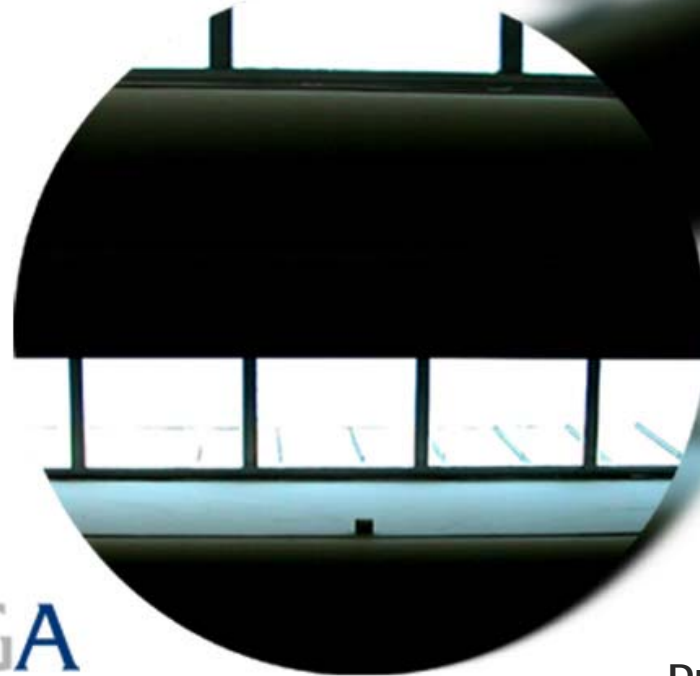


MATHEMATICA COMPUTING

Y

NODO CESGA



CESGA

Dr. Andrés Gómez Tato

Adm. Aplicaciones y Proyectos

agomez@cesga.es

CENTRO DE SUPERCOMPUTACIÓN DE GALICIA

CESGA

ESTABLISHED IN 1993

IN SANTIAGO DE COMPOSTELA [SPAIN]

CESGA.

Legal entities

- Public Company
- Public Foundation

Partners

- Regional Government of Galicia 70%



Xunta de Galicia

- National Research Council of Spain 30%



mission statement

- ➔ To provide high performance computing, communications resources and services to the scientific community of Galicia and to the National Research Council, as well as, to institutions and enterprises with R&D activity.
- ➔ To promote the use of new information and communication technologies applied to research within the scientific community of Galicia.
- ➔ To become a consolidated RTD Centre of Excellence serving as international scientific and technological reference in the field of computing science and numerical simulation.

SERVICIOS CESGA

INFRAESTRUCTURAS + SOPORTE A USUARIOS

- ✓ HPC y HTC
- ✓ User Data Storage
- ✓ Red de comunicaciones (solo en Galicia)
- ✓ Aulas de Aprendizaje remoto y VC avanzada
- ✓ GIS
- ✓ e-Learning
- ✓ e-Business

CÁLCULO INTENSIVO

SUPERORDENADORES

+

Optimización, determinación problemas, paralelización,...

ALMACENAMIENTO DE DATOS

DISCOS Y CINTAS

+

Determinación de opciones, backup,...

COMUNICACIONES

RECETGA

+

Mirror, mail, DNS, IPV6, streaming, WIFI,...

GIS

SERVIDOR MAPAS Y BBDD cartográficas

+

Análisis de soluciones, desarrollo hosting,...

TELE-ENSEÑANZA

AULAS REMOTAS, AULA CESGA

+

Análisis de soluciones, desarrollo hosting,...

COMERCIO-E

Servidor Centro Competencias

+

Análisis de soluciones innovadoras, información,...

High Performance Computing Group

- ✓ Dr. Ignacio López Cabido (Física)
- ✓ Dr. Andrés Gómez Tato (C. Físicas)
- ✓ Dr. Carlos Fernández Sánchez (Dr. C. Físicas)
- ✓ Dr. Javier López Cacheiro (C. Físicas)
- ✓ Dr. José Carlos Mouriño Gallego (Dr. Ing. Informática)
- ✓ Dr. Aurelio Rodríguez López (Dr. C. Químicas)

⇒ CESGA:

- ✓ Más de 40 técnicos
- ✓ 22 proyectos activos
- ✓ 35 proyectos finalizados en los 5 últimos años

✓ SIEMPRE en Colaboración.

