Servicios del CESGA a la Comunidad Científica del CSIC

II Encuentro en Computación de Alto Rendimiento en Simulaciones Moleculares

Aurelio Rodríguez,

Técnico Superior de aplicaciones

aurelio@cesga.es

CSIC Madrid, SPAIN, June 2008

CESGA

XUNTA DE GALICIA

CONSEJO SUPERIOR DE INVESTIGACIONES CIENTÍFICAS

ERDF European Regional Development Fund

ÍNDICE

- CESGA
  - Plataformas de cálculo científico
- DEP. APLICACIONES Y PROYECTOS
  - Aplicaciones y herramientas en FT
  - Pruebas de rendimientos
  - Soporte y nuevas aplicaciones

ESTABLISHED IN 1993 IN SANTIAGO DE COMPOSTELA

CESGA

CESGA

CSIC Madrid, SPAIN, June 2008

CESGA

XUNTA DE GALICIA

CONSEJO SUPERIOR DE INVESTIGACIONES CIENTÍFICAS

ERDF
European Regional Development Fund

COMUNIDAD DE USUARIOS DEL CESGA

- Universidades gallegas
- Centros de Investigación de la Xunta de Galicia
- Centros del CSIC
- Otras instituciones públicas y privadas de I+D

EVOLUCIÓN TECNOLÓGICA DEL CESGA

1993
VP 2400

2.5 GFLOPS

1998
VPP 300

14.1 GFLOPS

AP 3000

12 GFLOPS

1999
HPC 4500

9.6 GFLOPS

2001
SVG

9.9 GFLOPS

2002
HPC 320

64 GFLOPS

BEOWULF

16 GFLOPS

2003
SUPERDOME

768 GFLOPS

2004, 2005, 2006
SVG

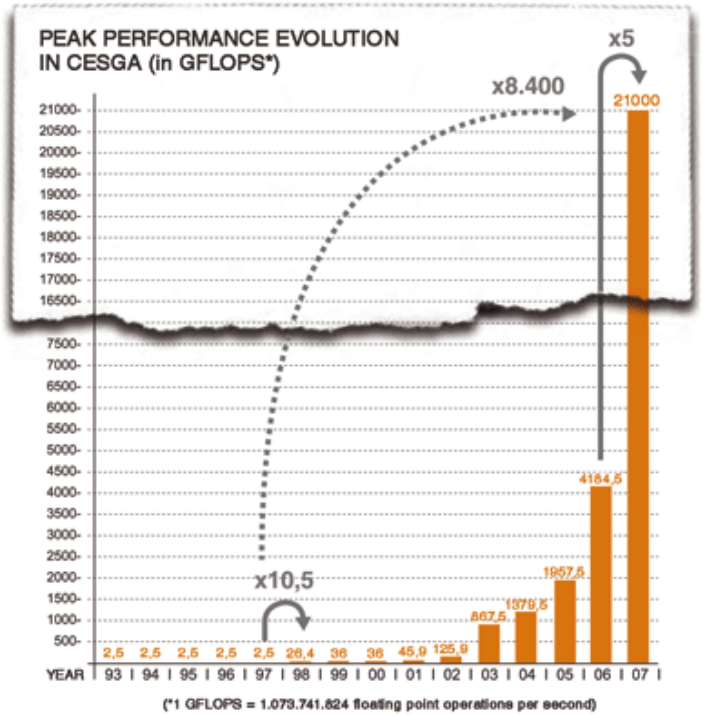
3,142 GFLOPS

2007
FINISTERRAE

16,000 GFLOPS

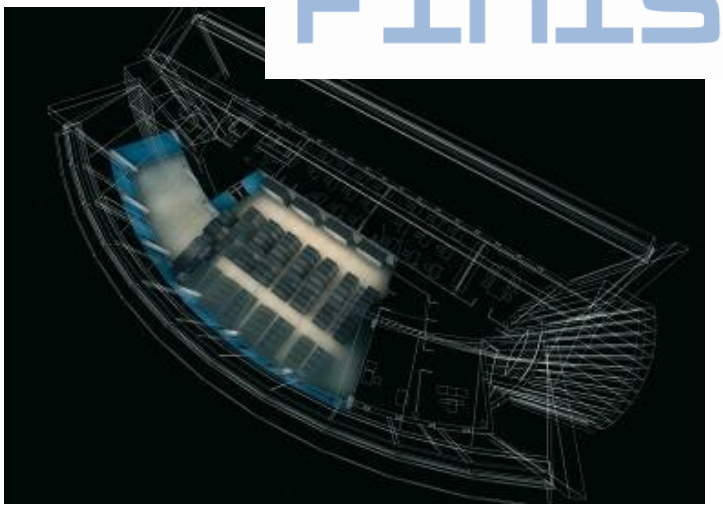
Installation Year	1993	1998	1999	2001	2002	2003	2004	2005	2006	2007
Capacity				SVG			SVG	SVG	SVG	
Capability	VP2400	VPP300E AP3000	HPC4500		HPC320	SUPERDOME				FINIS TERRAE

Evolución en rendimiento



FINIS TERRAE

FINISTERRAE



New Server HPC (December 2007)

on production (April 2008)

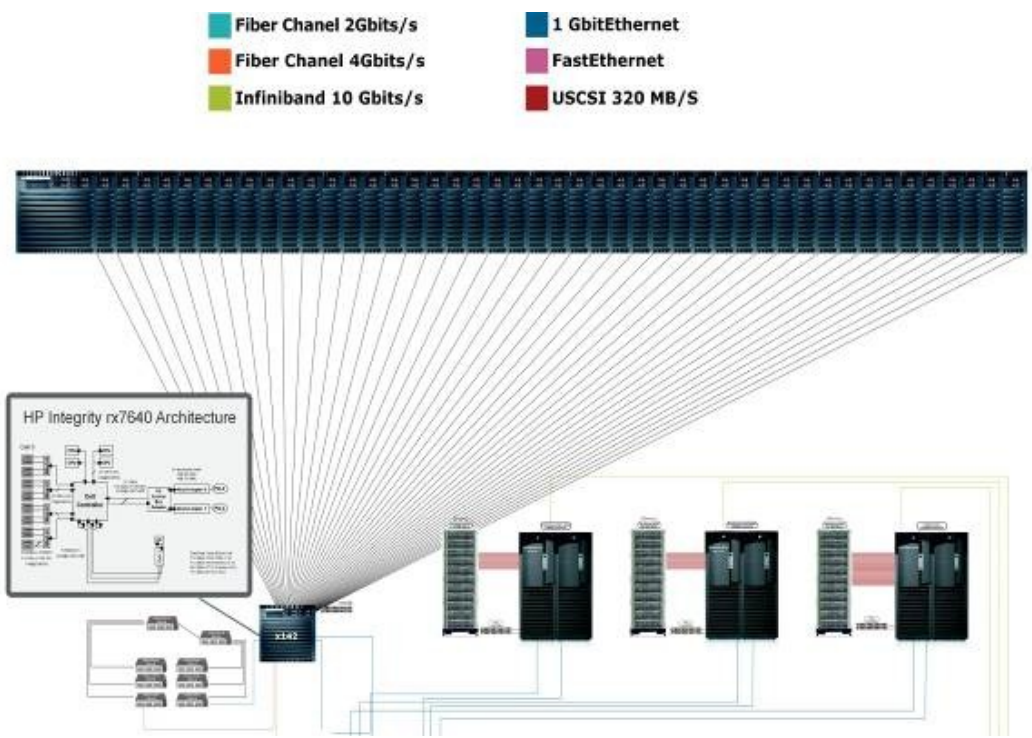
More than **16 TFLOPS** and **19TB RAM** Memory

Plus Agreement among

intel hp invent CESGA

CESGA XUNTA DE GALICIA CSIC CONSEJO SUPERIOR DE INVESTIGACIONES CIENTÍFICAS ERDF European Regional Development Fund

FINIS TERRAE – COMPUTING NODES

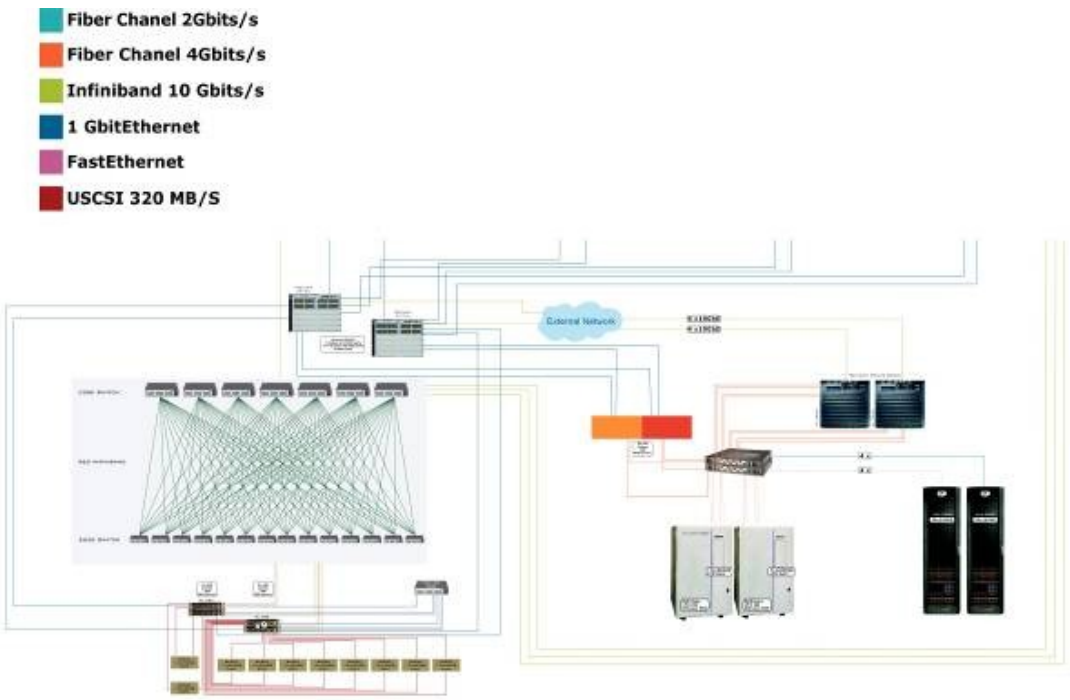


SUPERCOMPUTING NODES:

