

# *XtremWeb : une plate forme de calcul global*

Oleg Lodygensky  
LAL – IN2P3, Université Paris-Sud ;  
LRI, Université Paris Sud.

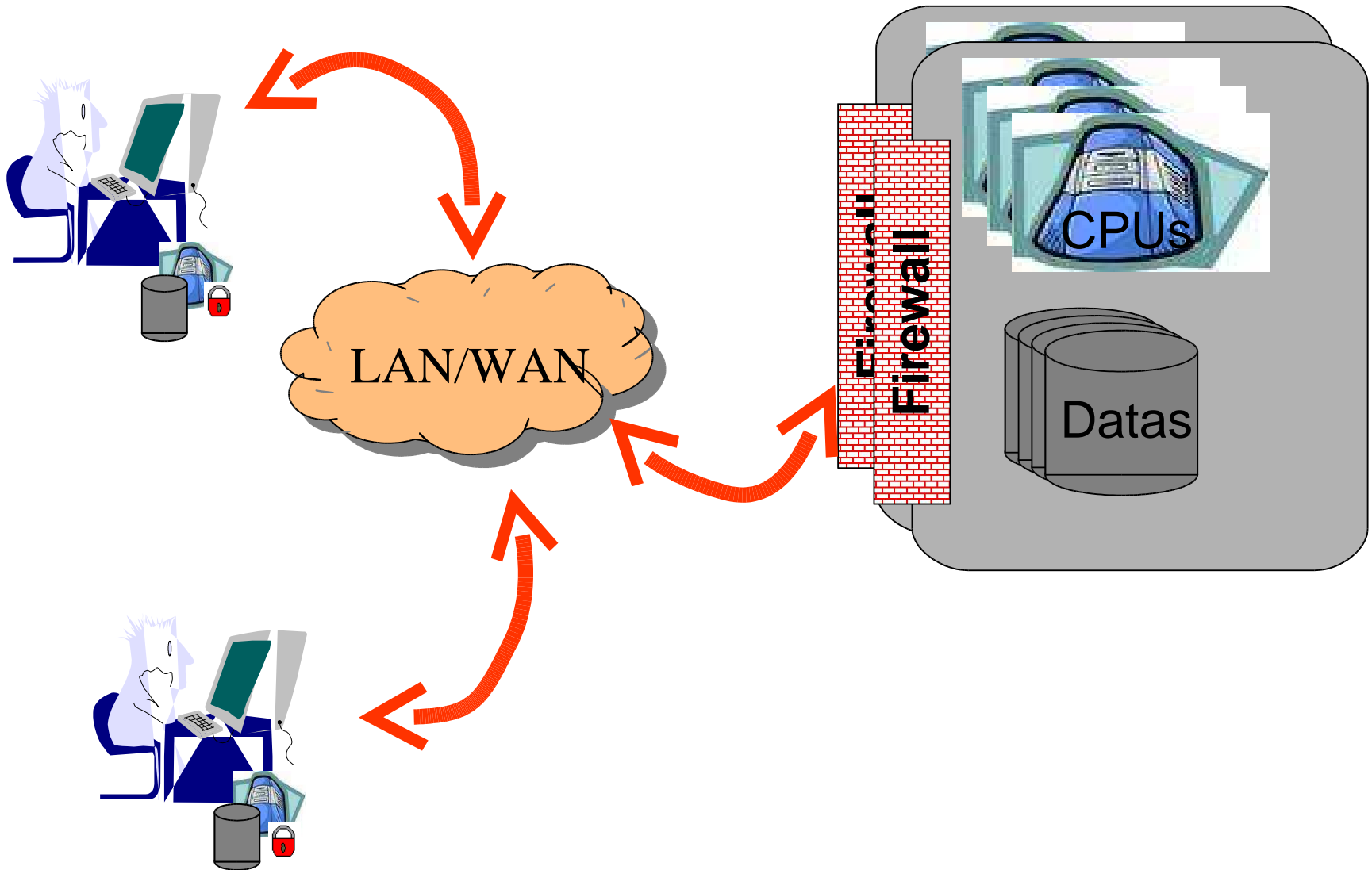


**Action Concertée Incitative [ACI]**  
**Globalisation des Ressources Informatiques  
et des Données [GRID]**

# Sommaire

- **Les grilles**
- XtremWeb
- Déploiements
- Applications
- Références

# Les grilles : schéma



# Les grilles: justifications économiques

## Optimiser l'utilisation des ressources

- Un seul site :
  - ✓ augmenter les capacités coûte cher
    - risque de sous utilisation
  - ✓ rester à capacité constante
    - temps de réponse “inacceptable”
- **Plusieurs sites :**
  - ✓ **distribution des coûts**
  - ✓ **distribution de la charge entre les sites**

Mythe : les grilles fournissent des ressources gratuites

# Les grilles : points essentiels

## Partager des ressources entre différents domaines administratifs

- Sociologie :
  - ✓ définir des protocoles d'utilisation des ressources partagées
- **Standardisation :**
  - ✓ **des environnements**
  - ✓ **des services**
- **Sécurité**
  - ✓ **identification**
  - ✓ **autorisations**
  - ✓ **comptabilité**

# Sommaire

- Les grilles
- **XtremWeb**
- Déploiements
- Applications
- Références

# XtremWeb

## Motivations

Agréger des CPUs pour :

- utiliser des ressources distribuées “volontaires” ;
- construire une plate forme stable et sécurisée, à partir d'éléments volatiles et même potentiellement “agressifs” ;
- appliquer les paradigmes de programmation distribuée (MPI, RPC...) ;
- étudier les rapprochements possibles avec les “Grids”.

C'est une plate forme de [Calcul Global](#)