Barcelona, Noviembre, 2006

NUESTRA
POLÍTICA

13 years of history

1993

VP 2400



2,5 GFLOPS

1998

VPP 300



14,1 GFLOPS

AP 3000



12 GFLOPS

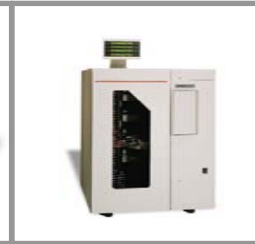
1999

HPC 4500



9,6 GFLOPS

STORAGETEK



51 TERABYTES

2001

SVG



9,9 GFLOPS

2002

HPC 320



64 GFLOPS

BEOWULF



16 GFLOPS

2003

SUPERDOME



768 GFLOPS

2004

SVG



512 GFLOPS

VP-2400 AND Superdome 2003



1993: VP-2400

2,5 GFLOPS

0,5 GB memoria

Nº 1 in Spain and Nº 145 in the World

2003: SUPERDOME

768 GFLOPS

384 GB memoria

Nº 1 in Spain and Nº 227 in the World

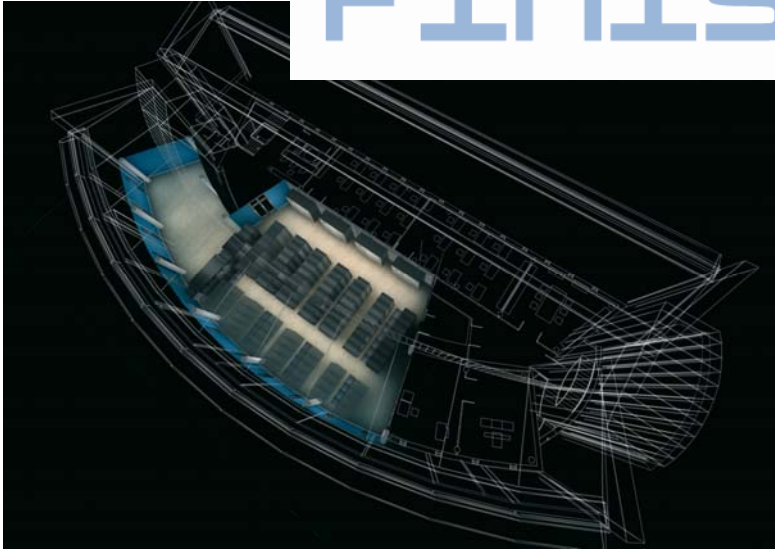


Barcelona, Noviembre, 2006



FinisTerrae 2007

FINISTERRAE



New Server HPC 2007

More than 16 TFLOPS and 19TB RAM Memory

Joint Venture of



Barcelona, Noviembre, 2006



FINISTERRAE

SUPERCOMPUTING:

146 ccNUMA Nodes with Itanium II CPUs connected through a high efficiency INFINIBAND network

- ➔ 1 node: 128 cores, 1.024 GB memory
- ➔ 1 node: 128 CPUs, 384 GB memory
- ➔ 142 nodes: 16 cores, 128 GB memory
- ➔ 2 nodes: 4 cores, 4 GB memory for testing

DATA STORAGE:

- ➔ 22 nodes with 44 cores for storage management
- ➔ 390 TB disk
- ➔ 1 PB Robot Tape Library

MORE TECHNICAL INFORMATION ON REQUEST

PROPUESTA 1: Mathematica Challenge

- ➔ 1 Reto científico computacional en Matemáticas a ejecutar en FinisTerraes.
- ➔ Fecha de ejecución: tercer-cuarto trimestre de 2007
- ➔ Condiciones:
 - ✓ Científicamente o Tecnológicamente interesante. Validado por CD.
 - ✓ Necesitado de la arquitectura del FinisTerraes
 - ✓ Un investigador del equipo en CESGA durante la preparación/ejecución.
 - ✓ Basado en software libre y gratuito o, preferiblemente, propio.
- ➔ Soporte del CESGA para la migración/programación

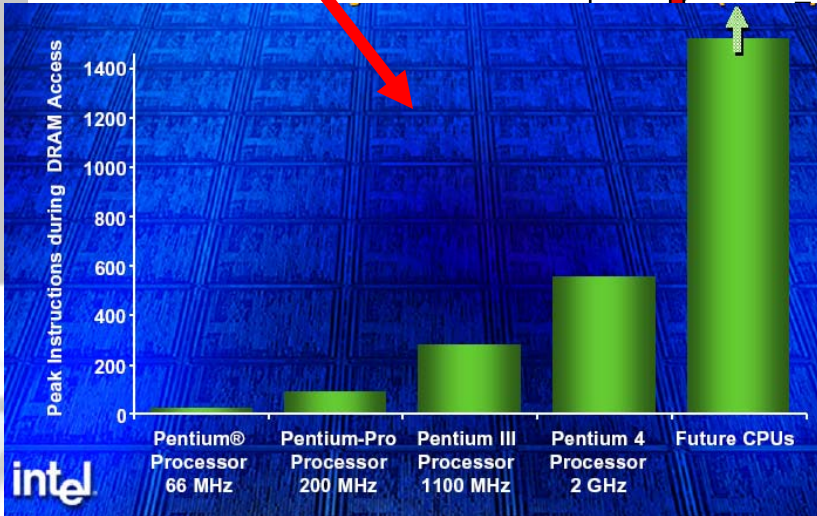
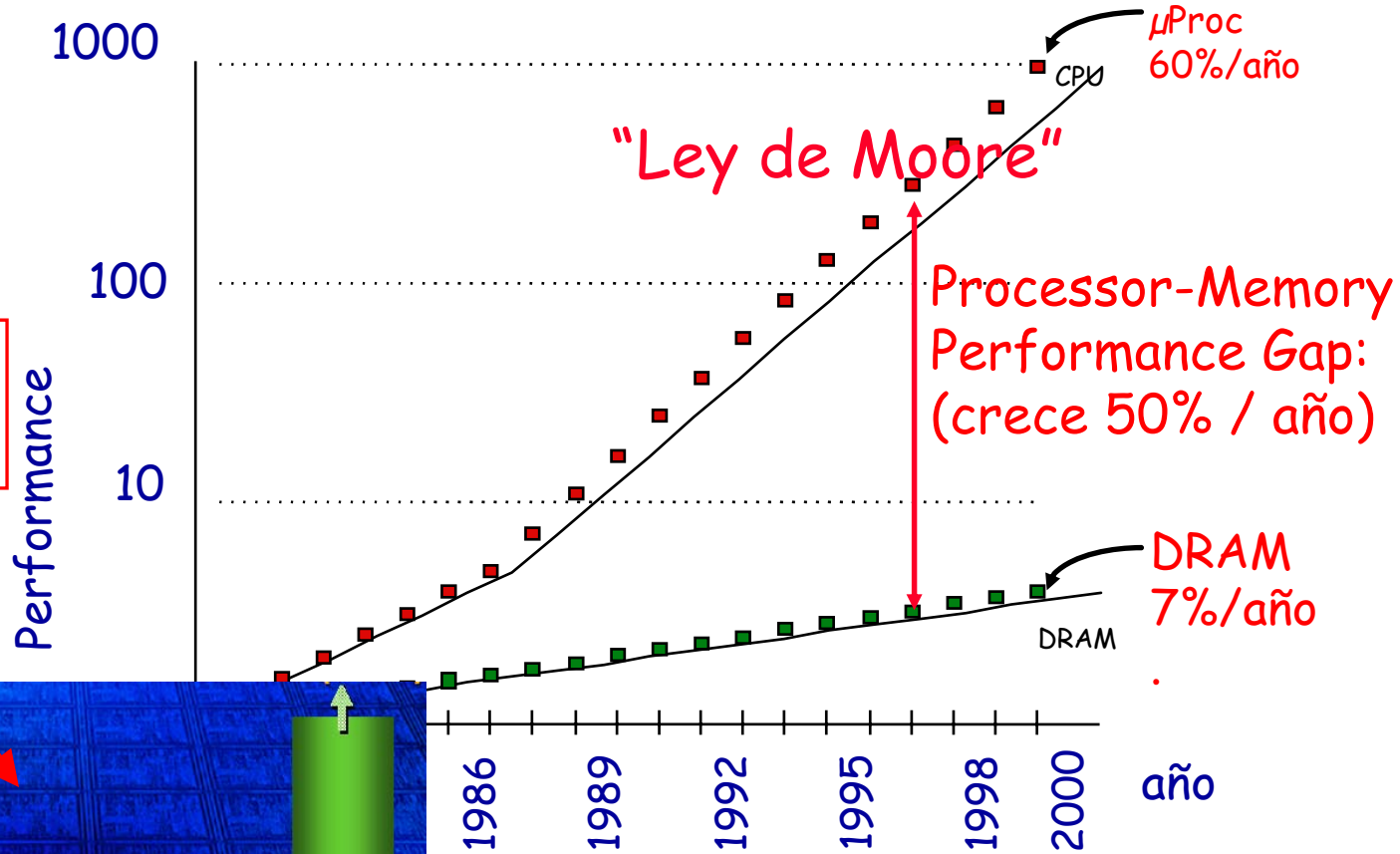
CONSOLIDER
MATHEMATICA

