

TERAFLOP

CESCA

REVISTA DEL CENTRE DE SUPERCOMPUTACIÓ DE CATALUNYA

• Núm. 22 • Abril 1997 •



■ Presentació del Sr.
Macià Alavedra, president
del CESCA *Pàg. 2*

■ Memòria d'activitats 1996
Pàg. 3

■ Multiplicada per sis la
potència de càlcul
disponible *Pàg. 4*

■ Consolidació del serveis
proporcionats pel Centre
Pàg. 5

■ Canvis estructurals per
dinamitzar el centre *Pàg. 10*

■ Els nostres serveis
Pàg. 12

Supercomputació al servei de l'usuari



Macià Alavedra
President del CESCA

Al'octubre de 1995 la Fundació Catalana per a la Recerca va signar un conveni amb la CIRIT i la Universitat Politècnica de Catalunya per coordinar les activitats del CESCA amb les del CEPBA mitjançant el Centre de Computació i Comunicacions de Catalunya i compartir els recursos de càlcul i humans disponibles en ambdós centres. L'any 1996 s'ha caracteritzat per la posada en marxa d'aquest acord i la consolidació dels serveis que el CESCA ofereix a les universitats, centres de recerca i empreses de Catalunya.

La potència de càlcul disponible per als investigadors ha augmentat significativament amb les ampliacions del Cray Y-MP i de l'IBM SP2 del CESCA i la disponibilitat dels equips del CEPBA. Els serveis del Centre que fins ara estaven exclusivament orientats al mercat científicotècnic, s'han expandit a l'entorn comercial amb la possibilitat d'experimentar l'ús de les bases de dades paral·leles.

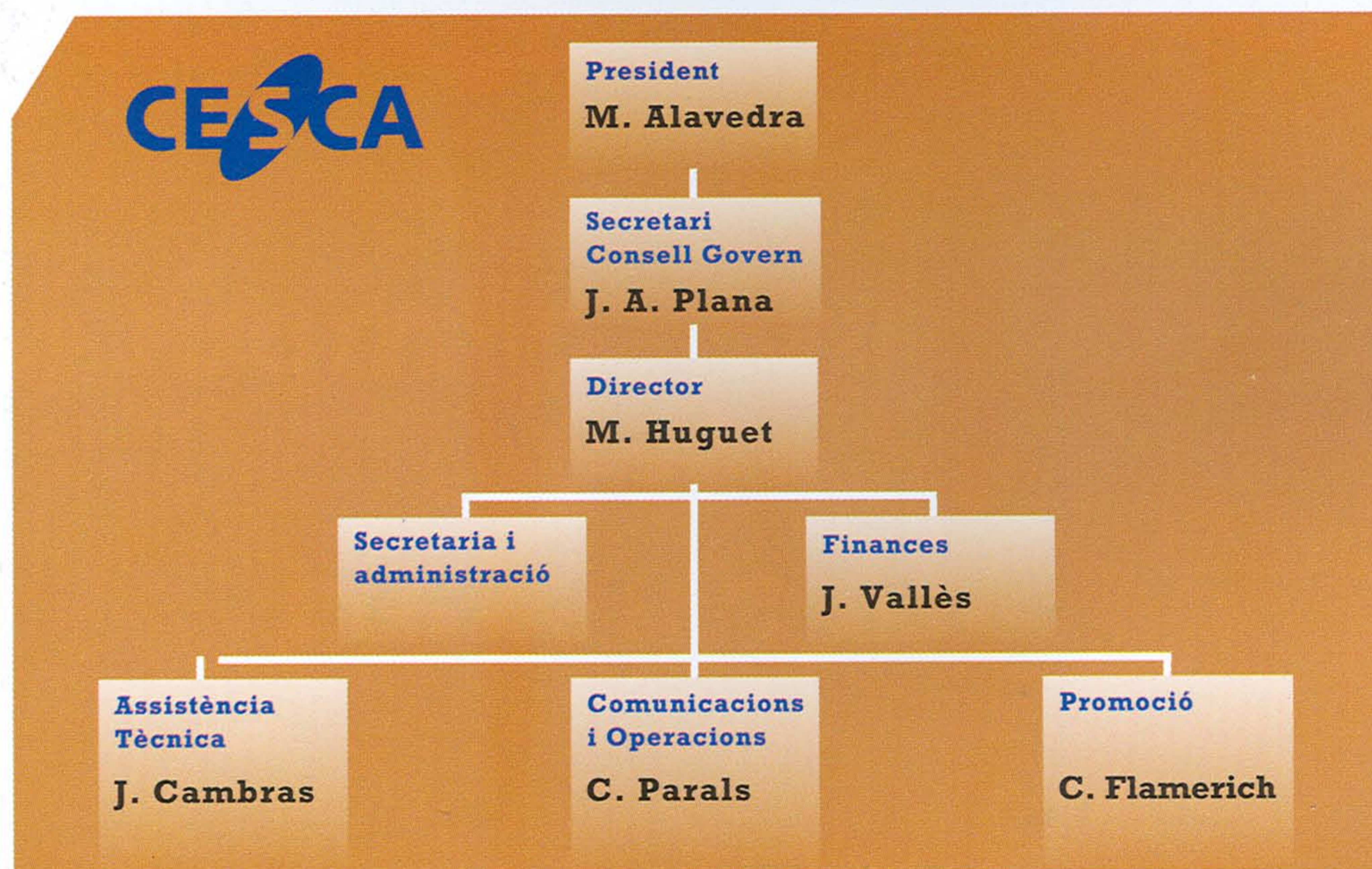
L'Anella Científica s'ha convertit en el gran eix de comunicacions de la comunitat investigadora de tot Catalunya. S'hi han incorporat noves institucions i s'ha ampliat la connectivitat d'altres com a conseqüència de la demanda sempre creixent.