# XtremWeb 1.3.7

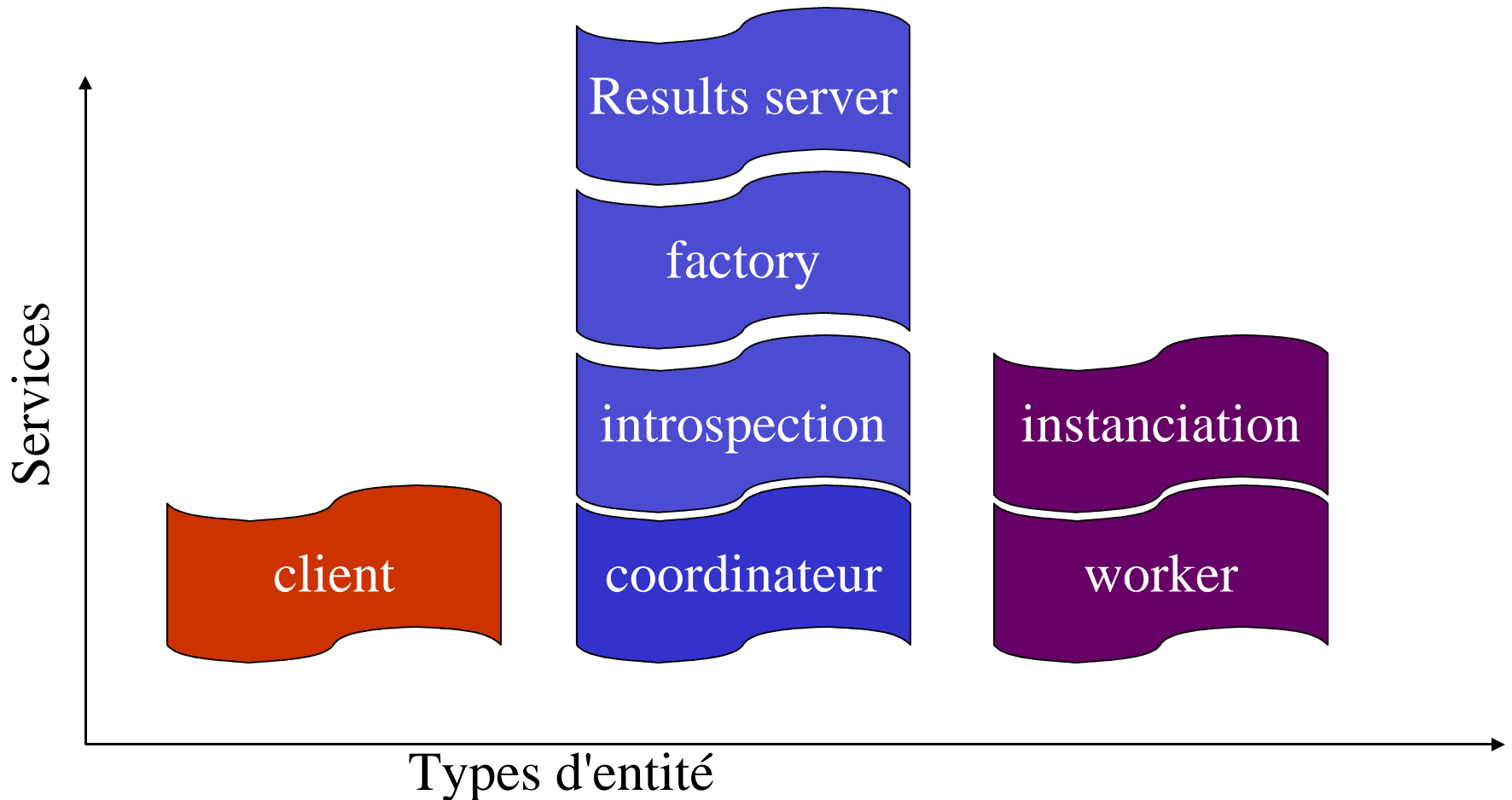
## En un mot :

- calcul distribué CG-P2P
- Sécurité (Sandbox, SSL, identifications, autorisations)
- multi plate forme (Linux, Windows, MacOS)
- checkpoint applicatif
- migration des binaires
- politique d'activation (vol de cycles)



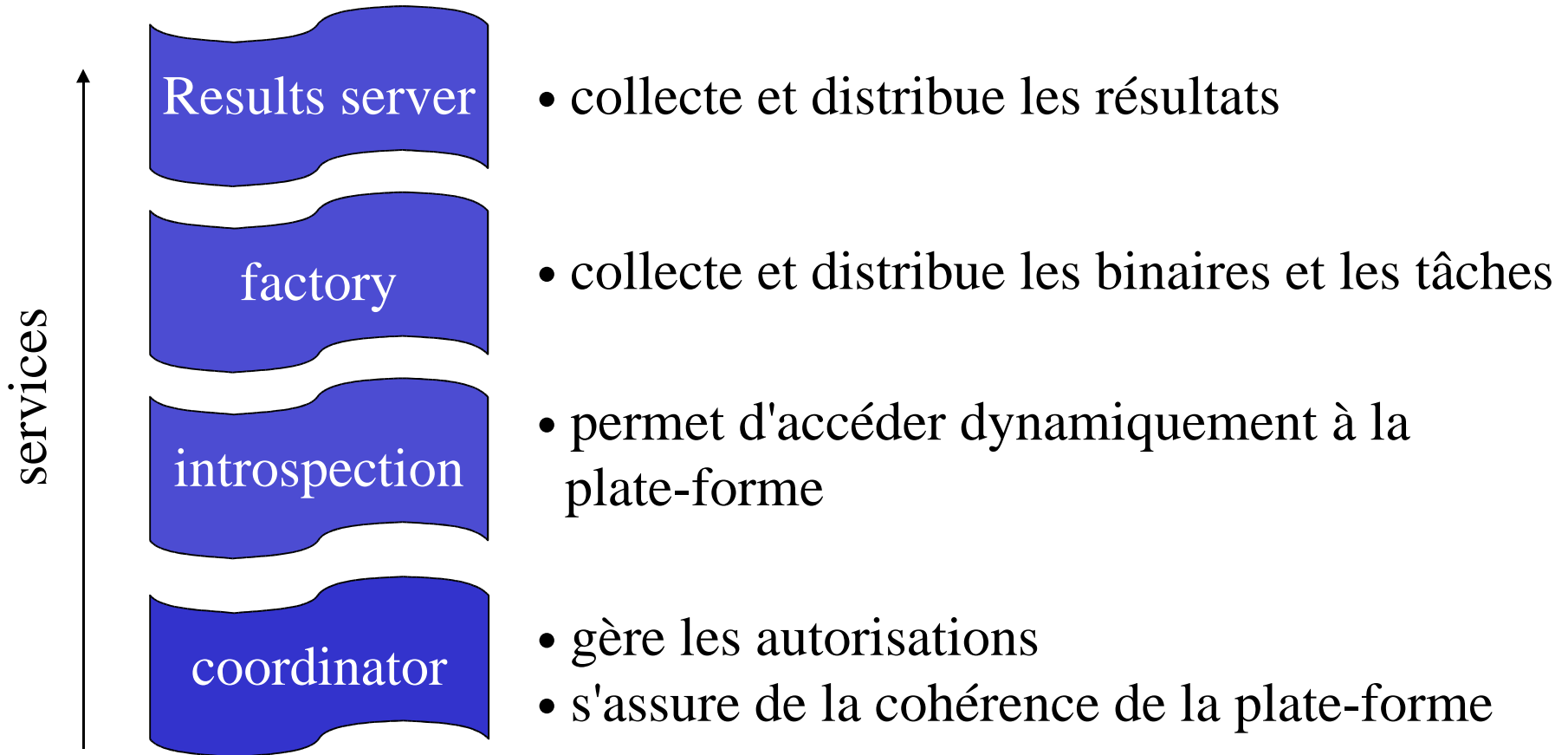
# XtremWeb : architecture

- architecture centralisée
- Global Computing et P2P
- 3 entities : **client**; **coordinateur**; **worker**



