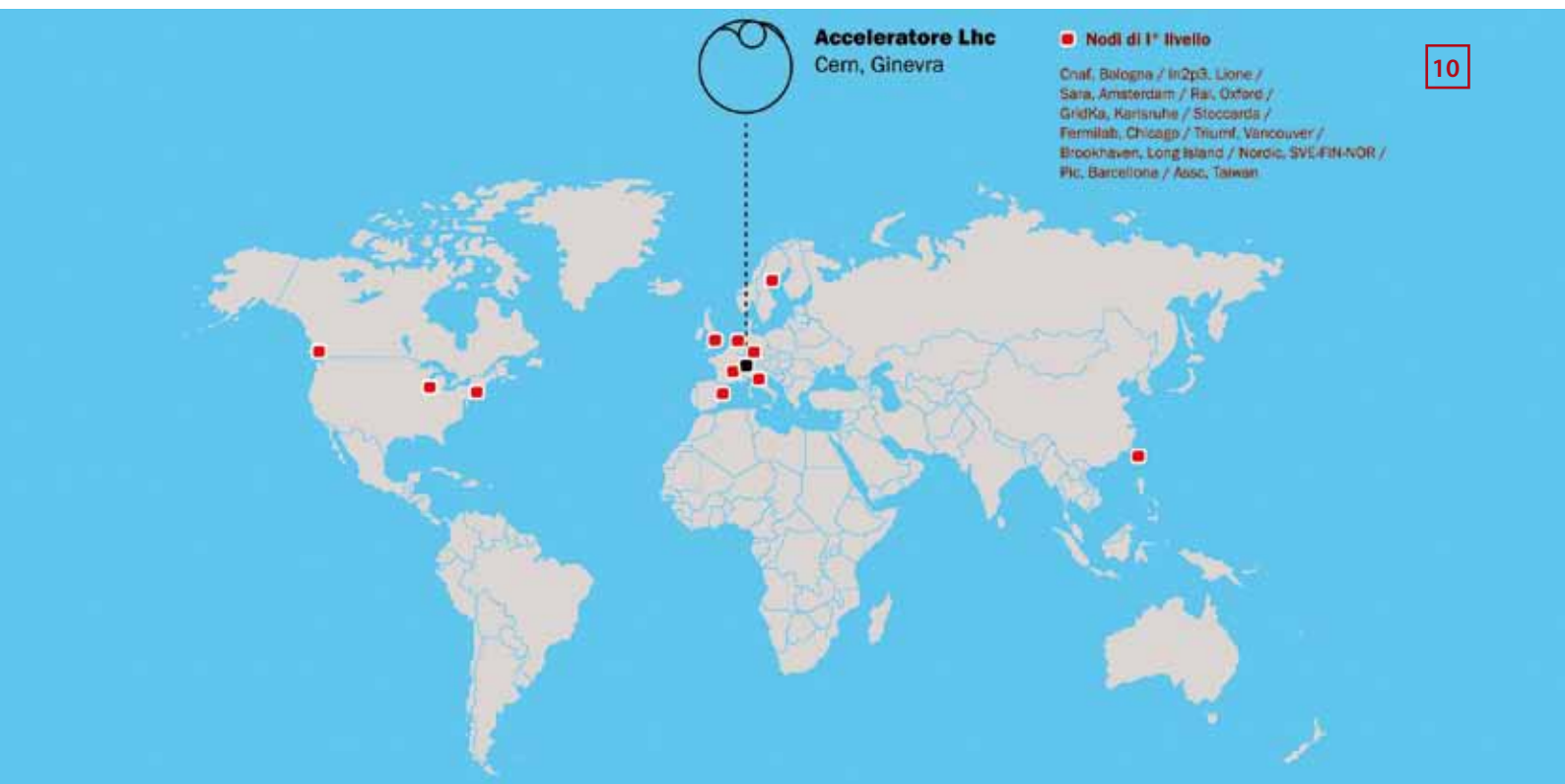


secondo) e registrati dai quattro esperimenti già costruiti e posizionati nelle regioni di intersezione dovrebbero essere analizzati e condivisi in sicurezza da migliaia di ricercatori appartenenti a centinaia di istituzioni scientifiche ed accademiche. Se non si filtrassero in tempo reale (*trigger*) gli eventi prodotti negli apparati sperimentali, essi produrrebbero 10^8 Megabyte/s. Il *trigger* consente invece di registrare circa 200–250 eventi/s che corrispondono a circa 50–300 Megabyte/s nei vari esperimenti. Nonostante si operi tale riduzione, la produzione annuale di dati da questi apparati sperimentali per l'analisi *off-line* raggiunge valori mai ottenuti in precedenza.