També hem acollit quasi una cinquantena d'investigadors europeus que han vingut a col·laborar amb els grups de recerca catalans usant els recursos disponibles en ambdós centres.

S'ha continuat difonent l'ús i els beneficis de les tecnologies d'altres prestacions a través de seminaris, conferències i d'aquesta revista que avui inicia una nova etapa.

Aquest número resumeix totes les activitats que el Centre ha desenvolupat durant l'any 1996 i que, sens dubte, han ajudat a promoure el desenvolupament científic i tecnològic de Catalunya. Per aquest motiu ens hem de sentir plenament satisfets.

Macià Alavedra
Barcelona, març de 1997



Memòria d'activitats 1996

La consolidació dels serveis de computació d'altres prestacions i la reorganització del centre defineix la nova etapa encetada pel CESCA l'any 1996

El Centre de Supercomputació de Catalunya (CESCA) va ser inaugurat l'octubre de 1991 amb l'objectiu d'oferir serveis de càlcul d'altres prestacions a universitats, centres de recerca i empreses. El CESCA va ser impulsat per la Fundació Catalana per a la Recerca a demanda del Departament de Presidència de la Generalitat. En el consorci també es van integrar les que aleshores eren les quatre universitats públiques catalanes (Universitat de Barcelona, Universitat Autònoma de Barcelona, Universitat Politècnica de Catalunya i Universitat Pompeu Fabra). Posteriorment s'hi han incorporat la Universitat de Girona, la Universitat Rovira i Virgili i la Universitat de Lleida.

Per tal de facilitar l'accés als seus recursos, a partir del 1993, també gestiona l'Anella Científica, patrocinada per la FCR i Telefònica, la xarxa acadèmica que connecta totes les universitats, els centres de recerca i diverses institucions (biblioteques, hospitals, organismes autònoms de la Generalitat, etc.) i que els enllaça amb la xarxa estatal RedIRIS.

Des de la seva creació els supercomputadors han experimentat una evolució tecnològica molt ràpida de manera que les prestacions dels nous equips han augmentat de manera significativa mentre que els vells equips s'han quedat obsolets ràpidament. A més, els computadors d'altres prestacions basats en processadors estàndards s'han consolidat en el mercat i, segons per a quines aplicacions, ja s'obté un cost/rendiment millor que amb els supercomputadors vectorials. Així, avui dia, ha desaparegut la línia divisòria entre equips vectorials més aptes per a un centre de serveis com el CESCA i equips paral·lels per a un centre d'investigació com el CEPBA. Els computadors paral·lels usats pels investigadors en paral·lelisme poden



perfectament donar servei als investigadors d'altres camps, com ho demostra l'adquisició de l'IBM SP2 pel CESCA l'any 1995.

En conseqüència, és lògic optimitzar l'ús de recursos públics, incrementant la cooperació que sempre hi ha hagut entre els dos centres per facilitar l'accés al maquinari i al programari de cada centre a tots els investigadors de la nostra comunitat. Cal recordar que la primera cooperació entre els centres l'any 1993 va permetre ser seleccionats com a Gran Instal·lació Europea per la CEC, proporcionant-nos 1,7 mECU per a investigadors europeus que vinguin a treballar a Barcelona. Per formalitzar aquesta cooperació, la FCR, la CIRIT i la UPC van signar un conveni l'octubre de 1995 per coordinar les activitats d'ambdós centres a través del Centre de Computació i Comunicacions de Catalunya (C⁴).

Durant el 1996, el CESCA ha continuat donant suport a les activitats de recerca de totes les universitats públiques catalanes que necessiten càlcul d'altres prestacions proporcionant-les 270.183 hores computacionals; gestionant l'Anella Científica, que ha transportat 4.252 GB, i el nus de la RedIRIS a Catalunya; incentivant la creació de consorcis formats per empreses i grups de recerca; i difonent i promocionant l'ús i els beneficis de les noves tecnologies a la nostra comunitat.

