

Problem-oriented web-interfaces for Russian national grid network

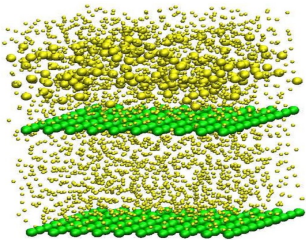
N. Kutovskiy^{1,2}, I. Lensky¹, R. Semenov¹

¹ Laboratory of information technologies, Joint institute for nuclear research (Dubna, Russia)

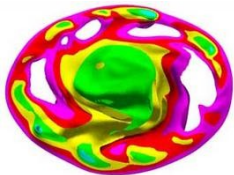
² National Scientific and Educational Centre of Particle and High Energy Physics of the
Belarusian State University (Minsk, Belarus)

Goal

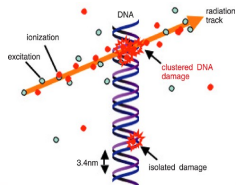
- To simplify user operations to work with particular application in RNGN problem-oriented web based interfaces were developed by LIT JINR team for the following apps:



DL_POLY (molecular dynamics);



Elmer (computer-aided engineering);

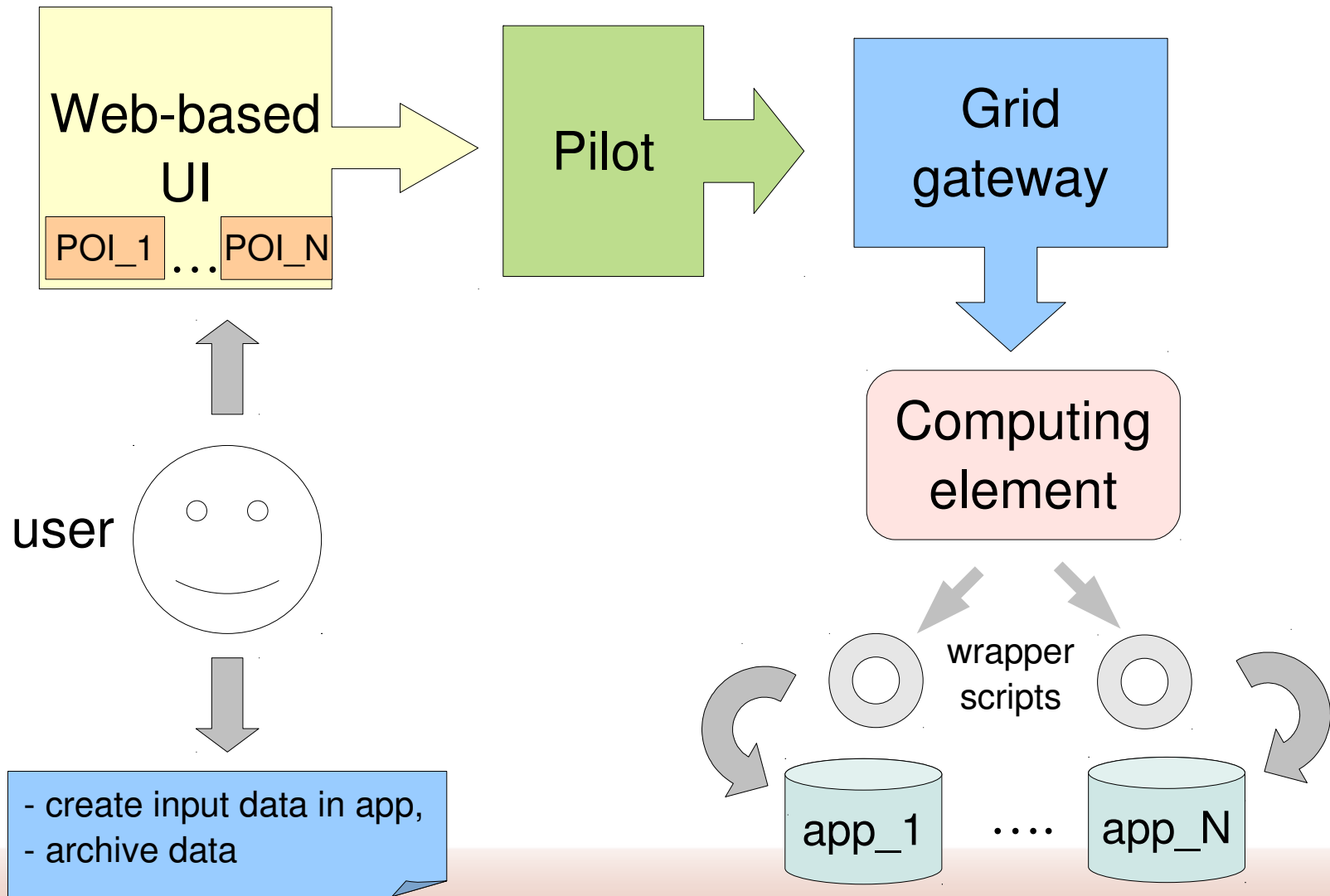


GEANT4-DNA (to simulate biological damages induced by ionising radiation at the cellular and sub-cellular scale).

