

Servicio General de Informática aplicada a la investigación

Cálculo Científico

Txema Mercero

Edu Ogando

SGIker

<http://www.ehu.es/SGI>



Cálculo Científico

- Cálculo Científico
- Física
- Química
- Matemáticas
- Biología
- Geología
- Ingeniería

Cálculo Científico en la UPV/EHU

SGI-IZO

Arquitectura de Arina

Paralelización

Gestión

Pendolo

TOP 500

Estadísticas

Otras Tareas Realizadas

Conclusiones

Cálculo Científico



Cálculo Científico

Cálculo Científico

● Cálculo Científico

- Física
- Química
- Matemáticas
- Biología
- Geología
- Ingeniería

Cálculo Científico en la
UPV/EHU

SGI-IZO

Arquitectura de Arina

Paralelización

Gestión

Pendolo

TOP 500

Estadísticas

Otras Tareas Realizadas

Conclusiones

Lo podemos definir como la actividad de la Ciencia que mediante el uso de la informática y los ordenadores obtiene conocimiento.

Su característica más notable es su multidisciplinaridad.



Cálculo Científico

● Cálculo Científico

● Física

● Química

● Matemáticas

● Biología

● Geología

● Ingeniería

Cálculo Científico en la UPV/EHU

SGI-IZO

Arquitectura de Arina

Paralelización

Gestión

Pendolo

TOP 500

Estadísticas

Otras Tareas Realizadas

Conclusiones

- Partículas
- Materiales
- Meteorología
- Cuántica
- Astrofísica
- ...

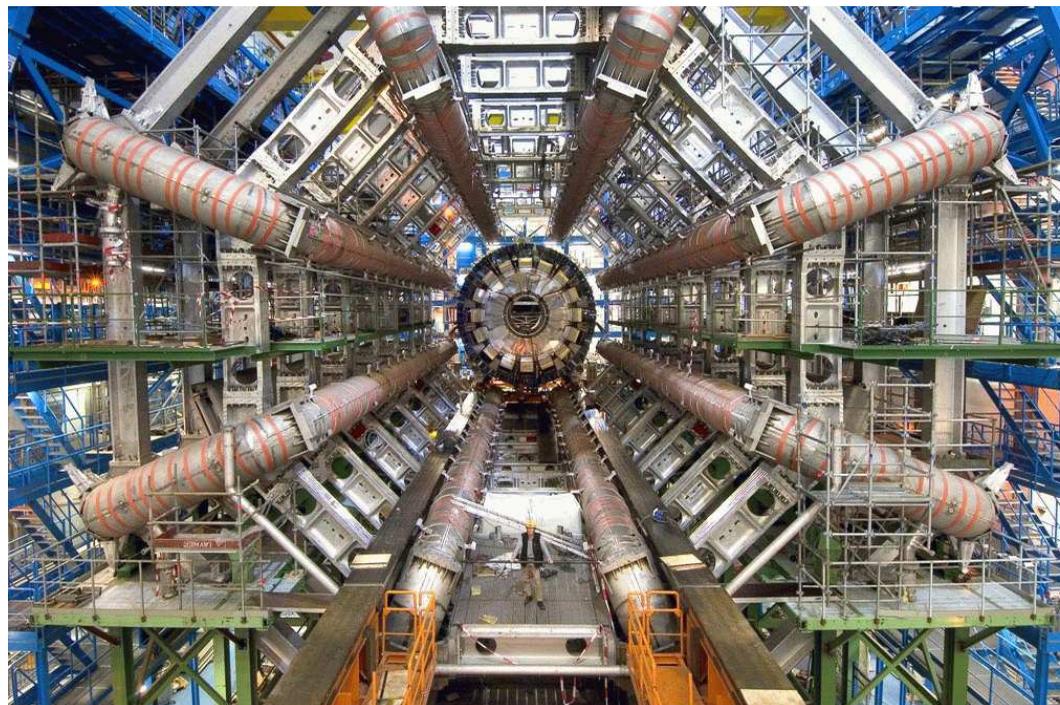


Figura 1: El detector ATLAS del LHC (CERN)

Física de materiales, ciencias planetarias



Química

Cálculo Científico

- Cálculo Científico
- Física
- Química
- Matemáticas
- Biología
- Geología
- Ingeniería

Cálculo Científico en la UPV/EHU

SGI-IZO

Arquitectura de Arina

Paralelización

Gestión

Pendulo

TOP 500

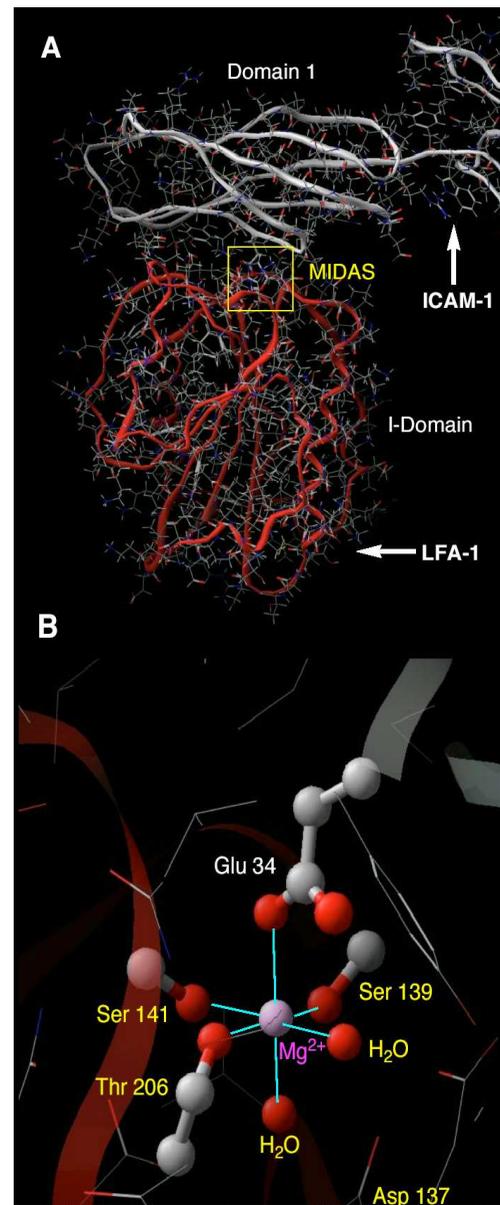
Estadísticas

Otras Tareas Realizadas

Conclusiones

- Química-Física
- Bioquímica
- Farmacología
- Ingeniería Química
-

Química orgánica, química física, bioquímica,...





Matemáticas

Cálculo Científico

- Cálculo Científico
- Física
- Química
- Matemáticas
- Biología
- Geología
- Ingeniería

Cálculo Científico en la UPV/EHU

SGI-IZO

Arquitectura de Arina

Paralelización

Gestión

Pendolo

TOP 500

Estadísticas

Otras Tareas Realizadas

Conclusiones

- Babbage: inventa la primera máquina programable.
- Ada: la primera programadora.
- Boole: Desarrolla la Teoría de los circuitos lógicos.
- Turing: sentó las bases de la Informática moderna.
- ...



Figura 2: El primer ordenador.

Criptografía, inteligencia artificial, estadística...



Biología

Proyecto Genoma humano no se hubiese podido llevar a cabo sin potentes ordenadores.

- Identificar ≈ 25000 genes.
- Identificar las secuencias de $3 * 10^9$ da bases.
- Almacenar la información en bases de datos.
- Analizar y estudiar los datos.
- ...



Bioinformática, genómica

Cálculo Científico

- Cálculo Científico
- Física
- Química
- Matemáticas

● Biología

- Geología
- Ingeniería

Cálculo Científico en la UPV/EHU

SGI-IZO

Arquitectura de Arina

Paralelización

Gestión

Pendulo

TOP 500

Estadísticas

Otras Tareas Realizadas

Conclusiones



Cálculo Científico

- Cálculo Científico
- Física
- Química
- Matemáticas
- Biología
- **Geología**
- Ingeniería

Cálculo Científico en la UPV/EHU

SGI-IZO

Arquitectura de Arina

Paralelización

Gestión

Pendolo

TOP 500

Estadísticas

Otras Tareas Realizadas

Conclusiones

Durante 3 años el ordenador más potente del mundo fue el Earth Simulator y está orientado al estudio de la Tierra.

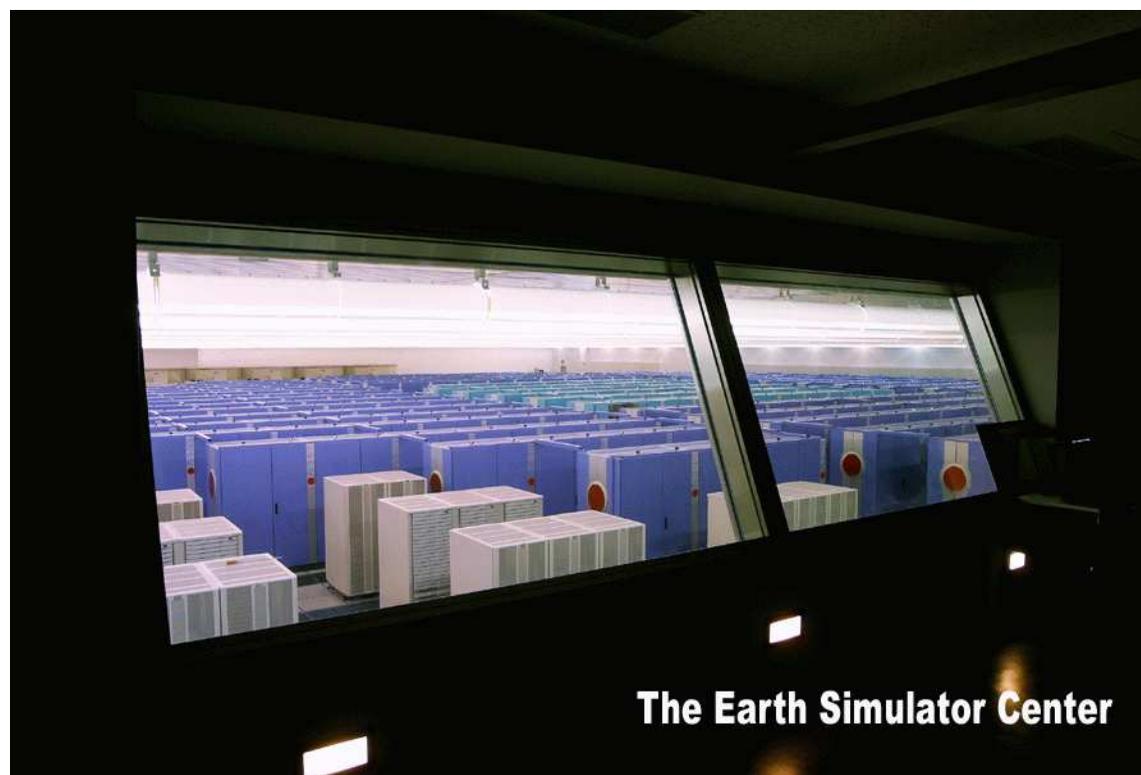


Figura 3: Ordenador más potente del mundo entre 2002 y 2005.



Ingeniería

Cálculo Científico

- Cálculo Científico
- Física
- Química
- Matemáticas
- Biología
- Geología
- Ingeniería

Cálculo Científico en la UPV/EHU

SGI-IZO

Arquitectura de Arina

Paralelización

Gestión

Pendulo

TOP 500

Estadísticas

Otras Tareas Realizadas

Conclusiones

- Dinámica de fluidos.
- Transmisión de calor.
- Resistencia de estructuras.
- Diseño mecánico.
- ...

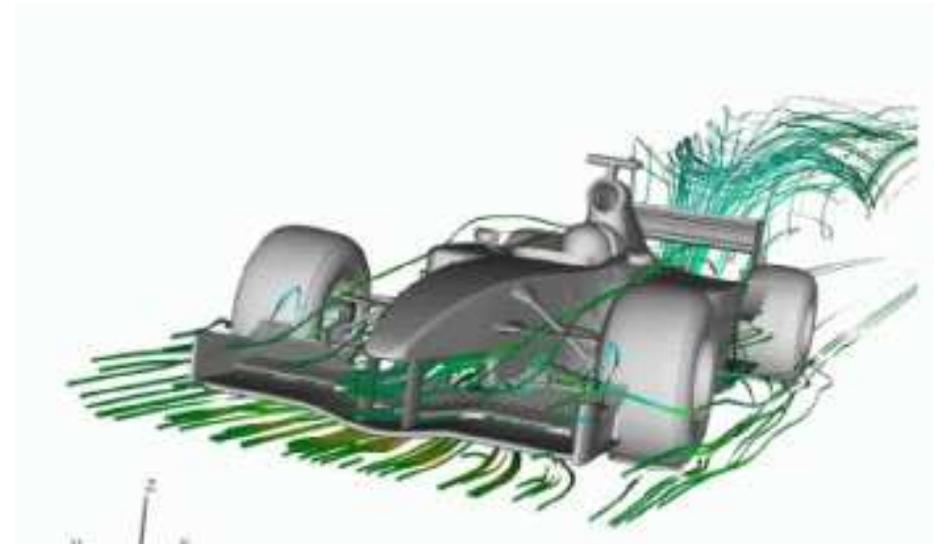


Figura 4: Estudio aerodinámico de un Fórmula-1.

Ingeniería nuclear, Ingeniería química



Cálculo Científico

Cálculo Científico en la UPV/EHU

- Cálculo Científico antes del SGI-IZO
- Clusters beowulf
- El SGI-IZO

SGI-IZO

Arquitectura de Arina

Paralelización

Gestión

Pendolo

TOP 500

Estadísticas

Otras Tareas Realizadas

Conclusiones

Cálculo Científico en la UPV/EHU



Cálculo Científico antes del SGI-IZO

Cálculo Científico

Cálculo Científico en la UPV/EHU

● Cálculo Científico antes del SGI-IZO

● Clusters beowulf

● El SGI-IZO

SGI-IZO

Arquitectura de Arina

Paralelización

Gestión

Pendolo

TOP 500

Estadísticas

Otras Tareas Realizadas

Conclusiones

- Las máquinas pertenecían a un investigador.
- El CIDIR administraba la mayor parte de las máquinas de cálculo.



Bartolo Ordenador,
del Campus de Leioa



SP2 y SGI de Donostia

Clusters beowulf

- Aparece Linux y los PCs se convierten en herramientas de cálculo.
- Los usuarios empiezan a administrar sus recursos.
- En Vitoria se crean grids de cálculo en las aulas de PCs.
- Las herraminetas de cálculo siguen siendo *personales*.



Cluster Orpheus (1999 → 12 Procesadores)
2003 → 108 Procesadores, 2006 → 70

Cálculo Científico

Cálculo Científico en la UPV/EHU

- Cálculo Científico antes del SGI-IZO
- Clusters beowulf
- El SGI-IZO

SGI-IZO

Arquitectura de Arina

Paralelización

Gestión

Pendolo

TOP 500

Estadísticas

Otras Tareas Realizadas

Conclusiones



El SGI-IZO

Cálculo Científico

Cálculo Científico en la
UPV/EHU

- Cálculo Científico antes del SGI-IZO
- Clusters beowulf
- El SGI-IZO

SGI-IZO

Arquitectura de Arina

Paralelización

Gestión

Pendolo

TOP 500

Estadísticas

Otras Tareas Realizadas

Conclusiones

- 2004 La universidad crea el Servicio General de Infotmática aplicada a la Investigación.
- Un servicio que además de tiempo de cálculo, ofrece asesoramiento a los investigadores en cualquier aspecto relativo al cálculo Científico.
- A principios del 2005 se compra el Cluster *Arina*.
- En septiembre del 2005 nos incorporamos los dos técnicos al servicio.
- En el 2006 se realiza la primera ampliación.
- El el 2008 se realiza una segunada ampliación.
- El el 2010 se ha realiza una tercera ampliación.



Cálculo Científico

Cálculo Científico en la UPV/EHU

SGI-IZO

- Organigrama
- SGI-IZO

Arquitectura de Arina

Paralelización

Gestión

Pendolo

TOP 500

Estadísticas

Otras Tareas Realizadas

Conclusiones

SGI-IZO



Organigrama

Cálculo Científico

Cálculo Científico en la UPV/EHU

SGI-IZO

● Organigrama

● SGI-IZO

Arquitectura de Arina

Paralelización

Gestión

Pendolo

TOP 500

Estadísticas

Otras Tareas Realizadas

Conclusiones





Servicio **G**eneral de **I**nformática (SGI-IZO) aplicada a la Investigación (Cálculo Científico)

- Asiste a los investigadores en el uso de las estrategias de computación más adecuadas a sus necesidades, y en general, orientarlos en el empleo de ordenadores en sus investigaciones.

