

www.bsc.es



Barcelona Supercomputing Center
Centro Nacional de Supercomputación

Recursos de Supercomputación en BSC-CNS, RES & PRACE 2013



Málaga, 28 de junio de 2013





BSC-CNS: Constitución y atribuciones

« Es el Centro Nacional de Supercomputación,

- Consorcio constituido por:



MINISTERIO DE ECONOMÍA Y COMPETITIVIDAD



Generalitat de Catalunya
Departament d'Economia i Coneixement



UNIVERSITAT POLITÈCNICA DE CATALUNYA
BARCELONATECH

- Coordinador de la **Red Española de Supercomputación**.
- Centro estatal miembro del proyecto **PRACE (PaRtnership for Advanced Computing in Europe)**.

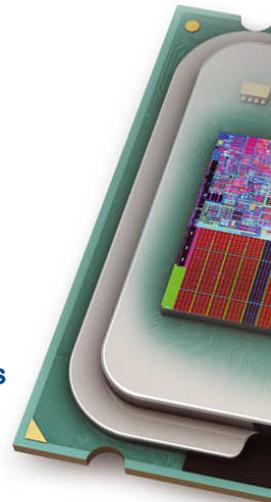
BSC-CNS: Misión

« La misión del BSC-CNS es **investigar, desarrollar y gestionar la tecnología** para facilitar el **progreso científico**.

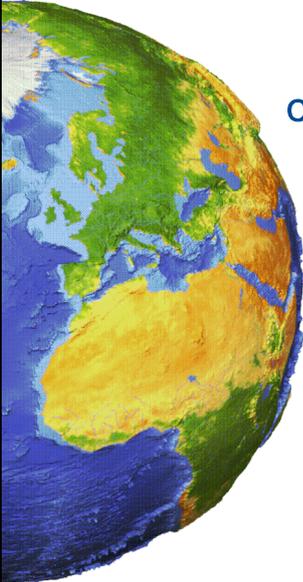
- Proporciona **soporte de la supercomputación para la investigación externa** al BSC-CNS.
- Realiza I+D en **Ciencias de la Computación, Ciencias de la Vida y Ciencias de la Tierra**.

BSC-CNS: Dpt. Ciencias de la Computación

Arquitectura de computadores e interfaz de SO
Arquitecturas de computación heterogéneas
Arquitectura para computadores paralelos
Herramientas de análisis de rendimiento
Modelos de programación
Sistemas y clusters Grid
Sistemas autónomos y plataformas de e-Business
Sistemas de almacenamiento
Arquitectura de redes



BSC-CNS: Dpt. Ciencias de la Tierra



CALIOPE Sistema de Pronóstico de la CALidad del aire Operacional Para España (y Europa)

Modelado Atmosférico y Predicción climática

- Modelado global de polvo mineral
- Transporte de polvo mineral
- Transporte de ceniza volcánica
- Estudios de impacto ambiental

7

BSC-CNS: Dpt. Ciencias de la Vida

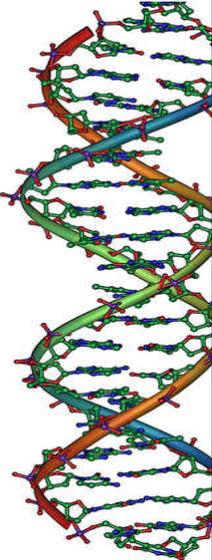
Bases estructurales de interacción proteína-proteína

Análisis de genomas y redes para modelar enfermedades, sistemas y evolución de organismos

Modelado atómico (y electrónico) de bioquímica y biofísica de proteínas

Diseño de fármacos

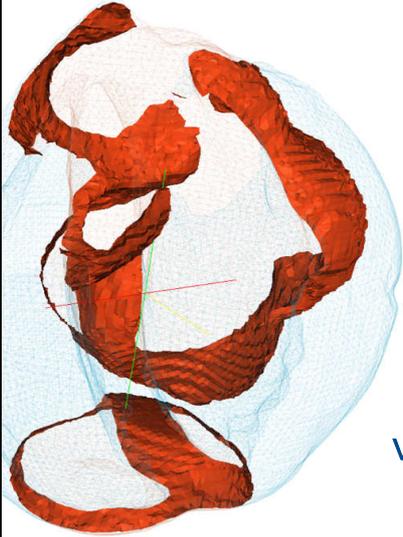
Modelado micro y mesoscópico de macromoléculas