Rispondendo alle esigenze dettate da questo panorama scientifico, il progetto WLCG ha realizzato un'infrastruttura che ingloba i centri di calcolo per LHC distribuiti nel mondo (fig. 8) ed è basata sul *middleware* ed i servizi offerti dai grandi progetti Grid internazionali sviluppati anche per altri ambiti disciplinari come EGEE in Europa e OSG negli USA, e nazionali come INFN-Grid in Italia. Tale griglia, che ha superato collaudi molto intensivi di trasferimento e ricostruzione dei dati utilizzando eventi simulati con grande dettaglio negli apparati sperimentali, in attesa della partenza di LHC ha già operato per la presa dati con raggi cosmici con le funzionalità previste nei modelli di calcolo degli esperimenti (prima ricostruzione al Tier-0, analisi dati ai Tier-1, calibrazioni ai Tier-2, etc.).

5.1.2 Il modello di calcolo degli esperimenti

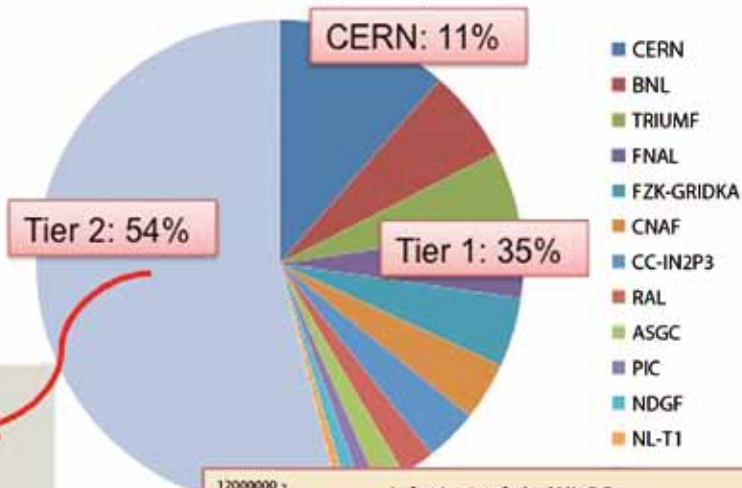
La Grid di LHC si sviluppa su tre livelli chiamati **Tier** (fig. 9). Per il **Tier-0**, che costituisce il livello base della struttura, passano tutti i dati provenienti dagli esperimenti LHC. Il Tier-0 è situato al CERN e rappresenta circa il 20% della capacità di calcolo totale dell'intera infrastruttura. Sul Tier-0 verrà eseguito un primo *backup* dei dati e, dopo un processamento iniziale, i dati verranno distribuiti a una serie di centri di calcolo di livello 1 denominati **Tier-1** (fig. 10) caratterizzati da una elevata capacità di calcolo e di registrazione dei dati su dischi e nastri magnetici, da un altissimo livello del servizio, una connettività a larga banda, garantendo il funzionamento di tutta l'infrastruttura Grid di WLCG a livello mondiale. I Tier-1 a loro volta renderanno disponibili i dati ai cosiddetti **Tier-2**, dei centri di calcolo di livello nazionale di capacità adeguate per permettere specifiche analisi, calibrazioni dei rivelatori, simulazioni dell'apparato. Si stima che i Tier-2 attualmente disponibili costituiscano circa il 50% della capacità di calcolo necessaria ad LHC. È inoltre previsto, ove necessario, l'utilizzo di un quarto livello di Tier, denominato **Tier-3**, che consente ai singoli ricercatori di accedere alle strutture di calcolo a livello di Dipartimento Universitario o anche di singolo PC, registrate anche esse in LCG ed utilizzate per analisi dati locali. I quattro esperimenti LHC hanno costruito i loro specifici modelli di calcolo sulla base di questa struttura gerarchica e, dal punto di vista dell'utilizzazione delle risorse, in



