

Introducción

Cálculo de Alto Desempeño

Gonzalo Hernández Oliva
CMM - Universidad de Chile



Modelación de Sistemas Complejos



- Modelos matemáticos de sistemas reales cada vez más complejos. Algunos ejemplos:
 - Earth System Modelling: Modelación climática y atmosférica
 - Planificación Operaciones Mineras
 - Redes de Transporte, Energía y Telecomunicaciones: Algoritmos de optimización para modelos de transporte, energía y telecomunicaciones
 - Secuenciación Genómica: Búsqueda Intensiva en bases de datos de gran tamaño
 - Sistemas de Interacción Local

Modelación de Sistemas Complejos



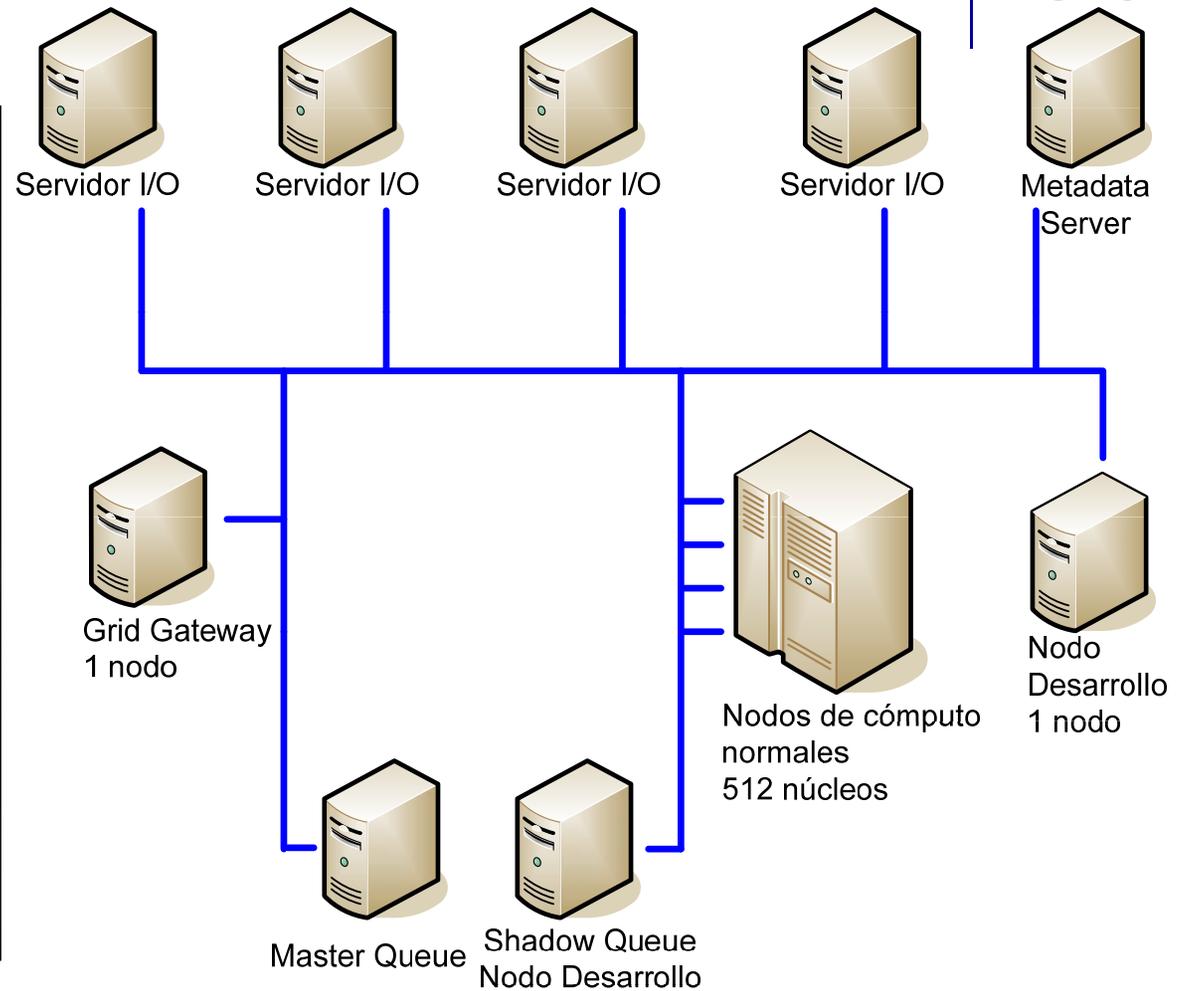
- Para estudiar estos sistemas de debe resolver sistemas de ecuaciones no lineales de gran tamaño:
 - Ecuaciones diferenciales parciales no lineales en grandes dominios
 - Optimización discreta
 - Algoritmos eficientes de búsqueda y matching
 - Sistemas dinámicos complejos de gran tamaño
- Uso intensivo de recursos computacionales: Procesadores, Ram, Red, Storage
- Obtención de soluciones en tiempo real



- 1) Cluster computing support for CMM and Chilean researchers in applied projects such as:
 - Bio-informatics
 - Environmental Modeling
 - Networks Economics
 - Large-scale image processing
 - Mathematical Modeling in Mining and Geo-mechanics
 - Complex systems simulation



HPC Lab: Levque (Relámpago)



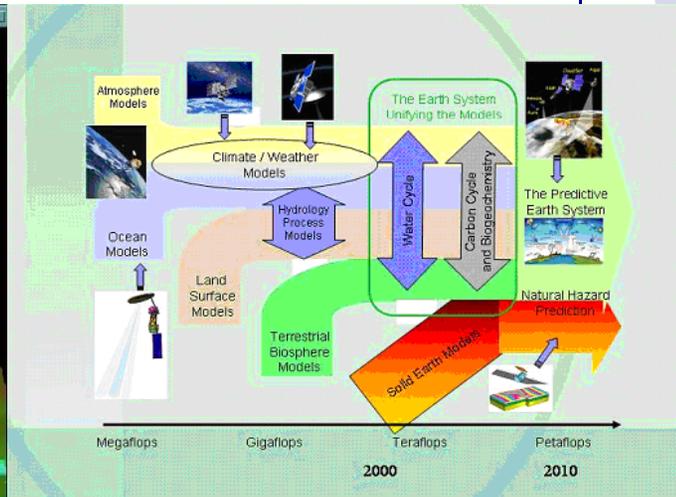
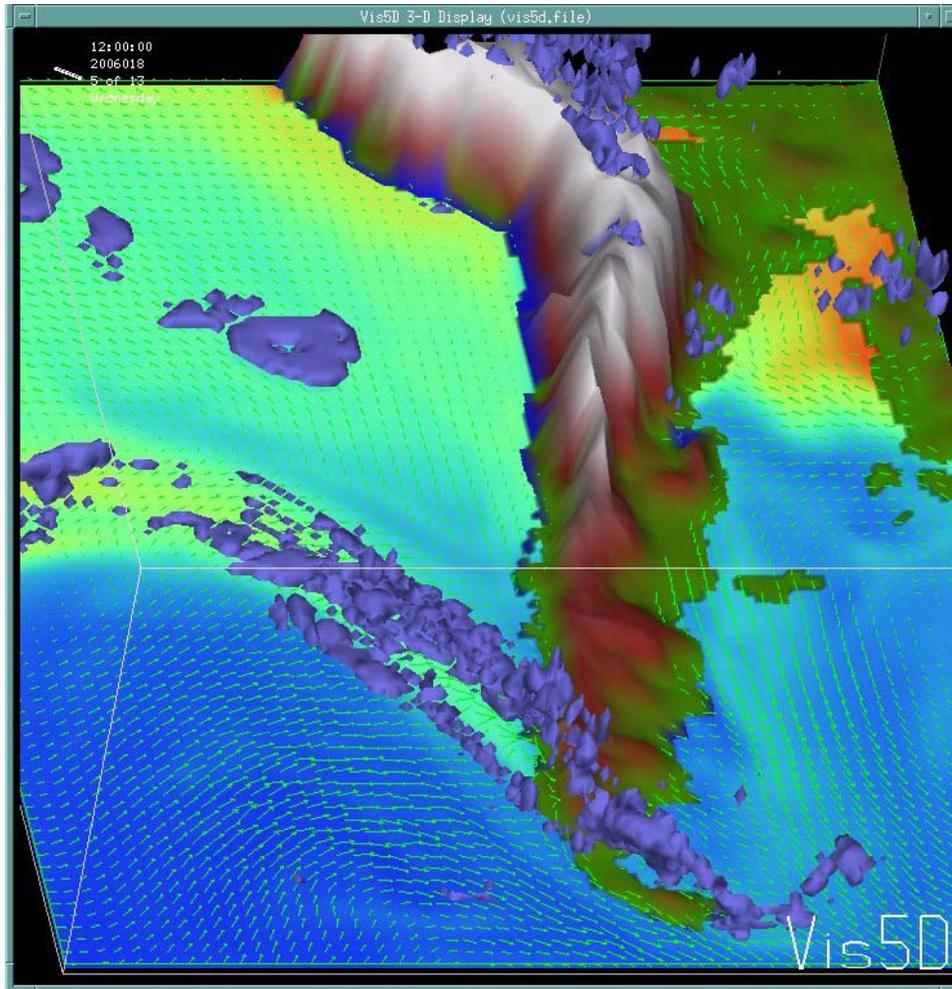


