

Jornadas sobre Computación de Altas Prestaciones y Software Libre

Software Libre en el Centro de Supercomputación de Galicia

Aurelio Rodríguez
aurelio@cesga.es

¿Está presente el Software libre?
¿es importante? ¿crítico?
¿está influyendo en el centro de supercomputación?
¿de qué manera?

Software libre en:

I.Sistema operativo del Supercomputador

II.Monitorización del Supercomputador

III.Disco del Supercomputador

IV.Gestión y envío de trabajos

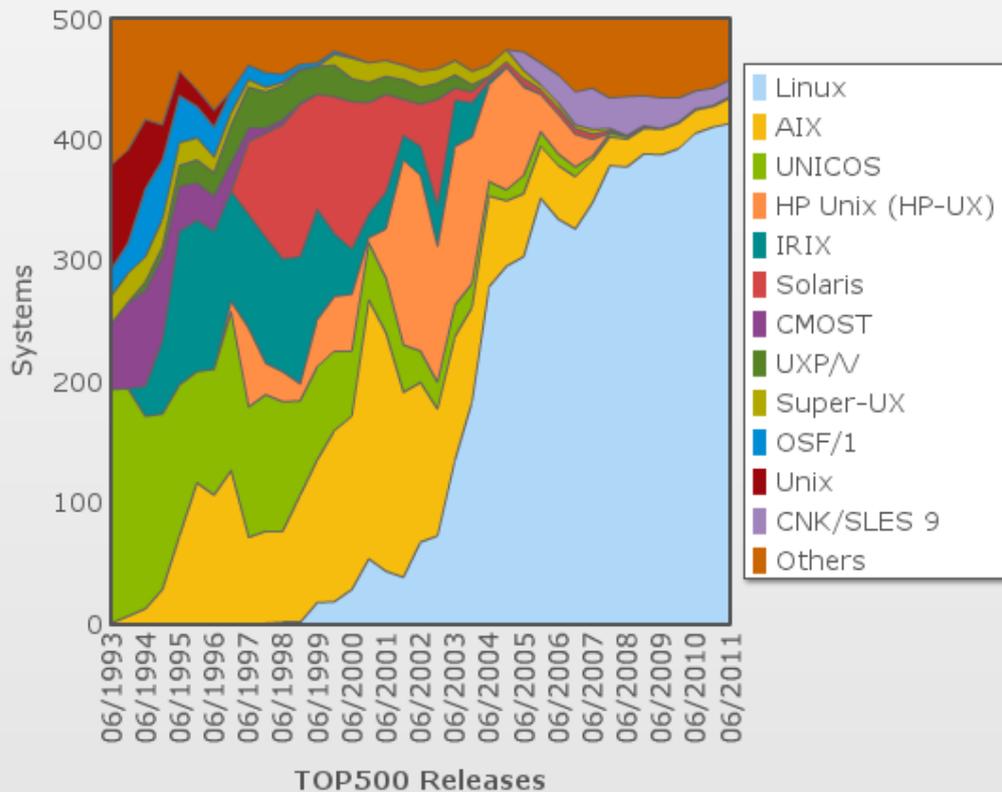
V.Compiladores y herramientas de desarrollo en un Supercomputador

VI.Aplicaciones

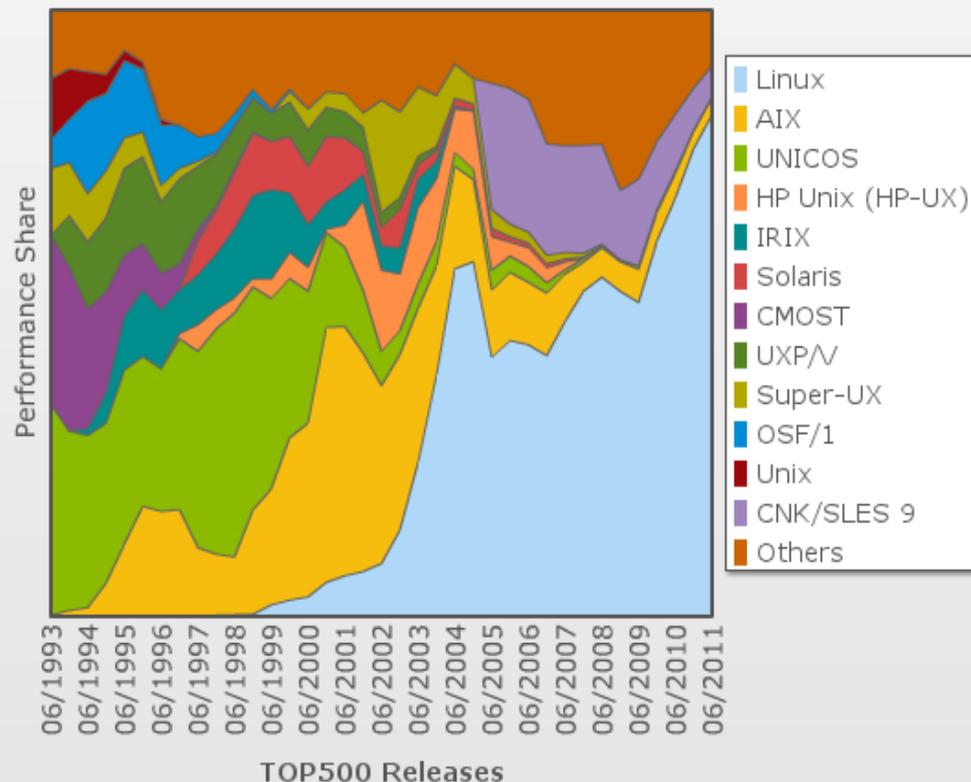
VII.Soporte a usuarios

Sistema operativo del Supercomputador

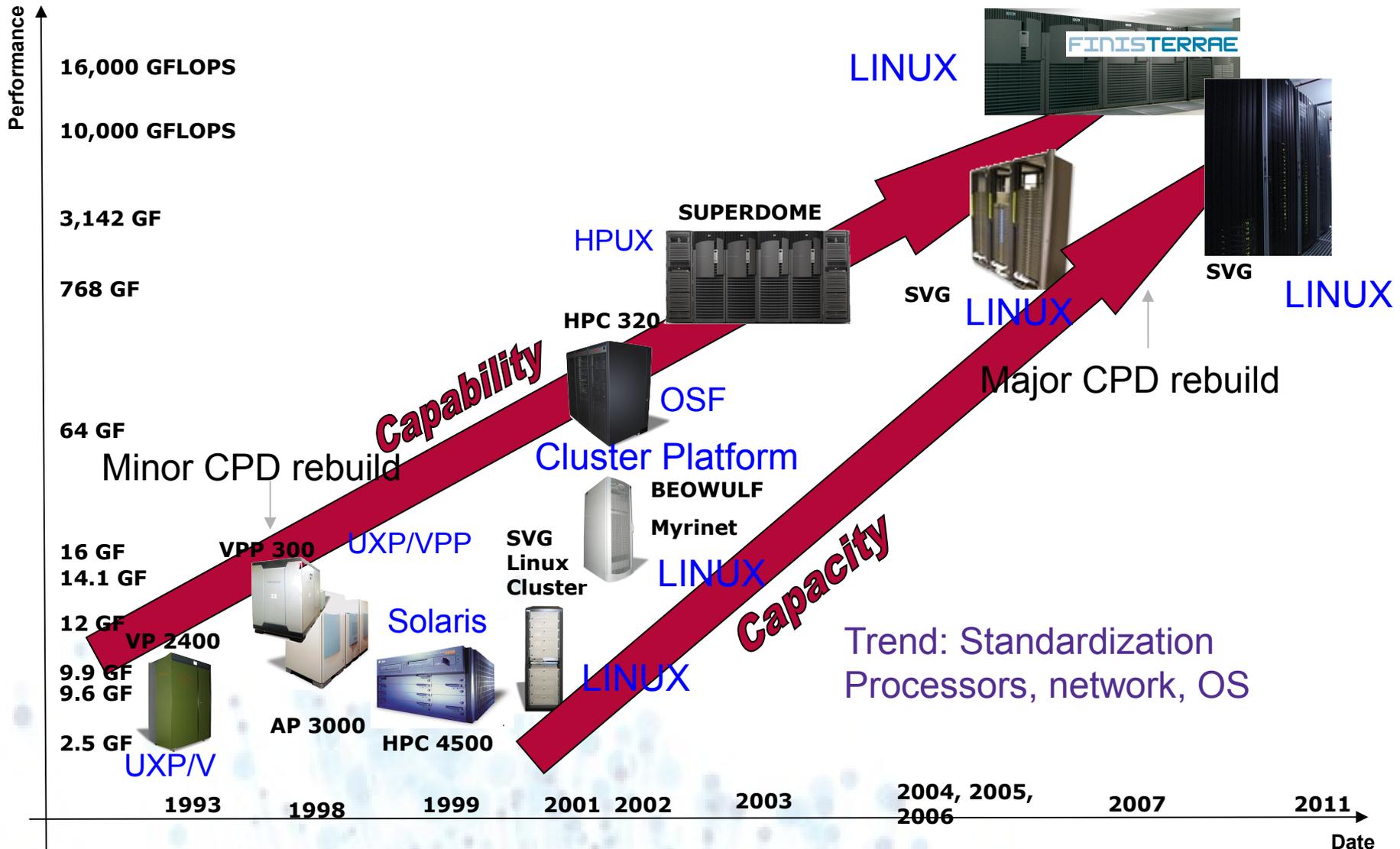
Operating System Share Over Time
1993-2011



Operating System Share Over Time
1993-2011



Sistema operativo del Supercomputador



Sistema operativo del Supercomputador



http://www.linuxhpc.org/pages.php?page=Cluster_Software



Open-Source Toolkit
for Real and Virtual Clusters

<http://www.rockclusters.org>

Soluciones disponibles en las grandes distribuciones

Sistema operativo del Supercomputador

CLOUD

Independencia del sistema operativo: Virtualización

Gran flexibilidad:

- Software específico
- Requerimientos de seguridad específicos

¿Posibilidades en software libre?

Virtualización: Xen/KVM/Virtualbox

Gestión Cloud: OpenNebula

OpenNebula.org

The Open Source Toolkit for Cloud Computing



El software libre (LINUX) claramente predomina en el sistema operativo de un supercomputador.

El software libre también está presente en las nuevas tendencias: entornos cloud

Monitorización del Supercomputador



Monitoring clusters and Grids since the year 2000

<http://ganglia.sourceforge.net/>

- Ganglia es un sistema de monitorizado distribuido y escalable para clusters/grids.
- Implementación robusta portada a un gran conjunto de procesadores/sistemas operativos.
- Actualmente usada en miles de clusters en todo el mundo.

Con Nagios es posible:

- Monitorizar una infraestructura entera
- Localizar problemas antes de que ocurran
- Conocer los problemas inmediatamente
- Compartir disponibilidad
- Detectar problemas de seguridad
- Planificar actualizaciones

Nagios®

<http://www.nagios.org>

Monitorización del Supercomputador



Cluster Report for Fri, 30 Sep 2011 13:58:19 +0200

Metric Last Sorted

[Physical View](#)

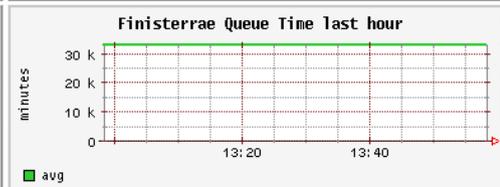
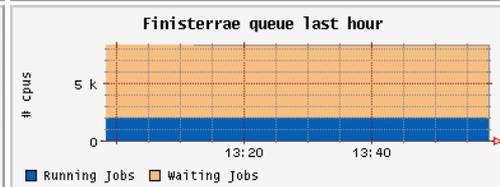
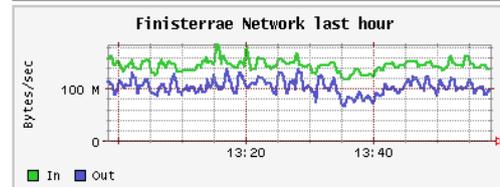
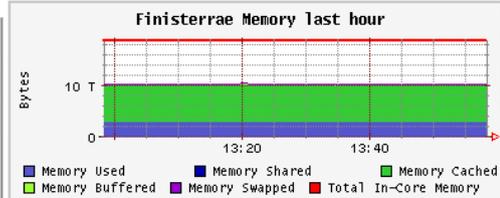
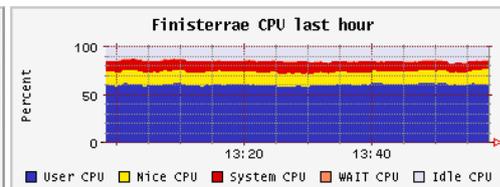
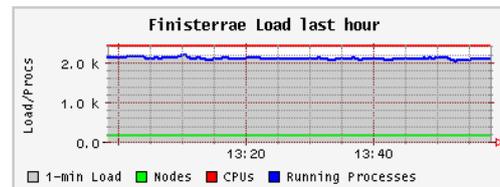
Grid > [Finisterrae](#) >

Overview of Finisterrae

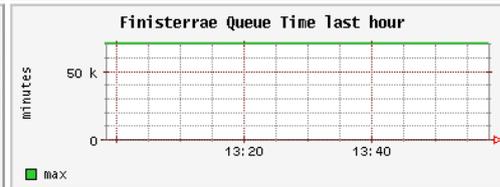
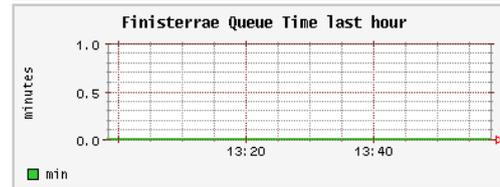
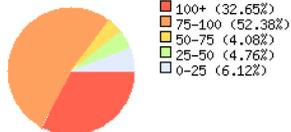
CPU's Total: **2414**
 Hosts up: **147**
 Hosts down: **0**

Avg Load (15, 5, 1m):
87%, 87%, 88%
 Localtime:
2011-09-30 13:58

[Job Queue](#)



Cluster Load Percentages



Monitorización del Supercomputador

Nagios®



Nagios

- Monitoring ☰
- ▶ Vista General
- ▶ Detalles por Host
- ▶ Detalles por Servicio
- ▶ Agrupación Host
- ▶ Agrupación Servicios
- ▶ Mapa de Estado
- ▶ Problemas de Servicios
- ▶ Problemas de Hosts
- ▶ Comments
- ▶ Downtime
- ▶ Process Info
- ▶ Performance Info
- ▶ Scheduling Queue
- Reporting ☰
- ▶ Tendencia
- ▶ Disponibilidad
- ▶ Histogramas de Alertas
- ▶ Historial de Alertas
- ▶ Sumario de Alertas
- ▶ Notificaciones
- ▶ Log de Eventos
- Adhos ☰
- ▶ PHP4NAGIOS
- Configuración ☰
- ▶ Ver Config

Search ...

