
Laboratorio de Súper Cómputo y Visualización en Paralelo

UAM-I

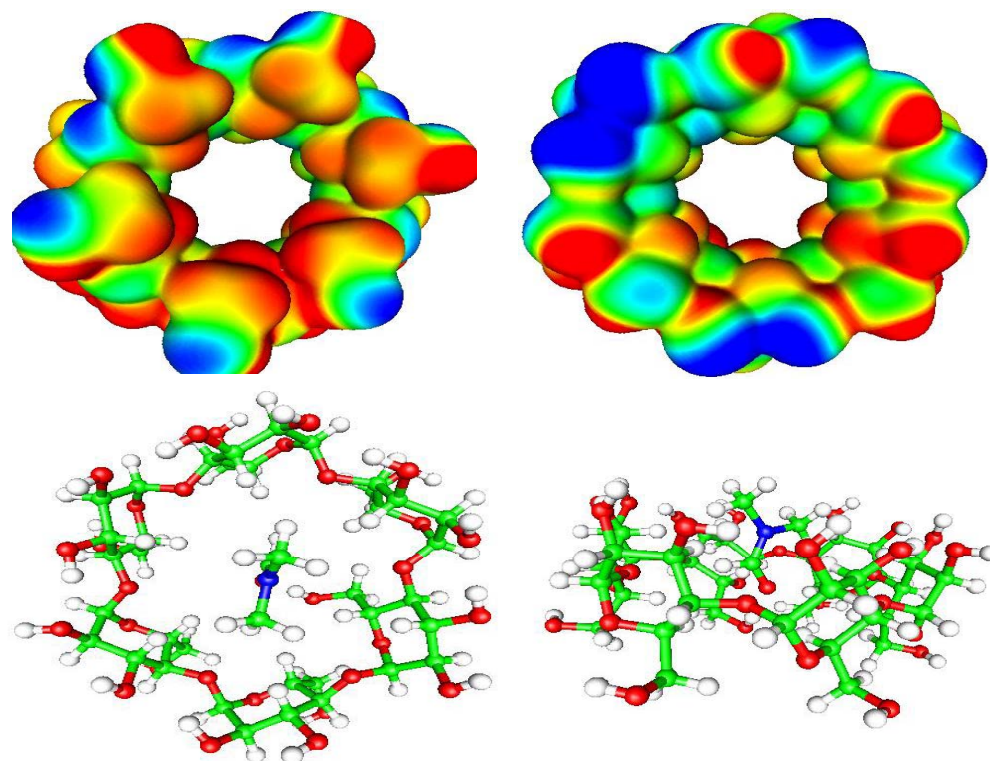
Manuel Aguilar Cornejo

Coordinador del Laboratorio de Supercómputo y
Visualización en Paralelo

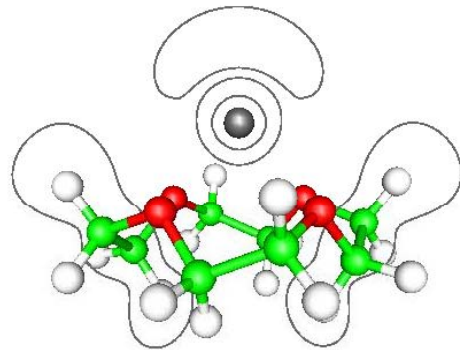




Demanda de cómputo

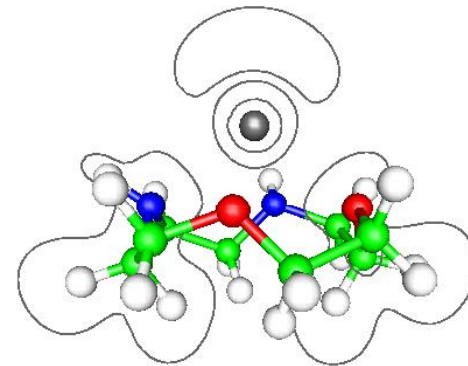


Demanda de cómputo

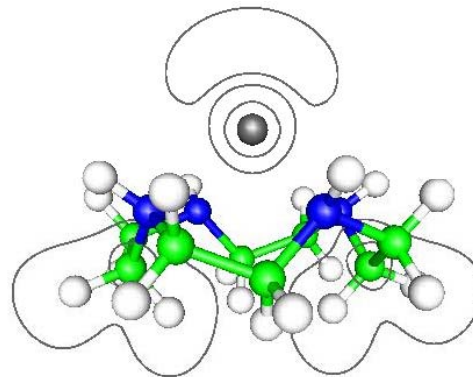


$\text{Pb}^{+2}\text{-12crnO}_4$

ELF
 $\eta(r) = 0.385$



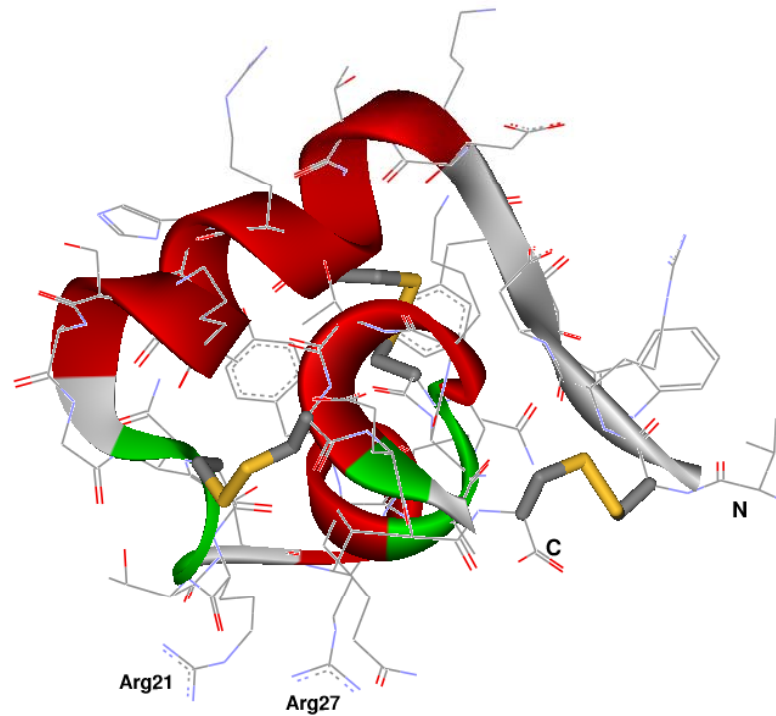
$\text{Pb}^{+2}\text{-12crnO}_2\text{N}_2$



