



# ***Processamento em Grid: Muito Além de Altas Energias***

Sérgio F. Novaes  
IFT/UNESP

# O que é o Grid ?



# Processadores X Conexão



<i>Processador</i>	<i>Ano</i>	<i>Transistores</i>
<i>4004</i>	<i>1971</i>	<i>2.250</i>
<i>8008</i>	<i>1972</i>	<i>2.500</i>
<i>8080</i>	<i>1974</i>	<i>5.000</i>
<i>8086</i>	<i>1978</i>	<i>29.000</i>
<i>286</i>	<i>1982</i>	<i>120.000</i>
<i>386™</i>	<i>1985</i>	<i>275.000</i>
<i>486™ DX</i>	<i>1989</i>	<i>1.180.000</i>
<i>Pentium®</i>	<i>1993</i>	<i>3.100.000</i>
<i>Pentium II</i>	<i>1997</i>	<i>7.500.000</i>
<i>Pentium III</i>	<i>1999</i>	<i>24.000.000</i>
<i>Pentium 4</i>	<i>2000</i>	<i>42.000.000</i>

<i>Tecnologia</i>	<i>Ano</i>	<i>Conexão (bps)</i>
<i>Analógica</i>	<i>1985</i>	<i>9.600</i>
<i>Digital</i>	<i>1989-1994</i>	<i>256.000</i>
<i>Shared</i>	<i>1990-1993</i>	<i>1.500.000</i>
	<i>1996-1998</i>	<i>4.000.000</i>
	<i>1999-2000</i>	<i>20.000.000</i>
	<i>2001-2002</i>	<i>310.000.000</i>
	<i>2002-2003</i>	<i>622.000.000</i>
<i>Lambda</i>	<i>2003-2004</i>	<i>2.500.000.000</i>
	<i>2005</i>	<i>10.000.000.000</i>

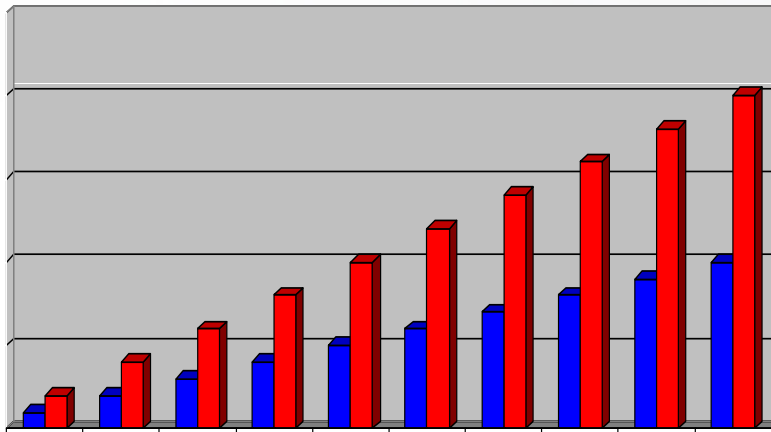
# Poder Computacional X Network



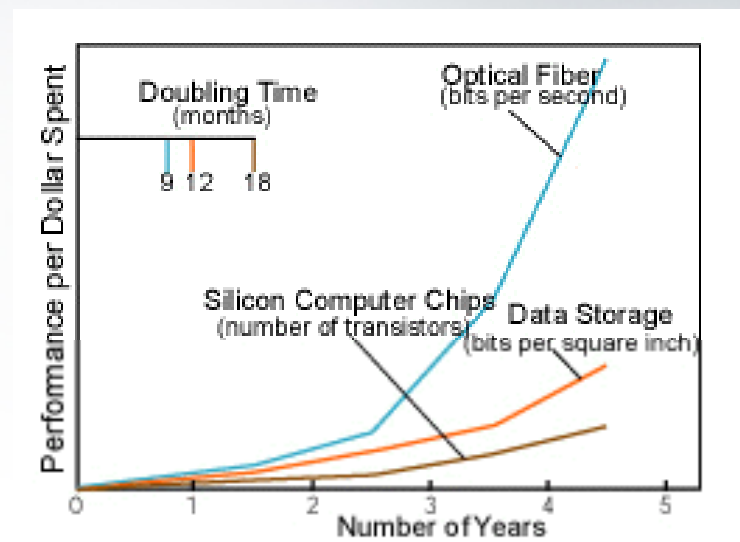
Capacidade dos **transistores** dobra a cada **18 meses**

Capacidade de **armazenamento** de dados dobra a cada **12 meses**

Banda de **transmissão de dados** dobra a cada **9 meses**

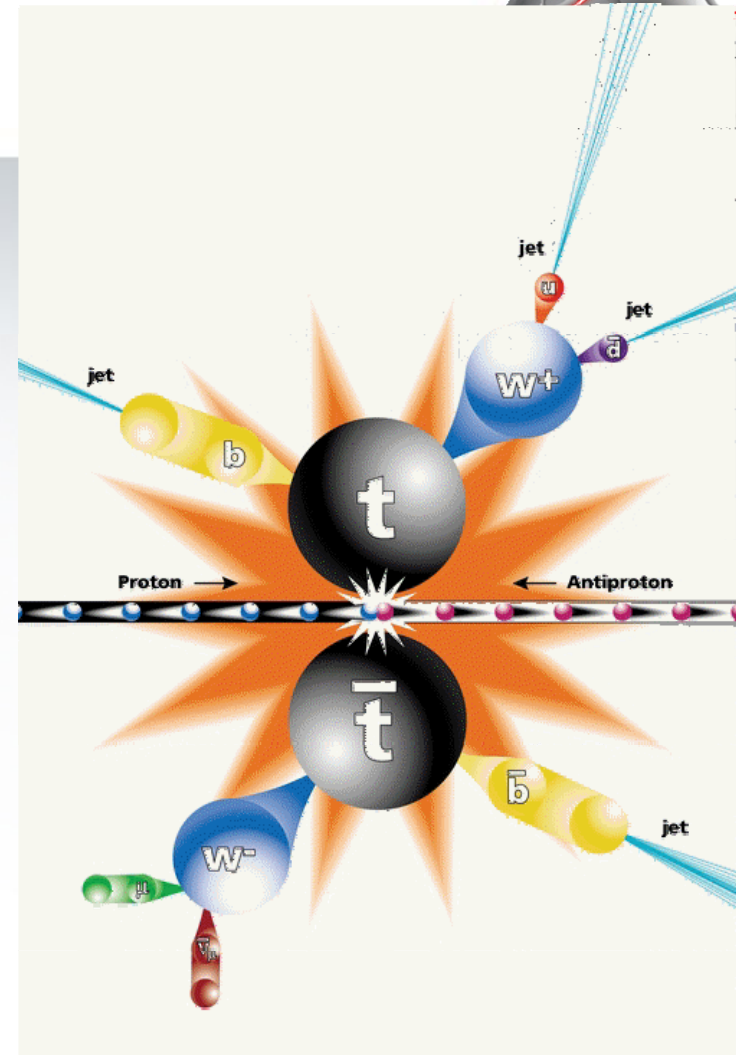
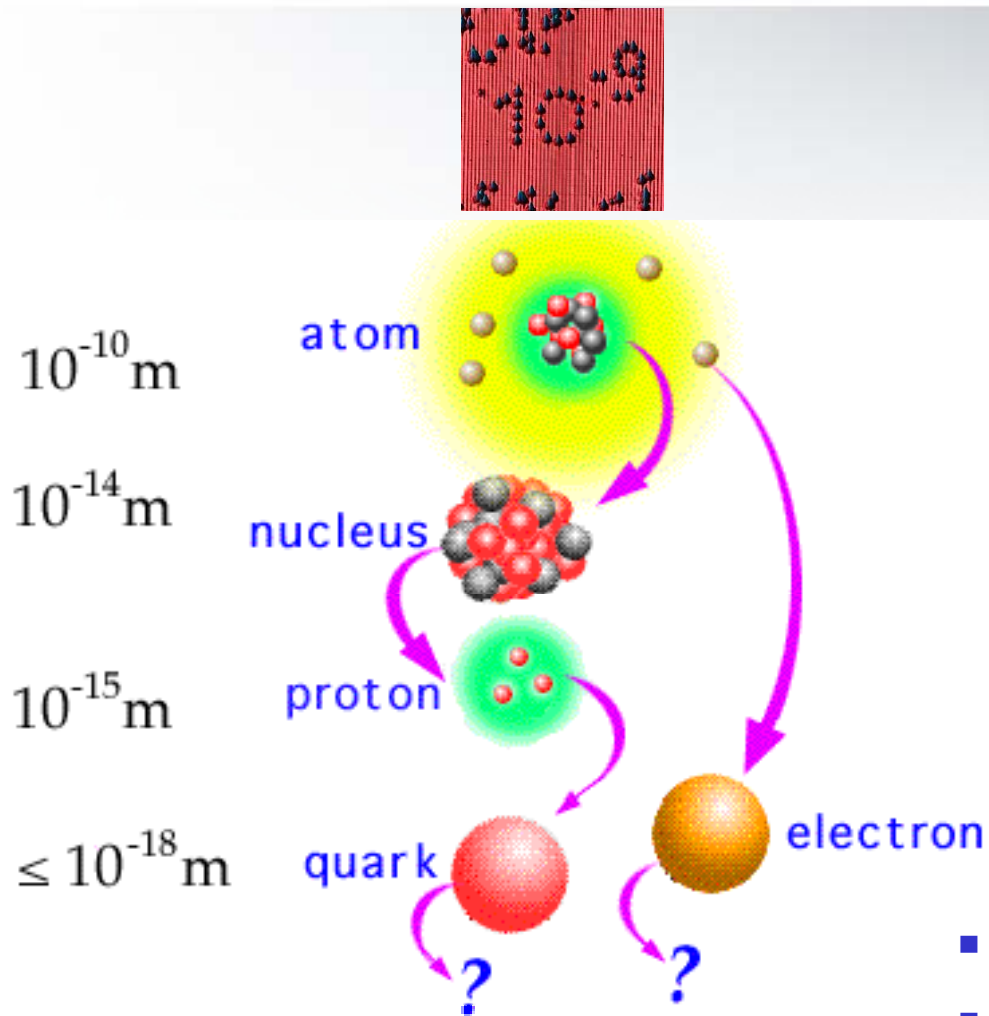


Significa que as redes evoluem  
**100 vezes** mais em 10 anos



E tornam-se cada vez mais  
baratas...

# Física de Altas Energias



- Pequenas distâncias são exploradas
- Novas partículas são produzidas

# Colaborações Internacionais



- **Grandes colaborações** internacionais. CMS:
  - 39 Países
  - 182 Instituições
  - 2972 Pesquisadores
- Enorme **complexidade** dos experimentos: detector, eletrônica e software
- Trabalho **colaborativo**: Físicos, Engenheiros e Cientistas da Computação
- Benefícios secundários: o **WWW** foi proposto no CERN para:
  - Permitir o acesso à informação dos experimentos de Altas Energias.
  - Disponibilizar facilmente novas informações.
  - Incorporar vários servidores de armazenamento de informação, permitindo acesso à informação dos vários experimentos.