Cálculo Científico

Cálculo Científico en la
UPV/EHU

SGI-IZO

● Organigrama

● SGI-IZO

Arquitectura de Arina

Paralelización

Gestión

Pendolo

TOP 500

Estadísticas

Otras Tareas Realizadas

Conclusiones



Servicio **G**eneral de **I**nformática (SGI-IZO) aplicada a la Investigación (Cálculo Científico)

- Asiste a los investigadores en el uso de las estrategias de computación más adecuadas a sus necesidades, y en general, orientarlos en el empleo de ordenadores en sus investigaciones.
- Proporciona recursos de computación propios.

Cálculo Científico

Cálculo Científico en la
UPV/EHU

SGI-IZO

● Organigrama

● SGI-IZO

Arquitectura de Arina

Paralelización

Gestión

Pendolo

TOP 500

Estadísticas

Otras Tareas Realizadas

Conclusiones



Servicio **G**eneral de **I**nformática (SGI-IZO) aplicada a la Investigación (Cálculo Científico)

- Asiste a los investigadores en el uso de las estrategias de computación más adecuadas a sus necesidades, y en general, orientarlos en el empleo de ordenadores en sus investigaciones.
- Proporciona recursos de computación propios.
- Vigilancia tecnológica de los avances que se producen en el Cálculo Científico para su implementación en la UPV/EHU.

Cálculo Científico

Cálculo Científico en la
UPV/EHU

SGI-IZO

● Organigrama

● SGI-IZO

Arquitectura de Arina

Paralelización

Gestión

Pendolo

TOP 500

Estadísticas

Otras Tareas Realizadas

Conclusiones



Cálculo Científico

Cálculo Científico en la UPV/EHU

SGI-IZO

Arquitectura de Arina

- Características
- Otras características
- Rendimiento
- Tipos de arquitecturas
- Redes de Arina
- Almacenamiento de Datos

Paralelización

Gestión

Pendolo

TOP 500

Estadísticas

Otras Tareas Realizadas

Conclusiones

Arquitectura de Arina



Características

Cálculo Científico

Cálculo Científico en la
UPV/EHU

SGI-IZO

Arquitectura de Arina

● Características

● Otras características

● Rendimiento

● Tipos de arquitecturas

● Redes de Arina

● Almacenamiento de Datos

Paralelización

Gestión

Pendulo

TOP 500

Estadísticas

Otras Tareas Realizadas

Conclusiones

- 4 Nodos duales de conexión y compilación.
- 56 cores de cálculo Itanium 2 1.3 GHz, L3 3 MB.
- 32 cores de cálculo Itanium 2 1.6 GHz, L3 6MB.
- 40 cores de cálculo Opteron 2.4GHz, L2 1MB.
- 192 cores de cálculo Itanium2 1.6 GHz (96 Dual-Core).
- 456 cores de cálculo Xeon E5520 2.27 GHz
- 8 FPGPUs. 4 Tesla C2050 y 4 C2070.
- Sistema de Archivos Paralelo (SFS).
- Red de conexión infiniband.
- Linux Redhat AS 4 (Update 4).



Características

Cálculo Científico

Cálculo Científico en la
UPV/EHU

SGI-IZO

Arquitectura de Arina

● Características

● Otras características

● Rendimiento

● Tipos de arquitecturas

● Redes de Arina

● Almacenamiento de Datos

Paralelización

Gestión

Pendulo

TOP 500

Estadísticas

Otras Tareas Realizadas

Conclusiones

- 3 Nodos duales de conexión y compilación.
Arina: Itanium2 1.6 GHz, 4GB RAM (Dual-Core).
Arinaz: Itanium2 1.3 GHz, 2GB RAM.
Maiz: Opteron 2.4 GHZ, 4Gb RAM.
Guinness: Xeon 2.27 GHZ, 8Gb RAM.
- 56 cores de cálculo Itanium2 1.3 GHz.
- 32 cores de cálculo Itanium2 1.6 GHz.
- 40 cores de cálculo Opteron 2.4GHz..
- 192 cores de cálculo Itanium2 1.6 GHz (96 Dual-Core).
- 456 cores de cálculo Xeon E5520 2.27 GHz
- 8 FPGPUs. 4 Tesla C2050 y 4 C2070.
- Sistema de Archivos Paralelo (SFS).
- Red de conexión infiniband.
- Linux Redhat AS 4 (Update 4).



Características

Cálculo Científico

Cálculo Científico en la
UPV/EHU

SGI-IZO

Arquitectura de Arina

● Características

● Otras características

● Rendimiento

● Tipos de arquitecturas

● Redes de Arina

● Almacenamiento de Datos

Paralelización

Gestión

Pendulo

TOP 500

Estadísticas

Otras Tareas Realizadas

Conclusiones

- 3 Nodos duales de conexión y compilación.
- 56 cores de cálculo Itanium2 1.3 GHz.
- 32 cores de cálculo Itanium2 1.6 GHz.
- 40 cores de cálculo Opteron 2.4 GHz.
- 192 cores de cálculo Itanium2 1.6 GHz (96 Dual-Core).
320 cores en 42 nodos con 4-8 CPU's
4-128 GB de RAM por nodo.
- 456 cores de cálculo Xeon E5520 2.27 GHz
- 8 FPGUs. 4 Tesla C2050 y 4 C2070.
- Sistema de Archivos Paralelo (SFS).
- Red de conexión infiniband.
- Linux Redhat AS 4 (Update 4).



Características

Cálculo Científico

Cálculo Científico en la
UPV/EHU

SGI-IZO

Arquitectura de Arina

● Características

● Otras características

● Rendimiento

● Tipos de arquitecturas

● Redes de Arina

● Almacenamiento de Datos

Paralelización

Gestión

Pendolo

TOP 500

Estadísticas

Otras Tareas Realizadas

Conclusiones

- 4 Nodos duales de conexión y compilación.
- 56 cores de cálculo Itanium2 1.3 GHz.
- 32 cores de cálculo Itanium2 1.6 GHz.
- 40 cores de cálculo Opteron 2.4 GHz.
- 192 cores de cálculo Itanium2 1.6 GHz (96 Dual-Core).
- 456 cores de cálculo Xeon E5520 2.27 GHz
24-96 GB de RAM por nodo.
- 8 FPGPUs. 4 Tesla C2050 y 4 C2070.
- Sistema de Archivos Paralelo (SFS).
- Red de conexión infiniband.
- Linux Redhat AS 4 (Update 4).



Características

Cálculo Científico

Cálculo Científico en la
UPV/EHU

SGI-IZO

Arquitectura de Arina

● Características

● Otras características

● Rendimiento

● Tipos de arquitecturas

● Redes de Arina

● Almacenamiento de Datos

Paralelización

Gestión

Pendulo

TOP 500

Estadísticas

Otras Tareas Realizadas

Conclusiones

- 4 Nodos duales de conexión y compilación.
- 56 cores de cálculo Itanium2 1.3 GHz.
- 32 cores de cálculo Itanium2 1.6 GHz.
- 40 cores de cálculo Opteron 2.4 GHz.
- 192 cores de cálculo Itanium2 1.6 GHz (96 Dual-Core).
- 456 cores de cálculo Xeon E5520 2.27 GHz
- 8 FPGPUs. 4 Tesla C2050 y 4 C2070.
14 Multiprocesadores, 112 cores
2 y 4 GB de Memoria global.
- Sistema de Archivos Paralelo (SFS).
- Red de conexión infiniband.
- Linux Redhat AS 4 (Update 4).



Características

Cálculo Científico

Cálculo Científico en la
UPV/EHU

SGI-IZO

Arquitectura de Arina

● Características

● Otras características

● Rendimiento

● Tipos de arquitecturas

● Redes de Arina

● Almacenamiento de Datos

Paralelización

Gestión

Pendolo

TOP 500

Estadísticas

Otras Tareas Realizadas

Conclusiones

- 4 Nodos duales de conexión y compilación.
- 56 cores de cálculo Itanium 2 1.3 GHz.
- 32 cores de cálculo Itanium 2 1.6 GHz.
- 40 cores de cálculo Opteron 2.4GHz.
- 192 cores de cálculo Itanium2 1.6 GHz (96 Dual-Core).
- 456 cores de cálculo Xeon E5520 2.27 GHz
- 8 FPGPUs. 4 Tesla C2050 y 4 C2070.
- 2 Sistemas de Archivos Paralelo (SFS).
 - 4 Servidores.
 - 6 cabinas SATA.
 - Almacenamiento neto de 4.7 y 8 TB y gran ancho de banda.**
- Red de conexión infiniband.
- Linux Redhat AS 4 (Update 4).



Características

Cálculo Científico

Cálculo Científico en la
UPV/EHU

SGI-IZO

Arquitectura de Arina

● Características

● Otras características

● Rendimiento

● Tipos de arquitecturas

● Redes de Arina

● Almacenamiento de Datos

Paralelización

Gestión

Pendolo

TOP 500

Estadísticas

Otras Tareas Realizadas

Conclusiones

- 4 Nodos duales de conexión y compilación.
- 56 cores de cálculo Itanium 2 1.3 GHz.
- 32 cores de cálculo Itanium 2 1.6 GHz.
- 40 cores de cálculo Opteron 2.4GHz.
- 192 cores de cálculo Itanium2 1.6 GHz (96 Dual-Core).
- 456 cores de cálculo Xeon E5520 2.27 GHz
- 8 FPGPUs. 4 Tesla C2050 y 4 C2070.
- Sistema de Archivos Paralelo (SFS).
- Red de conexión infiniband.
Ancho de banda de 2 y 4 GB/s
Baja latencia.
- Linux Redhat AS 4 (Update 4).



Características

Cálculo Científico

Cálculo Científico en la
UPV/EHU

SGI-IZO

Arquitectura de Arina

● Características

● Otras características

● Rendimiento

● Tipos de arquitecturas

● Redes de Arina

● Almacenamiento de Datos

Paralelización

Gestión

Pendulo

TOP 500

Estadísticas

Otras Tareas Realizadas

Conclusiones

- 2 Nodos duales de conexión y compilación.
- 56 cores de cálculo Itanium 2 1.3 GHz.
- 32 cores de cálculo Itanium 2 1.6 GHz.
- 40 cores de cálculo Opteron 2.4GHz.
- 192 cores de cálculo Itanium2 1.6 GHz (96 Dual-Core).
- 456 cores de cálculo Xeon E5520 2.27 GHz
- 8 FPGPUs. 4 Tesla C2050 y 4 C2070.
- Sistema de Archivos Paralelo (SFS).
- Red de conexión infiniband.
- Linux Redhat AS 4 (Update 4).





Otras características

Cálculo Científico

Cálculo Científico en la
UPV/EHU

SGI-IZO

Arquitectura de Arina

● Características

● Otras características

● Rendimiento

● Tipos de arquitecturas

● Redes de Arina

● Almacenamiento de Datos

Paralelización

Gestión

Pendolo

TOP 500

Estadísticas

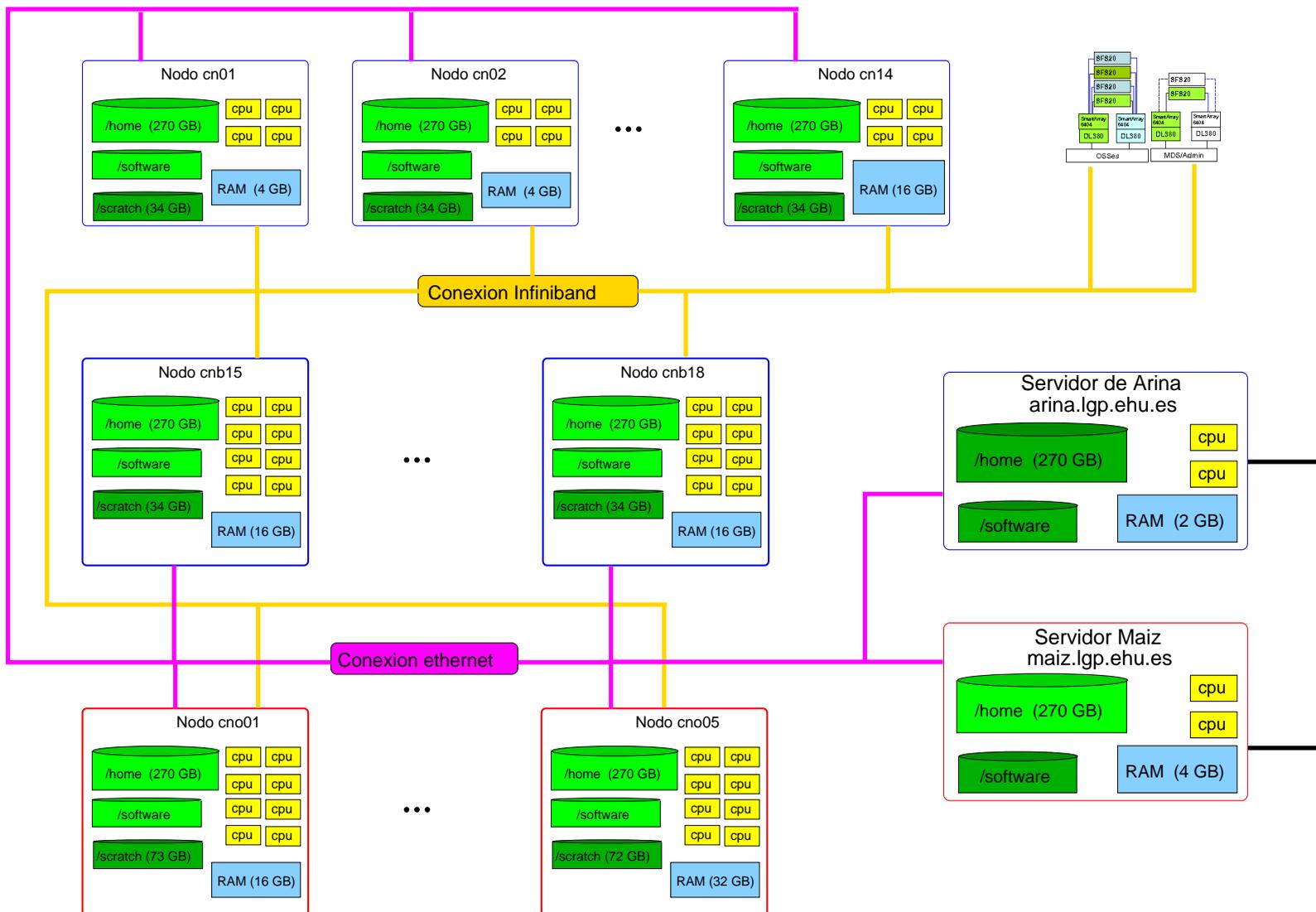
Otras Tareas Realizadas

Conclusiones

- Elementos redundantes: fuentes de alimentación, ventiladores, . . .
- Servicio técnico del proveedor de hardware/software.
- Infraestructura y personal adicional (CIDIR).
 - ◆ Situada en una sala de servidores.
 - ◆ UPS y grupo electrógeno.
 - ◆ Copias de seguridad diarias de los archivos.
 - ◆ Vigilancia y monitorización (Nagios).