Modelación Climática y Atmosférica

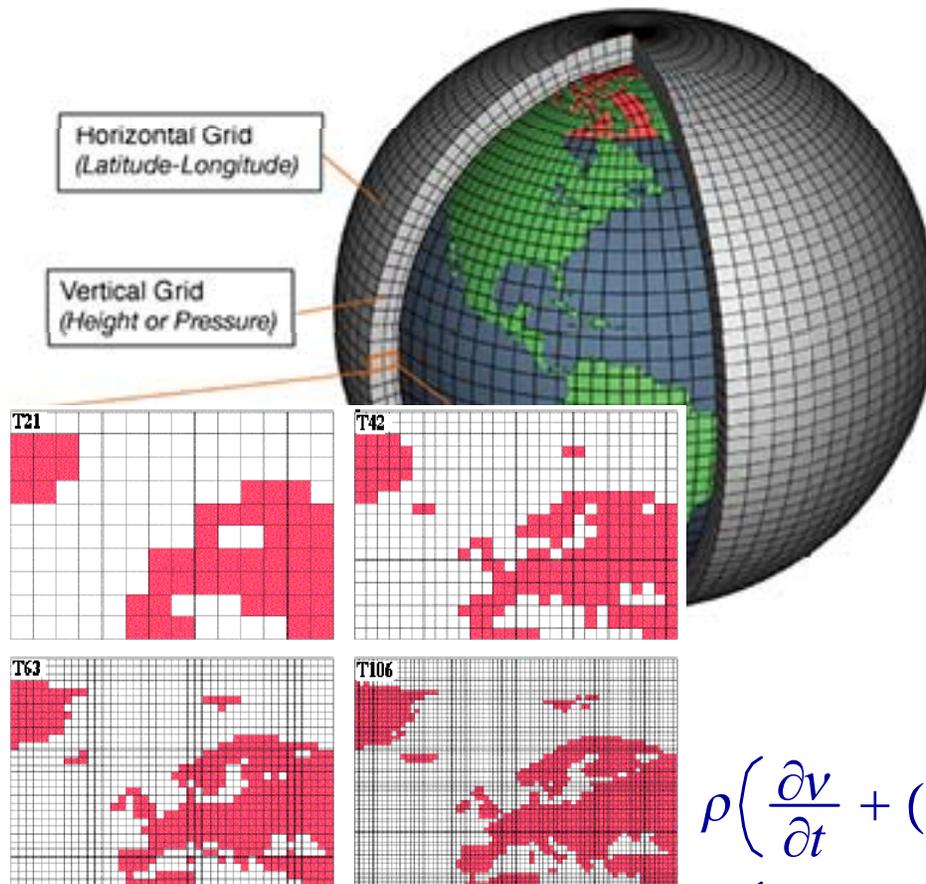


- Modelamiento climático y atmosférico
- Mejora del modelo actual de predicción del clima
- Problemas inversos: Emisiones consistente con la calidad el aire.
- Impacto de la contaminación en el clima de la región
- Red Europea – Latinoamericana para la evaluación del cambio climático: Estudio del efecto de distintos focos de contaminación atmosférica en el clima regional
- Estudio de la calidad del aire en zonas mineras y en ciudades latinoamericanas de gran tamaño

Modelación Climática y Atmosférica



Modelación Climática y Atmosférica Pronóstico: Ecuaciones Primitivas



$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div}(\rho \mathbf{v}) = 0$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho w)}{\partial z} = 0$$

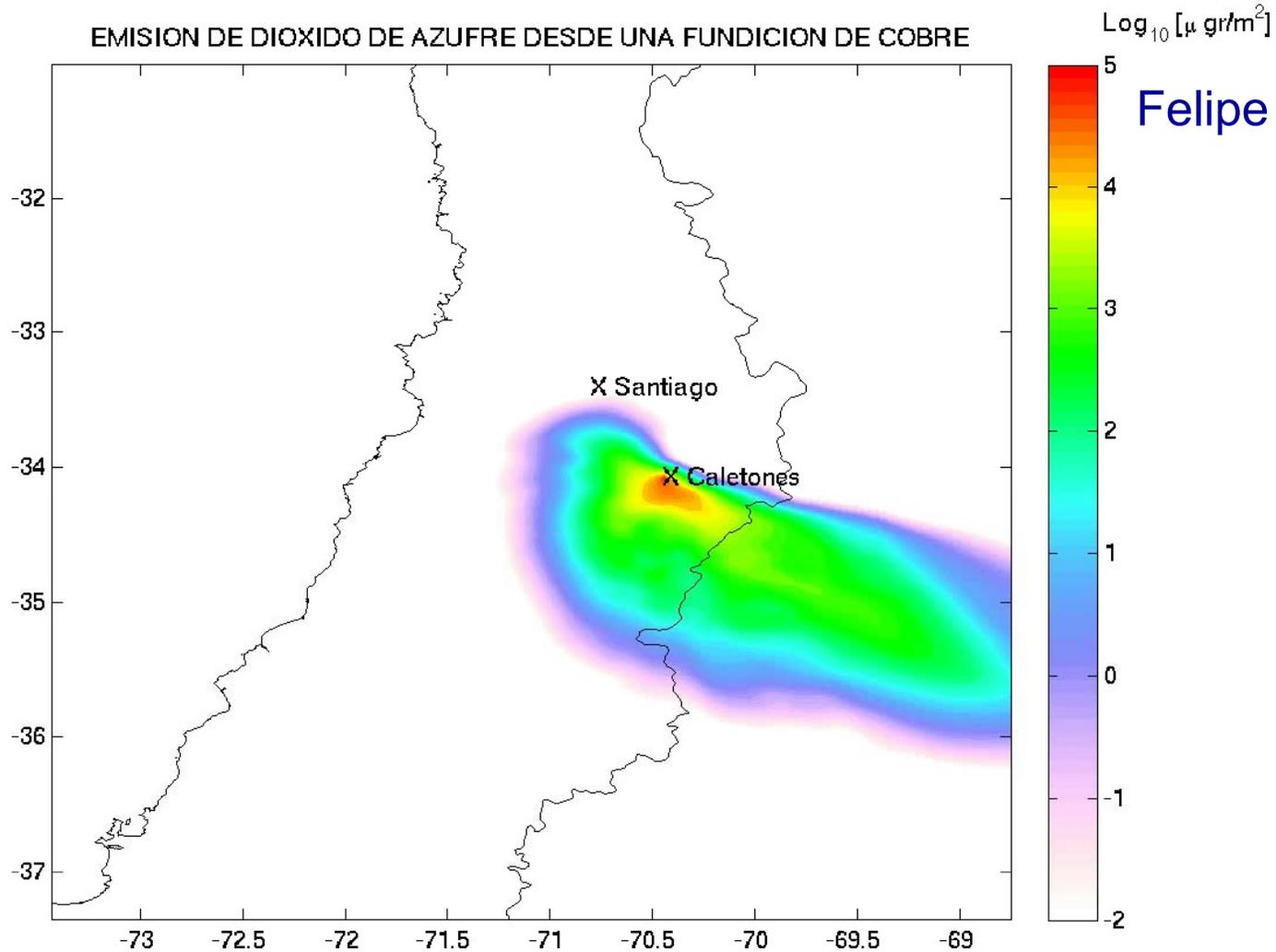
$$\frac{\partial \theta}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) \theta = \tau$$