145 cc-NUMA Nodes with Itanium CPUs connected through a high efficiency INFINIBAND network

- **1 node: 128 cores, 1.024 GB memory**
- **2 nodes: 64+64 CPUs, 256+128 GB memory**
- **142 nodes: 16 cores, 128 GB memory**

FINIS TERRAE – Recursos de almacenamiento



DATA STORAGE:

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

```
aurelio@fs001:~> df -H /sfs
S.ficheros              Tamaño  Usado   Disp Uso% Montado en
84.21.168.199:/sfs        156T   5.8T   142T   4% /sfs
```

OTRAS INFRAESTRUCTURAS

SVG	
Architecture	PC Farm (Self Made), Beowulf Cluster
Number of Processors	Over 96 processors
Type of Processor	Intel Pentium III 1GHz up to P4 3,2 GHz
Peak Performance	528 GFLOPS (nodo CESGA)
Interconnect	Myrinet and Gigabit Ethernet
Memory	1GB - 2GB per node
Disc	9 up to 160 GB per node (over 12TB global)
OS	Linux
Year Installed	2000 (first stage)

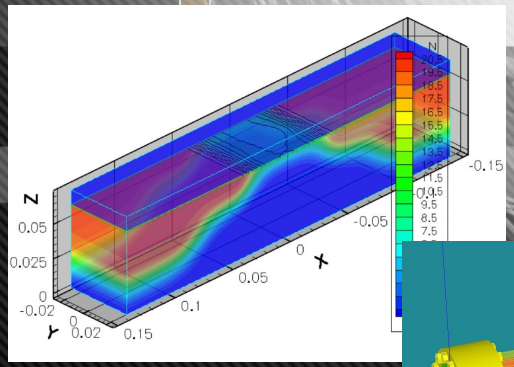
GRID	
Architecture	Blades Dell PowerEdge 1955
Number of Processors	40
Type of Processor	Intel quad-core: 36 Intel Xeon 5130 1.6GHz 4 Intel Xeon 5355 2.66GHz
Peak Performance	2183 GFLOPS
Interconnect	Gigabit Ethernet
Memory	4GB (nodos Xeon 5130) 8GB (nodos Xeon 5355)
Disc	SAS 73.4GB (nodos 5130) 2x SAS 73.4GB (nodos 5355)
OS	Linux
Year Installed	2007

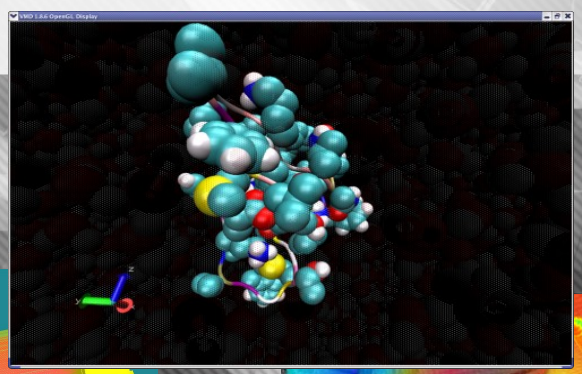
EGEE Infraestructura:

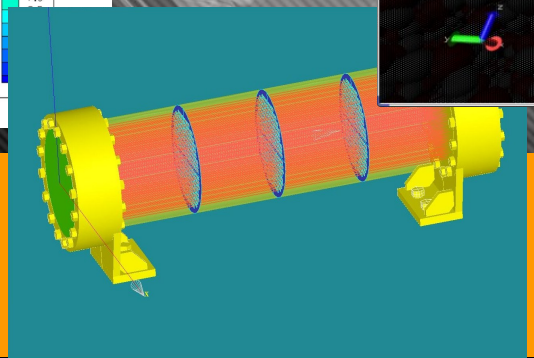
- **> 240 sitios en más de 50 países**
- **> 40.000 CPUs**
- **> 15 PB almacenamiento de media**
- **> 20.000 trabajos concurrentes por día**
- **> 120.000 trabajos por día**
- **> 6.000 usuarios en más de 100 VOs**

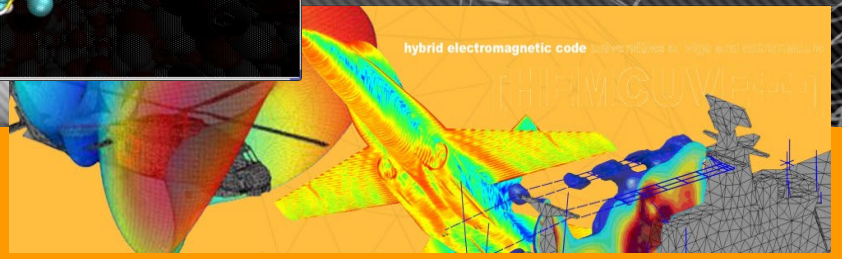
DPTO. APLICACIONES Y PROYECTOS

TERRAE









DPTO. APLICACIONES Y PROYECTOS

- 3 + 1 TÉCNICOS DE SOPORTE APLICACIONES
  - Dr. en Física
  - Dr. en Química Computacional
  - Dr. en Ingeniería Informática
  - Licenciada en Matemáticas (Aplicadas, i-MATH)
- TÉCNICO DE INNOVACIÓN
- CONTRATADOS DE PROYECTOS

DPTO. APLICACIONES Y PROYECTOS (i)

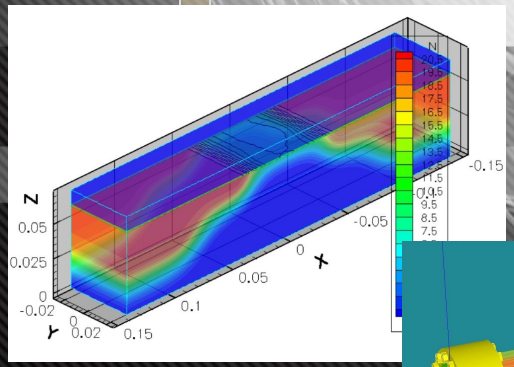
- INSTALACIÓN Y COMPILACIÓN DE APLICACIONES DE CÁLCULO
- SOPORTE TÉCNICO APLICACIONES Y PROGRAMACIÓN CIENTÍFICA
  - Paralelización
  - Librerías
  - Herramientas y lenguajes
  - Rendimiento
- DESARROLLO DE PEQUEÑAS APLICACIONES DE CÁLCULO

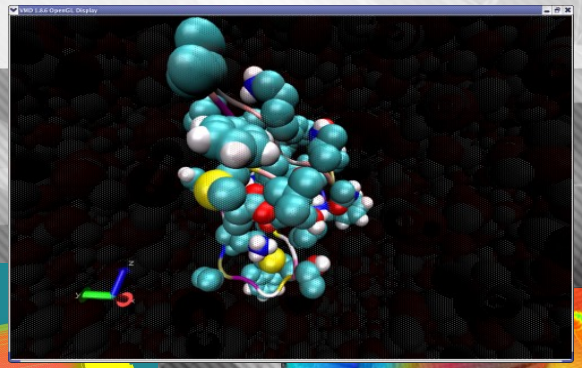
DPTO. APLICACIONES Y PROYECTOS (ii)

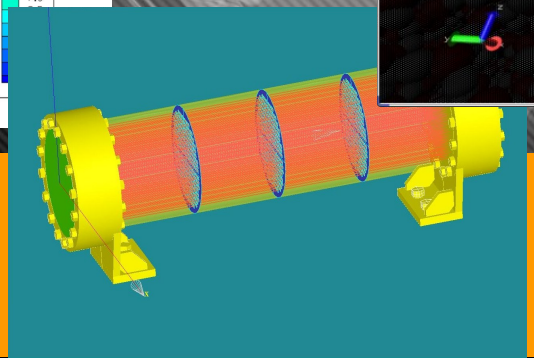
- REALIZACIÓN DE PROYECTOS DE I+D+i
  - Europeos (SMARTLM, EGEE, BEINGRID, ETC)
  - Nacionales (i-MATH, RETELAB, IFEC)
  - Regionales (g-Fluxo, ISEC, e-IMRT, etc).
  - Siempre en colaboración
  - Orientación de investigación aplicada

