

# Postales Desde Singapur

**Experiencias de la Reunión  
PRAGMA 8**

**Raúl Hazas Izquierdo**



# Organización

- ¿Qué es PRAGMA? ¿Qué impacto tiene?
- ¿Cuál es el estado actual de su “testbed”?
  - ¿Cómo colaboramos las instituciones mexicanas?
- ¿Qué aplicaciones se corren actualmente?
- ¿Qué problemas enfrentan?
- ¿Cómo esperan los integrantes de PRAGMA resolver los problemas?
- ¿Qué podemos aprender?



# Buscando a Nemo...



# ¿Qué es PRAGMA?

- Es una organización abierta, formada por instituciones académicas y de investigación con el fin de establecer colaboraciones a largo plazo y hacer prosperar el middleware de grid.
- Los programas de aplicación son la razón de ser de esta organización y constituyen el ímpetu para mejorar el middleware de grid.
- [www.pragma-grid.net](http://www.pragma-grid.net)



# ¿Qué impacto ha tenido PRAGMA?

- Premio de Infraestructura Distribuida: Trans-Pacific Grid Datafarm, un sistema de archivos distribuido que aprovecha múltiples trayectorias físicas a gran distancia para lograr un alto rendimiento. Se logró un sistema virtual de archivos con capacidad de 70 Terabytes entre Japón, Tailandia y EEUU. SC2003.





# Otros impactos

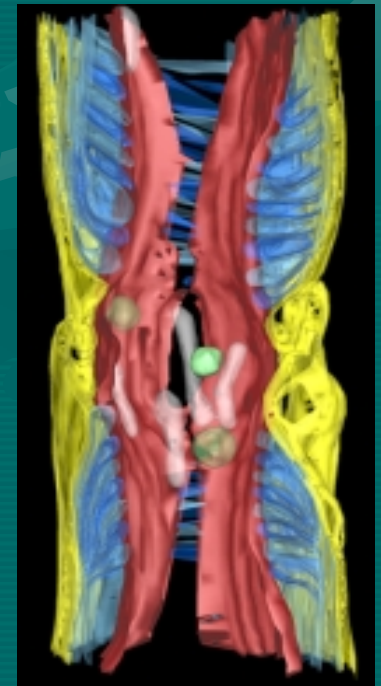
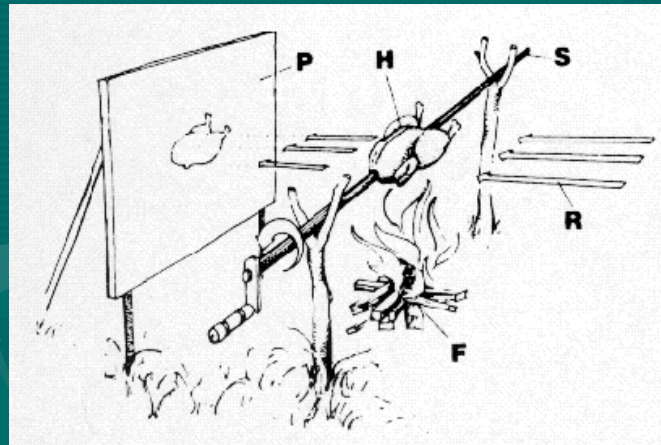
- Portal de Teleciencia: Una aplicación en la que se fusionan tecnologías de control, microscopía, bioinformática, comunicaciones ópticas y protocolos de comunicaciones. Investigadores de diferentes países utilizan los microscopios de barrido electrónico más poderosos en el mundo. Japón, Corea y EEUU.



