



Résultats, perspectives



Victor Alessandrini

IDRIS - CNRS

va@idris.fr



Activité concertée des

- centres nationaux de calcul de haute performance
- organismes utilisateurs du calcul intensif
- industries des technologies de l'information

pour contribuer au développement et à la diffusion des infrastructures des grilles de calcul en Europe.



Forschungszentrum Julich (D)



Victoria University of Manchester (UK)



CNRS - IDRIS (F)



Parallab - University of Bergen (N)



Warsaw University - ICM (PL)



ETH Zurich (SCSC Manno) (CH)



Deutscher Wetterdienst (D)



GIE EADS CCR (F)



Pallas GmbH (D) (Project coordination)



Associate
contractors :



Fujitsu European Center for
Information Technology (UK)



Debis Systemhaus (D)



● National HPC Centres

● Industrial Users

● Technology Providers

Le contexte

Plates-formes
de calcul

GLOBUS, Legion,
UNICORE

Grappes homogènes,
environnements hétérogènes

Grille : globalisation à
grande échelle

Services Web,
Calcul réparti

WWW, information
et contenu

J2EE, CORBA
.NET, JXTA

Communication, e-mail

UDDI, WSDL
XML - SOAP

TCP-IP, réseaux

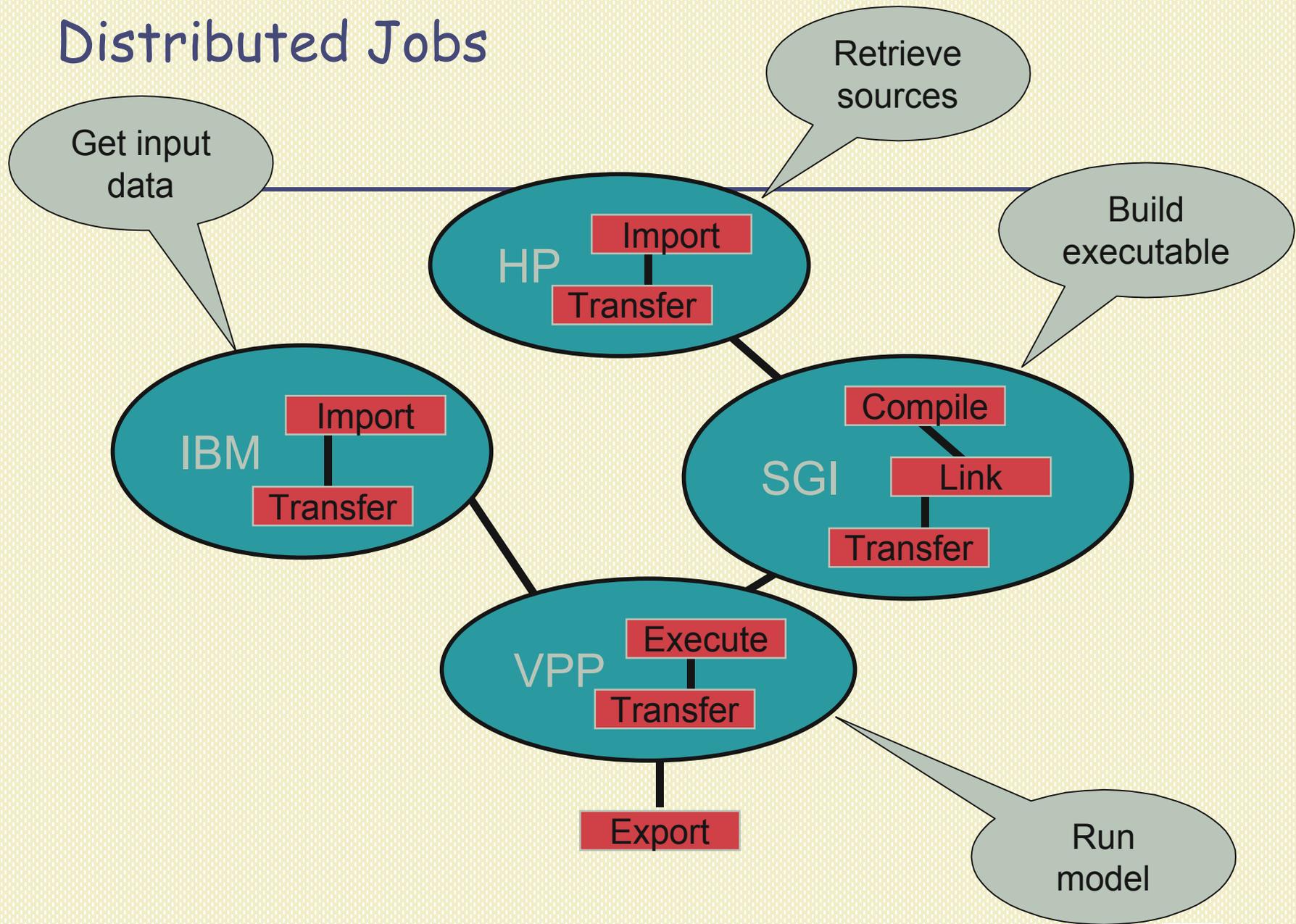
EUROGRID : stratégies

- Attention particulière aux environnements **hétérogènes** du calcul intensif de haute performance;
- Utilisation des technologies de grilles pour fournir une **image unique et un accès transparent** à ces environnements;
- Mise en place d'une grille opérationnelle constituée de puissantes ressources informatiques (HPC-GRID);
- Développement et intégration des technologies de grille pour HPC-GRID;
- Développement et opération des applications scientifiques sur HPC-GRID.