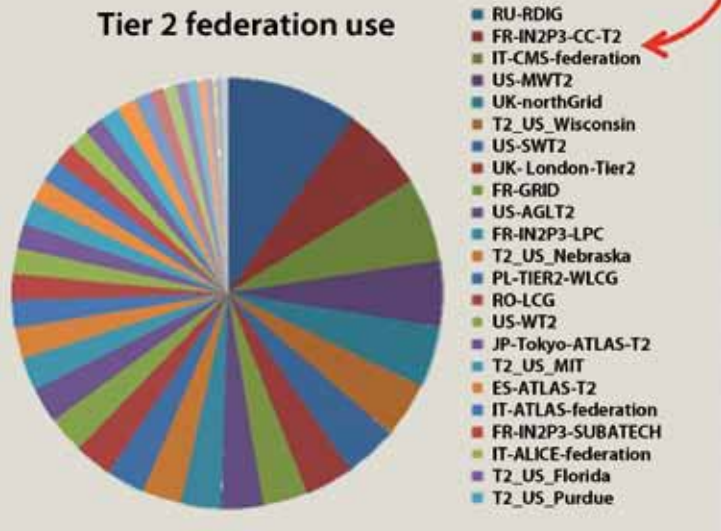
10

CPU Usage Early 2008

11

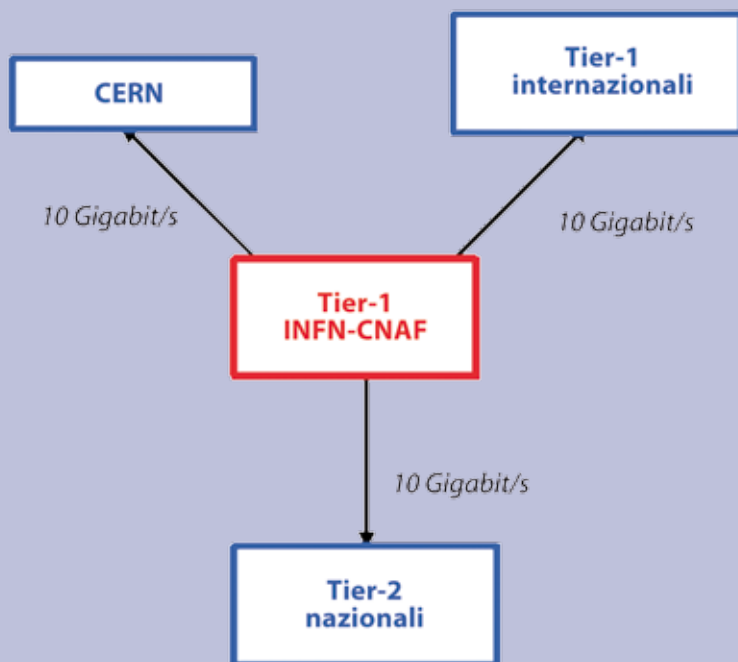


Tier 2 federation use



Jobs/month in WLCG





funzione delle competenze dei gruppi di ricerca, ad esempio assegnando ai Tier2 di determinati istituti le calibrazioni dei rivelatori da essi costruiti. In fig. 11 è mostrato l'utilizzo delle risorse di WLCG.

5.1.3 II TIER-1 al CNAF-INFN

Il CNAF [9] di Bologna è il Centro Nazionale dell'INFN per la ricerca e lo sviluppo nel campo delle tecnologie informatiche applicate agli esperimenti di Fisica delle Alte Energie, ma non solo. È coinvolto da anni nello sviluppo, implementazione e gestione di infrastrutture di griglia a livello italiano (GRID.it) [10], europeo (EGEE) ed internazionale (LCG), nella progettazione e sviluppo di *middleware*. Oggi il CNAF rappresenta il centro operativo della Grid nazionale ospitando nella sua sede il Tier-1 italiano per gli esperimenti LHC, contribuendo quindi con personale, risorse tecniche e competenze di primo piano alla sfida tecnologica che il futuro della ricerca ci chiede.