$$\frac{\partial h}{\partial t} = -(\mathbf{v} \cdot \nabla) h + E - P$$

$$\rho \left(\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v} \right) = F_g + F_p + F_f + F_C$$

$$\rho \left(\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v} \right) = -\rho g \hat{k} - \nabla p - 2\rho \Omega \times \mathbf{v} + F_f$$

Modelación Climática y Atmosférica Pronóstico: Ecuaciones Primitivas



Felipe Macias

Modelación de Sistemas de Transporte

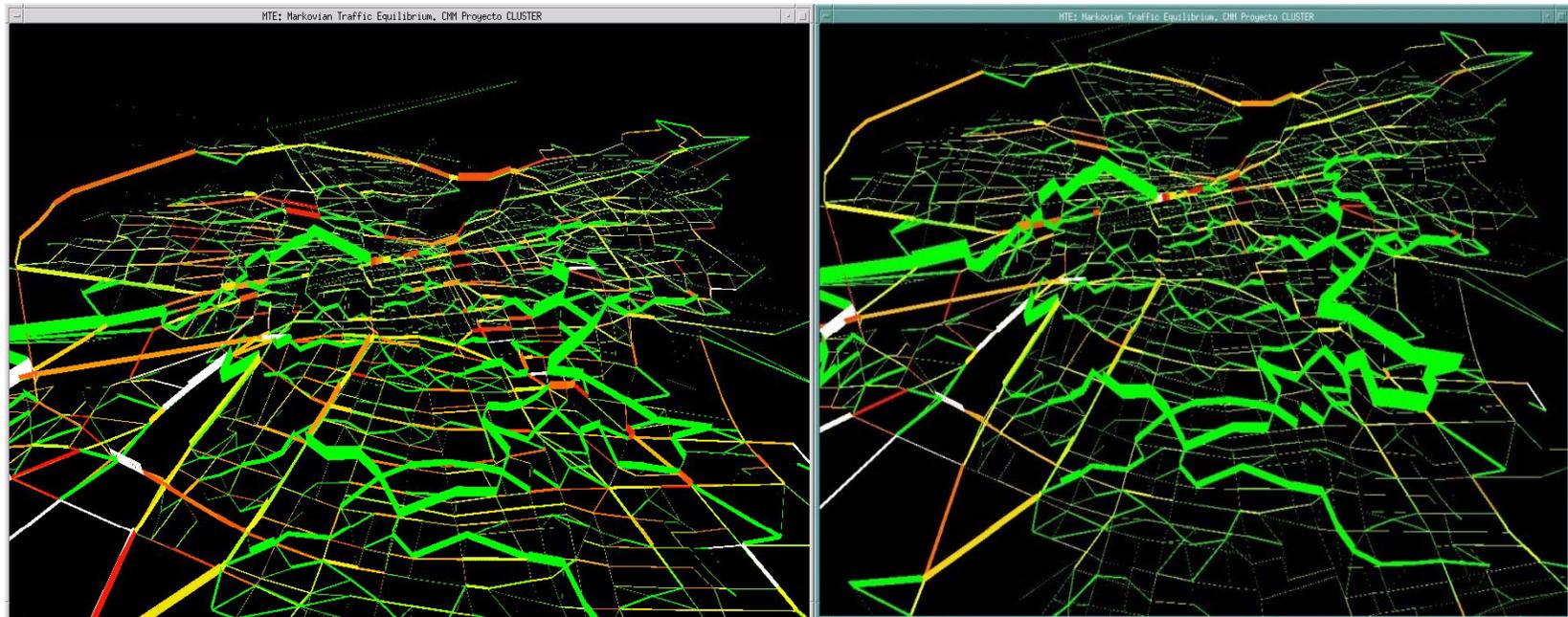


- Cada persona recorre el camino más corto disponible, considerando congestión y la red vial.
- Se formula como un problema de equilibrio estocástico.
- Los modelos estocásticos utilizados en simulación son más realistas pero necesitan más calculo.
- Los modelos estocásticos utilizados en la actualidad no se pueden aplicar para redes de gran tamaño.

Modelación de Sistemas de Transporte



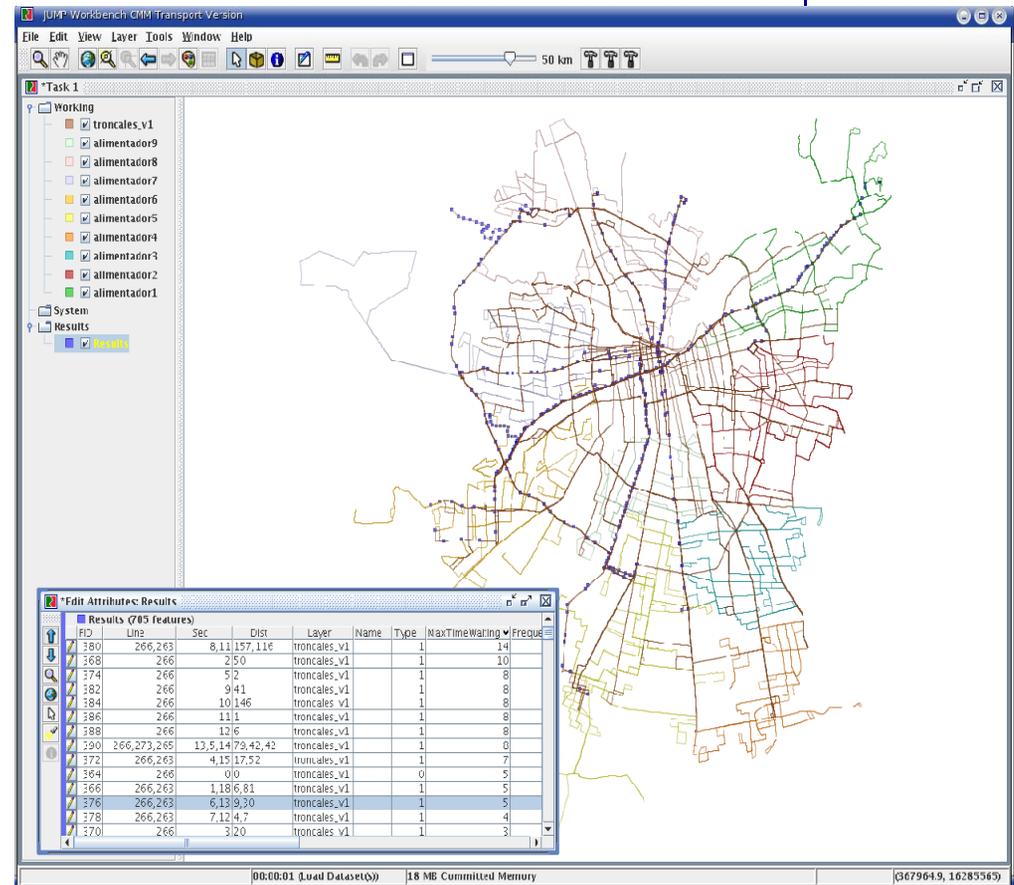
- El programa original fue escrito en Matlab
- Se re – escribió en C utilizando librerías Intel MKL (Math Kernel Library)
- El código se optimizó para la arquitectura Intel Itanium 2.
- Adicionalmente se paralelizó utilizando MPI.