Current Network Status
 Last Updated: Fri Sep 30 14:03:21 CEST 2011
 Updated every 90 seconds
 Nagios® Core™ 3.2.0 - www.nagios.org
 Logged in as aurelio

View History For all hosts
 View Notifications For All Hosts
 View Host Status Detail For All Hosts

Display Filters:

Host Status Types: All
 Host Properties: Any
 Service Status Types: All Problems
 Service Properties: Any

Host Status Totals

Up	Down	Unreachable	Pending
257	1	0	0
All Problems		All Types	
1		258	

Service Status Totals

Ok	Warning	Unknown	Critical	Pending
2549	11	0	36	0
All Problems		All Types		
47		2596		

Service Status Details For All Hosts

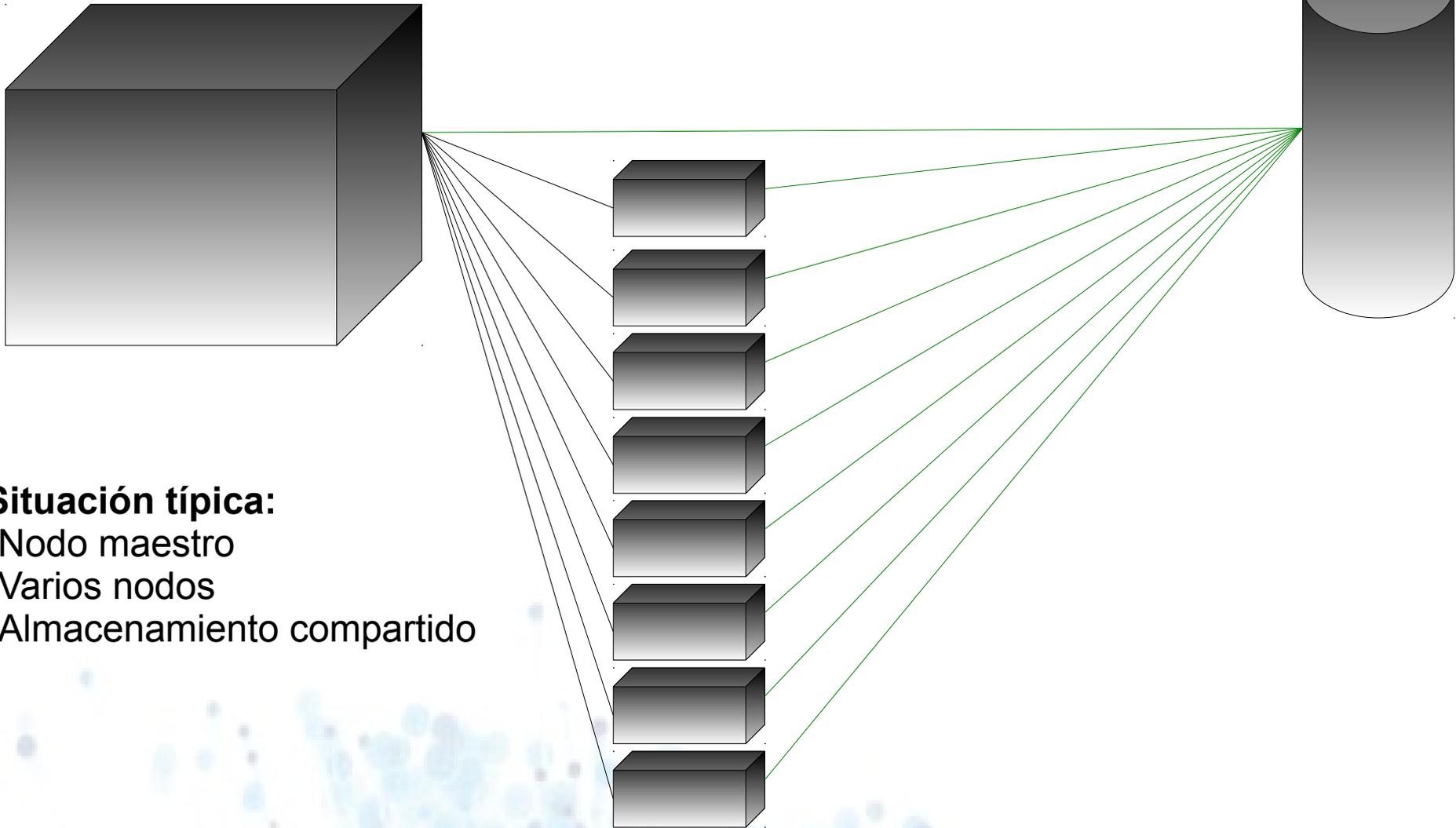
Host	Service	Status	Last Check	Duration	Attempt	Status Information
c4-14	SMART HDD	CRITICAL	30-09-2011 13:55:23	129d 22h 3m 28s	5/5	5 Reallocated_Sector_Ct 0x0033 100 100 036 Pre-fail Always - 3 196 Reallocated_Event_Count 0x0033 100 100 036 Pre-fail Always - 3 Fri Sep 30 13:55:23 CEST 2011
	TMP Inet	WARNING	30-09-2011 14:03:18	93d 1h 21m 36s	3/3	[WARNING] valor:
c4-21	/	CRITICAL	30-09-2011 13:57:52	73d 5h 22m 45s	5/5	Connection refused by host
	/scratch	CRITICAL	30-09-2011 13:58:06	73d 5h 22m 4s	5/5	Connection refused by host
	Amp	CRITICAL	30-09-2011 13:57:58	73d 5h 18m 7s	5/5	Connection refused by host
	Gmond	CRITICAL	30-09-2011 13:58:37	73d 5h 41m 13s	3/3	Connection refused by host
	LOAD	CRITICAL	30-09-2011 14:01:56	73d 5h 41m 37s	3/3	Connection refused by host
	SQE_execd	CRITICAL	30-09-2011 14:00:55	73d 16h 10m 3s	3/3	Connection refused by host
	SMART HDD	CRITICAL	30-09-2011 13:57:43	129d 22h 23m 22s	5/5	Connection refused by host
	Syslog	CRITICAL	30-09-2011 13:58:48	73d 5h 39m 26s	3/3	Connection refused by host
	TMP Inet	WARNING	30-09-2011 14:02:06	80d 0h 0m 53s	3/3	[WARNING] valor:
	ldap	CRITICAL	30-09-2011 14:00:55	73d 5h 41m 14s	3/3	Connection refused by host
ssh	CRITICAL	30-09-2011 14:00:16	73d 5h 39m 25s	3/3	Connection refused by host	
c4-22	TMP Inet	WARNING	30-09-2011 14:03:06	0d 4h 11m 13s	3/3	[WARNING] valor: 27
c4-23	/	CRITICAL	30-09-2011 13:58:04	36d 1h 48m 19s	5/5	Connection refused or timed out
	/scratch	CRITICAL	30-09-2011 13:58:06	36d 1h 48m 15s	5/5	Connection refused or timed out
	Amp	CRITICAL	30-09-2011 13:58:06	36d 1h 48m 9s	5/5	Connection refused or timed out
	Gmond	CRITICAL	30-09-2011 13:58:23	36d 1h 58m 54s	3/3	Connection refused or timed out
	LOAD	CRITICAL	30-09-2011 14:02:06	36d 2h 1m 31s	3/3	Connection refused or timed out
	SQE_execd	CRITICAL	30-09-2011 13:58:24	42d 5h 29m 30s	3/3	Connection refused or timed out
	SMART HDD	CRITICAL	30-09-2011 13:58:04	36d 1h 47m 37s	5/5	Connection refused or timed out
	Syslog	CRITICAL	30-09-2011 13:58:37	36d 1h 58m 54s	3/3	Connection refused or timed out
	TMP Inet	WARNING	30-09-2011 14:03:06	0d 2h 40m 47s	3/3	[WARNING] valor: 26
	ldap	CRITICAL	30-09-2011 14:03:19	36d 1h 59m 17s	3/3	Connection refused or timed out
ssh	CRITICAL	30-09-2011 13:58:39	36d 1h 58m 53s	3/3	Connection refused or timed out	
c4-24	/	CRITICAL	30-09-2011 13:47:56	0d 3h 15m 25s	1/5	(Service Check Timed Out)
	/scratch	CRITICAL	30-09-2011 13:55:35	0d 3h 7m 47s	1/5	(Service Check Timed Out)
	Amp	CRITICAL	30-09-2011 13:47:56	0d 3h 15m 25s	1/5	(Service Check Timed Out)
	Gmond	CRITICAL	30-09-2011 13:59:48	0d 3h 23m 37s	1/3	(Service Check Timed Out)
	LOAD	CRITICAL	30-09-2011 14:00:57	0d 3h 24m 15s	1/3	(Service Check Timed Out)



El software libre no sólo predomina en la monitorización sino que define tendencias y estándares de facto

Disco del Supercomputador

Clusters y Almacenamiento compartido



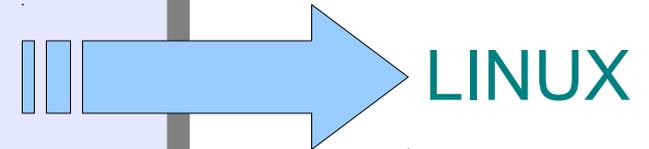
Situación típica:

- Nodo maestro
- Varios nodos
- Almacenamiento compartido

Disco del Supercomputador

Clusters y Almacenamiento compartido al viejo estilo

- I. Un **único servidor de almacenamiento** se convierte rápidamente en un cuello de botella para el rendimiento
- II. Si en el tiempo el cluster crece también crecen los requerimientos de almacenamiento (también puede crecer por requerimientos de usuarios)
- III. Añadir espacio suele ser fácil
- IV. Añadir ancho de banda y IOPs es difícil y normalmente involucra una actualización cara del hardware



Clusters y Almacenamiento compartido al viejo estilo

El ejemplo típico es comenzar con un servidor NFS con cierta cantidad de espacio en disco/memoria/procesador y ir añadiendo discos a este servidor:

- I. Añadir espacio simplemente supone añadir más discos o un nuevo controlador con un puerto externo para conectar discos externos
- II. Pero si no aumentas el ancho de banda de la red de este servidor no te vas a poder beneficiar de un mayor ancho de banda a disco
- III. La memoria del servidor se comparte entre más discos
- IV. El procesador se comparte aunque en el entorno multicore actual esto no suele ser un problema.

Disco del Supercomputador

Clusters y Almacenamiento compartido con solución paralela

La **solución paralela** consiste en:

I. Añadir servidores de almacenamiento, no sólo espacio de disco

II. Cada servidor de almacenamiento añade más memoria, más procesador y más ancho de banda

III. **La complejidad en el software es muy alta**

IV. No hay una fácil solución como NFS o CIFS



Alternativas en software libre?

Disco del Supercomputador

Clusters y Almacenamiento compartido con solución paralela

TOP 500 (June 2010) 100 sistemas primeros:

59/100 Lustre

22/100 GPFS

3/100 Panasas

1/100 CXFS

15 sin determinar



Open source

l.u.s.t.r.e.