Tutte le risorse di calcolo del CNAF sono connesse alla rete Internet mondiale della ricerca con una banda di alcune decine di Gigabit al secondo, assicurando quindi la connettività geografica verso il CERN, gli altri centri di calcolo Tier-1 internazionali e i Tier-2 nazionali e internazionali (fig. 12). Per avere un'idea delle dimensioni e quindi della complessità della rete del Tier-1 italiano, già destinata a crescere nel corso del 2009, si pensi che per la sua realizzazione sono stati utilizzati 16 km di cablaggio in

fibra ottica, 11 km di cablaggio in cavi di rame, 60 *switch* di aggregazione con 2800 porte Gigabit, 3 *switch router* che garantiscono delle bande interne complessive dell'ordine di qualche Terabit al secondo e 3 *link* a 10 Gb/s per la connettività geografica.

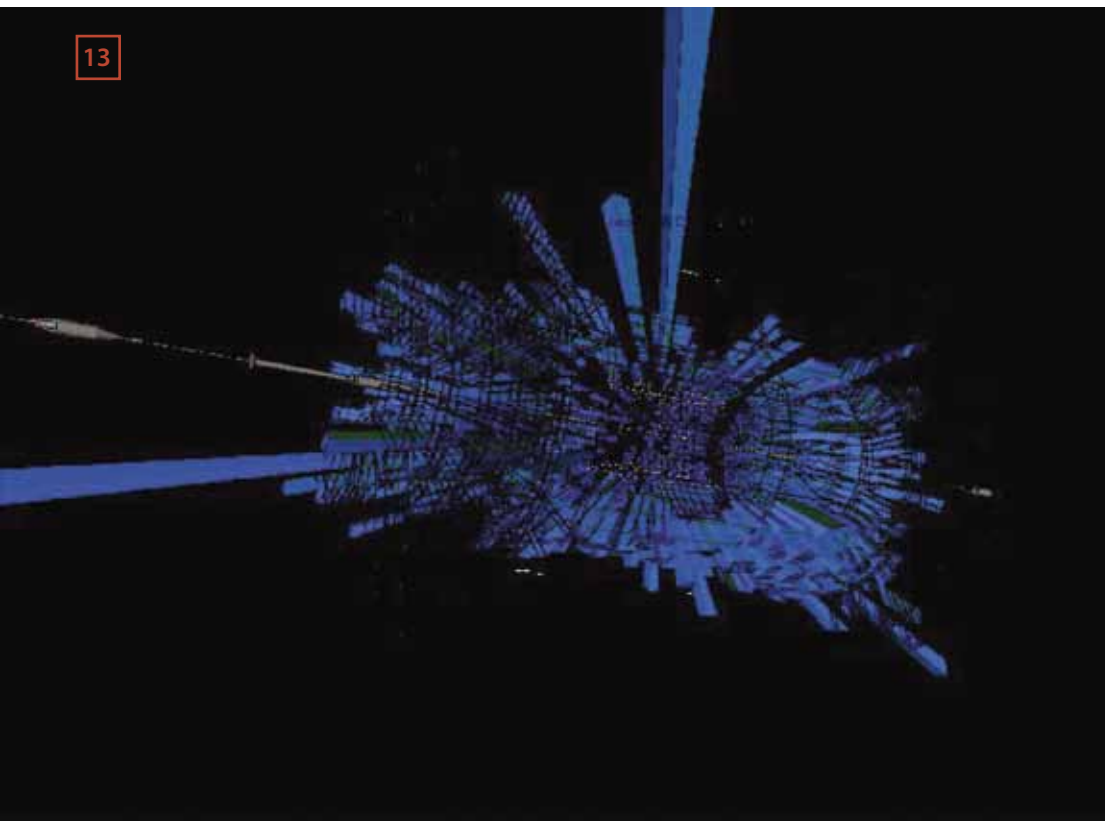
Il Tier-1 dispone attualmente di una *farm* di potenza di calcolo equivalente a circa 2600 processori di ultima generazione (6,5 milioni di SpecINT2K) che verranno raddoppiati nel corso del 2009 e di nuovo raddoppiati entro il 2011. Queste risorse di calcolo sono utilizzate oggi da circa 20 Collaborazioni scientifiche diverse che richiedono in media l'esecuzione di 18000 *job* al giorno.