Modelación de Sistemas de Transporte

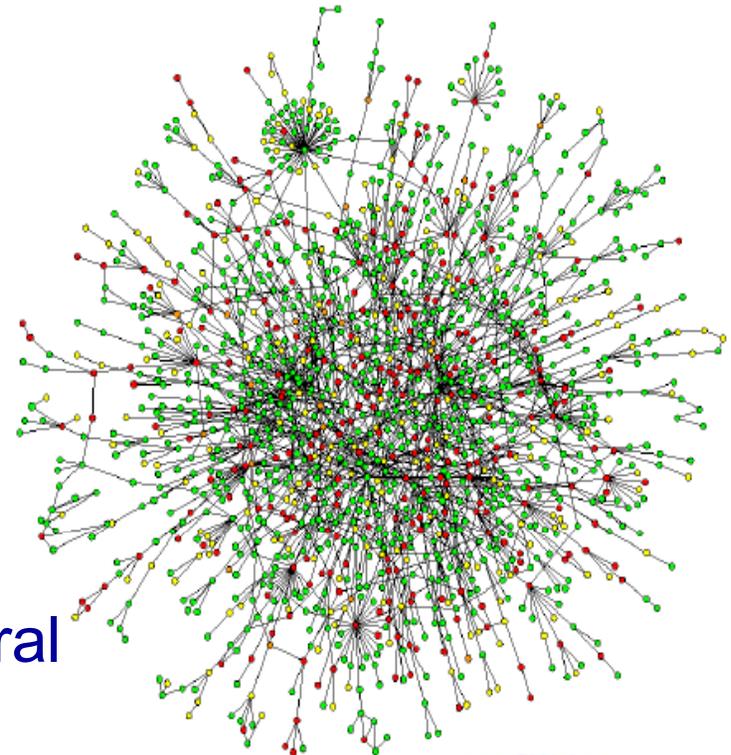


- El motor del modelo (que corre en Syntagma) alimenta en línea un interfaz gráfica que permite simular la red para diferentes parámetros y escenarios.
- Simulación Paralela de Eventos Discretos



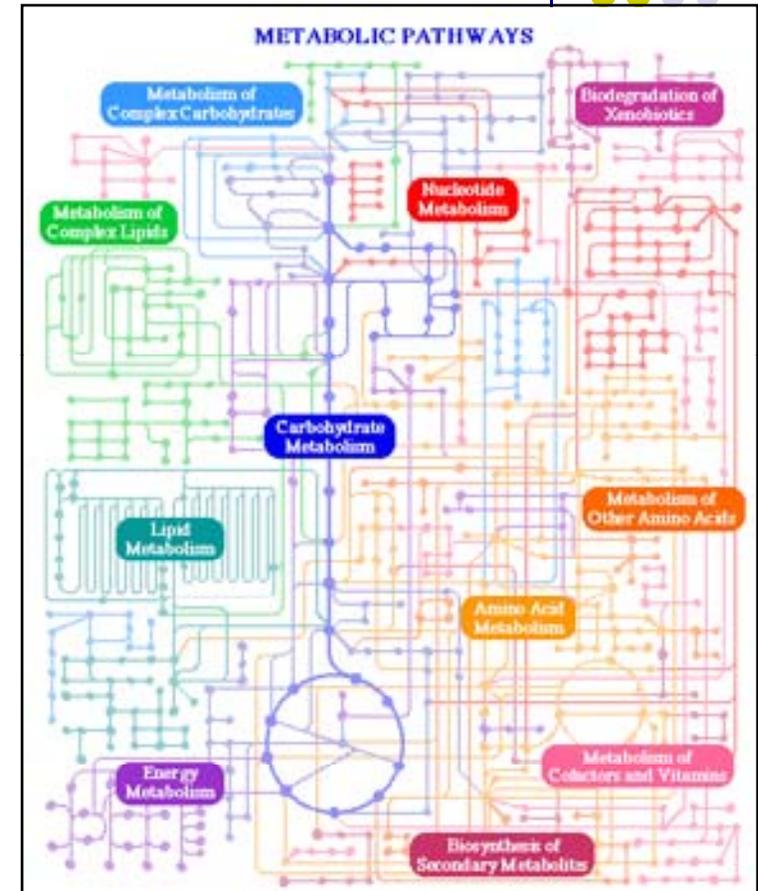


- Laboratorio de Bioinformática y Matemática del GENOMA
 - Material genético de bacterias ligadas a la lixiviación del cobre
 - Métodos matemáticos para la identificación de comunidades microbiales en su ambiente natural
 - Aspectos matemáticos de ensamblado y anotación de genomas bacteriales





- Análisis y simulación de redes metabólicas de regulación genética
- Análisis de microarrays de ADN
- Inmensos volúmenes de datos
- Paralelización de:
 - Determinación y caracterización de genes
 - Modelos biológicos
 - BLAST y matching de patrones





Proyecto MORPHEX

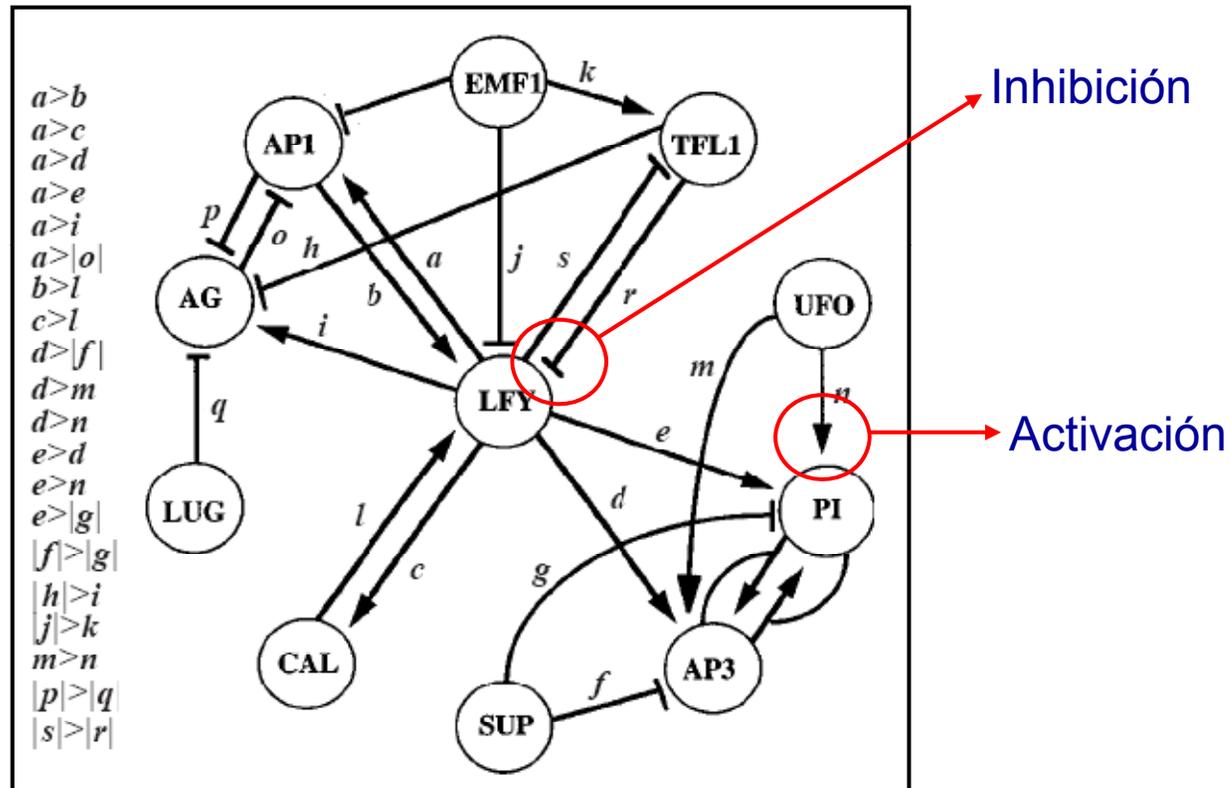
Redes Booleanas en Biología



- El objetivo de este proyecto es modelar y simular redes de regulación genética que intervienen en la morfogénesis de plantas y animales.
- De esta forma se podrá comprender mejor su estructura y dinámica
- Una de estas plantas es la *Arabidopsis Thaliana*.
- En la red de regulación genética, las interacciones de los genes y proteínas serán modeladas como redes booleanas de activación e inhibición con diferentes tipos de dinámicas.