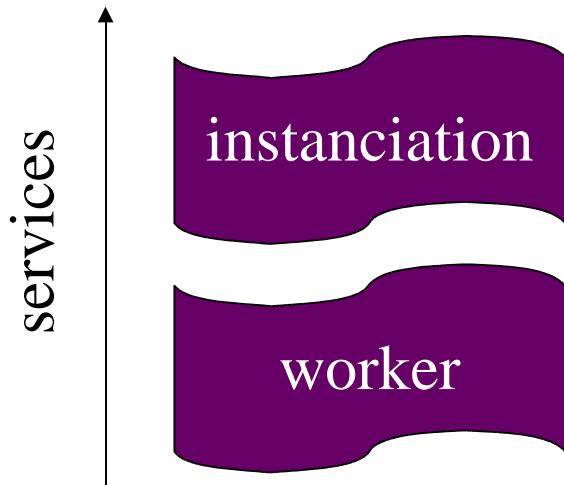
# XtremWeb : coordinateur

## Architecture



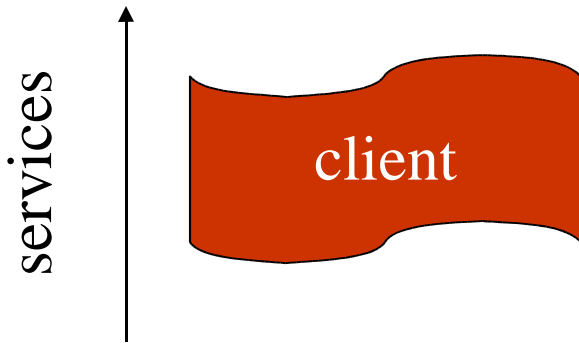
# XtremWeb : worker

## Architecture



- exécute les jobs en fonction de la politique choisie
- gère les communications
- gère les différents objets
  - ✓ binaires ;
  - ✓ tâches ;
  - ✓ résultats.

# XtremWeb : client



- gère les communications
- permet d'agir sur la plate-forme en fonction des autorisations accordées pour gérer :
  - ✓ les binaires ;
  - ✓ les workers ;
  - ✓ les utilisateurs ;
  - ✓ les jobs ;
  - ✓ les résultats.

# XtremWeb : technologies



- Java



- Java
- MySQL
- Apache
- ...
- ganglia etc.



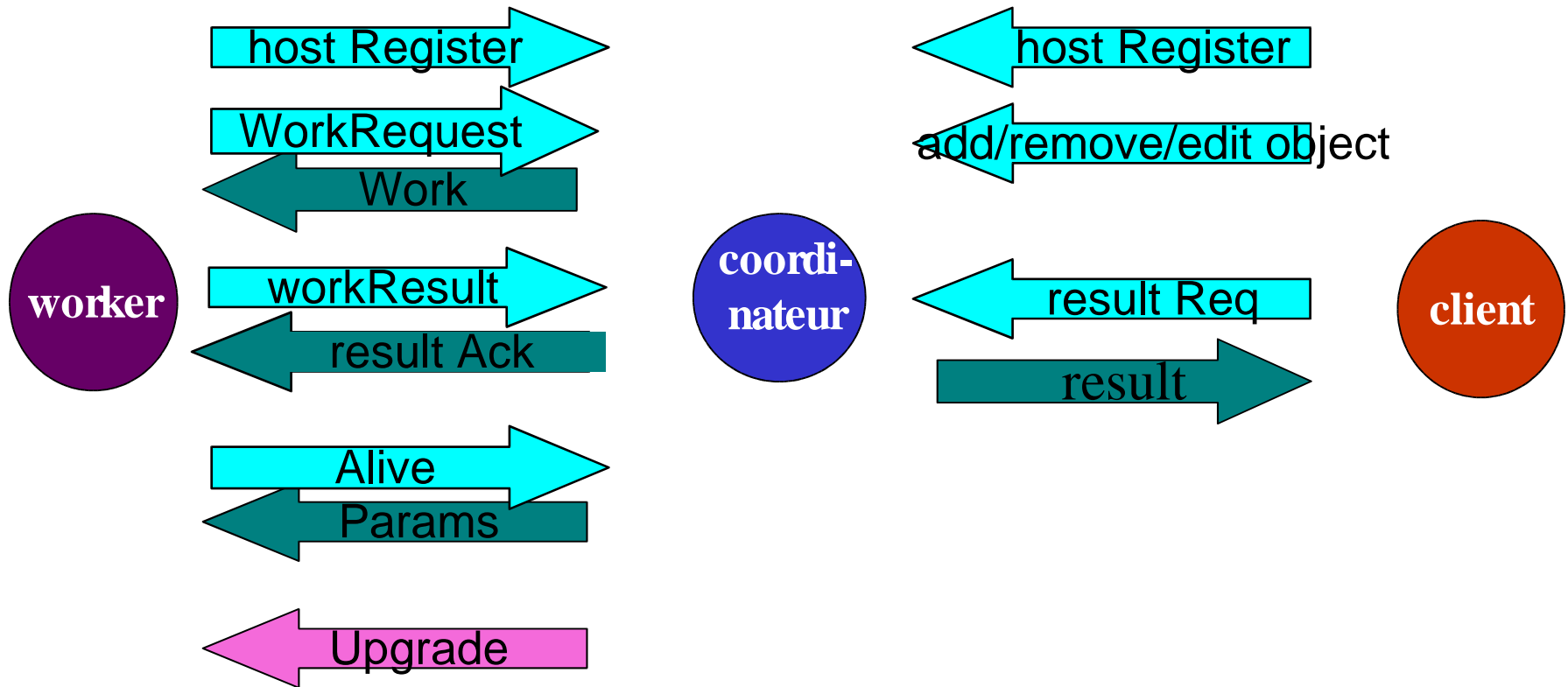
- Java
- C (Jni)