$\text{Pb}^{+2}\text{-12crnN}_4$

Demanda de cómputo

Biomoléculas

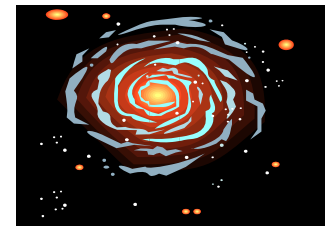


Demanda de cómputo

– Predicción del clima



– Evolución de galaxias



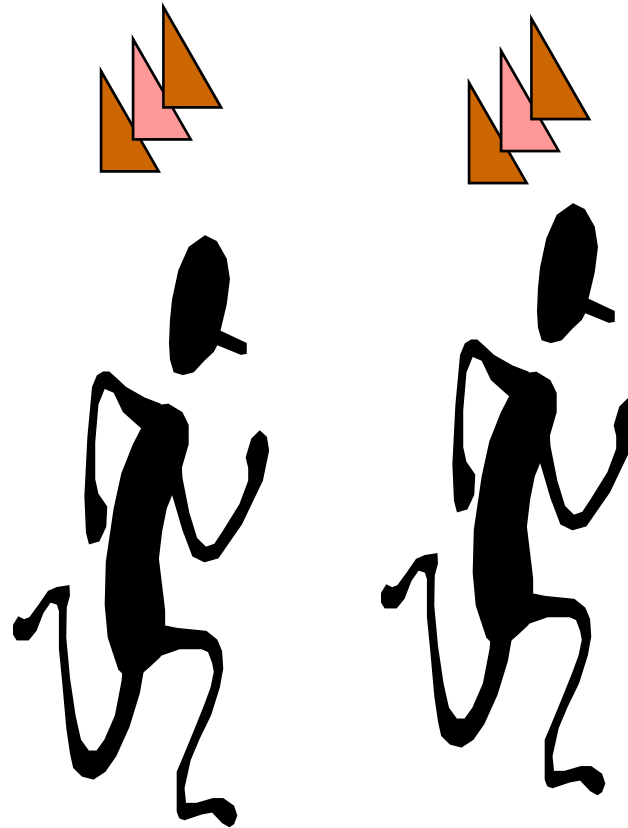
– Animaciones