Disco del Supercomputador

Arquitectura de Lustre

4 componentes principales:

- MetaData Server (MDS)
- Object Storage Servers (OSSs)
- Object Storage Targets (OSTs)
- Clientes

MDS

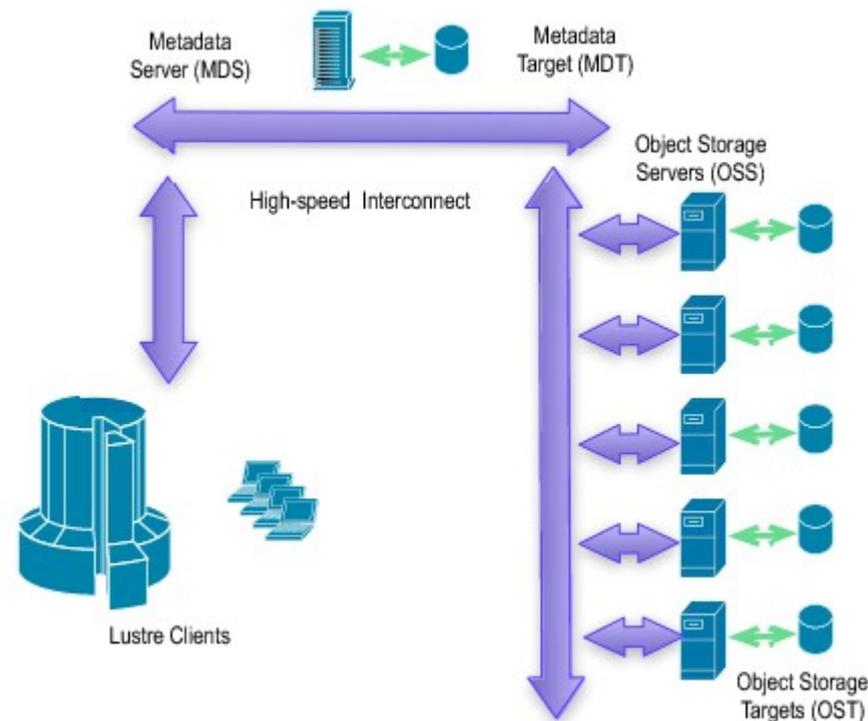
Gestiona el espacio de nombres,
operaciones de ficheros y directorios
Almacena los metadatos del sistema

OSS

Gestiona los OSTs

OST

Gestiona los dispositivos (discos)
Almacena los ficheros (data stripes)



HP-SFS

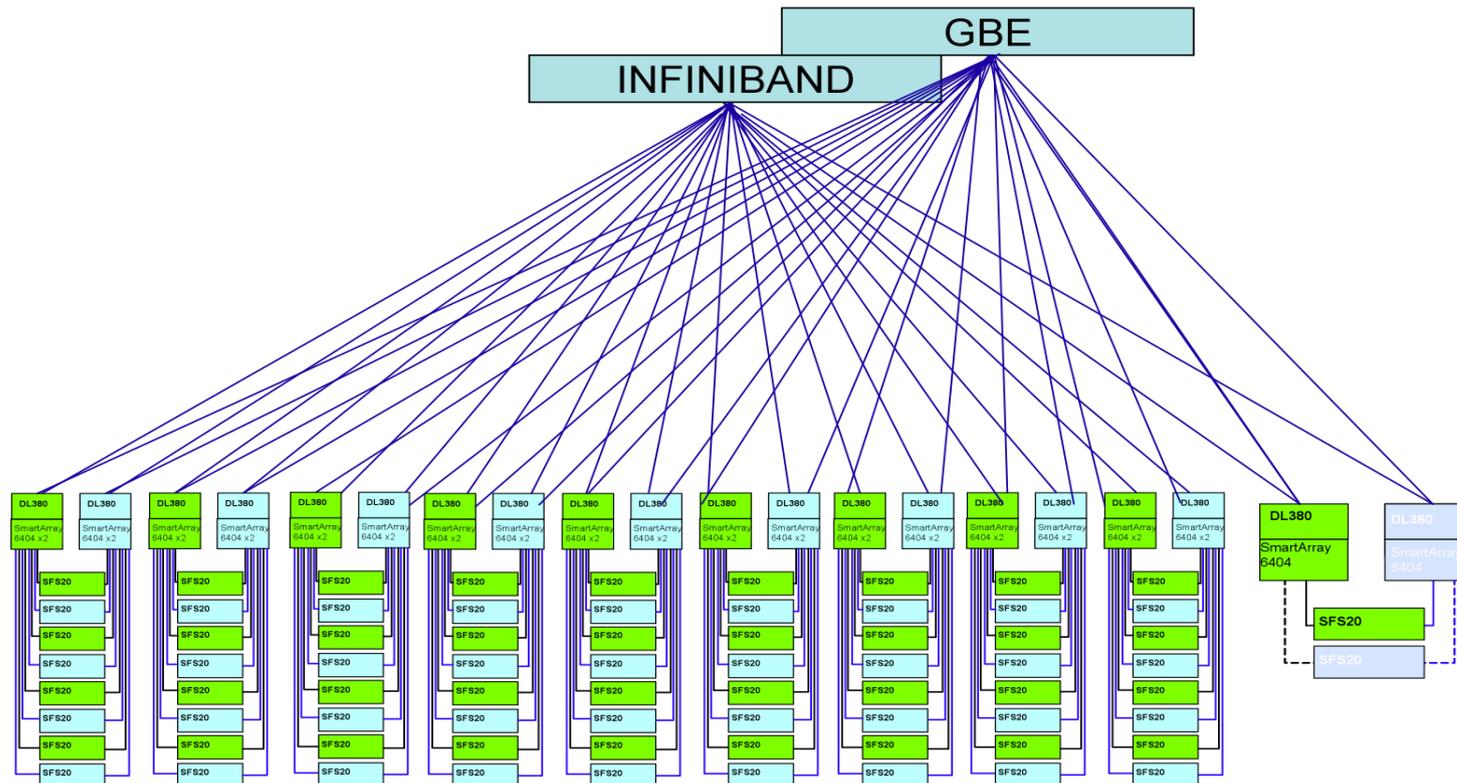
- Sistema de almacenamiento paralelo basado en **Lustre**
- Capacidad total de 216 Terabytes, obtenida mediante 864 discos SATA de 250 GB
- 18 celdas (servidores Proliand DL380) y 72 cabinas de discos HP SFS-20.
- Proporciona hasta 10 GB/s en lectura y 6 GB/s en escritura (real)
- Se accede mediante Infiniband.
- Es visto desde todos los nodos de computación como un sistema de ficheros convencional (/sfs)

HP-SFS

- Sistema de almacenamiento paralelo basado en **Lustre**
- Capacidad total de 216 Terabytes, obtenida mediante 864 discos SATA de 250 GB
- 18 celdas (servidores Proliand DL380) y 72 cabinas de discos HP SFS-20.
- Proporciona hasta 10 GB/s en lectura y 6 GB/s en escritura (real)
- Se accede mediante Infiniband.
- Es visto desde todos los nodos de computación como un sistema de ficheros convencional (/sfs)

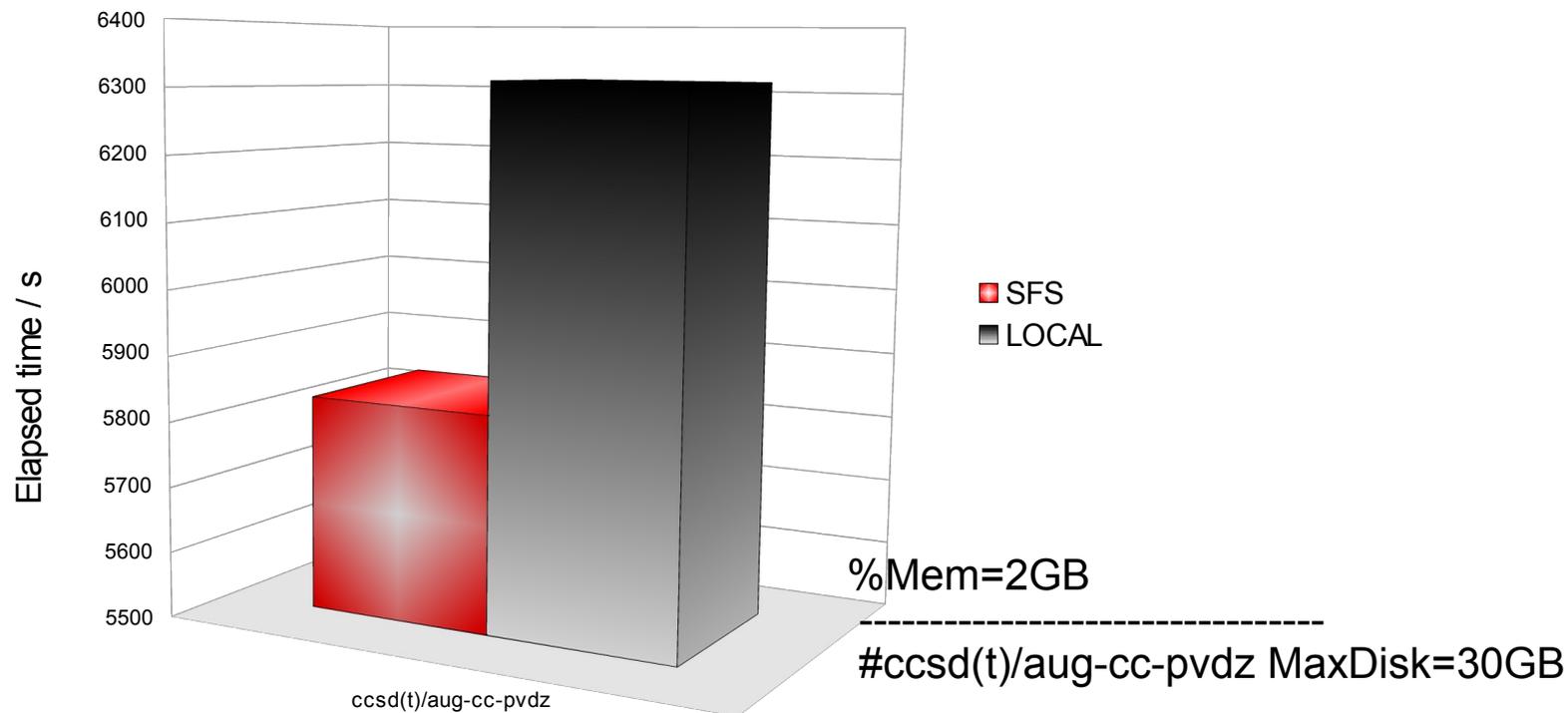
Disco del Supercomputador

HP SFS20 - CESGA –IB/GBE



Disco del Supercomputador

FULL OPTIMIZED FILESYSTEM



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

El software libre es una alternativa clara para sistemas de ficheros paralelos.

Muchos productos comerciales han fracasado en este área y las alternativas basadas en software libre predominan.

Gestión y envío de trabajos



Open Grid Scheduler

<http://gridscheduler.sourceforge.net/>

TORQUE Open-Source Resource Manager

<http://www.clusterresources.com/pages/products/torque-resource-manager.php>



<https://computing.llnl.gov/linux/slurm>

Gestión y envío de trabajos

The screenshot displays the QMON GUI with several windows open:

- QMON +++ Main Control**: Shows a menu bar (File, Task, Help) and a toolbar with various icons.
- QMON +++ Cluster Queues**: Displays a table of cluster queues and their instances.

Cluster Queues	Queue Instances	Hosts
CLUSTER QUEUE	CQLOAD USED RES AVAIL TOTAL	aoACDS cdsuE s
GRID_large	0.79 51 0 429 504	0 24 0
GRID_ops	0.33 0 0 25 25	0 0 0
GRID_small	0.79 0 0 480 504	0 24 0
big_large	0.82 7 0 137 144	0 0 0
big_small	0.91 31 1 113 144	0 0 0
g0-mem_big	0.89 5 2 667 696	0 24 0
g0-mem_small	0.91 5 2 428 504	0 72 0
g1-mem_big	0.92 0 0 144 144	0 0 0
g1-mem_small	0.81 1 0 143 144	0 0 0
intel_queue	-NA- 0 0 0 0	0 0 0
interactive	0.05 2 0 46 48	0 0 0
large	0.89 285 0 387 696	0 24 0
medium	-NA- 0 0 0 0	0 0 0
offline	0.86 0 0 1152 1248	0 96 0
small	0.91 142 0 290 504	0 72 0
- QMON +++ Host Configuration**: Shows a list of hosts for configuration.


```

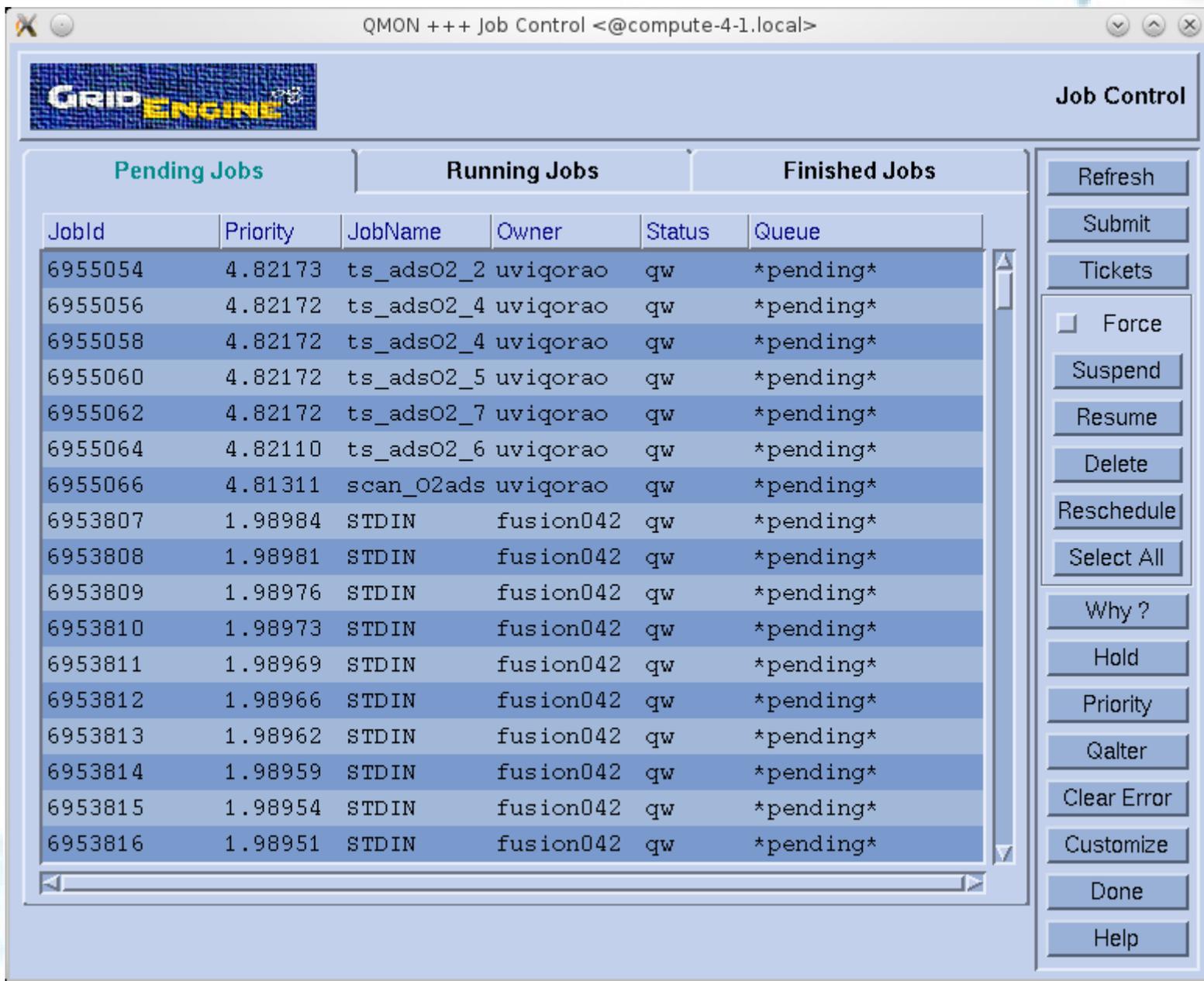
      ce2.egee.cesga.es
      ce3.egee.cesga.es
      ce4.egee.cesga.es
      compute-3-10.local
      compute-3-11.local
      compute-3-12.local
      compute-3-13.local
      compute-3-14.local
      compute-3-15.local
      compute-3-16.local
      compute-3-17.local
      compute-3-18.local
      compute-3-19.local
      compute-3-20.local
      compute-3-21.local
      compute-3-22.local
      compute-3-23.local
      compute-3-24.local
      compute-3-25.local
      compute-3-26.local
      compute-3-27.local
      compute-3-28.local
      compute-3-29.local
      compute-3-32.local
      compute-3-33.local
      compute-3-34.local
      compute-3-35.local
      compute-3-36.local
      compute-3-38.local
      compute-3-40.local
      compute-3-41.local
      compute-3-42.local
      compute-3-44.local
      compute-3-48.local
      
```
- QMON +++ Job Control**: Shows a table of pending jobs.