Communications

TCP / SSL / XML-RPC / RMI

# XtremWeb : protocoles

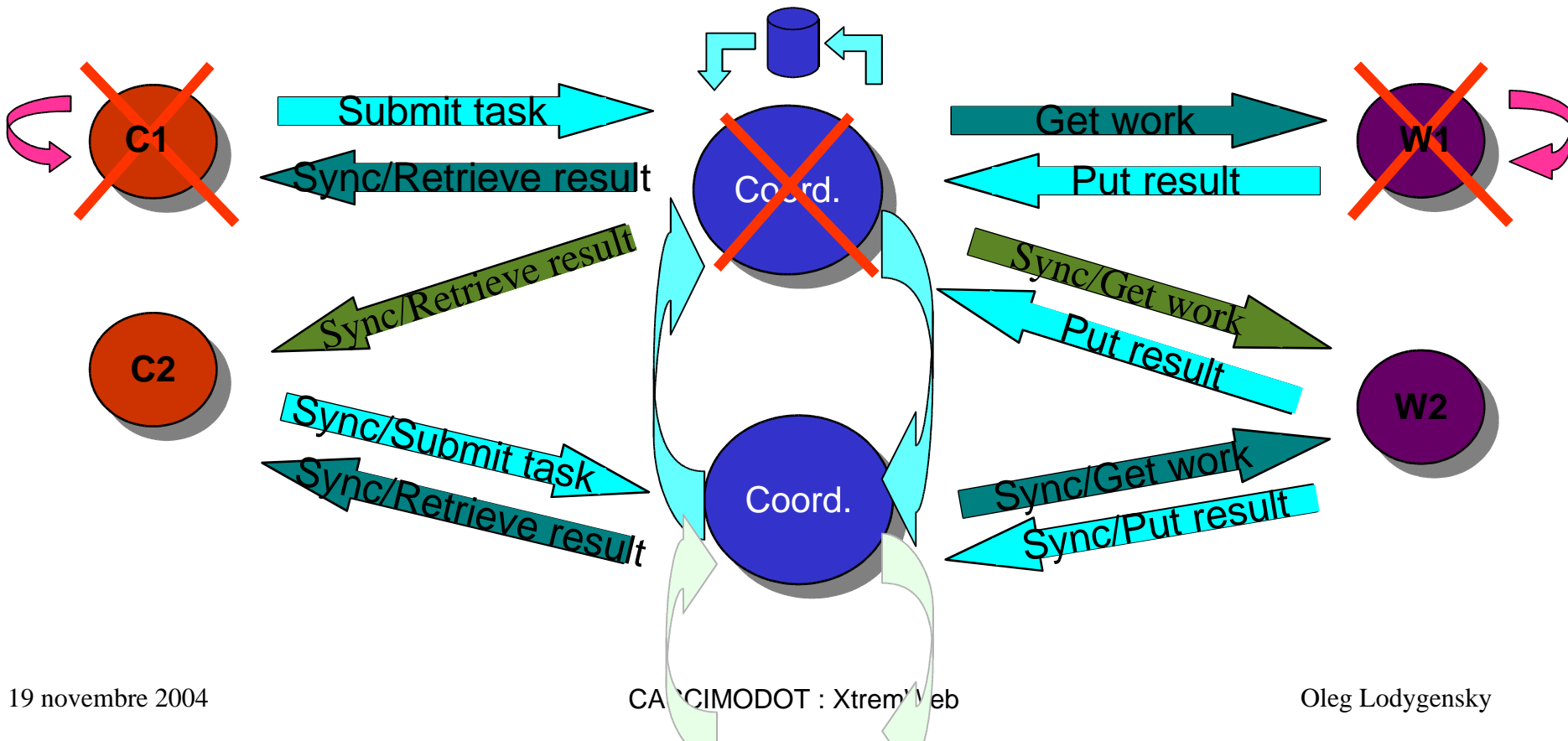
Mode “pull” : les workers et clients initient tout dialog.



# XtremWeb : tolérance aux pannes

Modèle de tolérance aux pannes des systèmes répartis :

- **Réplication passive** (clients et workers s'adressent à 1 coordinateur)
- + **log de message optimiste sender based** (une entité en interaction directe avec une autre peut reconstruire son état en cas de reprise).



# Sommaire

- Les grilles
- XtremWeb
- **Déploiements**
- Applications
- Références



# XtremWeb : modèles de déploiement

Le **coordonateur** est installé par l'administrateur.

Les **clients** sont fournis à qui de droit, éventuellement téléchargeables depuis un site web.

## Workers : Trois modèles d'installation

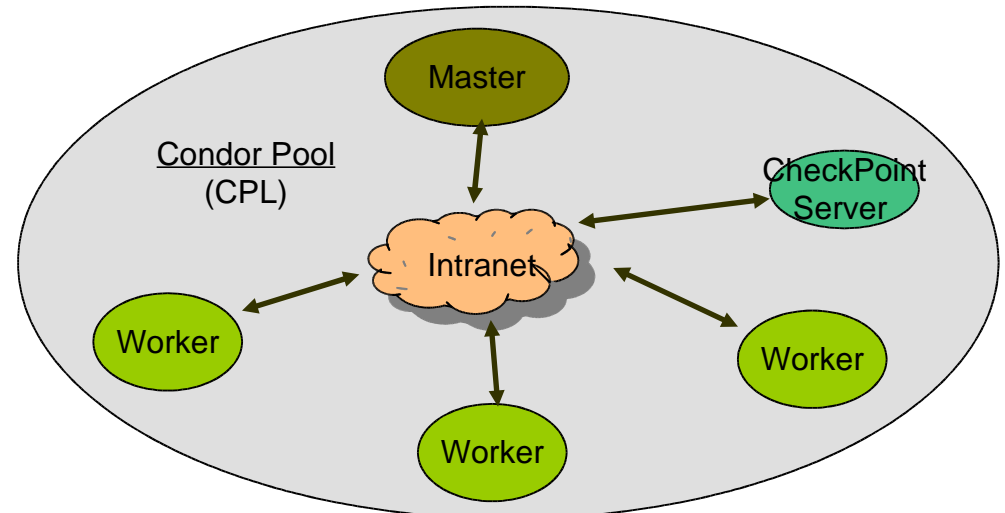
- **PC volontaires** :
  - ✓ installation par les participants eux mêmes
- **Clusters** (e.g. salle de TP) :
  - ✓ **installation par l'administrateur de la salle** (*NFS*)
- **Systemes de traitement de tâches** :
  - ✓ **Condor**
  - ✓ **PBS...**



### Gestion des tâches :

- migration des tâches (éventuellement depuis le dernier CP)
- les tâches sont sûres (responsabilité du domaine)  
(UID/GID and/or PIK)
- les machines sont sûres (responsabilité du domaine)

Les machines  
sont dans un seul  
domaine administratif

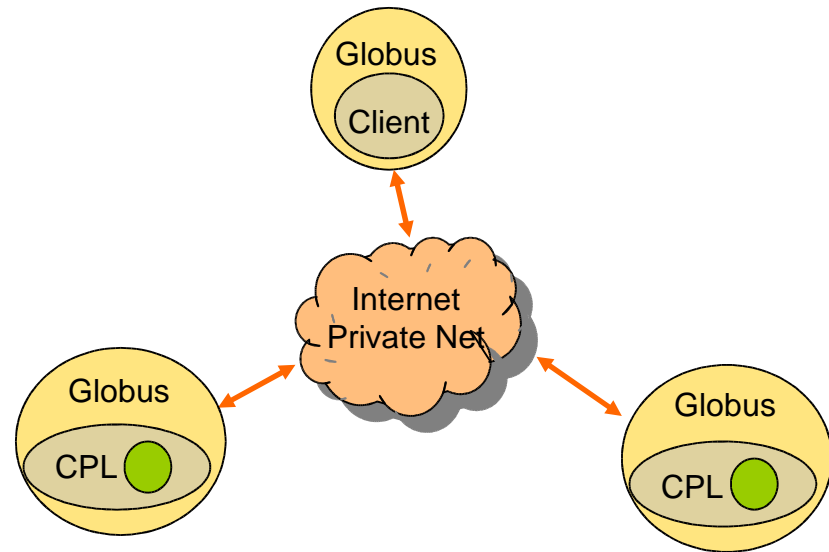


# Condor et le Grid

Avec Globus (Condor-G) on peut :

- connecter plusieurs domaines Condor
- la sécurité et l'administration s'appuient sur Globus (GRAM, GASS, GSI)

Interconnection  
de pools Condor  
de différents domaines



Mais installer et utiliser Globus

augmente la complexité

# Condor vs XtremWeb

## Condor

- mode “push”
- sécurité déléguée
- déploiement par domaine
- gestion des ressources par correspondance (*matchmaking*)
- déjà plusieurs installations

## XtremWeb

- mode “pull”
- sécurité incluse
- déploiement “global”
- *matchmaking*, mais...