Testbed

- POIs were developed as plug-ins for RNGN graphical web-based interface what was deployed on training and testing grid infrastructure and used for development and debugging.
- DL_POLY, Elmer and GEANT4-DNA applications were installed on JINR cluster connected to RNGN testbed through grid gateway.

Workflow



Implementation

- Current implementation of MPI tasks execution by RNGN middleware doesn't allow to do pre- and post-processing (i.e. before and after invoking application executable file on the worker node).
- There is no easy way to extract input and archive output files.
- A shell-script was developed to track all running parallel processes on WNs and only one of it (with id = 0 - “master”) does pre- and post-processing.

Screenshots

МИНСВЯЗЬ РОССИИ

ПОРТАЛ РОССИЙСКОЙ ГРИД-СЕТИ ДЛЯ ВЫСОКОПРОИЗВОДИТЕЛЬНЫХ ВЫЧИСЛЕНИЙ

Добро пожаловать Mikalai Kutouski Ваше учетное имя gridu001 Базовый URL для GridFTP gsiftp://grid.voskhod.ru/home/gridu001/files/ Виртуальная организация rrgn.test

СПРАВКА БЕЗОПАСНОСТЬ УПРАВЛЕНИЕ ФАЙЛАМИ ПОДГОТОВКА ЗАДАНИЙ ЗАПУСК И КОНТРОЛЬ ПРИЛОЖЕНИЯ

ИНФОРМАЦИЯ
Регламенты сети
Пакеты программ
Веб-интерфейс

ЛИЧНЫЙ КАБИНЕТ
Вход в систему

DL_POLY

Название задания:
DL_POLY (Sat 03 Dec 2011 06:36:37 PV) [Сбросить](#)

Требуемое окружение:
 [Обновить](#)

Количество процессоров:

Архив входных данных:

Архив выходных данных:

[Запустить](#)

18:36 - Обновляем список окружений.
18:36 - Список окружений обновлен.

МИНСВЯЗЬ РОССИИ

ПОРТАЛ РОССИЙСКОЙ ГРИД-СЕТИ ДЛЯ ВЫСОКОПРОИЗВОДИТЕЛЬНЫХ ВЫЧИСЛЕНИЙ

Добро пожаловать Mikalai Kutouski Ваше учетное имя gridu001 Базовый URL для GridFTP gsiftp://grid.voskhod.ru/home/gridu001/files/ Виртуальная организация rrgn.test

СПРАВКА БЕЗОПАСНОСТЬ УПРАВЛЕНИЕ ФАЙЛАМИ ПОДГОТОВКА ЗАДАНИЙ ЗАПУСК И КОНТРОЛЬ ПРИЛОЖЕНИЯ

ELMER

Название задания:
Elmer (Sat 03 Dec 2011 06:36:37 PM MS) [Сбросить](#)

Требуемое окружение:

Количество процессоров:

Архив входных данных:

Архив выходных данных:

[Запустить](#)

18:36 - Обновляем список окружений.
18:36 - Список окружений обновлен.

МИНСВЯЗЬ РОССИИ

ПОРТАЛ РОССИЙСКОЙ ГРИД-СЕТИ ДЛЯ ВЫСОКОПРОИЗВОДИТЕЛЬНЫХ ВЫЧИСЛЕНИЙ

Добро пожаловать Mikalai Kutouski Ваше учетное имя gridu001 Базовый URL для GridFTP gsiftp://grid.voskhod.ru/home/gridu001/files/ Виртуальная организация rrgn.test

СПРАВКА БЕЗОПАСНОСТЬ УПРАВЛЕНИЕ ФАЙЛАМИ ПОДГОТОВКА ЗАДАНИЙ ЗАПУСК И КОНТРОЛЬ ПРИЛОЖЕНИЯ

GEANT4-DNA

Название задания:
GEANT4-DNA (Sat 03 Dec 2011 06:36:37) [Сбросить](#)

Требуемое окружение:
 [Обновить](#)

Архив входных данных:
 [Выбрать](#)

Архив выходных данных:

[Запустить](#)

Журнал работы

18:36 - Обновляем список окружений.
18:36 - Список окружений обновлен.

task name

required environment

number of CPUs

input data

output data

submit button

log

Wishes

- It would be much easier to develop POIs if a possibility to invoke pre- and post-processing scripts would be implemented.
- Implement a mechanism to submit “parametric” applications (the same executable is run multiple times with different values of fix set of parameters).