# *Experimentos: Aceleradores*



Large Hadron Collider  
14 TeV  
27 km



# Uma avalanche de dados

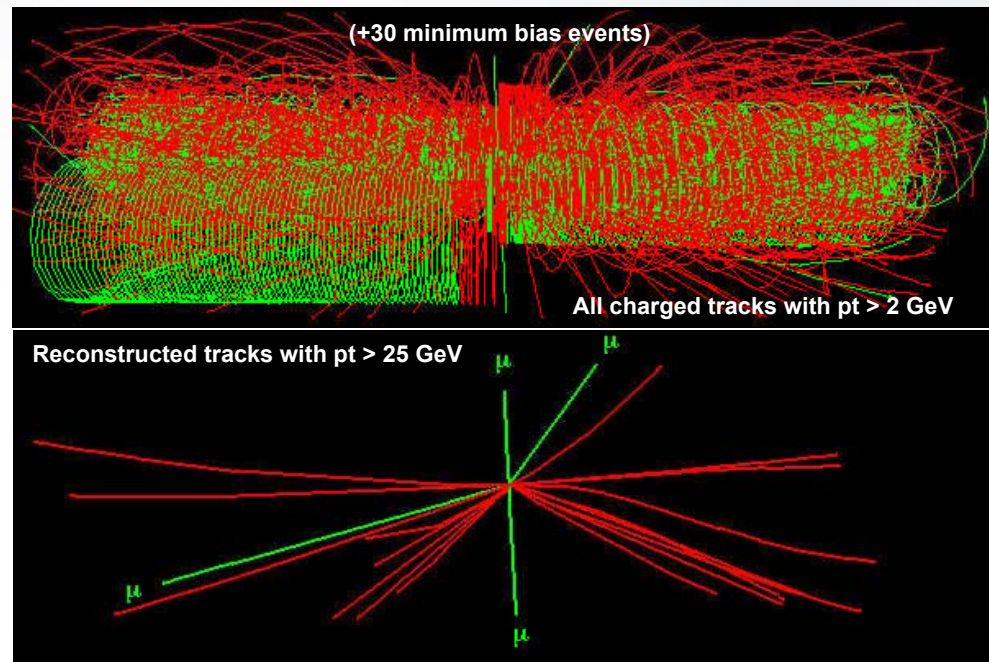


- Eventos são extremamente complexos
- Enorme quantidade de dados produzidos



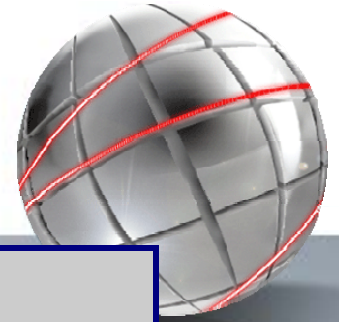
## LHC

- Dados
  - 10 PB / ano
- Usuários
  - > 5.000





# A Era do Exabyte

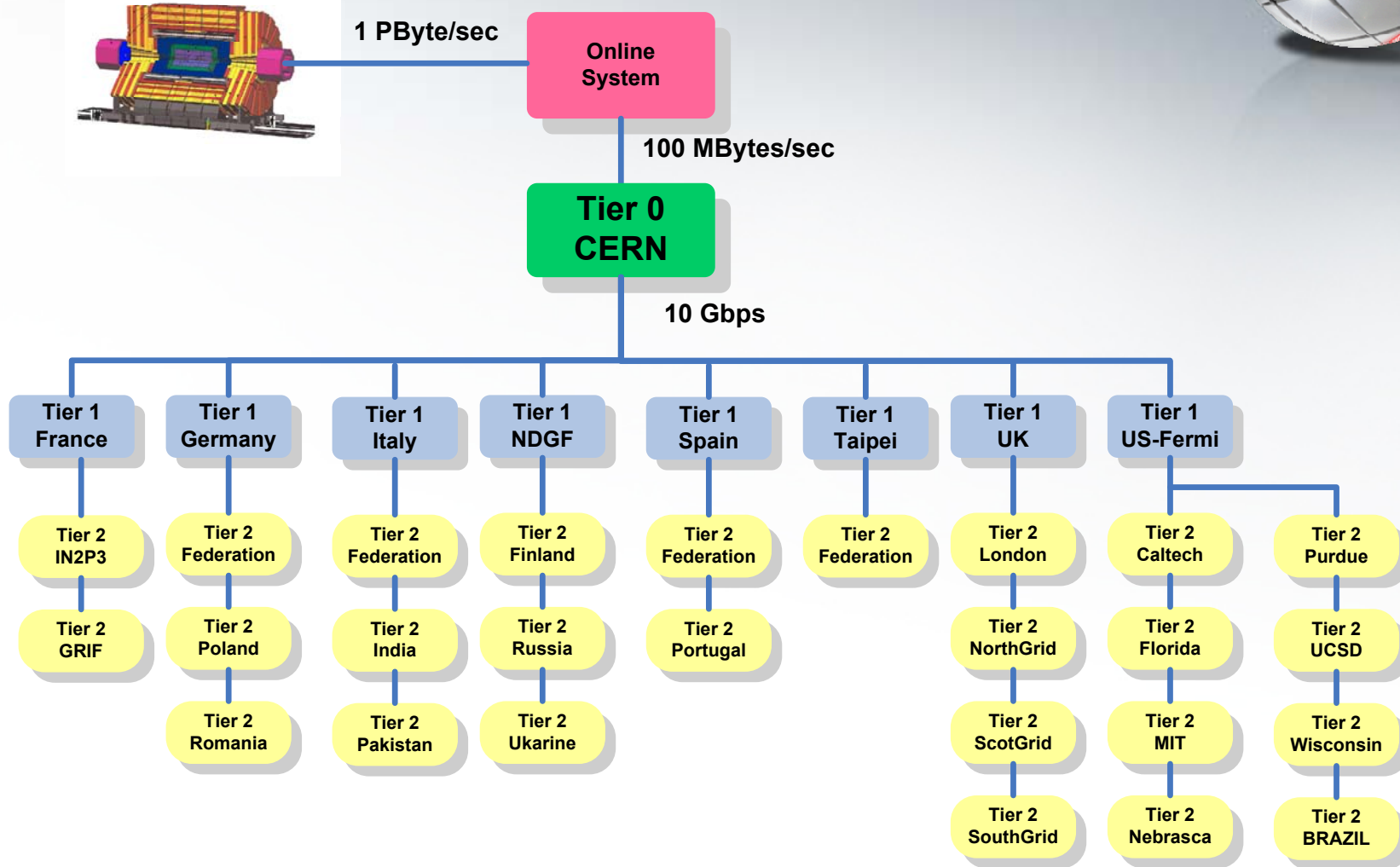


<b>1 Caráter (letra, número, etc)</b>	<b>1 byte</b>
<b>1/2 Página de Texto</b>	<b>1 KB (Kilobyte) = <math>10^3</math> bytes</b>
<b>1 Livro</b>	<b>1 MB (Megabyte) = <math>10^6</math> bytes</b>
<b>1 Sinfonia em Alta Fidelidade</b>	<b>1 GB (Gigabyte) = <math>10^9</math> bytes</b>
<b>1/20 da Biblioteca do Congresso Americano</b>	<b>1 TB (Terabytes) = <math>10^{12}</math> bytes</b>
<b>1/10 Toda Informação Existente na Web</b>	<b>1 PB (Petabyte) = <math>10^{15}</math> bytes</b>
<b>1/5 Toda Informação Gerada em 2002</b>	<b>1 EB (Exabyte) = <math>10^{18}</math> bytes</b>

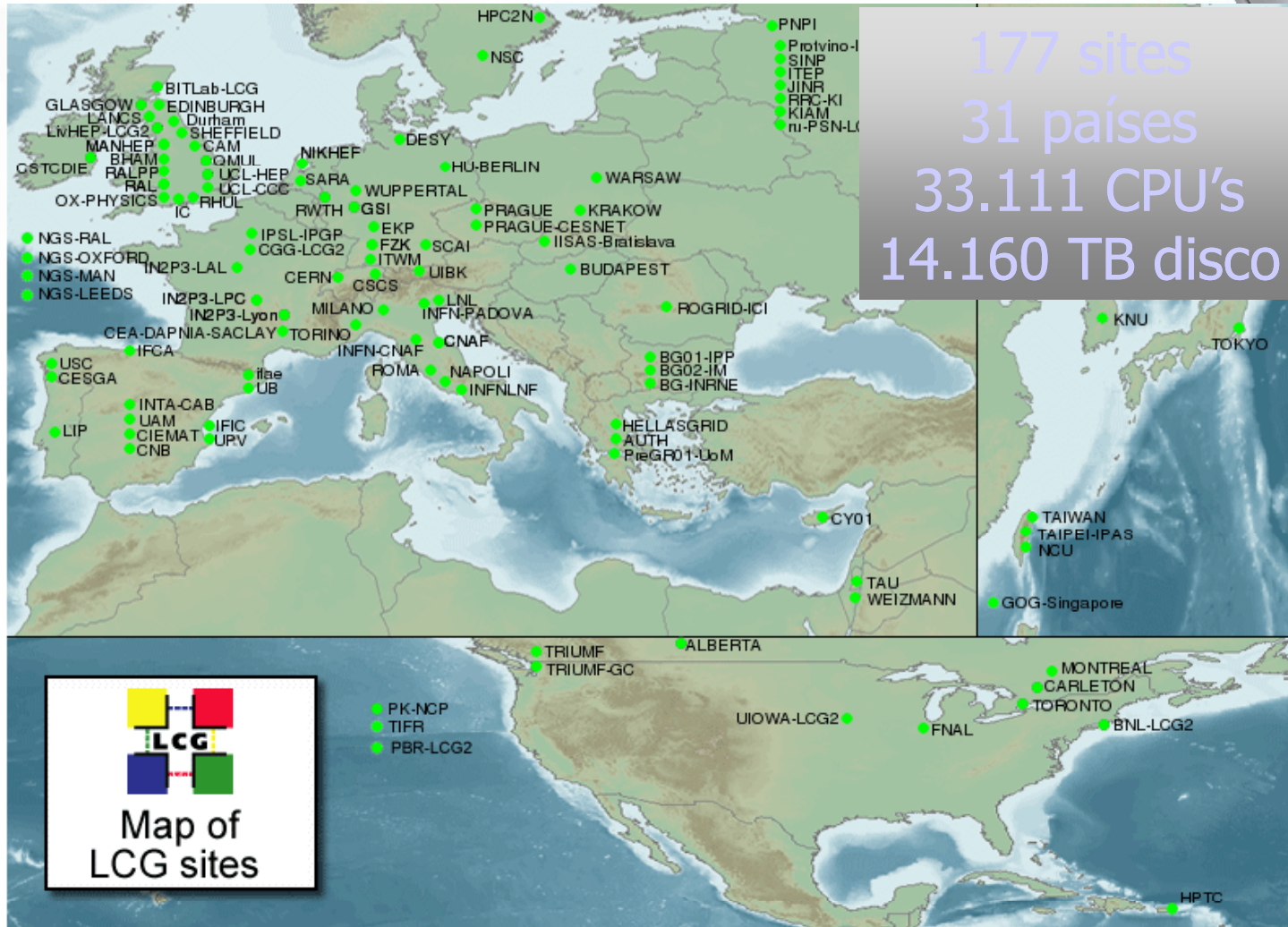


- LHC
  - 1 Exabyte de dados in 5–8 anos
  - Equivalente a 1,43 bilhões de CD's
    - Pilha de 1.857 km
    - 4.700 Pães de Açúcar
    - 210 Montes Everest