ALGUNOS RETOS COMPUTACION

- ➔ **Latencia memoria**
- ➔ Consumo excesivo
- ➔ Absorber nuevos paradigmas:
 - ✓ MultiThreading,
 - ✓ MultiCore
- ➔ Compiladores más eficientes (fundamentales en Itanium II)
- ➔ Algoritmos más eficientes
- ➔ Paralelización más sencilla: Time-to-Solution

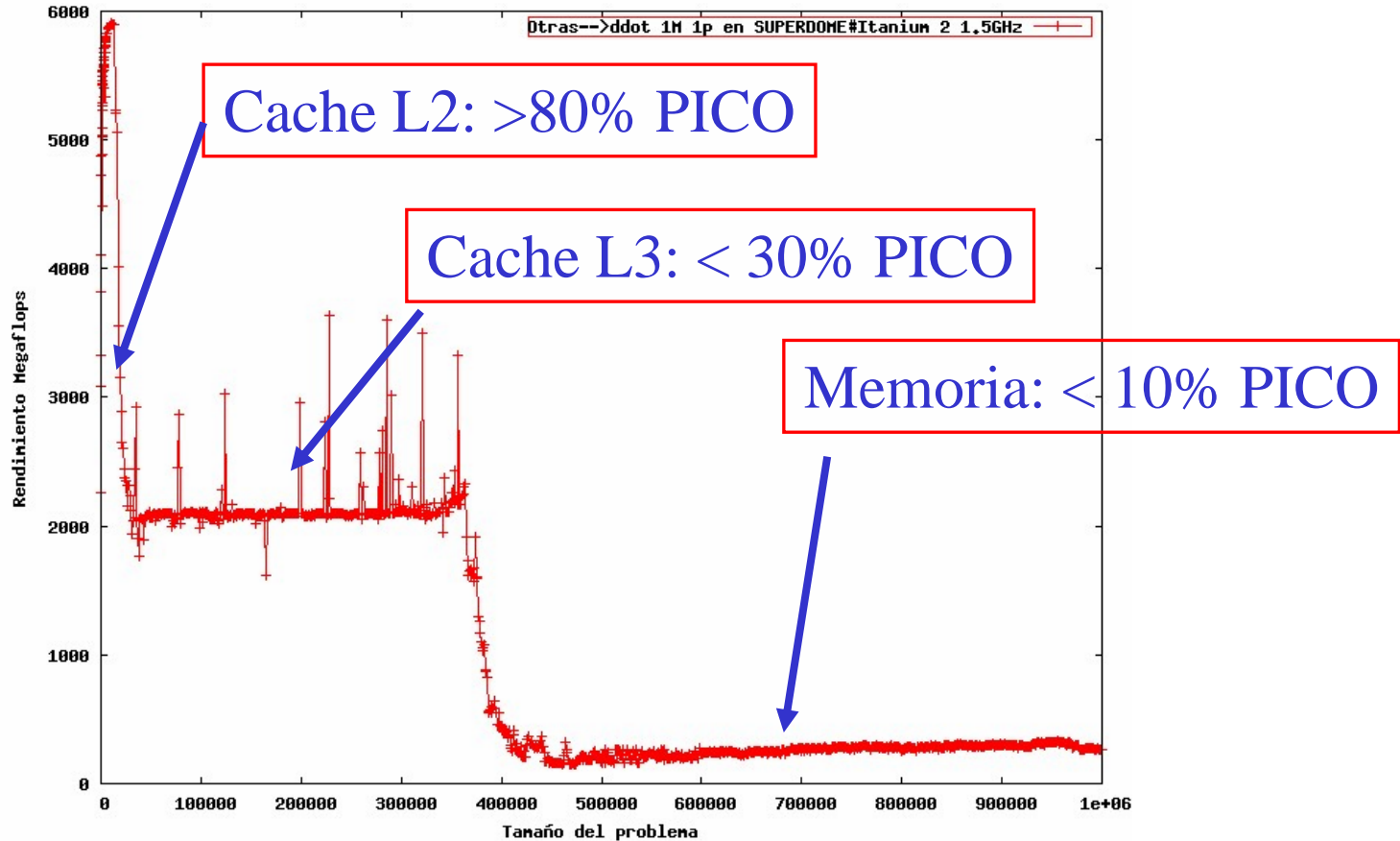
RETOS COMPUTACION: Latencia acceso memoria