 **Barcelona Supercomputing Center**
Centro Nacional de Supercomputación

8

BSC-CNS: Dpt. Aplicaciones para Ciencia e Ingeniería



- Dinámica de fluidos computacional
- Mecánica de sólidos computacional
- Representación gráfica de seísmos
- Simulaciones sociales
- Flujos geofísicos
- Paralelización de código
- Optimización de código
- Visualización y post-procesado de datos

 **Barcelona Supercomputing Center**
Centro Nacional de Supercomputación

9

BSC-CNS Microsoft Centro de Investigación



- ⌋ Inauguración del centro en 2008
- ⌋ Centrado en el desarrollo de aplicaciones con Memoria Transaccional, herramientas para facilitar el desarrollo de dichas aplicaciones y la propuesta de implementaciones escalables de Memoria Transaccional Híbrida.

Además:

- ⌋ Investigación en hardware eficiente para el soporte de sistemas de ejecución de nuevos lenguajes de programación, a la vez que su sincronización y fiabilidad, Procesadores Vectoriales de bajo consumo y OmpSs@Barrelfish.

 **Barcelona Supercomputing Center**
Centro Nacional de Supercomputación

10

Colaboración Intel-BSC Exascale Lab

« Inicio de actividades en 2011



« Objetivo: Enfrentarse a los retos del camino hacia Exascale

Eficiencia, variabilidad, memoria, escalado (conurrencia) y complejidad respecto a jerarquía y heterogeneidad.

« Principales líneas de investigación:

- OmpSs: modelo de programación para algoritmos y sistemas de ejecución responsables de asignarse a los recursos.
- Desarrollo de herramientas de análisis: monitorización y modelización del rendimiento potencia, predicción de estrategias para distribución de tareas.
- Implementación de aplicaciones y algoritmos que contemplen la asincronía y la complejidad (MPI híbrido/OmpSs).

BSC-CNS Centro de Excelencia CUDA

« Desde 2010 es Centro de Investigación CUDA

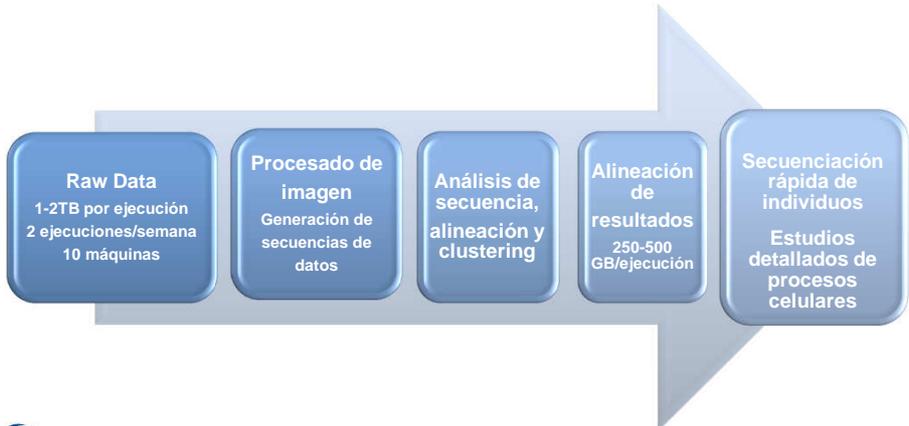
« Desde 2011 reconocido como Centros de Excelencia NVIDIA.

- Modelos de programación: entorno de ejecución GMAC (Global Memory for Accelerators) , OmpSs para clusters híbrido CPU/GPU y auto-vectorización.
- Desarrollo de aplicaciones
- Crear programa de educación y escuela de verano para formación en CUDA, OpenCL y starSs.



BSC-CNS Soporte a CNAG

« Soporte a nivel de HPC, IT y datos para la secuenciación de nueva generación.