1996 ha estat un any de canvis per al CESCA. Primer, els nostres usuaris van veure un augment significatiu tant de la potència de càlcul disponible com de la facilitat d'ús en crear-se un entorn metacomputador comú per al maquinari d'ambdós centres. Segon, la reorganització del Centre i el trasllat de la nostra seu social des de la Facultat de Biològiques de la UB a l'Edifici Nexus i l'agrupament de tot el maquinari a l'Edifici Annexus del Campus Nord de la UPC ha permès reduir els nostres costos de funcionament i augmentar la nostra capacitat de gestió. Finalment, el canvi ha arribat al nostre noticiari TERAFLUP que inicia amb aquest número una segona etapa. Malgrat que la finalitat continuï essent la mateixa, difondre l'ús i els beneficis de les tecnologies d'altres prestacions, hem adoptat un format que esperem que us serà més còmode (DIN A4) i més atractiu (color!). Aquest número és un número de transició on us informem de les activitats desenvolupades durant l'any passat. En el proper número ja us comentarem en detall els canvis introduïts.

Miquel Huguet

Director del CESCA

Multiplicada per sis la potència de càlcul disponible

L'any 1996 s'ha caracteritzat per l'increment significatiu de la potència disponible als usuaris en multiplicar-se per sis, fins a 23,4 Gflop/s de potència punta, gràcies a:

- L'augment del nombre de processadors de l'IBM SP2, de 12 a 44, mit-

**Tant el CESCO
com el CEPBA són
al TOP500**

jançant l'acord de col·laboració entre la FCR i IBM i una aportació addicional del CEPBA.

- La duplicació del nombre de processadors del Cray Y-MP, de 2 a 4, mitjançant l'acord de col·laboració entre la FCR i Cray (ara SGI).
- L'accessibilitat del maquinari del CEPBA (PowerChallenge Array, Convex C3480 i Connection Machine CM-200) mitjançant el conveni de la creació del Centre de Computació i Comunicacions de Catalunya.

Aquest increment ha millorat la disponibilitat d'hores de càlcul de manera que l'ús ha augmentat d'unes 16.000 HC/mes a principis d'any a 35.000, a finals.

L'ampliació de l'SP2 també ha

El maquinari disponible: una visió històrica

Inicialment el maquinari disponible en el CESCO era un Cray X-MP/116 amb un únic processador i una potència punta de 235 Mflop/s i un IBM 3090/600J amb sis processadors i una potència punta de 828 Mflop/s. Avui dia, aquesta potència ha estat multiplicada per 53 gràcies a l'actualització del propi maquinari (un factor de 20) i l'accés al maquinari del CEPBA (25) i del Departament d'Arquitectura de Computadors (DAC) de la UPC (8).