UNIified Access to COmputing REsources

- Projets allemands UNICORE (1998-2000) et UNICORE-PLUS (2000-2002);
- Développé par les centres nationaux allemands avec Pallas et Fecit;
- Plate-forme logicielle pour la globalisation des ressources. Accès transparent et unifié à un ensemble distribué de ressources hétérogènes;
- Pilotage très efficace d'applications réparties de type "flot de tâches" (workflow).

Distributed Jobs



Client UNICORE : interface graphique

The screenshot displays the UNICORE Client graphical interface with the following components:

- Menu Bar:** File, Job Preparation, Job Monitoring, Job Control, Settings, Extensions, Help.
- Job Preparation Panel (Left):** A tree view showing the job structure. The selected job is "FS_IDRIS+UoM+FZJ [Mon Jan 28 15:59:10 CET 2002]". It contains sub-groups: Group_Visualization2 (Visualization2), Group_Structure2 (Structure2), Group_Fluid (Fluid), Group_Structure1 (Structure1, Transfer_Structure_Fluid), Visualization1, and Transfer_Visualization_Fluid.
- Job Group Panel (Middle-Left):** Name: FS_IDRIS+UoM+FZJ. It lists Unicore Sites: FZJ, Para//lab, ICM, IDRIS-CNRS (highlighted), and Manchester University. Below it, the Virtual Site is listed as IBM-SP3-tlon.
- Task Dependencies Panel (Right):** A dependency graph on a blue background. It shows "Visualization1" and "Group_Structure1" as parent tasks. "Visualization1" depends on "Transfer_Visualiz...". "Group_Structure1" depends on "Transfer_Visualiz...", "Group_Fluid", and "Group_Structure2".

EUROGRID : résultats

- Mise en place et opération de HPC-GRID, plate-forme trans-nationale de calcul intensif;
- Développement et opération d'un portail pour les applications bio-moléculaires;
- Mise en place d'un service de prévision locale du temps sur demande;
- Interopérabilité CORBA - UNICORE, et déploiement des codes couplés sur HPC-GRID.

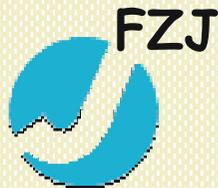
HPC - GRID



CRAY T3E 900 (32 PE)
NEC SX4B/2A
Linux Cluster (4 PE)



SGI Onix (4 PE)
SGI O2000 (128 PE)



Linux Intel Cluster (36 PE)
CRAY T3E - 600 (512 PE)
CRAY T3E - 1200 (512 PE)



NEC SX5 (10 PE)
SUN E-450 (4 PE)



CRAY T3E - 1200 (816 PE)
FUJITSU VPP300 (8 PE)
SGI O2000 (128 PE)
SGI O3000 (256 PE)



IBM SP3 (8 PE)
NEC SX5 cluster (40 PE)
IBM Power4 (256 PE, 1.3 TFLOPS)
COMPAQ Linux Cluster (24 PE)



BIO - GRID

- Portail pour un ensemble d'applications très populaires de chimie quantique et biologie structurale (Gaussian, Amber, ...) déployées sur HPC-GRID;
- Interface utilisateur unique, accès unifié aux bases de données;
- Basé sur des extensions de UNICORE (Plugins);
- Portail Gaussian98 opérationnel, portail Amber en préparation.