The flowchart consists of five blue rounded rectangular boxes arranged horizontally, connected by a large grey arrow pointing to the right. Each box contains text describing a step in the process:

- Raw Data**
1-2TB por ejecución
2 ejecuciones/semana
10 máquinas
- Procesado de imagen**
Generación de secuencias de datos
- Análisis de secuencia, alineación y clustering**
- Alineación de resultados**
250-500 GB/ejecución
- Secuenciación rápida de individuos**
Estudios detallados de procesos celulares



13



RED ESPAÑOLA DE SUPERCOMPUTACIÓN

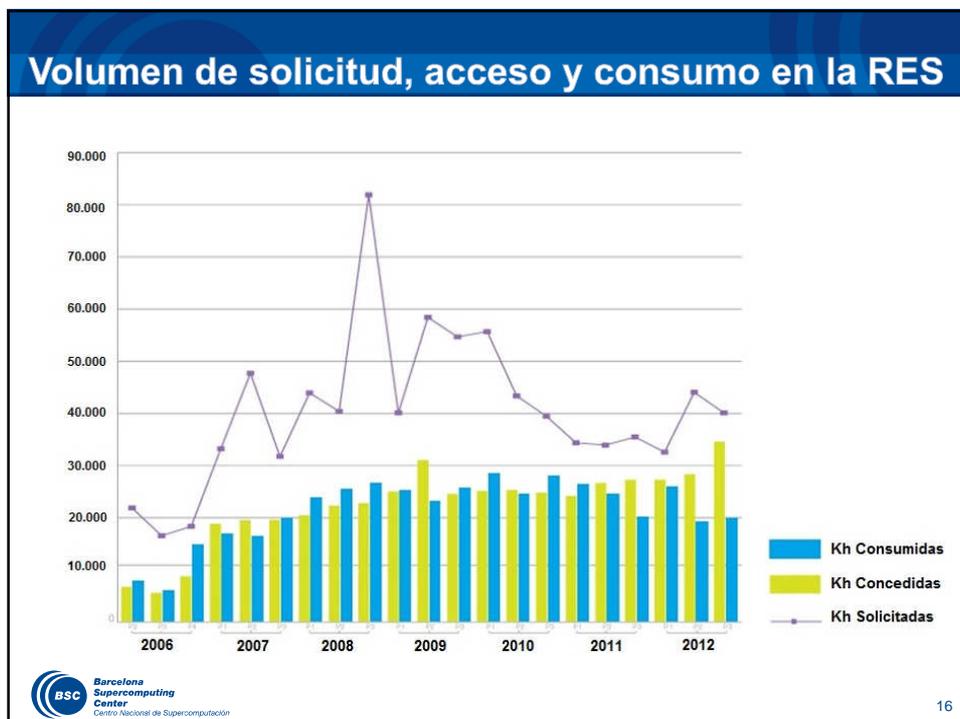
Red Española de Supercomputación

« Desde 2006, la RES es una infraestructura virtual distribuida consistente en la interconexión de **supercomputadores**, que en régimen de trabajo compartido, gestionan su capacidad de cálculo y proporcionan **servicio a investigadores españoles**.

Barcelona Supercomputing Center
Centro Nacional de Supercomputación

Barcelona Supercomputing Center
Centro Nacional de Supercomputación

15



Servicios principales ofrecido por la RES

⌘ Principalmente: Optimización de código

- Mejora de la paralelización y escalabilidad
- Optimización de Entrada/Salida
- Portabilidad de código (Arquitectura, procesador, aceleradores, GridSuperscalar, StarSs, ...)
- Depuración de código (Totalview, Paraver, DDT...)

Pero también:

- ⌘ Almacenamiento de datos
- ⌘ Actividades de test
- ⌘ Programas de movilidad
- ⌘ Soporte técnico
- ⌘ Difusión científica

Más servicios ofrecido por la RES

Además:

- ⌘ Jornadas de usuarios
- ⌘ Cursos para usuarios
- ⌘ Seminarios científicos
- ⌘ Cursos para los equipos técnicos de la RES
- ⌘ Colaboración en seminarios y conferencias:
 - Compartiendo experiencia y proporcionando expertos
 - Realizando cursos de formación específica
 - Co-financiando la celebración de eventos para promover la ciencia y la aplicación de la supercomputación



Suscripción en <http://www.bsc.es/hpc-events-trainings.xml>

MareNostrum3 (Instalación actual)



Equipamiento financiado a través de:




"Una manera de hacer Europa"

