



# Lecciones de PRAGMA 10

Raúl Hazas Izquierdo  
Dirección de Telemática, CICESE  
Coordinador Comunidades  
Grid/Supercómputo CUDI



# ¿Qué es PRAGMA?

Es una organización formada por instituciones académicas y de investigación

- Establecer colaboraciones a largo plazo
- Basadas en programas de aplicación
- Hacer prosperar el middleware de grid

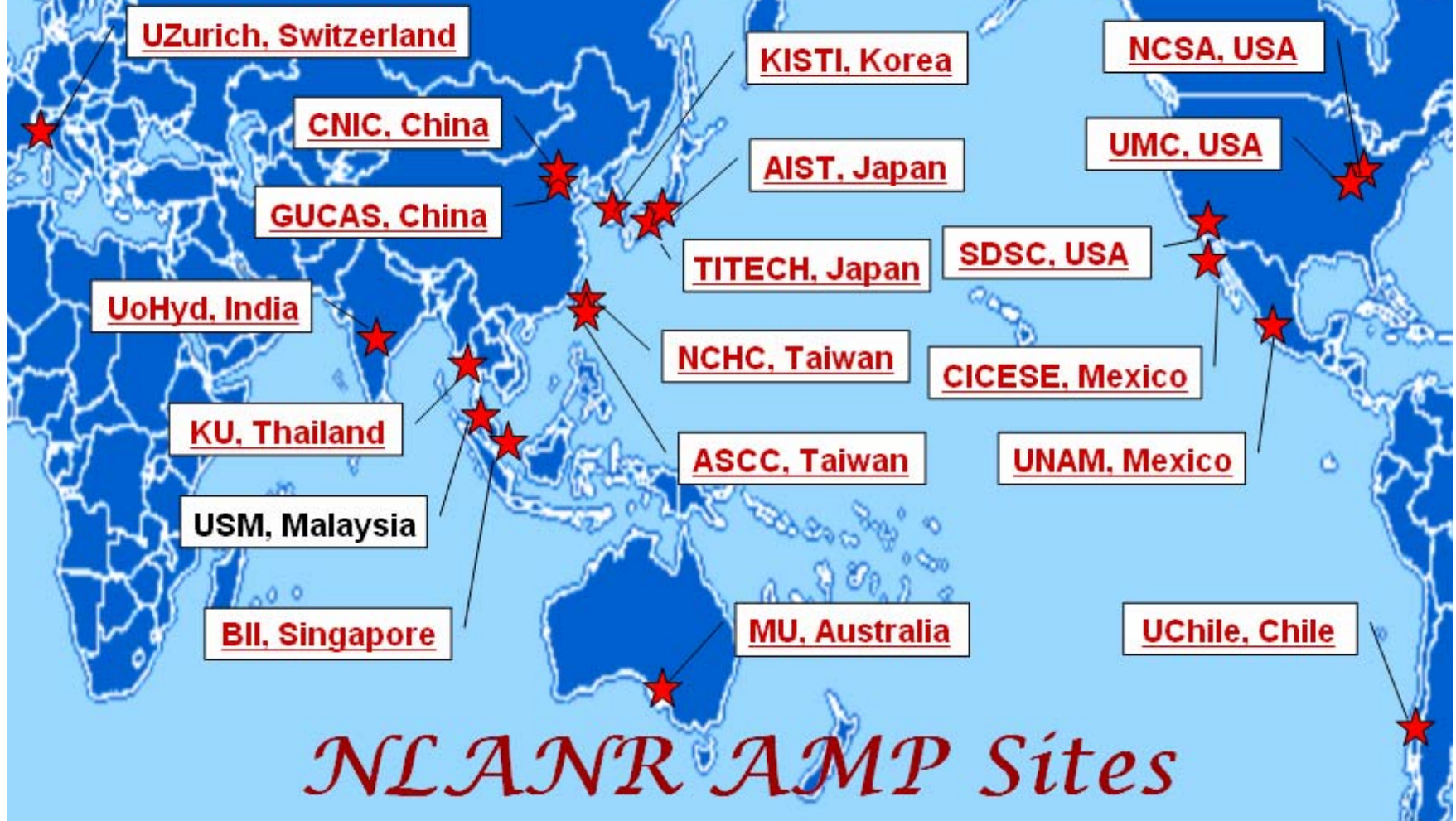


# Participación





# PRAGMA Grid Testbed



# Desarrollo

Las aplicaciones originales:

- Modelaciones de Química Cuántica,
- Secuenciación nucleica y de proteínas
- Cálculos de mecánica cuántica dentro de una simulación de dinámica molecular
- Estudio del impacto de los incendios en la sabana australiana sobre el clima del norte de Australia
- Secuencias genómicas ("Encyclopedia Of Life"), utiliza un sistema de archivos distribuido denominado "Gfarm"



# Desarrollo (cont.)

Dieron lugar a la formación de cuatro grupos de trabajo:

- Recursos
- Teleciencia
- Data grid
- Biociencia


## Aplicaciones de Manera Rutinaria

### 2nd Application - mpiBLAST

A DNA and Protein sequence/database alignment tool

- Drivers (ASCC, Taiwan)
  - Hung-Chun Lee
  - Chi-Wei Wong
- Started 9/20/04
- SC04 demo
- New requirements
- New mpiBLAST-G2
- Automate installation/setup/testing

<http://pragma-goc.rocksclusters.org/biogrid/default.html>



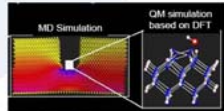
### 3rd Application – QM/MD

MD Simulation

QM simulation based on DFT

- Quantum mechanical calculation within a molecular dynamics simulation
- Grid-enabled by Hiroshi Takemeya, AIST, Japan

- Ninf-G based
- Driver: Hiroshi Takemeya
- Started 4/19/05
- MPI
- Multiple applications
- Fault tolerance
- Auto migration

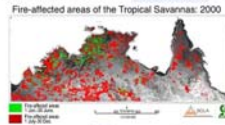


### 4th Application – Savannah Case Study

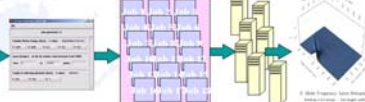
Study of Savannah fire impact on northern Australian climate

- Climate simulation model
- Based on Nimrod-G
- 1.5 month CPU \* 90 experiments
- Driver: Colin Enticott (Monash University, Australia)
- Requirements have been implemented

Fire-affected areas of the Tropical Savannas: 2000



Global namespace




<http://pragma-goc.rocksclusters.org/savannah/default.html>

### 5th Application – iGAP/Gfarm


- iGAP and EOL (SDSC, USA)
  - Genome annotation pipeline
- Gfarm – Grid file system (AIST, Japan)
- Demo in SC04 (SDSC, AIST, BIL)
- Preparation start in testbed March 2005
- Drivers: Wilfred Li and Osamu Tatebe