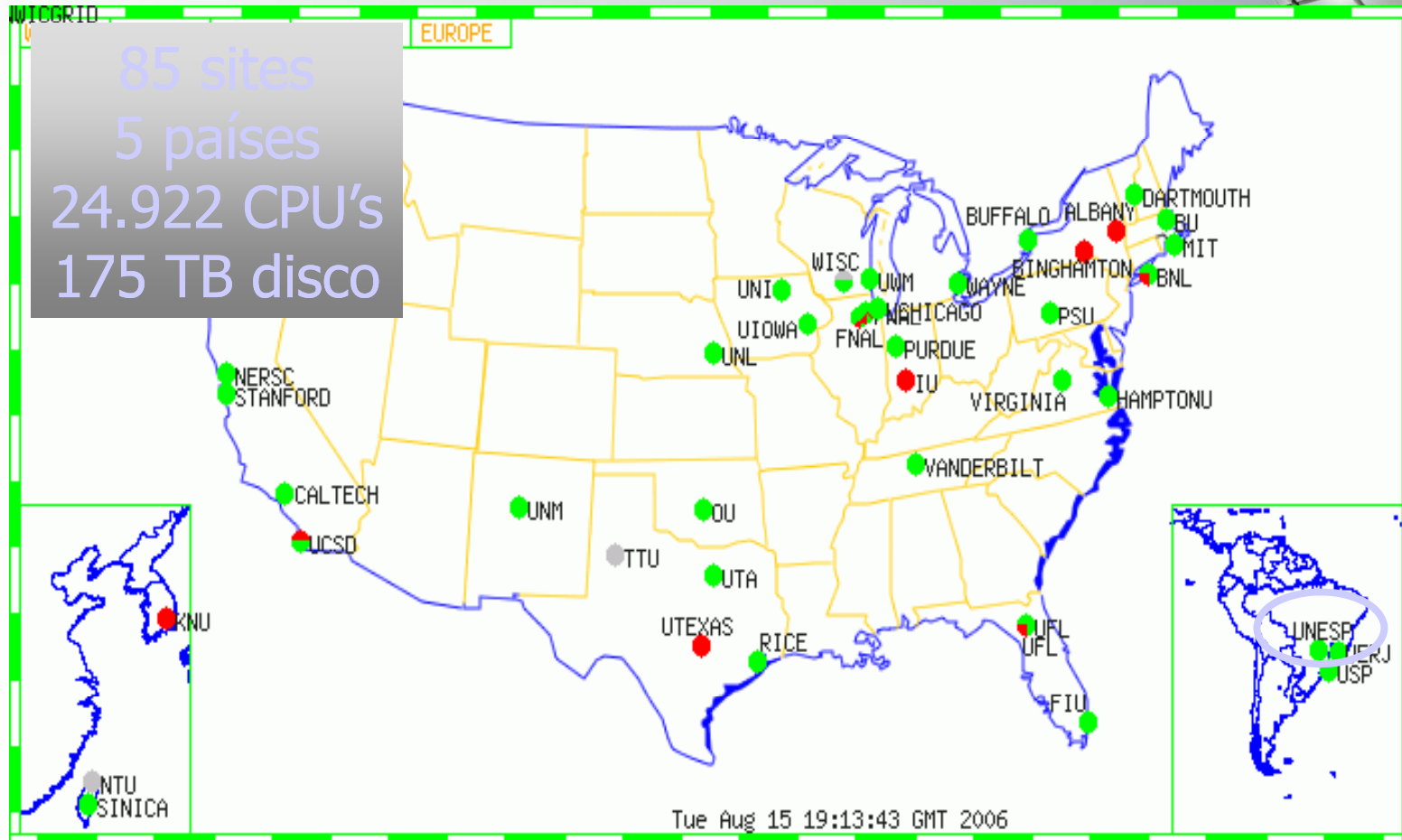
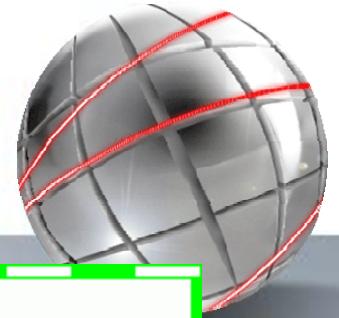
# Grid: Estrutura Hierárquica



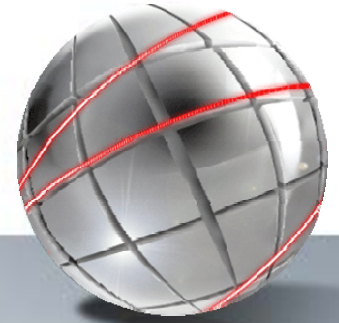
# Europa: LHC Computing Grid



# EUA: Open Science Grid



# SPRACE



# Reprocessamento de Dados do DØ

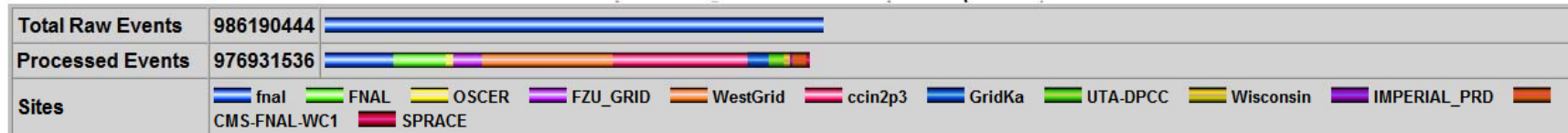


Dados são frequentemente reprocessados utilizando a versão mais recente do software de reconstrução

- **SPRACE**

- P17 Reprocessing (Março–Novembro/2005)

- Início em August 2005 = 10 milhões de eventos

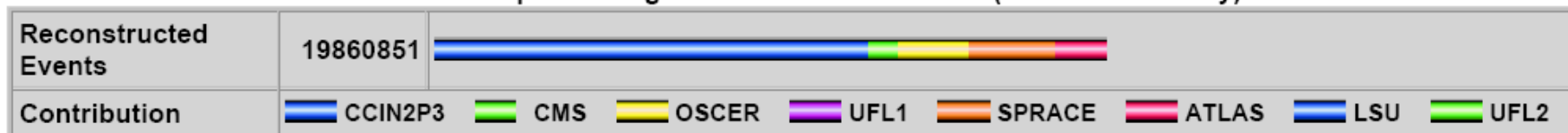


- P20 Reprocessing (Fevereiro–Abril/2007)

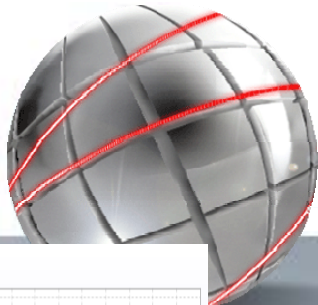
- 500 milhões de eventos a serem processados

- 2,300 CPU's necessárias: 30 s/evento @ 1 GHz CPU

P20.07.01 Reprocessing Status as of 20-Feb-2007 (Remote sites only)