Ciclos perdidos aumentan



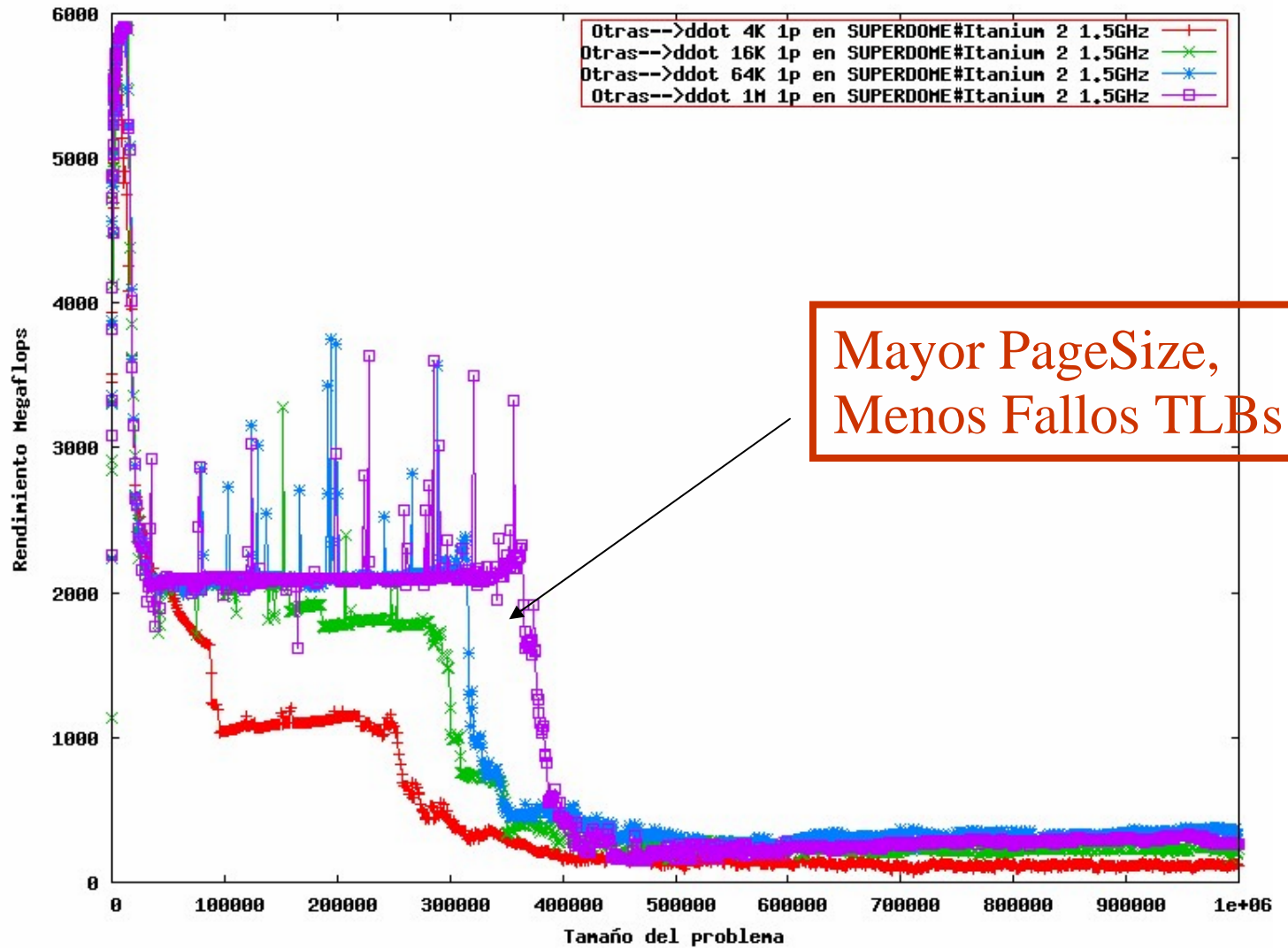
Fuente: Paco Tirado

RETOS: Latencia memoria. Consecuencia

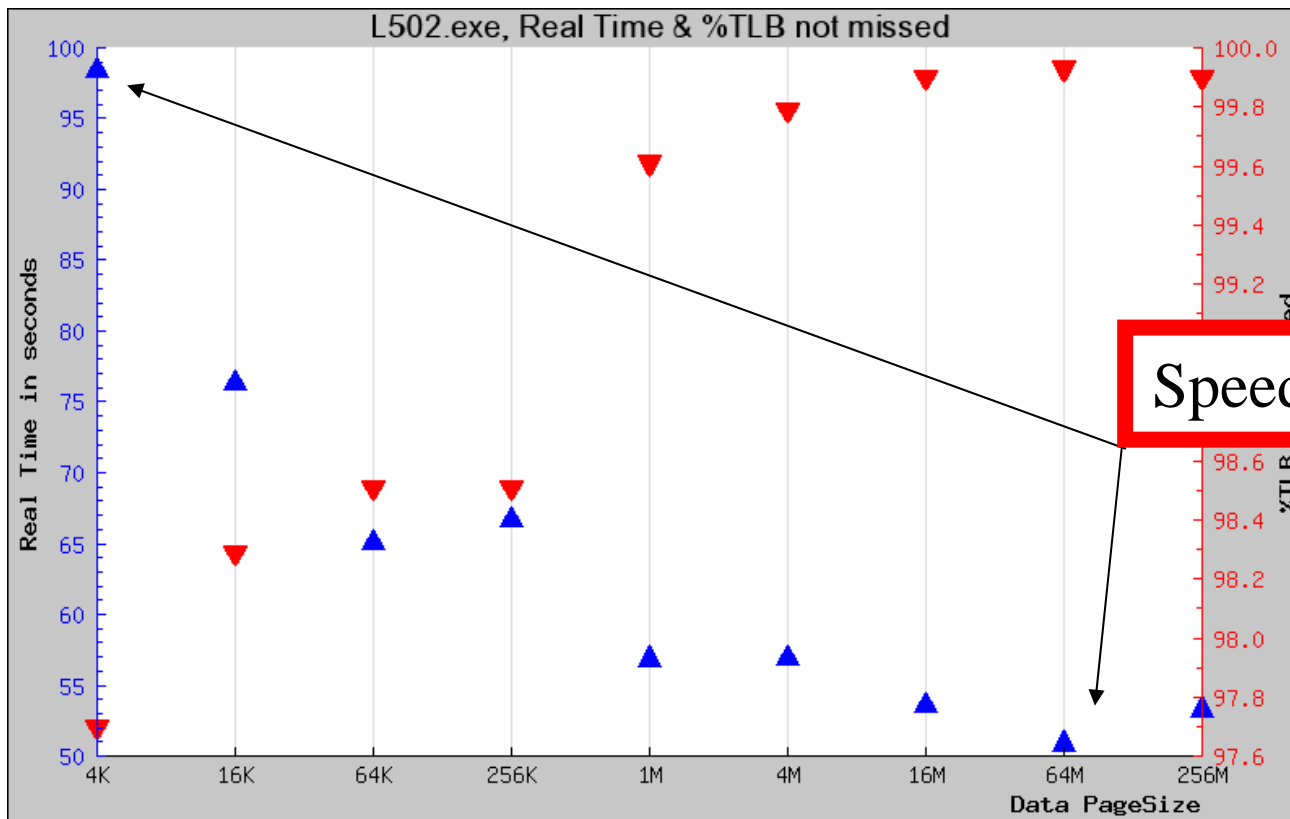


Objetivo: Reducir fallos caché. Mejorar rendimiento.

Ejecución y Rendimiento: Pagesize



RETO: Reducir Fallos TLBs. Pagesize

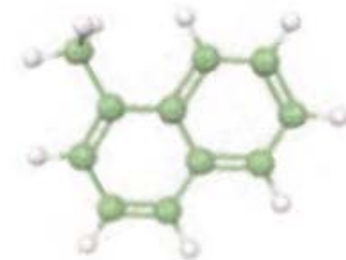


Ejemplo cálculo en Gaussian Incore 256 bases

Objetivo: Reducir fallos TLB. Ver GotoBlas:
<http://www.tacc.utexas.edu/resources/software/>

RETO: Reducir time-to-solution

- ➔ Diego González (UVIGO), Ivo Nezbeda (Acad. de Ciencias Repub. Checa), *7th Liblice Conference on the Statistical Mechanics of Liquids* (Lednice, R. Checa, 2006)
- ➔ **Problema:** estudio equilibrio líquido-vapor de sustancias de alto peso molecular comúnmente utilizadas en procesos industriales, en condiciones de temperatura muy inferiores a la de ebullición (1-metil-naftaleno)