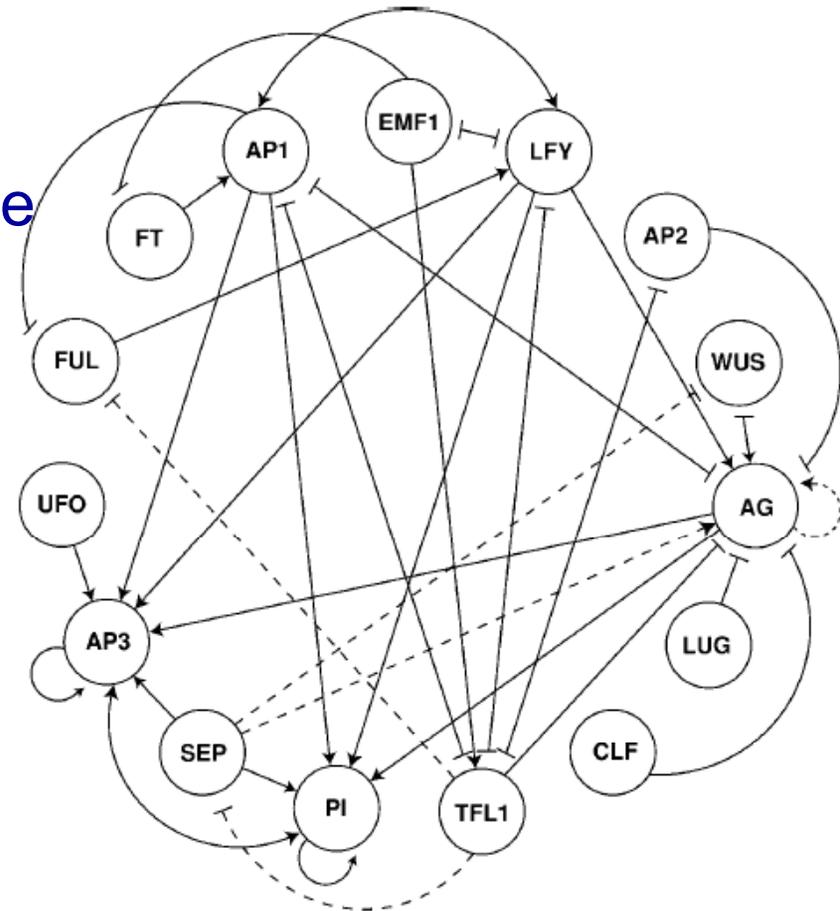
- Primer modelo:



Dynamics of the Genetic Regulatory Network for Arabidopsis Thaliana Flower Morphogenesis, L. Mendoza, E. Alvarez-Bulla, J. T. Biology, V. 193, pp. 307–319, 1998.



- Arquitectura de la red de regulación genética para la diferenciación de las células de las flores de la Arabidopsis



A Gene Regulatory Network Model for Cell-Fate Determination during Arabidopsis thaliana Flower Development, The Plant Cell, Vol. 16, 2923–2939, 2004.

Proyecto MORPHEX

Redes Booleanas en Biología



- La librería *Boolean Networks Numerical Dynamics*, fue diseñada para estudiar computacionalmente la dinámica de redes booleanas.

$$f(x) = \left(f_i(x) \right)_{i=1}^n \Rightarrow f_i(x) = \begin{cases} 1 & \text{if } \sum_{j=1}^n w_{ij} x_j - \theta_i \geq 0 \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases}$$

- Implementa diferentes esquemas deterministas de actualización:

1	1	1	1	←	Síncrono/Paralelo	} Modos de iteración en bloques
1	2	3	4	←	Asíncrono/Secuencial	
1	1	2	2	←	Dos bloques: 1,2 ; 3,4	
1	2	2	3	←	Tres bloques: 1 ; 2,3 ; 4	



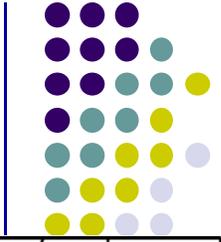
Proyecto MORPHEX

Redes Booleanas en Biología



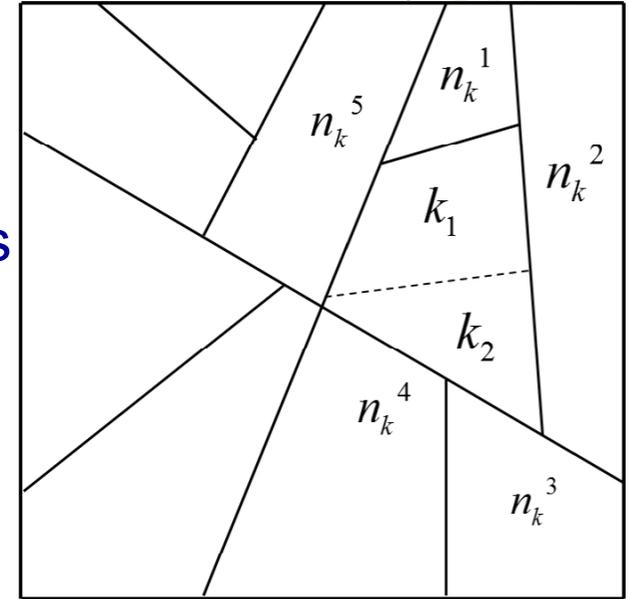
- Boolean Networks Numerical Dynamics:
 - Para un bloque de iteración dado calcula todos los atractores en el hipercubo.
 - Para todos los bloques de iteración calcula todos los atractores en el hipercubo.
 - Visualiza la dinámica para una condición inicial dada.
 - Calcula algunas estadísticas de la dinámica
- La librería se programó en Matlab[®] y utiliza algunos comandos del *Random Boolean Network Toolbox*:
Christian Schwarzer, Logic System Laboratory
Swiss Federal Institute of Technology in Lausanne

Fragmentation Models with Neighborhood Interaction



Definición del modelo:

- 1) Material y fallas puntuales
- 2) Fuerzas de fractura generadas por vecinos
- 3) Regla fragmentación n -aria
 - Fragmentos generados por fuerzas considerando fallas puntuales
 - Planos de corte perpendiculares a fuerza mayor y tangentes a fallas
 - Proceso auto-similar
- 4) Conservación de masa
- 5) Detención: tamaño de fragmento mínimo, probabilidad

