



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)



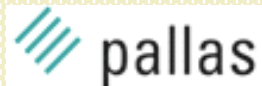
ETH Zurich (SCSC Manno) (CH)



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

---

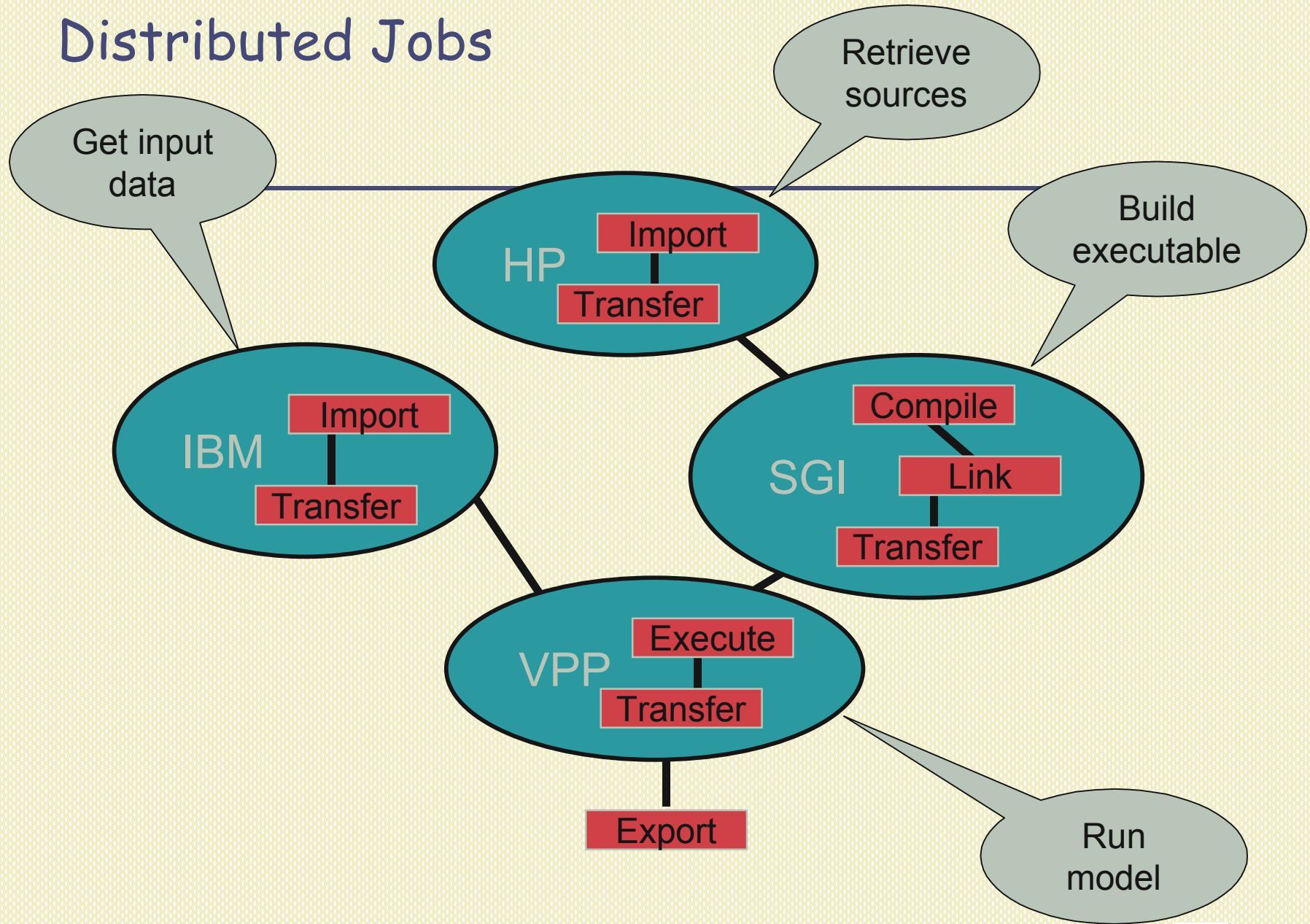
- Attention particulière aux environnements **hétérogènes** du calcul intensif de haute performance;
- Utilisation des technologies de grilles pour fournir une **image unique et un accès transparent** à ces environnements;
- Mise en place d'une grille opérationnelle constituée de puissantes ressources 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):** Shows a tree view of job components. The selected job is "FS\_IDRIS+UoM+FZJ [Mon Jan 28 15:59:10 CET 2002]". The tree includes:
  - Group\_Visualization2
    - Visualization2
  - Group\_Structure2
    - Structure2
  - Group\_Fluid
    - Fluid
  - Group\_Structure1
    - Structure1
    - Transfer\_Structure\_Fluid
  - Visualization1
  - Transfer\_Visualization\_Fluid