**Upgrade a
1 PFLOP
previsto en breve**

Rendimiento pico	0,7 PFLOPS
Procesador	33.664 Intel SandyBridge-EP E5-2670 2.6 GHz
Memoria	67,32 TB
Disco	2000 TB
Redes	Infiniband, GbE
Sistema	SUSE Linux ES


19

Hardware de MareNostrum2 vs MareNostrum3

		MN2	MN3
Cómputo	Cores/chip	2	8
	Chip/nodo	2	2
	Cores/nodo	4	16
	Nodos	2560	3028
	Total cores	10240	48448
Rendimiento	Frecuencia	2,3	2,6
	Gflops/core	9,2	20,8
	Gflops/node	36,8	332,8
	Total Tflops	94,2	1000,0
Memoria	GB/core (GB)	2	2
	GB/node (GB)	8	32
	Total (TB)	20	96,89
Interconexión	Topología	Non- blocking Fat Tree	
	Latencia (µs)	4	0,7
	Bandwidth (Gb/s)	4	40
Almacenamiento	(TB)	460	2000
Consumo	(KW)	750	1080


20

Software de MareNostrum2 vs MareNostrum3

	MN2	MN3
Sistema Operativo	SLES10 SP2	SLES11 SP1
Sistema de gestión	DIM	xCAT
Sistema de ficheros	GPFS	
Gestor de recursos/Scheduler	SLURM/MOAB	Loadleveler
Librería MPI	MPICH-GM/MX	IBM PE
Sistema de monitorización	Ganglia/BSCtoolkit	xCAT
Compiladores	GCC, IBM XL	GCC, Intel Cluster Suite
Herramientas de rendimiento	BSC, PAPI	
Librerías	IBM ESSL	Intel MKL

Incluyendo: - Las licencias para IBM Intel HPC Stack
 - Las UFM y OFED stacks soportadas por Mellanox.
 - Licencia & soporte SLES + IBM Support line para Linux

Recursos de MareNostrum2 vs MareNostrum3

	MN2	MN3
Total cores	10.240	48.448
Total de horas de cores en 1 año (x 365 x 24)	89.702.400	424.369.440
Usable Total core hours in a year (82%)	73.555.968	347.982.940
Horas para PRACE (70%)	0	243.588.058
Horas para BSC (20% x 30%)	14.711.193	20.878.976
Horas para RES (80% x 30%)	58.844.774	83.515.905
Horas para cada Call de la RES (3 al año)	19.614.924	27.838.635

1h Sandy Bridge (MN3) = 3h Power PC (MN2)

La Oferta a la RES aumenta en un factor 4,2

MinoTauro



Rendimiento pico	185,78 TFLOPS
Procesador	256 M2090 NVIDIA GPU 256 Intel E5649 2,53 GHz 6-Cores
Memoria	3 TB
Disco	31 TB
Redes	Infiniband QDR, 10 GbE
Sistema	ReddHat Linux

Magerit2



Rendimiento pico	103,4 TFLOPS
Procesador	3.920 IBM Power7 3.3
Memoria	8700 GB
Disco	190 TB
Redes	Infiniband, GbE
Sistema	Linux

Altamira



Rendimiento pico	52 TFLOPS
Procesador	316 Intel Xeon CPU E5-2670 2,60GHz
Memoria	10112 GB
Disco	14 TB
Redes	Infiniband
Sistema	Scientific Linux 6.2



LaPalma2



Rendimiento pico	9,4 TFLOPS
Procesador	1.024 IBM PowerPC 970 2.3GHz
Memoria	2 TB
Disco	14 + 10 TB
Redes	Myrinet, GbE, 10/100
Sistema	SUSE Linux

Tirant2



Rendimiento pico	18,8 TFLOPS
Procesador	2048 IBM PowerPC 970 2.3GHz
Memoria	2 TB
Disco	56 + 40 TB
Redes	Myrinet, GbE, 10/100
Sistema	SUSE Linux

Atlante



Rendimiento pico	3,1 TFLOPS
Procesador	48,448 Intel SandyBridge-EP E5-2670 cores at 2.6 GHz
Memoria	672 GB
Disco	3 + 90 TB
Redes	Myrinet, GbE, 10/100
Sistema	SUSE Linux

Picasso



Rendimiento pico	63 TFLOPS
Procesador	82 AMD Opteron 6176, 96 Intel E5-2670 56 Intel E7-4870 32 GPUS Nvidia Tesla M2075
Memoria	21 TB
Disco	600 TB Lustre + 260 TB
Redes	Infiniband, GbE
Sistema	SUSE Linux