Configuración



Cálculo Científico

Cálculo Científico en la UPV/EHU

SGI-IZO

Arquitectura de Arina

- Características
- Otras características
- Rendimiento
- Tipos de arquitecturas
- Redes de Arina
- Almacenamiento de Datos

Paralelización

Gestión

Pendolo

TOP 500

Estadísticas

Otras Tareas Realizadas

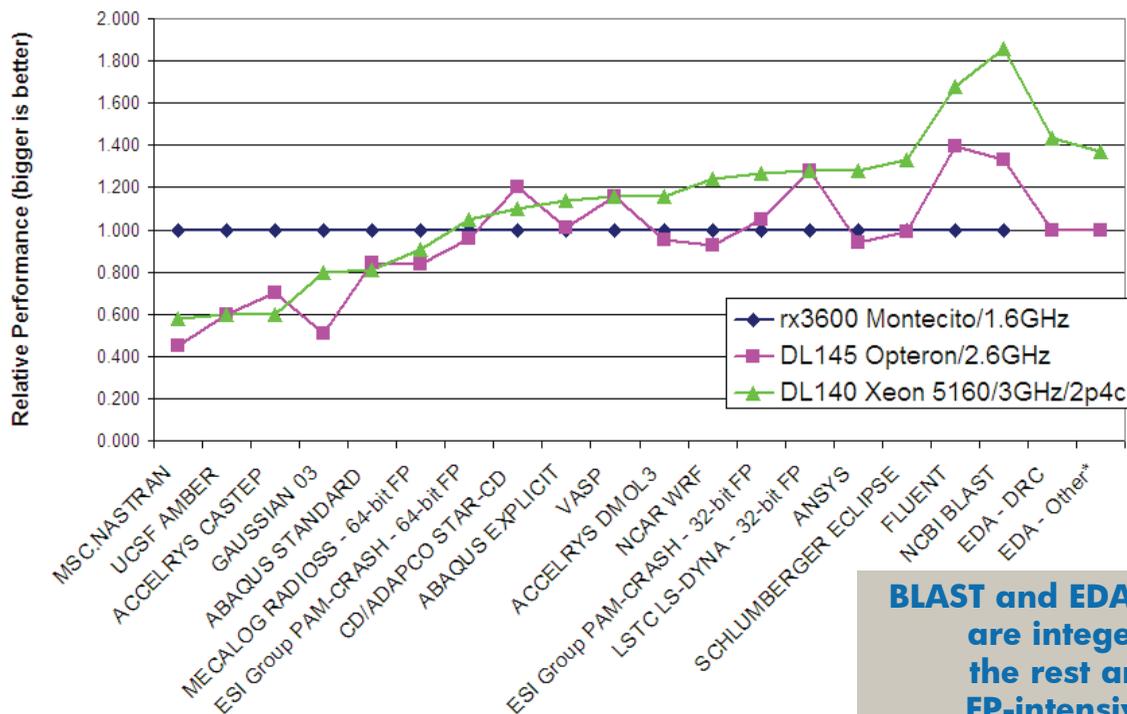
Conclusiones



- Cálculo Científico
- Cálculo Científico en la UPV/EHU
- SGI-IZO
- Arquitectura de Arina**
 - Características
 - Otras características
 - **Rendimiento**
 - Tipos de arquitecturas
 - Redes de Arina
 - Almacenamiento de Datos
- Paralelización
- Gestión
- Pendolo
- TOP 500
- Estadísticas
- Otras Tareas Realizadas
- Conclusiones

Core-for-Core Performance Comparison

Relative Performance of HPC Servers



BLAST and EDA codes are integer; the rest are FP-intensive

•Other EDA: simulation, verification, synthesis, physical design



3 5 July 2007



Itanium vs. Opteron

- Itanium
- Opteron

Cálculo Científico

Cálculo Científico en la
UPV/EHU

SGI-IZO

Arquitectura de Arina

- Características
- Otras características
- Rendimiento
- Tipos de arquitecturas
- Redes de Arina
- Almacenamiento de Datos

Paralelización

Gestión

Pendolo

TOP 500

Estadísticas

Otras Tareas Realizadas

Conclusiones



Itanium vs. Opteron

■ Itanium

- ◆ Baja frecuencia de reloj, pero realiza 4 operaciones en coma flotante por ciclo.
- ◆ Mucha cache (3, 6 o 18 MB de L3).
- ◆ EPIC, Predication, speculation, prediction.
- ◆ **Bajo rendimiento en operaciones con enteros (2 operaciones por ciclo).**
- ◆ **Bajo rendimiento en PHP y java.**
- ◆ **Alto consumo eléctrico.**

■ Opteron

Cálculo Científico

Cálculo Científico en la
UPV/EHU

SGI-IZO

Arquitectura de Arina

- Características
- Otras características
- **Rendimiento**
- Tipos de arquitecturas
- Redes de Arina
- Almacenamiento de Datos

Paralelización

Gestión

Pendolo

TOP 500

Estadísticas

Otras Tareas Realizadas

Conclusiones



Rendimiento

Itanium vs. Opteron

■ Itanium

■ Opteron

- ◆ Alta frecuencia de reloj.
- ◆ Ejecución directa de aplicaciones de 32 bits.
- ◆ Controladora de memoria integrada.
- ◆ Buen rendimiento con Java.
- ◆ **Realiza 2 operaciones en coma flotante por ciclo.**

Cálculo Científico

Cálculo Científico en la
UPV/EHU

SGI-IZO

Arquitectura de Arina

- Características
- Otras características
- Rendimiento
- Tipos de arquitecturas
- Redes de Arina
- Almacenamiento de Datos

Paralelización

Gestión

Pendolo

TOP 500

Estadísticas

Otras Tareas Realizadas

Conclusiones



Tipos de arquitecturas

Cálculo Científico

Cálculo Científico en la
UPV/EHU

SGI-IZO

Arquitectura de Arina

- Características
- Otras características
- Rendimiento
- Tipos de arquitecturas
- Redes de Arina
- Almacenamiento de Datos

Paralelización

Gestión

Pendolo

TOP 500

Estadísticas

Otras Tareas Realizadas

Conclusiones

- Itanium2 - ia64
- Opteron - x86_64 (Xeon, core2duo)
- Pentium - x86

- Mac - ppc
- Sun - sparc



Tipos de arquitecturas (Itanium2)

Cálculo Científico

Cálculo Científico en la UPV/EHU

SGI-IZO

Arquitectura de Arina

- Características
- Otras características
- Rendimiento
- Tipos de arquitecturas
- Redes de Arina
- Almacenamiento de Datos

Paralelización

Gestión

Pendolo

TOP 500

Estadísticas

Otras Tareas Realizadas

Conclusiones

- Itanium2 - ia64
Compiladores de Intel (ifort, icc, icpc)
- Opteron - x86_64 (Xeon, core2duo)
- Pentium - x86

- Mac - ppc
- Sun - sparc



Tipos de arquitecturas (Opteron)

Cálculo Científico

Cálculo Científico en la
UPV/EHU

SGI-IZO

Arquitectura de Arina

- Características
- Otras características
- Rendimiento

● Tipos de arquitecturas

- Redes de Arina
- Almacenamiento de Datos

Paralelización

Gestión

Pendolo

TOP 500

Estadísticas

Otras Tareas Realizadas

Conclusiones

- Itanium2 - ia64
- Opteron - x86_64 (Xeon, core2duo)
Compiladores de PGI (pgf77, pgf90, pgcc, pgCC)
Alternativamente compiladores de Intel y GNU
- Pentium - x86
- Mac - ppc
- Sun - sparc



Tipos de arquitecturas (Pentium)

Cálculo Científico

Cálculo Científico en la
UPV/EHU

SGI-IZO

Arquitectura de Arina

- Características
- Otras características
- Rendimiento

● Tipos de arquitecturas

- Redes de Arina
- Almacenamiento de Datos

Paralelización

Gestión

Pendolo

TOP 500

Estadísticas

Otras Tareas Realizadas

Conclusiones

- Itanium2 - ia64
- Opteron - x86_64 (Xeon, core2duo)
- Pentium - x86 (Pendulo)
Compiladores de Intel
Alternativamente compiladores de PGI y GNU
- Mac - ppc
- Sun - sparc



Redes de Arina

Cálculo Científico

Cálculo Científico en la
UPV/EHU

SGI-IZO

Arquitectura de Arina

- Características
- Otras características
- Rendimiento
- Tipos de arquitecturas
- Redes de Arina
- Almacenamiento de Datos

Paralelización

Gestión

Pendolo

TOP 500

Estadísticas

Otras Tareas Realizadas

Conclusiones

- Red auxiliar ethernet.
- Red Red Infiniband.
- Red Ethernet de Administración



Redes de Arina

Cálculo Científico

Cálculo Científico en la
UPV/EHU

SGI-IZO

Arquitectura de Arina

- Características
- Otras características
- Rendimiento
- Tipos de arquitecturas

● Redes de Arina

- Almacenamiento de Datos

Paralelización

Gestión

Pendolo

TOP 500

Estadísticas

Otras Tareas Realizadas

Conclusiones

- Red auxiliar ethernet.
Para exportar el `/home/$USER` a los nodos.
Transferir datos a los nodos.
Operaciones de administración estandares.
- Red Red Infiniband.
- Red Ethernet de Administración.



Redes de Arina

Cálculo Científico

Cálculo Científico en la
UPV/EHU

SGI-IZO

Arquitectura de Arina

- Características
- Otras características
- Rendimiento
- Tipos de arquitecturas
- Redes de Arina
- Almacenamiento de Datos

Paralelización

Gestión

Pendolo

TOP 500

Estadísticas

Otras Tareas Realizadas

Conclusiones

- Red auxiliar ethernet.
- Red Red Infiniband.
Para los cálculos paralelos distribuidos.
Para el SFS (Share File System).
- Red Ethernet de Administración.



Redes de Arina

Cálculo Científico

Cálculo Científico en la
UPV/EHU

SGI-IZO

Arquitectura de Arina

- Características
- Otras características
- Rendimiento
- Tipos de arquitecturas
- Redes de Arina
- Almacenamiento de Datos

Paralelización

Gestión

Pendolo

TOP 500

Estadísticas

Otras Tareas Realizadas

Conclusiones

■ Red auxiliar ethernet.

■ Red Red Infiniband.

■ Red Ethernet de Administración.

Los nodos HP tienen una consola de administración a la que se accede a través de esta red.

Los nodos BULL disponen de IPMI (Intelligent Platform Management Interface)



Importancia de la Red

Benchmark con Quantum Espresso

System	1 cpu	2 cpu	4 cpu	8 cpu
Core2duo (eth 100)	7200	4260	2987	3353
Core2duo (eth1000)	5580	3060	1629	874

Cálculo Científico

Cálculo Científico en la UPV/EHU

SGI-IZO

Arquitectura de Arina

- Características
- Otras características
- Rendimiento
- Tipos de arquitecturas

● Redes de Arina

- Almacenamiento de Datos

Paralelización

Gestión

Pendolo

TOP 500

Estadísticas

Otras Tareas Realizadas

Conclusiones



Almacenamiento de Datos

- Permanente.
- Temporal (scratch).

Cálculo Científico

Cálculo Científico en la
UPV/EHU

SGI-IZO

Arquitectura de Arina

- Características
- Otras características
- Rendimiento
- Tipos de arquitecturas
- Redes de Arina
- Almacenamiento de Datos

Paralelización

Gestión

Pendolo

TOP 500

Estadísticas

Otras Tareas Realizadas

Conclusiones



Almacenamiento permanente

home



- ≈ 2 TB.
- RAID 5.
- Backup diario

Cálculo Científico

Cálculo Científico en la
UPV/EHU

SIG-IZO

Arquitectura de Arina

- Características
- Otras características
- Rendimiento
- Tipos de arquitecturas
- Redes de Arina

● Almacenamiento de Datos

Paralelización

Gestión

Pendolo

TOP 500

Estadísticas

Otras Tareas Realizadas

Conclusiones



Almacenamiento Temporal Local

Cálculo Científico

Cálculo Científico en la
UPV/EHU

SGI-IZO

Arquitectura de Arina

- Características
- Otras características
- Rendimiento
- Tipos de arquitecturas
- Redes de Arina
- Almacenamiento de Datos

Paralelización

Gestión

Pendolo

TOP 500

Estadísticas

Otras Tareas Realizadas

Conclusiones

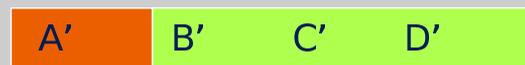
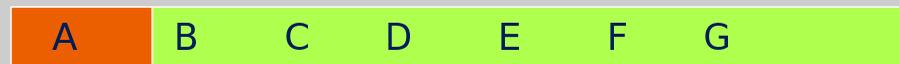
- 14 Nodos HD SCSI 15k RPM 36 GB
- 4 Nodos HD SCSI 15k RPM 72 GB
- 5 Nodos HD SCSI 15k RPM 72 GB RAID0
RAID0 Data Striping. Escritura en 2 HD en paralelo.
- 24 Nodos HD SCSI 15k RPM 400 GB
RAID0 Data Striping. Escritura en 2 HD en paralelo.
- 54 Nodos HD SATA 6k RPM 180 GB
- 4 Nodos HD SCSI 15k RPM 500 GB

SFS file system

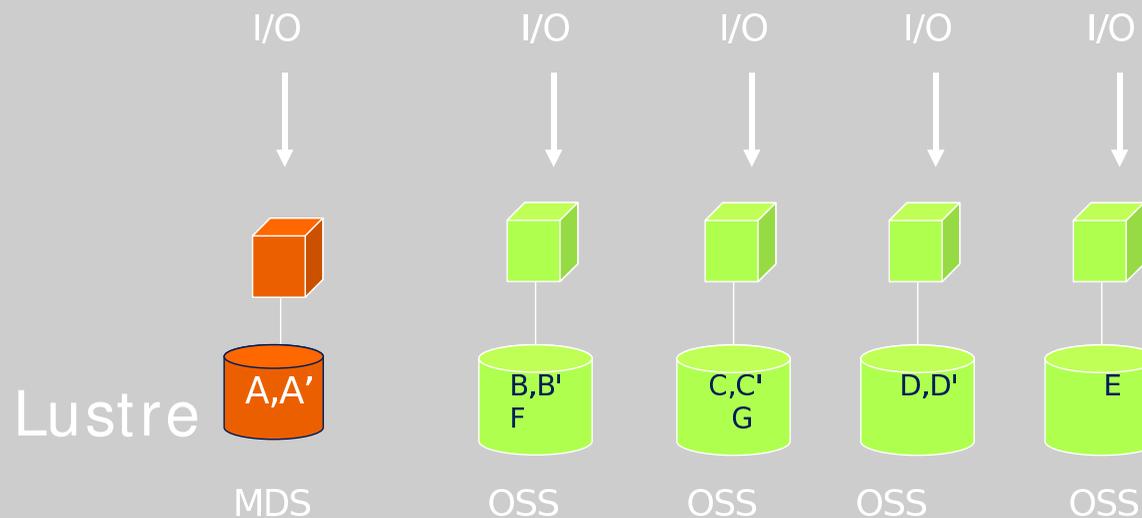
File

Metadata

data



Data is striped across several servers



Lustre



MDS



OSS



OSS



OSS



OSS

Cálculo Científico

Cálculo Científico en la UPV/EHU

SGI-IZO

Arquitectura de Arina

- Características
- Otras características
- Rendimiento
- Tipos de arquitecturas
- Redes de Arina
- Almacenamiento de Datos

Paralelización

Gestión

Pendulo

TOP 500

Estadísticas

Otras Tareas Realizadas

Conclusiones

SFS system redundancy

Cálculo Científico

Cálculo Científico en la UPV/EHU

SGI-IZO

Arquitectura de Arina

- Características
- Otras características
- Rendimiento
- Tipos de arquitecturas
- Redes de Arina
- Almacenamiento de Datos