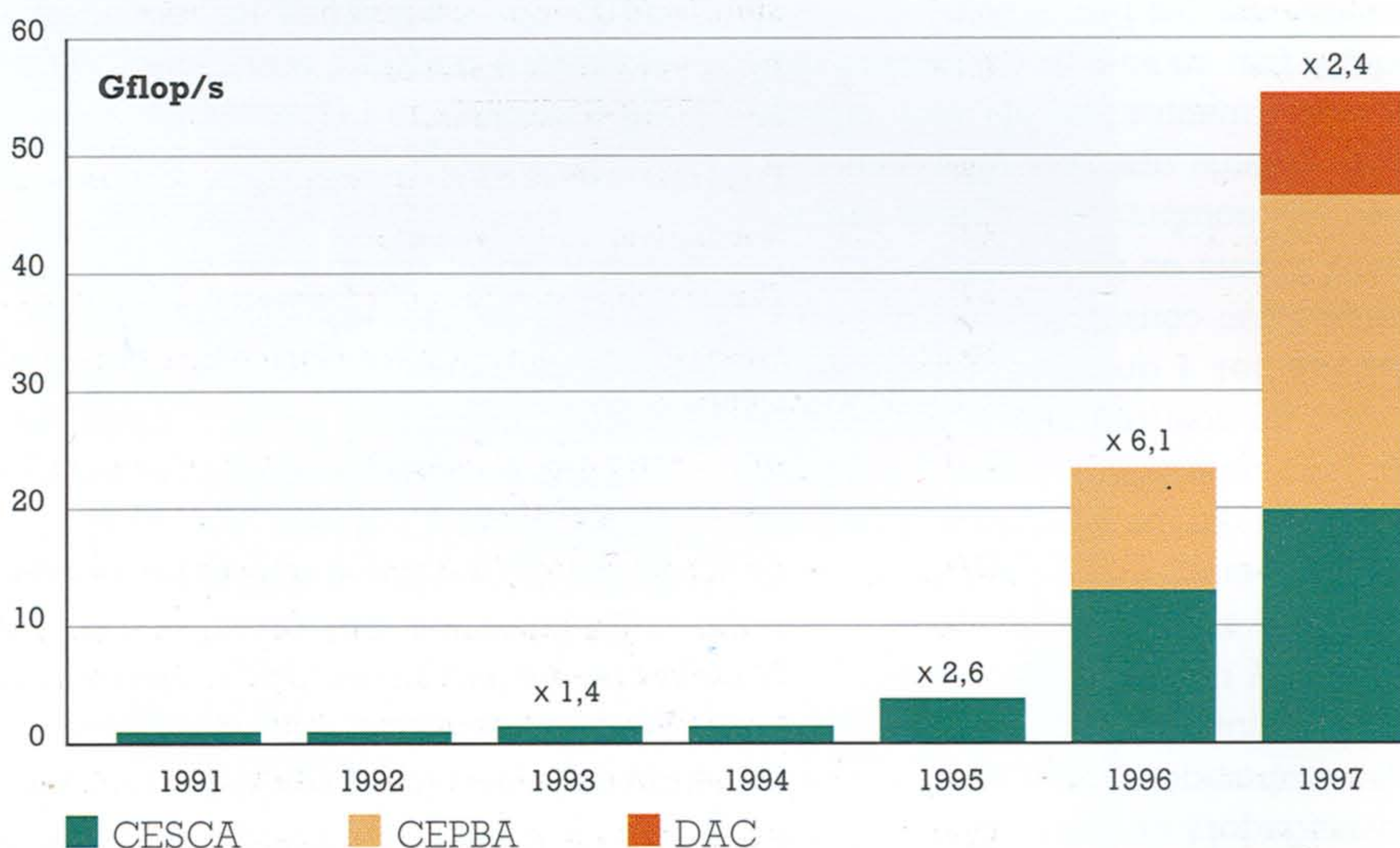


L'IBM SP2 amb 44 processadors té una potència punta de 11,72 Gflops/s i ocupa el rànquing 210 entre les màquines més potents del món.

permès que el CESCO retorni a la llista TOP500 del rànquing mundial de supercomputadors amb el número 210. Cal remarcar que el CEPBA també hi figura per primer cop amb el número 289 pel PowerChallenge.

Cal remarcar que aquesta potència es duplicarà el 1997 ja que els 32 processadors thin2 de l'SP2 de 266 Mflop/s cadascun seran substituïts per processadors SuperChip de 480 Mflop/s. A més, el CEPBA ha ad-