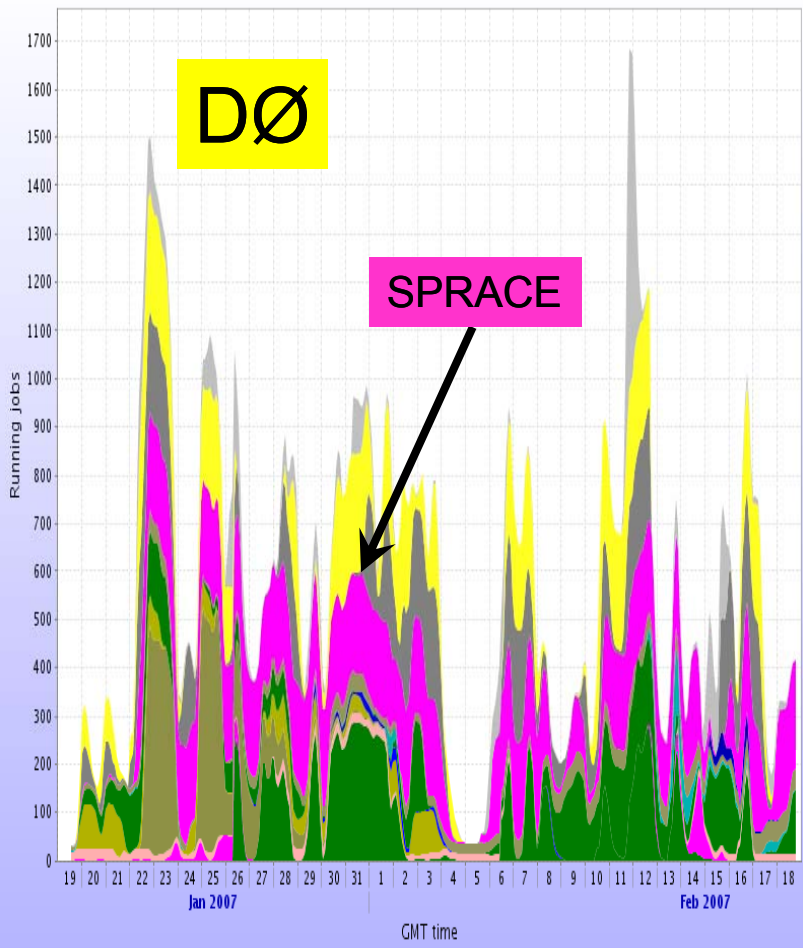






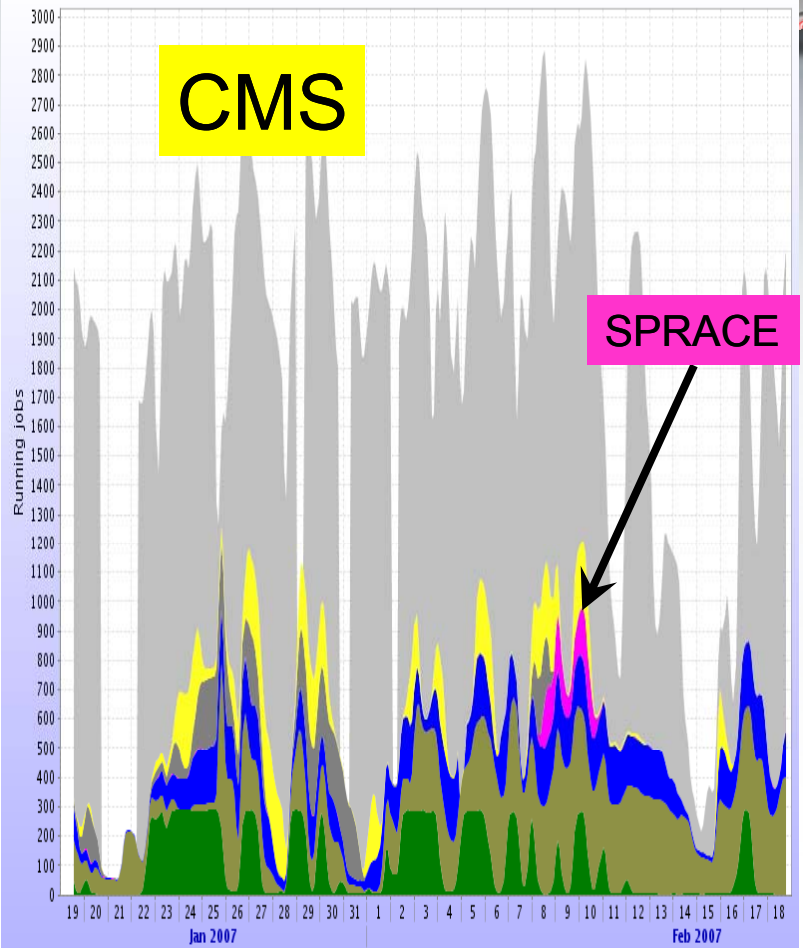
# Monitoramento (MonALISA)

Jobs status for DZERO VO



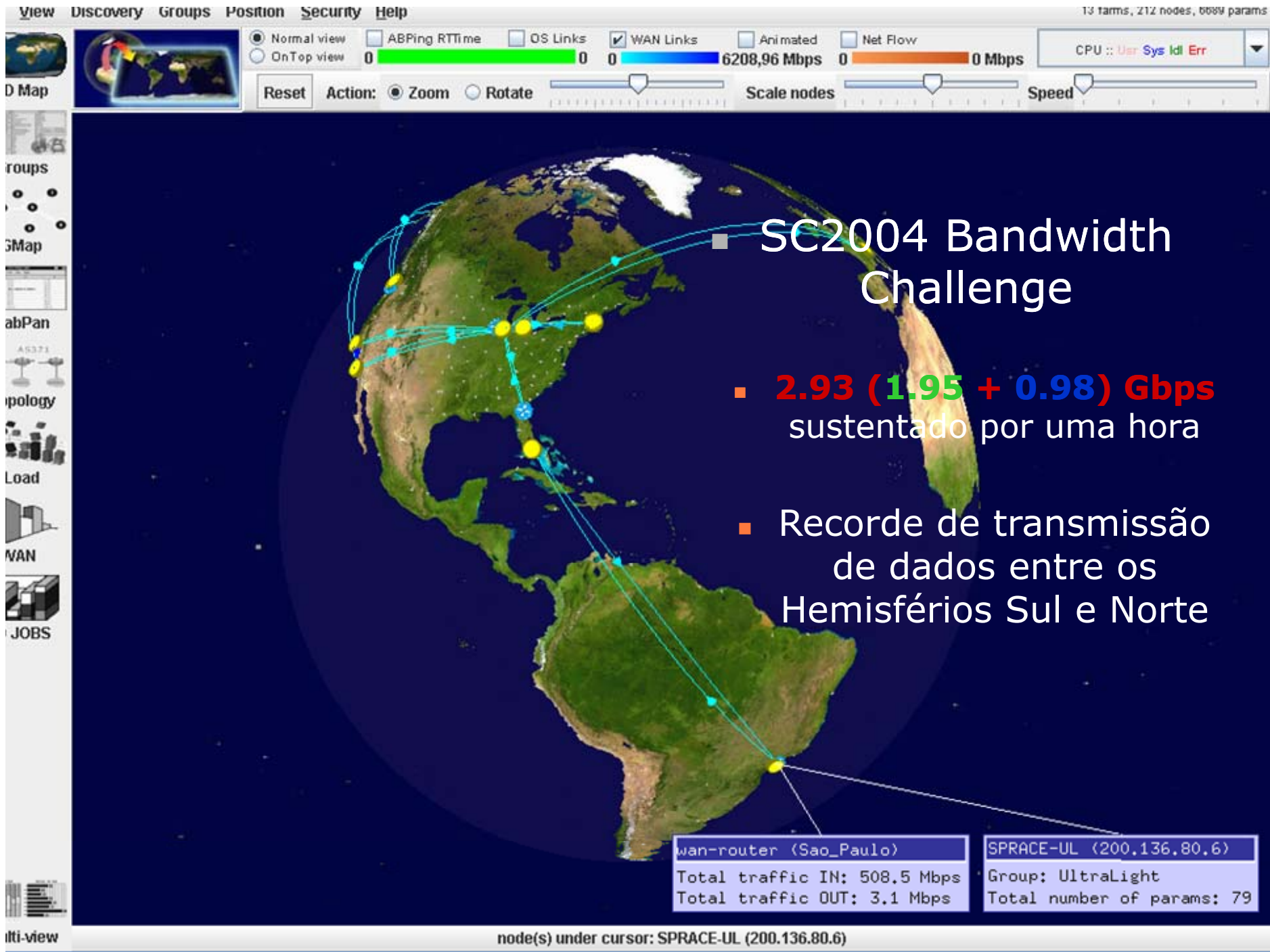
- ▲ CIT\_CMS\_T2
- ▲ FNAL\_FERMIGRID
- ▲ FNAL\_GPFARM
- ▲ LTU\_CCT
- ▲ LTU\_OSG
- ▲ MIT\_CMS
- ▲ NERSC-PDSF
- ▲ osg-gw-2.t2.ucsd.edu
- ▲ OU\_OSCER\_ATLAS
- ▲ OU\_OSCER\_CONDOR
- ▲ OUHEP\_OSG
- ▲ Purdue-RCA
- ▲ SPRACE
- ▲ UFlorida-IHEPA
- ▲ UFlorida-PG
- ▲ USCMS-FNAL-WC1-CE

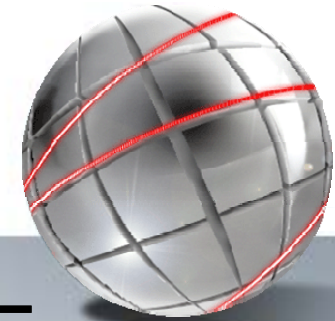
Jobs status for CMS VO



- ▲ CIT\_CMS\_T2
- ▲ MIT\_CMS
- ▲ osg-gw-2.t2.ucsd.edu
- ▲ Purdue-RCA
- ▲ SPRACE
- ▲ UFlorida-IHEPA
- ▲ UFlorida-PG
- ▲ USCMS-FNAL-WC1-CE



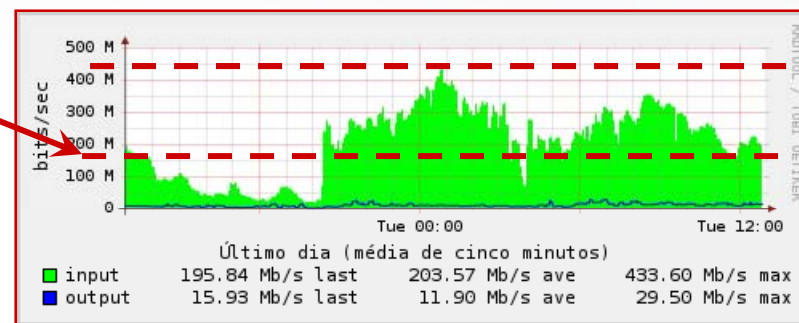
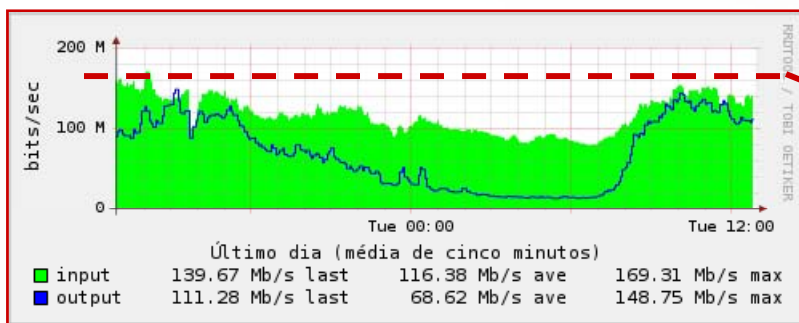
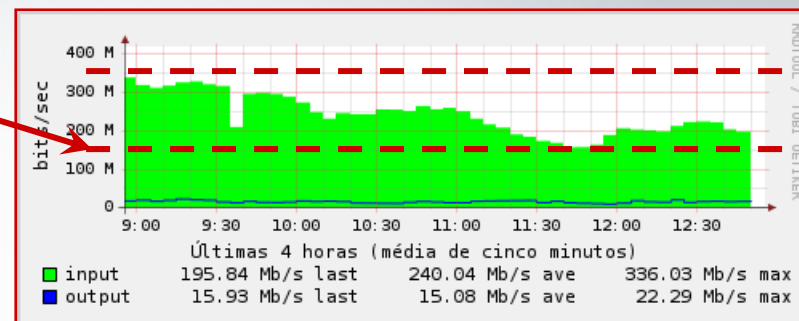
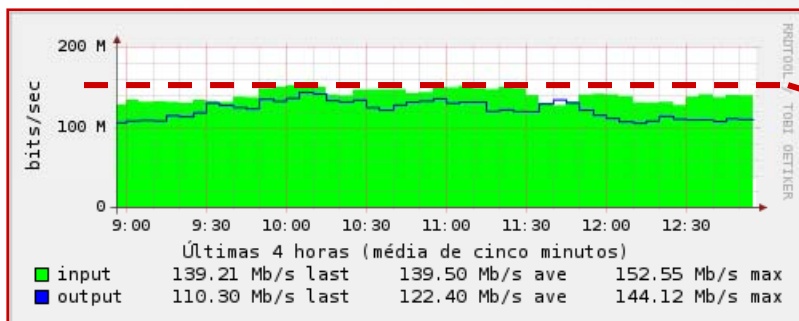