Caesaraugusta



Rendimiento pico	25,8 TFLOPS
Procesador	3072 AMD Opteron 6272 a 2.1GHz
Memoria	12,5 TB
Disco	36 TB Lustre
Redes	Infiniband, GbE
Sistema	Scientific Linux

Solicitud de acceso a RES

Información de convocatorias, condiciones y solicitud en:
www.bsc.es/RES

Información a aportar en la petición de acceso:

- Título de la actividad a desarrollar
- Descripción del proyecto
- Librerías numéricas y software necesario
- Descripción del equipo de investigación
- Cantidad de recursos necesarios
- Resumen del objetivo de la actividad para su publicación

Comité de Acceso y Paneles de Expertos

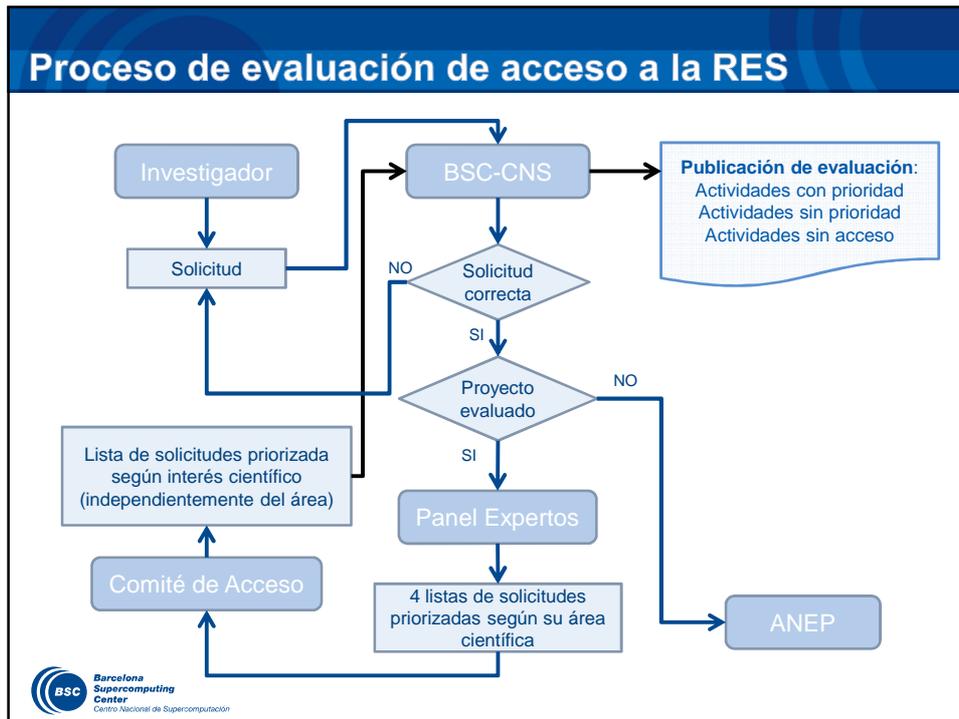
☞ Paneles de expertos

- 10 científicos y un coordinador en cada uno de los 4 paneles :
 - Matemáticas, Física e Ingeniería
 - Química y Ciencia y Tecnología de los Materiales
 - Biomedicina y Ciencias de la Tierra
 - Astronomía, Espacio y Ciencias de la Tierra

☞ Comité de Acceso

- 1 experto en gestión de innovación
- 1 representante de la ANEP
- 1 experto en supercomputación de la RES pero externo al BSC-CNS
- 1 experto en supercomputación del BSC-CNS

Los componentes de los Paneles de Expertos y del Comité de Acceso son nombrados por el MINECO.



CURES, Comité de Usuarios de la RES

- ⌘ **Historia**
El CURES se estableció en febrero de 2010
- ⌘ **Composición**
 - 8 científicos (2 de cada área de la RES) que hayan sido Investigadores Principales de actividades con acceso a la RES.
- ⌘ **Propósito**
 - Transmitir la opinión e interés de los usuarios y asesorar al coordinador de la RES sobre los servicios y recursos disponibles.
 - Promover el uso efectivo de los recursos de la RES compartiendo información sobre la experiencia de los usuarios y sugiriendo futuras líneas de investigación.