Global namespace



Gfarm File System

File replica creation



<http://pragma-goc.rocksclusters.org/savannah/default.html>

Cindy Zheng, CICESE Visit, 4/26/05

# Objetivos del Grupo de Trabajo de Recursos

1) Contar con un metacalendarizador que:

- Reutilice los "workflows" de grids ya existentes
- Su ejecución pueda ser distribuida o local
- Con una gama de invocaciones posibles
  - Local, Servicios de Web, Globos GRAM

NIMROD, Ninf-G y ahora KEPLER



# GriddLeS

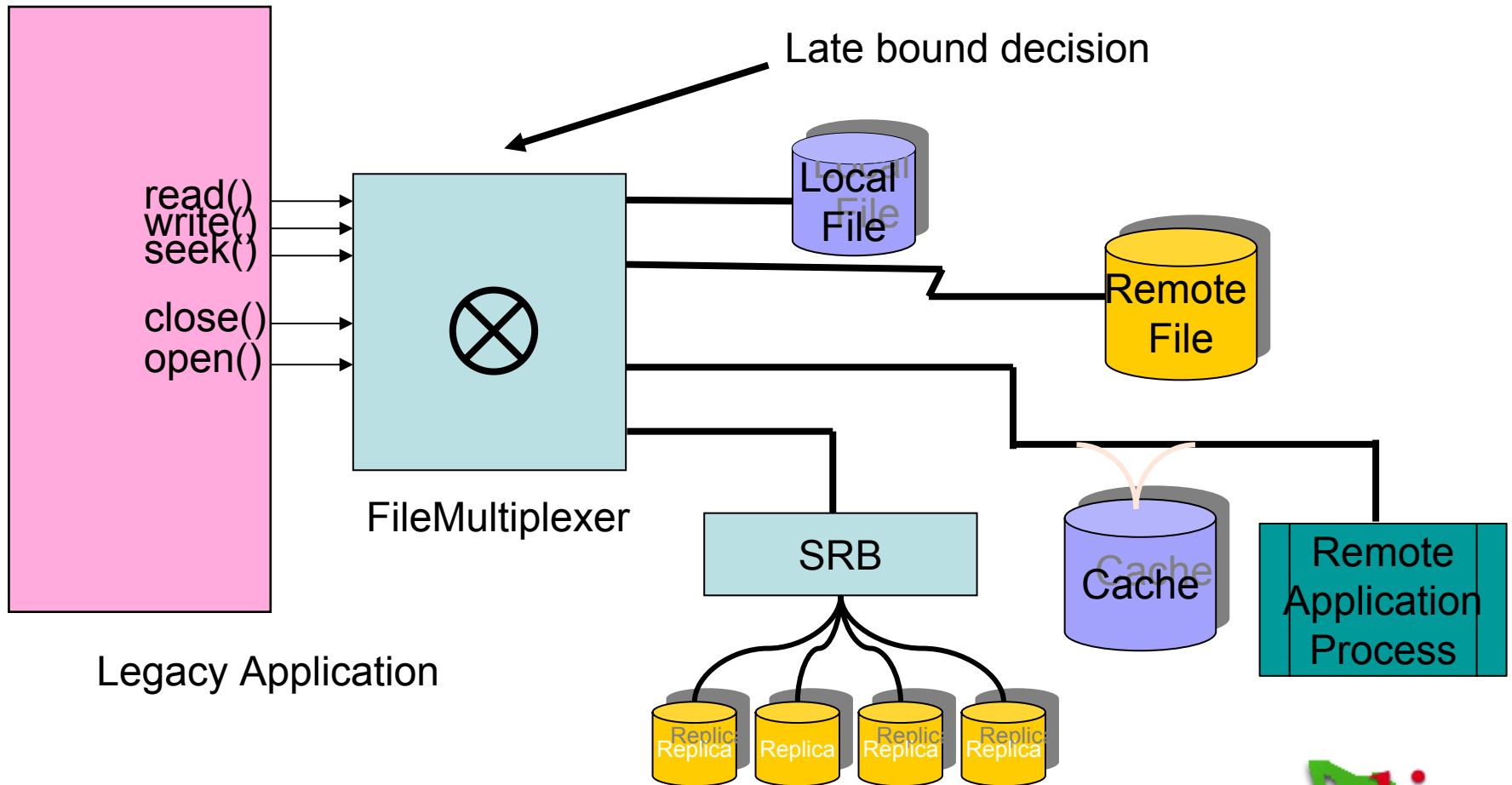
Sistema de virtualización de archivos para que aplicaciones heredadas

- Puedan ser invocadas de diferentes maneras
- Sean protegidas de las particularidades de
  - Archivos locales
  - Archivos remotos
  - Archivos duplicados
- No se determine *a priori* la manera como se realizará la IO al momento de escribir la aplicación o cuando se le “gridifique”