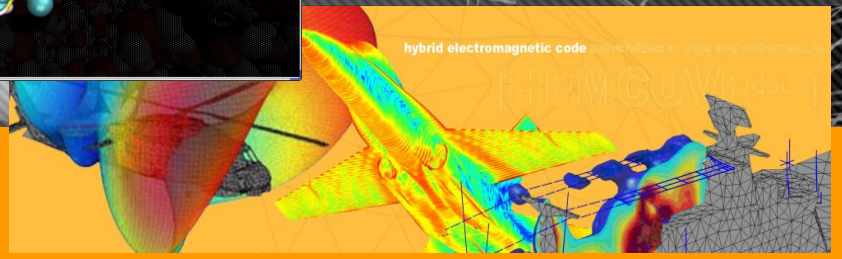
APLICACIONES EN FINIS TERRAE

FINIS TERRAE









APLICACIONES INSTALADAS ABRIL 2008

Cálculo Estructural, Fluídos y Magnetismo	Elmer

Elmer

Cálculo Molecular

Amber

Amber	X
Gaussian 03	X
SIESTA	X
Gromacs	X
LAMMPS	X
NAMD	X

Gaussian 03

siesta

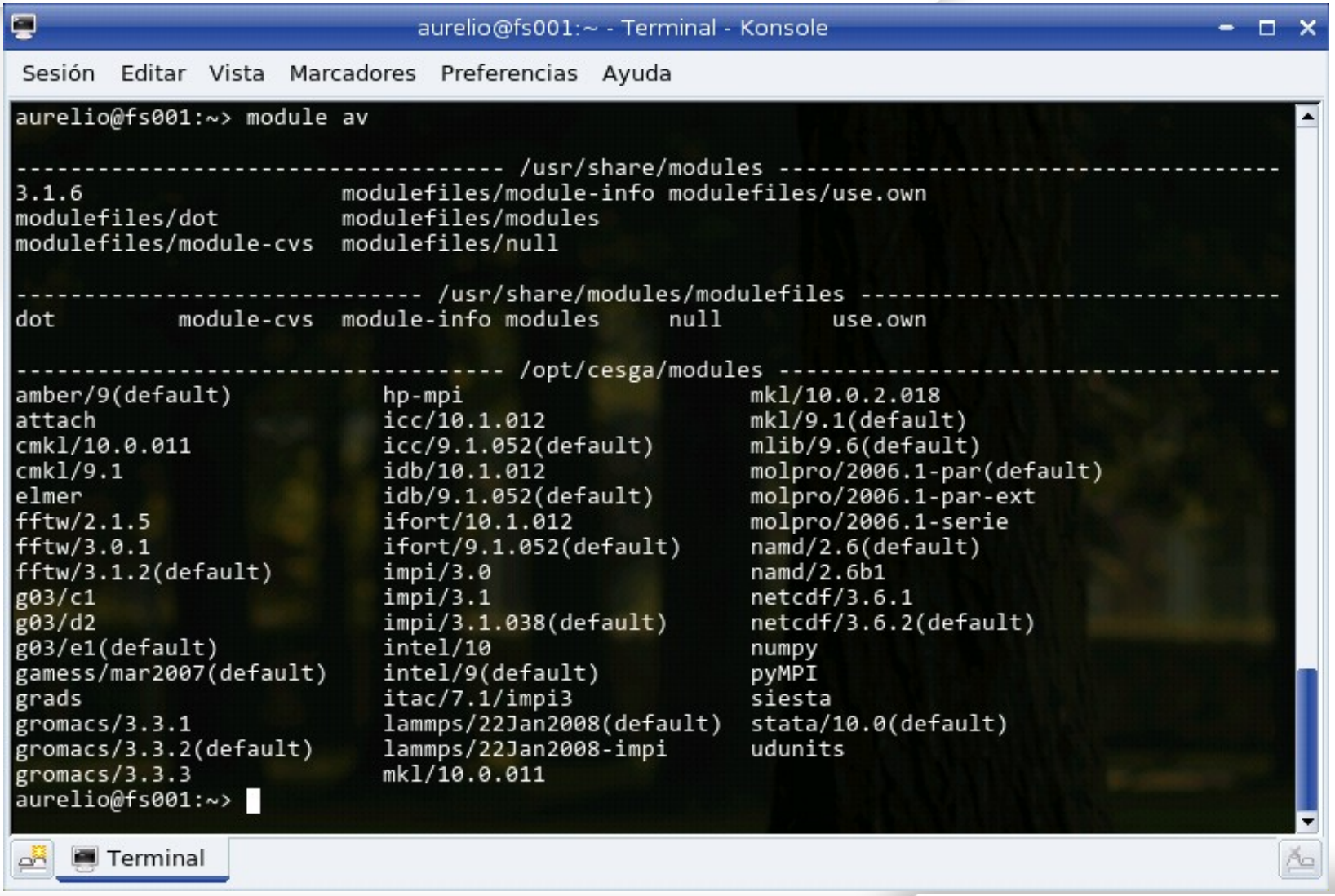
LAMMPS Molecular Dynamics Simulator

NAMD Scalable Molecular Dynamics

VER LISTA ACTUALIZADA EN

WWW.CESGA.ES O EN MODULES

APLICACIONES INSTALADAS ABRIL 2008



APLICACIONES CSIC EN EL FINIS TERRAE

INSTALADAS:

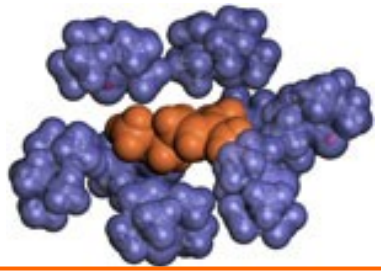
Molpro quantum chemistry package

STATA

PRÓXIMAMENTE:

Introducing a computing revolution...
Wolfram Mathematica 6

Materials Studio



PODEMOS INSTALAR APLICACIONES CON LICENCIA CSIC

CESGA
XUNTA DE GALICIA
CSIC CONSEJO SUPERIOR DE INVESTIGACIONES CIENTÍFICAS
ERDF European Regional Development Fund

HERRAMIENTAS DE DESARROLLO

HERRAMIENTAS

Intel C++ Compiler	X
Intel Fortran Compiler	X
Modules	X

LIBRERÍAS

MKL	X

HP's Mathematical Software Library (MLIB)
Developer & Solution Partner Program (DSPP)

MPI	HP MPI	X
	Intel MPI Library	X

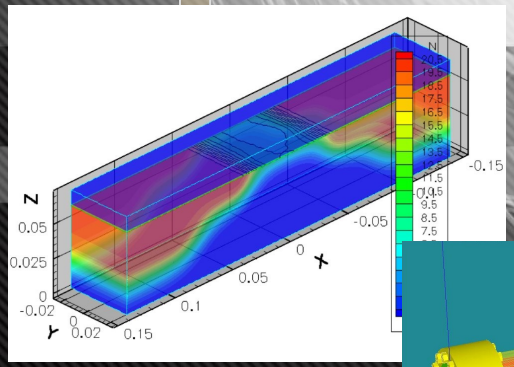
HP Message Passing Interface library (HP-MPI)
Developer & Solution Partner Program (DSPP)

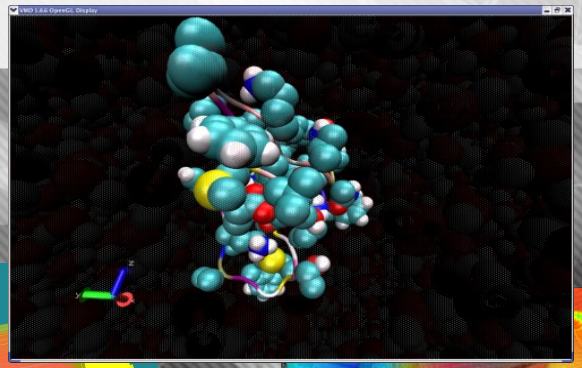
PRÓXIMAMENTE:

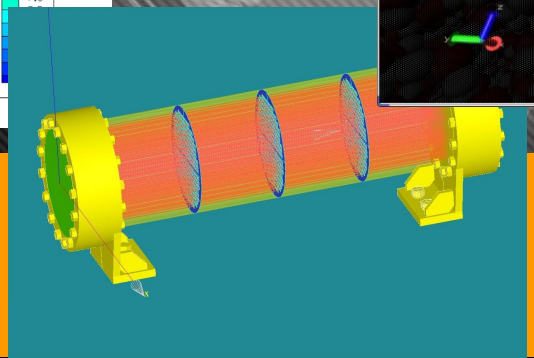
HP Caliper

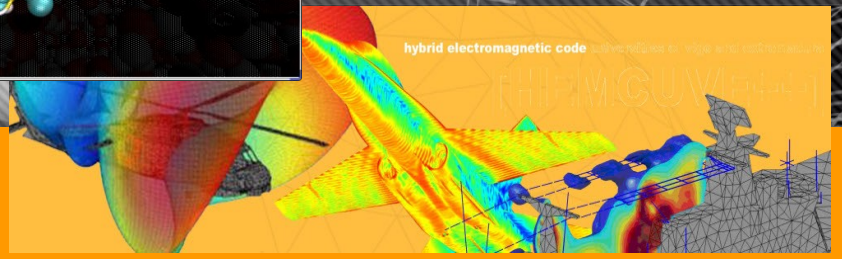
PRUEBAS Y RENDIMIENTO

TERRAE

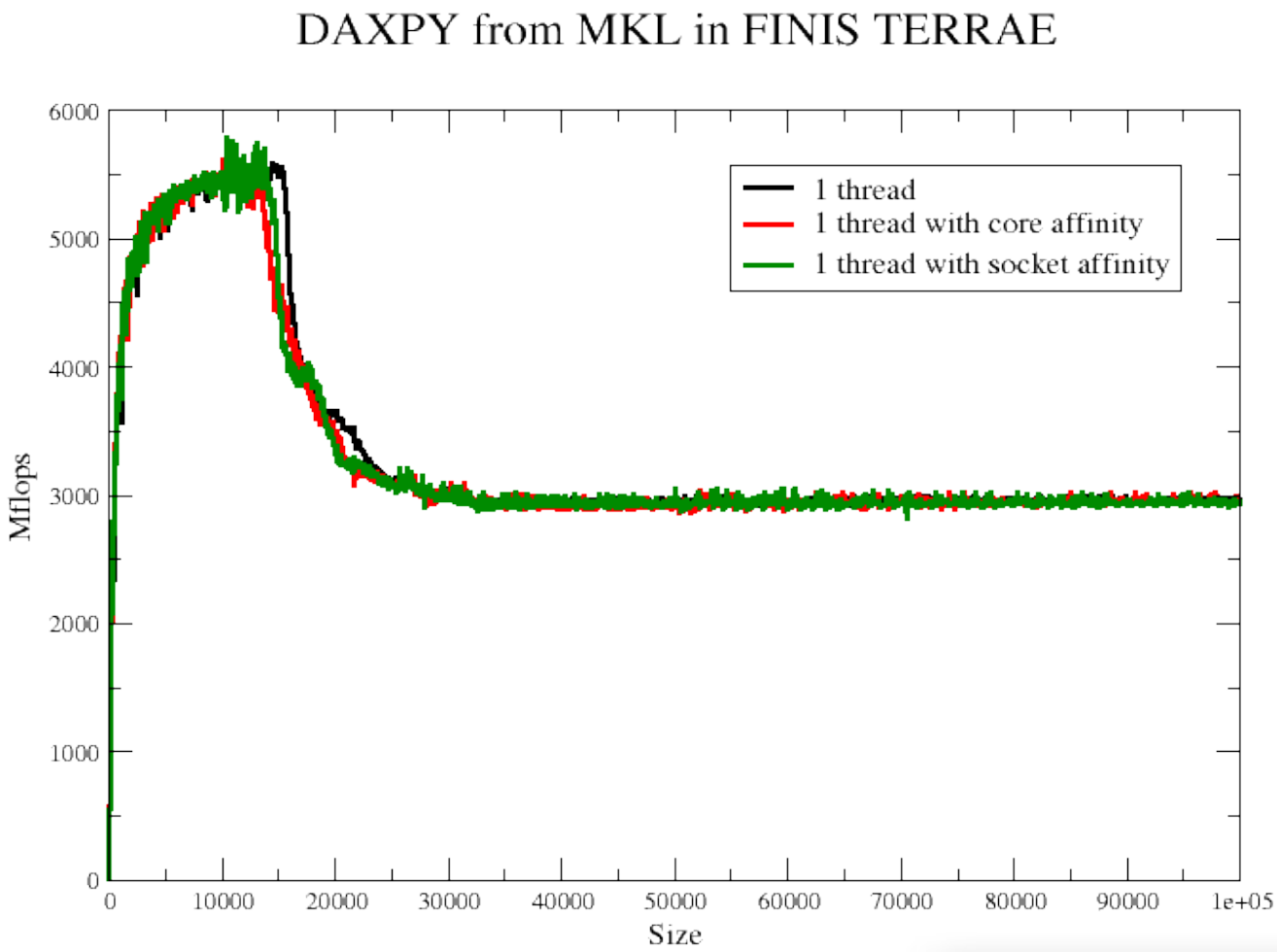




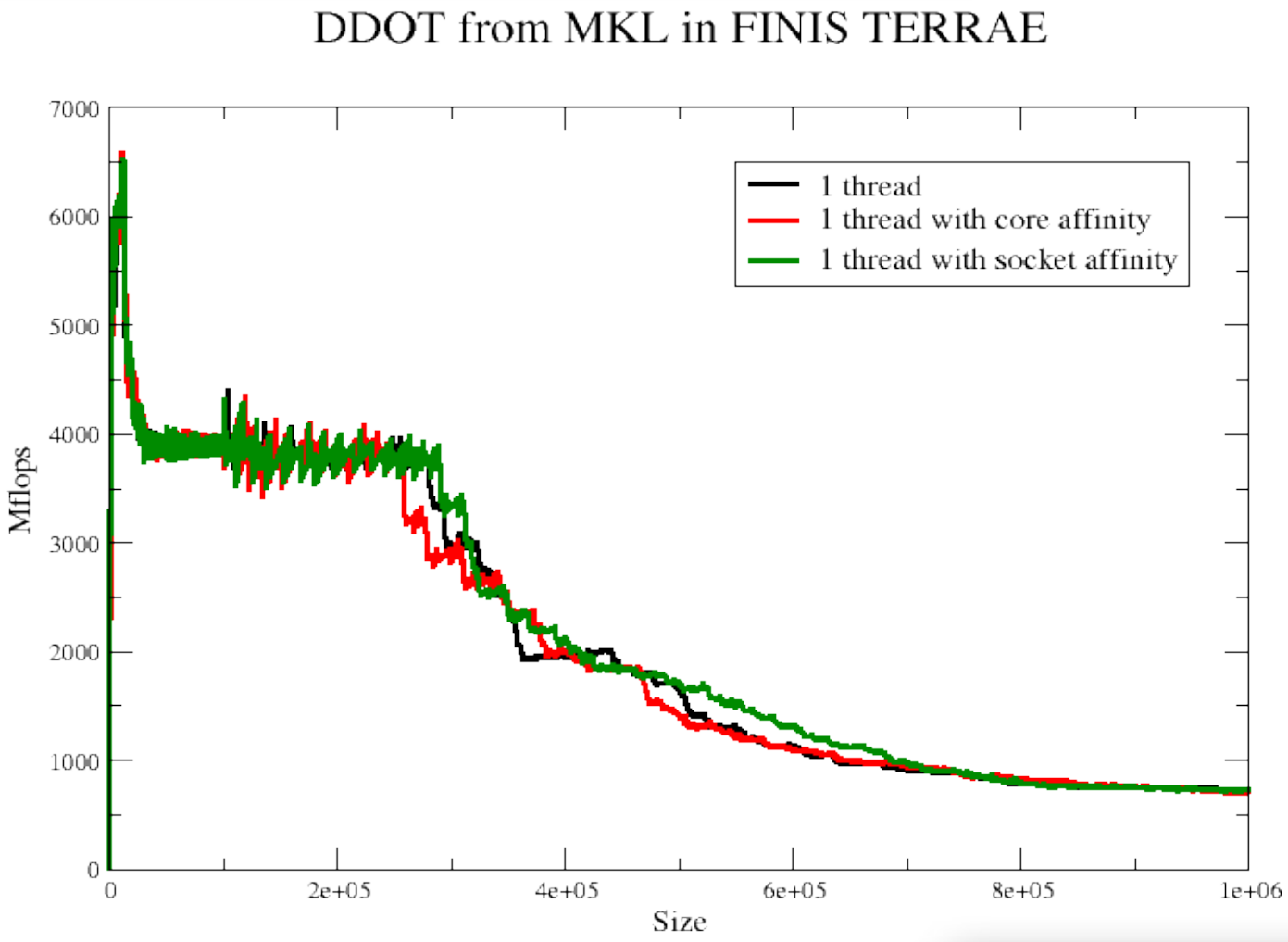




FINIS TERRAE – MKL Performance

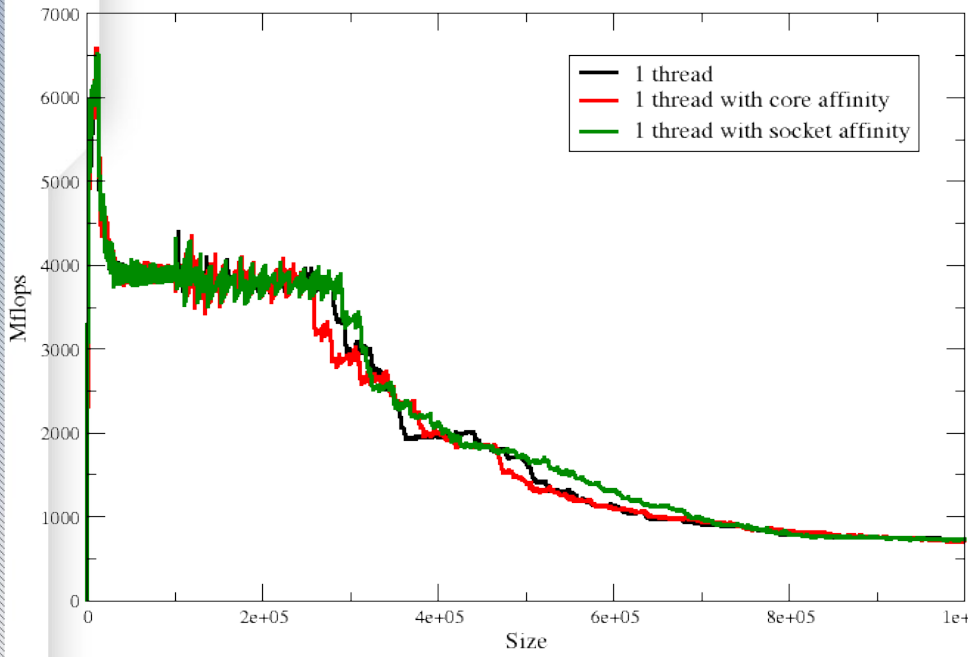


FINIS TERRAE – MKL Performance

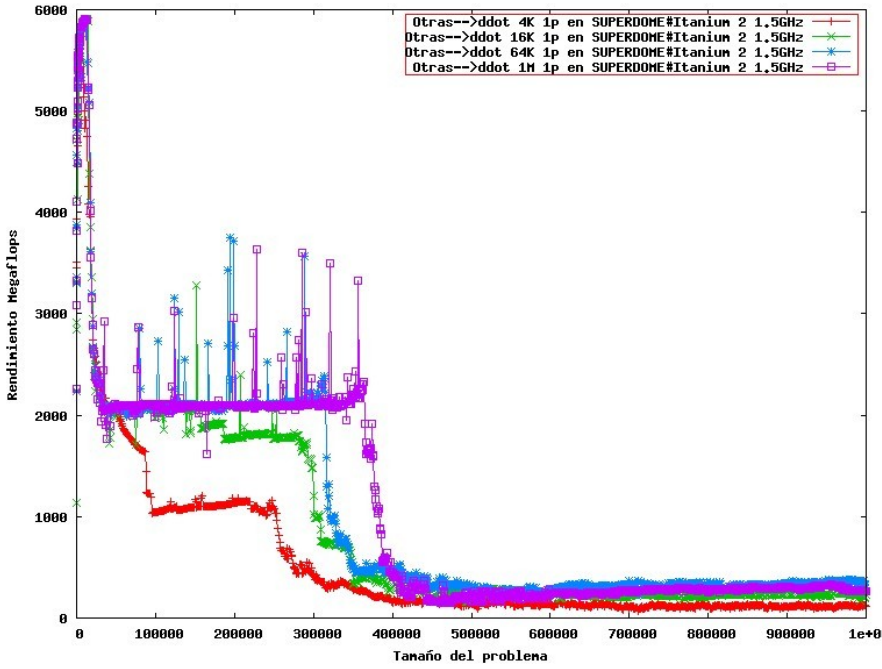