Barcelona Supercomputing Center
 Centro Nacional de Supercomputación

34

Difusión científica

- « Website de BSC-CNS
- « Informe anual del BSC-CNS y la RES
- « Difusión de artículos en las revistas más prestigiosas
- « Presentación de investigaciones en congresos nacionales e internacionales : Ibergrid, Supercomputing, International Supercomputing



PRACE: Infraestructura para la investigación

⌘ PRACE AISBL

- Inauguración en Barcelona en 2010, sede en Bruselas
- 24 miembros representantes de 20 países europeos
- Miembros anfitriones: Francia, Alemania, Italia y España



⌘ Financiación garantizada entre 2010 y 2015

- 400 M€ de los miembros anfitriones
 - 70 M€ de EC FP7 para su desarrollo e implementación (Concesión INFSO-RI-211528 y 261557)
- Complemento de ~60 M€ por los miembros de PRACE

PRACE: Objetivos

- ⌘ Desarrollo y provisión de una infraestructura a nivel europeo, que permita a la comunidad científica, incluida la industrial, acceso a sistemas High-end Computing o Tier-0.
- ⌘ Gestión de la coordinación entre Tier-0, centros nacionales (Tier-1) y centros regionales (Tier-2) y facilitar así el contacto con sus usuarios.
- ⌘ Provisión y racionalización del acceso a infraestructuras, a través de la evaluación y concesión a expertos científicos.

CURIE, Bull Bullx cluster (GENCI TGCC/CEA, Francia)

- ⌘ Compuesto por 3 particiones:
 - Fat node: 360 nodos con 32 cores por nodo para un rendimiento pico de 105 Tflops
 - Thin node: 5040 blades con 16 cores por nodo, rendimiento pico de 1.5 PetaFlops
 - Nodos híbridos: 144 blades con 8 cores escalares y 2 GPU por nodo, con un rendimiento pico de 200 TeraFlops



Más información en: <http://www-hpc.cea.fr/en/complexes/tgcccurie.htm>

FERMI, IBM BG/Q (CINECA, Italia)

- ⌘ Arquitectura: 10 BGQ Frame con 2 MidPlanes
- ⌘ Rendimiento pico: 2.1 PFlop/s
- ⌘ Front-end Nodes OS: Red-Hat EL 6.2
- ⌘ Compute Node Kernel: lightweight Linux-like kernel
- ⌘ Procesador: IBM PowerA2, 1.6 GHz
- ⌘ Nodos de computo: 10.240 con 16 cores, un total de 163.840 cores
- ⌘ RAM: 16GB / node; 1GB/core
- ⌘ Red interna: Interfaz de red con 11 enlaces en 5D Torus
- ⌘ Espacio de disco: más de 2PB de scratch



Más información en: <http://www.hpc.cineca.it/content/ibm-fermi-user-guide>

HERMIT, Cray XE6 (GCS HLRS, Alemania)

- ⌘ Rendimiento pico de 1 Petaflops
- ⌘ Está diseñado para mantener un rendimiento sostenido de las aplicaciones y una alta escalabilidad.
- ⌘ Compuesto por 3552 nodos dual socket equipado con procesadores AMD Interlagos con un total de 113664 cores.
- ⌘ Memoria principal en nodos con 32GB o 64GB



Más información en: <http://www.hlrs.de/systems/platforms/crayxe6-hermit>

JUQUEEN, IBM Blue Gene/Q (GCS Jülich, Alemania)

- ⌘ En su etapa final tendrá un rendimiento pico de 5.87 Petaflops.
- ⌘ Consiste en 28 racks, cad rack con 1024 nodos (16394 cores)
- ⌘ Memoria principal de 458 TB



Más información en: <http://www.fz-juelich.de/ias/jsc/juqueen>

SUPERMUC, IBM System x iDataPlex (GCS LRZ, Alemania)

- ⌘ Rendimiento pico de 3 Petaflops
- ⌘ 155656 cores en 9400 nodos de cómputo
- ⌘ >300 TB RAM
- ⌘ Infiniband FDR10 interconnect
- ⌘ 4 PB of NAS-based almacenamiento de disco permanente
- ⌘ 10 PB of GPFS-based almacenamiento de disco temporal
- ⌘ >30 PB almacenamiento en cinta
- ⌘ Potentes sistemas de visualización
- ⌘ Alta eficiencia energética



