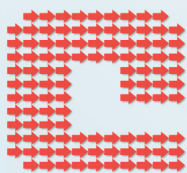


# CASPUR HPC GRANT 2009: RISULTATI E PROSPETTIVE

di Mario Rosati e Carlo Maria Serio



La messa in produzione del nuovo *cluster* Matrix ha consentito al Settore HPC del CASPUR di estendere le iniziative per l'assegnazione di Grant di calcolo, con l'obiettivo sia di coinvolgere una base utenti molto ampia, sia di assegnare significative risorse a pochi progetti di frontiera. I risultati dell'iniziativa sono stati molto significativi: 136 progetti approvati ed oltre 14.000.000 di *ore/core* assegnate.

Dott. Mario Rosati  
CASPUR  
Responsabile del Gruppo  
di Scienza dei Materiali  
e Finanza Computazionale  
m.rosati@caspur.it

Dott. Carlo Maria Serio  
CASPUR  
Responsabile del Settore HPC  
c.serio@caspur.it

## • Abstract

With the aim of promoting the use of high-performance computing in scientific research, CASPUR has periodically invited researchers from universities, public and private research institutions, to submit scientific projects for free allocation of computing resources.

The acquisition of the new computer facility, named 'Matrix' (an HPC cluster with 2640 core, interconnected in InfiniBand technology), has enabled CASPUR HPC Department to expand the computer resources offered to the Italian and international scientific community. The strategy of the 2009 HPC grants call is twofold: on the one hand to involve a very large user base, distributed over the whole national territory, i.e. beyond the limits of the universities member of the CASPUR consortium; and, on the other hand to give significant amount of resources to few projects, very ambitious from both scientific and computational point of view. Therefore the 2009 HPC grant initiative, named *CASPUR HPC Grant 2009*, is divided into two calls: *Standard HPC Grant 2009*, for projects requiring up to 80,000 hours/core over 9 months, and *Competitive HPC Grant 2009*, for projects requiring up to 1,000,000 hours/core over 18 months.

136 projects (15 Competitive) have been approved and more than 14,000,000 hours/core allocated. After the success of HPC Grant 2009 initiative, CASPUR will replicate and improve its offer of HPC Grant, increasing, if possible, the size and performance of its HPC systems available to their users.

Fin dai primi anni di vita, il CASPUR ha proposto iniziative, talvolta sporadiche, che invitavano la Comunità Scientifica nazionale a presentare progetti di ricerca per concorrere all'assegnazione di risorse di calcolo e supporto specializzato da parte del personale applicativo interno. Nel 2007, per la prima volta, il Consorzio ha proposto alla Comunità Scientifica nazionale un bando per l'assegnazione di risorse di calcolo a progetti di ricerca che avessero necessità solo di eseguire "run di produzione", cioè per i quali le applicazioni da utilizzare fossero già a punto e, al più, fosse necessario solo un limitato supporto da parte del personale CASPUR, nella fase di *startup* del lavoro.

L'iniziativa *Bando B 2007* ebbe un buon successo: furono presentate proposte che, complessivamente, richiedevano oltre 4.000.000 di *ore/core*, a fronte di una disponibilità di poco superiore a 1.000.000 e furono approvati 32 progetti, la maggior parte dei quali ha poi prodotto significativi risultati scientifici, anche se, in alcuni casi, la piccola taglia dei sistemi allora disponibili presso il Consorzio ha rappresentato un rilevante ostacolo per i gruppi vincitori. Questo esito è stato uno degli elementi che hanno concorso alla decisione di acquisire, nella seconda metà del 2008, un sistema che consentisse di far crescere significativamente, sia per dimensione che per performance, l'offerta dei servizi di calcolo ad alte prestazioni del CASPUR.

L'acquisizione e la messa in produzione del *cluster Matrix* (una macchina oggi in grado di erogare ben oltre 20.000.000 di *ore/core* per anno, vedi riquadro), hanno consentito al Settore HPC del CASPUR di riproporre ed estendere le iniziative per l'assegnazione a progetti di ricerca di Grant di calcolo, fissando un duplice obiettivo: da un lato coinvolgere una base utenti molto ampia e ben diffusa, sia sul territorio nazionale che per area scientifica di appartenenza, dall'altro assegnare quantità di risorse significative a pochi progetti, estremamente ambiziosi dal punto di vista scientifico e "di frontiera" per quanto concerne la "sfida computazionale". Su queste basi è stata concepita l'iniziativa *CASPUR HPC Grant 2009*, che ha visto l'organizzazione di due *call* distinte:

*Standard HPC Grant 2009*, per la fornitura gratuita di ore di calcolo a progetti che richiedano sino ad un massimo di 80.000 *ore/core* nell'arco di 9 mesi.

*Competitive HPC Grant 2009*, per la fornitura gratuita di ore di calcolo a progetti che richiedano sino ad un massimo di 1.000.000 di *ore/core* nell'arco di 18 mesi.