A questa potenza di calcolo si affiancano 2.4 Petabyte di spazio disco servito da 200 *disk-server* e una capacità nastro pari a 4 Petabyte serviti da 20 *tape-drive*. Tali capacità sono previste raddoppiare entro la fine del 2009, soprattutto per soddisfare le esigenze degli esperimenti LHC.

Da Aprile 2008 ad oggi, le risorse di calcolo del Tier-1 dell'INFN sono state utilizzate per il 66% dagli esperimenti WLCG, per un totale di circa 3 milioni di *job* computazionali eseguiti.

Il 10 settembre 2008, per la prima volta, un fascio di protoni di 450 GeV di energia ha circolato nell'anello di LHC provocando, dopo il suo assorbimento a ridosso degli apparati sperimentali, piogge di particelle nei rispettivi rivelatori che ne hanno digitalizzato e registrato i segnali (fig. 13). Questo evento, rimasto unico nel suo genere per

13



circa un anno a causa della partenza ritardata della macchina¹, ha messo alla prova, seppur senza arrivare alle prestazioni limite previste, l'infrastruttura di calcolo degli esperimenti che è stata in grado di gestire e distribuire i dati acquisiti secondo i modelli di calcolo previsti, dimostrando quindi in maniera pragmatica che il lavoro preparatorio e di avanzamento tecnologico svolto ad oggi per accogliere i dati di LHC ha avuto buon esito.

5.2 Astrofisica e Astronomia

Molti fenomeni astrofisici, soprattutto quelli di altissima energia, coinvolgono processi fisici non lineari il cui studio è diventato possibile solo con l'avvento di strumenti di calcolo avanzato su larga scala quali i supercalcolatori e le griglie computazionali. Con questi strumenti oggi è possibile sviluppare modelli fisici molto complessi riguardanti i collassi stellari, la formazione di buchi neri e molti altri fenomeni. Anche in Cosmologia le simulazioni numeriche sono considerate lo strumento

migliore per confrontare i dati osservativi con i modelli teorici. Tali simulazioni richiedono risorse di calcolo sempre crescenti.

Per quanto riguarda l'Astronomia osservativa, gli archivi di dati astronomici coprono ormai la maggior parte del cielo con alta risoluzione e in gran parte delle lunghezze d'onda elettromagnetiche, da quelle radio a quelle gamma. La quantità sempre crescente di dati scientifici di altissima qualità contenuti in questi archivi sta diventando una vera e propria "sorgente" in quanto può essere utilizzata in maniera simile all'osservazione con un telescopio reale situato sia a terra che nello spazio.

Pertanto vi è una forte spinta da parte degli astronomi ad avere un accesso semplice e diretto a questa grande massa di dati, opportunamente archiviati e documentati. L'idea innovativa che ha suggerito la Grid è che un gruppo di archivi astronomici interconnessi tra loro può essere visto come un *Astrophysical Virtual Observatory* nel quale lo strumento per l'osservazione, il nuovo telescopio, è rappresentato da una rete informatica che permette l'accesso alle informazioni archiviate secondo dei formati *standard* che

Fig. 12 Connettività geografica del Tier-1 dell'INFN-CNAF.

Fig. 13 Un evento ("splash event") ricostruito nell'apparato sperimentale ATLAS ottenuto dall'assorbimento del fascio di protoni di 450 GeV che ha circolato in LHC il 10 settembre 2008, compiendo per la prima volta un giro completo.

¹ Il riavvio di LHC, dopo il ben noto incidente del 2008, è avvenuto il 21 Novembre 2009 proprio mentre questo numero de *Il Nuovo Saggiatore* andava in stampa (n.d.r.).



Fig. 14 Le 17 Organizzazioni appartenenti all'*International Virtual Observatory Alliance*, IVOA.

ne permettono la comprensione, corredata da un serie di strumenti *software* per interrogare e analizzare i dati. Con uno strumento simile diventa così possibile operare un "survey virtuale" del "cielo reale".