JobId	Priority	JobName	Owner	Status	Queue
6946597	6.89577	tiradas.sh	carmen	qw	*pending*
6949447	5.16712	run-gfortr	aurelio	qw	*pending*
6949449	5.16708	run-open64	aurelio	qw	*pending*
6949451	5.16705	run-ekopat	aurelio	qw	*pending*
6950772	4.66225	go.tsop1-2	uvigoabr	qw	*pending*
6950774	4.66225	go.tsop1-2	uvigoabr	qw	*pending*
6950776	4.66224	go.tsop1-2	uvigoabr	qw	*pending*
6950792	4.65807	go.min1-2	uvigoabr	qw	*pending*
6950794	4.65807	go.min1-2	uvigoabr	qw	*pending*
6950796	4.65807	go.min1-2	uvigoabr	qw	*pending*
6950798	4.65806	go.min1-2	uvigoabr	qw	*pending*
6950796	4.65807	go.min1-2	uvigoabr	qw	*pending*
6950833	4.65526	go.tsop1-3	uvigoabr	qw	*pending*
6950835	4.65525	go.tsop1-3	uvigoabr	qw	*pending*
6950837	4.65524	go.tsop1-3	uvigoabr	qw	*pending*
6950839	4.65524	go.tsop1-3	uvigoabr	qw	*pending*
6950844	4.65353	go.tsop1-2	uvigoabr	qw	*pending*
6950846	4.65353	go.min2_Au	uvigoabr	qw	*pending*



Gestión y envío de trabajos

Job Control



The screenshot displays the QMON Job Control interface. The window title is "QMON +++ Job Control <@compute-4-1.local>". The interface features a "GRID ENGINE" logo and three tabs: "Pending Jobs", "Running Jobs", and "Finished Jobs". The "Pending Jobs" tab is active, showing a table of jobs. The table has columns for JobId, Priority, JobName, Owner, Status, and Queue. The jobs listed are all in a "qw" status and are in the "*pending*" queue. The control panel on the right includes buttons for Refresh, Submit, Tickets, Force (checkbox), Suspend, Resume, Delete, Reschedule, Select All, Why?, Hold, Priority, Qalter, Clear Error, Customize, Done, and Help.

JobId	Priority	JobName	Owner	Status	Queue
6955054	4.82173	ts_ads02_2	uviqorao	qw	*pending*
6955056	4.82172	ts_ads02_4	uviqorao	qw	*pending*
6955058	4.82172	ts_ads02_4	uviqorao	qw	*pending*
6955060	4.82172	ts_ads02_5	uviqorao	qw	*pending*
6955062	4.82172	ts_ads02_7	uviqorao	qw	*pending*
6955064	4.82110	ts_ads02_6	uviqorao	qw	*pending*
6955066	4.81311	scan_02ads	uviqorao	qw	*pending*
6953807	1.98984	STDIN	fusion042	qw	*pending*
6953808	1.98981	STDIN	fusion042	qw	*pending*
6953809	1.98976	STDIN	fusion042	qw	*pending*
6953810	1.98973	STDIN	fusion042	qw	*pending*
6953811	1.98969	STDIN	fusion042	qw	*pending*
6953812	1.98966	STDIN	fusion042	qw	*pending*
6953813	1.98962	STDIN	fusion042	qw	*pending*
6953814	1.98959	STDIN	fusion042	qw	*pending*
6953815	1.98954	STDIN	fusion042	qw	*pending*
6953816	1.98951	STDIN	fusion042	qw	*pending*

Gestión y envío de trabajos

Gestión de Colas

QMON +++ Cluster Queues <@compute-4-1.local>

GRID ENGINE

Cluster Queue Control

Cluster Queues					Queue Instances				Hosts		
Host	Arch	#CPU	#Sock	#Core	LoadAvg	%CPU	MemUsed	MemTotal	SwapUsed	SwapT	
compute-3-91	x86_64	4	0	0	0.00	0.0%	676.3M	2.9G	9.6M	2.0G	
compute-3-92	x86_64	4	-	-	-	-	-	-	-	-	
compute-3-93	x86_64	4	0	0	0.00	0.0%	136.8M	2.9G	12.0K	1.9G	
compute-3-94	x86_64	4	0	0	0.00	0.0%	140.2M	2.9G	128.0K	1.9G	
compute-3-95	x86_64	4	0	0	0.00	0.0%	116.5M	2.9G	10.1M	1.9G	
compute-3-99	lx24-amd64	8	-	-	-	-	-	11.7G	-	2.0G	
compute-4-1	x86_64	22	2	12	0.01	0.0%	1.3G	31.5G	6.2M	8.0G	
compute-4-10	x86_64	5	2	12	19.02	79.2%	8.6G	63.0G	10.2M	8.0G	
compute-4-11	x86_64	6	2	12	17.86	74.4%	6.8G	63.0G	809.1M	8.0G	
compute-4-12	x86_64	7	2	12	16.83	70.1%	4.1G	63.0G	321.4M	8.0G	
compute-4-13	x86_64	6	2	12	18.08	75.3%	19.3G	63.0G	50.1M	8.0G	
compute-4-14	x86_64	6	2	12	18.04	75.2%	6.3G	63.0G	37.5M	8.0G	
compute-4-15	x86_64	1	2	12	23.13	96.4%	5.8G	63.0G	11.8M	8.0G	
compute-4-16	x86_64	7	2	12	17.25	71.9%	5.0G	63.0G	12.9M	8.0G	
compute-4-17	x86_64	2	2	12	22.11	92.1%	4.5G	63.0G	407.2M	8.0G	
compute-4-18	x86_64	5	2	12	18.97	79.0%	5.0G	63.0G	13.2M	8.0G	
compute-4-19	x86_64	5	2	12	18.99	79.1%	8.9G	63.0G	206.8M	8.0G	
compute-4-2	x86_64	24	2	12	0.00	0.0%	2.1G	31.5G	9.9M	8.0G	
compute-4-20	x86_64	8	2	12	20.89	87.0%	34.5G	63.0G	189.6M	8.0G	
compute-4-21	x86_64	0	2	12	17.72	73.8%	5.2G	63.0G	0.0	8.0G	
compute-4-22	x86_64	8	2	12	15.98	66.6%	22.5G	63.0G	39.0M	8.0G	
compute-4-23	x86_64	0	-	-	-	-	-	31.5G	-	8.0G	
compute-4-24	x86_64	0	-	-	-	-	-	31.5G	-	8.0G	
compute-4-3	x86_64	2	2	12	21.92	91.3%	5.8G	63.0G	11.9M	8.0G	
compute-4-4	x86_64	8	2	12	16.01	66.7%	3.8G	31.5G	7.5M	8.0G	
compute-4-5	x86_64	5	2	12	18.97	79.0%	3.8G	63.0G	10.9M	8.0G	
compute-4-51	x86_64	7	2	12	17.09	71.2%	3.7G	63.0G	34.1M	8.0G	
compute-4-52	x86_64	8	2	12	16.00	66.7%	7.4G	63.0G	44.0M	8.0G	
compute-4-53	x86_64	3	2	12	21.01	87.5%	2.6G	63.0G	1.8G	8.0G	
compute-4-54	x86_64	2	2	12	22.03	91.8%	3.7G	63.0G	69.9M	8.0G	

Cluster Queue Control actions:

- Refresh
- Tickets
- Customize
- Done
- Help
- Add
- Clone
- Modify
- Delete
- Show Detached Settings
- Force
- Suspend
- Resume
- Disable
- Enable
- Reschedule
- Clear Error
- Load
- c a A E
- Explain

Gestión y envío de trabajos

Envío de trabajos

Submit Job <@compute-4-1.local>

GRID ENGINE

Job Submission

General | **Advanced**

Prefix # \$

Job Script 

Job Tasks 

Job Name 

Job Args 

Priority Job Share Max Tasks

0 0 0

Start At 

Project 

Current Working Directory

Working Directory 

Shell 

Merge Output

stdout 

stderr 

stdin 

Request Resources 

Restart depends on Queue 

Notify Job

Hold Job UNDEFINED

Start Job Immediately

Job Reservation

Batch

Jobscript

Submit

Edit

Clear

Reload

Save Settings

Load Settings

Done

Help

Gestión y envío de trabajos

Configuración de:

- Recursos complejos
- Hosts
- Cluster
- Planificador
- Calendarios
- Usuarios
- Entornos Paralelos
- Checkpoint
- Políticas
- Proyectos
- Quotas
- Reservas



Las alternativas en software libre de sistemas de colas y planificadores son maduras, versátiles y eficientes.

La gran mayoría de los centros de supercomputación las usan y adaptan de acuerdo a sus necesidades.

Compiladores y herramientas de desarrollo

- ✓ En supercomputación se busca la obtención del máximo rendimiento de una aplicación en una plataforma determinada.
- ✓ Los compiladores y las herramientas de desarrollo son fundamentales en este objetivo.



¿Software libre disponible?

Sí, muchísimas posibilidades ...

Compiladores: C/C++/Fortran/Java/Scripting (GNU, ...)

Debuggers: GNU ...

Librerías de paralelización: Threads (Linux), OpenMP (GNU,...), MPI (MPICH, openMPI, ...)

Librerías matemáticas: BLAS/LAPACK, FFT, ... (GNU, ...)

Compiladores y herramientas de desarrollo

¿Rendimiento con las últimas tecnologías?

Experiencia en el CESGA

Caso FinisTerae:

Itanium 2 Montvale/gran cantidad de memoria

Puesta en marcha: Finales 2007

FORTRAN (16 benchmarks)

MEDIA/s	Intel 11.1	GFortran 4.4
PB05	20.94	50.95

Polyhedron Fortran Benchmarks <http://www.polyhedron.com/>



Compiladores y herramientas de desarrollo

FT	Intel 11.1	GFortran 4.4	Open64 4.2
AC	11.85	25.58	10.30
AERMOD	57.74	72.69	84.68
AIR	11.92	14.58	9.12
CAPACITA	105.30	138.47	111.62
CHANNEL	3.06	11.85	4.29
DODUC	56.83	80.68	78.70
FATIGUE	18.94	24.94	17.79
GAS_DYN	9.07	48.99	11.92
INDUCT	31.38	68.45	41.72
LINPK	26.58	108.34	32.18
MDBX	15.03	31.73	21.04
NF	18.02	119.01	52.87
PROTEIN	72.08	186.85	98.73
RNFLOW	53.67	143.19	69.62
TEST_FPU	11.07	65.13	13.89
TFFT	5.53	9.64	8.20
MEDIA	20.94	50.95	26.88



<http://www.open64.net/>

INTEL: `lfort -O3 -ipo -ftz -static`

GFORTRAN: `-ffast-math -O3 -minline-int-divide-min-latency -minline-float-divide-min-latency -minline-sqrt-max-throughput`

OPEN64: `-march=auto -Ofast -ipa -ffast-math`

Compiladores y herramientas de desarrollo

¿Rendimiento con las últimas tecnologías?

Experiencia en el CESGA

Caso SVG:

AMD opteron 6174 (Magny-Cours)

Puesta en marcha: Marzo 2011

FORTRAN (16 benchmarks)

MEDIA/s	Intel 12.0	GFortran 4.4	x86 OPEN64 4.2	PGI 11.4	Ekopath4
PB05	14.84	16.86	16.38	17.58	19.06

Polyhedron Fortran Benchmarks <http://www.polyhedron.com/>

Compiladores y herramientas de desarrollo

SVG	Intel 12.0	GFortran 4.4	Open64 4.2	PGI 11.4	Ekopath4
AC	12.67	13.79	10.58	14.60	11.61
AERMOD	22.97	44.37	34.05	25.45	37.12
AIR	7.17	7.69	6.69	8.82	8.30
CAPACITA	50.57	56.04	47.29	46.52	50.95
CHANNEL	5.44	4.36	5.43	5.41	6.42
DODUC	32.90	38.13	37.32	37.57	37.00
FATIGUE	8.86	9.35	7.66	10.53	8.70
GAS_DYN	4.32	7.18	5.40	7.09	14.09
INDUCT	23.57	23.76	34.63	37.08	61.20
LINPK	15.73	15.85	21.03	15.83	15.92
MDBX	16.99	16.87	17.85	19.00	18.75
NF	17.12	20.40	18.87	19.15	21.91
PROTEIN	45.11	50.41	45.00	52.95	45.39
RNFLOW	26.27	34.58	37.15	43.75	36.34
TEST_FPU	10.15	10.95	11.04	11.54	14.84
TFFT	5.88	5.85	6.22	6.29	5.82
MEDIA	14.84	16.86	16.38	17.58	19.06

INTEL: -O3 -msse3 -ipo -no-prec-div -simd -use-intel-optimized-headers -unroll-aggressive -fast-transcendentals

GFORTRAN: -march=native -ffast-math -funroll-loops -O3

x86 OPEN64: -march=auto -Ofast -ipa

PGI: -O4 -Bstatic -V -fastsse -Munroll=n:4 -Mipa=fast,inline -tp istanbul

EKOPATH: -march=auto -O -OPT:Ofast -ffast-math -ipa

Compiladores y herramientas de desarrollo



Intel Compilers

<http://software.intel.com/en-us/articles/intel-composer-xe>



PGI Compilers

<http://www.pgroup.com/>



GFortran

<http://gcc.gnu.org/fortran>



x86 Open64 Compiler Suite

<http://developer.amd.com/tools/open64/pages/default.aspx>

EKOPath™

4



<http://www.pathscale.com/ekopath4-open-source-announcement>

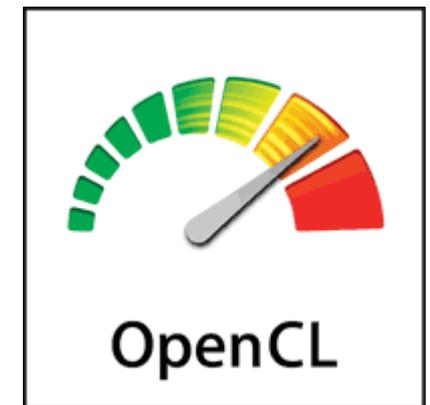
Compiladores y herramientas de desarrollo

¿Rendimiento con las últimas tecnologías?