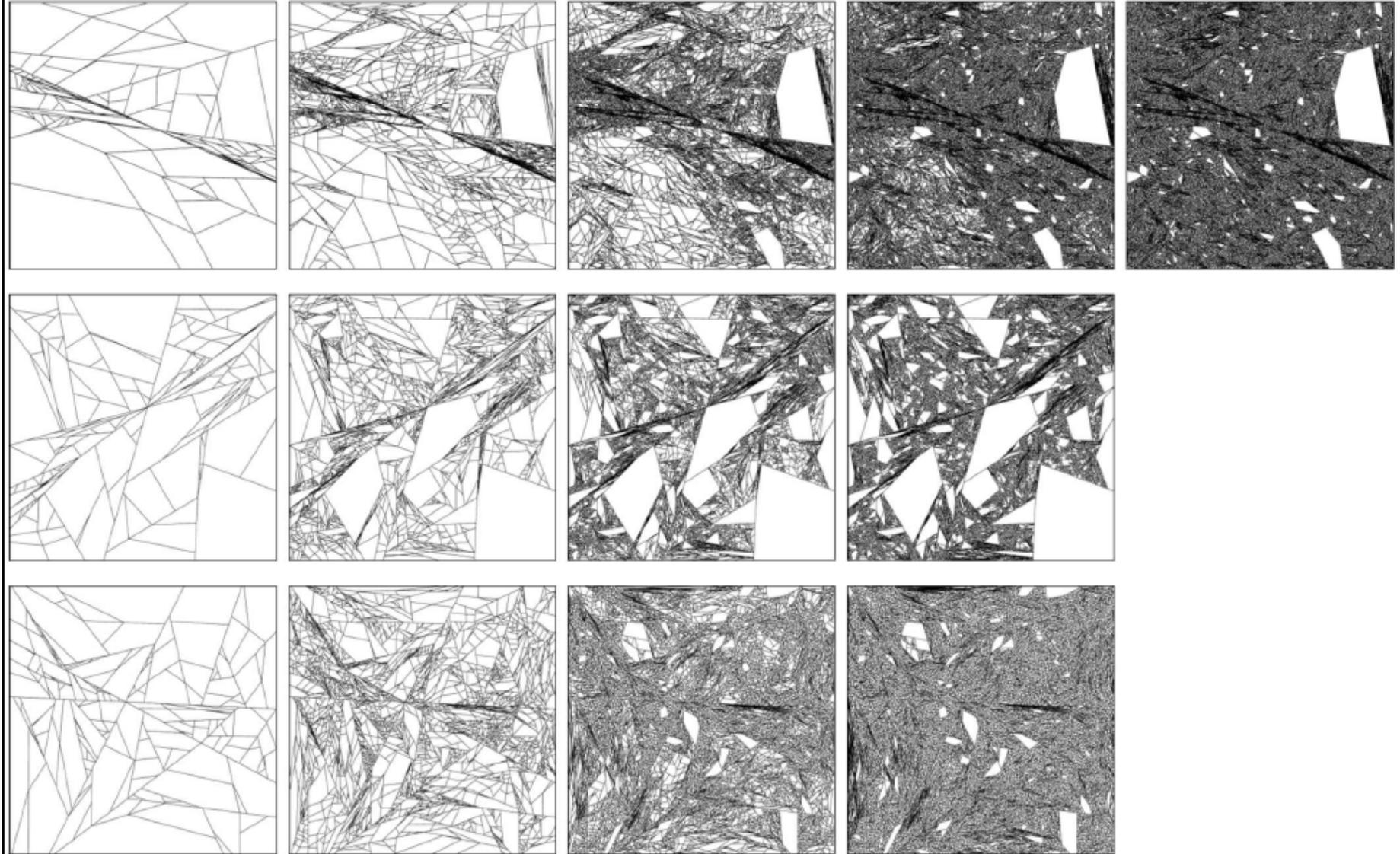


$$f_{i_k, k} \propto \int_{\partial B_{i_k, k}} \underline{\underline{\sigma}} \vec{n} = \text{length}(\partial B_{i_k, k})$$



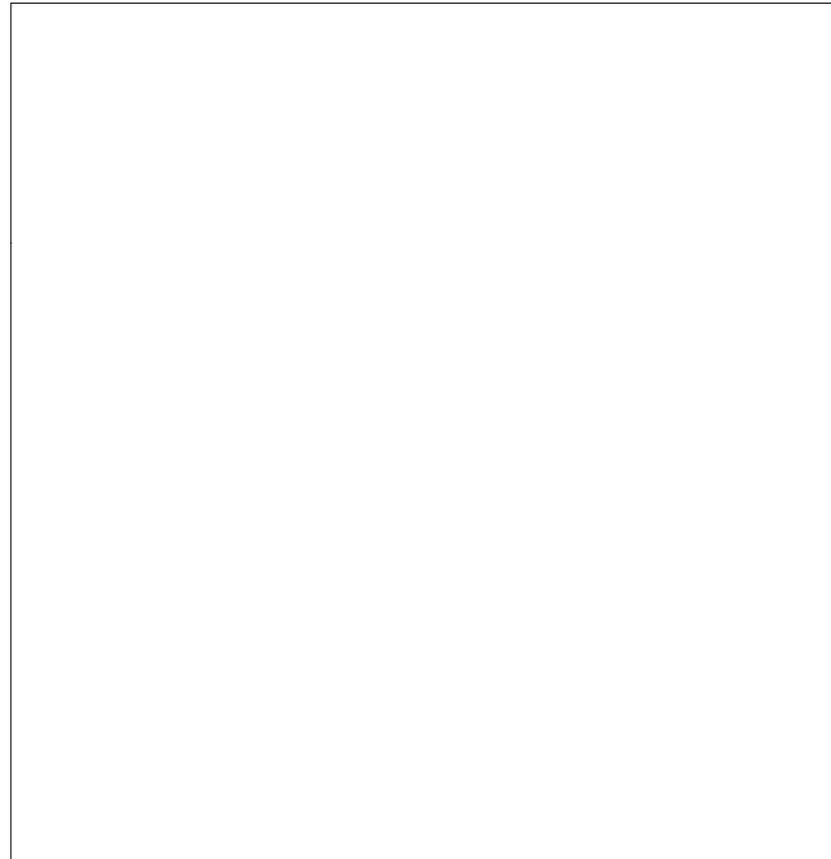
CENTRO DE
MODELAMIENTO
MATEMATICO

Fragmentation Models with Neighborhood Interaction

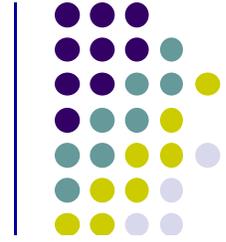




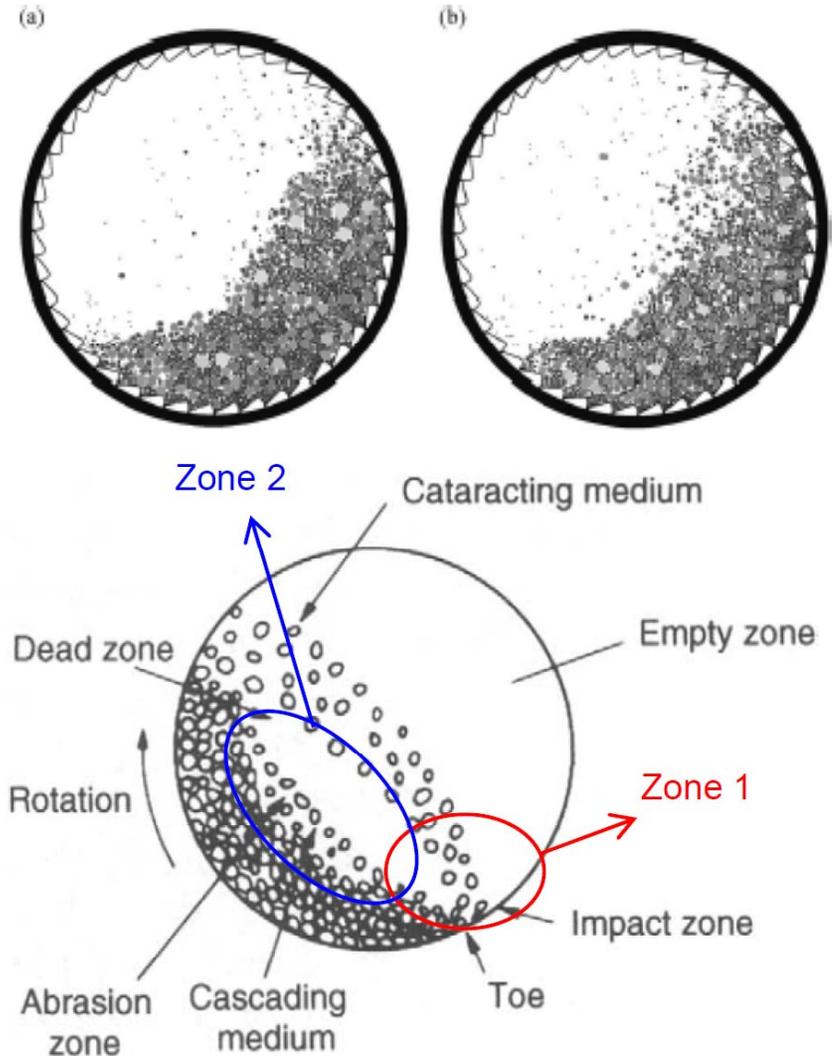
Fragmentation Models with Neighborhood Interaction