Paralelización

Gestión

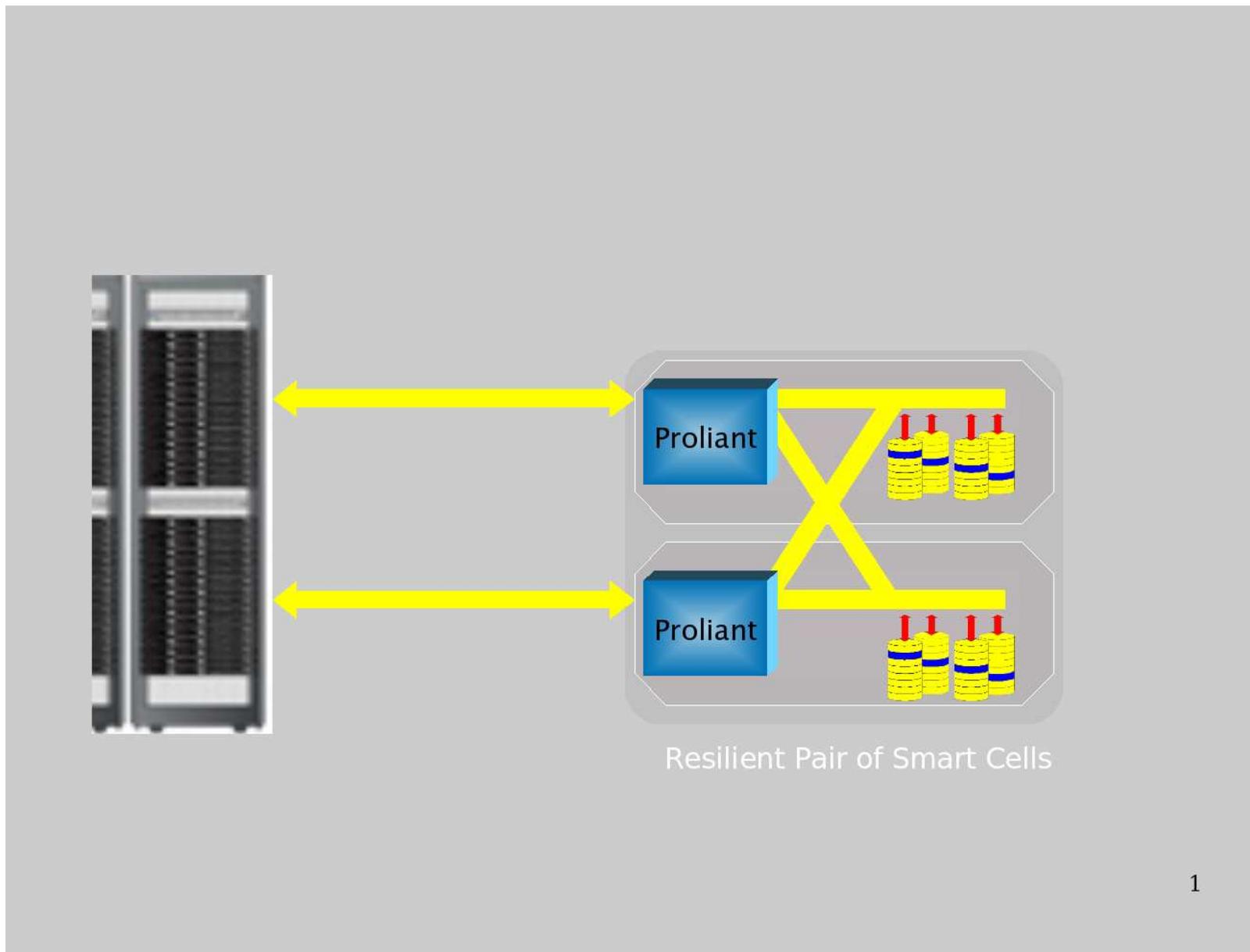
Pendulo

TOP 500

Estadísticas

Otras Tareas Realizadas

Conclusiones



SFS system redundancy

Cálculo Científico

Cálculo Científico en la UPV/EHU

SGI-IZO

Arquitectura de Arina

- Características
- Otras características
- Rendimiento
- Tipos de arquitecturas
- Redes de Arina
- Almacenamiento de Datos

Paralelización

Gestión

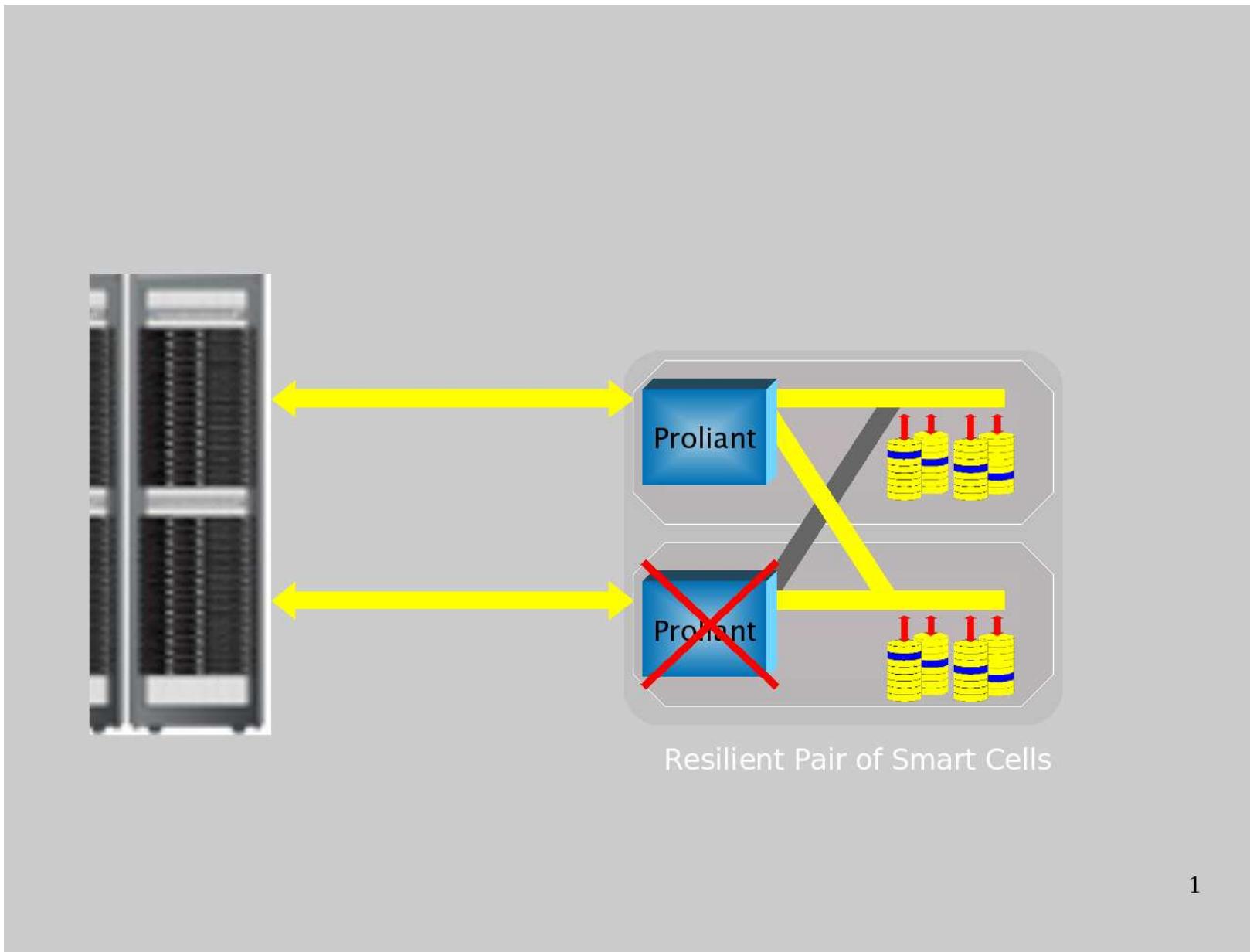
Pendulo

TOP 500

Estadísticas

Otras Tareas Realizadas

Conclusiones





Cálculo Científico

Cálculo Científico en la UPV/EHU

SGI-IZO

Arquitectura de Arina

Paralelización

- Paralelización
- GPUs

Gestión

Pendolo

TOP 500

Estadísticas

Otras Tareas Realizadas

Conclusiones

Paralelización



Paralelización

Es el uso de varios procesadores para realizar un único trabajo, ejecutándose de forma paralela en todos.

Es necesario programarlo específicamente.

- OpenMP
- MPI

Es el futuro (año 2007)

Cálculo Científico

Cálculo Científico en la
UPV/EHU

SGI-IZO

Arquitectura de Arina

Paralelización

● Paralelización

● GPUs

Gestión

Pendolo

TOP 500

Estadísticas

Otras Tareas Realizadas

Conclusiones



GPUs

Las tarjetas gráficas (GPUs) se perfilan como una nueva gran herramienta para cálculo científico.

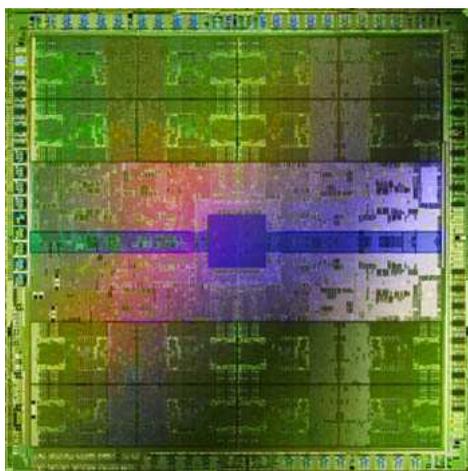


Figura 5: Nvidia GT300

- Producción masiva \Rightarrow relativamente baratas (más que as FPGA's).
- Procesado masivamente paralelo.
- Diseñadas para cálculo (DP).
- Difíciles de programar (falta de estándares).

Parece que es el futuro, en realidad suponen el retorno del coprocesador matemático y la vuelta a las operaciones vectoriales.

Cálculo Científico

Cálculo Científico en la
UPV/EHU

SGI-IZO

Arquitectura de Arina

Paralelización

● Paralelización

● GPUs

Gestión

Pendolo

TOP 500

Estadísticas

Otras Tareas Realizadas

Conclusiones



Cálculo Científico

Cálculo Científico en la UPV/EHU

SGI-IZO

Arquitectura de Arina

Paralelización

Gestión

- Administración
- Gestión del Software
- Galeria
- ¿Qué se hace en Arina?
- Astrofísica
- Dinamicas en sistemas de altas Energías
- Desarrollo de Nuevos Modelos Teoricos
- Química contra la Metastasis
- Diseño de Nanohilos
- Diseño de Nanohilos

Pendolo

TOP 500

Estadísticas

Otras Tareas Realizadas

Gestión



Administración

Política de un uso racional.



Reparto del tiempo de cálculo en base a méritos científicos.

Política de un proceso o hilo en cada procesador.



Sistema de colas PBSpro.

Cálculo Científico

Cálculo Científico en la
UPV/EHU

SGI-IZO

Arquitectura de Arina

Paralelización

Gestión

● Administración

● Gestión del Software

● Galeria

● ¿Qué se hace en Arina?

● Astrofísica

● Dinámicas en sistemas de
altas Energías

● Desarrollo de Nuevos

Modelos Teóricos

● Química contra la Metastasis

● Diseño de Nanohilos

● Diseño de Nanohilos

Pendolo

TOP 500

Estadísticas

Otras Tareas Realizadas



Gestión de los Recursos

El sistema de colas permite gestionar de forma ordenada y automatizada los trabajos que son enviados a ejecución.

Sistema de Colas TORQUE / Scheduler MAUI

- Límites por servidor.
- Límites por nodo.
- Límites por usuario.
- Límites por grupo.
- Límites por cola.
- Prioridades por el reparto del tiempo de cálculo.
- Prioridades de usuario y colas según uso.
- *Parámetros tratados dinámicamente.*

Cálculo Científico

Cálculo Científico en la
UPV/EHU

SGI-IZO

Arquitectura de Arina

Paralelización

Gestión

● Administración

● Gestión del Software

● Galería

● ¿Qué se hace en Arina?

● Astrofísica

● Dinámicas en sistemas de
altas Energías

● Desarrollo de Nuevos

Modelos Teóricos

● Química contra la Metastasis

● Diseño de Nanohilos

● Diseño de Nanohilos

Pendulo

TOP 500

Estadísticas

Otras Tareas Realizadas



Buenas prácticas de los usuarios

Se ha optimizado preprocesando los trabajos.

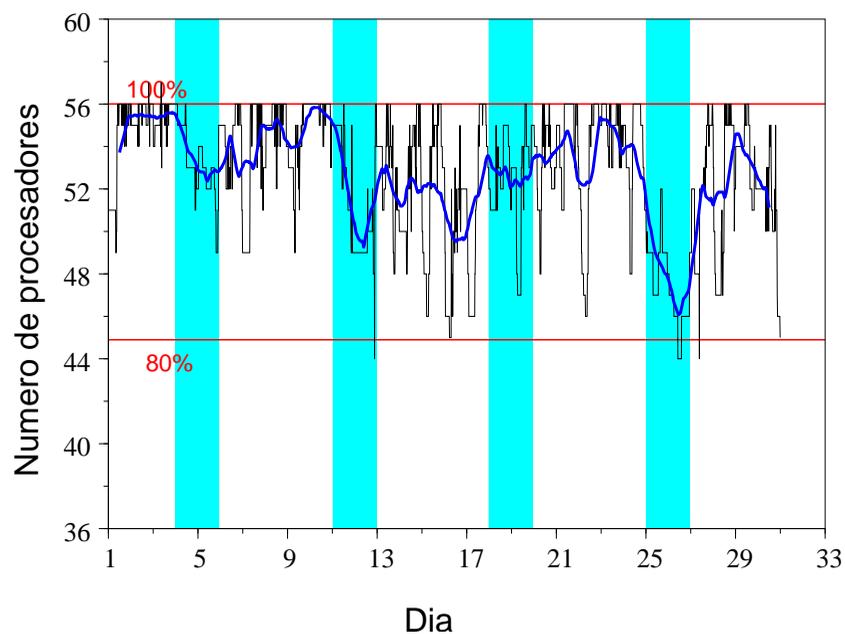


Figura 6: Rendimiento de Arina.

Cálculo Científico

Cálculo Científico en la UPV/EHU

SGI-IZO

Arquitectura de Arina

Paralelización

Gestión

● Administración

● Gestión del Software

● Galería

● ¿Qué se hace en Arina?

● Astrofísica

● Dinámicas en sistemas de altas Energías

● Desarrollo de Nuevos Modelos Teóricos

● Química contra la Metastasis

● Diseño de Nanohilos

● Diseño de Nanohilos

Pendulo

TOP 500

Estadísticas

Otras Tareas Realizadas



Buenas prácticas de los usuarios

Se ha optimizado preprocesando los trabajos.

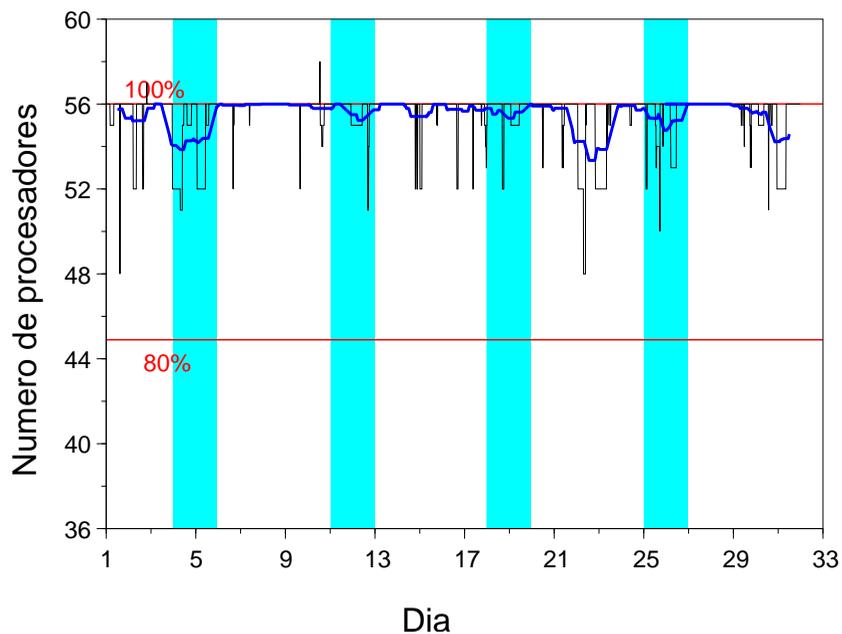


Figura 7: Rendimiento de Arina.

Cálculo Científico

Cálculo Científico en la UPV/EHU

SGI-IZO

Arquitectura de Arina

Paralelización

Gestión

● Administración

● Gestión del Software

● Galeria

● ¿Qué se hace en Arina?

● Astrofísica

● Dinamicas en sistemas de altas Energías

● Desarrollo de Nuevos Modelos Teoricos

● Química contra la Metastasis

● Diseño de Nanohilos

● Diseño de Nanohilos

Pendolo

TOP 500

Estadísticas

Otras Tareas Realizadas



Monitorización y control de los recursos

Control de Recursos

- Monitorización web. (<http://www.ehu.es/sgi/monitorweb>)
- Carga de los nodos.
- Ocupación de los discos.
- Control de procesos en el servidor.
- Control de cuotas de disco.
- Control de los tiempos utilizados por los usuarios.
- HP CMU
- Bull KSIS

Cálculo Científico

Cálculo Científico en la
UPV/EHU

SGI-IZO

Arquitectura de Arina

Paralelización

Gestión

● Administración

● Gestión del Software

● Galeria

● ¿Qué se hace en Arina?