FINIS TERRAE – SUPERDOME

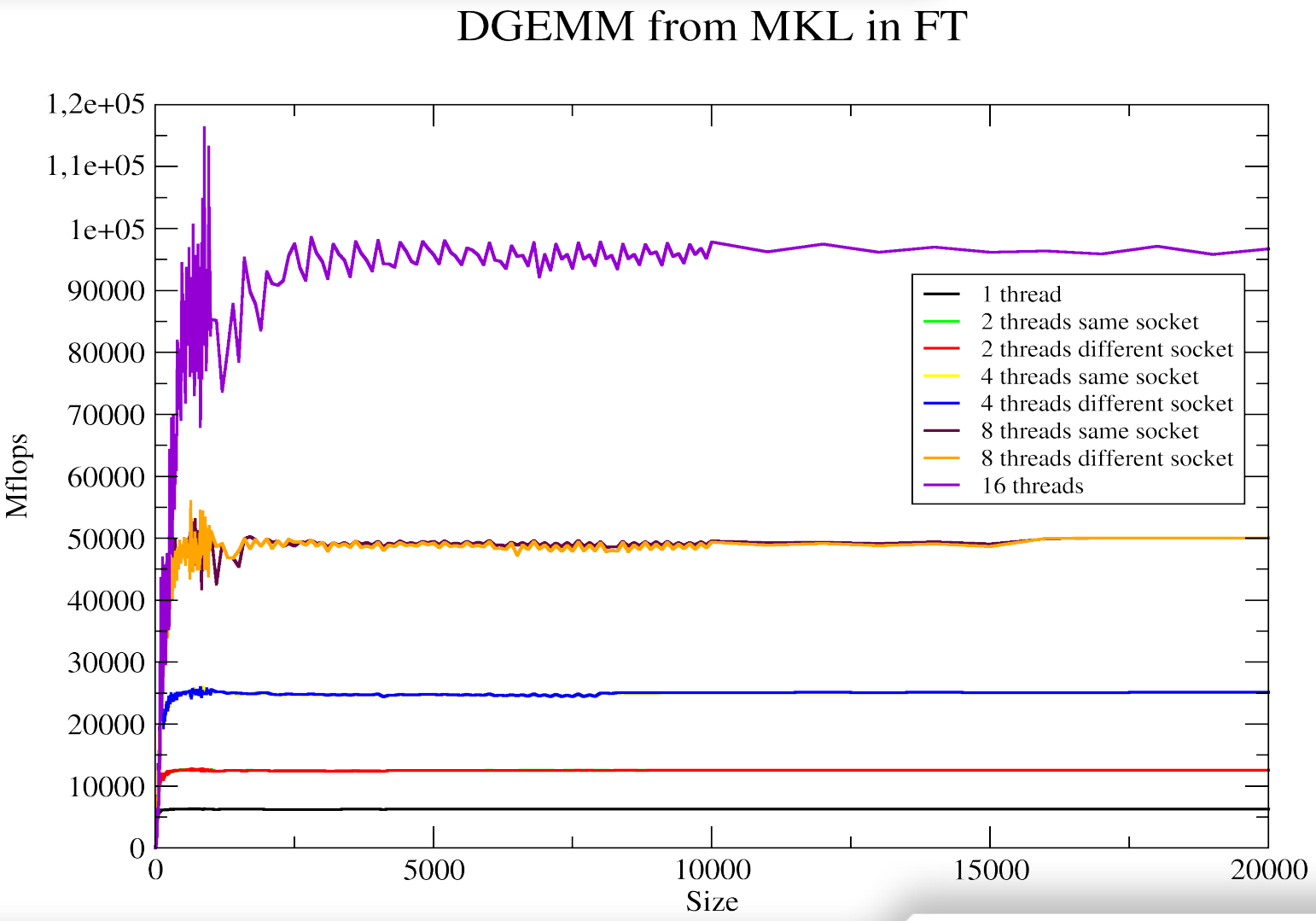
DDOT from MKL in FINIS TERRAE



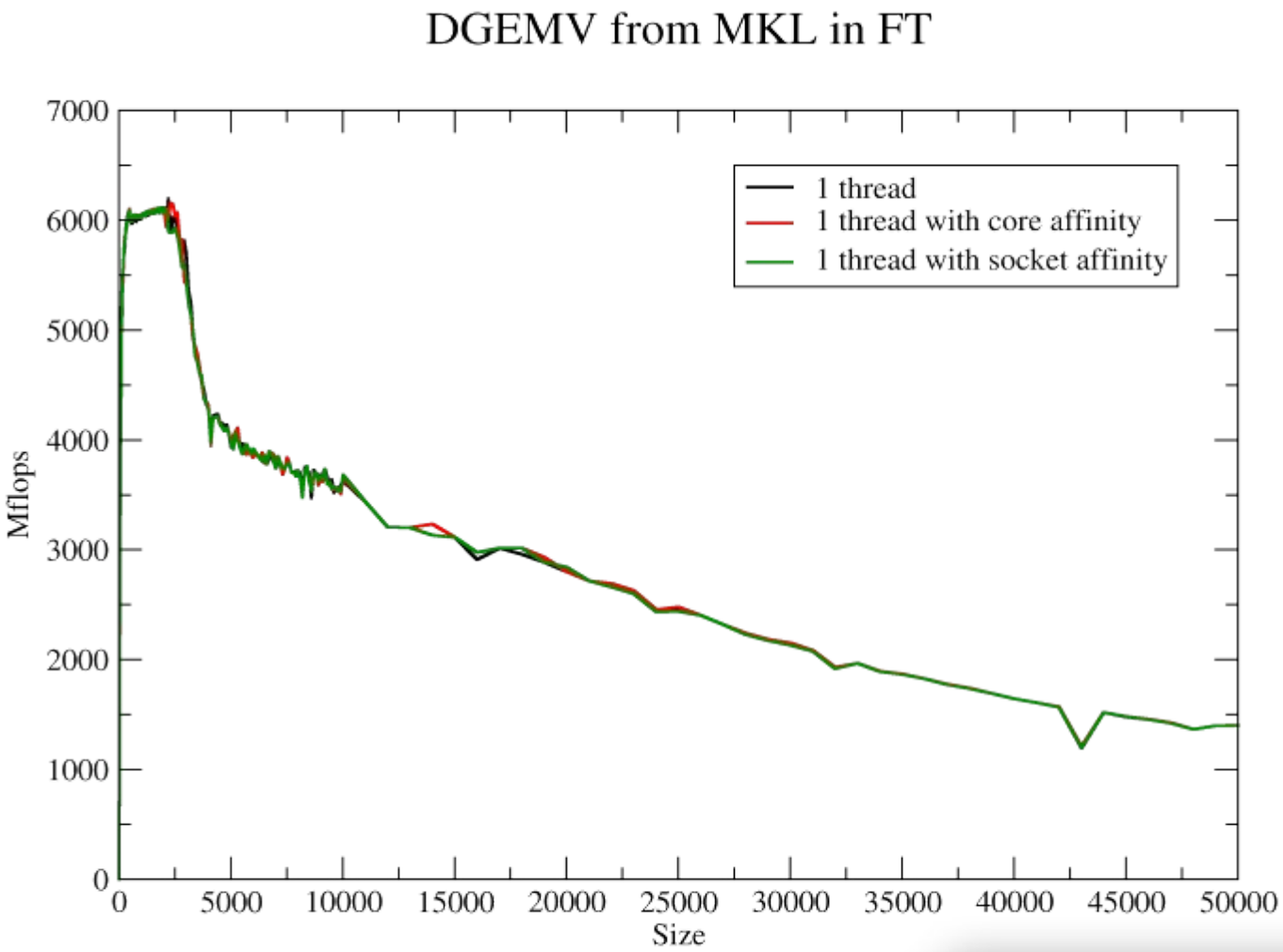
SUPERDOME HP-UX -MLIB



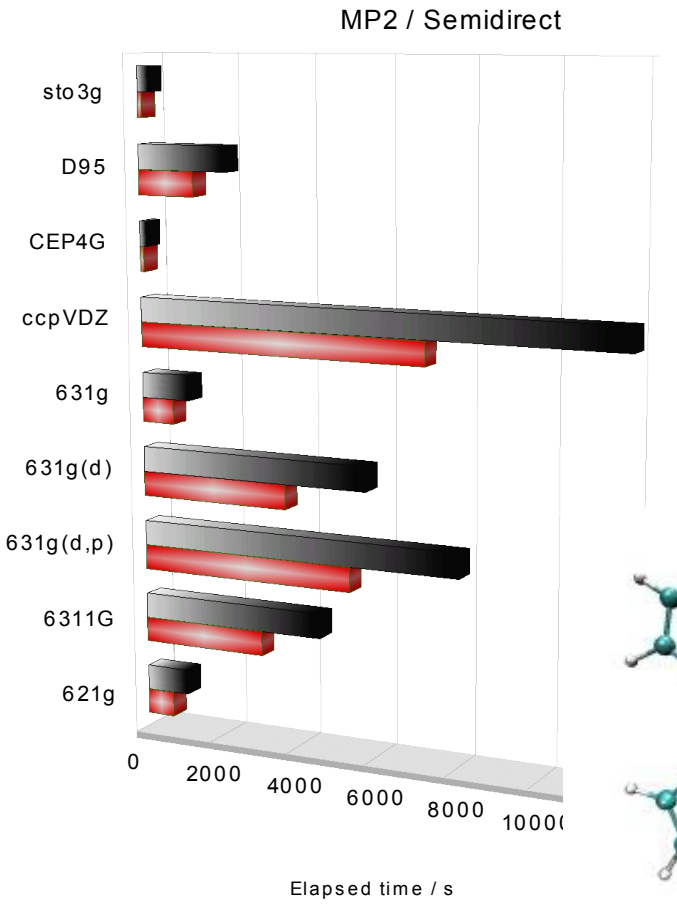
FINIS TERRAE – MKL Performance

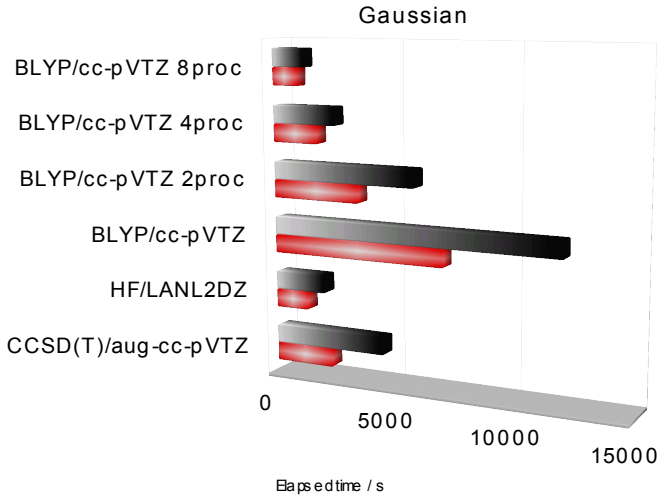


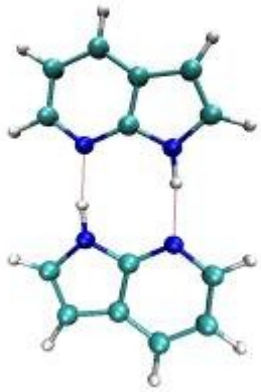
FINIS TERRAE – MKL Performance



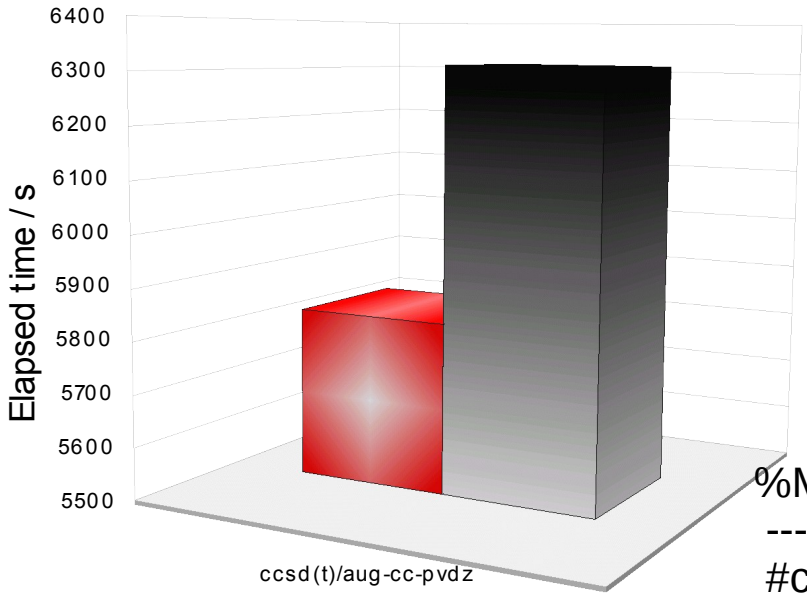