La nozione di *Virtual Observatory* si fonda quindi sul paradigma Grid. Non solo gli archivi federati hanno un'ampia dislocazione geografica, ma anche le risorse di calcolo richieste per analizzare in maniera automatica grandi quantità di dati (*data mining*) non sono situate necessariamente presso i ricercatori che ne fanno uso, ma possono risiedere in un sito differente o addirittura essere distribuite. In questo laboratorio virtuale, utilizzando il lavoro svolto nei progetti delle comunità astronomiche che vi hanno aderito, è possibile attivare *browser* molto elaborati che permettono un'analisi anche intensiva in tempo reale di dati astronomici raccolti da telescopi a terra e nello spazio. In **fig. 14** sono mostrati i diciassette membri della *International Virtual Observatory Alliance* (IVOA) [11] creata nel 2002 con lo scopo di coordinare la collaborazione internazionale necessaria per un accesso integrato e globale ai dati

astronomici, soprattutto cercando di definire gli *standard* per la loro rappresentazione. Un altro esempio interessante di uso della Grid riguarda la rivelazione di onde gravitazionali prodotte da eventi più o meno violenti nell'universo vicino. Tale ricerca è condotta in Europa principalmente dall'esperimento VIRGO situato presso l'*European Gravitational Observatory* (EGO) [12] di Cascina, vicino Pisa. VIRGO è un interferometro laser fatto di due bracci ortogonali di circa 3 km. L'apparato sperimentale è stato realizzato con tecnologie molto avanzate (ad esempio laser ultrastabili, specchi con riflettività mai raggiunta, un sofisticato sistema di pendoli per conseguire un isolamento sismico senza precedenti). L'elevata sensibilità dell'apparato permette la rivelazione di onde gravitazionali prodotte da supernove e da sistemi binari coalescenti nella Via Lattea o in galassie esterne, ad esempio nell'Ammasso della Vergine. L'analisi dati di VIRGO pone problemi computazionali estremamente complessi dovendo rimuovere il rumore che è di diversi ordini di grandezza più grande del segnale. Inoltre, poiché sono previsti tipi diversi di



sorgenti astrofisiche che emettono onde gravitazionali, l'estrazione del segnale dal rumore richiede diversi metodi. Ad esempio, l'analisi *off-line* per la ricerca "cieca" di segnali continui, ovvero di segnali emessi da stelle di neutroni asimmetriche ruotanti, di cui non si conoscono né la posizione nel cielo né i parametri d'emissione, è estremamente onerosa dal punto di vista computazionale a causa dell'enorme spazio dei parametri che deve essere esplorato. La potenza di calcolo a disposizione fissa la "profondità" della ricerca: maggiori risorse di calcolo permettono di esplorare una porzione maggiore dello spazio dei parametri. Per dare un'idea delle risorse necessarie, si pensi che per effettuare l'analisi "cieca" di circa quattro mesi di presa dati è necessaria una potenza di calcolo almeno dell'ordine del Teraflop disponibile per altrettanto tempo. Questa analisi è particolarmente adatta ad essere affrontata in un ambiente di calcolo distribuito in quanto l'intera banda di frequenze da analizzare può essere divisa in un numero qualsivoglia di sotto bande, ciascuna analizzabile indipendentemente dalle altre. I codici di analisi sono stati quindi adattati all'ambiente Grid ed è stata creata la VO "VIRGO" che permette agli utenti di accedere alle risorse di calcolo dei Tier-1 del CNAF e di Lione e a vari altri siti della griglia di produzione INFN. L'analisi dei dati per questo tipo di studio consiste in una fase di pre-processamento locale che termina con la costruzione delle cosiddette *peak maps*, seguita da una fase incoerente sulla griglia in cui ciascun *job* analizza una porzione delle *peak maps* producendo una lista di candidati, infine da una fase di *follow-up* coerente, in locale, in cui viene raffinata l'analisi sfruttando attentamente anche le informazioni di fase dei segnali.