Job Preparation

- New job group
 - Job_name_1

Job Monitoring

Gaussian Script

Job Name: Job name 1

Job Type: Opt

Parameter: QST2

Model: Density Functional Methods

Theory: B3LYP

Basis Set: 6-21G

Charge: 1

Multiplicity: Doublet

status: molecule loaded successful

Load a Molecule

Gaussian Input

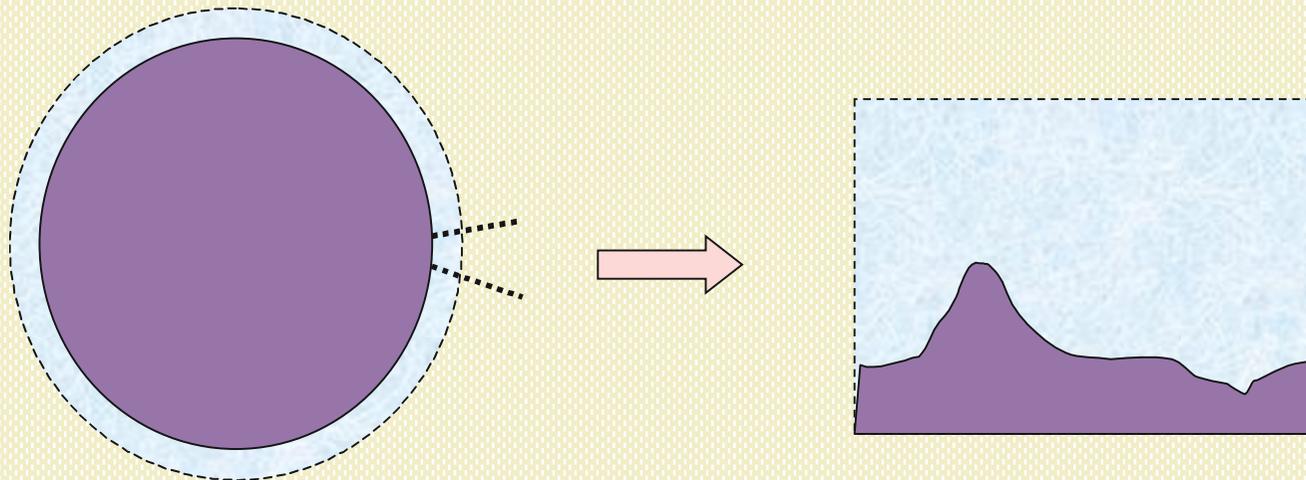
```
# molecule data
O -0.464 0.177 0.0
H -0.464 1.137 0.0
H 0.441 -0.143 0.0
```

Generate Gaussian Input

Apply

Reset

Météo-Grid : simulations multi-échelles



Modèle Global:
Résolution 60 Km

Modèle Local:
Résolution 2 Km

Couplage du modèle global à un modèle local à placement arbitraire

Service ASP pour prédiction locale à la demande

Applications couplées : motivations

- Un nombre important de problèmes scientifiques, industriels, de société, conduisent à des modèles comportant des composants multiples interagissant à travers des **interfaces**;
- Les défis algorithmiques et informatiques posés par ces systèmes multi-physiques et multi-échelles, sont aujourd'hui à la frontière des sciences computationnelles;
- Le couplage des codes pour les applications multi-physiques s'avère souvent une stratégie adéquate;
- Les applications comportant plusieurs modules logiciels couplés se projettent très naturellement sur une **grille de calcul hétérogène** comme HPC-GRID.

IDRIS applications : partnerships with users' teams

- Turbulent fluid ↔ • Vibrating structure
- Basic gravitational N body problem ↔ • Hydrodynamic shocks, cooling of primordial chemical elements
- MAR regional atmospheric model ↔ • Hydrological model for cycles in West Africa
- Basic combustion code ↔ • Thermal radiation, pollutant generation
- Supercoiled macromolecule ↔ • Brownian motion generation by environment.

- and many others

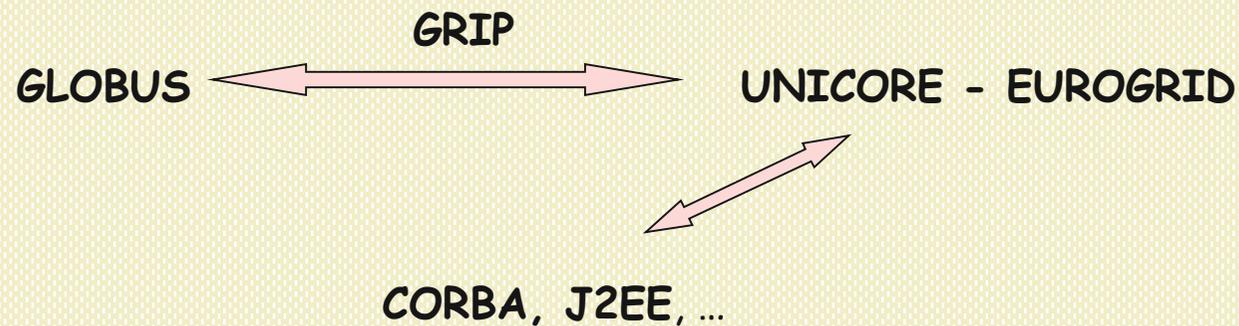
Applications couplées : stratégie

- Couplage basé sur les technologies d'objets distribués (CORBA) :
 - Implantation transparente de l'application,
 - Indépendance des langages, architectures, systèmes, protocoles
 - Intégration des applications patrimoine.
- Validation - par l'IDRIS - de l'interopérabilité de CORBA avec UNICORE.
 - UNICORE peut être utilisé "tel quel" pour déployer et piloter des applications couplées avec CORBA.
- Intégration des interfaces pour les applications couplées dans UNICORE.

EUROGRID : en cours de réalisation

- Courtage de ressources (**Manchester**);
- Applications CAO (**EADS**);
- Transfert des données performant et fiable (**Pallas, Fecit**);
- Infrastructures pour mode ASP (**EADS, Debis**);
- Infrastructures pour l'accès interactif (**Parallab**);
- Infrastructures pour les applications couplées (**IDRIS**);
- Service sur Météo-Grid (**DWD, CSCS**);
- Relations avec les autres projets européens (GridSTART)

Enjeu majeur : l'interopérabilité



Proposition de standard universel pour les services des grilles :
OGSA (Open Grid Services Architecture) GLOBUS + IBM