FINIS TERRAE – Gaussian Performance







FINIS TERRAE – SFS: A Gaussian Test

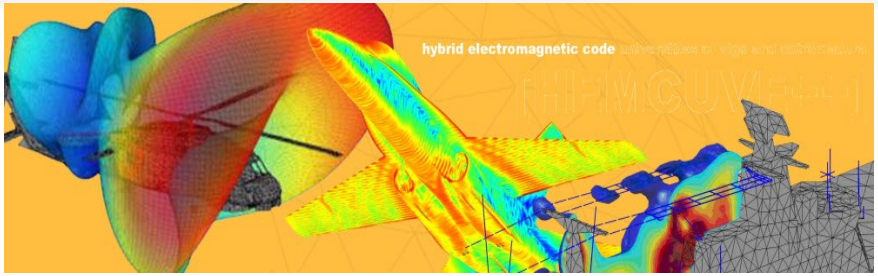


%Mem=2GB

#ccsd(t)/aug-cc-pvdz MaxDisk=30GB

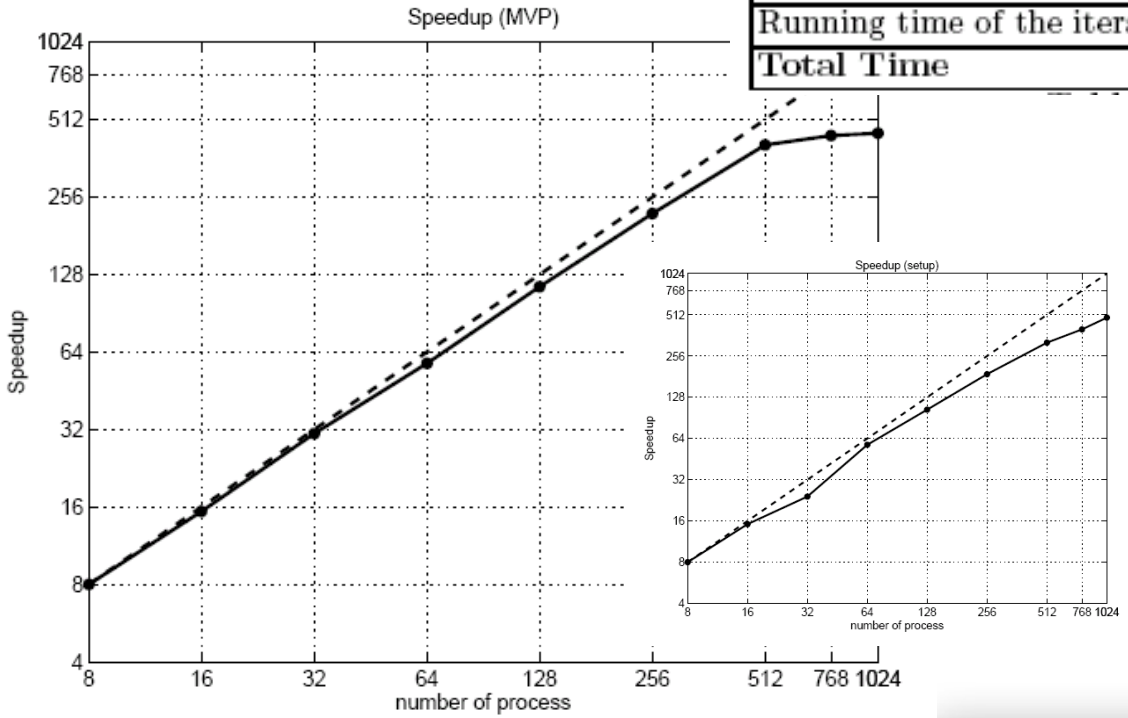
```
aurelio@fs001:~> df -H /sfs
S.ficheros            Tamaño  Usado   Disp Uso% Montado en
84.21.168.199:/sfs      156T   5.8T   142T   4% /sfs
```