● Astrofísica

● Dinámicas en sistemas de
altas Energías

● Desarrollo de Nuevos
Modelos Teóricos

● Química contra la Metastasis

● Diseño de Nanohilos

● Diseño de Nanohilos

Pendulo

TOP 500

Estadísticas

Otras Tareas Realizadas



Gestión del Software

Cálculo Científico

Cálculo Científico en la
UPV/EHU

SGI-IZO

Arquitectura de Arina

Paralelización

Gestión

● Administración

● Gestión del Software

● Galería

● ¿Qué se hace en Arina?

● Astrofísica

● Dinámicas en sistemas de
altas Energías

● Desarrollo de Nuevos
Modelos Teóricos

● Química contra la Metastasis

● Diseño de Nanohilos

● Diseño de Nanohilos

Pendulo

TOP 500

Estadísticas

Otras Tareas Realizadas

- La mayoría del software de cálculo actual es propietario de los grupos de investigación.
- Dependiendo de las licencias, no puede ser usado por otros grupos diferentes de la UPV/EHU.
- Duplicidad de licencias.
- El SGI compra, en sintonía con los investigadores, software para que pueda ser accesible a todos los investigadores de la universidad. (CFX, Matlab, MOLCAS, ADF, WIEN2k, Qsite, NBO, ...)



Galeria

Cálculo Científico

Cálculo Científico en la UPV/EHU

SGI-IZO

Arquitectura de Arina

Paralelización

Gestión

- Administración
- Gestión del Software
- **Galeria**
- ¿Qué se hace en Arina?
- Astrofísica
- Dinámicas en sistemas de altas Energías
- Desarrollo de Nuevos Modelos Teóricos
- Química contra la Metastasis
- Diseño de Nanohilos
- Diseño de Nanohilos

Pendolo

TOP 500

Estadísticas

Otras Tareas Realizadas





Galería



Cálculo Científico

Cálculo Científico en la UPV/EHU

SIG-IZO

Arquitectura de Arina

Paralelización

Gestión

- Administración
- Gestión del Software
- **Galería**
- ¿Qué se hace en Arina?
- Astrofísica
- Dinámicas en sistemas de altas Energías
- Desarrollo de Nuevos Modelos Teóricos
- Química contra la Metastasis
- Diseño de Nanohilos
- Diseño de Nanohilos

Pendolo

TOP 500

Estadísticas

Otras Tareas Realizadas



Galería (trasera)



Cálculo Científico

Cálculo Científico en la UPV/EHU

SIG-IZO

Arquitectura de Arina

Paralelización

Gestión

- Administración
- Gestión del Software

● **Galería**

- ¿Qué se hace en Arina?
- Astrofísica
- Dinámicas en sistemas de altas Energías
- Desarrollo de Nuevos Modelos Teóricos
- Química contra la Metastasis
- Diseño de Nanohilos
- Diseño de Nanohilos

Pendolo

TOP 500

Estadísticas

Otras Tareas Realizadas



Cálculo Científico

Cálculo Científico en la UPV/EHU

SGI-IZO

Arquitectura de Arina

Paralelización

Gestión

- Administración
- Gestión del Software
- Galería

● ¿Qué se hace en Arina?

- Astrofísica
- Dinámicas en sistemas de altas Energías
- Desarrollo de Nuevos Modelos Teóricos
- Química contra la Metástasis
- Diseño de Nanohilos
- Diseño de Nanohilos

Pendulo

TOP 500

Estadísticas

Otras Tareas Realizadas

¿Qué se hace en Arina?



Cálculo Científico

Cálculo Científico en la
UPV/EHU

SGI-IZO

Arquitectura de Arina

Paralelización

Gestión

- Administración
- Gestión del Software
- Galería
- ¿Qué se hace en Arina?
- **Astrofísica**

- Dinámicas en sistemas de altas Energías
- Desarrollo de Nuevos Modelos Teóricos
- Química contra la Metastasis
- Diseño de Nanohilos
- Diseño de Nanohilos

Pendulo

TOP 500

Estadísticas

Otras Tareas Realizadas

El misterio de los jets de Júpiter comienza a desvelarse
 Sánchez-Lavega, A., G. Orton, S., R. Hueso, E.
 García-Melendo, S. Pérez-Hoyos, A. Simon-Miller, J. F. Rojas,
 J. M. Gómez et al., Nature (2008), 451, 437-440





Dinamicas en sistemas de altas Energías

Extreme dynamics and energetics of Coulomb explosions of Xe clusters.

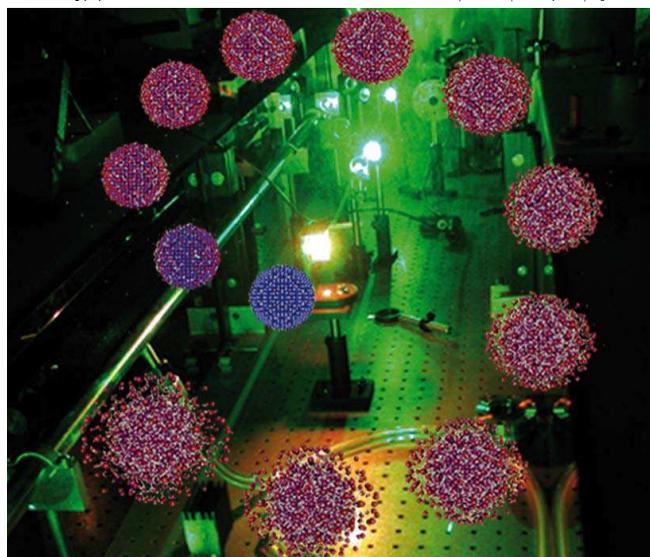
Dr. Andreas Heidenreich
Euskal Herriko Unibertsitatea

PCCP

Physical Chemistry Chemical Physics

www.rsc.org/pccp

Volume 11 | Number 1 | 7 January 2009 | Pages 1-196



ISSN 1463-9076

COVER ARTICLE
Jortner *et al.*
Extreme dynamics and energetics of Coulomb explosion of Xe clusters

PERSPECTIVE
Haran *et al.*
Collapse transition in proteins



1463-9076(2009)11:1;1-8

Cálculo Científico

Cálculo Científico en la UPV/EHU

SGI-IZO

Arquitectura de Arina

Paralelización

Gestión

- Administración
- Gestión del Software
- Galería
- ¿Qué se hace en Arina?
- Astrofísica
- **Dinamicas en sistemas de altas Energías**
- Desarrollo de Nuevos Modelos Teoricos
- Química contra la Metastasis
- Diseño de Nanohilos
- Diseño de Nanohilos

Pendolo

TOP 500

Estadísticas

Otras Tareas Realizadas



Desarrollo de Nuevos Modelos Teoricos

Performance of PNOF3 for reactivity studies: X(BO) and X(CN) isomerization reactions (X = H, Li) as a case study.

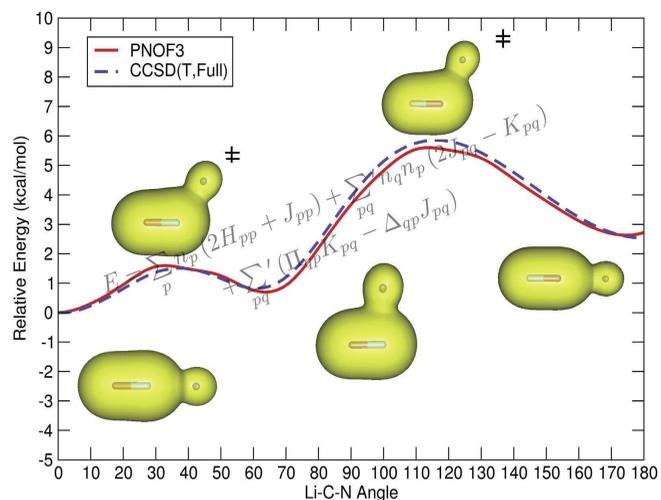
X. Lopez, M. Piris, J. M. Matxain and J. M. Ugalde
Euskal Herriko Unibertsitatea

PCCP

Physical Chemistry Chemical Physics

www.rsc.org/pccp

Volume 12 | Number 40 | 28 October 2010 | Pages 12877-13344



ISSN 1463-9076

COVER ARTICLE
Lopez et al.
Performance of PNOF3 for reactivity studies: X(BO) and X(CN) isomerization reactions as a case study

PERSPECTIVE
Witzke et al.
Nanoporous gold: a new material for catalytic and sensor applications



1463-9076(2010)12:40:1-Y

Cálculo Científico

Cálculo Científico en la UPV/EHU

SGI-IZO

Arquitectura de Arina

Paralelización

Gestión

- Administración
- Gestión del Software
- Galería
- ¿Qué se hace en Arina?
- Astrofísica
- Dinámicas en sistemas de altas Energías
- Desarrollo de Nuevos Modelos Teoricos
- Química contra la Metastasis
- Diseño de Nanohilos
- Diseño de Nanohilos

Pendulo

TOP 500

Estadísticas

Otras Tareas Realizadas

Química contra la Metastasis

Cálculo Científico

Cálculo Científico en la UPV/EHU

SGI-IZO

Arquitectura de Arina

Paralelización

Gestión

- Administración
- Gestión del Software
- Galería
- ¿Qué se hace en Arina?
- Astrofísica
- Dinámicas en sistemas de altas Energías
- Desarrollo de Nuevos Modelos Teóricos
- **Química contra la Metastasis**
- Diseño de Nanohilos
- Diseño de Nanohilos

Pendolo

TOP 500

Estadísticas

Otras Tareas Realizadas

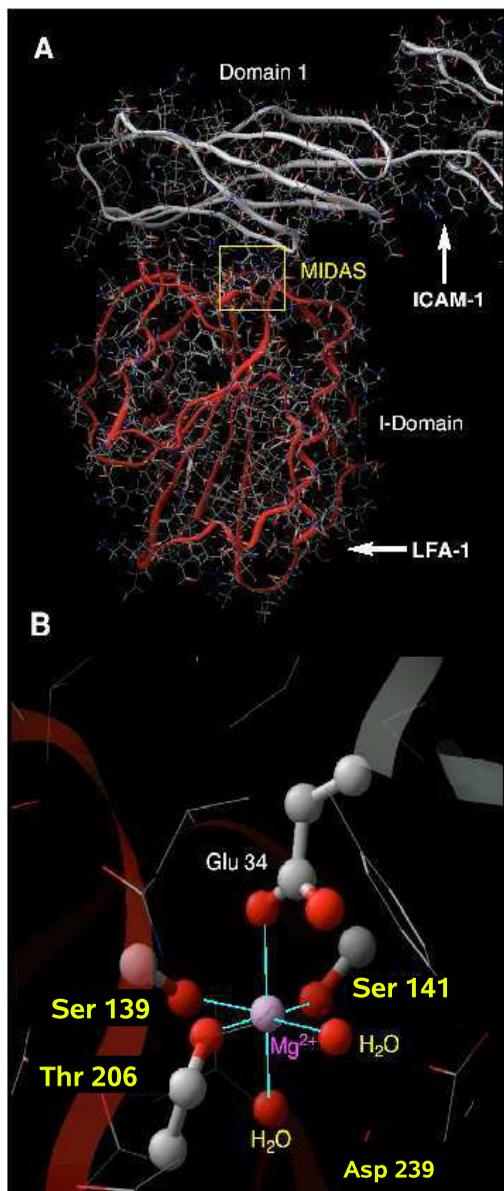


Fig. 3.1: A) Ribbon representation of the X-ray structure of the medium affinity conformation of the I-domain in LFA-1 (red), interacting with ICAM-1 (white) (PDB ID: 1D21 [60]). B) Highlighted the MIDAS motif (open state) in a ball and stick representation, where GLU-34 of ICAM-1 completes the coordination sphere of the metal.

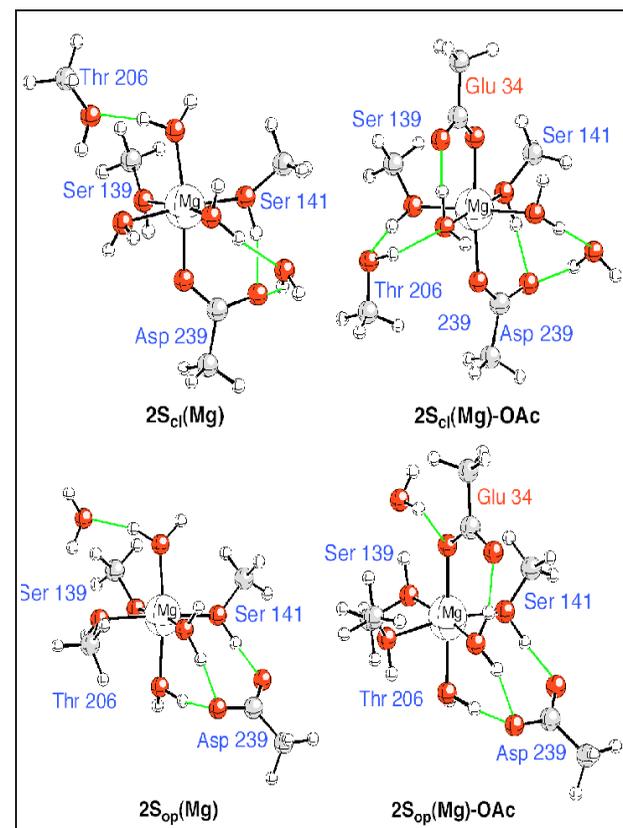


Fig. 3.4: Ball and stick representation of the MIDAS motif with first and second shell residues. Top: *closed* conformation in the absence (left) or presence (right) of GLU-34 from ICAM-1. Bottom: *open* conformation in the absence (left) or presence (right) of GLU-34 from ICAM-1.



Química contra la Metastasis

Cálculo Científico

Cálculo Científico en la UPV/EHU

SGI-IZO

Arquitectura de Arina

Paralelización

Gestión

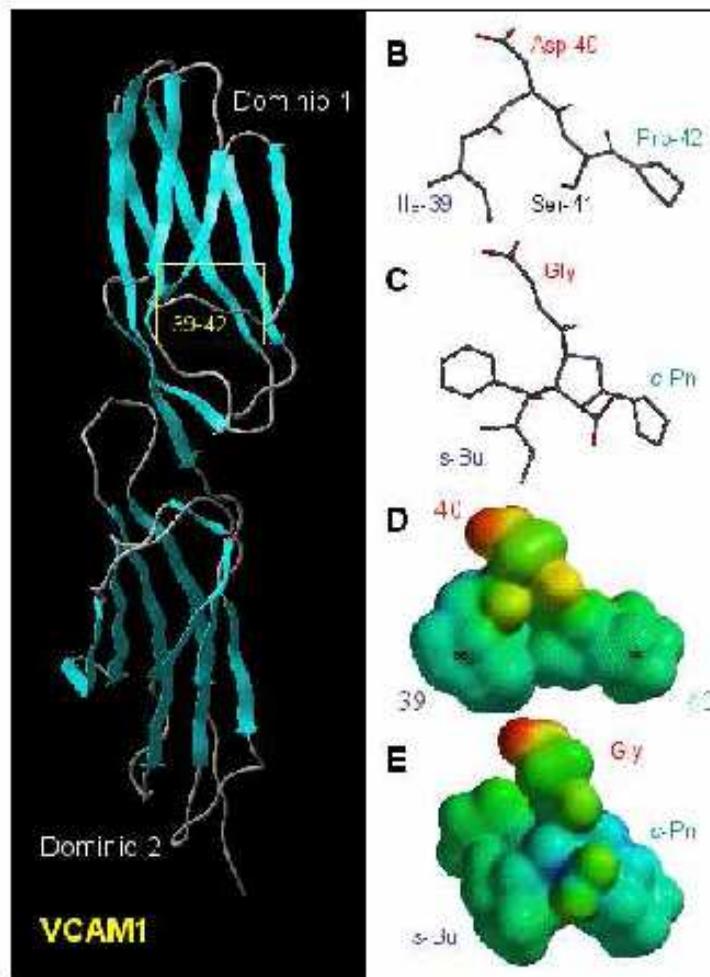
- Administración
- Gestión del Software
- Galería
- ¿Qué se hace en Arina?
- Astrofísica
- Dinámicas en sistemas de altas Energías
- Desarrollo de Nuevos Modelos Teóricos
- **Química contra la Metastasis**
- Diseño de Nanohilos
- Diseño de Nanohilos