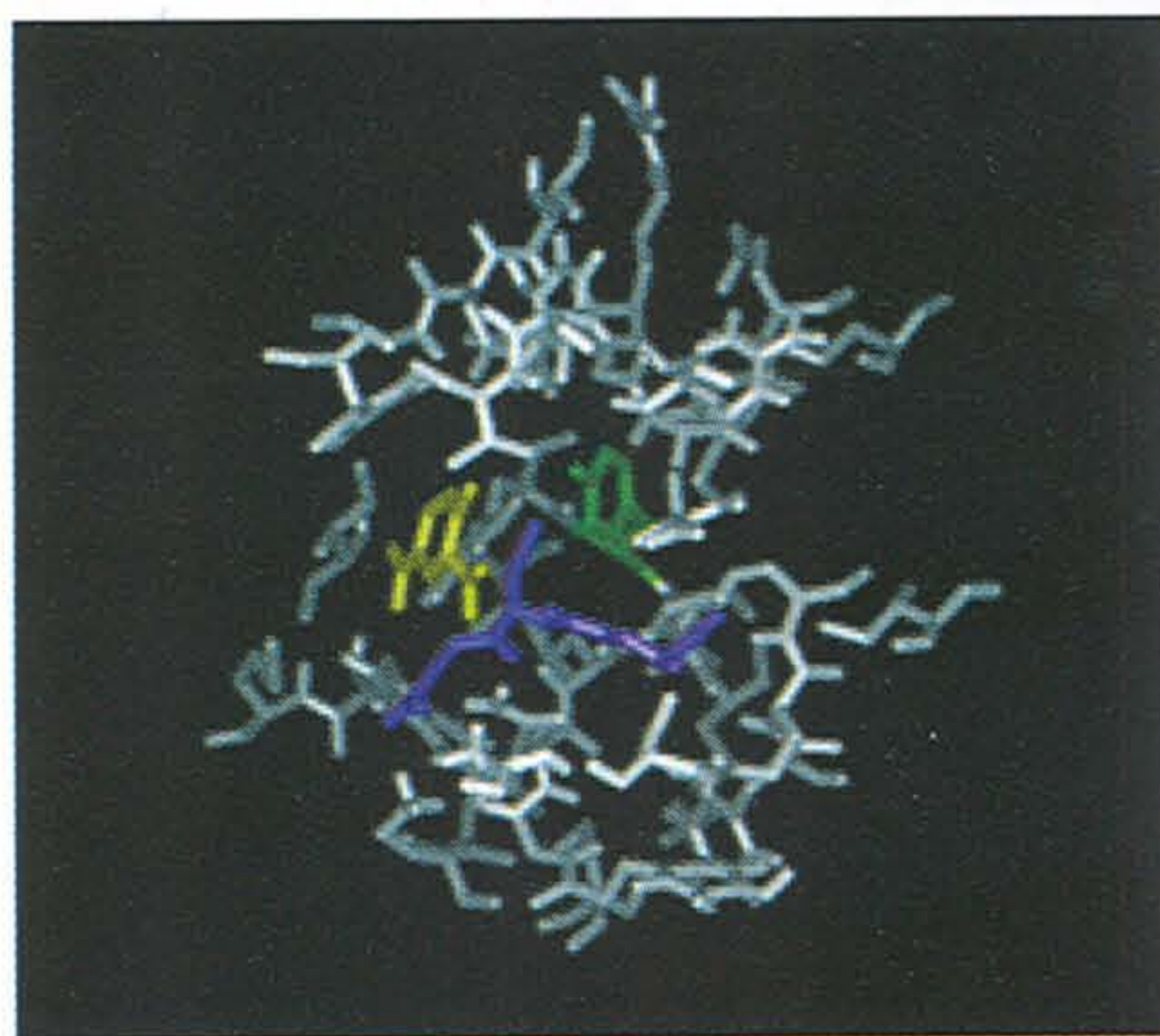
quirit un Origin 2000 amb 64 processadors, 8 GB de memòria principal, 288 GB en disc i una velocitat punta de 25,6 Gflop/s; i la línia d'investigació en Computadors d'Altes Prestacions del Departament d'Arquitectura de Computadors de la UPC, un AlphaServer 8400 amb 10 processadors, 2 GB de memòria principal, 66,5 GB en disc i una potència punta de 8,8 Gflop/s. Aquestes dues màquines també estaran disponibles per als nostres usuaris.



Els serveis que el CESCA ofereix es materialitzen en quatre àrees:

1. Servei de consultes i ajuda a l'usuari, proporcionat pel Departament d'Assistència Tècnica. Aquest servei comprèn:

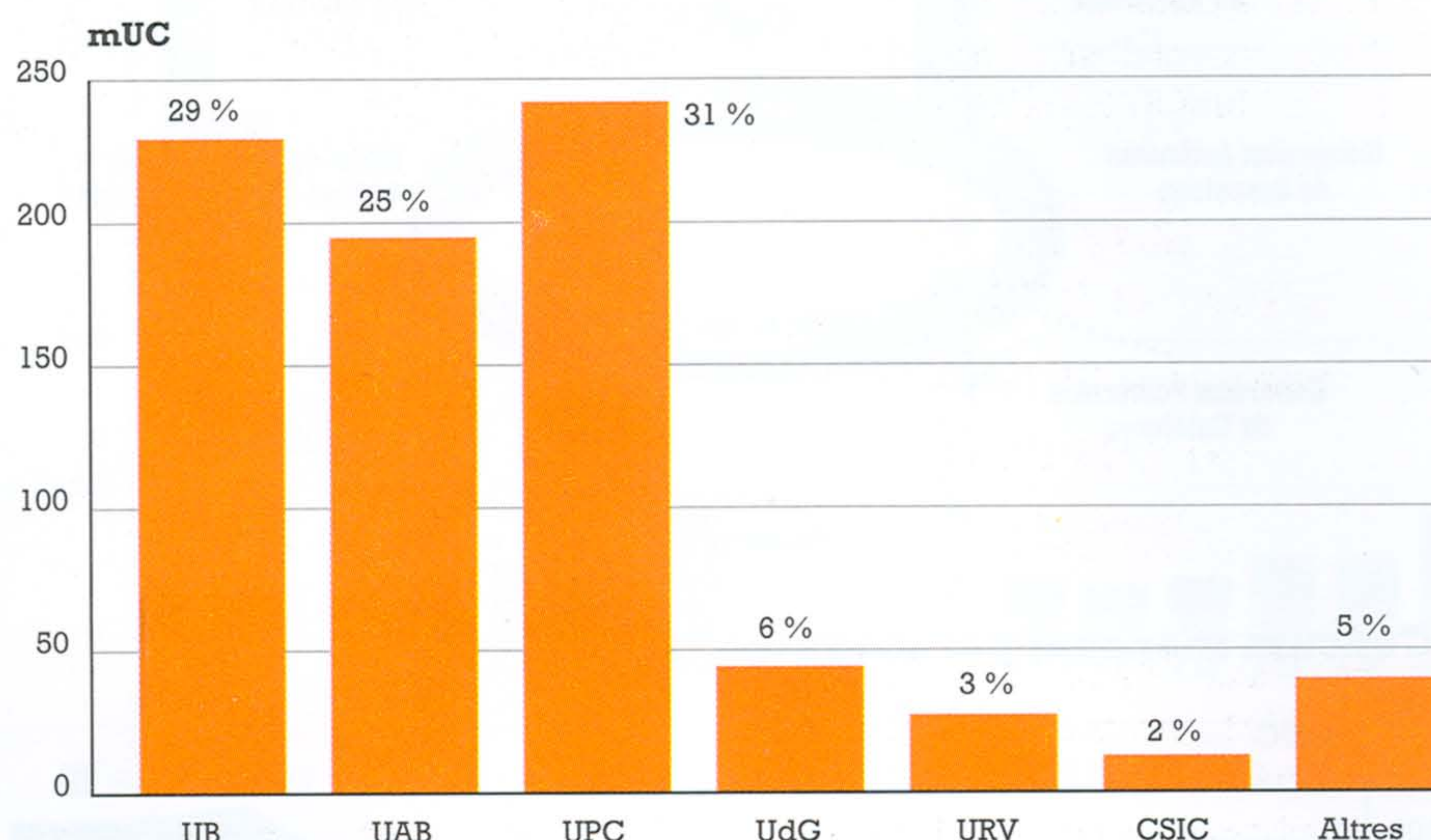
- L'assessorament a usuaris en la utilització eficaç dels ordinadors del Centre, en la definició dels recursos necessaris per a un determinat projecte i en la selecció i utilització dels paquets de programari idonis.
- L'elaboració i distribució de documentació escrita i *on-line* sobre els recursos disponibles i la millor manera d'usar-los.
- El suport i ajuda a usuaris en els problemes que puguin aparèixer en el dia a dia, redundant en canvis que milloren el servei que s'ofereix.