FINIS TERRAE – APLICACIONES PRUEBA



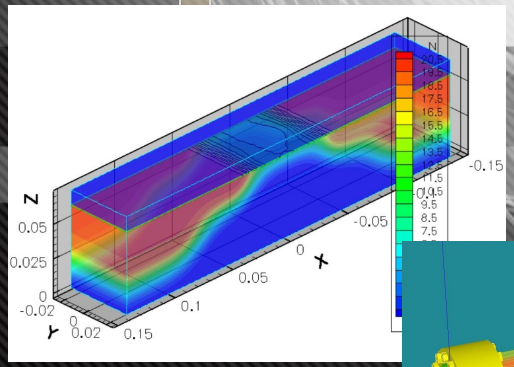
RCS of a sphere with 200λ diameter.	
Unknowns number	32,411,106
Cell dimensions	2λ
Process number	512
Total Memory	7TB
Setup time	4h35m
Single MVP time	6m6s
Running time of the iterative process	10h35m
Total Time	15h10m

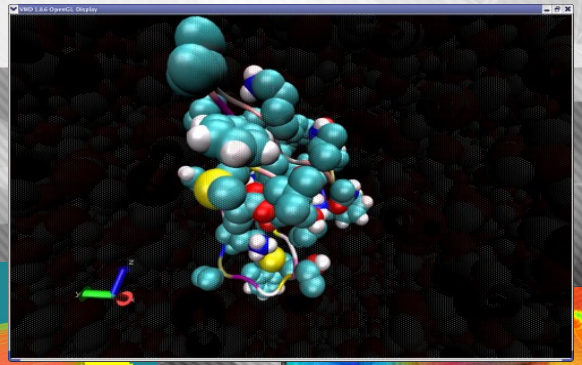
¡¡32.000.000 INCOGNITAS!!

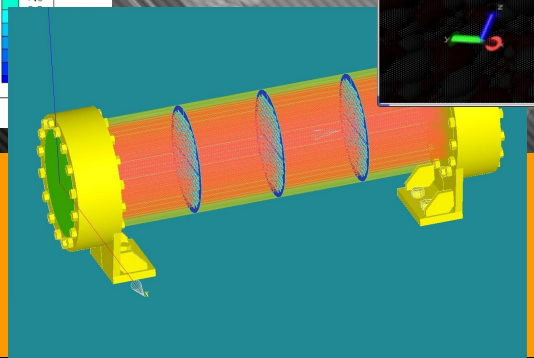


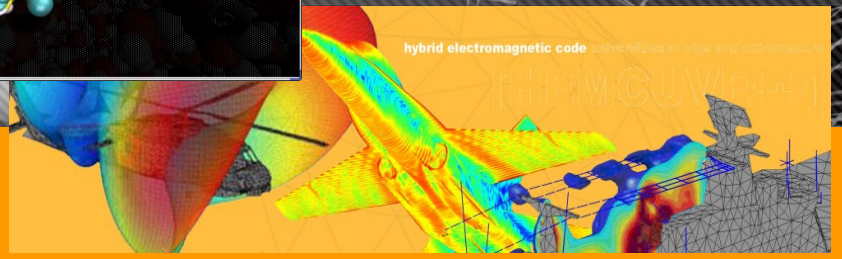
SOPORTE Y NUEVAS APLICACIONES

TERRAE





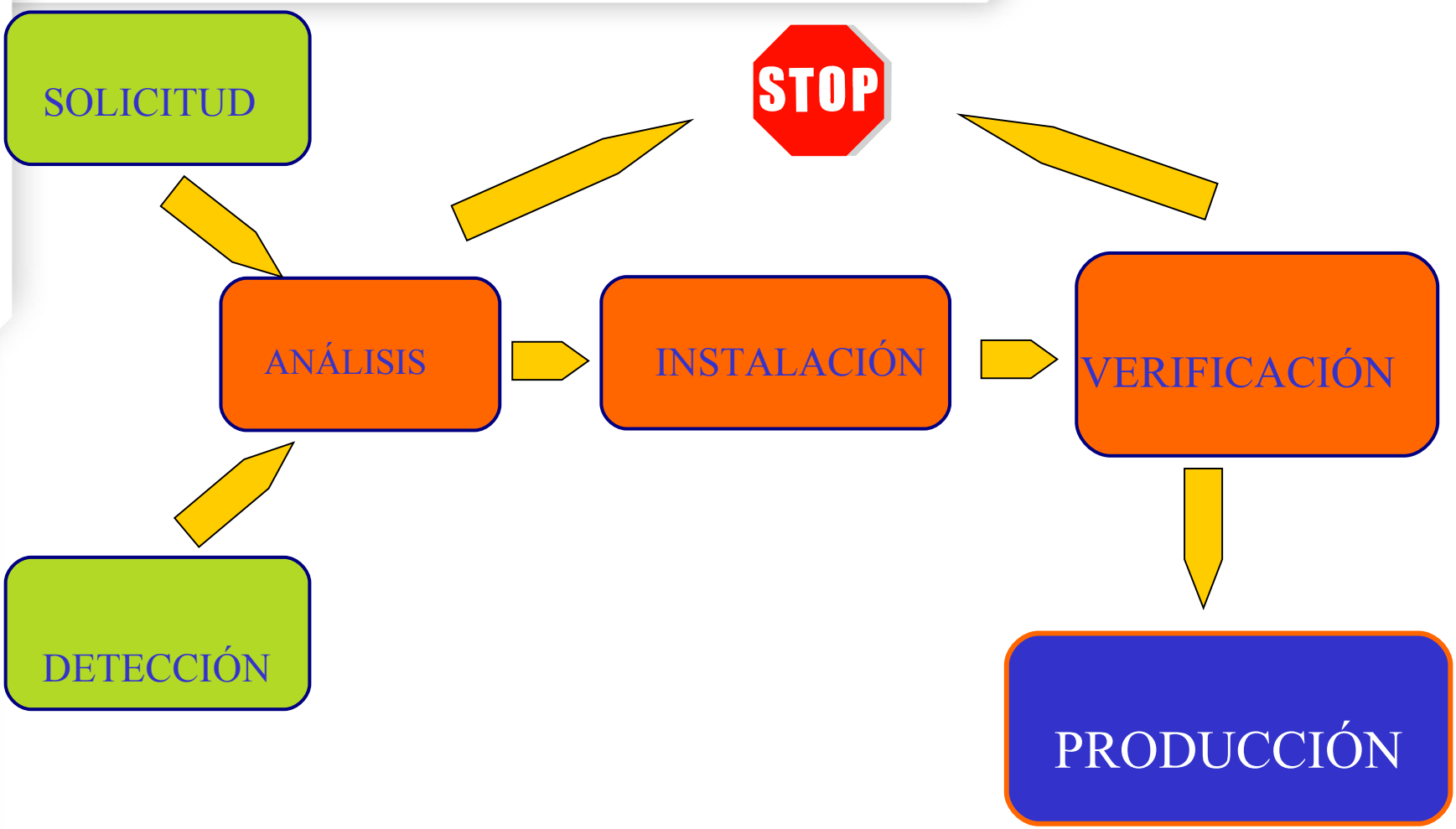




SOPORTE

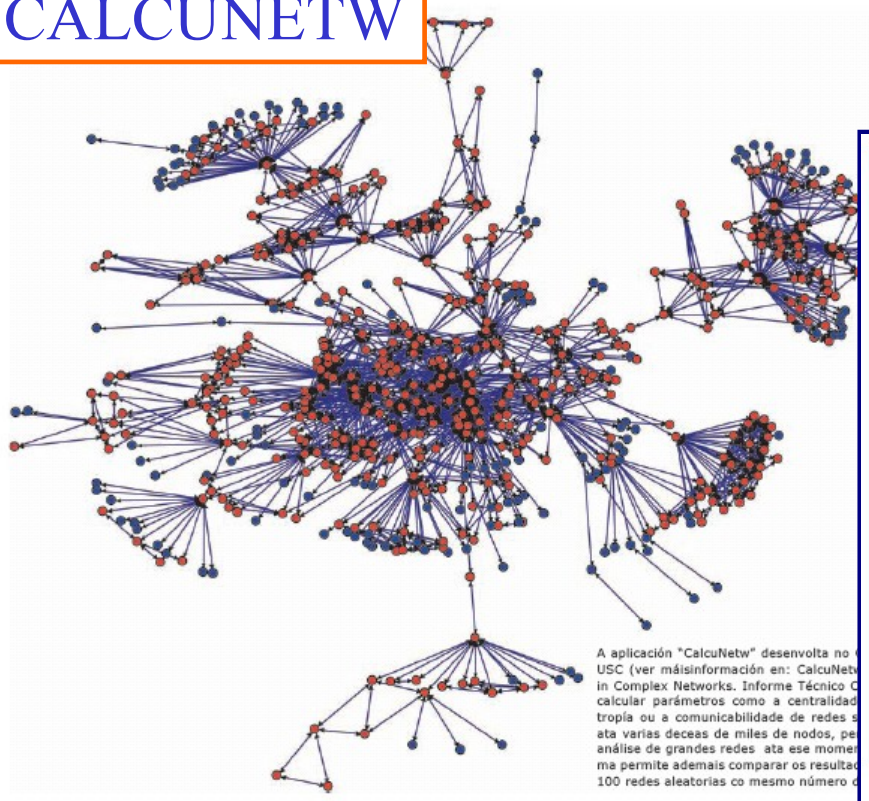
- FORMA DE CONTACTO
  - E-CORREO: aplicaciones@cesga.es
  - TELÉFONO: 981569810
  - VISITA (PREFERIBLE PARA DESARROLLOS)
- SE ASIGNA TÉCNICO Y TICKET
- SERVICIOS
  - ERRORES EN APLICACIONES
  - INSTALACIÓN NUEVAS APLICACIONES Y LIBRERÍAS
  - COMPILACIÓN APLICACIONES PROPIAS
  - CONSULTAS SOBRE PARALELIZACIÓN, EJECUCIÓN, COMPILACIÓN
  - DESARROLLOS DE APLICACIONES