¿Software libre y programación en GPGPUs?

Inicialmente ligado a los SDKs propietarios de los fabricante: NVIDIA/ATI

OpenCL como estándar probablemente ayude a la aparición de drivers/SDKs libres



Compiladores y herramientas de desarrollo

Herramientas de desarrollo:

En **software libre** existen una **gran cantidad de herramientas** para el desarrollo en HPC:

Debuggers: GDB

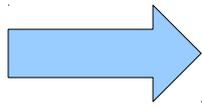
Debuggers de memoria: Valgrind/Electric Fence

Debuggers paralelos: GDB/Helgrind (Threads), GDB/Valgrind, Marmot (MPI)...

Análisis de rendimiento: gprof,PAPI,Oprofile,TAU,scalasca ...

En el CESGA un tanto ligados a las herramientas INTEL ...





Desarrollar enteramente usando software libre es una realidad.

La **limitación principal** es el **soporte de hardware específico**:

Aunque los fabricantes apoyan cada vez más proyectos de software libre

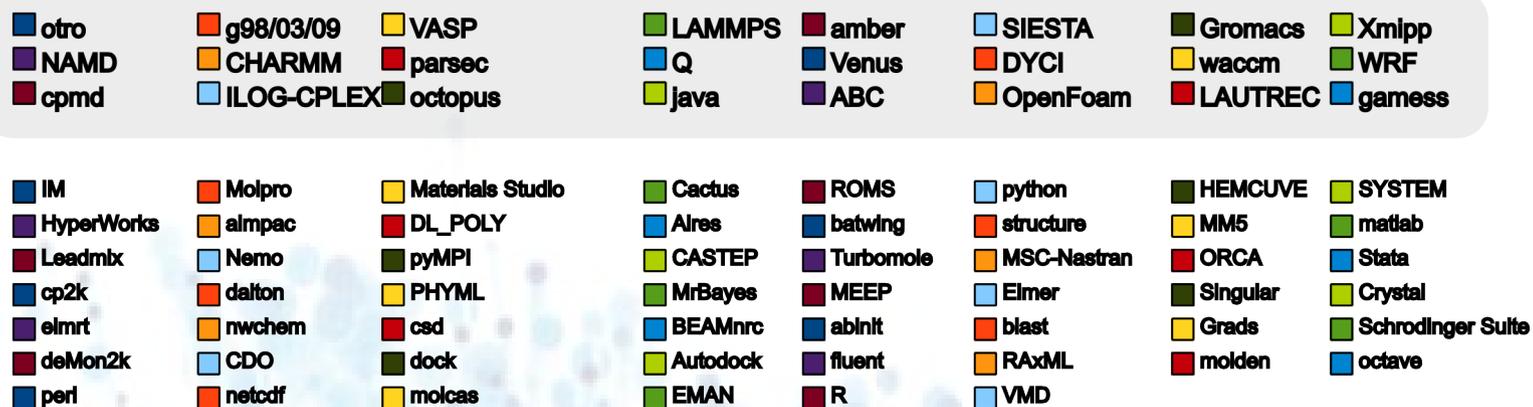
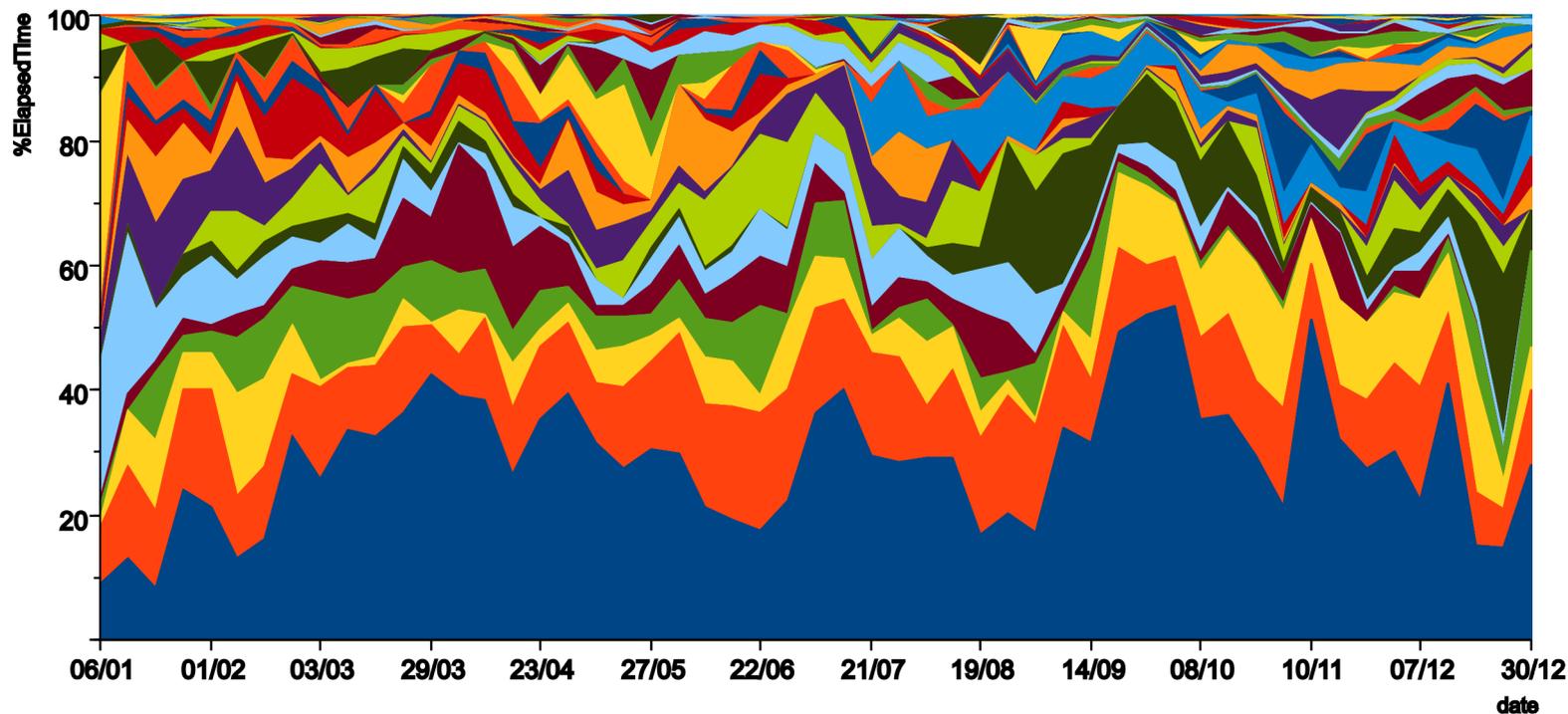
Aplicaciones

Desde el [Dpto de aplicaciones del CESGA](#) compilamos y adaptamos aplicaciones demandadas por nuestros usuarios para su ejecución eficiente en nuestros servidores.

Actualmente el CESGA da soporte a [más de 200 aplicaciones y librerías científicas](#) demandadas por sus usuarios

Software libre y programas científicos

Aplicaciones



Consumo relativo de CPU por aplicación durante el 2010

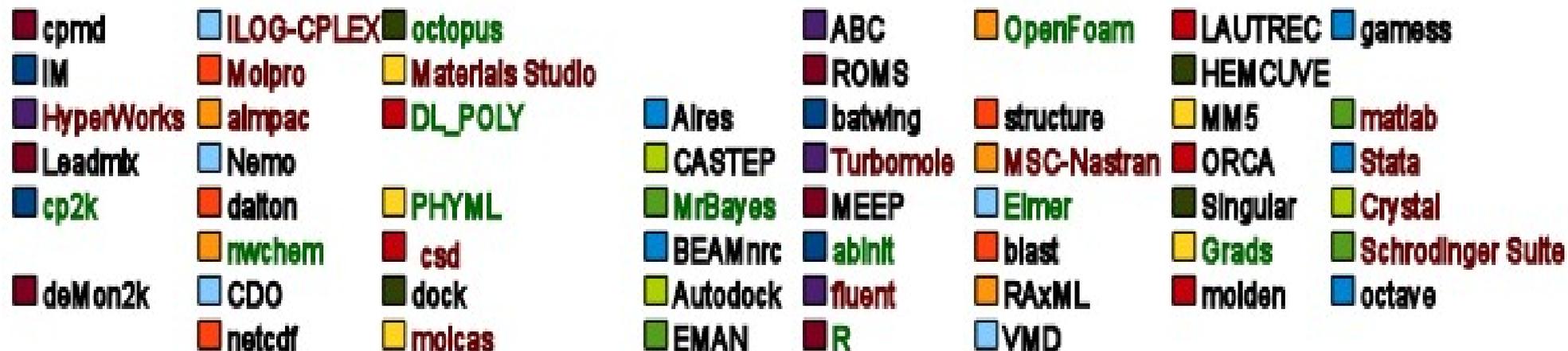
Aplicaciones

	CPU time (sys+user)
g98/03/09	2071233
VASP	1187066
LAMMPS	817379
amber	793094
SIESTA	772761
Gromacs	767408
Xmipp	632104
NAMD	535246
CHARMM	451844
parsec	388708
Q	386512
Venus	307067
DYCI	278516
waccm	247049
WRF	158028

Open source

Comercial

Aplicaciones





El software libre está muy presente en software científico.

En general aparecen 3 grupos de licencias:

- **Código abierto** (open source)
- **Comercial** (cobro por uso / facilidades para uso académico-investigación)
- **Licencia específica**: generalmente gratuito para uso académico-investigación pero con uso de código fuente restringido

Soporte a Usuarios

Adicionalmente al software de administración y desarrollo en un supercomputador, un centro de supercomputación necesita herramientas administrativas y de gestión de usuarios.

¿Cómo dar un buen soporte?

¿Cómo crear una buena base de conocimiento? ¿FAQs?

Soporte a Usuarios

This message has been automatically generated in response to the creation of a trouble ticket regarding:

"Problem about ...",

a summary of which appears below.



There is no need to reply to this message right now. Your ticket has been assigned an ID of [cesga.es #16767].

Please include the string:

[cesga.es #16767]



in the subject line of all future correspondence about this issue. To do so, you may [reply to this message](#).

Thank you,
helpdesk_sistemas@cesga.es

RT at a glance New ticket in Aplicaciones

Quick ticket creation

Subject:

Queue: Aplicaciones Owner: aurelio

Content:

Sin propietario - Aplicaciones

#	Subject Requestors	Last Updated Owner
15866	Instalacion: (112 - 430 - Finisterrae) Intel Fortran Compiler 11.1.073 aplicacions@cesga.es, software@ac.cesga.es	Mon Oct 04 17:15:23 2010 Nobody
15869	Instalacion: (113 - 431 - Finisterrae) Intel C++ Compiler 11.1.073 aplicacions@cesga.es, software@ac.cesga.es	Mon Oct 04 17:41:50 2010 Nobody
16179	Instalacion: (120 - 440 - Finisterrae) VASP 5.2 aplicacions@cesga.es, software@ac.cesga.es	Fri Oct 15 11:05:03 2010 Nobody
14773	Instalacion: (13 - 417 - Finisterrae) Ferret 6.6.2 aplicacions@cesga.es, software@ac.cesga.es	Mon Oct 18 18:42:10 2010 Nobody
16482	Instalacion: (204 - 446 - Finisterrae) Platform MPI 6.0 aplicacions@cesga.es, software@ac.cesga.es	Tue Nov 02 08:42:57 2010 Nobody
16643	Instalacion: (179 - 354 - SVGD-Prototipo) Gaussian 09 A.02 aplicacions@cesga.es, software@ac.cesga.es	Fri Nov 12 13:10:51 2010 Nobody
16648	Instalacion: (1 - 187 - SVGD-Prototipo) Gaussian 03 E.01 aplicacions@cesga.es, software@ac.cesga.es	Fri Nov 12 14:27:32 2010 Nobody

Reminders

Quick search

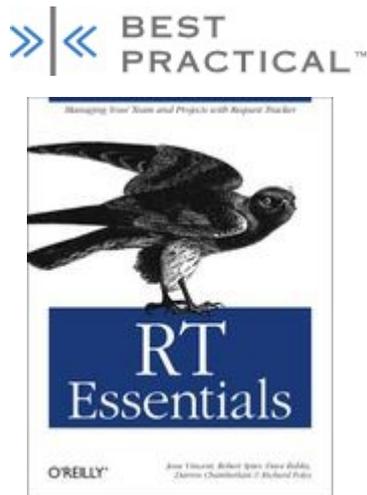
Queue	new	open	stalled
Aplicaciones	0	80	0
Cal_accmejora	0	7	0
Cal_noconformidad	0	2	0
Difusion	2	1	0
EGEE-Project	28	24	1
General	3	4	0
i2g	1	7	0
Ideas	13	11	0
Pruebas	1	1	0
RIGA	12	2	8
RT	1	4	0
Seguridad	0	0	0
servicom	0	0	0
Sistemas	9	43	0
Viajes	2	1	0

Refresh

Don't refresh this page.