Fragmentation Models with Neighborhood Interaction



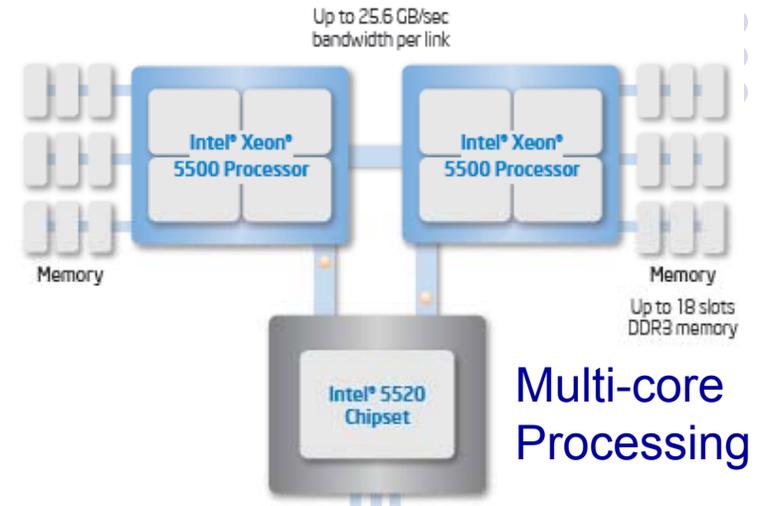
- SAG (Semi-Autogenous Grinding): Kind of mill that utilize steel balls for rocks grinding.
- SAG mil simulation goals:
 - Decrease the amount of operational energy used.
 - Increase the duration of plates and lifters.
 - Compute the fragment size distribution.
 - Process visualizations





2) Training in Parallel Computing:

- Cluster computing
- Memory management optimization for parallel multi-core hybrid programs
- Parallel programming: MPI & OpenMP libraries
- GPU Computing
- Performance evaluation of large scale simulations



Intel Multi-core Roadmap				
Platform	2005	2006	2007	Future
Itanium® processor	Itanium® 2 Processor	Montecito	Montvale	Tukwila Poulson Dimona
MP Server	Intel® Xeon® processor MP	Intel® Xeon® processor MP	Tulsa	Tigerton Dunnington
DP Server / WS	Intel® Xeon® Processor w/ 2MB cache	Intel® Xeon® processor Dempsey Woodcrest Sossaman	Clovertown	Future
UP Server / WS	Pentium® Processor Extreme Edition	Pentium® D (Presler)	Conroe	Kentsfield Future
Desktop Client	Pentium® D			
Mobile Client	Pentium® M processor	Intel Core™ Duo	Merom	Future

today

All products and dates are preliminary and subject to change without notice. Refer to "fact sheet" for specific product timings.

Single core Multi-core (>=2 cores) Multi-core (>=4 cores)





HPC Lab: Training – 03/08



- 15:00 hrs. - 15:45 hrs.: Arquitectura del Cluster Levque, Claudio Baeza, HPC Laboratory, CMM.
- 15:45 hrs. - 16:30 hrs.: Modelos de Programación Paralela, Gonzalo Hernandez, HPC Laboratory, CMM.
- 17:00 hrs. - 18:00 hrs.: Librería MPI, Gonzalo Hernandez, HPC Laboratory, CMM.
- 18:00 hrs. - 18:45 hrs.: Librería ScaLAPACK, Oscar Peredo, Doctoral Program University of Calaluña & Barcelona Supercomputing Center.



HPC Lab: Training – GPU Day



- 10:00-13:00 hrs.: Tutorial Practico de Programación CPU/GPU, Felipe Cruz, PhD (C), Dep. Mathematics, University of Bristol.
- 15:00 hrs.: Supercomputación TESLA, Arturo Allel, NVIDIA.
- 15:30 hrs.: Vision INTEL para HPC basado en CPU/GPU, Agustin March, Lab. Manager at INTEL Software Argentina.
- 16:30 hrs.: Toward GPU-accelerated meshfree flow simulation, Lorena Barba, Mechanical Engineering Dep., Boston University.
- 17:30 - 18:30 hrs.: 42 TFlops Hierarchical N-body Simulations on GPUs with Applications in both Astrophysics and Turbulence, Rio Yokota, Department of Mathematics, University of Bristol.



HPC Lab: Training

- CLGrid5: Workshop of the Chilean Grid Initiative, UTFSM, Valparaíso.



CMM - G. Hernandez

MA-43C Introducción



ORGANIZA

RUSPICIA



CENTRO DE
MODELAMIENTO
MATEMÁTICO

HPC Lab: Training - CLGrid5

USM, 29/09 - 03/10, 2008.



Hora	Lunes 29/09	Martes 30/09	Miércoles 01/10	Jueves 02/10	Viernes 03/10
08:30 09:00	Inscripción	Inscripción			
09:00 10:00	Multicore Architecture (C. Trinitis)	Multicore Architecture (C. Trinitis)	Multicore Architecture (C. Trinitis)	Multicore Performance Evaluation (M. Gerndt)	GRIFCOLET, un marco software basado en servicios grid para el desarrollo de herramientas de aprendizaje colaborativo (S. Guinez-Molinos, U. de Talca) Procesamiento paralelo de imágenes sobre PlayStation3 bajo Linux (P. Bj. Bro, U. de Talca)
10:00 11:00	Multicore Programming (G. Hernández)	Multicore Programming (G. Hernández)	Multicore Programming (G. Hernández)	Intel Math Kernel Library (A. Avila)	HPC aplicado a las ciencias ambientales en el CMM (R. Delgado, CMM) Una propuesta de arquitectura Grid para la iniciativa de grid Chilena CLGrid (C. Baeza, CMM)
11:00 11:30	Coffee Break	Ceremonia de Inauguración Coffee Break	Coffee Break	Coffee Break	Coffee Break
11:30 12:30	Multicore Performance Evaluation (M. Gerndt)	Multicore Performance Evaluation (M. Gerndt)	Intel Math Kernel Library (A. Avila)	Intel Math Kernel Library (A. Avila)	Experiencias de Unicore y desarrollo de GridBeans (J. P. Gil y J. Abarzúa, CEMCC UFRO) Raquel Pezoa (CIT HPC, USM) Sistema de Información para la Grid del Experimento ATLAS, en CERN

F



CENTRO DE
MODELAMIENTO
MATEMATICO

HPC Lab: Training - CLGrid5 USM, 29/09 - 03/10, 2008.



Hora	Lunes 29/09	Martes 30/09	Miércoles 01/10	Jueves 02/10	Viernes 03/10
12:30 14:30	Almuerzo	Almuerzo	Almuerzo	Almuerzo	Almuerzo
14:30 16:00	Laboratorio	Laboratorio	Laboratorio	Laboratorio	HPC Performance Benchmarks (A. March, Intel) Herramientas para verificación y desarrollo de clusters (R. Garabato, Intel)
16:00 16:30	Coffee Break	Coffee Break	Coffee Break	Coffee Break	Coffee Break
16:30 18:00	Laboratorio	Laboratorio	Laboratorio	Laboratorio	SGI: Enfoque de Solución para Implementación de Centros de Cómputo Multi-Propósito (J.M. Añasco, Omega Systems)



HPC Lab: Training - CLGrid4

UFRO, Temuco, March 19 - 22, 2007.