- Job Group Panel (Middle):** Name: FS\_IDRIS+UoM+FZJ. It lists Unicore Sites: FZJ, Para//lab, ICM, IDRIS-CNRS (highlighted), and Manchester University. Below, it shows Virtual Site: IBM-SP3-tlon.
- Task Dependencies Panel (Right):** A dependency graph on a blue background showing:
- Visualization1 (top left) depends on Transfer\_Visualiz... (middle left).
- Group\_Structure1 (top right) depends on Transfer\_Visualiz... (middle left) and Group\_Structure2 (bottom right).
- Transfer\_Visualiz... (middle left) depends on Group\_Visualizat... (bottom left) and Group\_Fluid (bottom middle).



# EUROGRID : résultats

---

- Mise en place et opération de HPC-GRID, plate-forme transnationale 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

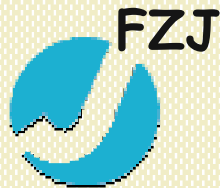
---



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
```

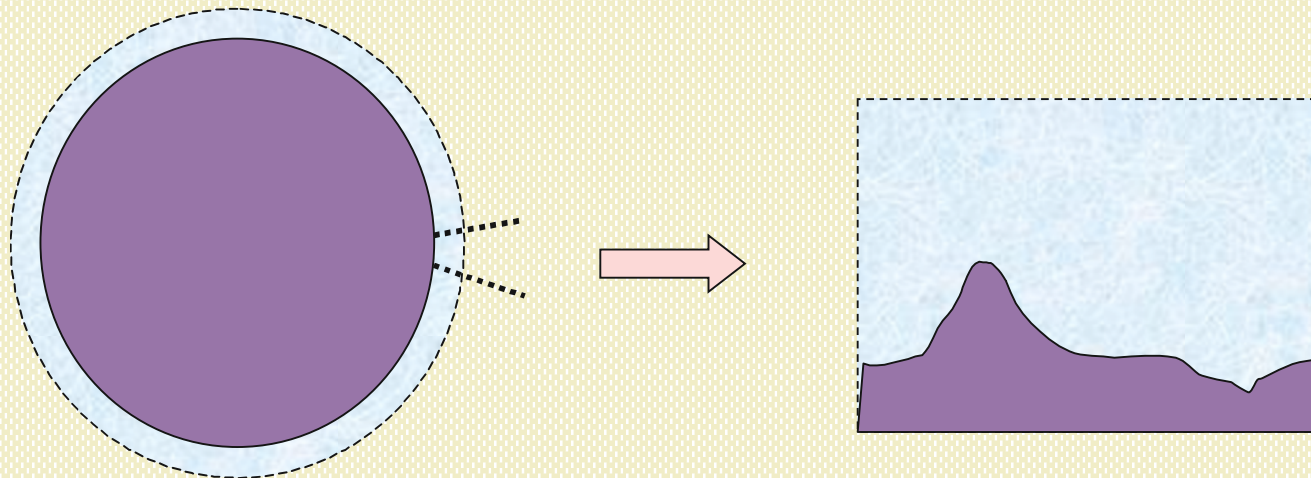
Generate Gaussian Input

Apply

Reset

# Météo-Grid : simulations multi-échelles

---



Modèle Global:  
Résolution 60 Km

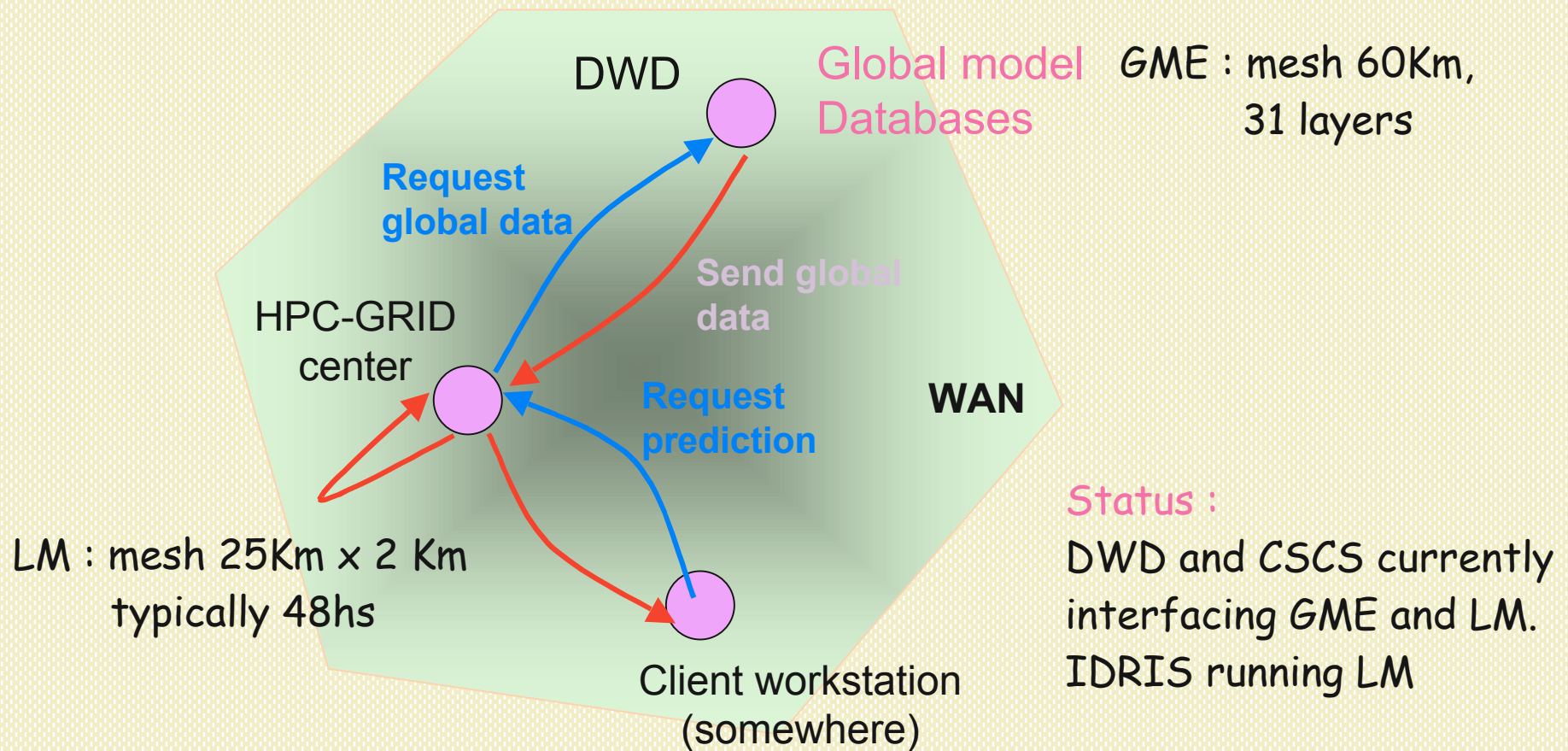
Modèle Local:  
Résolution 2 Km

Couplage du modèle global à un modèle local à placement arbitraire

Service ASP pour prédiction locale à la demande

# Meteo-Grid

Ubiquitous access to local weather prediction software, developed at DWD



# 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.

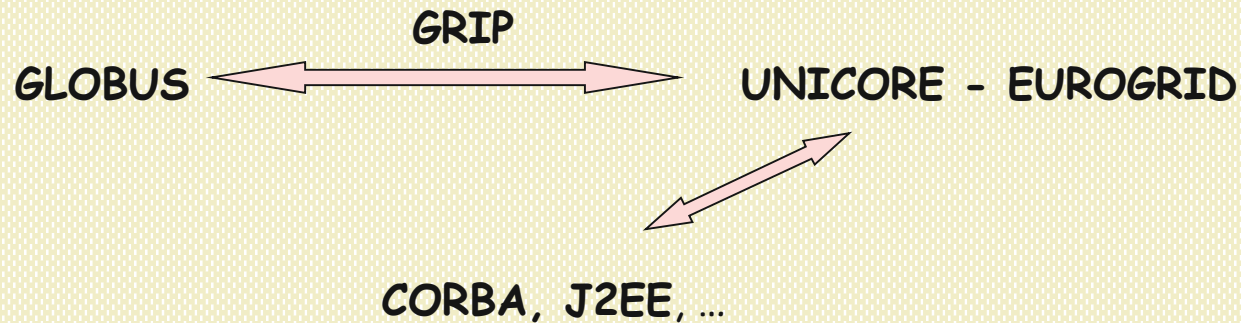
# EUROGRID : en cours de réalisation

---

- 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