Nell'ambito delle due *call* sono pervenute richieste per un totale di oltre 22.000.000 di *ore/core*.

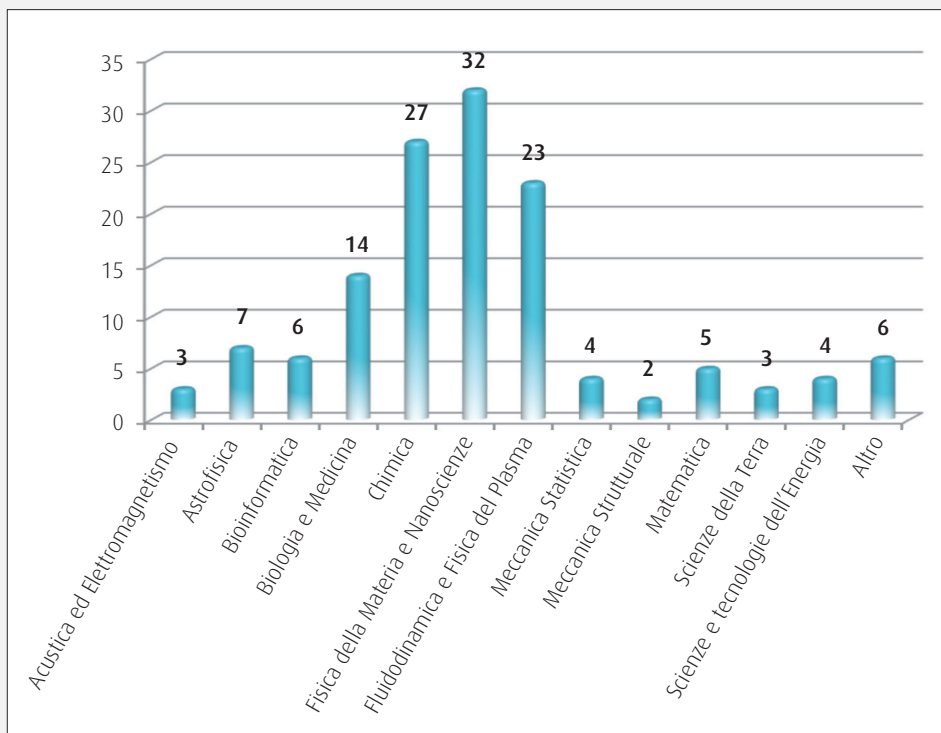
I diversi obiettivi delle due *call* hanno suggerito una procedura di valutazione piuttosto diversa. Per lo *Standard HPC Grant* la valutazione ha visto coinvolti il Consiglio Tecnico Scientifico (CTS) ed i gruppi applicativi del Settore HPC del CASPUR. Ciascun progetto è stato esaminato da un membro del CTS e da un "applicativo" CASPUR, esperti della problematica scientifica e computazionale posta dal progetto stesso e sono stati approvati tutti i progetti che avessero una valutazione più che sufficiente per ognuno dei parametri definiti. Il processo ha portato all'approvazione di 121 progetti, per un totale di 7.156.600 *ore/core* assegnate.

Per quanto riguarda la valutazione del *Competitive HPC Grant 2009*, il processo è stato coordinato dal CTS, in collaborazione con gli autori del presente articolo. Dopo la definizione di un set di parametri di valutazione, ciascun progetto è stato inviato ad una coppia di *peer reviewer* nazionali ed internazionali, di chiara fama nell'area del progetto stesso e sono stati pienamente approvati (100% delle *ore/core* richieste) solo 6 progetti, che hanno ottenuto un punteggio eccellente in ciascuno dei parametri di valutazione definiti. Inoltre sono state assegnate risorse (dal 20 al 40% in meno rispetto alla richiesta) ad altri 9 progetti, che hanno ottenuto una valutazione complessiva tra il buono e l'eccellente. Quindi il processo ha portato all'approvazione di 15 progetti per un totale di 7.000.000 *ore/core*.