Miércoles 21		Jueves 22	
9:00	Comunicaciones Técnicas	9:00	Comunicaciones Técnicas
10:00	<i>café</i>	10:00	<i>café</i>
10:30	Workshop: "Grid Application Development Tools (1)" Dr. Michael Gemdt	10:30	Workshop: "Grid Application Development Tools (2)" Dr. Michael Gemdt
12:00	Workshop: "Taller de MPI (1)" Dr. Gonzalo Hernández	12:00	Workshop: "Taller de MPI (2)" Dr. Gonzalo Hernández
13:30	<i>Almuerzo</i>	13:30	<i>Almuerzo</i>
15:00	Conferencia: "An Application Service Provider for Finite Element Analysis" Dr. Marco Bittencourt	15:00	Conferencia Plenaria
16:00	Videoconferencia: "Star-P: Un puente entre Lenguajes de Alto Nivel y Computación Paralela" Mg. Carlos Rojas	16:00	Comunicaciones Técnicas
		17:00	<i>café</i>
17:30	<i>café</i>	17:30	Reunión de Coordinación CL-Grid
18:00	Comunicaciones Técnicas		

HPC Lab: Training - CLGrid 1,2,3



- CLGrid3: UCN, Antofagasta, November 23 & 24, 2006.
- CLGrid2: CMM, Santiago, May 17 & 18, 2006.
- CLGrid1: CMM, Santiago, January 05 & 06, 2006.





HPC Lab: Participation in Conferences



- HPC2010 Latam: Latin American HPC Symposium, September 1 y 2, Buenos Aires, Argentina.
- HPC2009 Latam: Latin American HPC Symposium, August 26 & 27, Mar del Plata, Argentina.
- CLCAR 2009: Latin American Conference on HPC, September 21 – 25, Merida, Venezuela.
- XIII WSDP: Workshop on Parallel and Distributed Systems, November 9 – 14, Santiago, Chile.



HPC Lab: Training – DIM



Univ. of Chile, Dep. of Mathematical Engineering:

- MA-43B: Numerical Analysis
 - Matlab Laboratory
 - Programming in C
 - Mathematical Models of Complex Systems
- MA-43C: High Performance Computing
 - Supercomputing and Multi-core Architecture
 - Parallel Programming: Shared and Distributed Memory (OpenMP, MPI, CUDA)
 - Efficient Implementation of Algorithms
 - HPC Programming Laboratory



3) Grid Computing:

CLGrid allow the sharing of computer resources available in the academic institutions. The members of CLGrid have carried out the following activities:

- Formation of international scientific cooperation networks.
- Participation in ALFA Projects of the European Community: SCAT & EELA.
- Organization of six CLGrid workshops.
- Implementation of different applications on CLGrid.





CENTRO DE
MODELAMIENTO
MATEMATICO

HPC Lab: Scientific Cooperation Net



Type of Cooperation	Institutions
Performance Optimization for Multi-core Simulations of Complex Systems	Tec. University of Munich, Ins. Informatics USM, Informatics Department UCHILE, Center for Mathematical Engineering
Characterization of the alea, impacts over the works and mitigation of rocky natural risk	Lab. Central des Ponts et Chaussées (LCPC) USM, Informatics Department UCHILE, Center for Mathematical Engineering
SCAT Scientific Computing and Advanced Training	This project falls under ALFA projects for Scientific and Technical training, and thus has an important mobility component of students in their last year of degree and graduates.
EELA: E-Infrastructure shared between Europe and Latin America	Using pilot resources available in some centers of Europe and Latin America, EELA will create a human network dedicated to work in Scientific Computing Grids, e-Science and e-Infrastructure



CENTRO DE
MODELAMIENTO
MATEMATICO

HPC Lab: Scientific Cooperation Net



Type of Cooperation	Institutions
Chilean Grid Initiative CLGRID	UCHILE, Center for Mathematical Modeling REUNA UCN, Departament of Informatics UDEC, Innovation Center in Mathematical Engineering UFRO, Departament of Mathematical Engineering U. de la Serena, CEAZA USM, Departament of Informatics Dirección Meteorológica de Chile Universidad Adolfo Ibañez Universidad Nacional Andrés Bello Universidad Austral de Chile Universidad del Bío Bío Universidad de Santiago Universidad de Valparaíso

Descripción



- El objetivo de este curso es realizar una introducción al Cálculo de Alto Desempeño (High Performance Computing) como una herramienta para modelar y simular sistemas complejos que aparecen en Ciencia e Ingeniería. Se estudiarán los siguientes temas:
 - Supercomputación y Arquitecturas Paralelas
 - Programación Paralela: MPI, OpenMP y GPU.
 - Implementación eficiente de algoritmos para estudio de sistemas complejos.
 - Tópicos de Computación Paralela.

Descripción



La metodología incluirá las siguientes actividades:

- Estudiar diferentes sistemas complejos que requieran uso intensivo de recursos computacionales.
- Presentar la evolución de los supercomputadores desde 1985 a la fecha, incluyendo Grid Computing.
- Describir las arquitecturas paralelas actuales.
- Aprender diferentes modelos de programación paralela utilizando las librerías MPI, OpenMP y CUDA.
- Implementación de programas en clusters de computadores.
- Realizar una introducción a los métodos y técnicas de la Computación Paralela



1) Laboratorios HPC: 50%

- L1: Introducción al Lenguaje C - Programación Clusters
- L2: Programación Paralela de Memoria Distribuida
- L3: Programación Paralela de Memoria Compartida
- L4: Programación Paralela GPU

2) Proyecto HPC: 50%

Estudiar numéricamente un sistema complejo aplicando herramientas de HPC.



1) Sistemas Complejos

- Modelación sistemas complejos @ CMM
- Modelación y simulación de redes de regulación genómica
- Problemas Optimización Combinatorial:
 - Bisección del grafo
 - TSP, VRP
 - University timetabling
- Autómata celulares: Extremal rules, OFC
- Modelos de fragmentación
- Modelo económico de telefonía celular



- 2) Supercomputación y arquitecturas multi-core
 - Supercomputadores y su evolución
 - Supercomputadores actuales: Evolución del poder de cálculo (estadísticas)
 - Supercomputación de bajo costo: Clusters (descripción arquitectura y software de Levque)
 - Programación paralela en clusters
 - Grid Computing
 - Arquitecturas multi-core actuales



3) Programación Paralela

- Modelos de Programación Paralela
- Implementación Eficiente de Algoritmos
- Programación de Memoria Distribuida:
Librería MPI
- Programación de Memoria Compartida:
Librería OpenMP
- Utilización de Profilers
- Programación en Clusters CPU/GPU:
Librerías CUDA y OpenCL



4) Tópicos de Computación Paralela

- Complejidad computacional: Modelo RAM + PRAM
- Metodología para diseñar programas paralelos
- Taxonomía de Flynt
- Speed-Up y eficiencia: Modelos de predicción de performance: Amdahl, Gustafson – Barsis, Karp – Flatt, Iso-eficiencia
- Escalabilidad: Problema, procesadores, red
- Aplicaciones



- 1) Pacheco, P., Parallel Programming with MPI,, Morgan Kaufmann, 1997.
- 2) Quinn, M.J., Parallel Programming in C with MPI and OpenMP,, McGraw-Hill, 2004.
- 3) Dongarra, J., I. Foster (Eds.), The Sourcebook of Parallel Computing, Morgan Kaufmann, 2002.
- 4) Hoffmann, K.H., A. Meyer Parallel Algorithms and Cluster Computing: Implementations, Algorithms and Applications, Springer, 2006.
- 5) Scott, L., T. Clark, B. Bagheri Scientific Parallel Computing, Princeton University Press, 2005.