

Acceso a HPC a través del Supercomputador ALTAMIRA

para la simulación y optimización de quemadores de gas

*Jesús Marco de Lucas (marco@ifca.unican.es)
Prof. Inv. CSIC, Instituto de Física de Cantabria CSIC-UC*

II Jornada de los Grupos de Investigación que colaboran con

B/S/H/

P1: ¿Qué es un supercomputador?

SUPERCOMPUTADOR:

- Muy alta velocidad de cálculo
- Ranking mundial: **Top500**
 - ❑ #1 mundial (USA): 16 Peta flops
- Se construye conectando "nodos"
 - ❑ # 1 mundial: 1.5 millones cores
- Mediante red muy rápida
- Eficiente en energía:
 - ❑ Ranking **Green500**



SISTEMA ALTAMIRA DE LA U.C.

- **80 Teraflops** billones de operaciones por segundo
- Fue #358 del Top500
 - ❑ **#2 en España**
- 240 "nodos" (IBM idataplex dx360m4)
 - ❑ ~4000 cores Intel: 330 Gflops/nodo (x20 PC)
- Red Infiniband (<1 microseg. entre nodos)
- Eficiencia: **#36** mundial



Rank	System	Nodes	Value	Value	Value
358	ALTAMIRA (UNIVERSIDAD DE CANTABRIA)	240	80	1200	7000
359	CRAY XT4E (UNIVERSIDAD DE CANTABRIA)	240	80	1200	7000
360	CRAY XT4E (UNIVERSIDAD DE CANTABRIA)	240	80	1200	7000



ADEMÁS EL SISTEMA DE SUPERCOMPUTACIÓN ALTAMIRA:

- ES UN SISTEMA CON CAPACIDAD DE PROCESADO MASIVO DE DATOS
 - ❑ ALMACENAMIENTO (>1000 Terabytes: >1000 capacidad de un PC)
 - ❑ RED (10Gbps REDIRIS-NOVA fibra oscura: >1000 veces la capacidad de una conexión ADSL)
- CUENTA CON UN DISEÑO EFICIENTE Y DE ÚLTIMA GENERACIÓN
 - ❑ **Definido conjuntamente por IBM, BSC e IFCA**
- UTILIZA SOFTWARE LIBRE (xCat, Linux, compiladores gcc, open MPI, gestion SLURM)



Datos técnicos sistema ALTAMIRA

- ✦ Clusters IBM idataplex, 160 nodos dx360m4
 - ✦ 2x SandyBridge-EP E5-2670 2.6GHz/1600 20MB
 - ✦ 64GB RAM, 16x4G DDR3-1600 DIMMs (4GB/core)
 - ✦ 500GB 7200 rpm SATA II local HDD
 - ✦ 332.8Gflop/node
- ✦ Red HPC Infiniband FDR10 (40 Gbps)
 - FDR10 IB HCA Mellanox
 - Switches 36 bocas, leafs+ core layers
 - FAT TREE non-blocking
 - ✦ Red de gestión avanzada
- ✦ Almacenamiento HPC:
 - ✦ Sistema GPFS conectado por IB y por 10G
 - ✦ Capacidad total >2 Petabytes en disco, + archivado LTO5 (robot)
- ✦ **Además:**
 - ✦ 7 nodos IBM dx360m3 con GPUs TESLA
 - ✦ 11 nodos IBM ps702 con Power7
 - ✦ **1 fat-node IBM x3850 con 1Tb RAM, 40 cores**
- ✦ Instalados en CPD IFCA



- ✦ **Software:**
 - ✦ xCat (gestión de la instalación)
 - ✦ Linux (Scientific Linux y RedHat)
 - ✦ Gestor de colas (SLURM/Moab)
 - ✦ MPI (mvapich2, openmpi-x86_64)
 - ✦ Compiladores (gcc, INTEL)