# Tráfego UNESP X SPRACE

## UNESP

## SPRACE

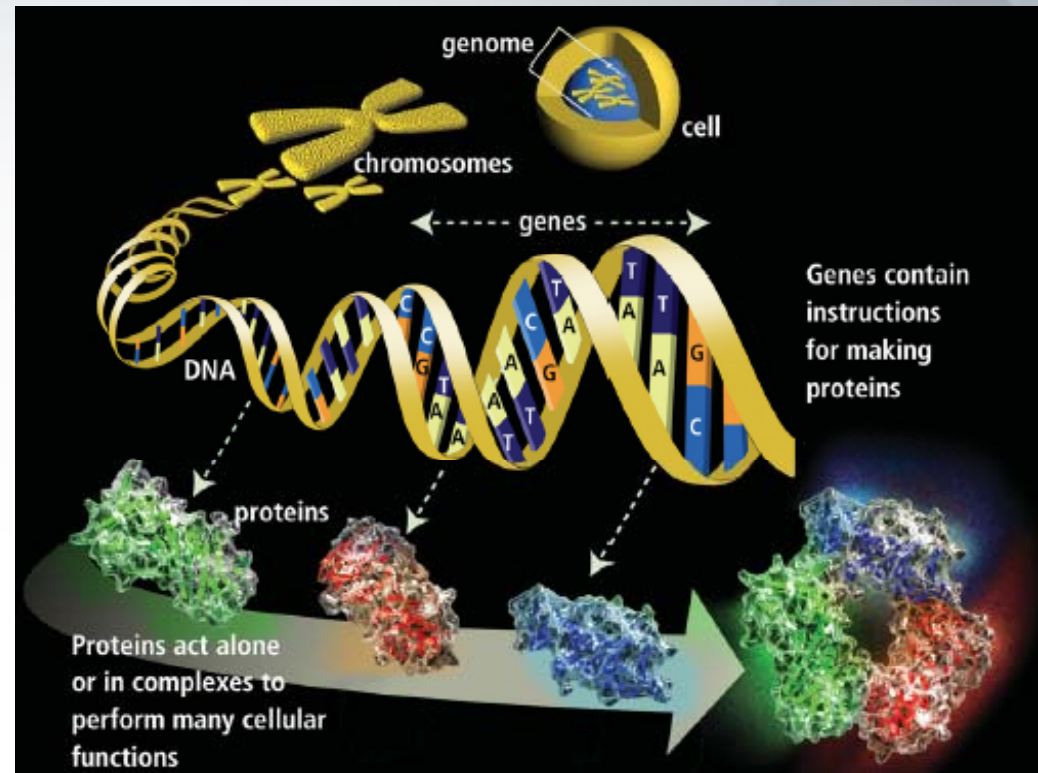


20/Mar/2007

# Genômica e Proteômica



- **Proteínas**
  - Responsáveis pelas funções vitais
  - **Função biológica** é determinada pela **estrutura 3D** (enovelamento)
  - Estrutura é **estabelecida por comparação das cadeias** disponíveis nos bancos de dados.
- **Protein Data Bank**
  - 25.000 estruturas 3D
  - 300 PC's/um ano
- **Encyclopedia of Life**
  - Catálogo do proteoma completo de todas as espécies vivas.



# Química Combinatória

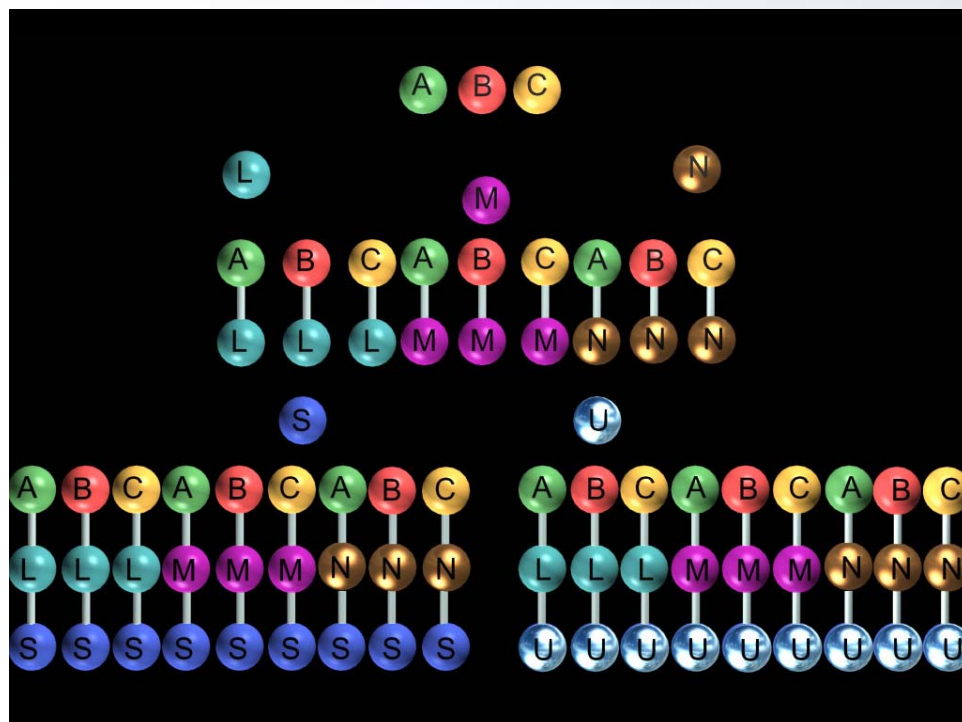


Método **rápido e barato** de sintetizar um grande número de moléculas com propriedades desejadas:

- Fármacos
- Catalisadores
- Polímeros
- Novos materiais
- Pigmentos
- Defensivos agrícolas.

Split & Mix:

- $3 \times n$  reações  $\rightarrow 3^n$  compostos
  - Triagem de desempenho
- Identificação do componente ativo



# Mamografia

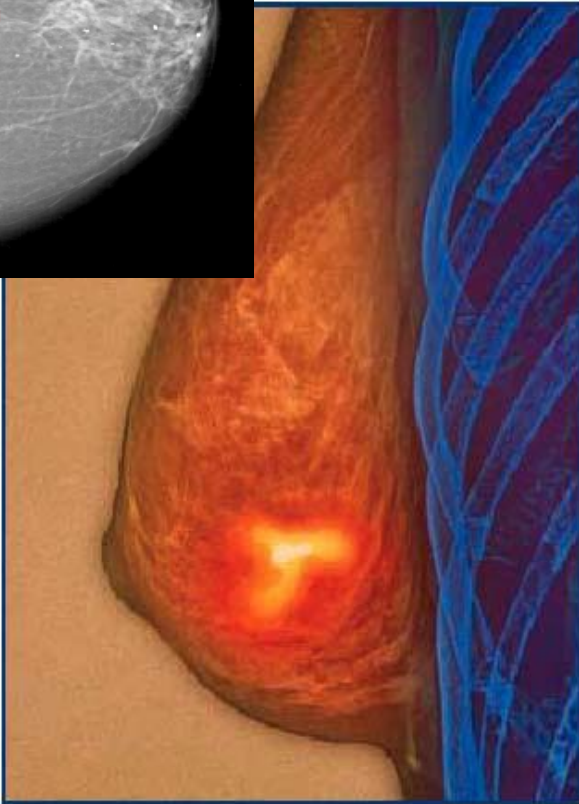
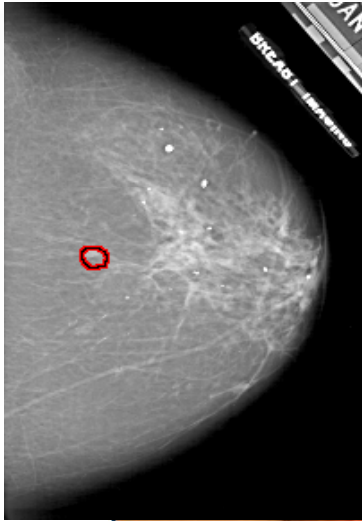


IMAGE © C. BURBERGPHOTO RESEARCHERS



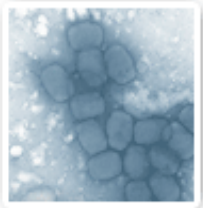
Primeiro sinal de câncer de mama:

- **Depósitos de cálcio**
  - Algumas dezenas de microns
    - 120 MB / exame

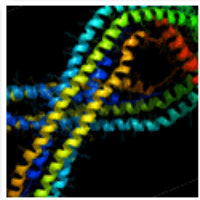
Poucos especialistas

Imagens heterogêneas

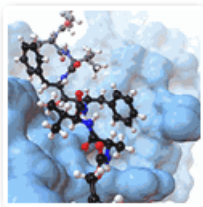
Grandes bancos de dados



**Varíola:** busca de drogas para controle da **varíola** é acelerado pelo uso do grid.



**Enovelamento de Proteínas Humanas (Nov/04) :** identificando as proteínas que compõe o Proteoma Humano pode-se buscar tratamento para doenças como o **câncer, HIV/AIDS, SARS e malaria**.



**FightAIDS@Home (Nov/05) :** uso de métodos computacionais para identificar drogas com as características necessárias para bloquear protease do **HIV** ("Structure-Based Drug Design").



**Enovelamento de Proteínas Humanas 2 (Jun/06) :**  
Objetivos: obter estruturas com maior resolução para proteínas específicas; explorar a capacidade de predição dos softwares .



**Help Defeat Cancer (Jul/06)**

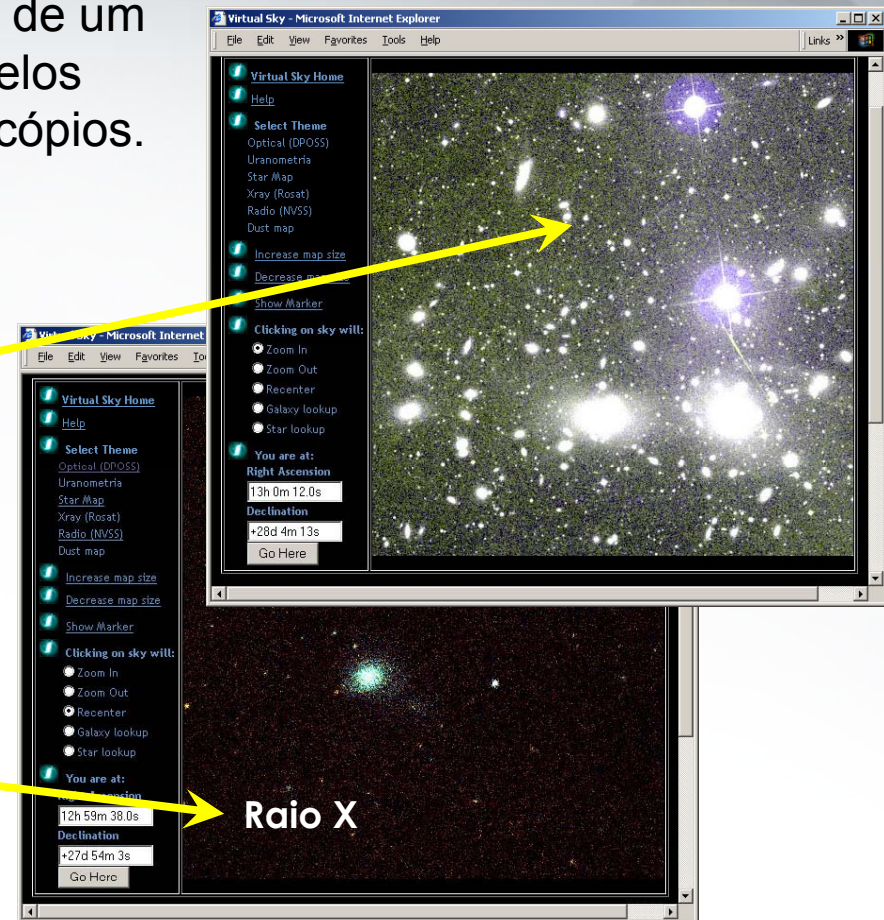
exame de tecidos para melhorar o tratamento do câncer através do diagnóstico correto e precoce.