- ➔ **Método:** Simulación Metrópolis Montecarlo en el colectivo estadístico NVT que permite la simulación explícita de interfaces líquido-vapor
 - ✓ *Calidad de los resultados proporcional al n° de moléculas y al n° de configuraciones*
 - ✓ *3000 moléculas y 109 configuraciones*
 - ✓ *Código desarrollado y compilado por el usuario*
 - ✓ *Tiempo estimado 1CPU en el HPC320 > 3 años.*
 - ✓ *Código no paralelizable y algoritmo adecuado*



RETO: time-to-solution. Resultados

➔ Técnicas:

- ✓ *Profile del código para identificar partes más costosas*
- ✓ *Extracción de subexpresiones comunes*
- ✓ *Reordenamiento de matrices*
- ✓ *Opciones del compilador*
- ✓ *Búsqueda arquitectura más óptima*

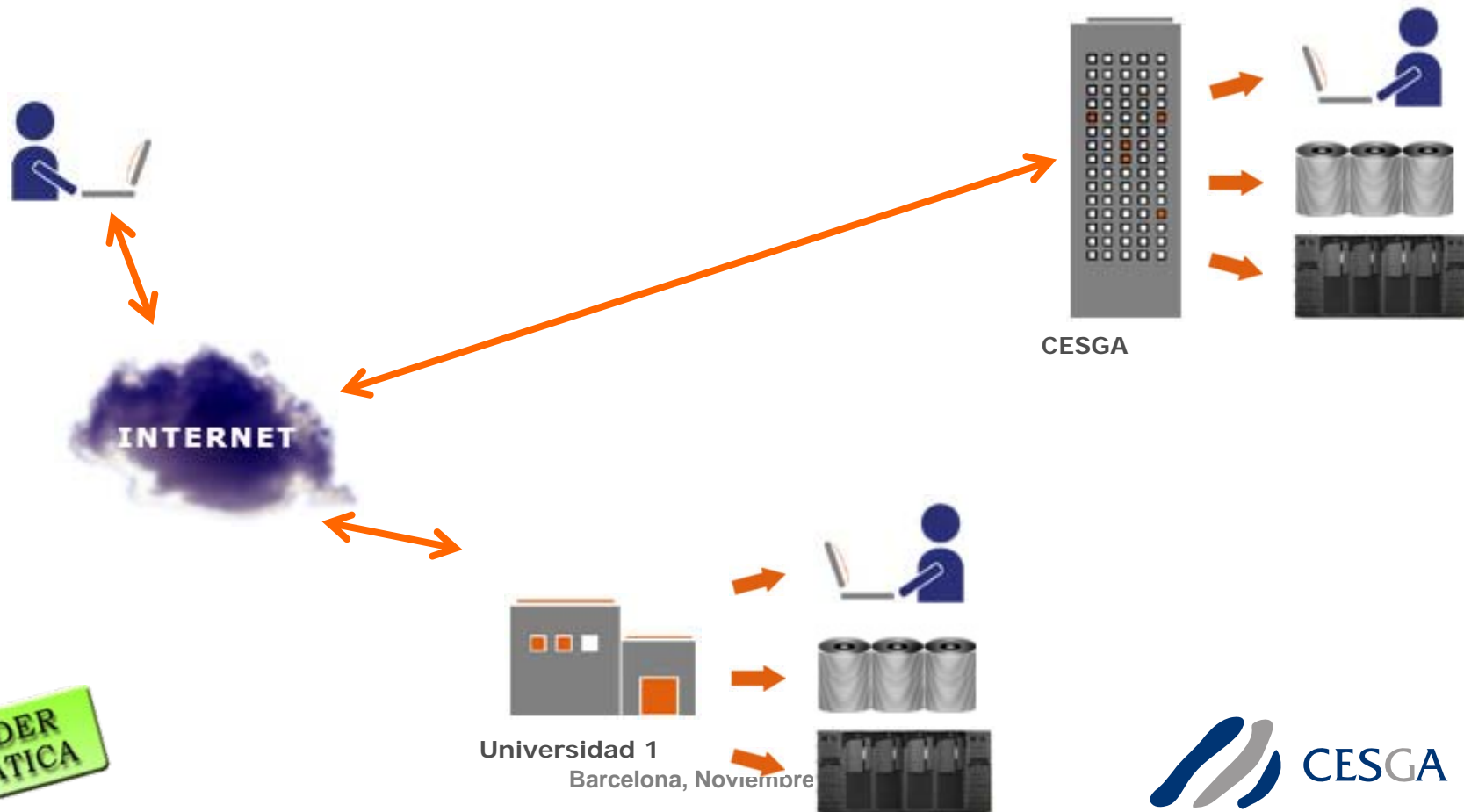
A Tiempo!