Nel tempo l'uso di Grid in VIRGO si è esteso ad altre applicazioni, ad esempio alla ricerca di segnali da binarie coalescenti. Attualmente la sua VO è in piena produzione e si prevede che negli anni a venire le richieste di risorse di calcolo per l'analisi e la movimentazione dei dati non solo per VIRGO, ma in generale per questo settore di ricerca, aumenteranno enormemente a causa della coincidenza con altri interferometri gravitazionali (LIGO negli Stati Uniti e GEO600 in Germania) e degli *upgrade* dei rivelatori, quali *Advanced VIRGO* e LIGO.

La collaborazione tra gli osservatori americano ed europeo si sta estendendo anche sul piano del *Virtual Observatory*. Infatti, sono in corso di studio le modalità di fusione della Grid di VIRGO con l'analoga struttura americana, meno sofisticata dal punto di vista del *software* e delle prestazioni, ma più estesa dal punto di vista delle risorse di calcolo disponibili. La nuova Grid coprirà non solo i due continenti europeo ed americano, ma si estenderà all'intero pianeta includendo le risorse dei gruppi asiatici e australiani già coinvolti nell'analisi

dei dati dei rivelatori gravitazionali.

5.3 Scienze della Vita

Dopo la decodifica del genoma umano, una delle prossime frontiere della Scienza è indubbiamente la Proteomica, ossia la scienza che studia le proteine. Mentre i geni del DNA determinano le informazioni sulla struttura degli esseri viventi, le proteine regolano la funzionalità delle cellule e per studiarle occorrono modelli tridimensionali complessi ed enormi quantità di dati biologici e biomedici. Ad esempio la simulazione di una mutazione genetica necessita di enormi risorse di calcolo non solo per una ragionevole modellizzazione degli oggetti in studio, ma anche per collegare le varie configurazioni ai possibili farmaci. Di questi problemi si occupa la Bioinformatica, una disciplina recente che utilizza le risorse della Grid per affrontare essenzialmente problemi di Genomica, Proteomica, Transcriptomica e Dinamica Molecolare. L'Istituto di Tecnologie Biomediche del CNR di Milano, il CILEA di Bologna e l'INFN hanno partecipato ad un Progetto di ricerca internazionale di Bioinformatica chiamato BioinfoGRID [13] che utilizza l'infrastruttura di griglia europea di EGEE. Nell'ambito di BioinfoGRID si sono svolte numerose attività non solo scientifiche, ma anche di disseminazione e di coordinamento delle applicazioni relative agli archivi di dati biologici e biomedici.

Tra le applicazioni sviluppate in questo progetto, ci sono i processi *in silico* per lo studio dei farmaci di malattie quali l'influenza aviaria e la malaria. Ad esempio si è simulata una proteina specifica legata allo sviluppo dell'influenza aviaria con tutte le possibili mutazioni e i rispettivi collegamenti ai possibili farmaci. In modo analogo e utilizzando la potenza di calcolo messa a disposizione dalla Grid, sono stati effettuati test di *docking* (valutazione dell'energia di legame tra una proteina bersaglio e una varietà di molecole ligando), ulteriormente raffinati con strumenti di Dinamica Molecolare, per la ricerca di farmaci per combattere la malaria, conseguendo notevoli avanzamenti nella definizione di composti inibitori di efficacia pari o superiore ai farmaci odierni (progetto WISDOM, [14]).

5.4 Scienze della Terra e Climatologia

Anche in Climatologia è divenuto indispensabile uno sforzo interdisciplinare che mette insieme conoscenze nei campi del clima e dell'Informatica. Gli obiettivi principali di questi studi sono quelli di fornire una valutazione più rigorosa possibile dell'impatto dei cambiamenti climatici sulla nostra economia, sull'agricoltura, sui mari e le coste, sull'ambiente in generale, in modo da poterne valutare le conseguenze e cercare di attenuarne gli effetti. Per fare ciò è necessario accedere,



visualizzare e condividere moltissimi dati geograficamente distribuiti.