Soporte a Usuarios

Request Tracker: software libre para seguimiento de “bugs”, soporte de usuarios, procesos de workflows...



<http://bestpractical.com/rt/>

Home Tickets Tools Logged in as jesse RT for example.com BEST PRACTICAL

RT at a glance New ticket in General Search...

10 highest priority tickets I own Edit

#	Subject	Priority	Queue	Status
1	Office has run out of coffee!	0	Office	(pending 1 other ticket)
2	Order more coffee	0	Office	(pending 2 other tickets)

10 newest unowned tickets Edit

#	Subject	Queue	Status	Created	Take
3	Obtain Series-C funding	General	new	52 sec ago	Take

Bookmarked Tickets Edit

#	Subject	Priority	Queue	Status
4	Evaluate responses to RFP for coffee roasts	0	General	new

Quick ticket creation

Subject:

Queue: Owner:

Requestors:

Content:

Create

My reminders Edit

Quick search Edit

Queue	new	open	stalled
General	2	-	-
Office	1	1	-

Dashboards Edit

RT System's dashboards	Subscription
SLA Performance	daily at 6:00 AM

Refresh

Don't refresh this page.

Go!

Soporte a Usuarios

En el CESGA también existe una intranet de gestión con desarrollos propios basados enteramente en software libre:

Desarrollos web: LAMP

- Linux
- Apache
- Mysql/PostgreSQL
- PHP



Nova máquina | Nova aplicación | Nova versión de aplicación | Instalación vec aplicación en máquina | Instalación incompletas | Programas e aplicacións | Estado das aplicacións | Indicadores aplicacións | Axuda

Cambiar a vista de árbol por máquinas | Expandir árbol aplicacións | Descargar PDF estado actual

Admin. Sair

Gardar Atrás

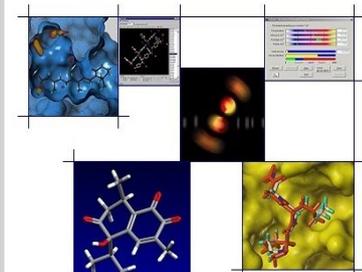
Datos actuals da aplicación | Descripción para a WEB: | Descripción para la WEB: | Description for the WEB:

Web CESGA

Descripción: Guía de usoz | Usuarios | Referencia: | URL Manual:



Cambridge Structural Database é unha base de datos que recolle información bibliográfica, química e cristalográfica de compostos orgánicos e organometálicos obtida mediante difracción de raios X e difracción de neutróns.



Cambiar a vista de árbol por máquinas | Expandir árbol aplicacións | Descargar PDF estado actual

Nova máquina | Nova aplicación | Nova versión de aplicación | Instalación vec aplicación en máquina | Instalación incompletas | Programas e aplicacións | Estado das aplicacións | Indicadores aplicacións | Axuda

Admin. Sair

Consumo del día: Lunes, 03/10/2011

Aplicaciones	Jobs	Tiempo			Memoria	I/O (Chars)	R/W (Blocks)
		sys	usr	elp			
ft							
Crystal	72	74.81	386.09	462.30	47.88	0	0
ORCA	6	0.31	52.77	53.11	3.33	0	0
cp2k	208	781.56	5,288.28	6,078.82	90.48	0	0
SYSTEM	7	0.21	0.09	4,588.23	14.44	0	0
CDO	18	0.13	20.26	3.14	3.50	0	0
SIESTA	3447	119.53	914.08	1,037.29	107.96	0	0
Nemo	88	24.36	355.72	382.28	131.64	0	0
ROMS	61	30.33	119.57	145.42	83.82	0	0
otro	566	25.78	154.49	185.43	120.86	0	0
nwchem	75	29.77	69.72	144.45	40.66	0	0
pyMPI	882	34.34	107.73	149.59	27.90	0	0
CHARMM	32	1.21	93.57	94.92	22.10	0	0
perl	130	0.64	6.32	8.01	0.39	0	0
Grads	12	0.01	0.27	0.29	9.05	0	0
parsec	92	7.69	696.79	705.49	11.64	0	0
g98/03/09	27	23.22	3,697.90	843.49	870.08	0	0
Molpro	20	0.80	5.33	6.24	522.24	0	0
WRF	747	1.65	330.07	334.45	15.08	0	0
amber	230	31.36	297.52	329.63	24.90	0	0
java	2	0.00	0.07	4.29	57.82	0	0
Gromacs	167	472.38	6,252.61	6,728.44	2.66	0	0
molden	10	0.01	0.29	1.31	7.23	0	0
VASP	253	93.47	1,892.50	1,995.13	63.24	0	0
svg2011							
g98/03/09	7	1.89	777.00	108.54	383.52	0	0
otro	331	0.25	2,883.29	2,912.39	70.36	0	0
Gromacs	83	0.03	294.01	294.42	0.32	0	0
NAMD	64	1.24	31.01	56.46	4.83	0	0

¿Está presente el Software libre? **SI**

¿es importante? ¿crítico? **SI**

¿está influyendo en el centro de supercomputación? **SI**

¿de qué manera?

- **Los centros de supercomputación intervienen o inician desarrollos**
- **Software personalizado**
- **Reducción de costes**

Muchas gracias ¿Preguntas?





Jornadas sobre Computación de Altas Prestaciones y Software Libre

Software Libre en el Centro de Supercomputación de Galicia

Aurelio Rodríguez
aurelio@cesga.es



**¿Está presente el Software libre?
¿es importante? ¿crítico?
¿está influyendo en el centro de supercomputación?
¿de qué manera?**

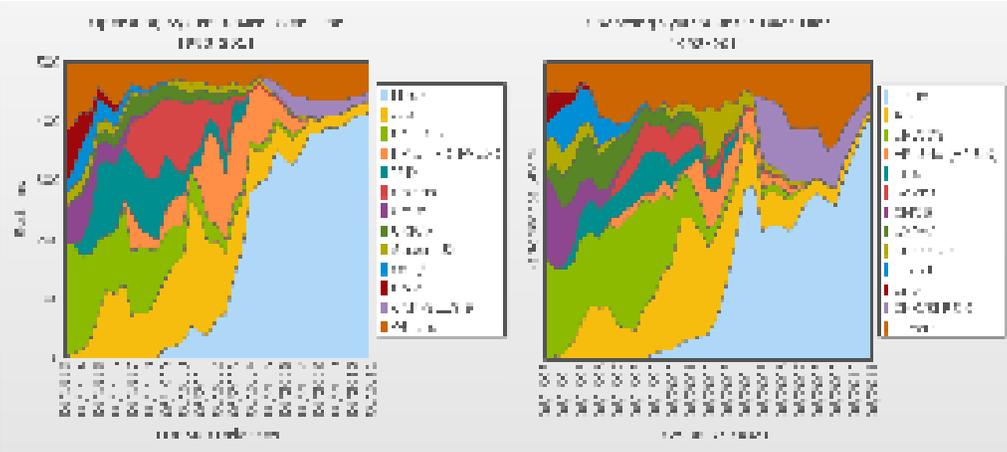
Agenda

Software libre en:

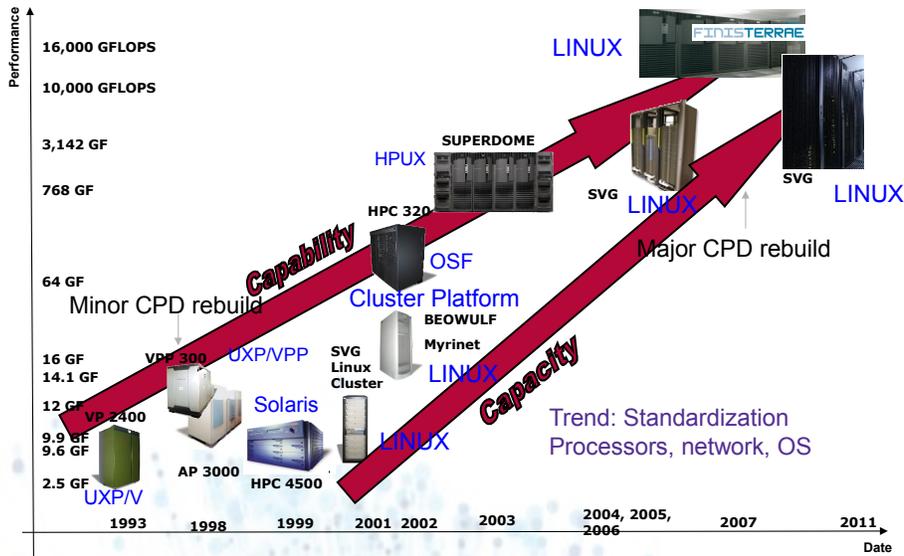
- I.Sistema operativo del Supercomputador
- II.Monitorización del Supercomputador
- III.Disco del Supercomputador
- IV.Gestión y envío de trabajos
- V.Compiladores y herramientas de desarrollo en un Supercomputador
- VI.Aplicaciones
- VII.Soporte a usuarios



Sistema operativo del Supercomputador



Sistema operativo del Supercomputador



Sistema operativo del Supercomputador



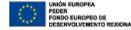
http://www.linuxhpc.org/pages.php?page=Cluster_Software



Open-Source Toolkit
for Real and Virtual Clusters

<http://www.rocksclusters.org>

Soluciones disponibles en las grandes distribuciones



Sistema operativo del Supercomputador

CLOUD

Independencia del sistema operativo: Virtualización

Gran flexibilidad:

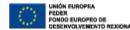
- Software específico
- Requerimientos de seguridad específicos

¿Posibilidades en software libre?

Virtualización: Xen/KVM/Virtualbox

Gestión Cloud: OpenNebula

OpenNebula.org
The Open Source Toolkit for Cloud Computing



Sistema operativo del Supercomputador

El software libre (LINUX) claramente predomina en el sistema operativo de un supercomputador.

El software libre también está presente en las nuevas tendencias: entornos cloud



Monitorización del Supercomputador



Monitoring clusters and Grids since the year 2000

<http://ganglia.sourceforge.net/>

- Ganglia es un sistema de monitorizado distribuido y escalable para clusters/grids.
- Implementación robusta portada a un gran conjunto de procesadores/sistemas operativos.
- Actualmente usada en miles de clusters en todo el mundo.

Con Nagios es posible:

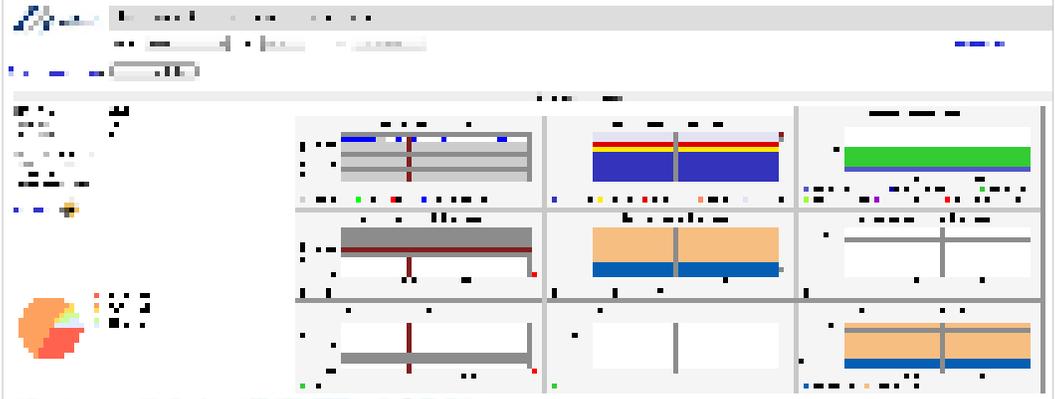
- Monitorizar una infraestructura entera
- Localizar problemas antes de que ocurran
- Conocer los problemas inmediatamente
- Compartir disponibilidad
- Detectar problemas de seguridad
- Planificar actualizaciones

Nagios[®]