Más información en: <http://www.lrz.de/services/compute/supermuc/systemdescription>

PRACE: Tipos de convocatorias

- ⌘ **Acceso Preparatorio**
 - Destinado a un uso previo para la preparación de solicitud de acceso regular como proyecto
 - Necesidad de revisión técnica
- ⌘ **Acceso como proyecto**
 - Destinado a investigadores individuales o grupos de investigación
 - Necesidad de revisión técnica y científica
- ⌘ **Acceso Multianual**
 - Disponible a los proyectos o infraestructura que puedan beneficiarse de los recursos de PRACE
 - Se planea que tenga una duración de 2 años
 - Está en fase de test

PRACE: Convocatorias vigente

Solicitud en: <https://prace-peer-review.cines.fr>

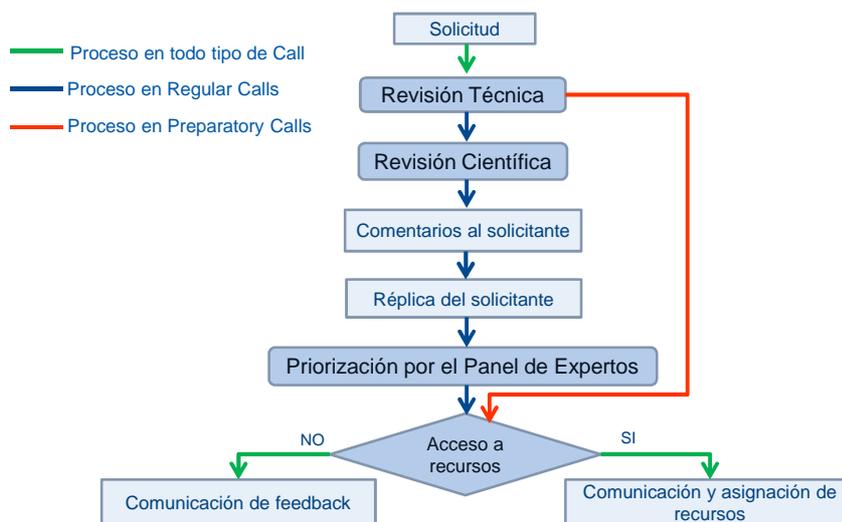
⌘ Acceso regular

- Apertura de la 8ª PRACE Regular Call prevista en Septiembre de 2013.

⌘ Acceso preparatorio

- Continuamente abierto a solicitudes que se evalúan periódicamente.

PRACE: Proceso de revisión de solicitudes



PRACE: Criterio para la revisión técnica

- ⌘ Necesidad de uso del recurso PRACE
- ⌘ Disponibilidad del software requerido en el recurso solicitado
 - En caso de que el código sea propio del solicitante debe haber sido testeado en cuanto a eficiencia, escalabilidad y adecuación a la infraestructura.
 - Para solicitudes de Acceso como Proyecto deberán enviarse pruebas de los test.
- ⌘ Adecuación al recurso solicitado
 - La evaluación técnica debe asociar las solicitudes al recursos más adecuado.

PRACE: Criterio para la revisión científica

- ⌘ Excelencia científica demostrando impacto internacional
- ⌘ Novedad y cualidades transformadoras
- ⌘ Relevancia en la convocatoria si se diese un enfoque determinado a la convocatoria (en el caso de realizar convocatorias temáticas)
- ⌘ Metodología
- ⌘ Relevancia de la diseminación en distintos canales y publicaciones
- ⌘ Sólida estructura de gestión en el proyecto.

PRACE: Soporte a través del BSC-CNS

- ⌘ Preparación técnica de solicitudes para potenciar su éxito
- ⌘ Pruebas de escalabilidad en instalaciones del BSC-CNS
- ⌘ Ayuda en el acceso y ejecución
 - Portabilidad de código
 - Transferencia de entrada/salida
 - Acceso a sistema de colas
 - Rendimiento de aplicaciones
- ⌘ Ayuda en la transferencia de datos durante y después del acceso

www.bsc.es



**Barcelona
Supercomputing
Center**
Centro Nacional de Supercomputación

Muchas gracias

Para obtener más información
applications@bsc.es