Pendolo

TOP 500

Estadísticas

Otras Tareas Realizadas





Química contra la Metastasis

Cálculo Científico

Cálculo Científico en la UPV/EHU

SIG-IZO

Arquitectura de Arina

Paralelización

Gestión

- Administración
- Gestión del Software
- Galería
- ¿Qué se hace en Arina?
- Astrofísica
- Dinámicas en sistemas de altas Energías
- Desarrollo de Nuevos Modelos Teóricos
- **Química contra la Metastasis**
- Diseño de Nanohilos
- Diseño de Nanohilos

Pendulo

TOP 500

Estadísticas

Otras Tareas Realizadas

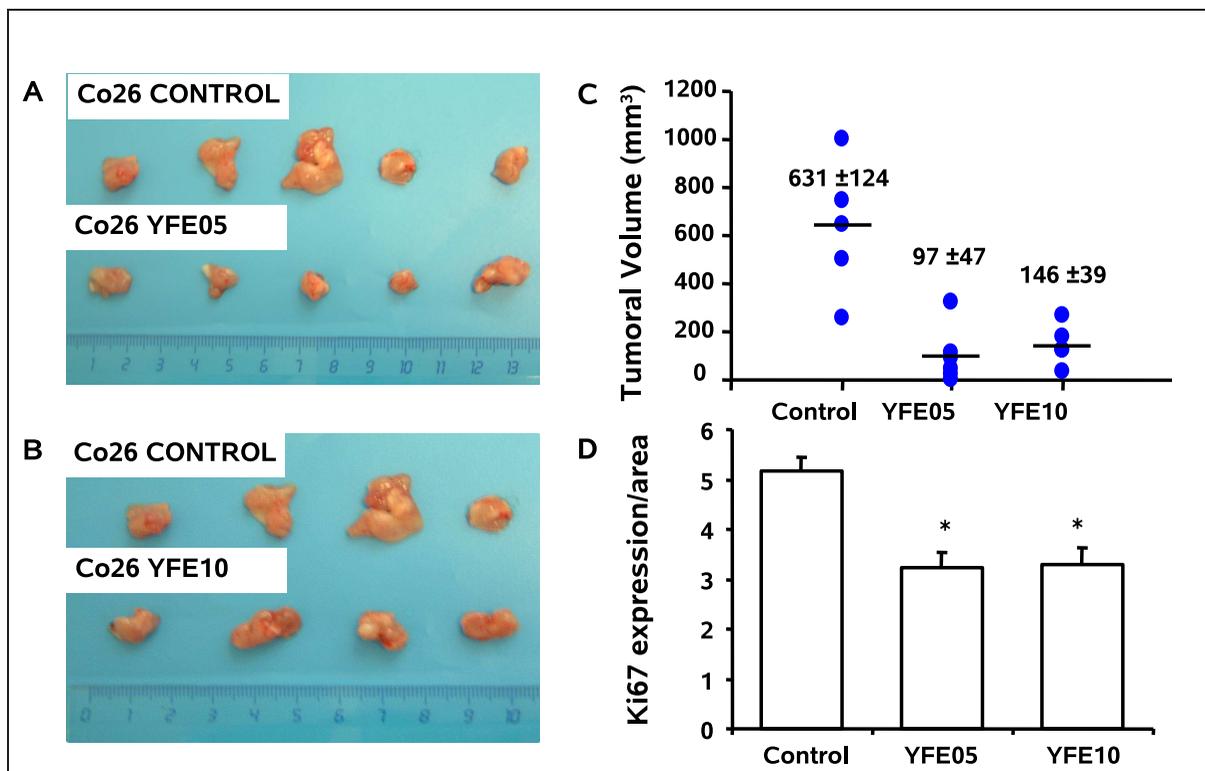


Fig. 6.10: LFA-1 antagonists inhibits CT26M tumor growth. CT26-CC cells (5×10^5) were subcutaneously injected into C57BL/6J mice. Mice received 2.5 mg/kg YFE05/PAMAMG3.5 and YFE10/PAMAMG3.5 daily. Primary tumors were removed on day 15th and tumor volume (C), and Ki67-expressing melanoma cells (D) were determined by immunohistochemistry. Data represent values SE. Differences in average values were statistically significant with respect to control mice by ANOVA and Tamhane's post-hoc test (* $p < 0.05$).



Diseño de Nanohilos

Cálculo Científico

Cálculo Científico en la UPV/EHU

SGI-IZO

Arquitectura de Arina

Paralelización

Gestión

- Administración
- Gestión del Software
- Galería
- ¿Qué se hace en Arina?
- Astrofísica
- Dinámicas en sistemas de altas Energías
- Desarrollo de Nuevos Modelos Teóricos
- Química contra la Metastasis
- **Diseño de Nanohilos**
- Diseño de Nanohilos

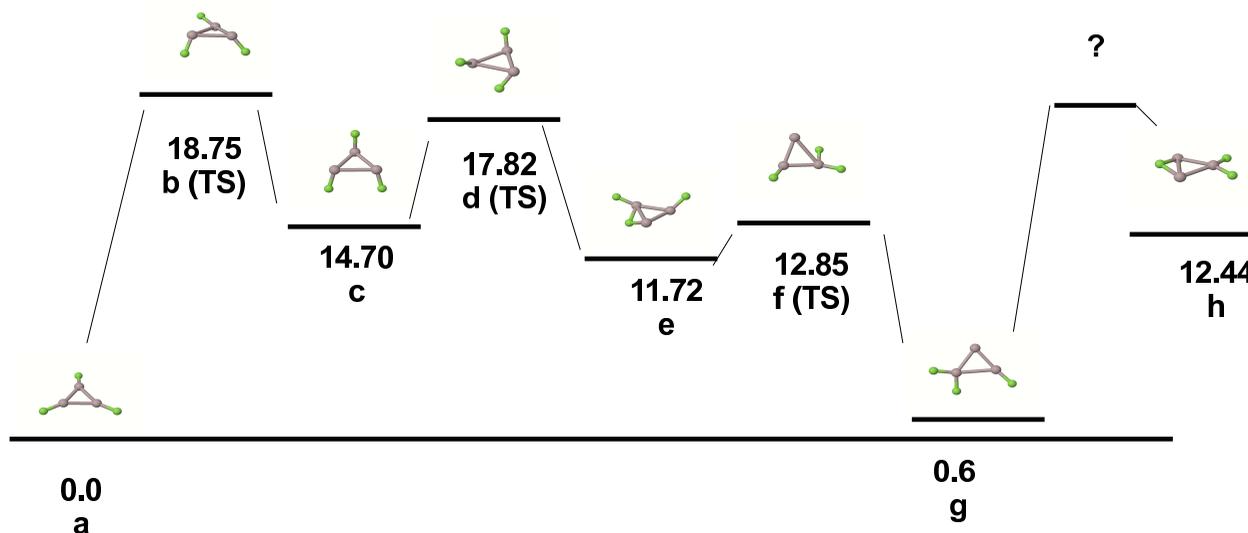
Pendulo

TOP 500

Estadísticas

Otras Tareas Realizadas

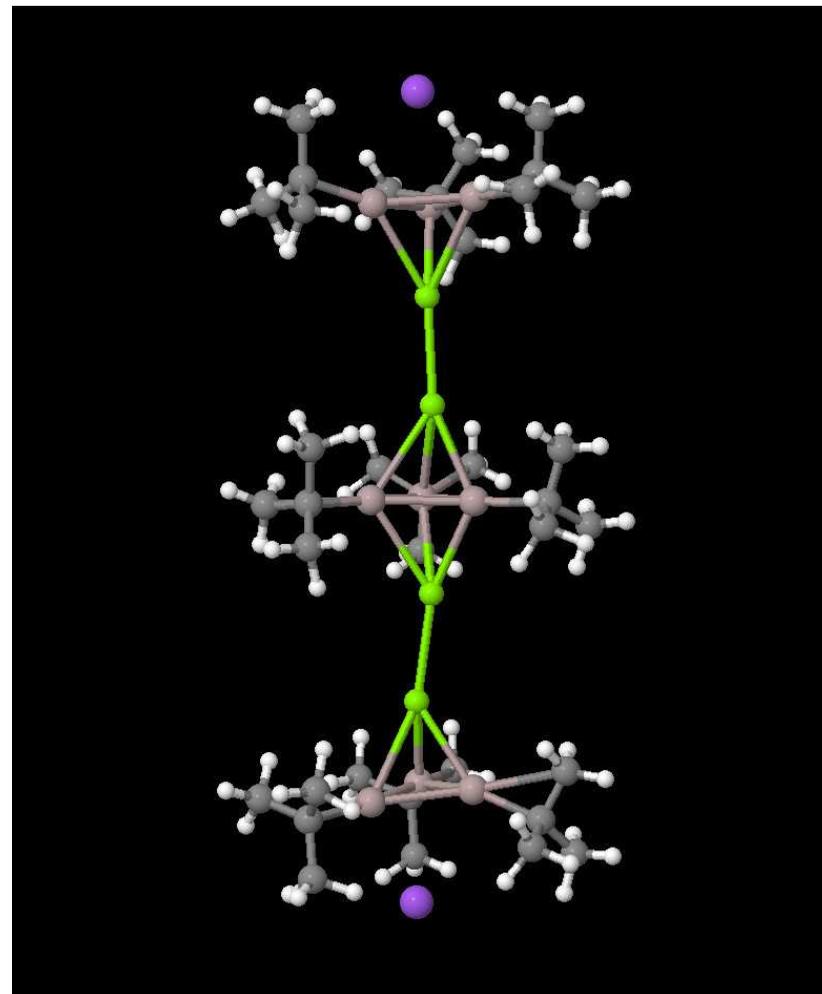
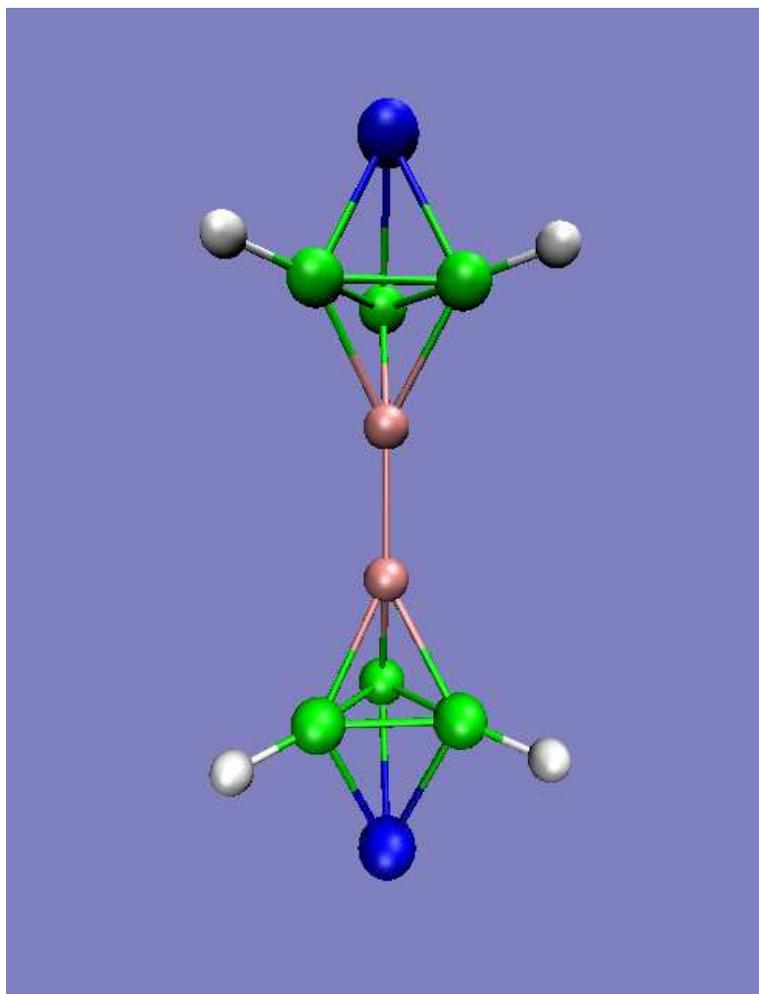
Buscando las moléculas adecuadas





Diseño de Nanohilos

Posibles candidatos



Cálculo Científico

Cálculo Científico en la UPV/EHU

SIG-IZO

Arquitectura de Arina

Paralelización

Gestión

- Administración
- Gestión del Software
- Galería
- ¿Qué se hace en Arina?
- Astrofísica
- Dinámicas en sistemas de altas Energías
- Desarrollo de Nuevos Modelos Teóricos
- Química contra la Metastasis
- Diseño de Nanohilos
- Diseño de Nanohilos

Pendulo

TOP 500

Estadísticas

Otras Tareas Realizadas



Cálculo Científico

Cálculo Científico en la UPV/EHU

SGI-IZO

Arquitectura de Arina

Paralelización

Gestión

Pendulo

- Situación de partida
- El Péndulo
- Requisitos
- Configuración
- Gestión del GRID.

TOP 500

Estadísticas

Otras Tareas Realizadas

Conclusiones

Pendulo



Situación de partida

- Creciente demanda de recursos computacionales.

Cálculo Científico

Cálculo Científico en la UPV/EHU

SGI-IZO

Arquitectura de Arina

Paralelización

Gestión

Pendolo

● Situación de partida

- El Péndulo
- Requisitos
- Configuración
- Gestión del GRID.

TOP 500

Estadísticas

Otras Tareas Realizadas

Conclusiones



Situación de partida

Cálculo Científico

Cálculo Científico en la
UPV/EHU

SGI-IZO

Arquitectura de Arina

Paralelización

Gestión

Pendolo

● Situación de partida

● El Péndulo

● Requisitos

● Configuración

● Gestión del GRID.

TOP 500

Estadísticas

Otras Tareas Realizadas

Conclusiones

- Creciente demanda de recursos computacionales.
- Existencia Recursos infrautilizados.



Situación de partida

Cálculo Científico

Cálculo Científico en la
UPV/EHU

SGI-IZO

Arquitectura de Arina

Paralelización

Gestión

Pendolo

● Situación de partida

● El Péndulo

● Requisitos

● Configuración

● Gestión del GRID.

TOP 500

Estadísticas

Otras Tareas Realizadas

Conclusiones

- Creciente demanda de recursos computacionales.
- Existencia Recursos infrautilizados.
 - ◆ Aulas docentes y de libre uso: horario reducido.



Situación de partida

Cálculo Científico

Cálculo Científico en la
UPV/EHU

SGI-IZO

Arquitectura de Arina

Paralelización

Gestión

Pendolo

● Situación de partida

- El Péndulo
- Requisitos
- Configuración
- Gestión del GRID.

TOP 500

Estadísticas

Otras Tareas Realizadas

Conclusiones

- Creciente demanda de recursos computacionales.
- Existencia Recursos infrautilizados.
 - ◆ Aulas docentes y de libre uso: horario reducido.
 - ◆ Ordenadores apagados fuera del horario de apertura.



Situación de partida

Cálculo Científico

Cálculo Científico en la
UPV/EHU

SGI-IZO

Arquitectura de Arina

Paralelización

Gestión

Pendolo

● Situación de partida

- El Péndulo
- Requisitos
- Configuración
- Gestión del GRID.

TOP 500

Estadísticas

Otras Tareas Realizadas

Conclusiones

- Creciente demanda de recursos computacionales.
- Existencia Recursos infrautilizados.
 - ◆ Aulas docentes y de libre uso: horario reducido.
 - ◆ Ordenadores apagados fuera del horario de apertura.
- Estudio de la viabilidad para el cálculo científico de estas aulas para su uso en investigación.



El Péndulo

¿Qué es?

Clúster de cálculo científico que utiliza los ordenadores de las aulas docentes informáticas durante el horario en que dichas aulas permanecen inactivas. GRID que utiliza los ordenadores de las aulas como nodos de cómputo.



Cálculo Científico

Cálculo Científico en la
UPV/EHU

SGI-IZO

Arquitectura de Arina

Paralelización

Gestión

Péndulo

● Situación de partida

● **El Péndulo**

● Requisitos

● Configuración

● Gestión del GRID.

TOP 500

Estadísticas

Otras Tareas Realizadas

Conclusiones



Requisitos

Cálculo Científico

Cálculo Científico en la
UPV/EHU

SGI-IZO

Arquitectura de Arina

Paralelización

Gestión

Pendulo

- Situación de partida
- El Péndulo

● Requisitos

- Configuración
- Gestión del GRID.