<http://www.nagios.org>

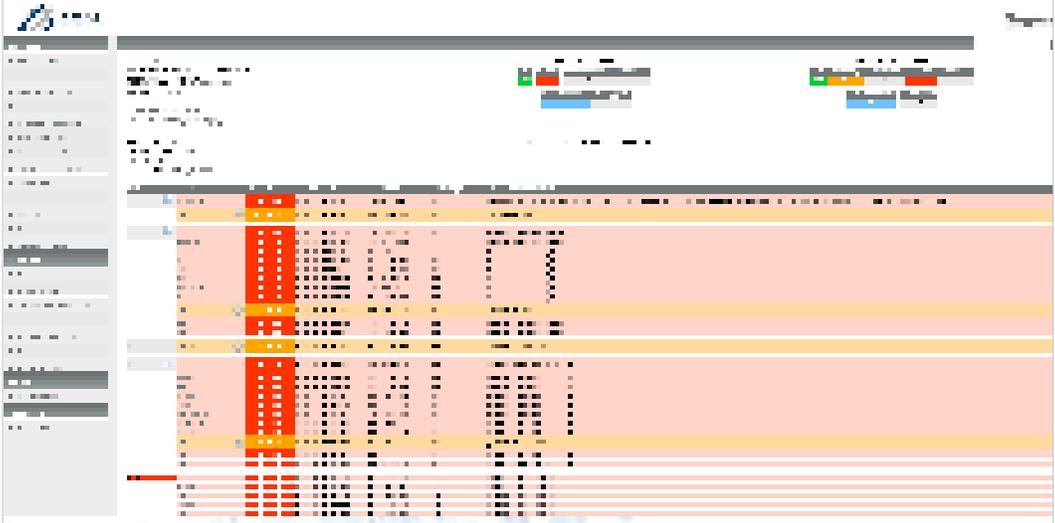


Monitorización del Supercomputador



Monitorización del Supercomputador

Nagios®



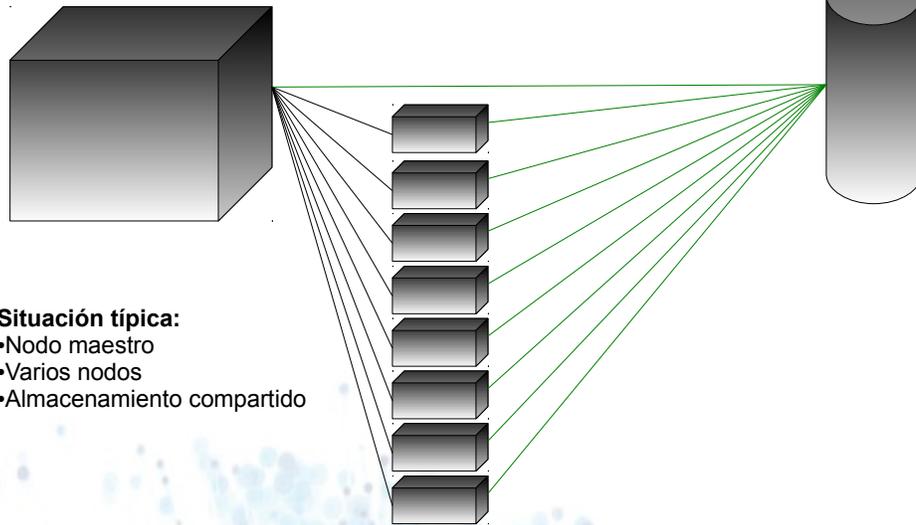
Monitorización del Supercomputador

El software libre no sólo predomina en la monitorización sino que define tendencias y estándares de facto



Disco del Supercomputador

Clusters y Almacenamiento compartido



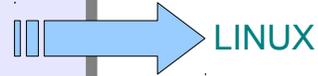
Situación típica:

- Nodo maestro
- Varios nodos
- Almacenamiento compartido

Disco del Supercomputador

Clusters y Almacenamiento compartido al viejo estilo

- I. Un **único servidor de almacenamiento** se convierte rápidamente en un cuello de botella para el rendimiento
- II. Si en el tiempo el cluster crece también crecen los requerimientos de almacenamiento (también puede crecer por requerimientos de usuarios)
- III. Añadir espacio suele ser fácil
- IV. Añadir ancho de banda y IOPS es difícil y normalmente involucra una actualización cara del hardware



Disco del Supercomputador

Clusters y Almacenamiento compartido al viejo estilo

El ejemplo típico es comenzar con un servidor NFS con cierta cantidad de espacio en disco/memoria/procesador y ir añadiendo discos a este servidor:

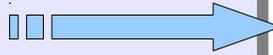
- I. Añadir espacio simplemente supone añadir más discos o un nuevo controlador con un puerto externo para conectar discos externos
- II. Pero si no aumentas el ancho de banda de la red de este servidor no te vas a poder beneficiar de un mayor ancho de banda a disco
- III. La memoria del servidor se comparte entre más discos
- IV. El procesador se comparte aunque en el entorno multicore actual esto no suele ser un problema.

Disco del Supercomputador

Clusters y Almacenamiento compartido con solución paralela

La **solución paralela** consiste en:

- I. Añadir servidores de almacenamiento, no sólo espacio de disco
- II. Cada servidor de almacenamiento añade más memoria, más procesador y más ancho de banda
- III. **La complejidad en el software es muy alta**
- IV. No hay una fácil solución como NFS o CIFS



Alternativas en software libre?

Disco del Supercomputador

Clusters y Almacenamiento compartido con solución paralela

TOP 500 (June 2010) 100 sistemas primeros:

59/100 Lustre

22/100 GPFS

3/100 Panasas

1/100 CXFS

15 sin determinar



Open source

lustre



Disco del Supercomputador

Arquitectura de Lustre

- 4 componentes principales:
- MetaData Server (MDS)
 - Object Storage Servers (OSSs)
 - Object Storage Targets (OSTs)
 - Clientes

MDS

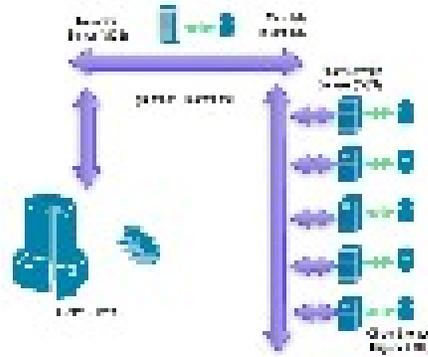
Gestiona el espacio de nombres,
operaciones de ficheros y directorios
Almacena los metadatos del sistema

OSS

Gestiona los OSTs

OST

Gestiona los dispositivos (discos)
Almacena los ficheros (data stripes)



Disco del Supercomputador

HP-SFS

- Sistema de almacenamiento paralelo basado en [Lustre](#)
- Capacidad total de 216 Terabytes, obtenida mediante 864 discos SATA de 250 GB
- 18 celdas (servidores Proliant DL380) y 72 cabinas de discos HP SFS-20.
- Proporciona hasta 10 GB/s en lectura y 6 GB/s en escritura (real)
- Se accede mediante Infiniband.
- Es visto desde todos los nodos de computación como un sistema de ficheros convencional (/sfs)

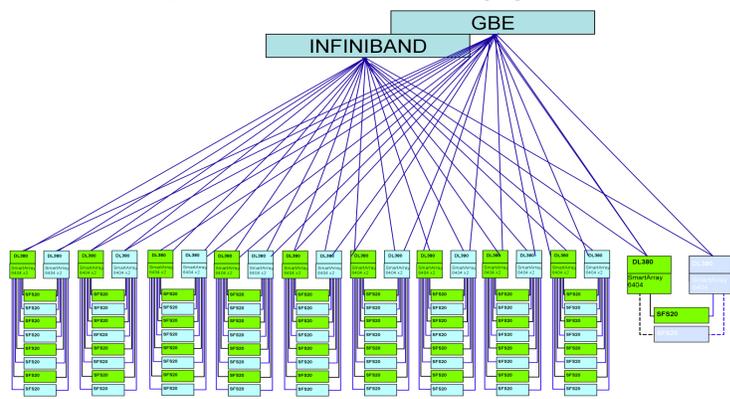
Disco del Supercomputador

HP-SFS

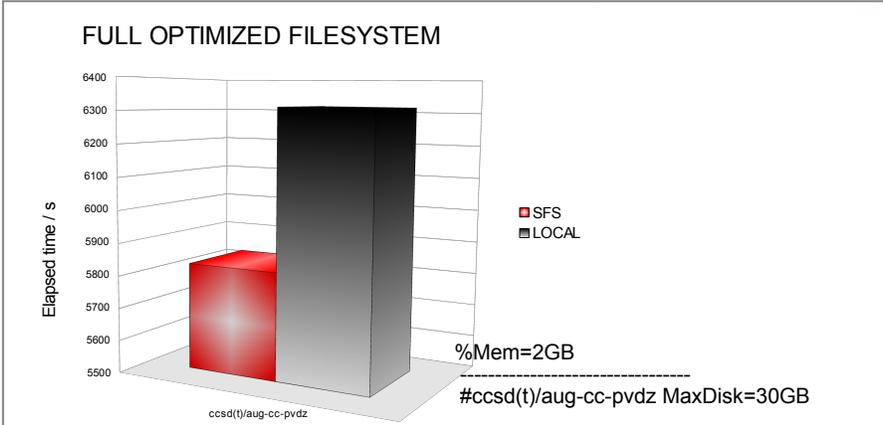
- Sistema de almacenamiento paralelo basado en [Lustre](#)
- Capacidad total de 216 Terabytes, obtenida mediante 864 discos SATA de 250 GB
- 18 celdas (servidores Proliant DL380) y 72 cabinas de discos HP SFS-20.
- Proporciona hasta 10 GB/s en lectura y 6 GB/s en escritura (real)
- Se accede mediante Infiniband.
- Es visto desde todos los nodos de computación como un sistema de ficheros convencional (/sfs)

Disco del Supercomputador

HP SFS20 - CESGA - IB/GBE



Disco del Supercomputador



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



Disco del Supercomputador

El software libre es una alternativa clara para sistemas de ficheros paralelos.

Muchos productos comerciales han fracasado en este área y las alternativas basadas en software libre predominan.



Gestión y envío de trabajos



Open Grid Scheduler

<http://gridscheduler.sourceforge.net/>

TORQUE Open-Source Resource Manager

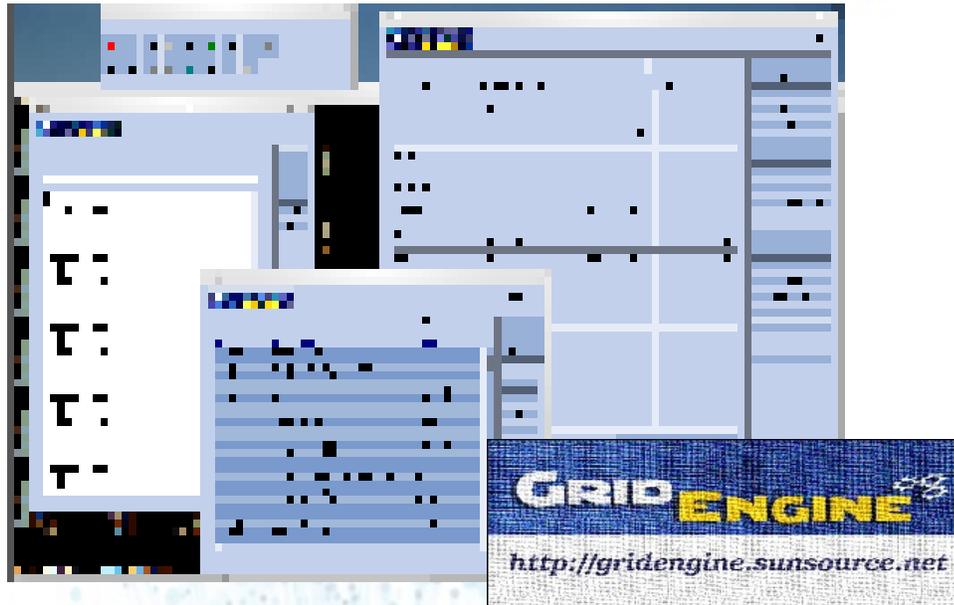
<http://www.clusterresources.com/pages/products/torque-resource-manager.php>



<https://computing.llnl.gov/linux/slurm>

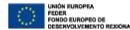
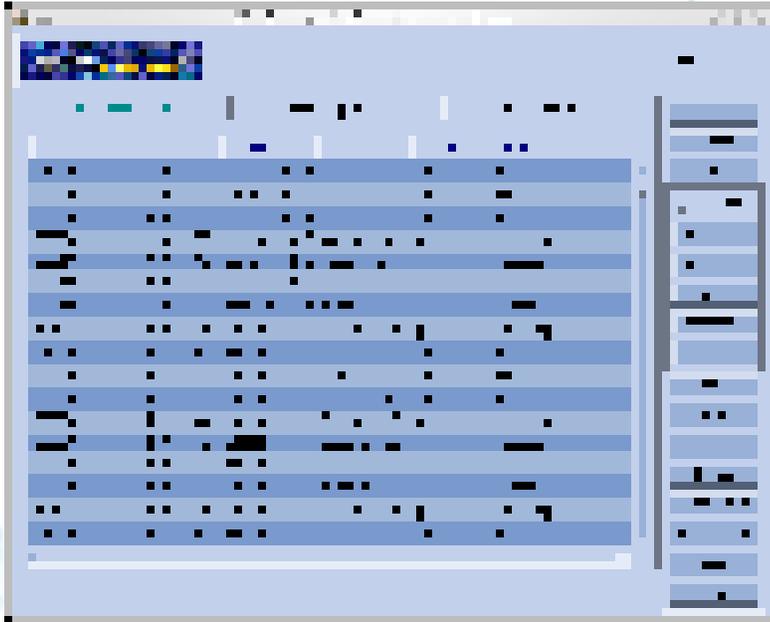


Gestión y envío de trabajos



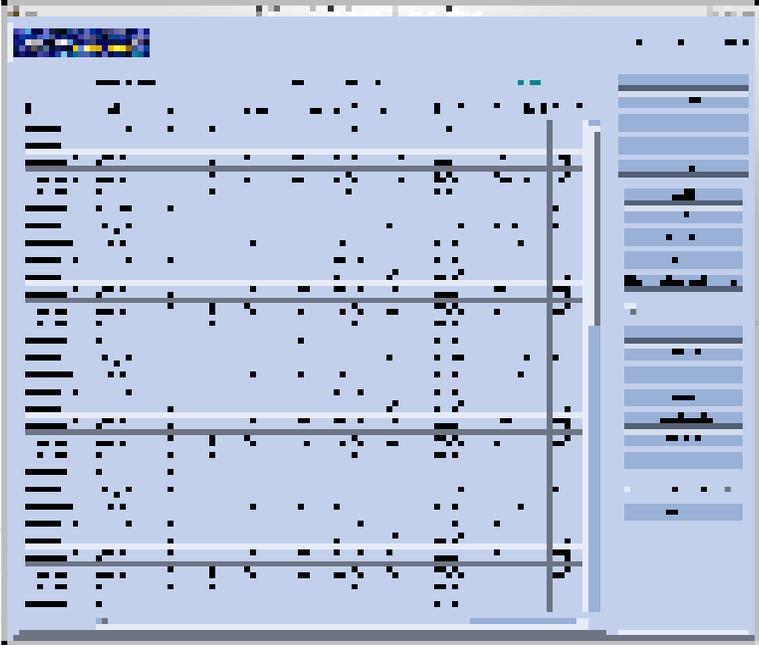
Gestión y envío de trabajos

Job Control



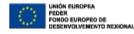
Gestión y envío de trabajos

Gestión de Colas



Gestión y envío de trabajos

Envío de trabajos



Gestión y envío de trabajos

Configuración de:

- Recursos complejos
- Hosts
- Cluster
- Planificador
- Calendarios
- Usuarios
- Entornos Paralelos
- Checkpoint
- Políticas
- Proyectos
- Quotas
- Reservas



Las alternativas en software libre de sistemas de colas y planificadores son maduras, versátiles y eficientes.