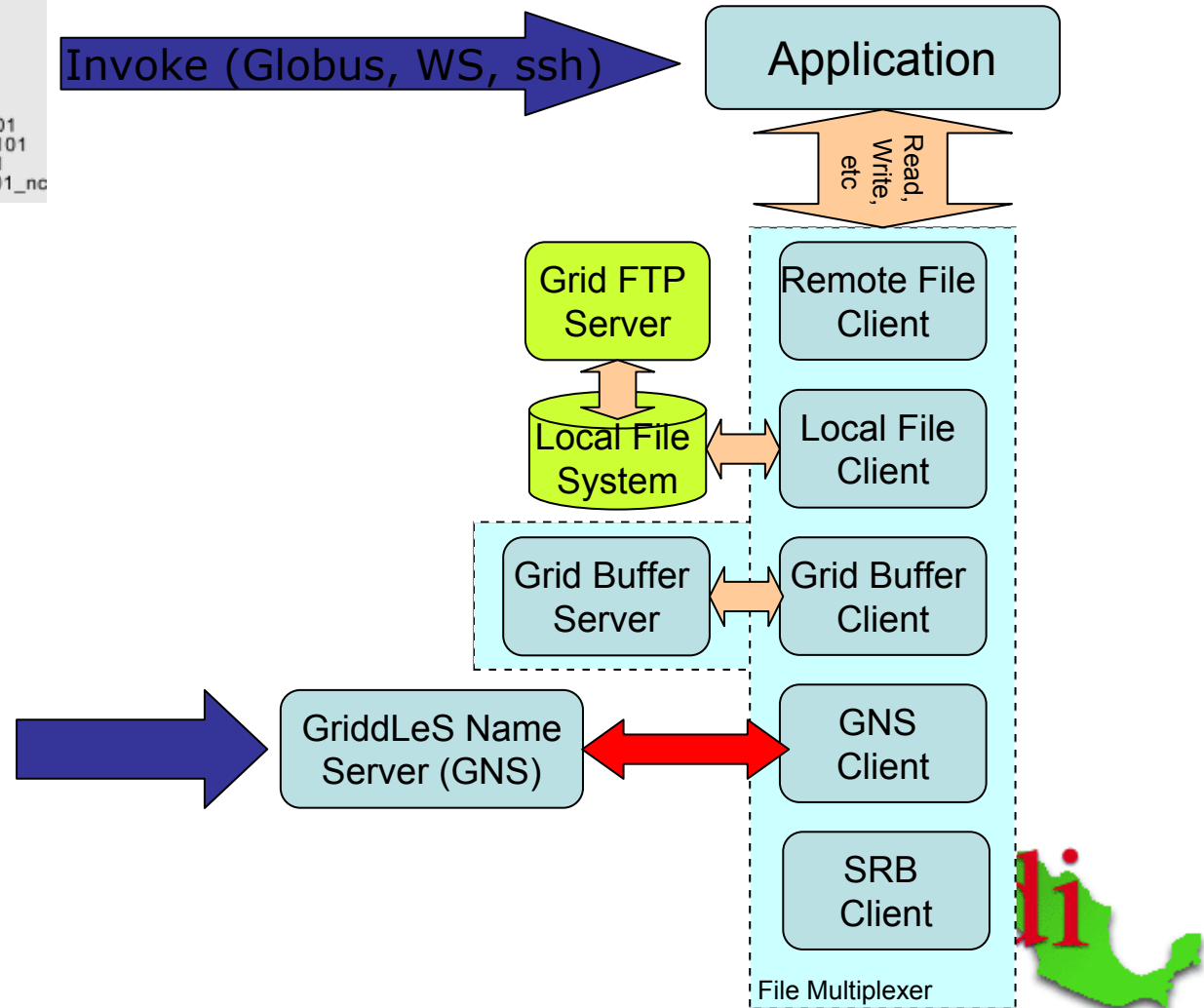
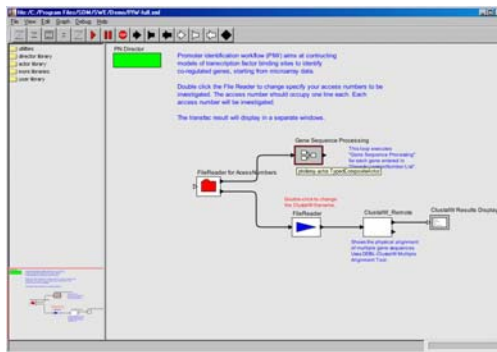
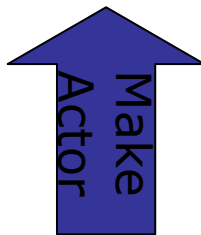
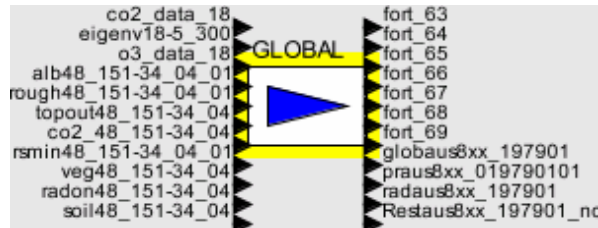