# Déployer XtremWeb sur Condor

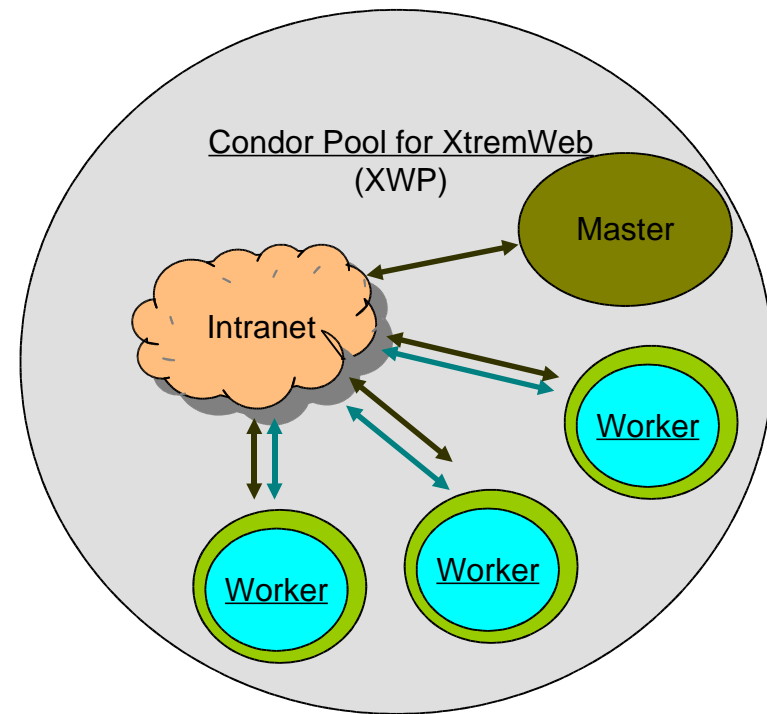
## Déployer des workers XtremWeb comme des tâches Condor

### Les avantages pour Condor :

- le mode “pull”
- sécurité individualisée (sandboxing + SSL)

### Les avantages pour XtremWeb :

- déploiement
- la gestion par domaine



# Connecter des Pools Condor avec XtremWeb

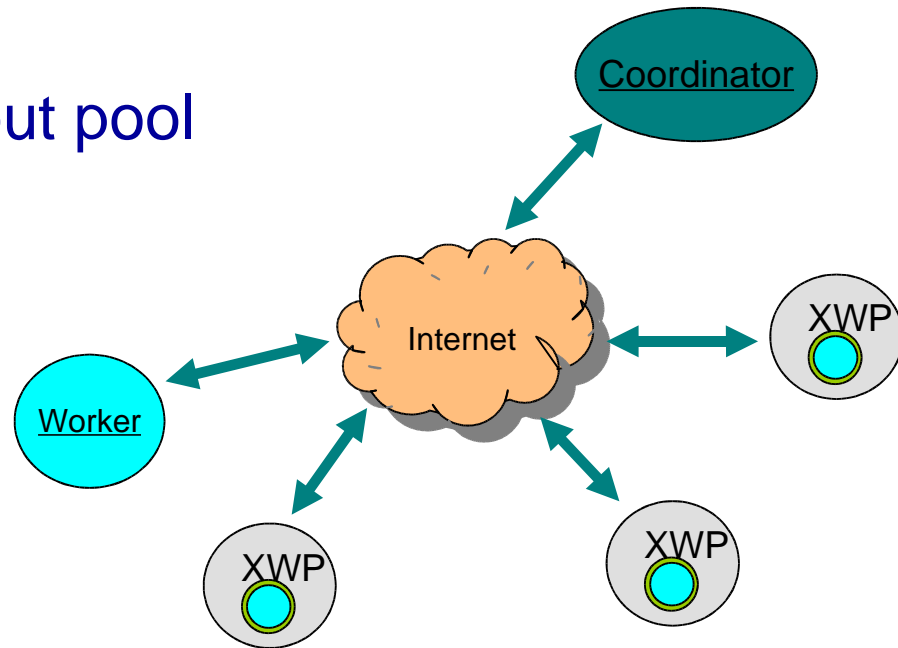
Installer un serveur XtremWeb et ses workers

Les avantages pour Condor :

- inclure des machines de tout pool
- installer une grille légère

Les avantages pour XtremWeb :

- gérer les workers par pool



# Sommaire

- Les grilles
- XtremWeb
- Déploiements
- **Applications**
- Références

# Etude des rayons cosmiques à haute énergie

## LABORATOIRE de l'ACCELERATEUR LINEAIRE

- Detect and study  $10^{19}$  eV cosmic rays
- The world's largest cosmic ray detector
- \$100M (30% USA; 30% South America; 40% others)
- More than 40 institutes in the collaboration
- Computing
  - 100Mb/Day expected
  - 10-100 hours simulation time





# Auger-XW (AIRES): physique des hautes énergies

Application :

AIRES

Deployment:

- Coordinateur au LRI
- Madison: 700 workers

Pentium III, Linux

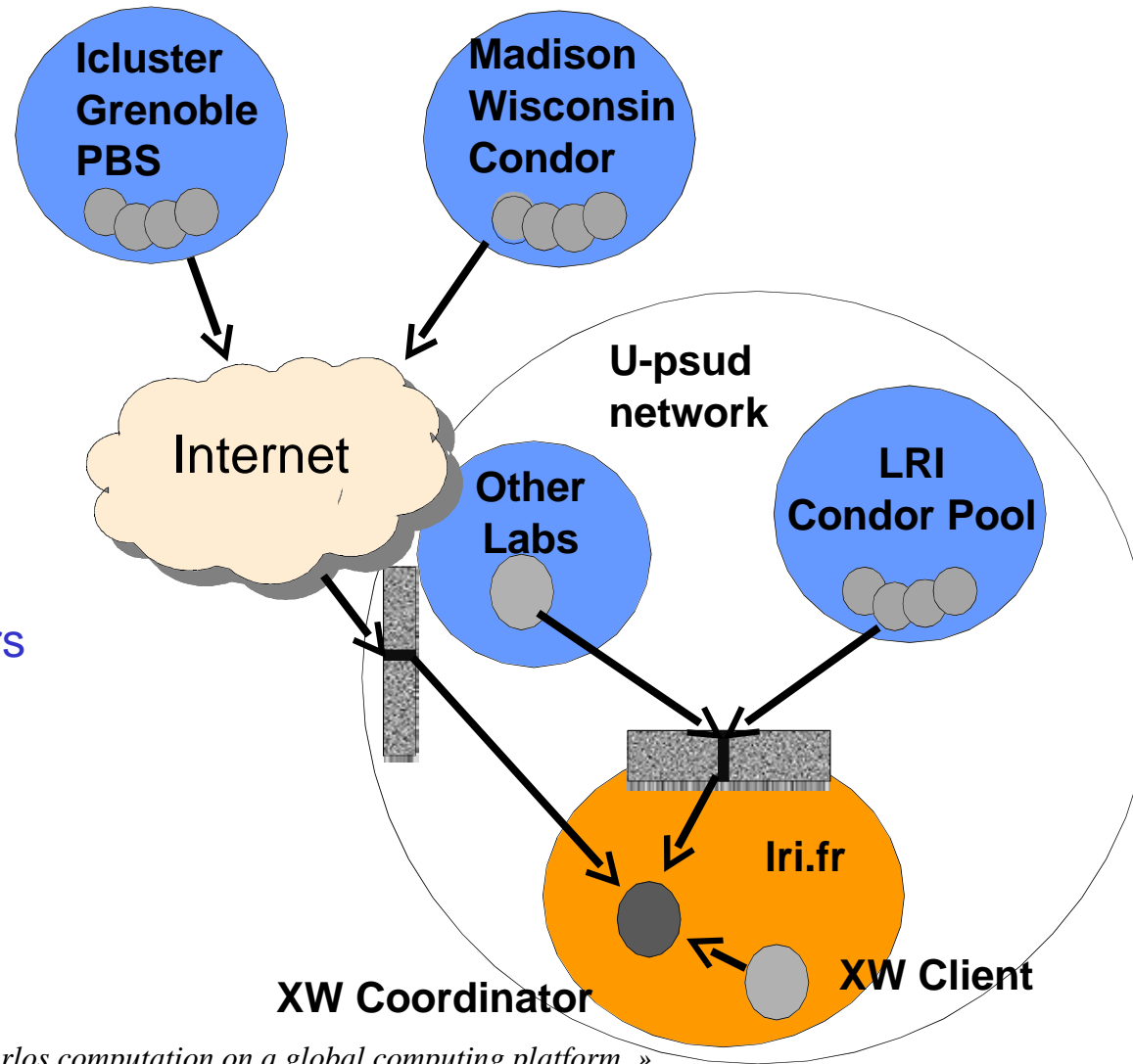
(500 MHz+933 MHz)

- Grenoble cluster: 146 workers  
(733 Mhz)

- LRI: 100 workers

Pentium III, Athlon, Linux

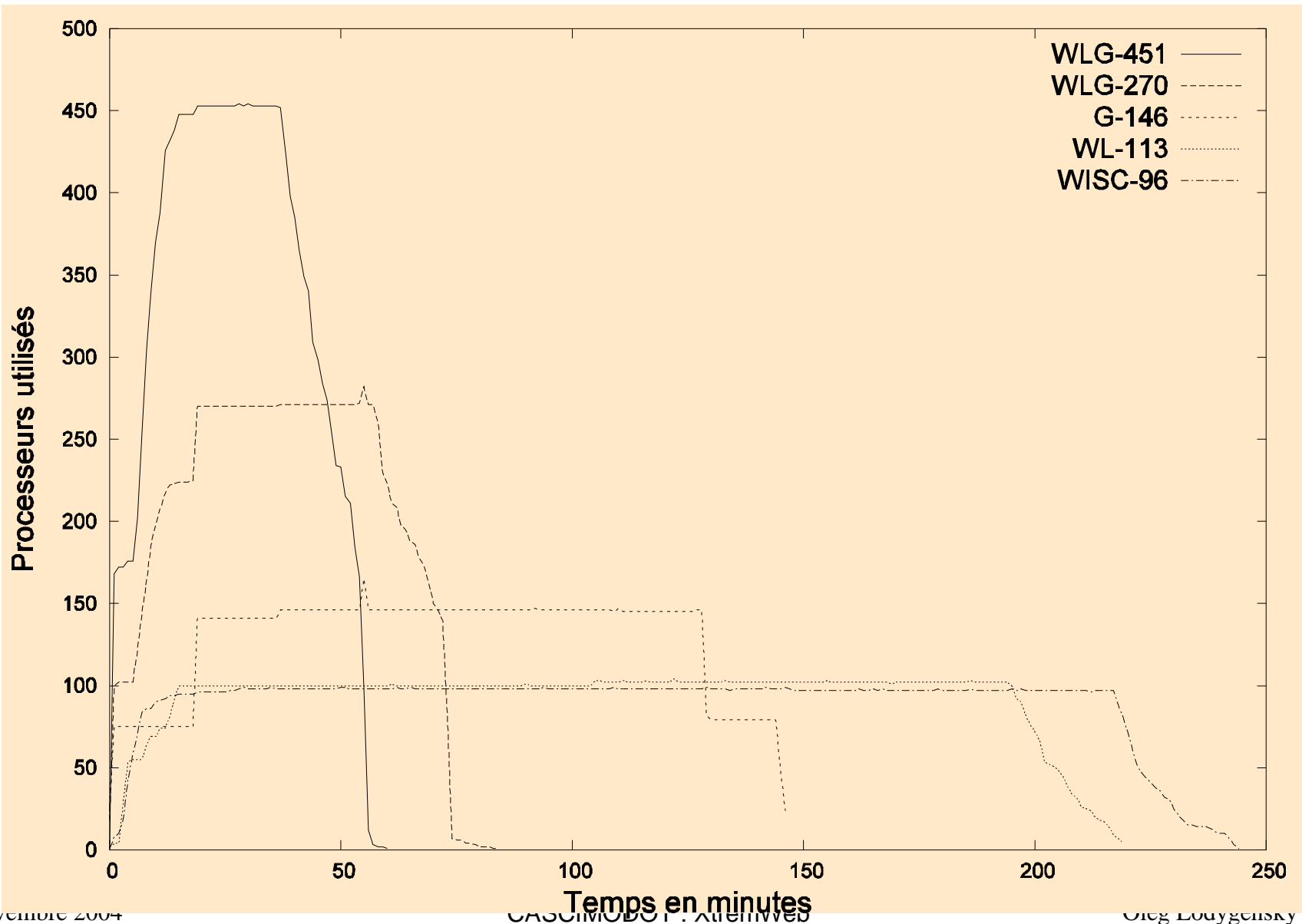
(500MHz, 733MHz, 1.5 GHz)