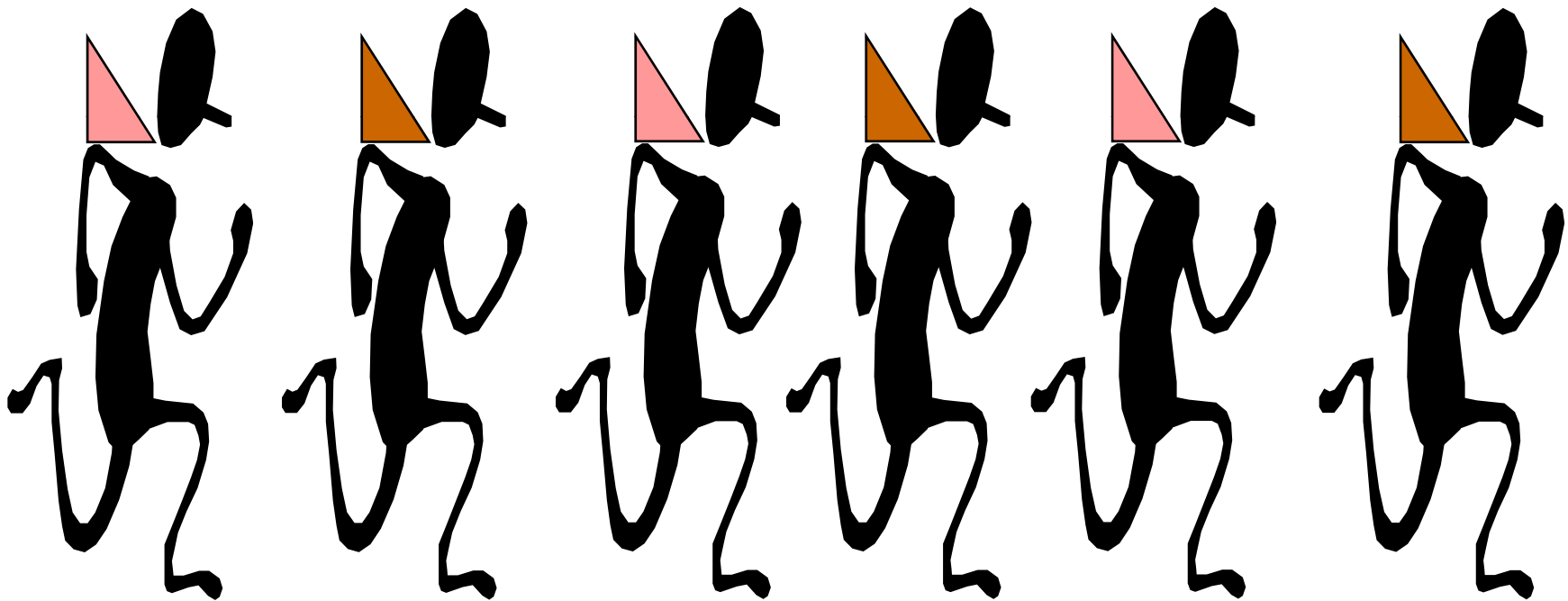
Demanda de cómputo



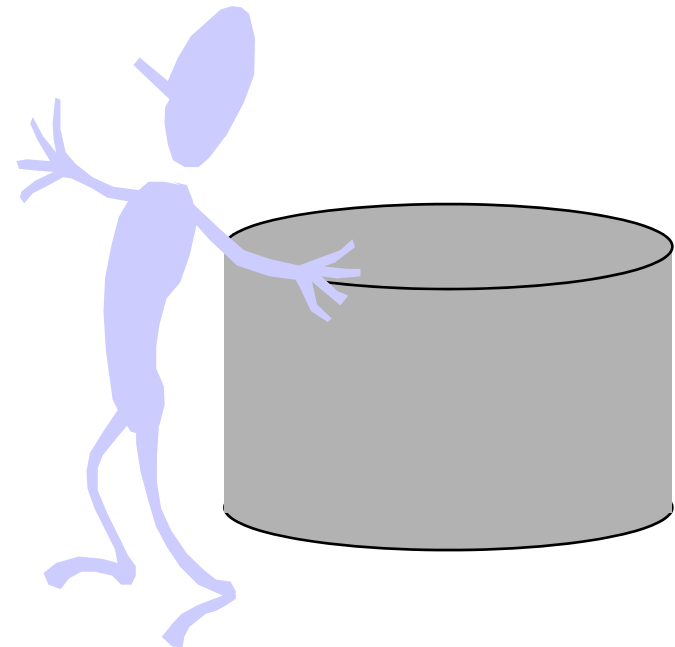
Demanda de cómputo



Demanda de cómputo

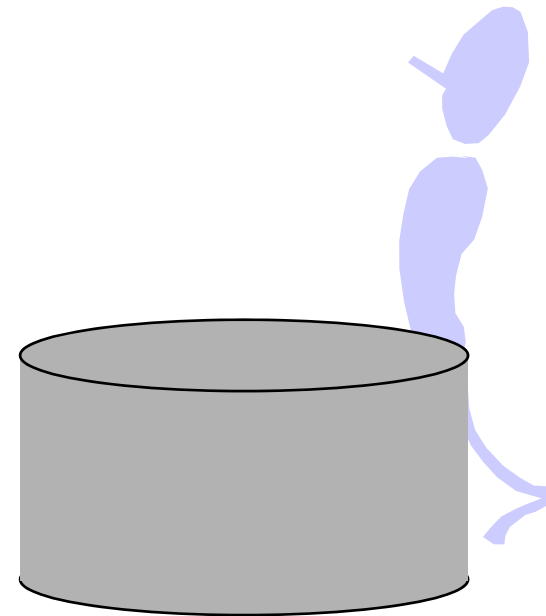
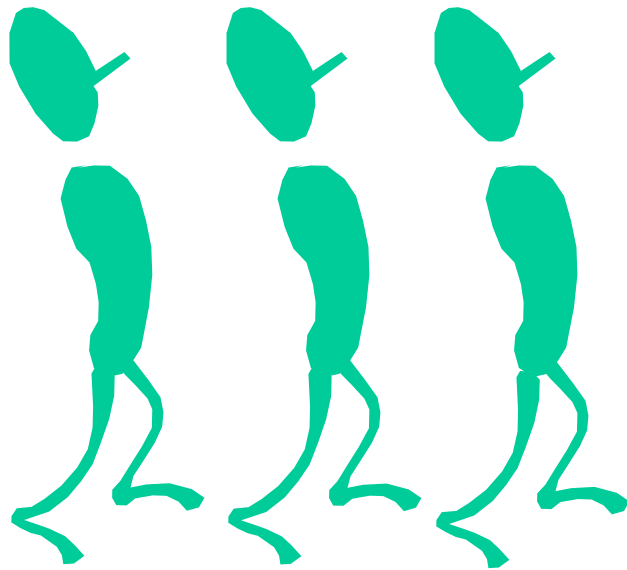