INSTALACIÓN APLICACIONES

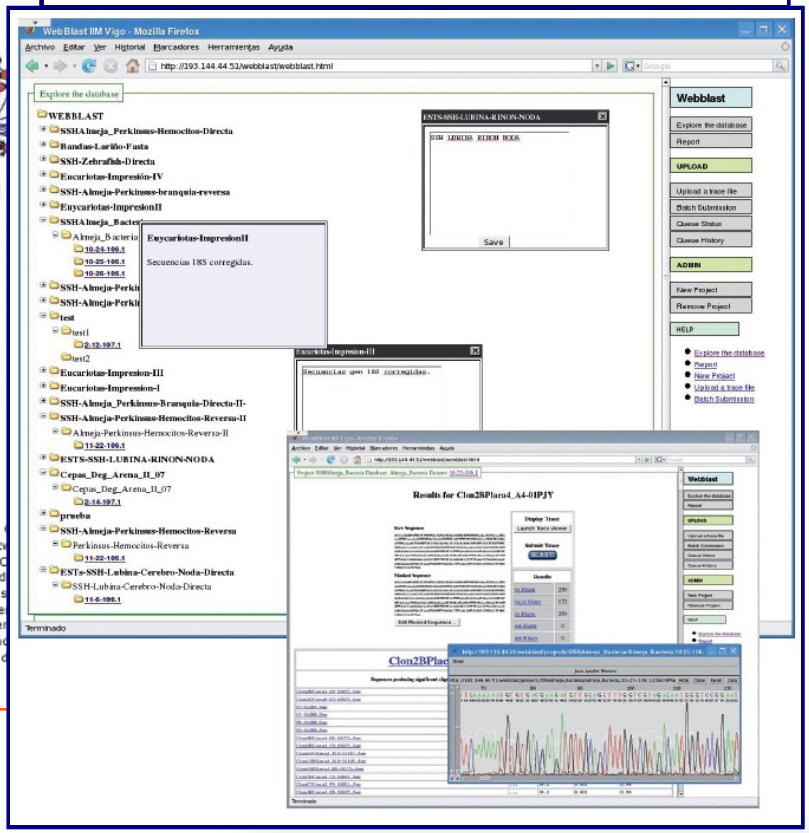


EJEMPLOS APLICACIONES

CALCUNETW



A aplicación "CalcuNetw" desenvolta no
USC (ver máisinformación en: CalcuNetw
in Complex Networks. Informe Técnico C
calcular parámetros como a centralidad
tropía ou a comunicabilidade de redes s
ata varias deceas de miles de nodos, pe
análise de grandes redes ata ese momer
ma permite ademais comparar os resultad
100 redes aleatorias co mesmo número d



Instituto de Investigaciones Marinas de Vigo

CSIC CONSEJO SUPERIOR DE INVESTIGACIONES CIENTÍFICAS

CESGA

XUNTA DE GALICIA

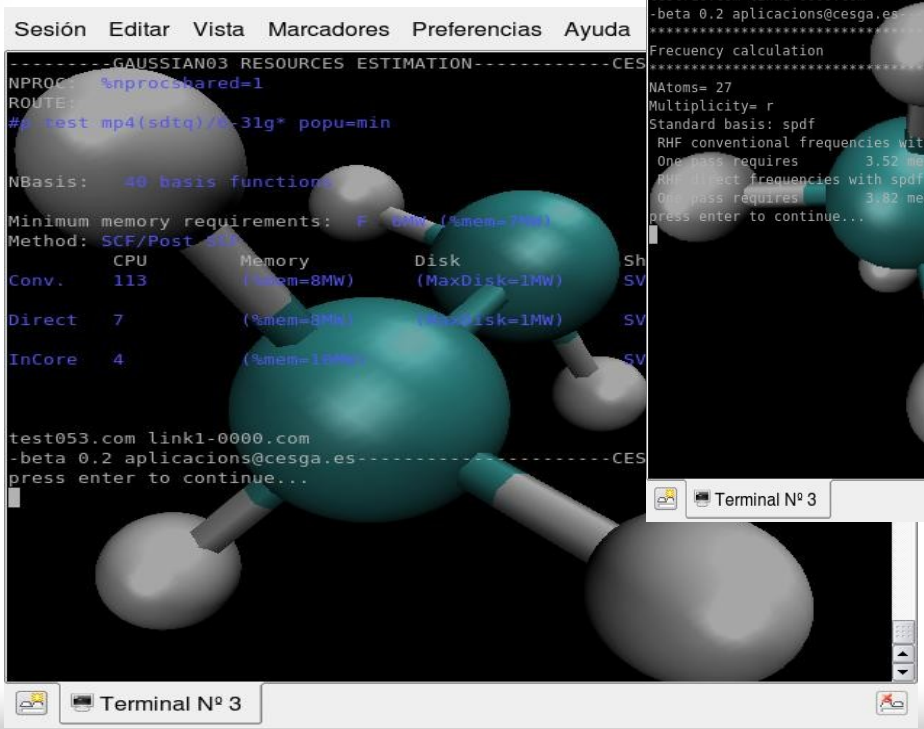
CSIC CONSEJO SUPERIOR DE INVESTIGACIONES CIENTÍFICAS

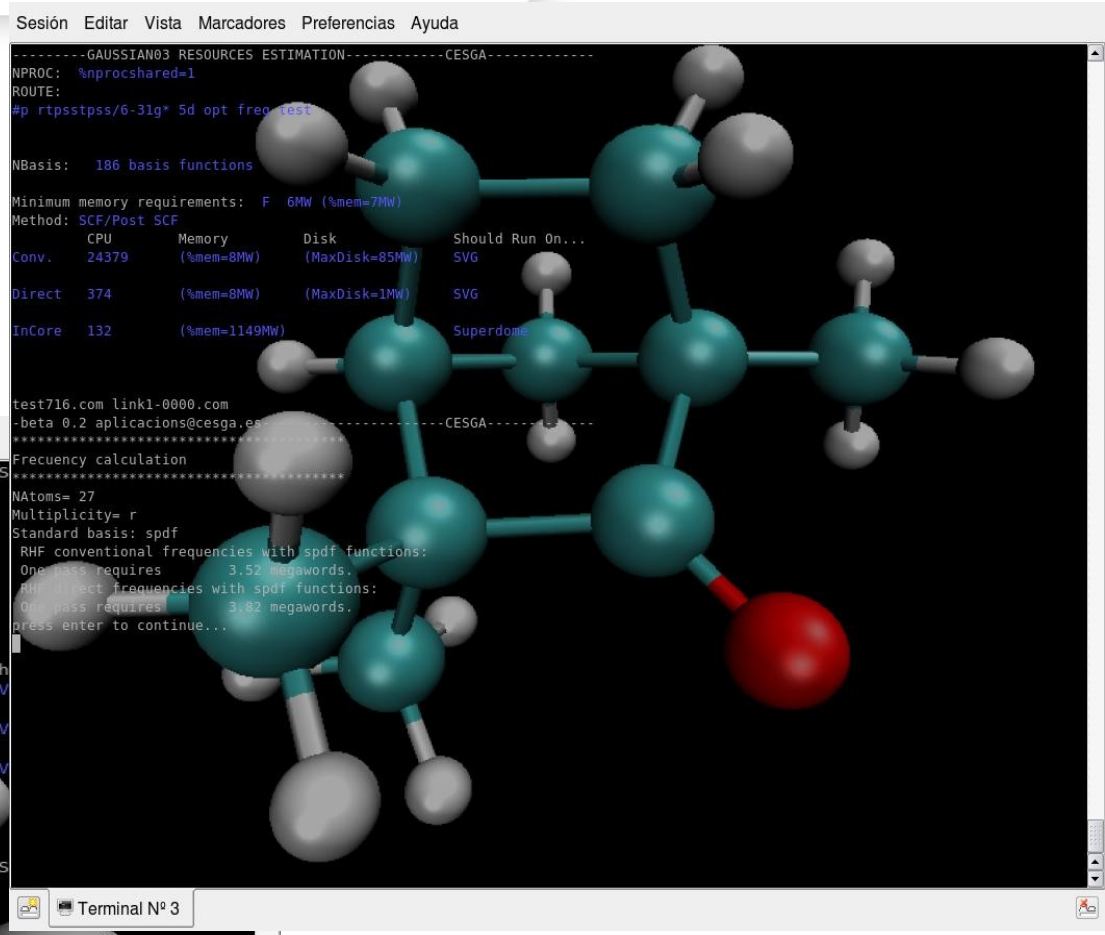
ERDF European Regional Development Fund

EJEMPLOS APLICACIONES

G03MEM

Gaussian03 Resources Estimation

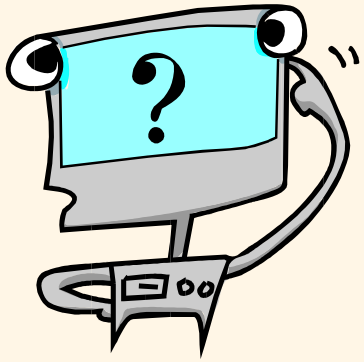




END

THANK YOU!

QUESTIONS



CONTACT:

Aurelio Rodríguez

aurelio@cesga.es

http://www.cesga.es