Nell'ambito di EGEE, il progetto *Climate-G* [15] ha costruito un *testbed*, ossia un ambiente di sviluppo e collaudo delle applicazioni orientate alla gestione di dati e metadati su larga scala, indirizzando le problematiche sulla variabilità del clima tramite modelli globali del sistema Terra e modelli regionali. In questo modo le previsioni climatiche sempre più precise per la crescente quantità di dati raccolti e le continue migliorie dei modelli, consentono un monitoraggio sempre più puntuale del territorio.

6 Conclusioni

In questo articolo si è cercato di descrivere come la Grid abbia influenzato enormemente il calcolo scientifico del 21esimo secolo, attivando una sinergia senza precedenti tra le comunità scientifiche di tutti i Paesi, in numerosi settori disciplinari. In alcuni campi di applicazione si è assistito addirittura a dei balzi in avanti della conoscenza del tutto inaspettati, anticipando quegli obiettivi che sembravano ancora molto lontani.

Si è mostrato che la Grid può accelerare enormemente lo sviluppo di risorse e competenze per le sue potenzialità di utilizzo, anche al di fuori dell'ambito scientifico. Il suo futuro a breve va sicuramente nella direzione del consolidamento degli strumenti che esistono oggi e verso un lavoro di unificazione e omogeneità delle base dati, nello sviluppo e uso delle tecnologie informatiche per il *business (e-commerce)*, ad esempio sviluppando il *Cloud Computing* che si prefigge di fornire risorse *hardware* e *software*, anche eterogenee, in remoto, anche a costo di discostarsi da quelle caratteristiche di sicurezza e affidabilità del servizio che sono proprie dell'ambiente di ricerca. Va detto esplicitamente che il buon funzionamento della Grid, o dei suoi derivati per applicazioni non scientifiche, si basa fortemente su una potente rete telematica che funzioni a livello locale ma anche geografico e che continui a svilupparsi dal punto di vista tecnologico.

In ogni caso, la tendenza in atto in numerosi settori scientifici ad usare le risorse informatiche che la Grid mette a disposizione, ha fatto sì che si stiano affacciando al suo utilizzo un numero di discipline sempre maggiore e gruppi di ricerca sempre più numerosi, allargando gli orizzonti della Scienza come se ci si muovesse verso una sua globalizzazione.

Ringraziamenti

Desidero ringraziare i miei colleghi Alessandro De Salvo, Francesco Lacava, Lamberto Luminari e Fulvio Ricci per i loro suggerimenti durante la stesura di questo articolo.

Bibliografia

- [1] I. Foster and C. Kesselman (Editors) *"The Grid: Blueprint for a New Computing Infrastructure"* (Morgan Kaufmann, San Francisco, CA) 1999.
- [2] <http://www.globus.org/alliance/publications/papers.php>
- [3] <http://public.web.cern.ch/Public/Welcome.html>
- [4] <http://public.web.cern.ch/Public/en/LHC/LHC-en.html>
- [5] <http://www.eu-egee.org/>
- [6] <http://glite.web.cern.ch/glite/>
- [7] <http://lcg.web.cern.ch/LCG/>
- [8] <http://atlas.ch>
- [9] <http://www.cnaf.infn.it/main/>
- [10] <http://grid.it/>
- [11] <http://www.ivoa.net/>
- [12] <http://www.ego-gw.it/>
- [13] <http://www.bioinfo.grid.eu/>
- [14] <http://wisdom.eu-egee.fr/>
- [15] <http://greloc.unile.it:8080/ClimateG-DDC-v1.0/>

Speranza Falciano

Speranza Falciano è Dirigente di Ricerca dell'Istituto Nazionale di Fisica Nucleare. Lavora presso la Sezione INFN di Roma della quale è attualmente Direttore. Ha lavorato al CERN di Ginevra presso la "facility" Omega Primo e negli esperimenti : NA10 e NA27 (*European Hybrid Spectrometer*) al SPS, ed L3 al LEP. I suoi interessi scientifici sono rivolti alla Fisica delle Particelle, allo sviluppo di rivelatori, ai sistemi di *trigger* e acquisizione dati, al calcolo scientifico. Attualmente è membro della Collaborazione ATLAS presso il LHC del CERN nella quale ha ricoperto numerosi incarichi di coordinamento per il sistema di *trigger* e il rivelatore di muoni.