

*Incontro del WP13 (Chimica Computazionale), progetto GRID.T
CNR Sede, Roma, 16 dicembre 2004*

Contributo ENEA all'attività WP13, progetto FIRB GRID.IT (Chimica computazionale)

G. Bracco⁽¹⁾, M. Celino⁽²⁾, C. Sciò⁽³⁾
ENEA INFO⁽¹⁾, **ENEA MAT**⁽²⁾, **esse3esse S.a.s.**⁽³⁾
bracco@frascati.enea.it

Contenuto

- ENEA-GRID
- Stato del gateway verso ChemGrid WP13
- Risorse ENEA e sviluppi in corso

Ente Nazionale per le Nuove tecnologie, l'Energia e l'Ambiente

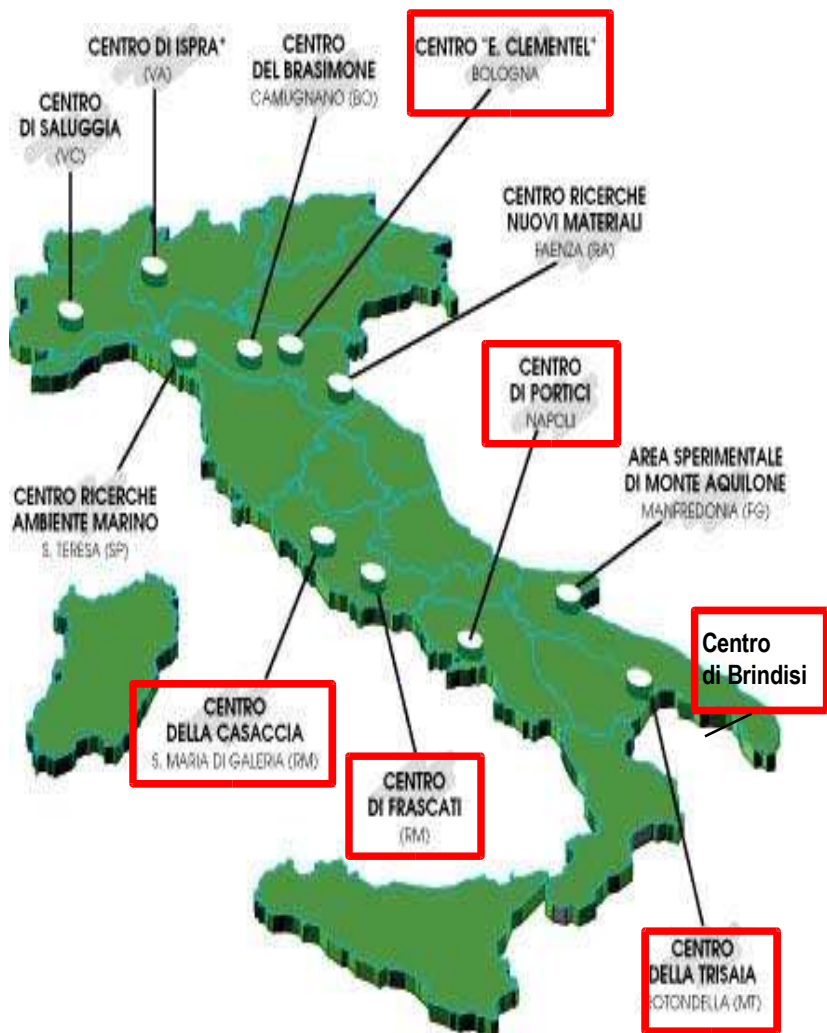
12 centri di ricerca

Servizio Centralizzato Informatica e Reti (INFO) **6 Centri di Calcolo**

Casaccia, Frascati, Bologna, Trisaia, Portici, Brindisi

Risorse multiplatforma per calcolo seriale/parallelo e per il post-processing grafico.