Detall del centre actiu de l'enzim Glutathione S-Transferasa. (M. Orozco, UB)

Consolidació dels serveis proporcionats pel centre

Consum per institució



La major part dels recursos són consumits per un nombre petit de projectes: 10 en consumeixen el 57% i 20, el 71%. També es pot observar que tres universitats (UPC, UB i UAB) consumeixen el 85% dels recursos.

- La instal·lació de programari d'aplicacions, utilitats, etc.

En total, s'han consumit 270.183 hores computacionals, distribuïdes entre 179 projectes amb 363 usuaris; s'han executat 42.180 treballs, el 70%

Més de 270.000 hores consumides entre 179 projectes

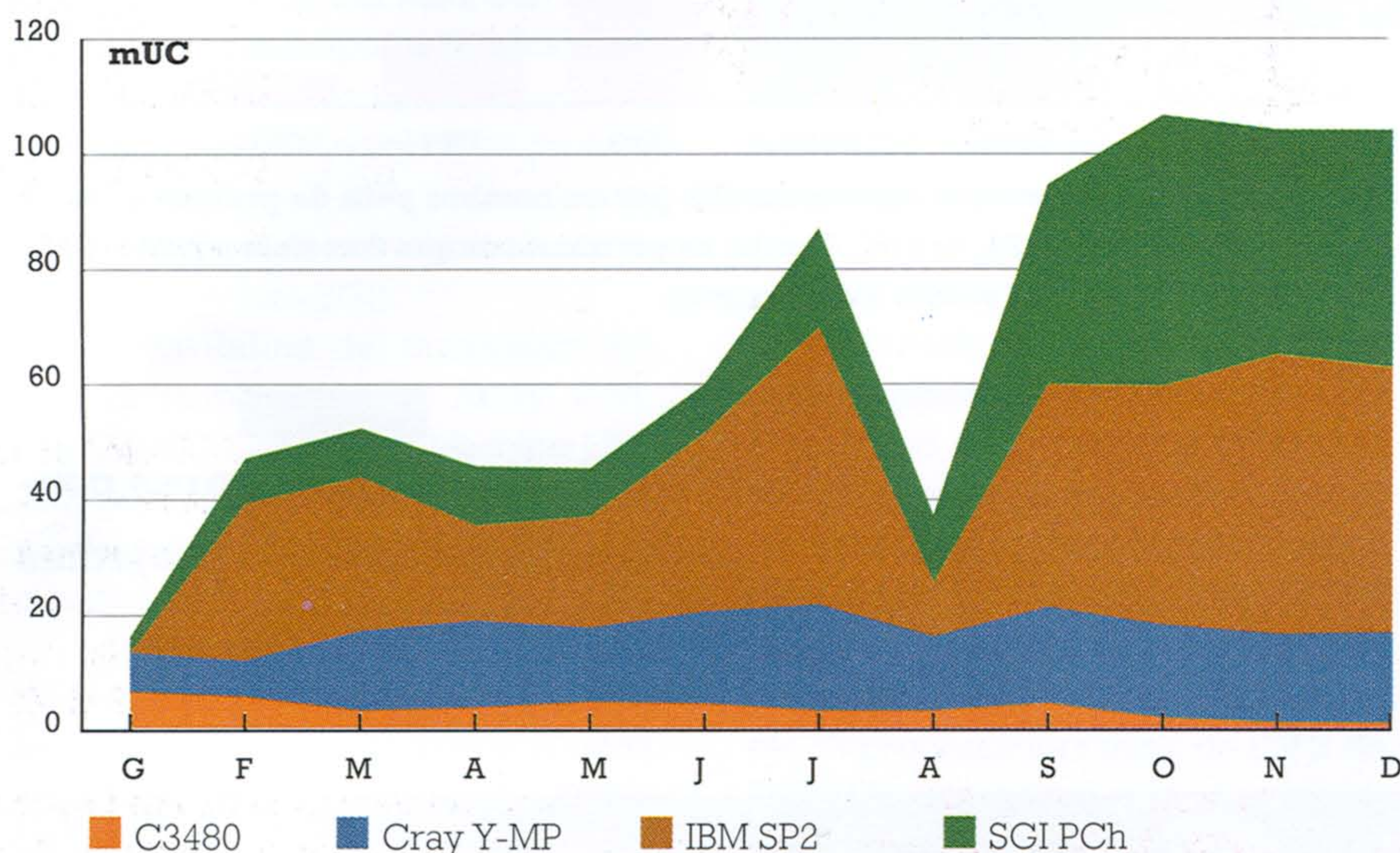
Els 12 projectes de més consum

Cap de projecte	Institució	Projecte	Consum realitzat
J. M. Lluch	UAB	Reaccions de transferència protònica i d'hidrogen	11 %
M. Valero	UPC	Simulació d'arquitectures i benchmarks	10 %
A. Oliva	UAB	Estructura i reactivitat de complexos metàl·lics . Aplicacions en síntesi orgànica i en química ambiental	8 %
J. J. Novoa	UB	Enginyeria de cristalls moleculars d'interès tecnològic	7 %
M. Orozco	UB	Reconeixement molecular	6 %
S. Álvarez	UB	Estructura electrònica i arquitectura de cristalls	6 %
G. Yepes	UAM	Simulacions numèriques de formació de galàxies en diferents marcs cosmològics	3 %
R. Carbó	UdG	Desenvolupament de nous algorismes per al càlcul de la semblança molecular quàntica	3 %
J. Labarta	UPC	Entorns de paral·lelització d'aplicacions numèriques	3 %
M. Duran	UdG	Estudi de les transferències protòniques intramoleculars en l'estat fonamental i l'excitat de diferents sistemes per a la determinació de molècules amb capacitat per actuar com a memòries òptiques	3 %
F. X. Avilés	UAB	Simulació computacional d'efectes produïts per enginyeria de proteïnes	2 %
J. M. Poblet	URV	Estudi Químic Quàntic de reaccions organometàl·liques	2 %

Anella Científica



Consum mensual per màquina. 1996



El consum ha augmentat significativament al llarg de l'any 1996: des de les 16.000 hores computacionals inicials per mes a les 35.000 finals. Noteu que el gran increment es va produir el juliol un cop es va acordar que l'ús del maquinari fóra gratuït per a l'any 1996.

Hores de CPU consumides per institució l'any 1996

Institució	Nre. de projectes	Nre. d'usuaris	Hores usades			
			Cray Y-MP	IBM SP2	SGI PC Array	C3480
UB	30	71	3.824	51.729	16.083	851
UAB	15	45	12.801	35.293	2.417	1.620
UPC	94	163	4.586	11.526	46.547	25.687
UdG	5	6	813	12.996	10	407
URV	7	16	4.082	909	50	-
CSIC	8	18	474	2.356	937	-
Altres	20	44	1.027	5.491	14.190	307
Total	179	363	27.607	120.300	80.234	28.871

dels quals s'han esperat menys d'una hora, amb una mitjana d'execució de 2,80 hores al Cray Y-MP, 2,91 al PowerChallenge i 5,98 a l'SP2; i s'han atès 960 consultes.