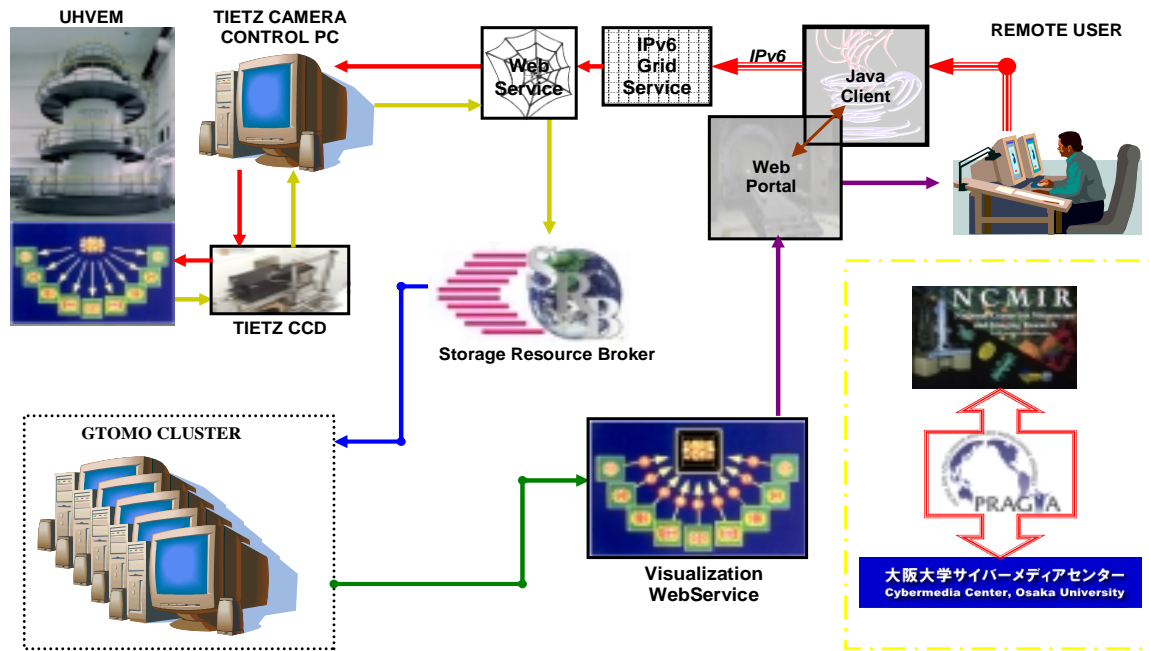
# La Tomografía Electrónica Microscópica es LA aplicación perfecta para incorporar varias tecnologías

Deriva información tridimensional de una serie de proyecciones en 2D

- Computación de alto rendimiento y manejo intensivo de datos
- Requiere el control de instrumentos únicos en el mundo
- Demanda la formación de bases de datos de estructuras biológicas
- Exige una visualización avanzada
- Necesita procesos que permitan la colaboración



# Deploying Telescience on the world's most powerful electron microscope





# ¿Cuál es el estado actual de su lecho de prueba (“testbed”)?

PRAGMA Grid Status - Netscape

File Edit View Go Bookmarks Tools Window Help

### Site Systems Membership Setup Status

(sorted by membership activation date)

Country / Region	Institution Name	System Name	Submit System Info	Provide Users Guide	Setup Monitor Account	SCMSWeb Ready	Joined Testbed Since	Status
Japan	AIST	ume	Done J	Done J	Done J	Done J	2004/06/01	active
Korea	KISTI	jupiter	Done J	Done J	Done J	Done J	2004/06/01	active
Thailand	KU	amada1	Done J	Done J	Done J	Done J	2004/06/02	active
Malaysia	USM	aurora	Done J	Done J	Done J	Ganglia	2004/06/02	active
USA	SDSC	rocks-52	Done J	Done J	Done J	Done J	2004/06/17	active
Japan	TITECH	gsic-presto	Done J		Done J	Done J	2004/06/30	active
Taiwan	NCHC	ase	Done J	Done J	Done J	Done J	2004/07/05	active
USA	NCSA	ccg-login	Done J	Done J	Done J	Done J	2004/07/07	In active
Singapore	BII	viper	Done J	Done J	Done J	Ganglia	2004/08/13	active
Mexico	UNAM	malicia	Done J		Done J	Done J	2004/08/25	active
Taiwan	ASCC	Pragma001	Done J	Done J	Done J	Done J	2004/10/01	active
India	UoHyd	amber	Done J	Done J	Done J	Done J	2004/10/12	active
Singapore	BII	marlin	Done J	Done J	Done J	Done J	2004/10/13	active
Mexico	CICESE	solaris	Done J	Done J	Done J	Ganglia	2004/11/30	active
Australia	MU	mahar	Done J		Done J		2004/12/17	active
USA	SDSC	rocks-47	Done J		Done J	Done J	2004/12/21	active
USA	NCSA	tgc	Done J	Done J	Done J	Done J	2005/02/01	active
Malaysia	USM	hawk	Done J		Done J		2005/02/16	active
China	CNIC	Pragma	Done J	Done J	Done J		2005/04/19	active