Procesadores y aplicaciones

Intel® Datacenter and Connected Systems Group (DCSG) Public Roadmap

Mission Critical

Itanium

2013 **2014/Future** 

Boxboro-MC Platform
Intel® Itanium® processor 9500 series
Intel® 7500 chipset, Intel® 7500 Scalable Memory Buffer, OEM chipset

Future Kittson processor

Expandable

Boxboro-EX Platform
Intel® Xeon® processor E7-8800/4800/2800 product families
Intel® 7500 chipset, Intel 7510/7512 Scalable Memory Buffer

Brickland Platform
Intel® Xeon® processor E7-8800/4800/2800 v2 product families
Intel® C602J chipset

Efficient Performance & Workstation

Romley-EP 4S Platform
Intel® Xeon® processor E5-4600 product family
Intel® C600 series chipset

Romley-EP Platform
Intel® Xeon® processor E5-2600 product family
Intel® C600 series chipset

Romley Workstation Platform
Intel® Xeon® processor E5-1600 product family
Intel® Xeon® processor E5-1600 v2 product family
Intel® C600 series chipset

Entry, Perf/Watt Optimized Microserver

Bromolow Platform
Intel® Xeon® processor E3-1200 v2 product family
Intel® C200 series chipset

Denlow Platform
Intel® Xeon® processor E3-1200 v3 product family
Intel® C220 series chipset

Density-optimized Microserver

Bordenville Platform
Intel® Atom™ processor S1200 product family

Edisonville Platform
Future processor (Avoton)

Many Integrated Core (MIC)

Intel® Xeon Phi™ Product Family
Intel® Xeon Phi™ coprocessor (Knights Corner)

All products, computer systems, dates, and figures specified are preliminary based on



P2: ¿Para qué se usan los supercomputadores?

INVESTIGACIÓN:

- ⊕ SIMULACIÓN / ANÁLISIS DE DATOS:
 - ❑ Ingeniería, Materiales, Química
 - ❑ Física, Astronomía, Meteorología
 - ❑ Biología, Medicina, Medio Ambiente
 - ❑ Finanzas, Sistemas sociales
- ⊕ Ejemplos:
 - ❑ Evolución del Universo
 - ❑ Diseño de un reactor de fusión
 - ❑ Plegado de proteínas
 - ❑ Nuevos nano-materiales
 - ❑ Simulación completa de un corazón

EMPRESAS Y ESTADO

- ⊕ DEFENSA/APLICACIONES MILITARES
 - ❑ Simulación de explosiones nucleares
 - ❑ Diseño de nuevas armas
 - ❑ Análisis de información
- ⊕ DISEÑO DE NUEVOS PRODUCTOS
 - ❑ **Modelado:** aviones, coches, **electrodomésticos**
 - ❑ Sistemas electrónicos (chips, placas)
 - ❑ Fármacos, productos cosméticos
- ⊕ ANÁLISIS FINANCIERO
- ⊕ PREDICCIÓN METEOROLÓGICA

RED ESPAÑOLA DE SUPERCOMPUTACIÓN: INVESTIGACIÓN

- ⊕ 8 nodos, más de 2000 proyectos desde 2006
- ⊕ Coordinada por el Barcelona Supercomputing Center
- ⊕ La Universidad de Cantabria participa desde su creación

INICIATIVAS EUROPEAS

- ❑ PRACE: Supercomputadores en Alemania, Francia, Italia, España
- ❑ **HPC-EUROPA:** promover uso por investigadores de toda Europa

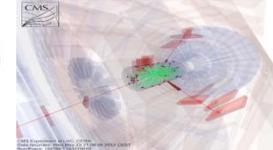
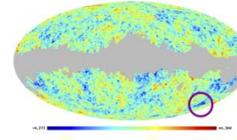


Supercomputación en la UC

A TRAVÉS DEL SERVICIO SANTANDER SUPERCOMPUTACIÓN (SCTI)

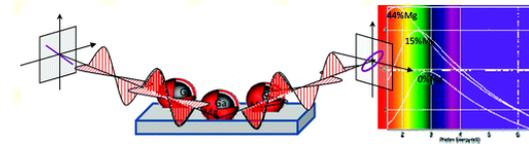
IFCA (Instituto de Física de Cantabria)

- ❑ Cosmología (proyectos ESA, ESO)
- ❑ Física de partículas (proyectos CERN)



Facultad de Ciencias

- ❑ Arquitectura de computadores
- ❑ Diseño de materiales, óptica



IBBTEC (Instituto de Biomedicina y Biotecnología)

- ❑ Biología molecular, genómica.