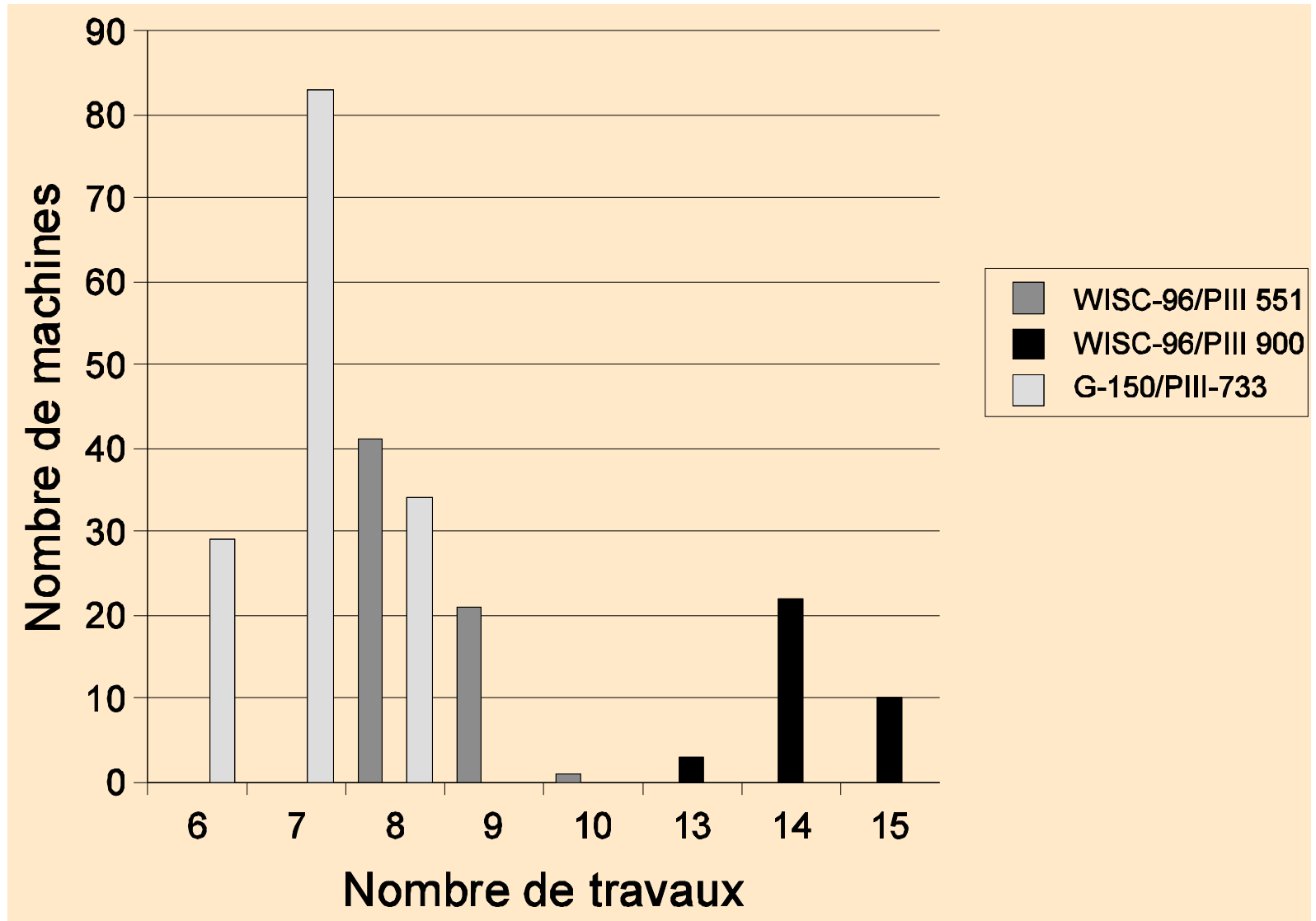
« Augernome & XtremWeb: Monte Carlos computation on a global computing platform. »

O. Lodygensky, G. Fedak, F. Cappello, V. Neri, A. Cordier  
*CHEP 2003, March 24-28, 2003, La Jolla, California, USA.*

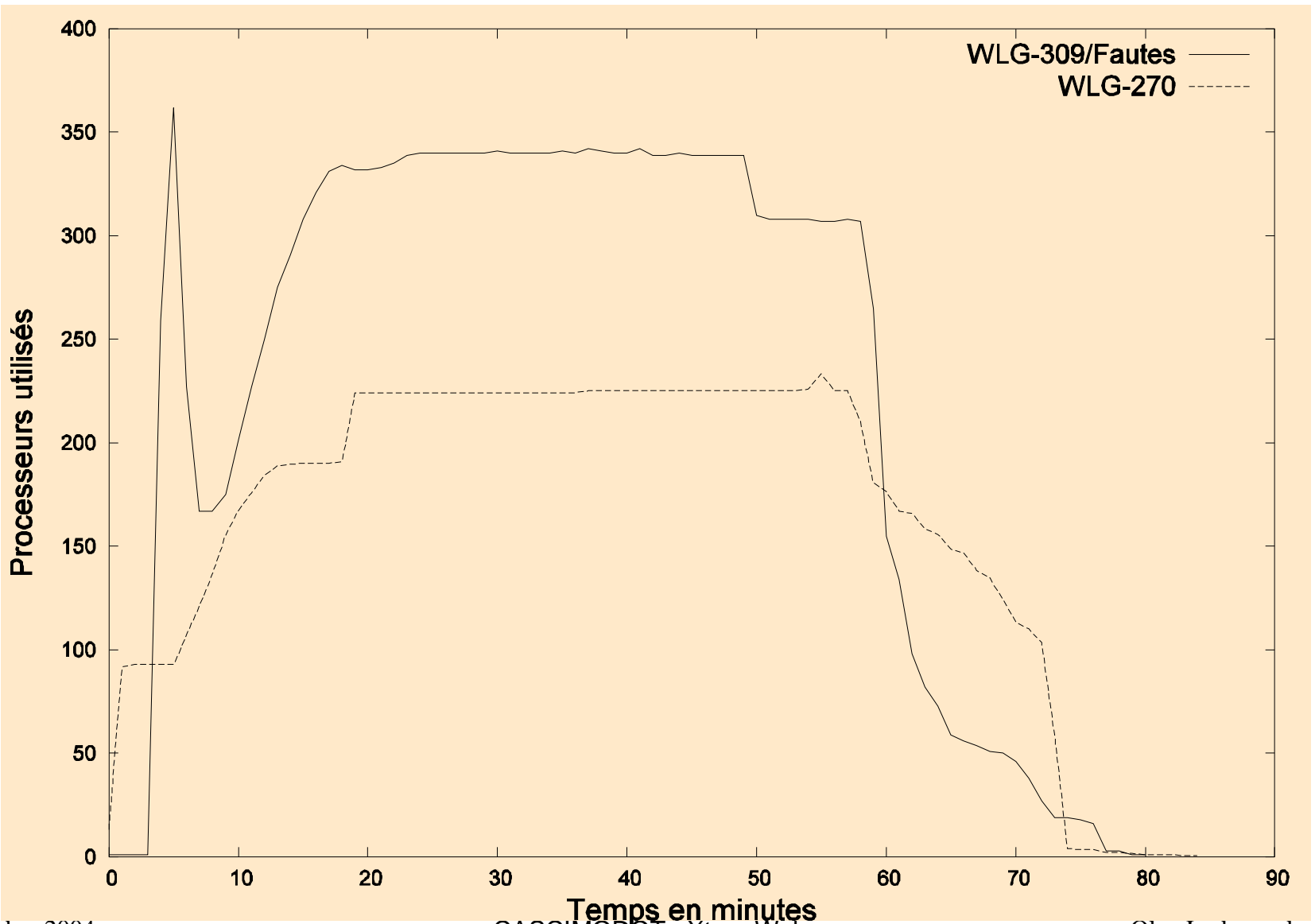
# Auger-XW (AIRES): physique des hautes énergies