➔ Resultado

- ✓ *Procesador: Opteron*
- ✓ *Compilador: Pathscale*
- ✓ *Opciones: -Ofast -cpp -m64 -static-data*
- ✓ *Tiempo necesario \approx 2 meses*

Grid

- *Ejecución de aplicaciones y almacenamiento utilizando recursos sobrantes de cada Grupo.*
- *Heterogeneidad, problemas portabilidad ejecución. Ver: crlibm*



CONSOLIDER
MATHEMATICA

PROPUESTA 2: Formación en computación

- Sobre técnicas de computación y nuevas herramientas de cálculo. Los cursos propuestos para el año 2007 son dos a elegir entre los cuatro siguientes:
 - ✓ *Matemática Computacional: compilación, ejecución y optimización de programas. (15h, 25 alumnos)*
 - ✓ *Programación de códigos paralelos utilizando MPI. (15h, 25 alumnos)*
 - ✓ *Arquitecturas cluster para computación matemática. (20h, 10 alumnos)*
 - ✓ *Programación paralela utilizando directivas OpenMP. (15h, 25 alumnos)*
- Todos ellos cuentan con 5 horas de asesoramiento individualizado a los asistentes.

⇒ Objetivos:

- ✓ *Localizar las herramientas existentes de software libre para la matemática computacional necesarias para los grupos del proyecto, incluyendo una evaluación de la misma.*
- ✓ *Incrementar la visibilidad internacional del software de matemática computacional, generalista o especializado, desarrollado por los grupos de investigación del proyecto.*

PROPUESTA 4: Grid-MATHEMATICA

➔ Objetivos:

- ✓ *Crear una infraestructura estable que interconecte los recursos de los grupos involucrados en Mathematica.*
- ✓ *Ejecución de aplicaciones utilizando recursos sobrantes de otros grupos*
- ✓ *En el CESGA instalación de un cluster con 10 CPUs interconectados con Gigabit Ethernet como nodo dedicado y estable con dedicación total al Grid-MATHEMATICA.*

PROPUESTA 5: Soporte técnico

⇒ Objetivos:

- ✓ *CESGA puede prestar servicios de soporte de alto nivel a técnicos e investigadores para mantener operativos correctamente los recursos computacionales existentes en cada centro.*
- ✓ *Optimización aplicaciones desarrolladas por los grupos.*



The **IMRT** project: a web-based tool for Monte Carlo optimization and verification of treatment plans

J. Pena¹, F. Gómez¹, D. González-Castaño¹, A. Gómez²,
C. Fernández², J. C. Mouriño², F. J. González-Castaño³,
D. A. Rodríguez-Silva³, M. Pombar⁴

¹Departamento de Física de Partículas, University of Santiago de Compostela, **Spain**

²Fundación Centro Tecnológico de Supercomputación de Galicia (CESGA), Santiago de Compostela, **Spain**

³Departamento de Ingeniería Telemática, University of Vigo, **Spain**

⁴Hospital Clínico Universitario de Santiago, Santiago de Compostela, **Spain**

Financed through Xunta de Galicia project PGIDT05SIN00101CT and partially by
the *European Social Fund*

What is the IMRT project?