# Flexible IO in GriddLeS



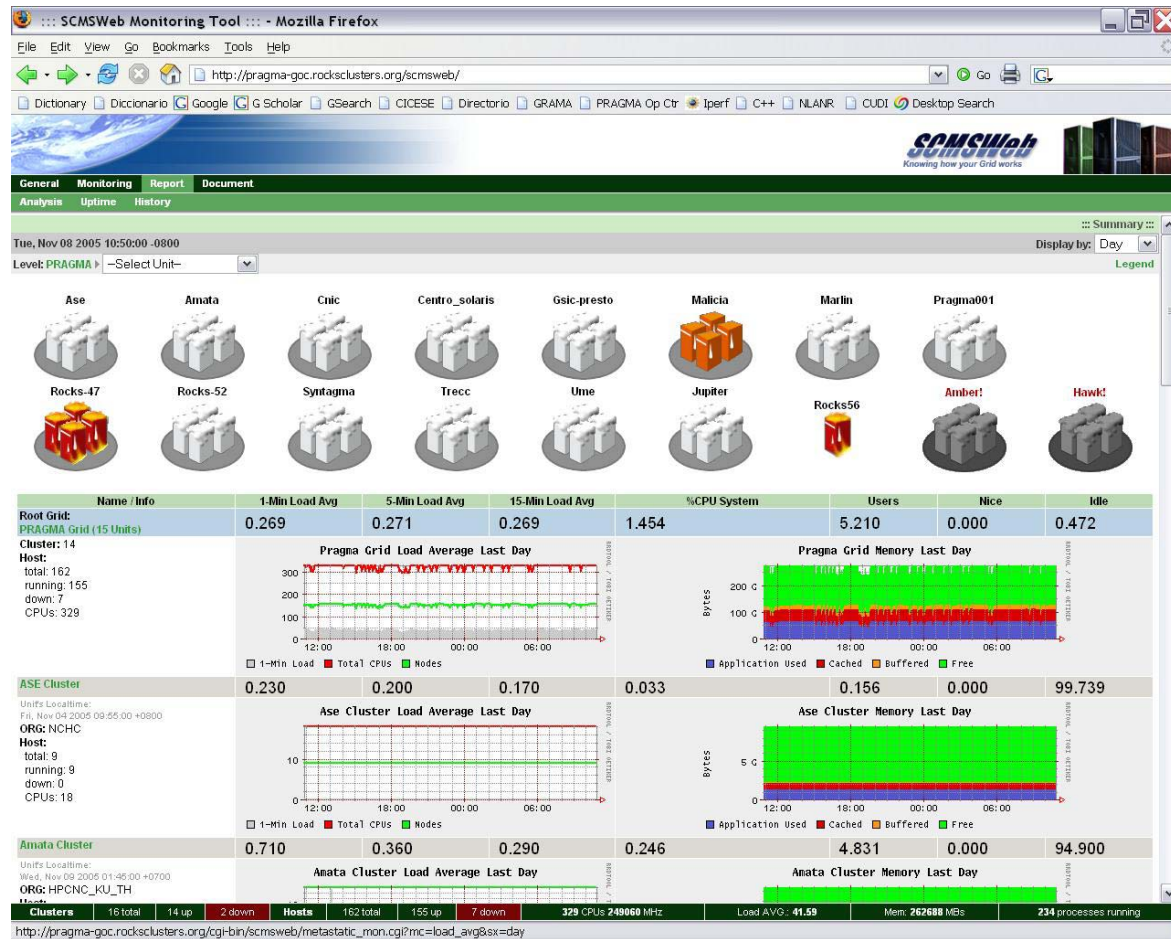
# Integrating Kepler & GriddLeS



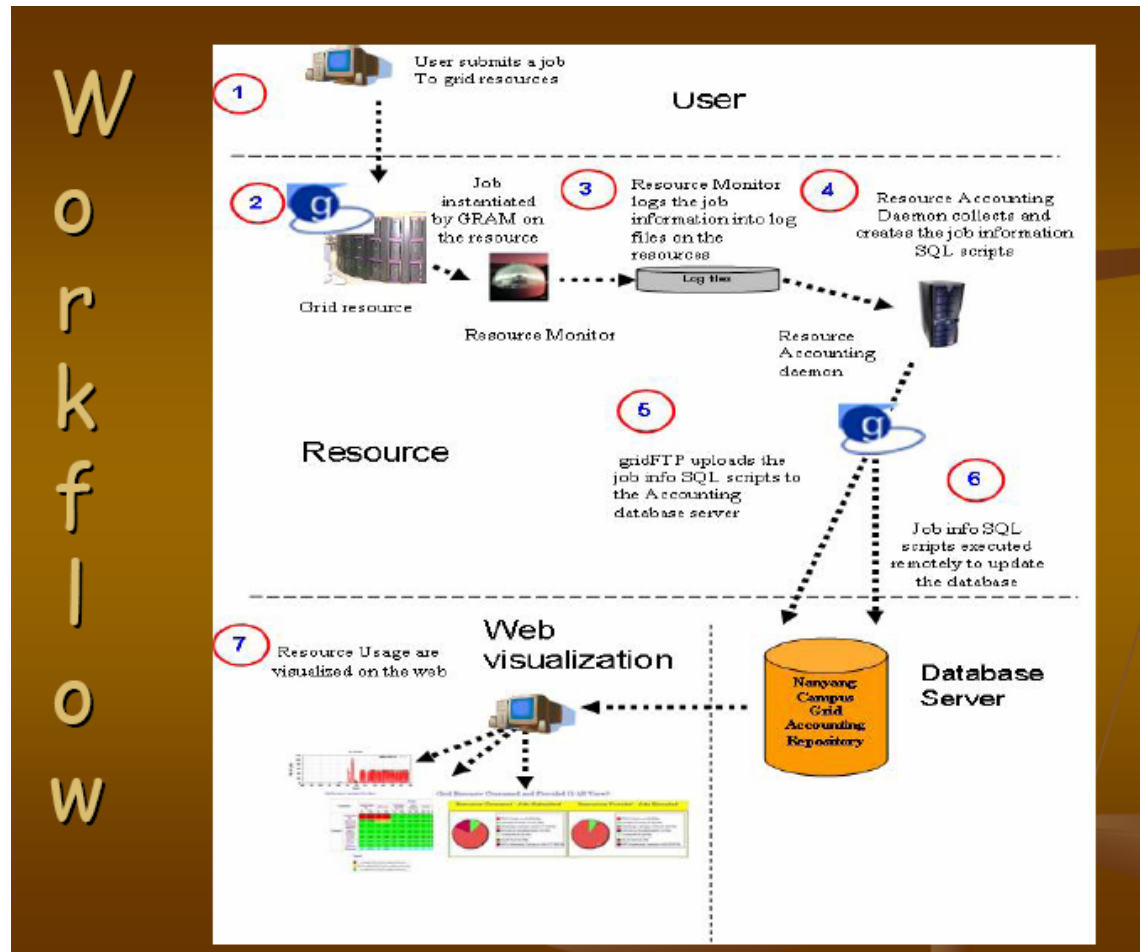
# Objetivos RGw (cont.)