TOP 500

Estadísticas

Otras Tareas Realizadas

Conclusiones

1. Integración entre todos los elementos de cálculo

- Integración de elementos heterogéneos.
- Integración con Arina, facilidad para los usuarios.

2. Bajo coste ⇒ Software libre.

3. Aulas operativas en su horario.

- Minimizar interferencias.

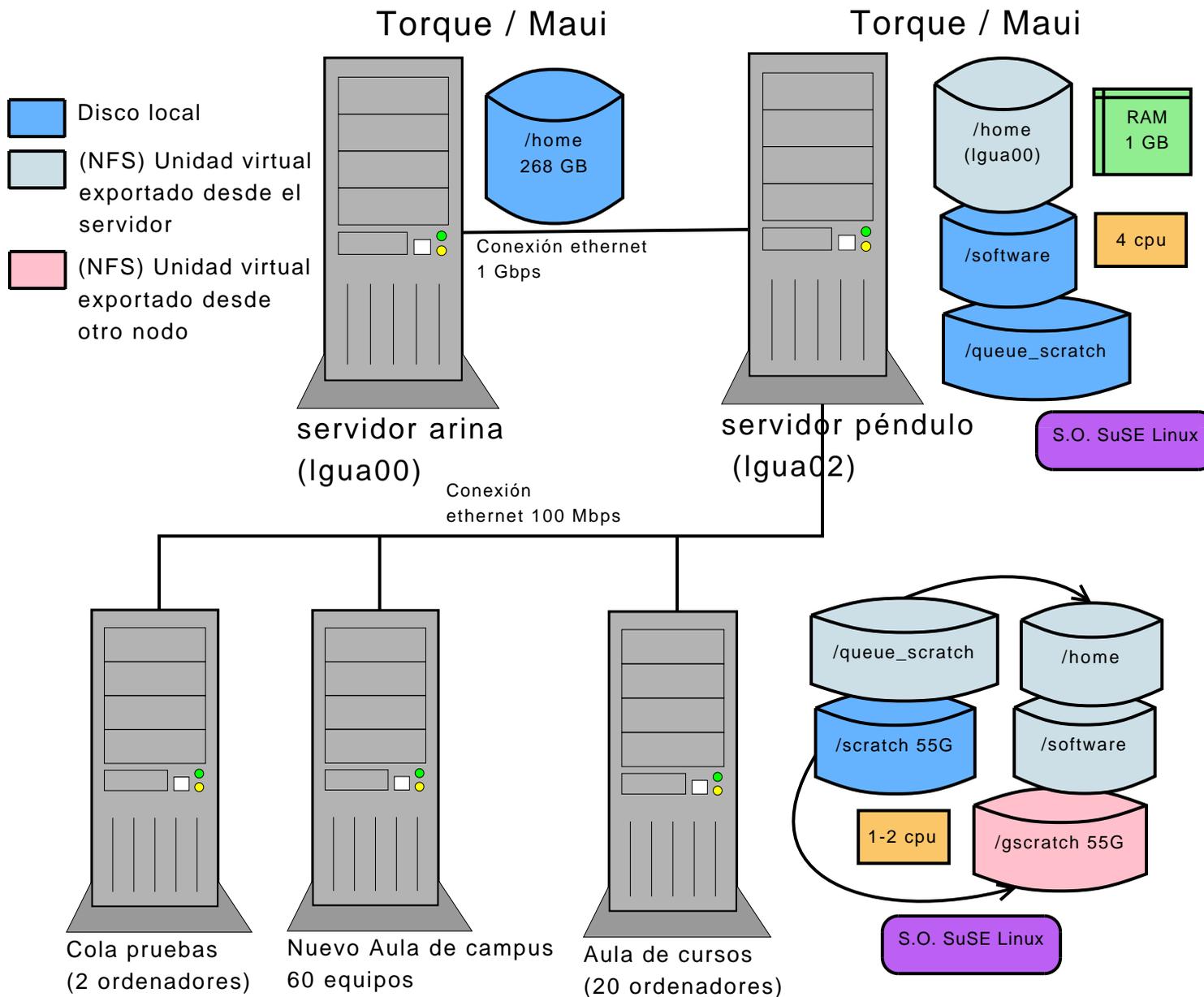
4. Servidor accesible en todo momento.

- Trabajar aunque los nodos estén inactivos.

5. Minimizar el mantenimiento



Configuración



- Cálculo Científico
- Cálculo Científico en la UPV/EHU
- SGI-IZO
- Arquitectura de Arina
- Paralelización
- Gestión
- Péndulo**
 - Situación de partida
 - El Péndulo
 - Requisitos
 - Configuración**
 - Gestión del GRID.
- TOP 500
- Estadísticas
- Otras Tareas Realizadas
- Conclusiones



Gestión del GRID.

Tiene una gestión singular en algunos aspectos.

- Servidor LDAP para gestión de usuarios.
- Startup script *administrar*. → Ejecución en el reinicio.
- Script *ahorrar_energia*
- Script *comprobar_encendido*
- Arranque dual: Servidor REMBO.

Cálculo Científico

Cálculo Científico en la
UPV/EHU

SGI-IZO

Arquitectura de Arina

Paralelización

Gestión

Pendulo

- Situación de partida
- El Péndulo
- Requisitos
- Configuración
- Gestión del GRID.

TOP 500

Estadísticas

Otras Tareas Realizadas

Conclusiones



Cálculo Científico

Cálculo Científico en la UPV/EHU

SGI-IZO

Arquitectura de Arina

Paralelización

Gestión

Pendulo

TOP 500

- ¿Qué es?
- Hitoria
- Evolución de Los Procesadores
- Tipo de interconexiones
- Tipo de interconexiones
- Sistema operativo
- Marcas
- Quienes
- Pros y Contras

Estadísticas

TOP 500



¿Qué es?

- Proporciona un listado de los 500 ordenadores más potentes.
- La potencia viene dada por el bechmatk LINPACK.
- Establece la ruta a seguir en el mundo del HPC.
- Existen muchos tipos de computadores.

Cálculo Científico

Cálculo Científico en la UPV/EHU

SGI-IZO

Arquitectura de Arina

Paralelización

Gestión

Pendolo

TOP 500

● ¿Qué es?

- Hitoria
- Evolución de Los Procesadores
- Tipo de interconexiones
- Tipo de interconexiones
- Sistema operativo
- Marcas
- Quienes
- Pros y Contras

Estadísticas



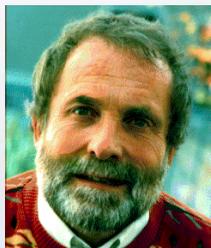
Hitoria



Mannheim Supercomputer Statistics & Project Start in 1993

Top500 Authors

Project was started in spring 1993 by:



Hans W. Meuer



Erich Strohmaier

Authors since:



06/1993
Jack Dongarra



11/2000
Horst Simon

Cálculo Científico

Cálculo Científico en la UPV/EHU

SGI-IZO

Arquitectura de Arina

Paralelización

Gestión

Pendolo

TOP 500

● ¿Qué es?

● **Hitoria**

- Evolución de Los Procesadores
- Tipo de interconexiones
- Tipo de interconexiones
- Sistema operativo
- Marcas
- Quienes
- Pros y Contras

Estadísticas



Evolución de Los Procesadores

Cálculo Científico

Cálculo Científico en la UPV/EHU

SGI-IZO

Arquitectura de Arina

Paralelización

Gestión

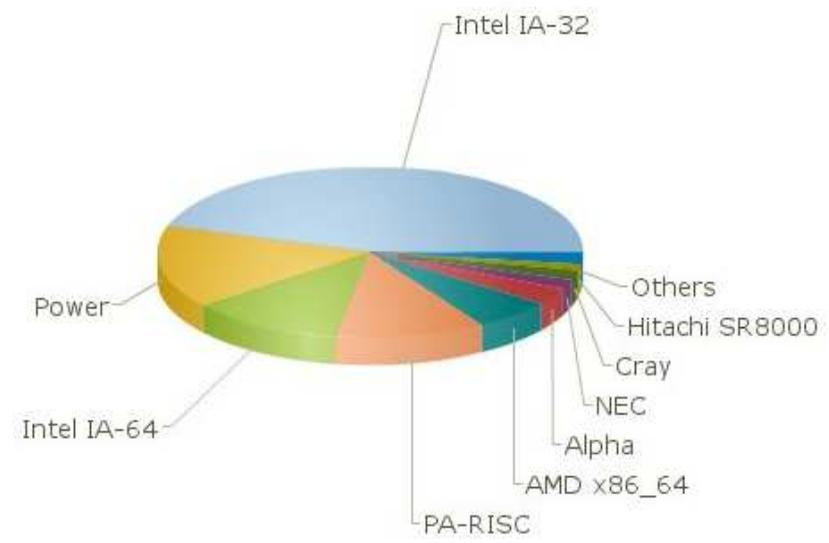
Pendulo

TOP 500

- ¿Qué es?
- Hitoria
- **Evolución de Los Procesadores**
- Evolución de Los Procesadores
- Tipo de interconexiones
- Tipo de interconexiones
- Sistema operativo
- Marcas
- Quienes
- Pros y Contras

Estadísticas

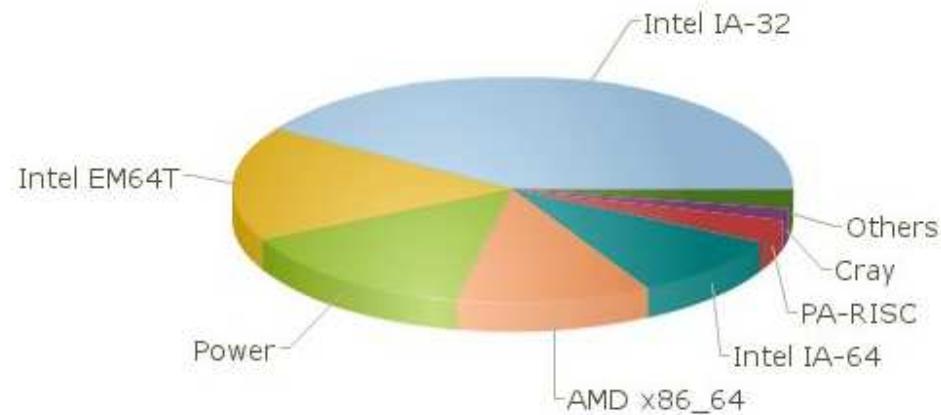
Processor Family / Systems
June 2004





Evolución de Los Procesadores

Processor Family / Systems
November 2005



Cálculo Científico

Cálculo Científico en la UPV/EHU

SGI-IZO

Arquitectura de Arina

Paralelización

Gestión

Pendolo

TOP 500

- ¿Qué es?
- Historia
- Evolución de Los Procesadores
- Tipo de interconexiones
- Tipo de interconexiones
- Sistema operativo
- Marcas
- Quienes
- Pros y Contras

Estadísticas



Evolución de Los Procesadores

Cálculo Científico

Cálculo Científico en la UPV/EHU

SGI-IZO

Arquitectura de Arina

Paralelización

Gestión

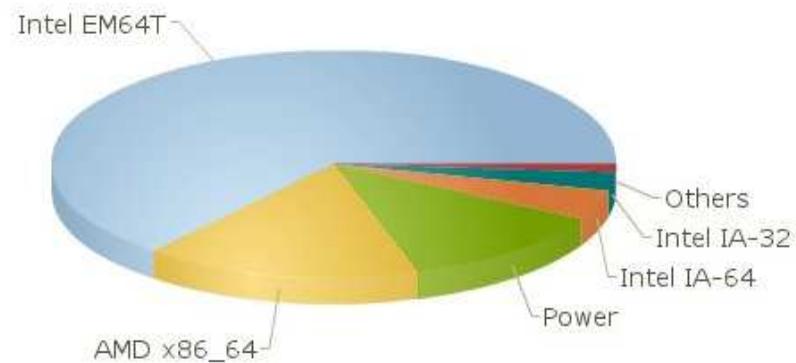
Pendolo

TOP 500

- ¿Qué es?
- Hitoria
- Evolución de Los Procesadores
- Evolución de Los Procesadores
- **Evolución de Los Procesadores**
- Evolución de Los Procesadores
- Tipo de interconexiones
- Tipo de interconexiones
- Sistema operativo
- Marcas
- Quienes
- Pros y Contras

Estadísticas

Processor Family / Systems
November 2007





Evolución de Los Procesadores

Cálculo Científico

Cálculo Científico en la UPV/EHU

SGI-IZO

Arquitectura de Arina

Paralelización

Gestión

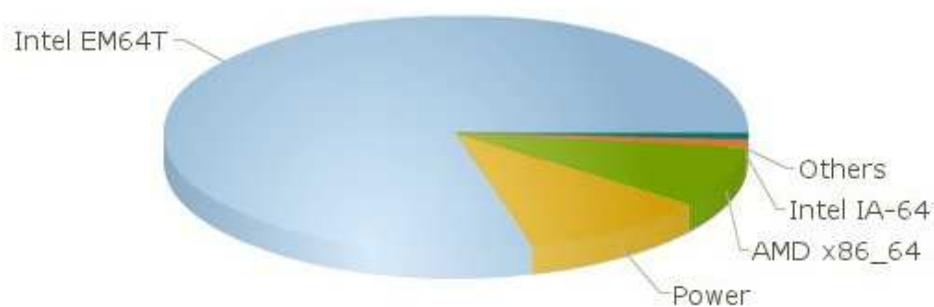
Pendolo

TOP 500

- ¿Qué es?
- Hitoria
- Evolución de Los Procesadores
- Tipo de interconexiones
- Tipo de interconexiones
- Sistema operativo
- Marcas
- Quienes
- Pros y Contras

Estadísticas

Processor Family / Systems
November 2009





Tipo de interconexiones

Cálculo Científico

Cálculo Científico en la UPV/EHU

SGI-IZO

Arquitectura de Arina

Paralelización

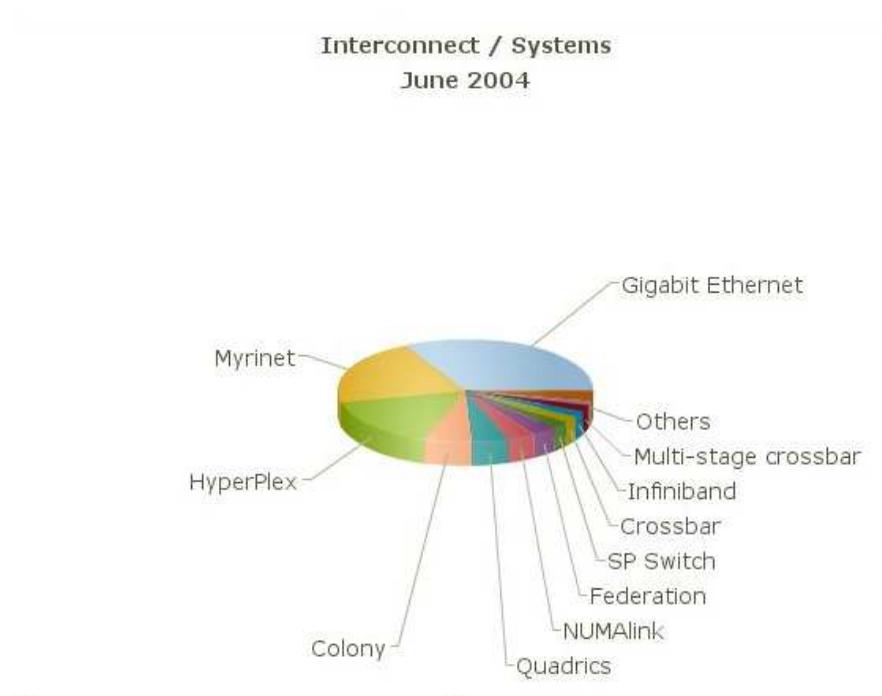
Gestión

Pendolo

TOP 500

- ¿Qué es?
- Historia
- Evolución de Los Procesadores
- Tipo de interconexiones
- Tipo de interconexiones
- Sistema operativo
- Marcas
- Quienes
- Pros y Contras