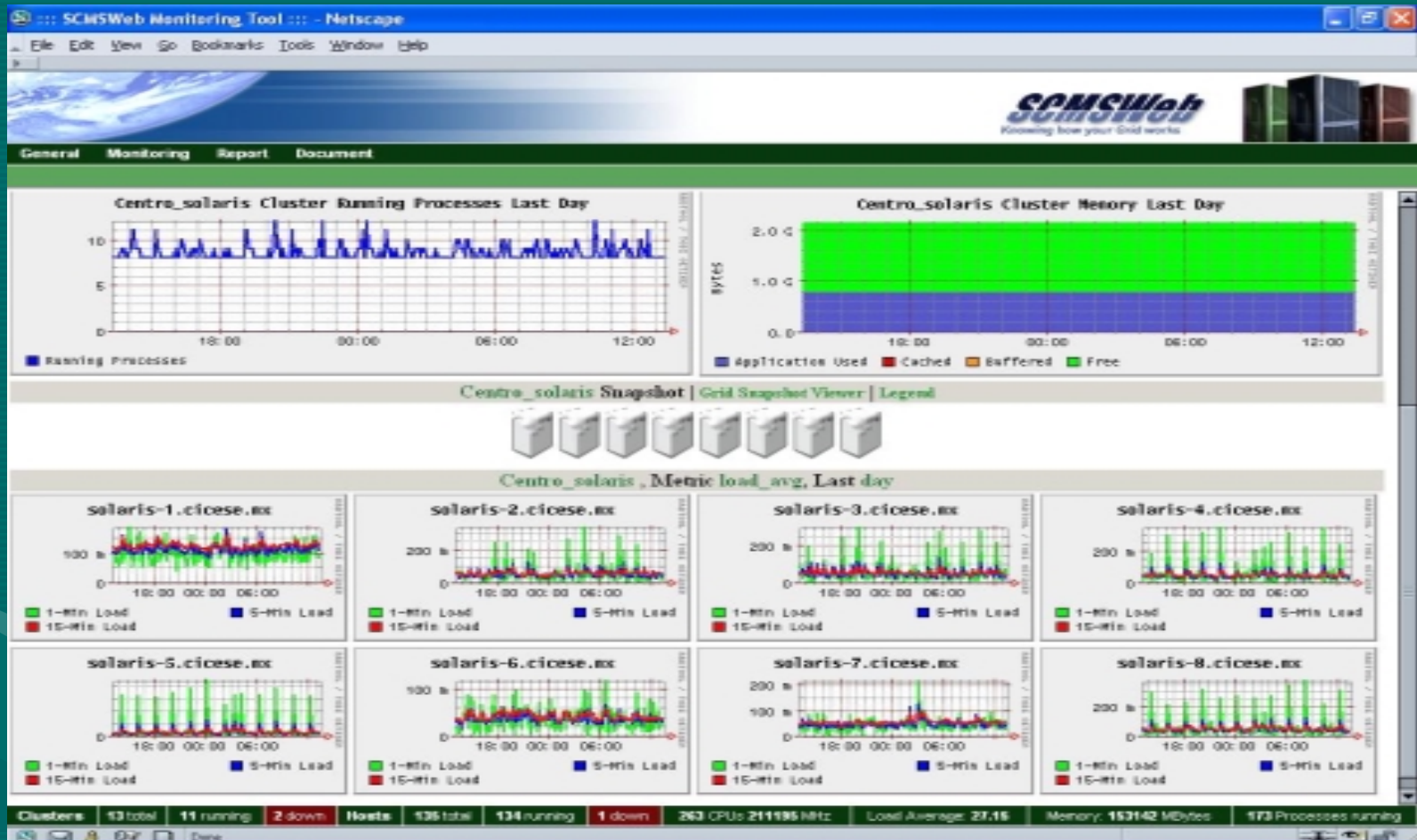
**GRAMA**  
Grid Académica Mexicana



# ¿Cómo colaboramos las instituciones mexicanas?



# CICESE en particular



**GRAMA**  
Grid Académica Mexicana





# ¿Qué aplicaciones se corren actualmente?

PRAGMA Grid Status - Netscape

File Edit View Go Bookmarks Tools Window Help

## Site Systems Support Status

Institution	Hostname	Compute Nodes	Application requirements			SCMSWeb upgrade	Notes
			BioGrid	Savannah	QM-MD		
AIST	ume	32	Done J	Done J	Done J	Done J	All done J
ASCC	pragma001	3	Done J	Done J	Done J	Done J	All done J
BII	marlin	4	Exempt	Done J	Done J	Done J	All done J
CICESE	solaris	7	Exempt	Exempt	in progress	Exempt	Working on hardware problem
CNIC	pragma	8	Exempt	Exempt	Done J	Exempt	All done J
KISTI	jupiter	16	Done J	Done J	Done J	Done J	All done J
KU	amata1	14	Exempt	Done J	Done J	Done J	All done J
MU	mahar	50	Exempt	Done J	in progress	in progress	
NCHC	ase	8	Done J	Done J	Done J	Done J	All done J
NCSA	tgc	12	Done J	Done J	Done J	Done J	All done J
SDSC	rocks-52	15	Done J	Done J	Done J	Done J	All done J