## 2) Gestión y Contabilidad

- Para gestión se utiliza la herramienta SCMSWeb

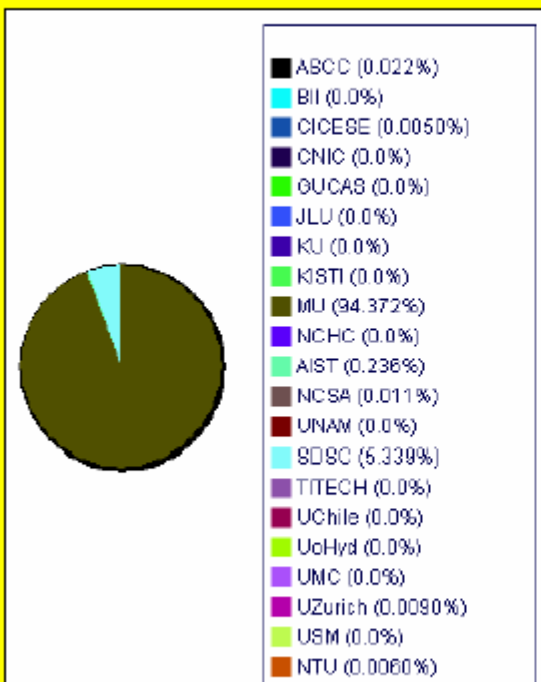


# Contabilidad MOGAS

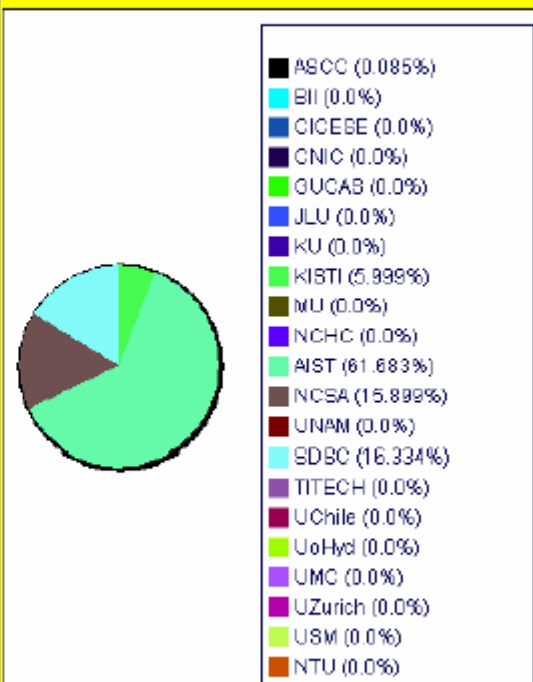




Resources Consumed - Jobs Submitted



Resources Provided - Jobs Executed



## Top 10 Jobs Executed:

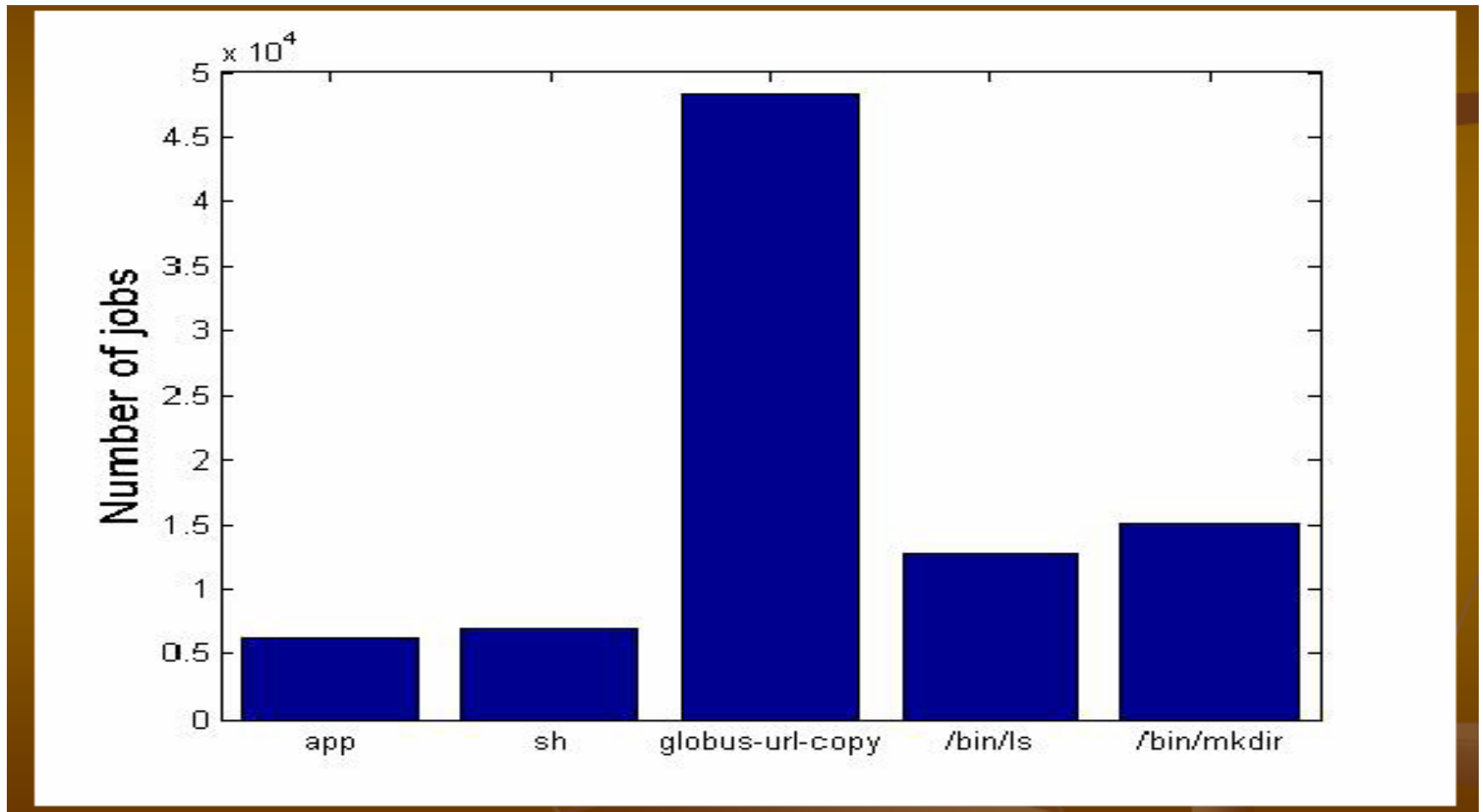
Please select month and year:   based on

Top 10 jobs executed in 2005 Sep based on cost	
/home/cme/nimrod/cmamahar.csse.monash.edu.au --contact tcp%mahar.csse.monash.edu.au%43011 --ident 1	351210
/home/cicese/MM5_SANTAANA/MM5/Run/mm5.mpp	215020
/home/cme/nimrod/cmamahar.csse.monash.edu.au --contact tcp%mahar.csse.monash.edu.au%43002 --ident 1	181340
/home/takemiya/QMMD_Dynamic/Serv/Ver_1/_stub_QM --client=pine.hpcc.jp:35625 --gassServer=http://pine	175965
/home/cicese/MM5_MARTY/MM5/Run/mm5.mpp	132690
/home/cme/nimrod/cmamahar.csse.monash.edu.au --contact tcp%mahar.csse.monash.edu.au%43000 --ident 1	89725
/home/cme/nimrod/cmamahar.csse.monash.edu.au --contact tcp%mahar.csse.monash.edu.au%43007 --ident 1	84565
/home/cme/nimrod/cmamahar.csse.monash.edu.au --contact tcp%mahar.csse.monash.edu.au%43001 --ident 1	11860
/home/cicese/MM5-3.7/Run/mm5.mpp	8010
/home/cicese/MM5_DIARIO/datos/mm5_fase1.csh	7275