La gran mayoría de los centros de supercomputación las usan y adaptan de acuerdo a sus necesidades.

Compiladores y herramientas de desarrollo

- ✓ En supercomputación se busca la obtención del máximo rendimiento de una aplicación en una plataforma determinada.
- ✓ Los compiladores y las herramientas de desarrollo son fundamentales en este objetivo.



¿Software libre disponible?

Compiladores y herramientas de desarrollo

Sí, muchísimas posibilidades ...

Compiladores: C/C++/Fortran/Java/Scripting (GNU, ...)

Debuggers: GNU ...

Librerías de paralelización: Threads (Linux), OpenMP (GNU,...), MPI (MPICH, openMPI, ...)

Librerías matemáticas: BLAS/LAPACK, FFT, ... (GNU, ...)



Compiladores y herramientas de desarrollo

¿Rendimiento con las últimas tecnologías?

Experiencia en el CESGA

Caso FinisTerra:

Itanium 2 Montvale/gran cantidad de memoria

Puesta en marcha: Finales 2007

FORTTRAN (16 benchmarks)

MEDIA/s	Intel 11.1	GFortran 4.4
PB05	20.94	50.95

Polyhedron Fortran Benchmarks <http://www.polyhedron.com/>



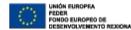
Compiladores y herramientas de desarrollo

FT	Intel 11.1	GFortran 4.4	Open64 4.2
AC	11.85	25.58	10.30
AERMOD	57.74	72.69	84.68
AIR	11.92	14.58	9.12
CAPACITA	105.30	138.47	111.62
CHANNEL	3.06	11.85	4.29
DODUC	56.83	80.68	78.70
FATIGUE	18.94	24.94	17.79
GAS_DYN	9.07	48.99	11.92
INDUCT	31.38	68.45	41.72
LINPK	26.58	108.34	32.18
MDBX	15.03	31.73	21.04
NF	18.02	119.01	52.87
PROTEIN	72.08	186.85	98.73
RNFLOW	53.67	143.19	69.62
TEST_FPU	11.07	65.13	13.89
TFFT	5.53	9.64	8.20
MEDIA	20.94	50.95	26.88



<http://www.open64.net/>

INTEL: ifort -O3 -ipo -ftz -static
GFORTTRAN: -ffast-math -O3 -minline-int-divide-min-latency -minline-float-divide-min-latency -minline-sqrt-max-throughput
OPEN64: -march=auto -Ofast -ipa -ffast-math



Compiladores y herramientas de desarrollo

¿Rendimiento con las últimas tecnologías?

Experiencia en el CESGA

Caso SVG:

AMD opteron 6174 (Magny-Cours)

Puesta en marcha: Marzo 2011

FORTTRAN (16 benchmarks)

MEDIA/s	Intel 12.0	GFortran 4.4	x86 OPEN64 4.2	PGI 11.4	Ekopath4
PB05	14.84	16.86	16.38	17.58	19.06

Polyhedron Fortran Benchmarks <http://www.polyhedron.com/>



Compiladores y herramientas de desarrollo

SVG	Intel 12.0	GFortran 4.4	Open64 4.2	PGI 11.4	Ekopath4
AC	12.67	13.79	10.58	14.60	11.61
AERMOD	22.97	44.37	34.05	25.45	37.12
AIR	7.17	7.69	6.69	8.82	8.30
CAPACITA	50.57	56.04	47.29	46.52	50.95
CHANNEL	5.44	4.36	5.43	5.41	6.42
DODUC	32.90	38.13	37.32	37.57	37.00
FATIGUE	8.86	9.35	7.66	10.53	8.70
GAS_DYN	4.32	7.18	5.40	7.09	14.09
INDUCT	23.57	23.76	34.63	37.08	61.20
LINPK	15.73	15.85	21.03	15.83	15.92
MDBX	16.99	16.87	17.85	19.00	18.75
NF	17.12	20.40	18.87	19.15	21.91
PROTEIN	45.11	50.41	45.00	52.95	45.39
RNFLOW	26.27	34.58	37.15	43.75	36.34
TEST_FPU	10.15	10.95	11.04	11.54	14.84
TFFT	5.88	5.85	6.22	6.29	5.82
MEDIA	14.84	16.86	16.38	17.58	19.06

INTEL: -O3 -msse3 -ipo -no-prec-div -simd -use-intel-optimized-headers -unroll-aggressive -fast-transcendentals
 GFORTTRAN: -march=native -ffast-math -funroll-loops -O3
 x86 OPEN64: -march=auto -Ofast -ipa
 PGI: -O4 -Bstatic -V -fastsse -Munroll=n:4 -Mipa=fast,inline -tp istanbul
 EKOPATH: -march=auto -O -OPT:Ofast -ffast-math -ipa



Compiladores y herramientas de desarrollo



Intel Compilers

<http://software.intel.com/en-us/articles/intel-composer-xe>



PGI Compilers

<http://www.pgroup.com/>



GFortran

<http://gcc.gnu.org/fortran>



x86 Open64 Compiler Suite

<http://developer.amd.com/tools/open64/pages/default.aspx>



<http://www.pathscale.com/ekopath4-open-source-announcement>



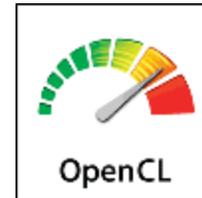
Compiladores y herramientas de desarrollo

¿Rendimiento con las últimas tecnologías?

¿Software libre y programación en GPGPUs?

Inicialmente ligado a los SDKs propietarios de los fabricante: NVIDIA/ATI

OpenCL como estándar probablemente ayude a la aparición de drivers/SDKs libres



Compiladores y herramientas de desarrollo

Herramientas de desarrollo:

En **software libre** existen una **gran cantidad de herramientas** para el desarrollo en HPC:

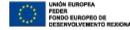
Debuggers: GDB

Debuggers de memoria: Valgrind/Electric Fence

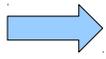
Debuggers paralelos: GDB/Helgrind (Threads), GDB/Valgrind, Marmot (MPI)...

Análisis de rendimiento: gprof,PAPI,Oprofile,TAU,scalasca ...

En el CESGA un tanto ligados a las herramientas INTEL ...



Compiladores y herramientas de desarrollo



Desarrollar enteramente usando software libre es una realidad.

La **limitación principal** es el **soporte de hardware específico**:

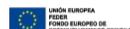
Aunque los fabricantes apoyan cada vez más proyectos de software libre

Aplicaciones

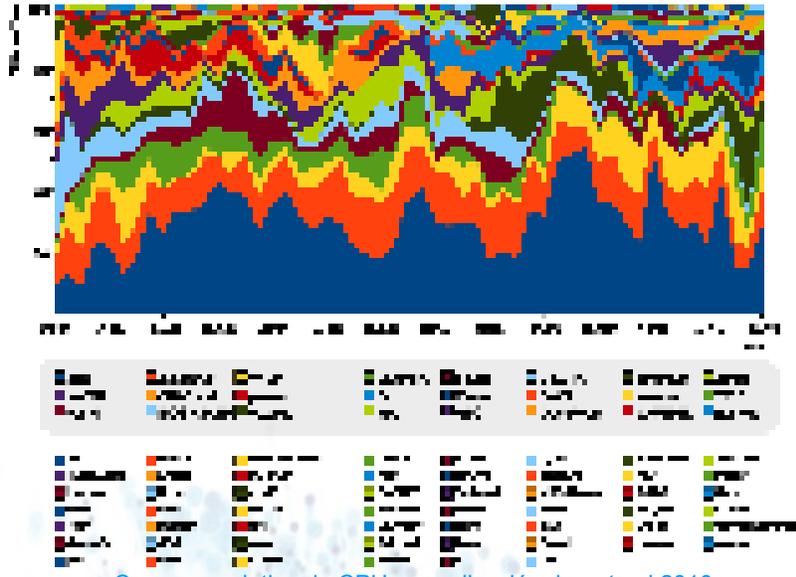
Desde el [Dpto de aplicaciones del CESGA](#) compilamos y adaptamos aplicaciones demandadas por nuestros usuarios para su ejecución eficiente en nuestros servidores.

Actualmente el CESGA da soporte a [más de 200 aplicaciones y librerías científicas](#) demandadas por sus usuarios

Software libre y programas científicos



Aplicaciones



Consumo relativo de CPU por aplicación durante el 2010



Aplicaciones

	CPU time (sys+user)
g98/03/09	2071233
VASP	1187066
LAMMPS	817379
amber	793094
SIESTA	772761
Gromacs	767408
Xmipp	632104
NAMD	535246
CHARMM	451844
parsec	388708
Q	386512
Venus	307067
DYCI	278516
wacm	247049
WRF	158028

Open source

Comercial

Aplicaciones

- | | | | | | | |
|------------|------------|------------------|----------|-------------|----------|-------------------|
| cpmd | ILDG-OPLEX | octopus | ABC | OpenFoam | LAMTREC | gamess |
| IM | molpro | Materials Studio | ROMS | | HENCUVE | |
| HyperWorks | simpac | DL_POLY | Aires | structure | MMS | matlab |
| Leadnick | Name | PHYNL | CASTEP | MSC-Nastran | ORCA | Stata |
| cp2k | dallen | cod | MrBayes | Elmer | Singular | Crystal |
| deMentik | newchem | desk | BEAMing | Blas | Grads | Schrodinger Suite |
| | QDQ | molcas | Autodesk | RAJNL | moldiv | octave |
| | relcod | | EMAN | R | | |
| | | | | YMD | | |

Aplicaciones

→ El software libre está muy presente en software científico.

En general aparecen 3 grupos de licencias:

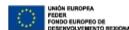
- **Código abierto** (open source)
- **Comercial** (cobro por uso / facilidades para uso académico-investigación)
- **Licencia específica**: generalmente gratuito para uso académico-investigación pero con uso de código fuente restringido

Soporte a Usuarios

Adicionalmente al software de administración y desarrollo en un supercomputador, un centro de supercomputación necesita herramientas administrativas y de gestión de usuarios.

¿Cómo dar un buen soporte?

¿Cómo crear una buena base de conocimiento? ¿FAQs?



Soporte a Usuarios

This message has been automatically generated in response to the creation of a trouble ticket regarding: ["Problem about ..."](#), a summary of which appears below.

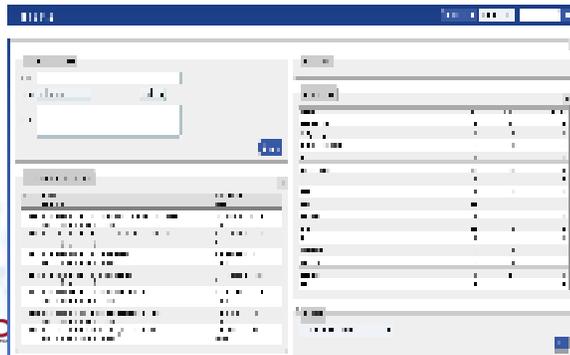
There is no need to reply to this message right now. Your ticket has been assigned an ID of [cesga.es #16767].

Please include the string:

[\[cesga.es #16767\]](#)

in the subject line of all future correspondence about this issue. To do so, you may [reply to this message](#).

Thank you,
helpdesk_sistemas@cesga.es

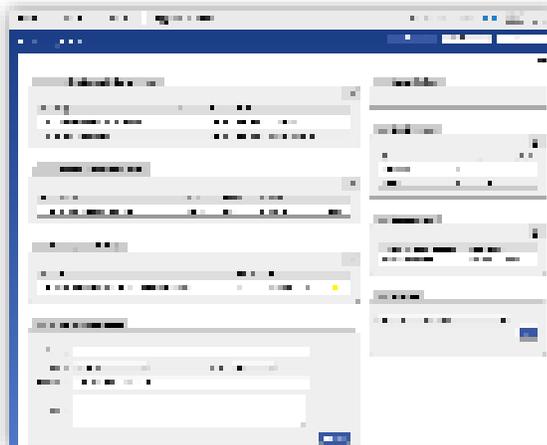


Soporte a Usuarios

Request Tracker: software libre para seguimiento de "bugs", soporte de usuarios, procesos de workflows...



<http://bestpractical.com/rt/>

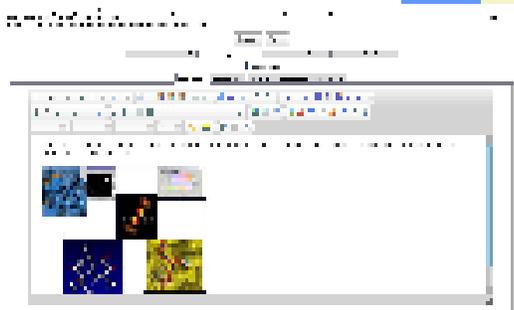


Soporte a Usuarios

En el CESGA también existe una intranet de gestión con desarrollos propios basados enteramente en software libre:

Desarrollos web: LAMP

- Linux
- Apache
- Mysql/PostgreSQL
- PHP



¿Está presente el Software libre? **SI**

¿es importante?¿crítico? **SI**

¿está influyendo en el centro de supercomputación? **SI**

¿de qué manera?

- **Los centros de supercomputación intervienen o inician desarrollos**
- **Software personalizado**
- **Reducción de costes**

Muchas gracias ¿Preguntas?