Estadísticas





Tipo de interconexiones

Cálculo Científico

Cálculo Científico en la UPV/EHU

SGI-IZO

Arquitectura de Arina

Paralelización

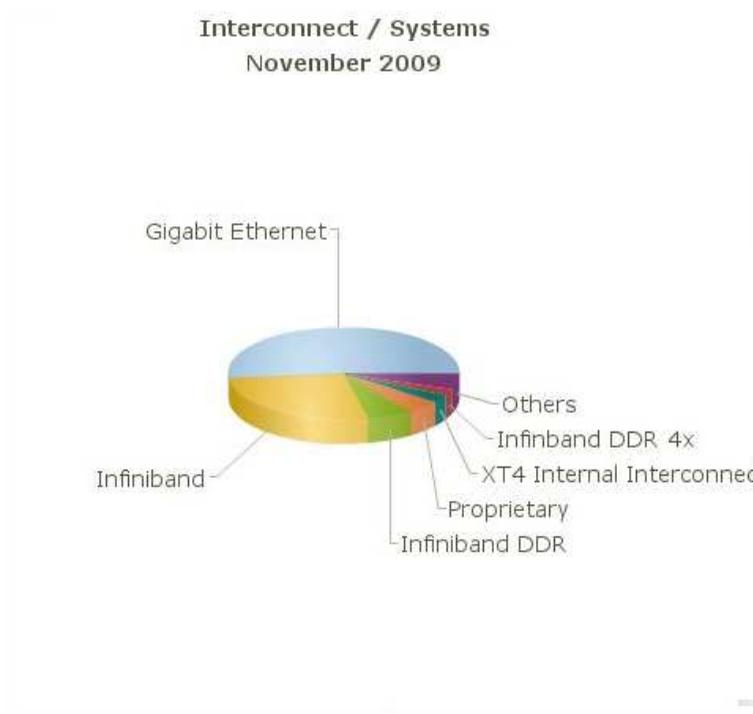
Gestión

Pendulo

TOP 500

- ¿Qué es?
- Hitoria
- Evolución de Los Procesadores
- Tipo de interconexiones
- **Tipo de interconexiones**
- Sistema operativo
- Marcas
- Quienes
- Pros y Contras

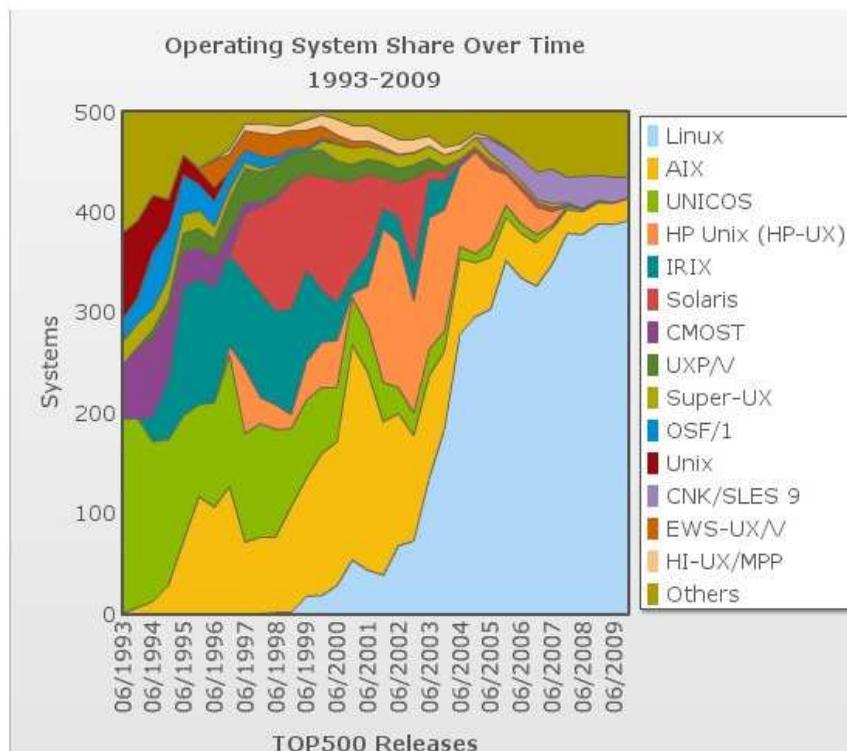
Estadísticas





Sistema operativo

Linux es el sistema operativo más usado.



Cálculo Científico

Cálculo Científico en la UPV/EHU

SIG-IZO

Arquitectura de Arina

Paralelización

Gestión

Pendolo

TOP 500

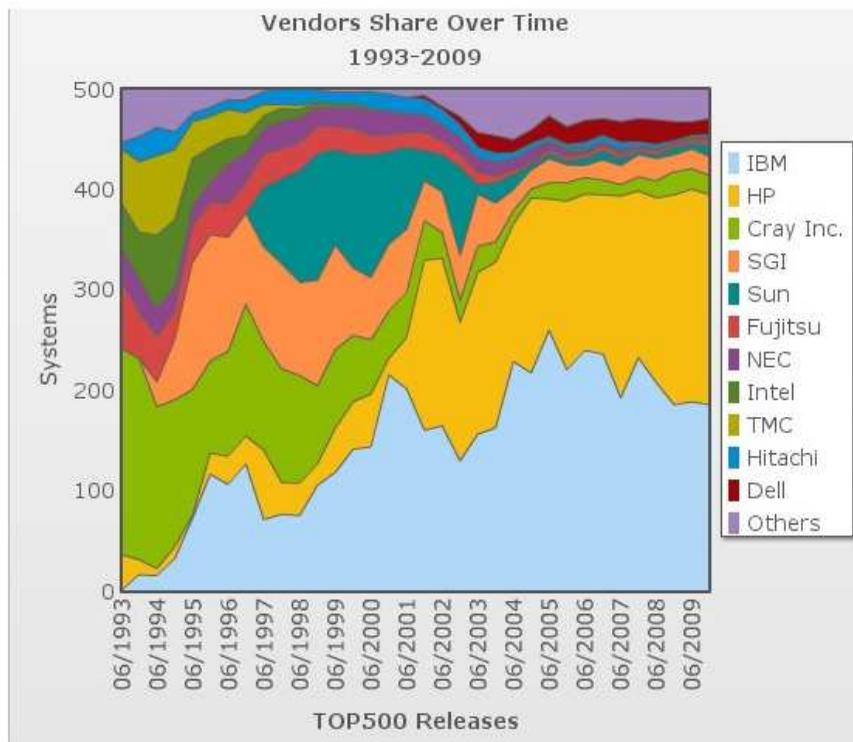
- ¿Qué es?
- Hitoria
- Evolución de Los Procesadores
- Tipo de interconexiones
- Tipo de interconexiones
- **Sistema operativo**
- Marcas
- Quienes
- Pros y Contras

Estadísticas



Marcas

HP e IBM son los dos grandes competidores.



Pero IBM tiene más potentes.

Cálculo Científico

Cálculo Científico en la UPV/EHU

SGI-IZO

Arquitectura de Arina

Paralelización

Gestión

Pendolo

TOP 500

- ¿Qué es?
- Hitoria
- Evolución de Los Procesadores
- Tipo de interconexiones
- Tipo de interconexiones
- Sistema operativo

● Marcas

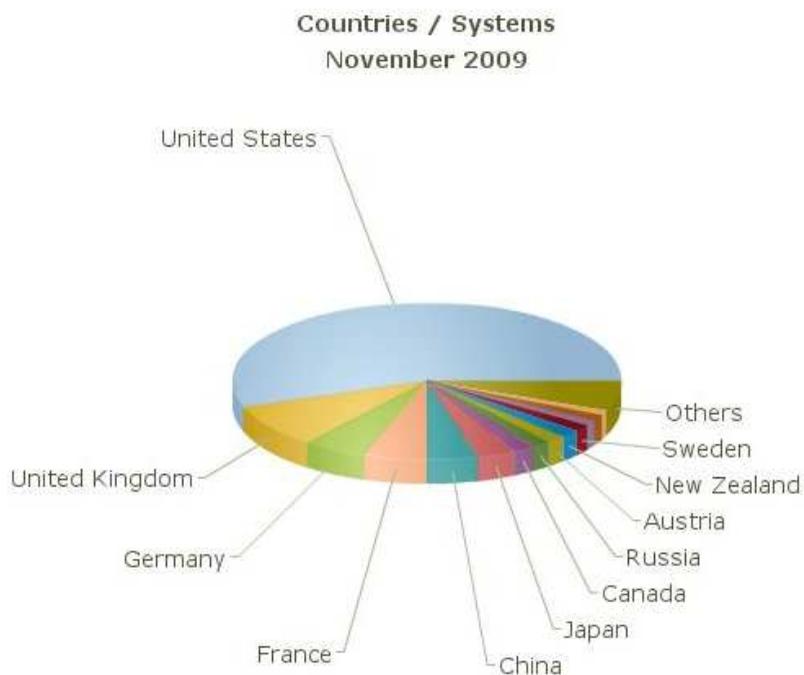
- Quienes
- Pros y Contras

Estadísticas



Quienes

La mayor parte se encuentran en América.



... más concretamente en EEUU.

- Cálculo Científico
- Cálculo Científico en la UPV/EHU
- SIG-IZO
- Arquitectura de Arina
- Paralelización
- Gestión
- Pendolo

TOP 500

- ¿Qué es?
- Hitoria
- Evolución de Los Procesadores
- Tipo de interconexiones
- Tipo de interconexiones
- Sistema operativo
- Marcas
- Quienes
- Pros y Contras

Estadísticas



Pros y Contras



Top500 in the Future

Motivation for Additional Benchmarks

Linpack Benchmark

➤ Pros

- One number
- Simple to define and rank
- Allows problem size to change with machine and over time
- Allowing Competitions

➤ Cons

- Emphasizes only “peak” CPU speed and number of CPUs
- Does not stress local bandwidth
- Does not stress the network
- Does not test gather/scatter

➤ From Linpack Benchmark and Top500: “no single number can reflect overall performance”

➤ Clearly need something more than Linpack

➤ HPC Challenge Benchmark and others

- Cálculo Científico
- Cálculo Científico en la UPV/EHU
- SGI-IZO
- Arquitectura de Arina
- Paralelización
- Gestión
- Pendolo
- TOP 500**
 - ¿Qué es?
 - Hitoria
 - Evolución de Los Procesadores
 - Tipo de interconexiones
 - Tipo de interconexiones
 - Sistema operativo
 - Marcas
 - Quienes
 - **Pros y Contras**
- Estadísticas



Cálculo Científico

Cálculo Científico en la UPV/EHU

SGI-IZO

Arquitectura de Arina

Paralelización

Gestión

Pendolo

TOP 500

Estadísticas

- Usuarios 2010
- Publicaciones

Otras Tareas Realizadas

Conclusiones

Estadísticas



Usuarios 2010

Cálculo Científico

Cálculo Científico en la
UPV/EHU

SGI-IZO

Arquitectura de Arina

Paralelización

Gestión

Pendolo

TOP 500

Estadísticas

● Usuarios 2010

● Publicaciones

Otras Tareas Realizadas

Conclusiones

- 2010 70 % de utilización hasta Junio, 40 % hasta Diciembre
Bevido a la ampliación de Julio.
- 91 usuarios realizáron cálculos en Arina.
- 23 usuarios consumieron más de 1000 días de cálculo, y 46
más de 100.
- Mayoritariamente Químicos y Físicos, también hay
informáticos, ingenieros, biólogos ...
- 275 cuentas y 50 proyectos en curso.



Publicaciones

Cálculo Científico

Cálculo Científico en la
UPV/EHU

SGI-IZO

Arquitectura de Arina

Paralelización

Gestión

Pendolo

TOP 500

Estadísticas

● Usuarios 2010

● Publicaciones

Otras Tareas Realizadas

Conclusiones

- Hasta la fecha (5 años) se han producido 211 artículos científicos, 11 DEA's y 13 tesis doctorales en los que se ha utilizado Arina.
- Una publicación 1500 días de cálculo.
- Estos artículos están recopilados en la página del servicio:
<http://www.ehu.es/sgi/CUENTA>



Otras Tareas

Cálculo Científico

Cálculo Científico en la
UPV/EHU

SGI-IZO

Arquitectura de Arina

Paralelización

Gestión

Pendulo

TOP 500

Estadísticas

Otras Tareas Realizadas

● Otras Tareas

● Proyecto SCICOMP

Conclusiones

Formación Usuarios

- Se utilizan diferentes herramientas para la formación de los usuarios en el correcto uso de los recursos computacionales:
 - ◆ Página Web del servicio <http://www.ehu.es/sgi/>
 - ◆ Lista de distribución de Arina.
 - ◆ Email para aclarar dudas y/o corregir errores.
- El curso que viene se prevé impartir un curso de introducción a `Linux` enfocado al correcto uso de los recursos del SGI.
- También se esta preparando un curso de programación en paralelo.



Otras Tareas

Cálculo Científico

Cálculo Científico en la
UPV/EHU

SGI-IZO

Arquitectura de Arina

Paralelización

Gestión

Pendolo

TOP 500

Estadísticas

Otras Tareas Realizadas

● Otras Tareas

● Proyecto SCICOMP

Conclusiones

Formación de los Técnicos

- Asistencia a Cursos.
- Asistencia a Congresos.



Otras Tareas

Cálculo Científico

Cálculo Científico en la
UPV/EHU

SGI-IZO

Arquitectura de Arina

Paralelización

Gestión

Pendolo

TOP 500

Estadísticas

Otras Tareas Realizadas

● Otras Tareas

● Proyecto SCICOMP

Conclusiones

Seguimiento de los Avances en Computacionales

- El objetivo es conocer el mercado para optar a la mejor solución a la hora de ampliar nuestros recursos.
- Visitas a centros de Supercomputación.
 - CESGA (Centro de Supercomputación de Galicia).
 - NSC (Centro Nacional de Supercomputación de Suecia).
 - NIC (John von Neumann Institute For Computing, Alemania).
 - BSC (Centron de supercomputación de Barcelona).
 - CESCA (Centro de Supercomputación de Catalunya).
- También se han visitado a diferentes proveedores (HP, SGI, BULL, SUN ...)



Proyecto SCICOMP

Cálculo Científico

Cálculo Científico en la
UPV/EHU

SGI-IZO

Arquitectura de Arina

Paralelización

Gestión

Pendolo

TOP 500

Estadísticas

Otras Tareas Realizadas

● Otras Tareas

● Proyecto SCICOMP

Conclusiones

- Liderado por nuestro Servicio participan 5 departamentos de la UPV/EHU y el nanoGUNE
 - Física de la Materia Condensada
 - Física Aplicada
 - Ciencia y Tecnología de Polímeros
 - Arquitectura y Tecnología de Computadores
 - Ciencia de la Computación e Inteligencia Artificial
- El objetivo es el estudio de las nuevas tecnologías de computación para implantarlas en la UPV/EHU, GPUs y paralelización masiva.
- Colaborarán Físicos y Químicos con software propio, e informáticos con el objetivo de analizar esos códigos y optimizarlos para adecuarlos a las nuevas tecnologías.
- Proyectos de Fin de Carrera.



Cálculo Científico

Cálculo Científico en la UPV/EHU

SGI-IZO

Arquitectura de Arina

Paralelización

Gestión

Pendulo

TOP 500

Estadísticas

Otras Tareas Realizadas

Conclusiones

● Conclusiones

Conclusiones



Conclusiones

Cálculo Científico

Cálculo Científico en la
UPV/EHU

SGI-IZO

Arquitectura de Arina

Paralelización

Gestión

Pendolo

TOP 500

Estadísticas

Otras Tareas Realizadas

Conclusiones

● Conclusiones

- Existe un servicio para dar apoyo de los investigadores.
- Se ha dotado de recursos computacionales y humanos al servicio.

- El servicio que ofrece, además de alto poder computacional, recursos humanos a los investigadores de la UPV/EHU y está también a disposición de otros institutos públicos y empresas.



Más Información

Página del Servicio:

<http://www.ehu.es/sgi>

Lista de Información sobre el Servicio:

<http://list.ehu.es/mailman/listinfo/arina-pruebas>

Eduardo Ogando (Dr. Física)

CIDIR Bizakia

Tel 946015022

edu.ogando@ehu.es

Txema Mercero (Dr. Química)

Kimika Fakultatea (Donostia)

Tel 943015312

jm.mercero@ehu.es

Cálculo Científico

Cálculo Científico en la
UPV/EHU

SGI-IZO

Arquitectura de Arina

Paralelización

Gestión

Pendolo

TOP 500

Estadísticas

Otras Tareas Realizadas

Conclusiones

● Conclusiones

Gracias por su amable atención.