Problemas al compartir recursos

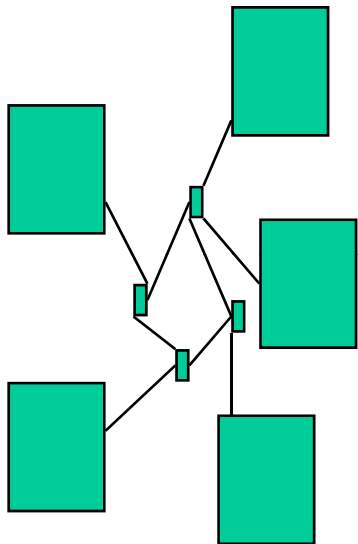


El programador de las aplicaciones debe resolver esos problemas

Problemas al compartir recursos

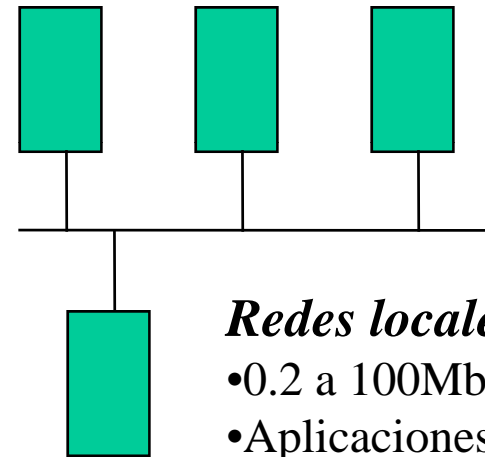


Diferentes tipos de arquitecturas paralelas



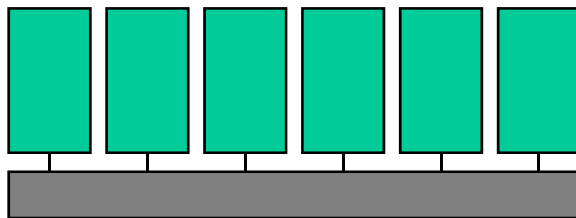
Redes de cobertura amplia

- 0.1 a 0.5 segundos
- Cooperación de aplicaciones existentes



Redes locales

- 0.2 a 100Mb por segundo
- Aplicaciones distribuidas integradas



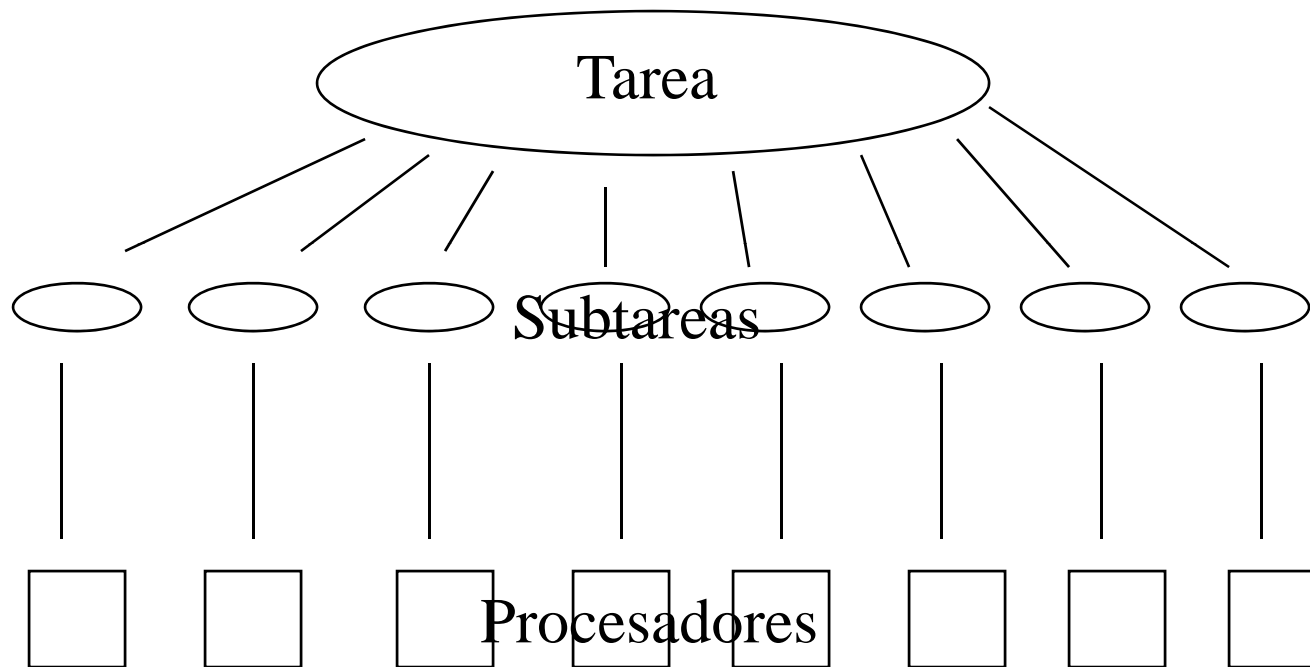
Multiprocesadores (Clusters)

- Aplicaciones paralelas

Cómputo de Alto Rendimiento (HPC)

- Procesadores trabajando todo el tiempo.
- Sistema disponible en cualquier momento.
- Sistema operativo estable.
- Trabajos con una larga duración.
- Trabajos que requieren varios procesadores.
- Muchas operaciones con enteros y números de punto flotante.