# National Virtual Observatory



Ferramentas para localizar, acessar e analisar dados astronômicos de um **catálogo universal** e comparar modelos teóricos com as observações dos telescópios.

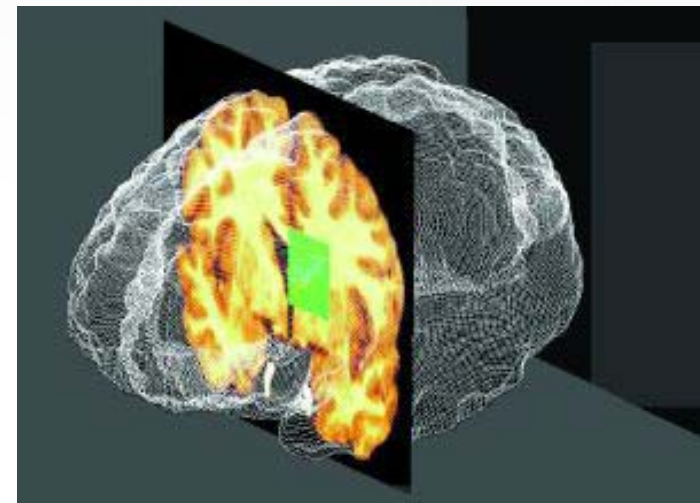
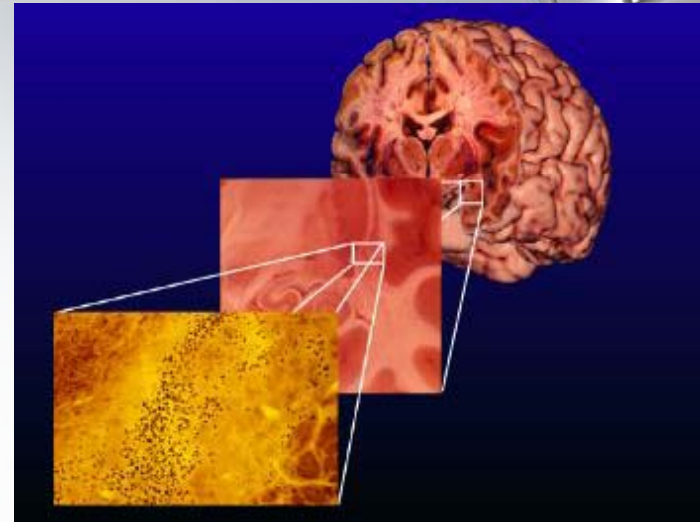
2008: 10 PB/ano



# Biomedical Informatics Research Network

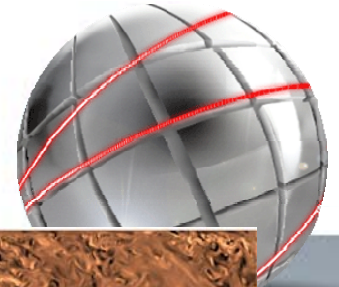


- **Imagens cerebrais** fornecem informação que possibilitam desenvolver terapias para **desordens neurológicas**:
  - Esclerose múltipla
  - Esquizofrenia
  - Alzheimer
  - Parkinson
- Colaboração de dezenas de laboratórios
- Amostragem de grandes populações
- 400 TB de dados: mais imagens com maior resolução

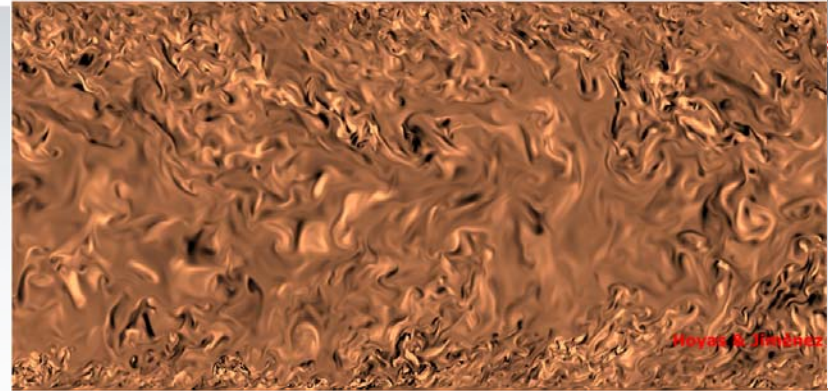




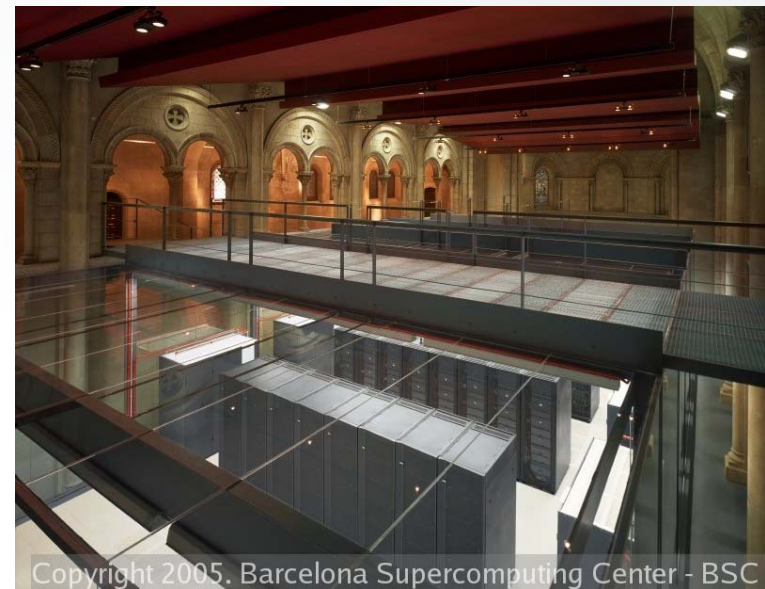
# Fluxo Turbulento



- Fluxo turbulento ocorre para altos números de Reynolds (força inercial  $\gg$  força viscosa): redemoinhos, vórtices, etc



- $R_e = 2.000$  :
  - melhor cálculo executado até hoje
  - Mare Nostrum (5º do mundo)
  - 10.240 processadores
  - Capela da Torre Girona
- Output: 25 TB de dados



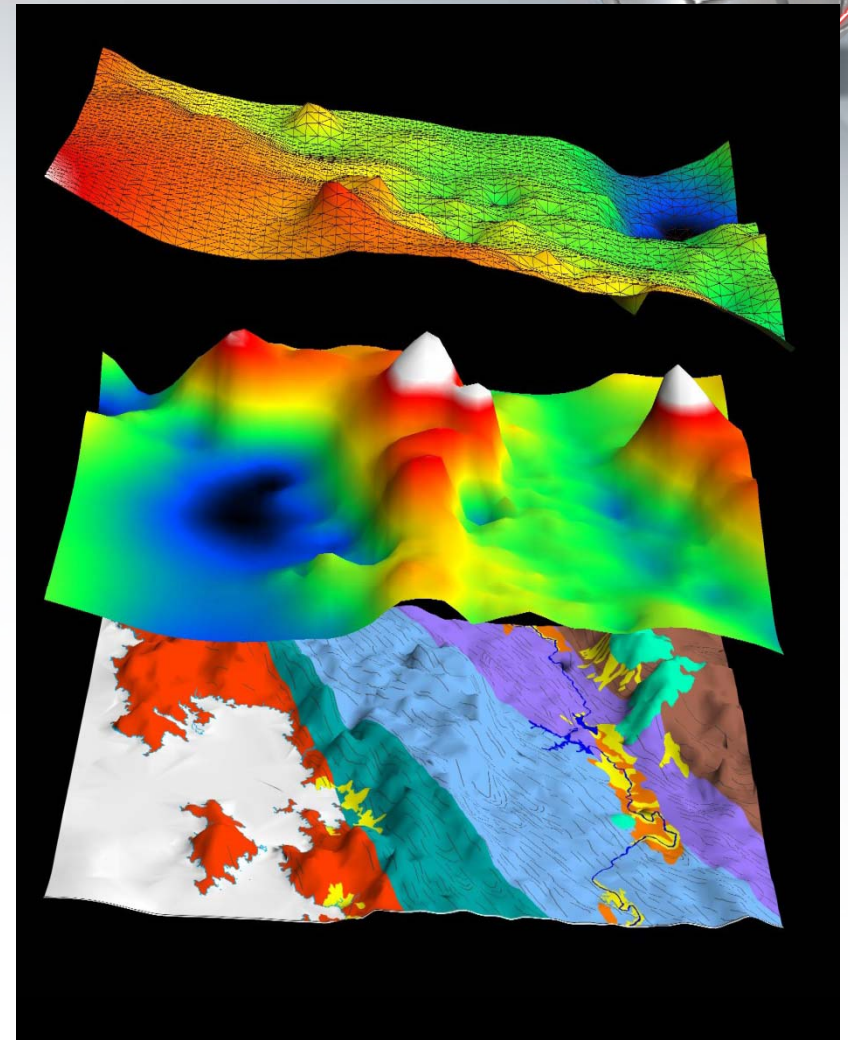
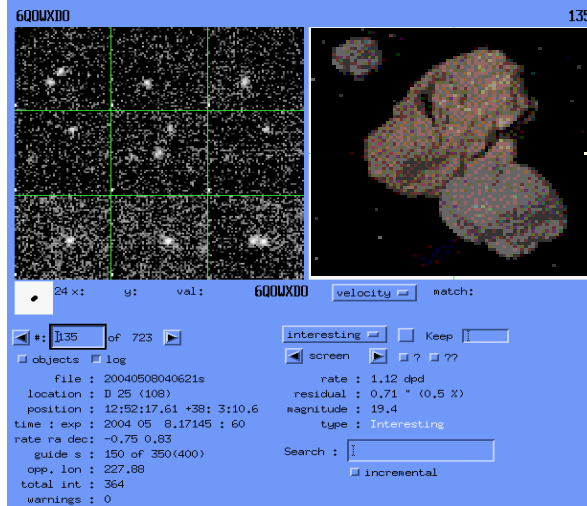
Copyright 2005. Barcelona Supercomputing Center - BSC

Capilla de la Torre Girona



# E Muito Mais...

- Simulação de Terremotos e da Dinâmica Geológica
  - Pesquisas de Clima
  - Desenho de Superfícies Aerodinâmicas e Aeronaves
- Rastreamento de asteróides