Altre risorse informatiche in ENEA: dipartimenti & ricercatori



Risorse di calcolo in ENEA GRID

OS	#cpu	Gflops	
AIX	154	400	Frascati(128), Bologna(8), Portici(18)
Linux x86 32/64	54	100	Frascati(28), Casaccia(14), Portici(4), Trisaia(4), Brindisi(4)
Linux Alpha	80	100	Casaccia
IRIX	26	40	Frascati(8), Casaccia(4), Portici(1), Trisaia(8), Brindisi(1), Bologna(5)
Solaris	8	10	Trisaia(4), Casaccia(2), Bologna(2)
Windows	18	50	Frascati(6), Portici(4), Trisaia(4), Brindisi(4)
Unicos[Cray]	16	19	Casaccia (SV1/1A)

Architettura di ENEA GRID

Si basa su **componenti maturi** che garantiscono affidabilità e supporto:

File system distribuito: **AFS -> OpenAFS**

Gestore delle risorse: **LSF Multicluster**

Interfaccia utente unificata: **Java & Citrix Technologies**

Sistema di monitor: **Patrol**

Server di licenze

Integrazione con le risorse dipartimentali & individuali

File system distribuito: AFS per i codici e i dati

Condivisione delle licenze

Stato del contributo ENEA al WP13 Grid.it

Attualmente: egw1, egw2, egw3.frascati.enea.it

3 PC 1.8 GHZ, 512 MB RAM, 80 GB HD

Middleware installato sui sistemi: Globus 3.2

Creazione di una Certification Authority con relazione di trust con la CA di Perugia.

Sistema front end (gatekeeper/gsiftp server) : egw1

Integrazione con ENEA-GRID:

egw1, egw2, egw3

- clienti AFS
- gestore di risorse LSF

Configurazione Firewall

Firewall

Sul firewall sono stati definiti due gruppi di macchine:

ChemGridFrascati : egw1

ChemGridItalia: front end degli altri siti

Tra i due gruppi è permesso il traffico bidirezionale sui ports:

2119/tcp

2135/tcp-udp

2811/tcp

2056-4096/tcp

Integrazione con ENEA-GRID (1)

Utenti ENEA-GRID:

se collegati ad `egw1.frascati.enea.it` hanno accesso ai comandi globus e con certificato possono accedere ai sistemi ChemGrid

Utenti ChemGrid:

gli utenti esterni all'enea sono mappati su di un unico utente ENEA-GRID `eneachem` ed ognuno ha la propria HOME in una sottodirectory di tale utente:

`/afs/enea.it/frascati/info/eneachem/cscp_ba/`

`/istm_mi/`

`/istm_pd/`

A scopo di prova è stata creata una utenza su una macchina esterna: `cg00.chemgrid.unipg.it`

Integrazione con ENEA-GRID (2)

Autenticazione : ENEA-GRID: AFS Kerberos: tokens

Globus: certificati X509

egw1: installato il demone **gssklogd** che traduce X509 in tokens.

Configurazione gatekeeper: acquisizione automatica del token;
individuazione automatica della HOME

da cg00.chemgrid.unipg.it:

globus-job-run egw1.frascati.enea.it /usr/bin/tokens

ritorna il valore corretto del token

Un analogo approccio non è ancora funzionante per il server gsiftp:

in scrittura si deve usare come area di appoggio /tmp

la HOME deve essere definita esplicitamente

Integrazione con ENEA-GRID (3)

Esempio di sottomissione di job da utenza esterna: es. istm_pg

1) Creazione del certificato proxy

```
grid-proxi-init
```

2) Trasferimento eseguibile [code.sh] e dati dati.dat su /tmp

```
globus-url-copy file:/$HOME/code.sh gsiftp://egw1.frascati.enea.it/tmp/code.sh
```

3) Copia da /tmp a HOME usando globus-job-run [fork]

```
globus-job-run egw1... /bin/cp /tmp/code.sh istm_pg
```

4) Esecuzione del job [LSF]

```
globus-job-submit egw1/Jobmanager-lsf /bin/bash code.sh
```

5) Recupero dei risultati

```
globus-job-get-output #####
```

Lavori in corso

- allineamento del server gsiftp al livello di integrazione ottenuto con il gatekeeper
- integrazione mpich con Isf-jobmanager
- ampliamento di risorse: già ora basta includere nella coda LSF a cui accede il gatekeeper su egw1 altre macchine ed esse risulteranno disponibili a ChemGrid; ad es. cluster 16 P4 2.4 Ghz con RH 9 , senza perdere la loro disponibilità per ENEA-GRID.
- installazione applicazione