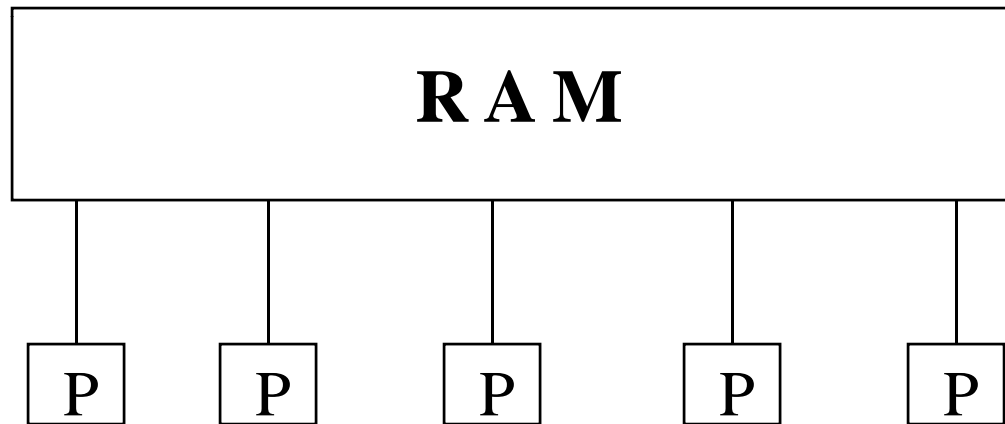
Cómputo en paralelo



Sistemas de Memoria Compartida



18 Procesadores R10000

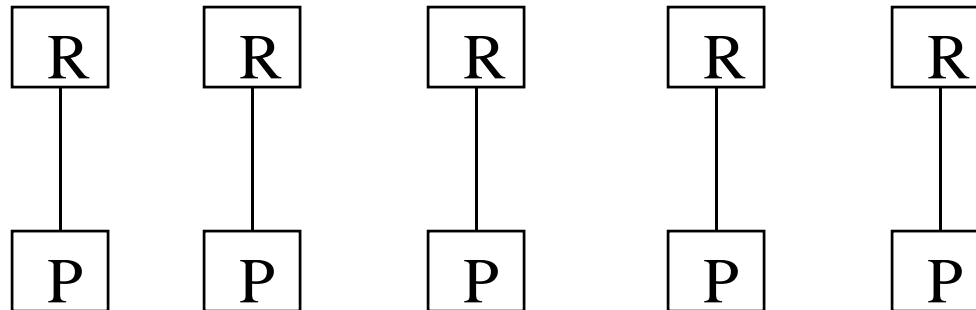


Modelo de programación de memoria compartida

Sistemas de Memoria Distribuida



CM5 (Thinking Machine)
32 Procesadores



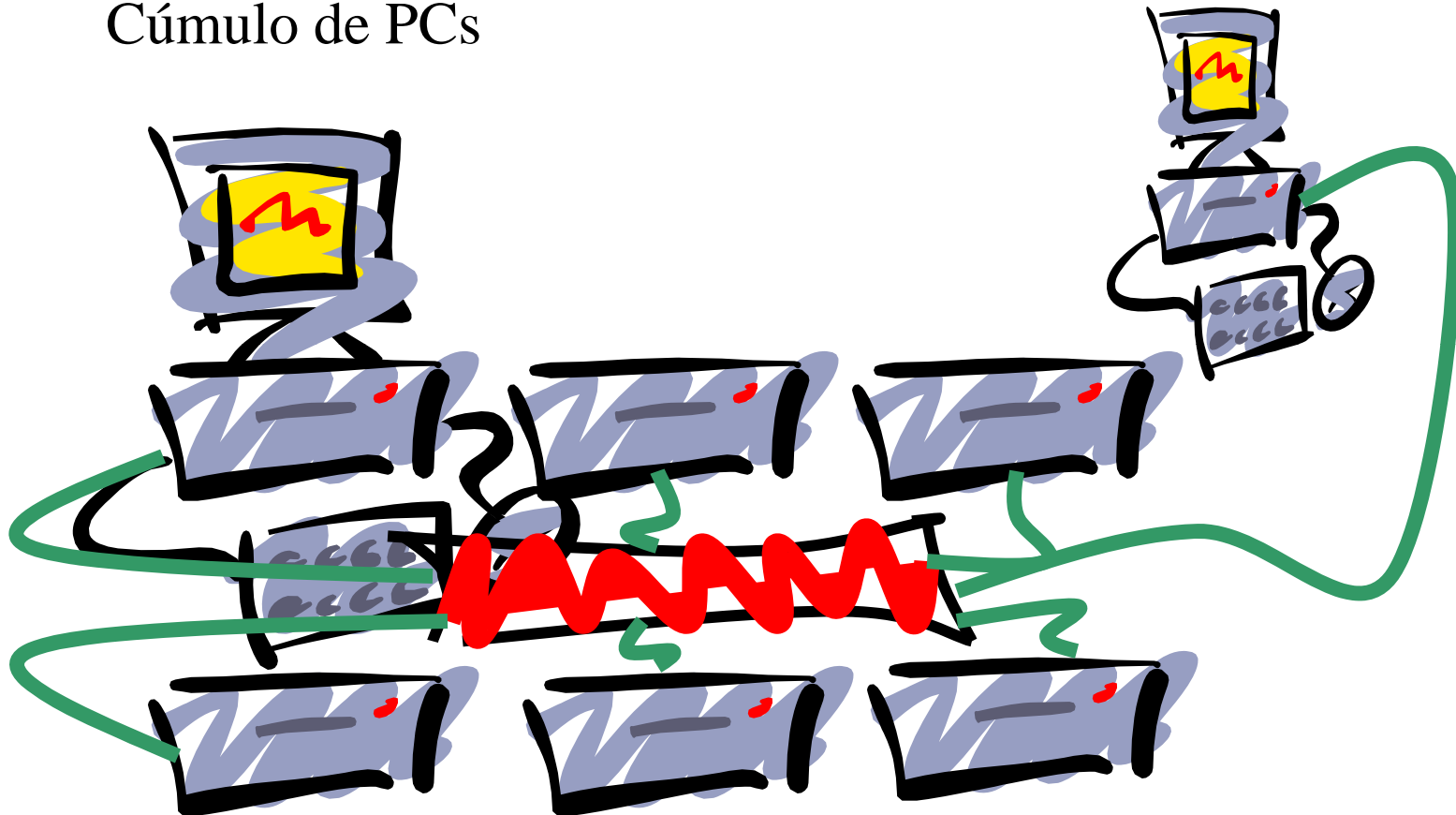
Modelo de programación de paso de mensajes