EN EL INSTITUTO DE HIDRAULICA AMBIENTAL (IH)

- ❑ Más de 140 profesionales de campos multidisciplinares con las más avanzadas infraestructuras e instrumentos de investigación.
- ❑ Investigación básica y aplicada y el desarrollo de metodologías y herramientas para la gestión de los ecosistemas acuáticos.
 - Simulaciones oceánicas, de costa, de ríos y embalses
 - Simulación y procesado de datos del Tanque de Oleaje
- ❑ Para empresas (Ferrovial, Dragados, Garrad Hassan, Cepsa), gobiernos locales y nacionales (Gobierno de Túnez, Egipto, España, El Salvador, Honduras, Brasil, México) y organizaciones internacionales (Banco Mundial, UNESCO, CEPAL).



P3: ¿Innovar con un supercomputador?

Objetivo de la financiación INNOCAMPUS:

- ✦ Mejorar y ampliar la capacidad del centro de cálculo científico existente mediante el *desarrollo en colaboración con la empresa de servicios avanzados de computación (supercomputación, grid, cloud computing y soporte para big data)*

PARA USAR UN SUPERCOMPUTADOR HAY QUE ADAPTAR LAS APLICACIONES

- ✦ ¿Cómo acercar la supercomputación a las empresas, especialmente PYMES?
 - ❑ Instalación de un nodo en el PCTCAN, gestionado por una PYME (CIC)
 - ❑ Acceso a empresas para el desarrollo de aplicaciones piloto
 - ❑ Facturación “por uso” en proyectos de innovación a precios competitivos
 - ❑ Asesoramiento técnico y apoyo en la adaptación de aplicaciones
 - ❑ **Pruebas iniciales y tests de aplicaciones a costes reducidos**

Supercomputación se ofrece ya cómo un servicio a las empresas en USA, UK :

- ✦ Ejemplo 1: Diseño e Ingeniería asistidos por ordenador, a mediana y gran escala
- ✦ Ejemplo 2: Preparación de nuevos fármacos
- ✦ Ejemplo 3: Análisis de tendencias y consumos en población
- ✦ Ejemplo 4: Medicina personalizada
- ✦ Ejemplo 5: Predicciones medioambientales



¡Ofrecer supercomputación cómo un servicio para la innovación!

Uso de ALTAMIRA en Innovación

OFRECER A LAS EMPRESAS PARA INNOVACIÓN:

ANÁLISIS DE RECURSOS

- ❑ Horas de CPU, capacidad de almacenamiento
- ❑ Uso priorizado, inmediato, on-demand, etc.
- ❑ Packs de "Test" con apoyo especializado

INTERACTIVE SUPERCOMPUTING

- ❑ Visualización de alta resolución

ALMACENAMIENTO DE ALTO RENDIMIENTO

- ❑ Procesado distribuido de grandes volúmenes
- ❑ Despliegue de bases de datos no-SQL

ENTORNOS INTEGRADOS

- ❑ Ej: simulación basada en agentes
- ❑ Ej: análisis de datos con redes neuronales
- ❑ Ej: Open GIS + procesado (R-paralelo)

VIRTUALIZACIÓN:

- ❑ Diferentes S.O. (ej. WINDOWS)
- ❑ Oferta de imágenes "cluster" de diferente tamaño adaptadas a las necesidades

Simulación y Optimización de quemadores de gas

B/S/H/

Colaboración iniciada hace unos meses entre Área de I+D de Predesarrollo del Centro de Tecnología de Gas de la Planta de Santander de BSH (responsable Salvador Ochoa) y el IFCA (contacto Jesús Marco)