# PRAGMA MOGAS status (27/3/2006)

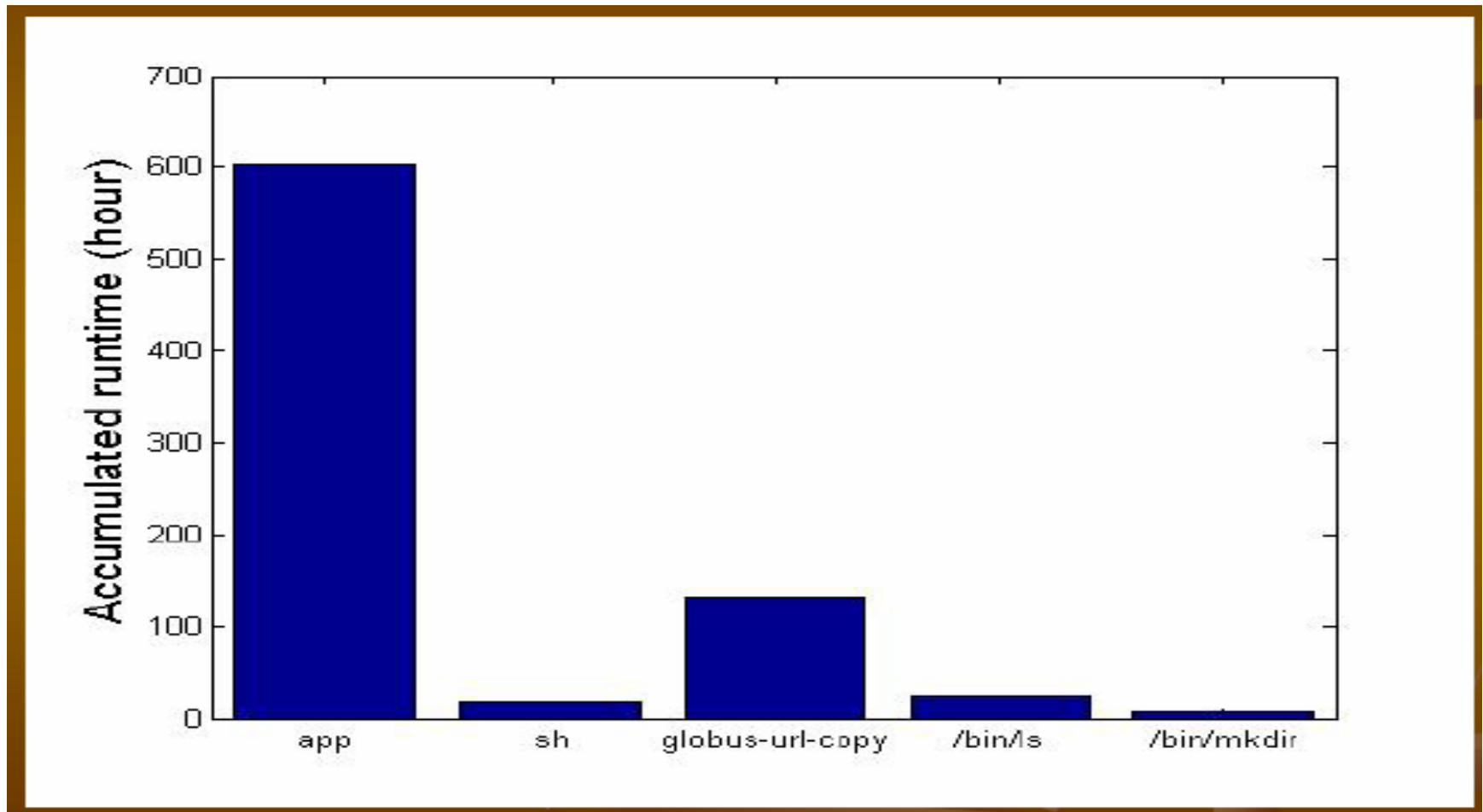


# Tipos de tareas sometidas por Monash University

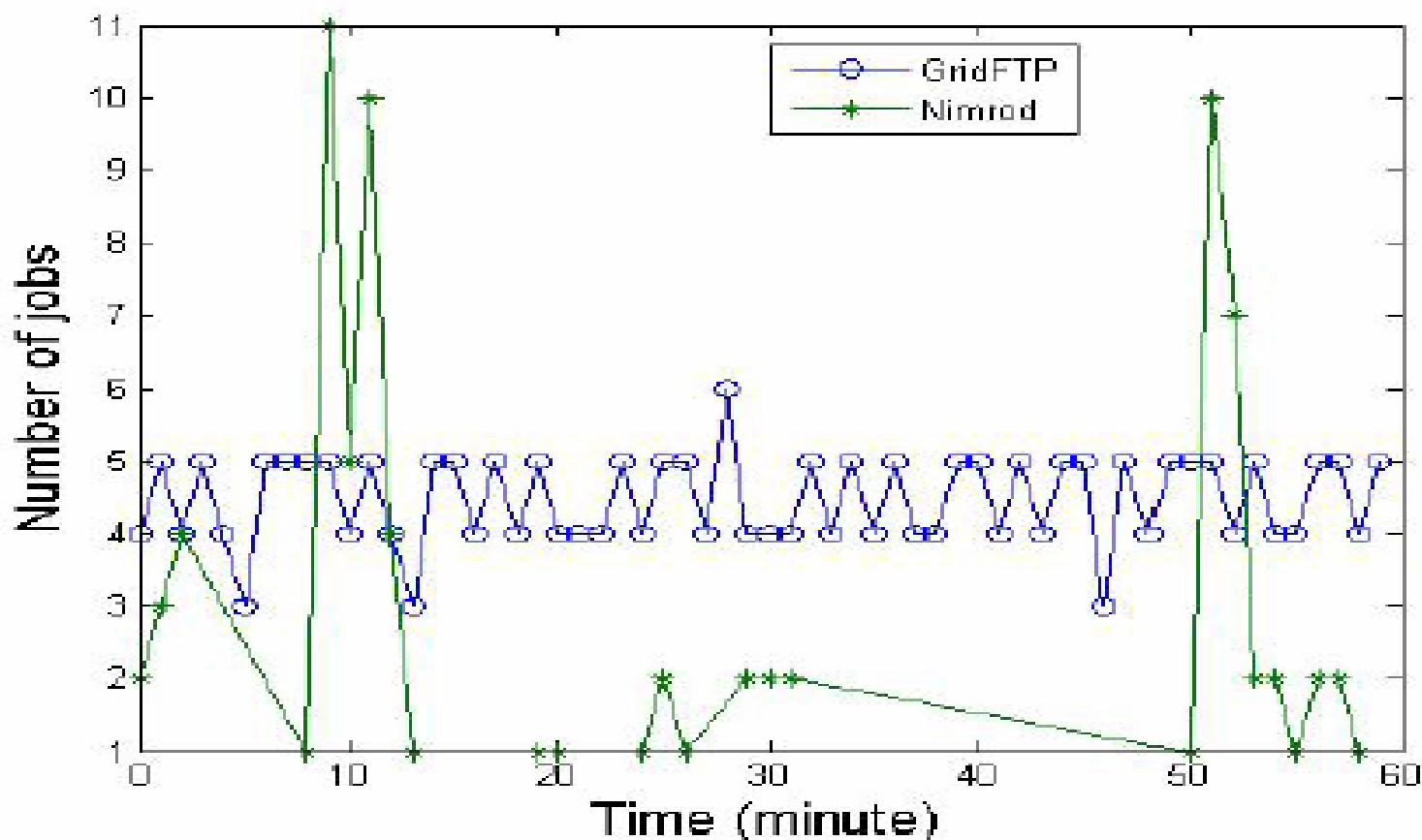




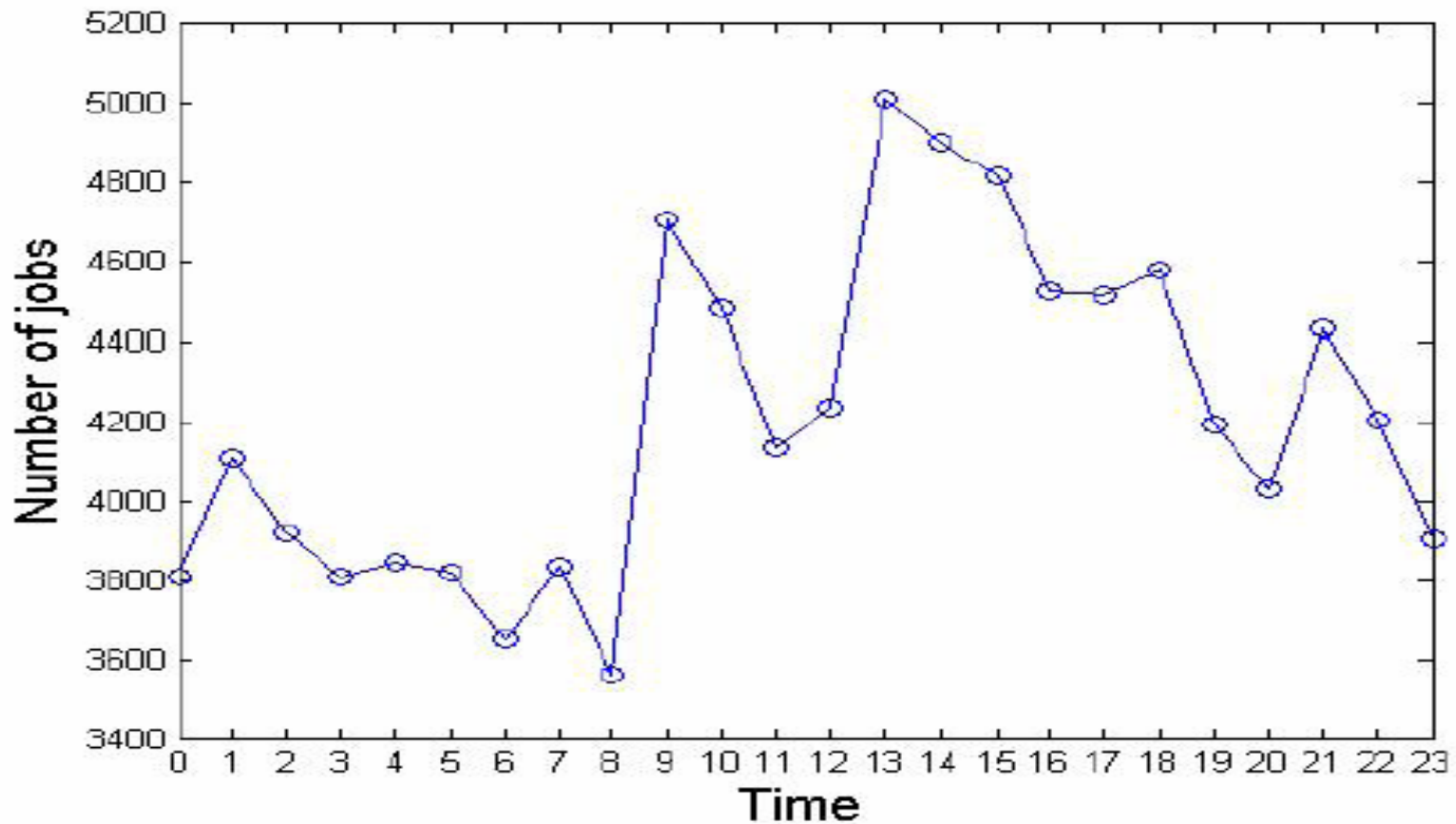
# Tiempo de ejecución acumulado



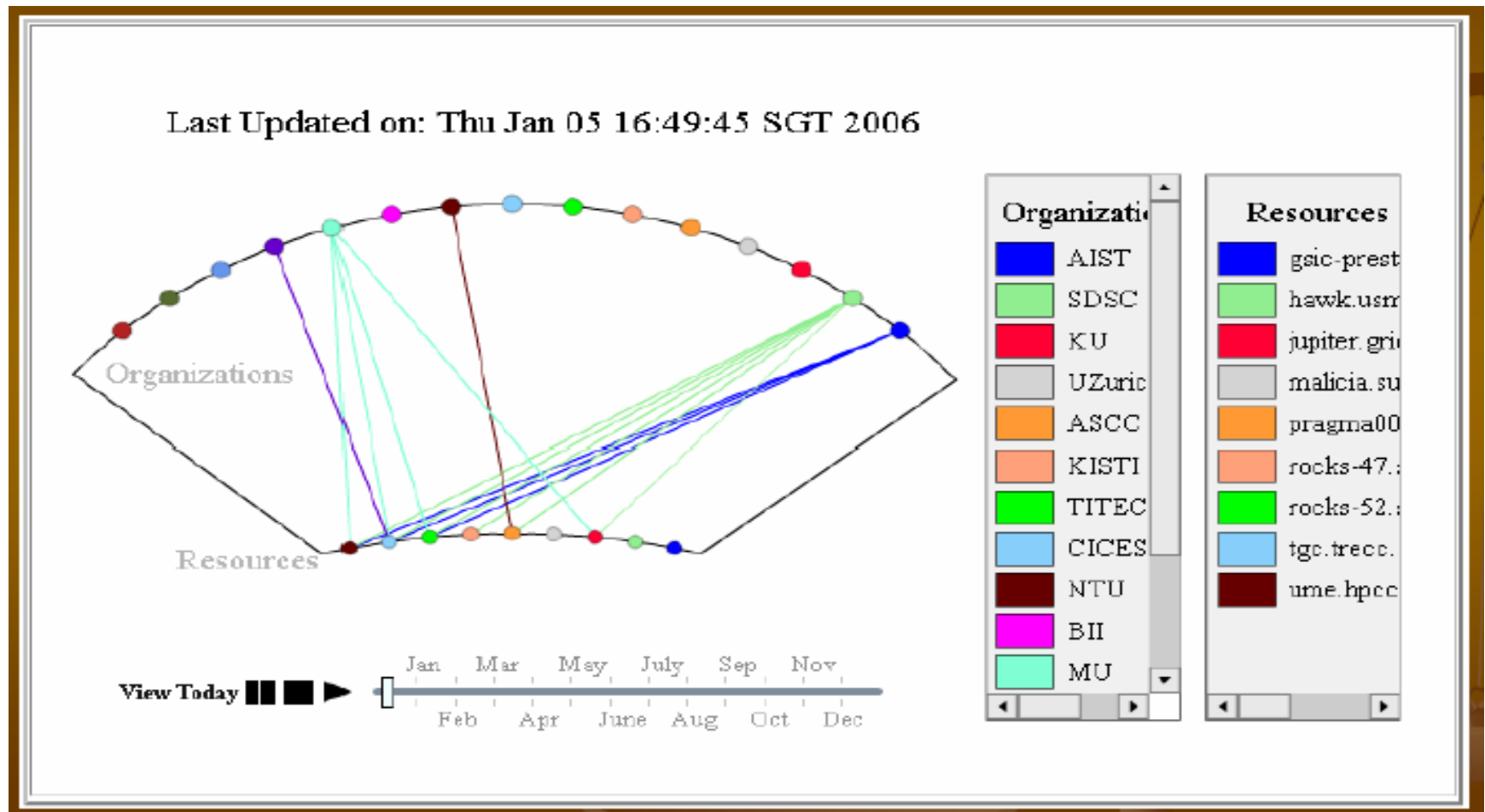
# Estudio del impacto de los incendios en la sabana australiana



# Recursos utilizados en un lapso de 24 hrs. por la aplicación



# Vista de utilización de recursos





# Vista general de utilización de recursos

Last Updated on: Thu Jan 05 16:24:30 SGT 2006



Zoom to:



Select

# Conjunción de bases de datos (y probablemente de GUI)

GGF field	MOGAS	SCMSWEB	Proposed field name	Proposed Type
-	id	id	id (primary key - auto increment)	int(20) unsigned
Username	username	local_user	username	varchar(255)
ProjectName	projectname	account_string	projectname	varchar(255)
JobId	jobid	local_job_id	jobid	varchar(255)
Queue	queue	queue	queue	varchar(255)
GridId	gridid	globus_user	gridid	varchar(255)
FromHost	fromhost	source	fromhost	varchar(255)
execHost	resource	target	exechost	varchar(255)
StartTime	starttime	submit_time	starttime	int(20)
EndTime	endtime	end_time	endtime	int(20)
Processors	processors	num_proc	processors	int(11)
NumNodes	numnodes	(NULL)	numnodes	int(11)
Cputime	cputime	cpu	cputime	int(20)
Walltime	walltime	(COMPUTE)	walltime	int(20)
Memory	memory	memory	memory	varchar(255)
Disk	(NULL)	disk	disk	varchar(255)
Network	(NULL)	(NULL)	network	int(20)
jobName	jobname	job_name	jobname	varchar(255)
Status	status	exit_status	status	int(11)
Charge	cost	(NULL)	charge	int(20)
JobType	jobtype	scheduler	jobtype	varchar(255)

# Objetivos RGW (cont.)

- 3) Contar con una Autoridad Certificadora acreditada por la Asia-Pacific Policy Management Authority (APPMa)
- 4) Como requerimiento mínimo, contar con el sistema distribuido de archivos Gfarm (GridLeS? Storage Resource Broker, SRB?)

# CIMA Project Goals

- Integrate instruments and sensors (real-time data sources) into a grid computing environment via Web Services interfaces
- Abstract instrument capabilities and functions to reduce data acquisition and analysis applications' dependence on specialized knowledge about particular instruments
- Move production of metadata as close to instruments as possible and facilitate the automatic production of metadata
- Develop a standard, reusable methodology for "grid enabling" instruments

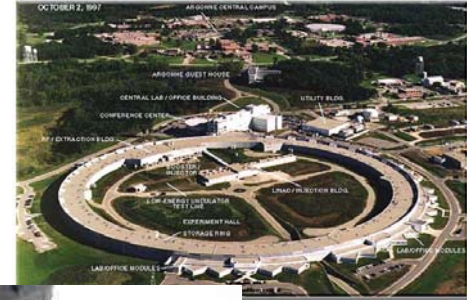


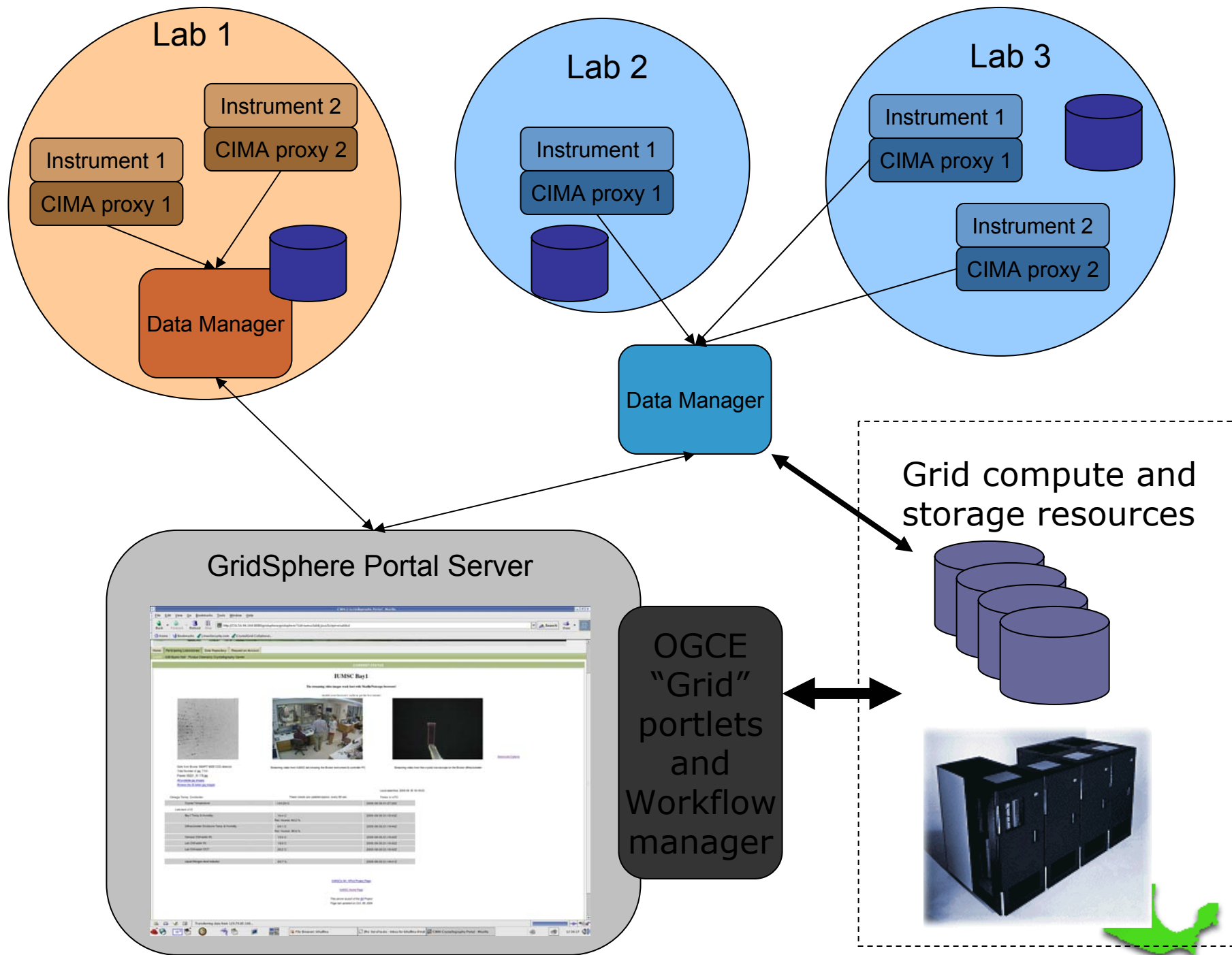


# CIMA Reference

## Implementation Applications

- Synchrotron X-Ray crystallography
  - Argonne APS ChemMatCARS & DND-CAT
  - CrystalGrid (global network of crystallography centers)
- Robotic telescopes
  - MMSF robotic optical observatory
- Sensor networks
  - Ecological observation
  - Berkeley MOTE sensor package





# Criterios para la formación de nuevos grupos de trabajo

- Debe estar compuesto por tres o más instituciones
- Debe tener al menos un proyecto bien definido
- Debe contar con uno o dos líderes responsables de manejarlo