# GridUNESP



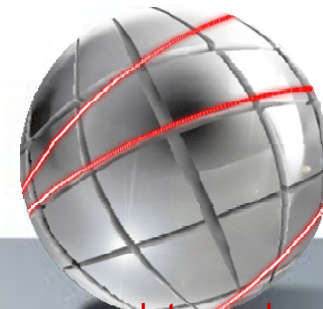
- **UNESP : Estrutura multicampi**
  - Perfil ideal para implementação da arquitetura Grid de processamento distribuído:
    - Distribuição eqüitativa dos recursos
    - Acesso de todos à infra-estrutura computacional compartilhada
    - Acompanhamento dos avanços mais recentes em tecnologia da informação
- **Março 2004 → Identificação dos grupos de pesquisa com demanda de recursos computacionais de alto desempenho:**
  - PROPP: Programa de Integração da Capacidade Computacional da UNESP
    - Projetos de Pesquisa
    - Levantamento da Infra-estrutura de Rede e das Necessidades de Processamento e Armazenamento de Dados
- **Maio 2004: Reunião de Trabalho**
  - Apresentação dos projetos
  - Discussão sobre programa
  - Preparação do projeto científico global

# Algumas Iniciativas Americanas



- **Harvard (Crimson Grid)**
  - <http://www.harvard.edu/>
  - Terremotos, Tumores cancerígenos, Partículas subatômicas, Modelos oceanográficos
- **Wisconsin (GLOW)**
  - <http://www.cs.wisc.edu/condor/glow/>
  - Engenharia, Genômica, Nanotecnologia, Altas Energias, Ciência da Computação
- **Texas (UTGrid)**
  - <http://www.utgrid.utexas.edu/>
  - Pesquisa acadêmica e educação
- **Michigan (MGRID)**
  - <http://www.mgrid.umich.edu>
  - Bio-informática, Física e HPC
- **Buffalo (ACDC)**
  - <https://grid.ccr.buffalo.edu/>
  - Biomedicina, Engenharia de Terremotos, Química, Ciências da Terra, Hidrodinâmica, Estrutura molecular
- **Iowa (HawkGrid)**
  - <http://grow.its.uiowa.edu/>
  - Física, Astronomia, Geografia, Radiologia, Estatística e Engenharia.

# Projeto Científicos



- São Paulo
  - Simulações Numéricas de Larga Escala em Física, IFT
  - SPRACE e HEP Grid-Brazil, IFT
- Araraquara
  - Caracterização de Novos Materiais e Desenvolvimento de Ligas Especiais de Titânio, IQ
  - Bioprospecção Químico-Farmacológica para Obtenção de Bioprodutos, IQ
- Rio Claro
  - UNESP-Gridgene, DEMAC
  - Aspectos Termodinâmicos no Processo de Enovelamento de Proteínas, IGCE – Física
  - Modelagem Tridimensional de Dados Geológicos, Fisiográficos, Hidrográficos e Geoambientais, IGCE – Petrologia e Metalogenia
- Botucatu
  - Definição de Regiões Genômicas Críticas Envolvidas na Progressão, Resposta a Tratamento e Metástase em Tumores Humanos, Medicina
- Bauru
  - Dinâmica de Vórtices em Supercondutores de Alta Temperatura Crítica do Tipo II, Física
  - Estudo Mecânico Quântico de Processos Não Radiativos em Moléculas de Interesse Biológico, Química
  - Estudo Numérico de Sistemas de Elétrons Fortemente Correlacionados em Baixa Dimensionalidade, Física
  - Modelagem das Propriedades Elétricas de Cerâmicas Semicondutoras, Matemática
  - Caracterização Teórica das Propriedades Elétricas e Canalizadoras de Óxidos, Matemática
- São José do Rio Preto
  - Genoma Estrutural - Rede de Biologia Molecular Estrutural, IBILCE – Física
  - Implementação Otimizada de Algoritmos Estocásticos para Alinhamento Múltiplo de Sequências em Clusters Beowulf, IBILCE – Computação Estatística
- Ilha Solteira
  - Métodos Analíticos e Numéricos em Engenharia Mecânica, Eng. Mecânica

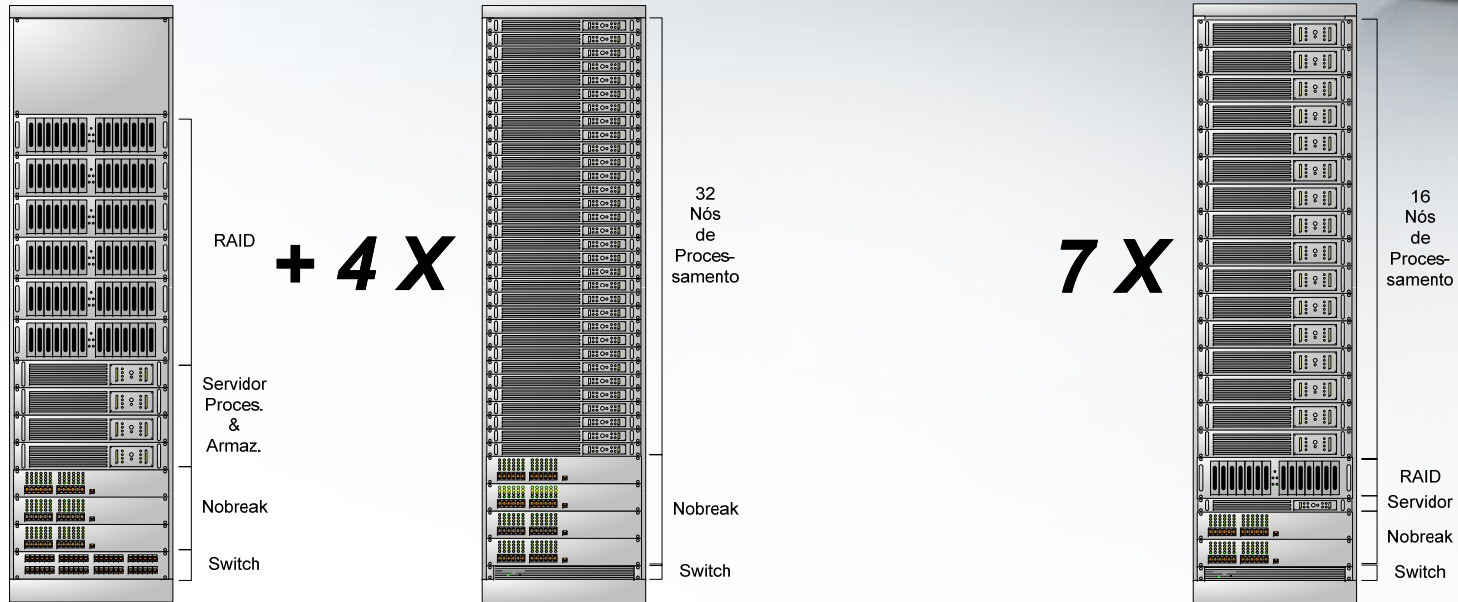


# ***ProInfra (MCT/FINEP)***



Maior projeto individual aprovado no Brasil  
(R\$ 4.415.477,00)

# Hardware



## Cluster Central

1 Processing Server + 3 Storage Servers  
128 two Quad Core Intel Xeon processor (InfiniBand)  
RAID: 64 X 500 GB = 32 TB