# Auger-XW (AIRES): physique des hautes énergies



# Auger-XW (AIRES): physique des hautes énergies



# Etude sur les protéines

## **INSTITUT de BIOCHIMIE et de BIOPHYSIQUE MOLECULAIRE et CELLULAIRE**

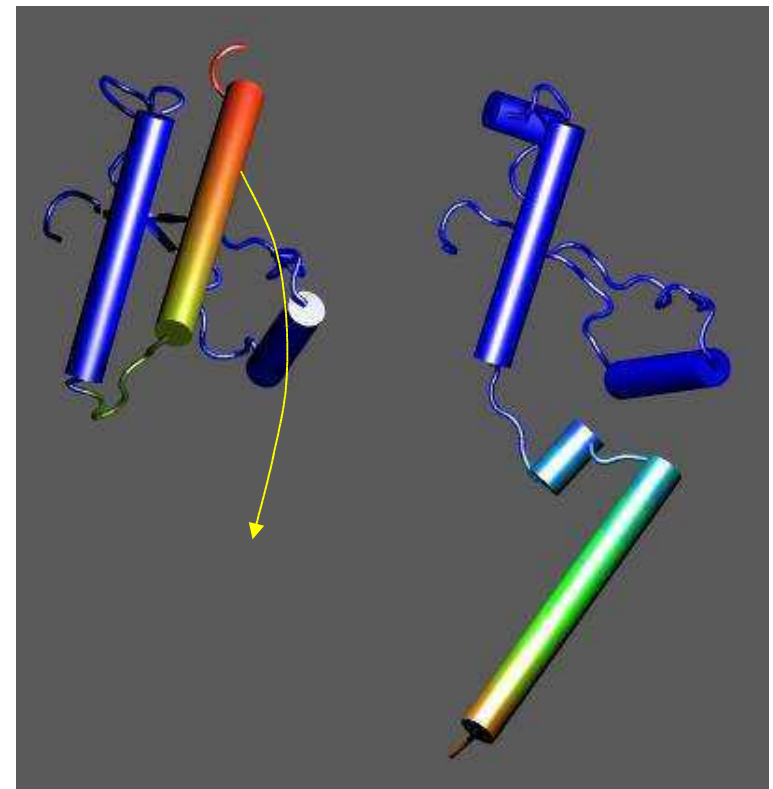
- Comprendre/maitriser les paramètres de stabilité et d'expression d'activité d'une protéine.
- Analyse des propriétés dynamiques de la structure protéique.
- Evaluation des facteurs de stabilité et de perturbation du processus de repliement par mutations.
- Approche expérimentale : mutagénèse de protéines modèles.
- Modélisation moléculaire: explorer les possibilités conformationnelles des macromolécules à des échelles de temps  $> 1$ nanosec et les appliquer aux protéines étudiées au laboratoire.

# Exploration of conformational transitions in proteins

- Molecular Dynamics is great for simulating random thermal deformations of a protein...
  - **but** unlikely to reach a particular conformation of the protein, even if you *really* want to
- Vibrational Modes is great for identifying preferred deformations towards "interesting" conformations
  - **but** strictly applicable to small deformations only
- Combined approach: we force molecular dynamics to explore "interesting" deformations identified by vibrational modes

e.g., normal prion protein

"interesting" conformation (amyloid?)



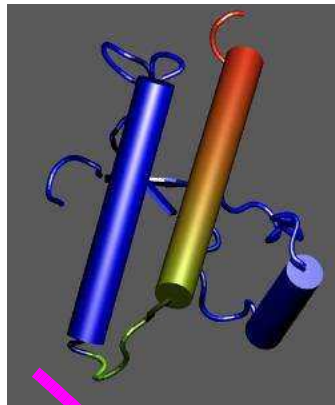
David Perahia and Charles Robert  
UMR8619 CNRS

University of Bordeaux, France

Oleg Lodygensky

30

# Obtain free-energy profiles

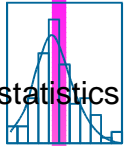


- Explore low-energy (favorable) transition pathways
- Extend to multiple dimensions (energy surfaces)

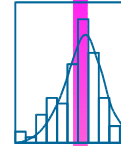
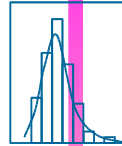
energy barrier

4) Calculate free energy profile

3) Gather statistics



...



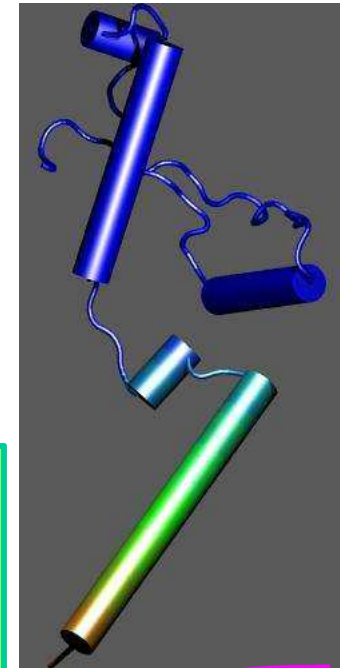
etc ...

XtremWeb  
Workers  
+  
Condor  
Pools

XtremWeb + Condor

2) Perform  $m$  constrained molecular dynamics simulations for each (=  $nm$  workers )

1) Generate  $n$  starting conformations along coordinate of interest



David Perahia and Charles Robert  
UMR8619 CNRS  
University of Paris-Sud Orsay  
France

Oleg Lodyginsky 31

# Sommaire

- Les grilles
- XtremWeb
- Déploiements
- Applications
- **Références**



# References

- Condor : <http://www.cs.wisc.edu/condor>
- XtremWeb : <http://xtremweb.net>
- Auger : <http://www.auger.org>
- IB BMC : <http://www.u-psud.fr/b-430/ibbmc.nsf>

[1] « The Grid : Blueprint for a new Computing Infrastructure »,

I. Foster et C. Kesselman, Morgan-Kaufmann - 1998.

[2] « Java P2P unleashed »,

R.Flenner, M.Abbott, F.Cohen, N.Krishnan, A.Moffet,  
R.Ramamurti, B.Siddiqui, F.Sommers - 2002.

[3] « Framework for Peer-to-Peer Distributed Computing in a  
Heterogeneous, Decentralized Environment »

Jerome Verbeke, Neelakanth Nadgir, Greg Ruetsch, Ilya Sharapov  
Sun Microsystems, Inc., Palo Alto, CA 94303  
<http://www.sun.com/software/jxta/mdejxta-paper.pdf>