It is a project to develop a remote computational platform for treatment

VERIFICATION and OPTIMIZATION

Hospital



Internet



What is **NOT** ?? Commercial // TPS substitute

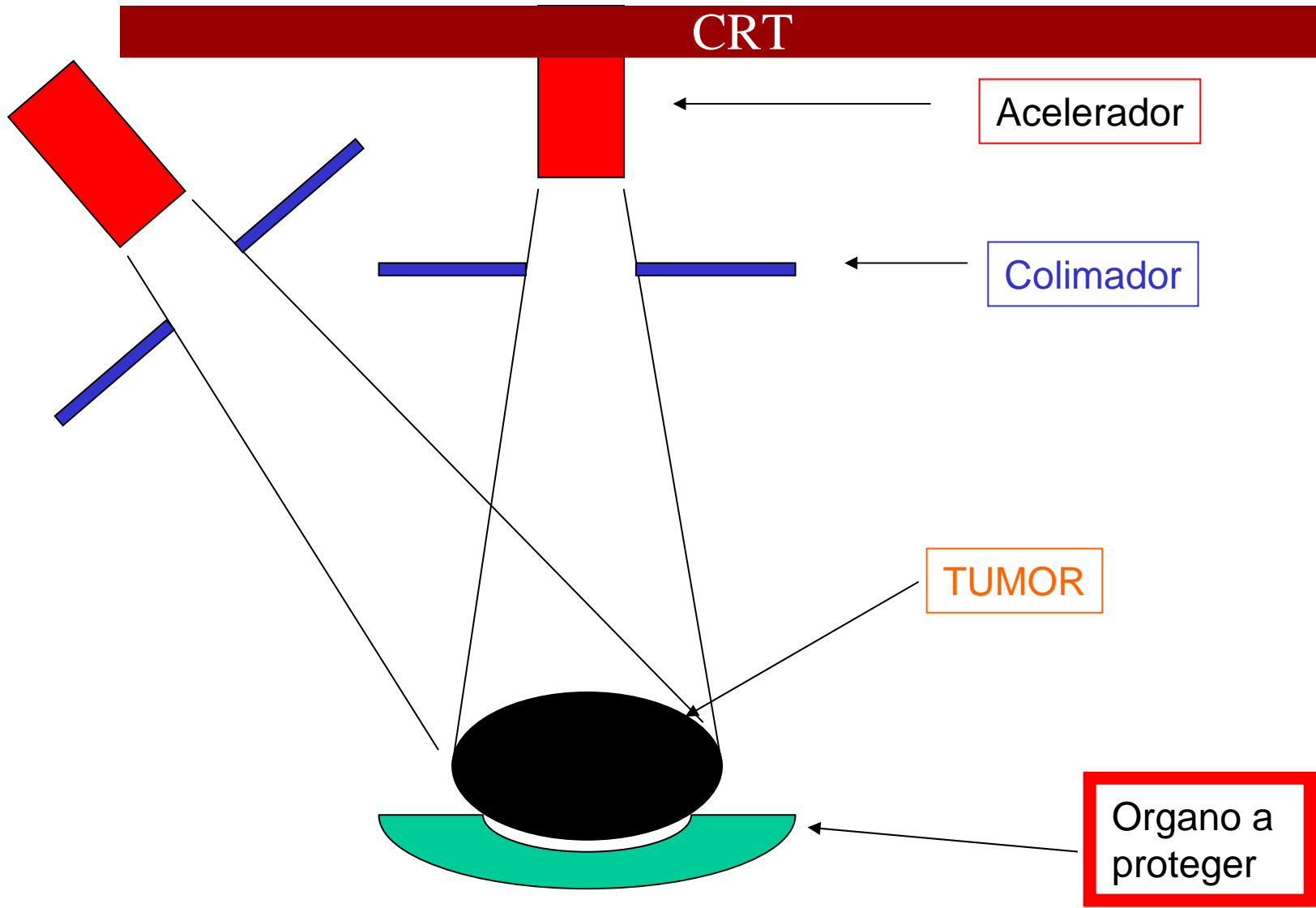
⇒ Three major components (services):

- ✓ Treatment VERIFICATION (Monte Carlo)
- ✓ Treatment OPTIMIZATION (CRT & IMRT)
- ✓ Treatment RESERVOIR: case studies and interesting treatments

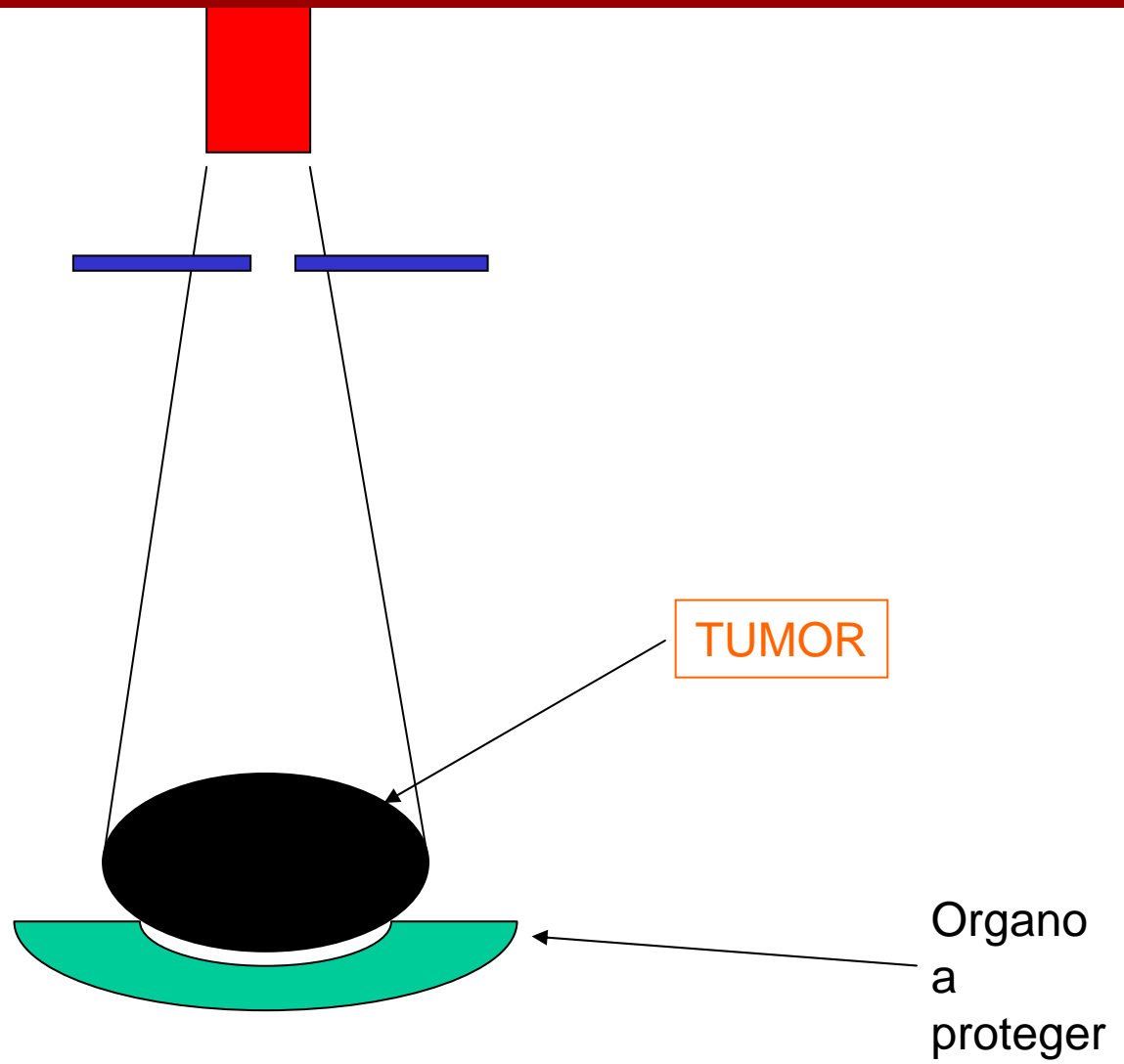
Under development!