## Clusters Distribuídos

1 Server  
16 two Quad Core nodes  
RAID = 4 TB

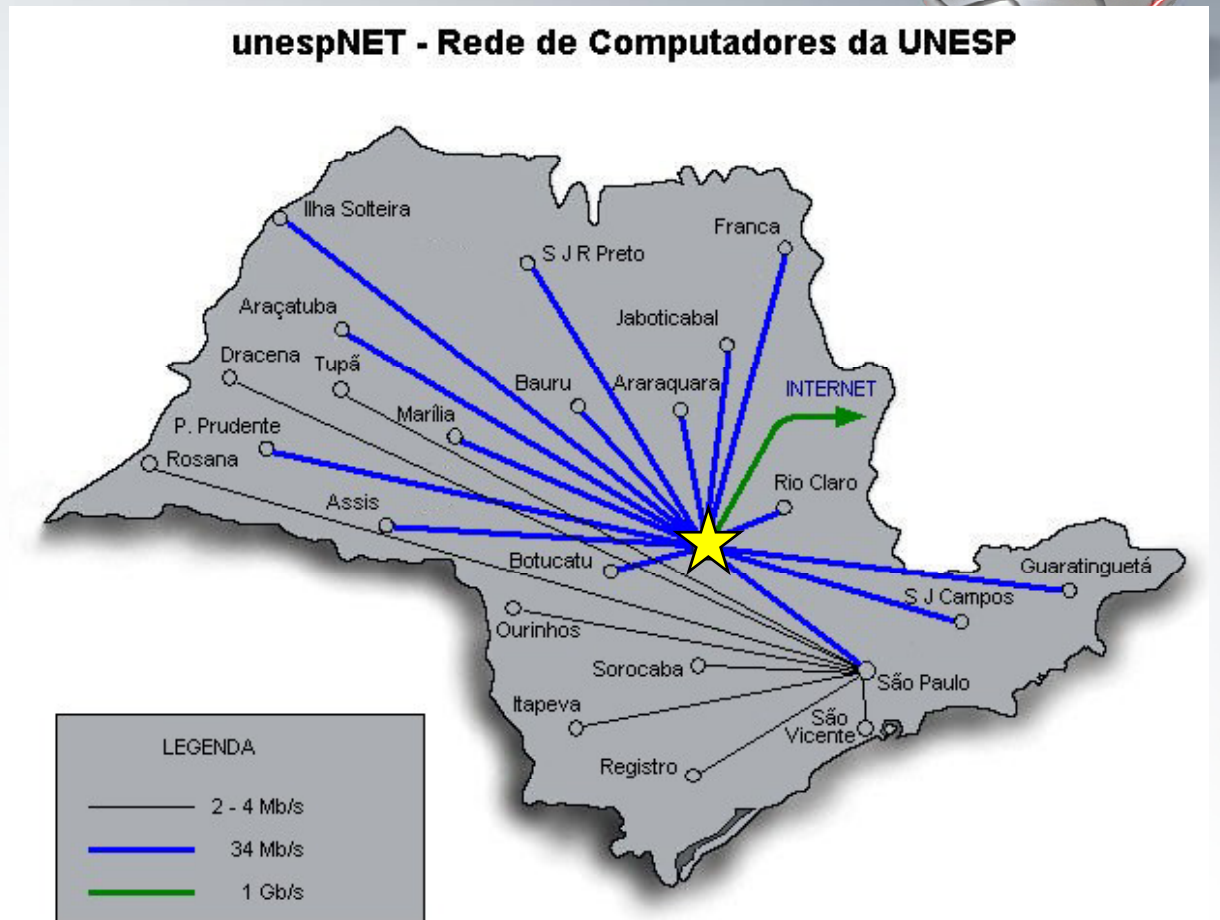




# unespNET



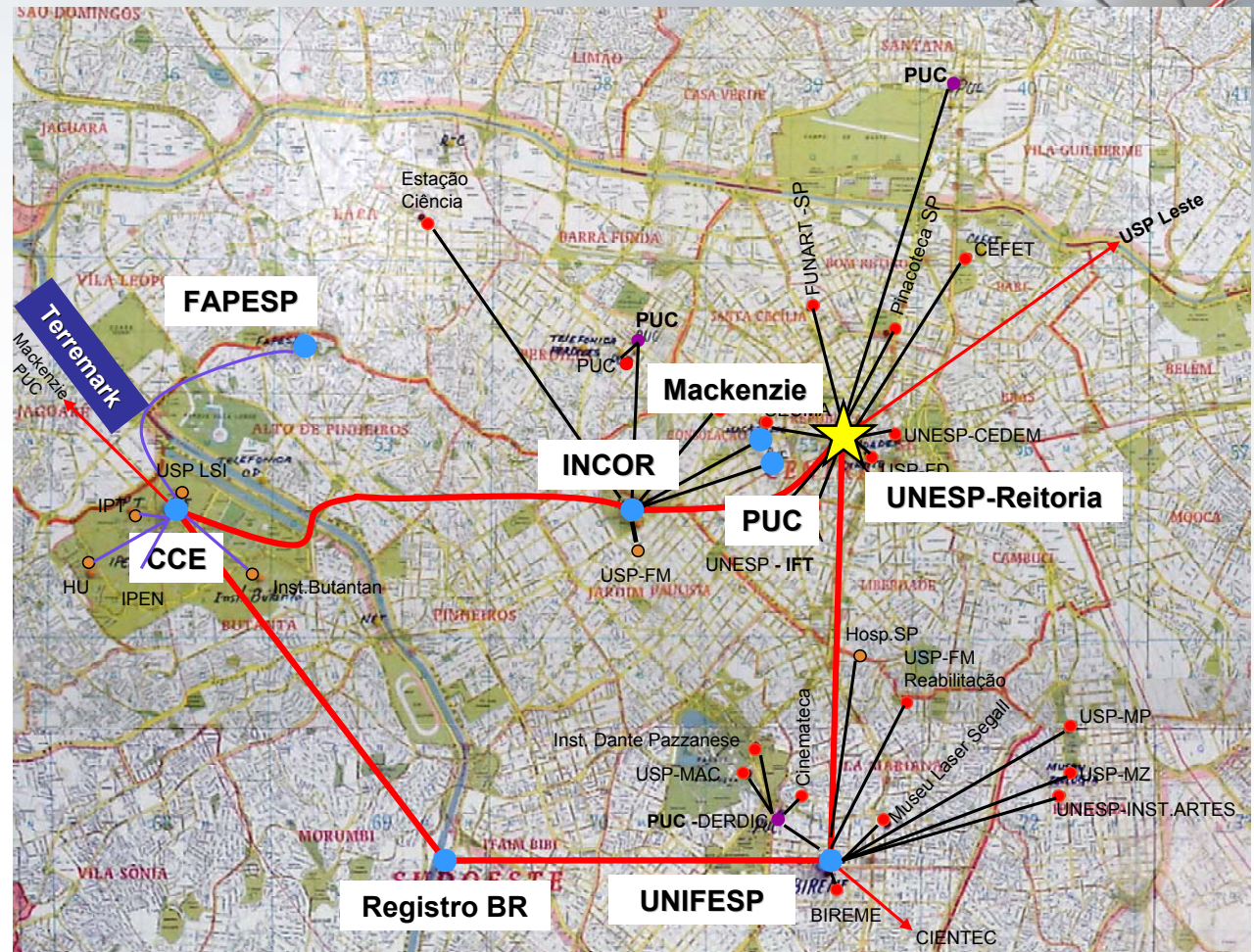
- **Integra:**
  - 40 campi
  - 23 cidades
- **Conexão:**
  - WAN: 34 Mb/s:
  - LAN: > 100 Mb/s:
- **Topologia: estrela**
  - Nó central:  
NAP do Brasil.



# MetroSampa



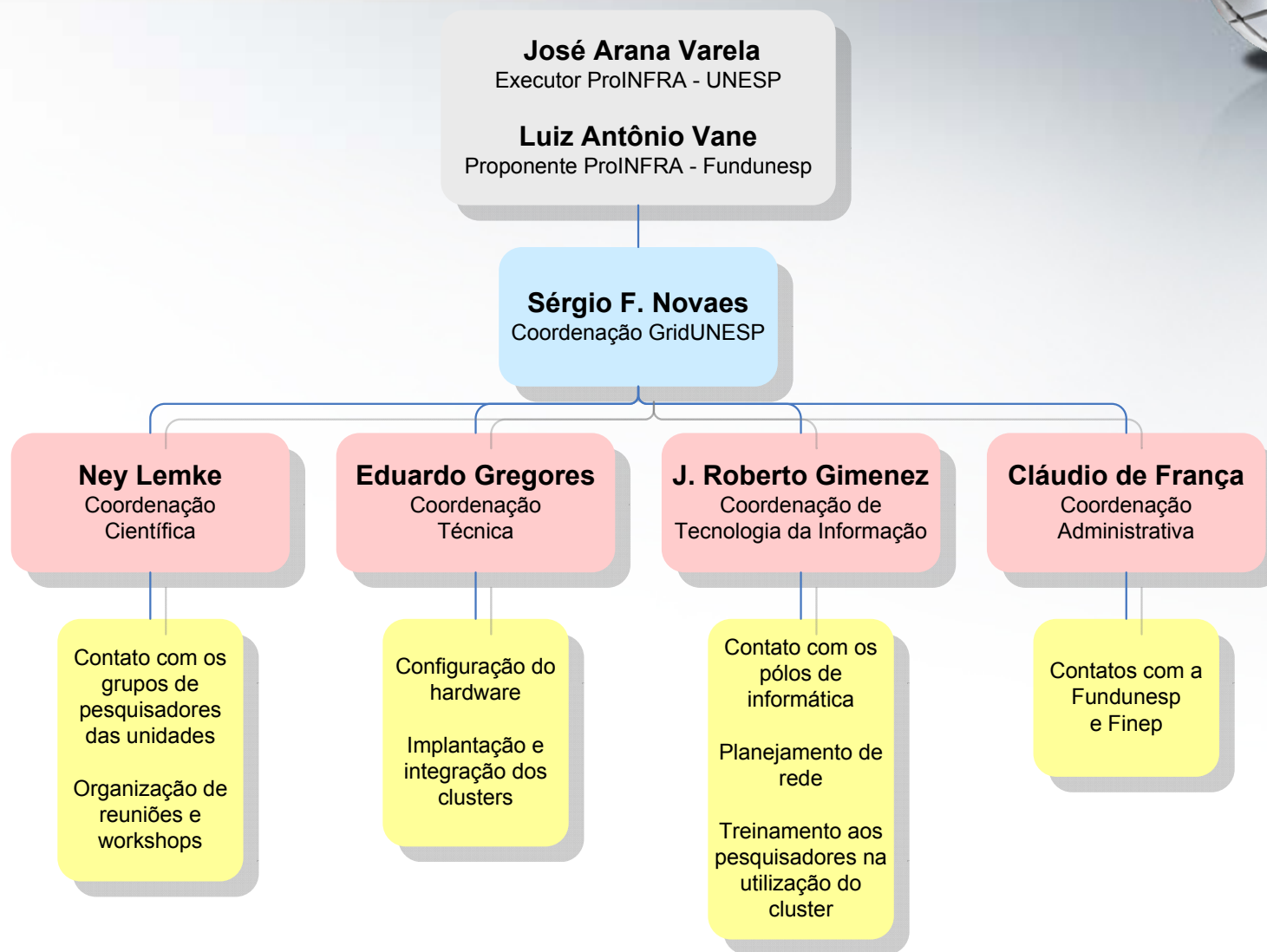
- ANSP**  
Academic Network at Sao Paulo
- BIREME**  
Centro Latino-Americano e do Caribe de  
Informação em Ciências da Saúde
- CEFET**  
Centro Federal de Educação Tecnológica
- IButantan**  
Instituto Butantan
- InCOR**  
Fundação Zerbini/Instituto do Coração
- IPEN**  
Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares
- IPT**  
Instituto de Pesquisas Tecnológicas do Estado  
de São Paulo
- Mackenzie**  
Universidade Presbiteriana Mackenzie
- PUC**  
Pontifícia Universidade Católica
- RNP**  
Rede Nacional de Ensino e Pesquisa
- UNESP**  
Universidade Estadual Paulista
- UNIFESP**  
Universidade Federal de São Paulo
- Escola Paulista de Medicina
- USP**  
Universidade de São Paulo







# Organograma



# Desafios



- Implementar a estrutura física em todo Estado de São Paulo: **apenas primeiro passo**
- **Desafio:**
  - Tornar o GridUNESP uma estrutura realmente **útil para toda a universidade**
    - Construção de uma **Portal** para submissão de jobs
    - Fornecer **treinamento** adequado ao pesquisadores
    - Implantar conexão de **rede** compatível com Grid
    - Dar **manutenção** para o sistema
    - Fornecer **suporte** permanente aos usuários
    - Incorporar demais recursos** computacionais da universidade

# Parceria com o Open Science Grid



- Grid and network organizations, international, national, regional and campus grids partners:
  - Data Intensive Science University Network (DISUN)
  - Enabling Grids for E-Science (EGEE)
  - Grid Laboratory of Wisconsin (GLOW)
  - Grid Operations Center at Indiana University
  - Grid Research and Education Group at Iowa (GROW)
  - Nordic Data Grid Facility (NordusGrid)
  - Northwest Indiana Computational Grid (NWICG)
  - TeraGrid
  - Texas Internet Grid for Research and Education (TIGRE)
  - TWGrid (Academica Sinica Grid Computing)
  - Worldwide LHC Computing Grid Collaboration (WLCG)

# Benefícios à UNESP



- **Aumentar a produção científica** em áreas de fronteira que ainda não produzem melhores resultados devido à carência de recursos computacionais adequados;
- Permitir o **envolvimento de pesquisadores em novas áreas** que requerem processamento e armazenamento de grande quantidade de dados;
- Gerar **produtos de alto valor agregado** para a indústria farmacêutica, de cosméticos, nanomateriais e materiais cerâmicos;
- **Integrar a universidade** nas estruturas de Grid internacionais, como o *Open Science Grid* (OSG) norte-americano e o *Enabling Grids for E-science* (EGEE) europeu;
- Incrementar o **intercâmbio internacional** com grupos que compartilham os mesmos interesses e necessidades, como os laboratórios nacionais nos EUA e Europa;
- Gerar **parcerias da universidade com áreas de alta tecnologia** que vêm tendo cada vez mais interesse no desenvolvimento da arquitetura Grid de processamento;
- Aperfeiçoar a **formação de pesquisadores em Tecnologia da Informação** com a implantação da estrutura de Grid na universidade.