SDSC	rocks-47	3	Exempt	Exempt	Done J	Exempt	All done J
TITECH	gsic-presto	8	Done J	Done J	Done J	Done J	All done J
UNAM	malicia	5	Exempt	Done J	Done J	Done J	All done J
UoHyd	amber	8	in progress	in progress	in progress	in progress	
USM	hawk	16	in progress	Done J	in progress	in progress	
USM	aurora	16	Done J	Done J	Done J	in progress	Pending OS upgrade in May 2005
Done			8	11	13	10	
Exempt			7	3	0	3	
In progress			2	3	4	4	

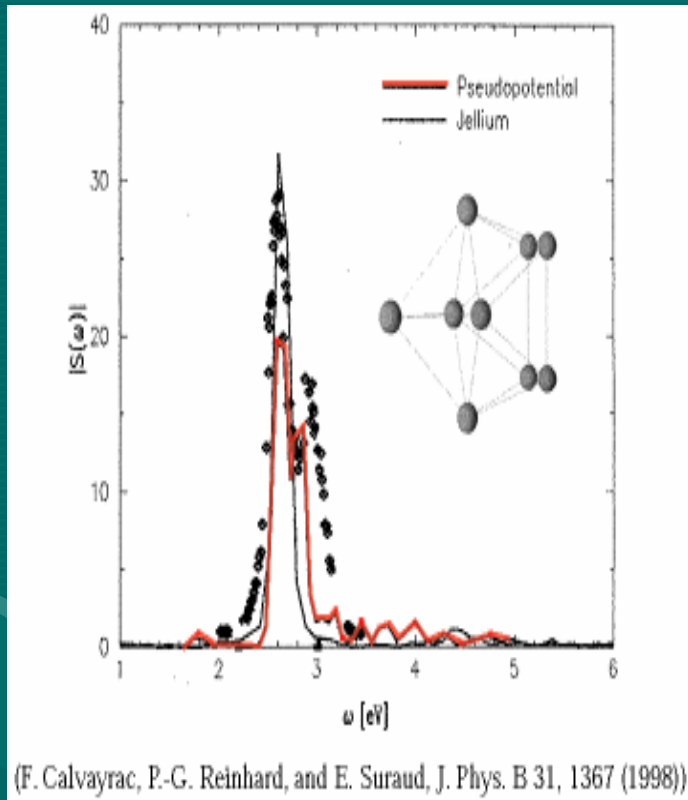


**GRAMA**  
Grid Académica Mexicana



# 1ª Aplicación

## Time-Dependent Density Functional Theory (TDDFT)



- **Modelo de Química Cuántica**
- **Portada a un ambiente de grid por Nobusada (IMS), Yabana (Tsukuba Univ.) y Yusuke Tanimura (AIST) utilizando Ninf-G**
- **Experimento corrió de 1/06/04 ~ 31/08/04**
- **10 sitios, 8 países, 198 CPUs**
  - # de corridas principales: 43
  - Tiempo Total de Ejecución: 1210 horas (50.4 días)
  - Corrida más larga: 164 horas (6.8 días)
  - Duración promedio por corrida : 28.14 horas (1.2 días)
- **Mejoras importantes a Ninf-G**