La UAM ha instalado sistemas que han estado en la lista del TOP500

Problemas con las compañías:

1. No son perpétuas.
2. Costos muy elevados.

Cúmulo de PCs



El Ing. Juan Carlos Rosas Cabrera ayudo a:

Construcción de cúmulos de servidores y manejo de LINUX para la administración de estos sistemas.

- 1.- Laboratorios de docencia de la DCBI
- 2.- Encargado técnico del LSVP

Siempre estuvieron involucrados estudiantes.

Diferentes tipos de conectividad

* Fast Ethernet (10-100 Mb/s)

* Gigabit Ethernet (> 1000 Mb/s)

} TCP/IP

* Giganet

* Myrinet

* Quadrics

* Infiniband

} > 1000 Mb/s

Primer Cúmulo en la UAMI (2000):

20 nodos duales Pentium III

* 1 GHz

* 1 Gb RAM

1 Switch Giganet con 32 Puertos 1.25 Gb/s

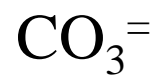
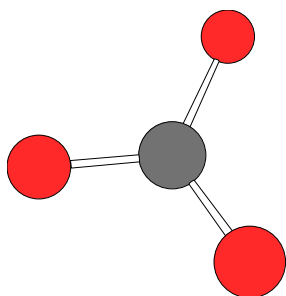
24 Tarjetas de red cLAN Giganet

Presupuesto: \$71,000.00 USD

Software:

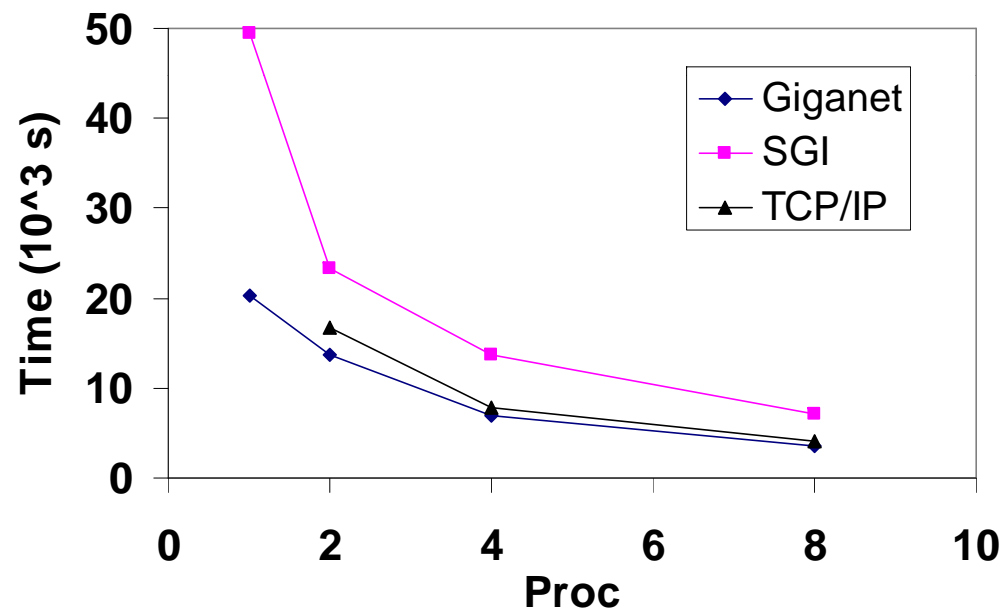
- * SO/LINUX
- * GNU compilers
- * NWChem
- * Gaussian 98
- * DFT++





HF/aug-cc-pVTZ (220 basis set functions)

CPU Time



Infraestructura en el 2004

- Computadora SGI con 18 procesadores
- Cúmulo de PCs con 40 procesadores PIII
- Cúmulo de PCs con 100 procesadores Xeon
- Cúmulo de 8 procesadores Itanium



* Cúmulo de G5 (2004)