⇒ General requirements

- ✓ Simple, user friendly and algorithm-independent
- ✓ Lowest possible human intervention
- ✓ Run on low-end hardware & software (client side)
- ✓ Anonimization of patient DICOM files



IMRT



- ➔ **Unconstrained optimization model derived from Wu & Mohan Med. Phys 27-4 2000**
- ➔ **Quasi-Newton minimization.**
- ➔ **Alternating Quasi-Newton stages with heuristics to vary the weights of the constraints → Getting multiple solutions.**
- ➔ **New optimization models welcome!**

Under development !

➔ Problema:

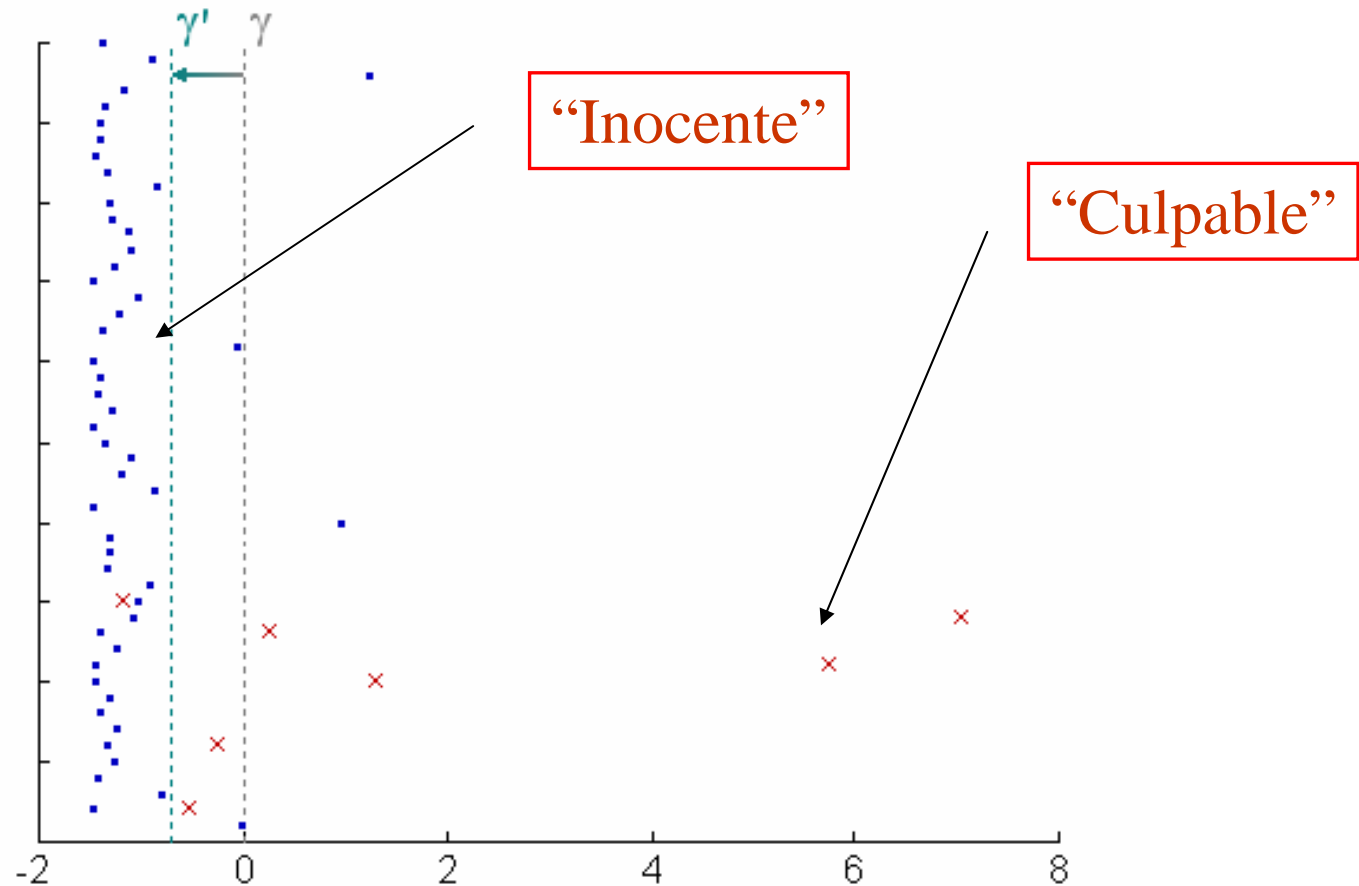
- ✓ *Tráfico P2P es perjudicial para las redes de investigación. Es necesario detectarlo y, en su caso, eliminarlo.*
- ✓ *No es posible capturar y procesar todo el tráfico a 2.5Gbp/s*

➔ Objetivos:

- ✓ *Solución independiente de la tecnología*
- ✓ *Transparente al usuario (no agresivo)*
- ✓ *Evitar falsos positivos*

F.J. González-Castaño et.al., CIMSA 2006, pag. 103

Supported Vector Machines Detection of P2P traffic (II)



F.J. González-Castaño et.al., CIMSA 2006, pag. 103

FIN

CONSOLIDER
MATHEMATICA

Barcelona, Noviembre, 2006