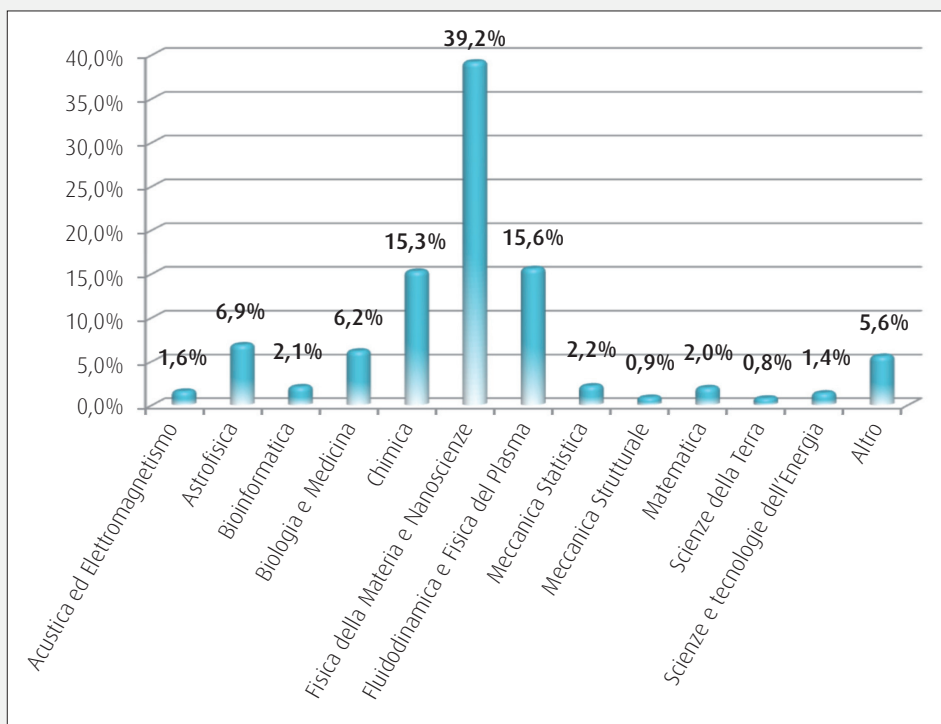
**Figura 1**

Numero di progetti approvati per ciascuna area scientifica.



**Figura 2**

Frazione di ore/core assegnate rispetto al totale per ciascuna area scientifica.



In sintesi, dunque, l'iniziativa *HPC Grant 2009* ha portato all'approvazione di 136 progetti<sup>1</sup> per un totale di oltre 14.000.000 di ore/core assegnate; rispetto all'iniziativa *Bando B 2007* sono stati approvati oltre 4 volte i progetti ed il numero di ore assegnate è salito ben più di un ordine di grandezza!

<sup>1</sup> L'elenco dei progetti approvati è disponibile all'indirizzo <http://hpc.caspur.it/hpc.grants/>.

Anche se discipline come la Chimica, la Fisica della Materia e la Fluidodinamica, in cui si fa tradizionalmente uso di risorse *HPC*, vedono complessivamente oltre il 60% dei progetti approvati, il restante 40% è ben distribuito su un ampio insieme di Aree Scientifiche (vedi Figure 1 e 2).

Per quanto concerne la distribuzione dei progetti approvati per ente di provenienza dei Principal Investigator (vedi Figura 3), il 35% proviene dalle Università che costituiscono il Consorzio CASPUR, il 30% da Enti di Ricerca diffusi sul territorio nazionale, il 27% da Università italiane non consorziate, anche in questo caso dif-

fuse da Nord a Sud del paese, il 7% da Università ed Enti di Ricerca stranieri e meno dell'1% da privati (1 progetto su 136).

Vista la mancanza di una programmazione a livello nazionale dell'offerta ed un'analisi della domanda di servizi *HPC*, è difficile dire se il successo dell'iniziativa *CASPUR HPC Grant 2009* sia dovuto alla raccolta di una domanda preesistente oppure allo stimolo in-

dotto nella comunità scientifica nazionale dall'iniziativa stessa. La nostra opinione è che sia vera un combinazione delle due circostanze e che, comunque, valga la pena sostenere ed incrementare iniziative di questo tipo. Pertanto nel futuro replicheremo, migliorandola, la nostra offerta di Grant di calcolo, incrementando, se possibile, dimensioni e performance dell'infrastruttura *HPC* a disposizione dei nostri utenti.

### • Matrix: un Top500 HPC cluster al CASPUR

Alla fine del 2008 il CASPUR ha messo in produzione Matrix, un HPC cluster inizialmente costituito da 258 nodi bi-processore basati su AMD Opteron 2352 (CPU a 4 core da 2.1 GHz) ed equipaggiati con 16 GB di RAM (90% dei nodi) e 32 GB (10% dei nodi), cui sono stati poi aggiunti ulteriori 72 nodi. I 330 nodi complessivi sono interconnessi attraverso una rete ad alte prestazioni in tecnologia InfiniBand DDR, utilizzata sia per la comunicazione tra processi MPI, che per accedere alle aree di storage basate sul file system Lustre.

Il sistema operativo installato su Login e Compute Node è Scientific Linux 5.2; Torque e Moab consentono il resource management e lo scheduling dei job. Per l'utente è stato predisposto un ambiente modulare nel quale sono facilmente accessibili le più diffuse suite di sviluppo, librerie matematiche e di comunicazione e che consente di utilizzare i principali software scientifici di comunità.

Matrix è entrata nei Top500 di Novembre 2008 alla posizione 460 ed è 154.ma della classifica dei Green500, la lista mondiale dei 500 supercalcolatori con il miglior rapporto prestazioni/consumi. Ulteriori informazioni su Matrix sono disponibili all'indirizzo <http://hpc.caspur.it>.

**Figura 3**

Distribuzione dei progetti approvati per ente di provenienza.