12 procesadores G5

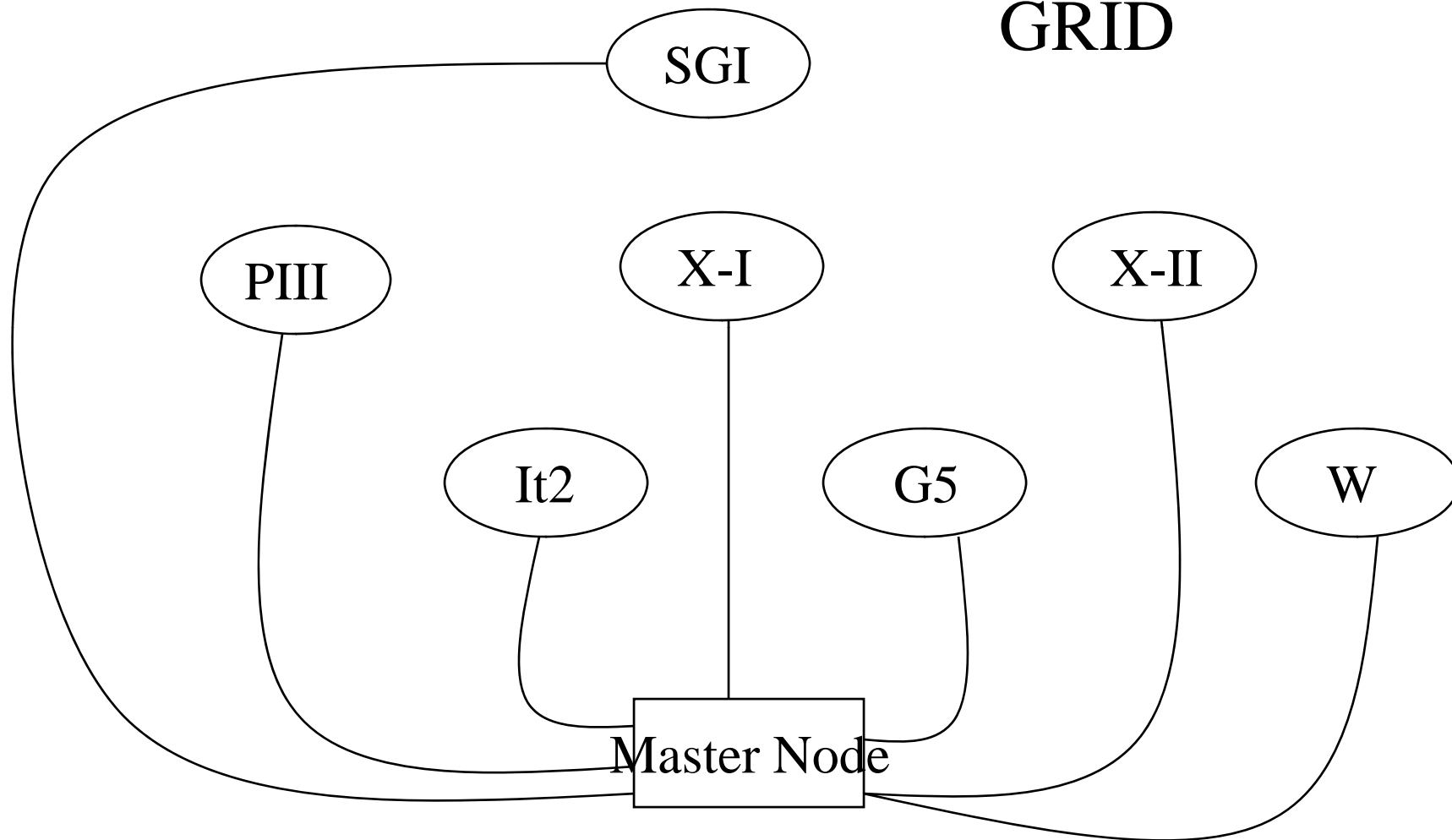
* Cúmulo de Itanium (2004)

12 procesadores Itanium 2

* Cúmulo de Woodcrest dual core (2006)