Formalización mediante un convenio

Software de las aplicaciones:

- ❑ ANSYS/FLUENT (Licencia)
- ❑ OpenFoam (Open)

Algunos pasos en marcha:

- ❑ Cuentas en Altamira para BSH
- ❑ Test VNC (pantalla/gráficos remotos)
- ❑ Instalación ANSYS y servidor licencias
 - ❑ Primeras pruebas
- ❑ Instalación OpenFoam
 - ❑ Tuning/primeras pruebas
- ❑ Ejecución ~200K horas

Un tema bien conocido en innovación y HPC:

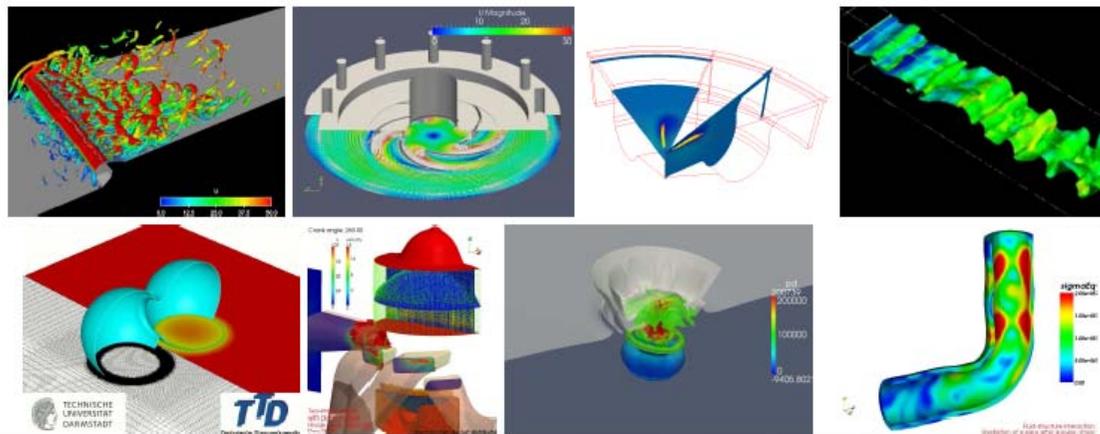
PRACE Seminar: Industrial Usage of HPC

OpenFOAM: Capabilities Highlights

WIKKI

Physical Modelling Capability Highlights

- Basic: Laplace, potential flow, passive scalar/vector/tensor transport
- Incompressible and compressible flow: segregated pressure-based algorithms
- Heat transfer: buoyancy-driven flows, conjugate heat transfer
- Multiphase: Euler-Euler, VOF free surface capturing and surface tracking
- RANS for turbulent flows: 2-equation, RSTM; full LES capability
- Pre-mixed and Diesel combustion, spray and in-cylinder flows
- Stress analysis, fluid-structure interaction, electromagnetics, MHD, etc.



P4: ¿Es ALTAMIRA el sistema adecuado?

Points of Interest

WIKKI

Current Status: Performance Scaling

- Implicit general purpose CFD solvers work reasonably well up to low 000s of CPUs
- Current approach is inappropriate for inhomogeneous communication speed and an order of magnitude increase in computer size
- Communication speed and memory access are critical: clusters must be co-located with fast inter-connect; moving jobs around is not practical
- Limiting factors in performance scale-up:
 - Parallelisation of complete CFD process, from geometry to post-processing
 - Iterative sparse matrix solver algorithms
 - Non-field operations in CFD algorithms: spray, radiation, surface physics

Summary

- Current CFD technology involving implicit solvers is close to its limit
- Some necessary algorithms are badly parallelised due to requirement of method-to-method coupling
- New approach is needed: how do we do massively parallel linear algebra?
- We may remain at the level of 000s of CPUs for a long time, looking for other avenues of improvement: multi-core CPU, handling inhomogeneous communications speed, fast memory access, complete migration to GPU