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





# Aplicaciones de Manera Rutinaria

## 2<sup>nd</sup> Application - mpiBLAST

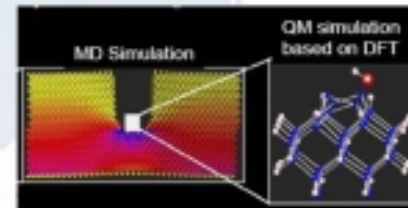
A DNA and Protein sequence/database alignment tool

- Drivers (ASCC, Taiwan)
  - Hurng-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



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

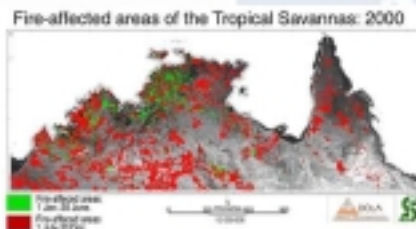
- Ninf-G based
- Driver: Hiroshi Takemeya
- Started 4/19/05
- MPI
- Multiple applications
- Fault tolerance
- Auto migration



## 4<sup>th</sup> 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



## 5<sup>th</sup> Application – iGAP/Gfarm

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



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

Cindy Zfeng, CICESE Visit, 4/26/05

National Institute of Advanced Industrial Science and Technology

Cindy Zfeng, CICESE Visit, 4/26/05

# ¿Qué problemas enfrentan?

- **M. Katz:** Todavía se necesita mucho trabajo para lograr que una aplicación corra en el lecho de prueba.
- **P. Papadoupulos:** Experimentos replicables:
  - Simpleza en la instalación, configuración, etc.
  - Contar con tutoriales y ejemplos
  - El investigador líder no es computólogo



# Otros problemas

- **C. Zheng:** Es necesario atraer un mayor número de científicos a PRAGMA
  - Con verdaderas aplicaciones en ciencia
  - No únicamente demos
  - Resultados sustantivos de manera rutinaria
  - Formación de recursos humanos para portar las aplicaciones de un cluster a la Grid.



# ¿Cómo esperan los integrantes de PRAGMA resolver los problemas?

- Mayor integración entre los diferentes grupos de trabajo,
- Mantener la relación entre los miembros de la comunidad,
- Ganar la confianza de investigadores de las diferentes áreas temáticas,
- Diseminar las experiencias obtenidas





Collaboration Overview: Annual Report 2004-2005

PRAGMA



PACIFIC RIM APPLICATIONS AND GRID MIDDLEWARE ASSEMBLY

[www.pragma-grid.net](http://www.pragma-grid.net)

# Contents: 2004-2005

- Overview
- Accomplishments
- PRIME
- Working Groups
- Institutions
- References
- Opportunities
- Sponsors

<http://www.pragma-grid.net>

MA  
ca Mexicana



CICESE



# ¿Qué podemos aprender?

- Carecemos aún de una masa crítica,
- Conocer los requerimientos de los usuarios desde su perspectiva,
- Cruzar la “barrera de la jerga técnica”

Para solventar los puntos anteriores es necesario armarnos de paciencia y apoyar unos cuantos proyectos de aplicación a partir de etapas tentativas.



# Otros tópicos

- Formación de Recursos Humanos a nivel licenciatura (postgrado y “PRAGMA classes”, aún por definirse)
- Integración de Redes de Instrumentos con Grids,
- Ciber-infraestructura de Singapur



# PRIME 2004

PRIME

*Pacific Rim  
Undergraduate Experiences*



Class of 2004

An international research and cultural experience to better prepare students for the global workplace of the 21st century

Application Deadline  
March 4, 2005

[prime.ucsd.edu](http://prime.ucsd.edu)



# Collaborative Lake Metabolism Project

About the Project

Proposal

People

Data (near real time)