144 cores

GRID



Control de trabajos

- Open PBS
 - Filas
 - Recursos

- MAUI
 - Despachador de recursos

```

jgo@aitia:~
File Edit View Terminal Tabs Help

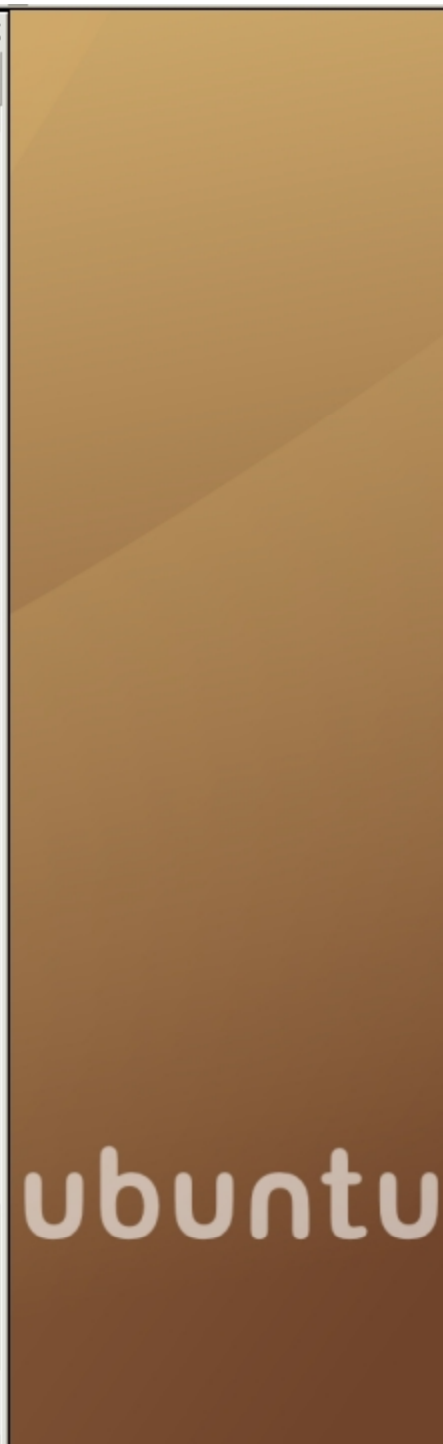
1056          fm      Idle      2  5:00:00:00  Sat Mar 10 09:26:42

Total Jobs: 37  Active Jobs: 23  Idle Jobs: 13  Blocked Jobs: 1
[jgo@aitia ~]$ showq
ACTIVE JOBS-----
JOBNAME          USERNAME      STATE  PROC   REMAINING      STARTTIME
1176             fap          Running  12    10:23:50  Tue Mar 13 14:43:28
1135             mgalvan     Running  36    16:40:25  Tue Mar 13 09:00:03
1134             mgalvan     Running  36    17:27:31  Tue Mar 13 09:47:09
1133             jgo         Running  16    2:06:10:15  Mon Mar 12 22:29:53
1051             scs         Running   2    4:02:30:47  Mon Mar 12 18:50:25
1054             fm          Running   2    4:02:30:47  Mon Mar 12 18:50:25
1053             fm          Running   2    4:02:30:49  Mon Mar 12 18:50:27
1055             fm          Running   2    4:02:30:49  Mon Mar 12 18:50:27
1057             diaz       Running   2    4:02:30:49  Mon Mar 12 18:50:27
1064             fdr        Running   2    4:02:30:49  Mon Mar 12 18:50:27
1077             diaz       Running   2    4:02:30:49  Mon Mar 12 18:50:27
1095             mam        Running   2    4:02:30:49  Mon Mar 12 18:50:27
1096             mam        Running   2    4:02:30:49  Mon Mar 12 18:50:27
1101             fdr        Running   2    4:02:30:49  Mon Mar 12 18:50:27
968             jra        Running   1    4:02:31:14  Mon Mar 12 18:50:52
971             jra        Running   1    4:02:31:14  Mon Mar 12 18:50:52
1050             scs         Running   2    4:02:31:14  Mon Mar 12 18:50:52
1140             cedillo    Running   8    4:08:30:14  Tue Mar 13 00:49:52
1150             cedillo    Running   4    4:16:06:52  Tue Mar 13 08:26:30
1158             fdr        Running   2    4:18:50:48  Tue Mar 13 11:10:26
1165             cedillo    Running   8    4:21:25:04  Tue Mar 13 13:44:42
266             esma       Running   2    40:18:30:47  Mon Mar 12 18:50:25
267             esma       Running   2    40:18:30:49  Mon Mar 12 18:50:27

    23 Active Jobs    150 of 250 Processors Active (60.00%)
                        57 of   90 Nodes Active   (63.33%)

IDLE JOBS-----
JOBNAME          USERNAME      STATE  PROC   WCLIMIT      QUEUETIME
1167             mam         Idle     2    5:00:00:00  Tue Mar 13 13:42:11
1177             fap         Idle    16    12:00:00    Tue Mar 13 14:51:19
1178             fap         Idle    12    12:00:00    Tue Mar 13 14:54:51
1179             jgo         Idle    12    3:00:00:00  Tue Mar 13 15:19:25
1180             jgo         Idle    12    3:00:00:00  Tue Mar 13 15:24:45
1181             jgo         Idle    12    3:00:00:00  Tue Mar 13 15:28:50
1182             jgo         Idle    12    3:00:00:00  Tue Mar 13 15:31:27

```



El LSVP en el 2006

Renovación de infraestructura

- Planta de respaldo
- UPS
- Aire acondicionado
- Procesadores adicionales (36 Woodcrest duales dual core)

Fondos: SEP, CONACYT, UAM



FUTURO

Delta Metropolitana de Cómputo de Alto Rendimiento



Instalación de nodos robustos

En el 2008 la UAM-Iztapalapa instala un cúmulo de servidores con 2160 cores

Un nodo maestro (Sun Microsystems)

2160 núcleos de procesamiento Intel (LUFAC)

Unidad de almacenamiento de 100 TB usables (HP)



Servicios que ofrece el LSVP

- Instalación de cúmulos
- Cursos de admon. en LINUX
- Cursos de instalación de cúmulos
- Tiempo de CPU en aitzaloo
- Almacenamiento de datos

Directorio

Dra. Verónica Medina

Dr. Manuel Aguilar
mac@xanum.uam.mx

Dr. Andrés Cedillo
cedillo@xanum.uam.mx

Dr. Leonardo Dagdug M. en C. Alfonso Martínez
dll@xanum.uam.mx

amm@xanum.uam.mx

Dra. Graciela Roman
grac@xanum.uam.mx

Ing. Juan Carlos Rosas
jcarlos@xanum.uam.mx

Preguntas???