Workshops to Build Capacity for Observatories

Presentations

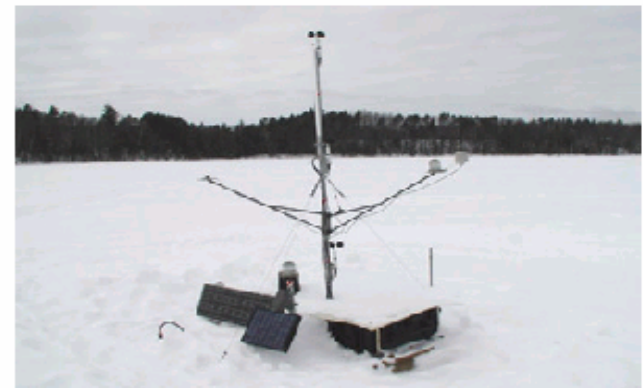
Opportunities for Students & Post-Docs

Meeting Notes

Upcoming Events

Gallery

Links





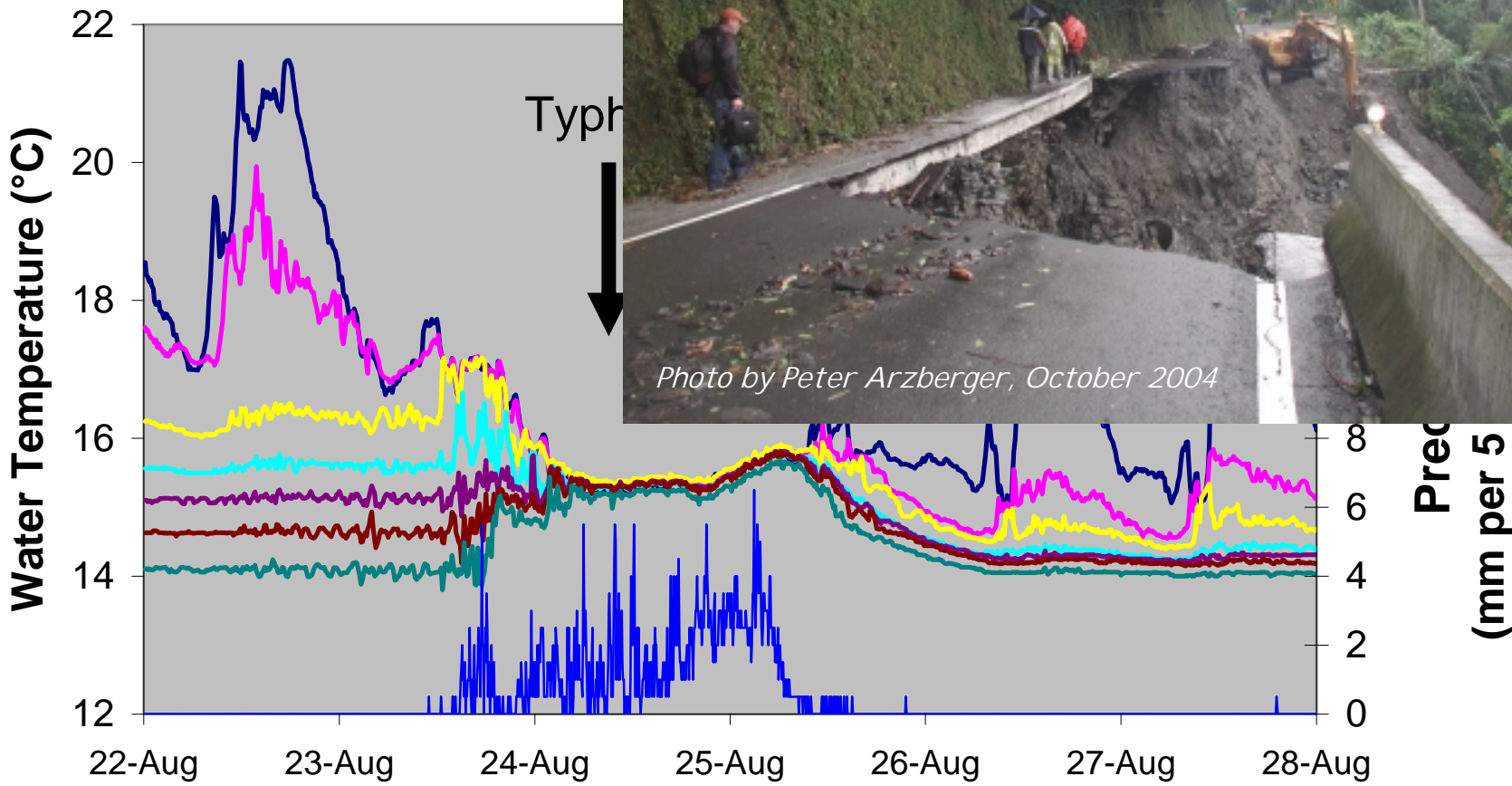
# An example of critical quantities and thresholds

Yuan Yang Lake,

Access can be difficult during the most interesting times



Photo by Peter Arzberger, October 2004



Used by NSF Director Feb 2005



**GRAMA**  
Grid Académica Mexicana