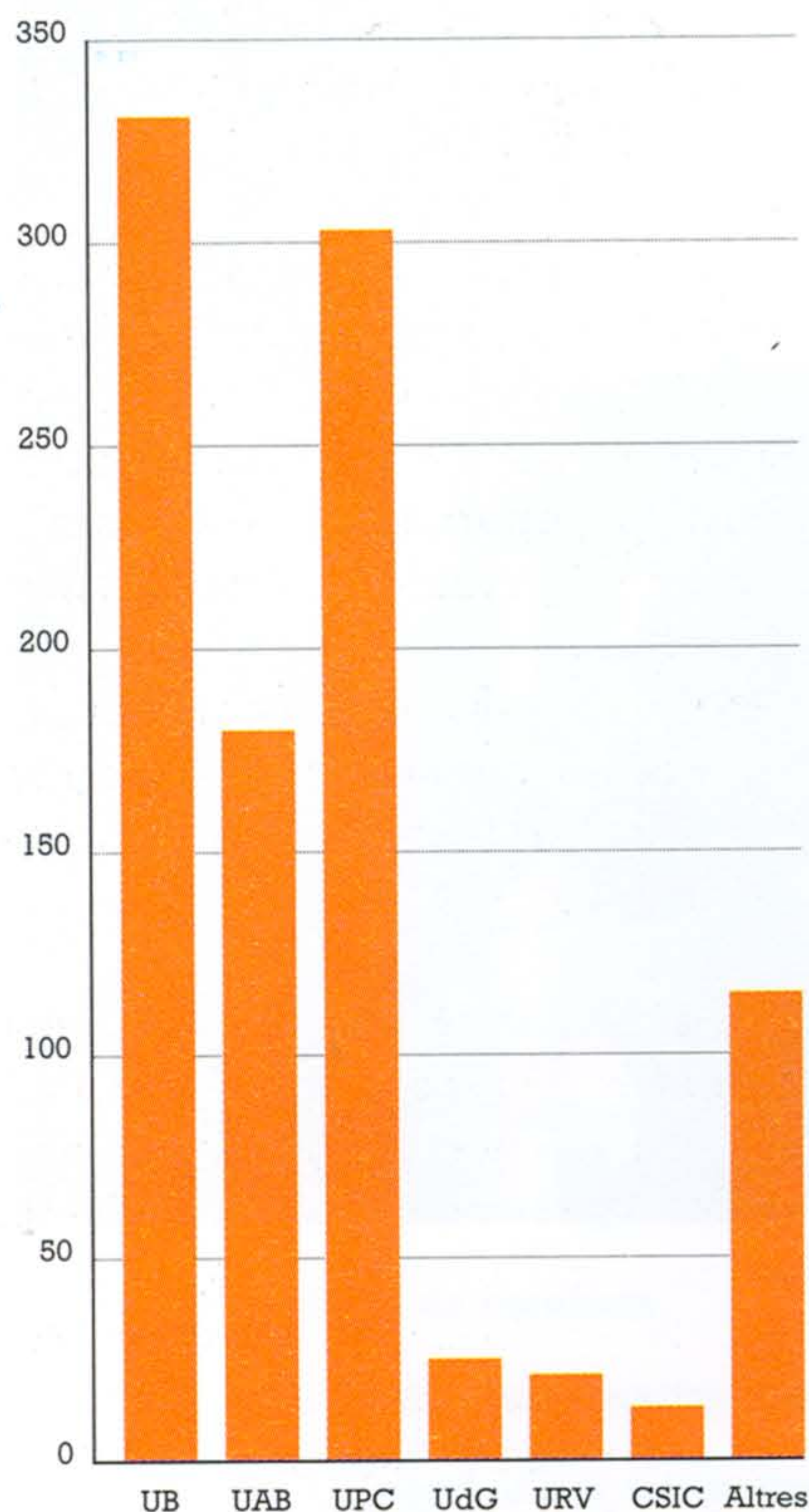
2. Servei de coordinació de l'Anella Científica, de suport al nus de la RedIRIS a Catalunya i de gestió de la base de dades documental, proporcionat pel Departament de Comunicacions i Operacions. Aquest servei comprèn:

- El suport i ajuda a les organitzacions que es connecten a l'Anella Científica, tant en el moment de connexió com en els problemes que puguin sorgir en el dia a dia.
- La instal·lació física de les connexions als equips del CESCÀ i RedIRIS.
- La coordinació de serveis que s'ofereixen a nivell de tota l'Anella Científica com per exemple el servidor secundari de domini .es i el servei MBO-NE (videoconferència a Internet).
- La gestió de tot l'equipament d'infraestructura bàsica (servidor de correu, de web, etc.) i de la xarxa local del Centre així com la creació, el desenvolupament i el manteniment de la nostra base de dades documental.

En total, s'han transmès per l'Anella Científica 4.252 GB durant l'any 1996; s'han connectat 6 noves institucions (Institut Cartogràfic de Catalunya, Institut d'Estadística de Catalunya, Institut Dexeus, etc.) fins a les 49; i s'ha augmentat l'amplada de banda de 5

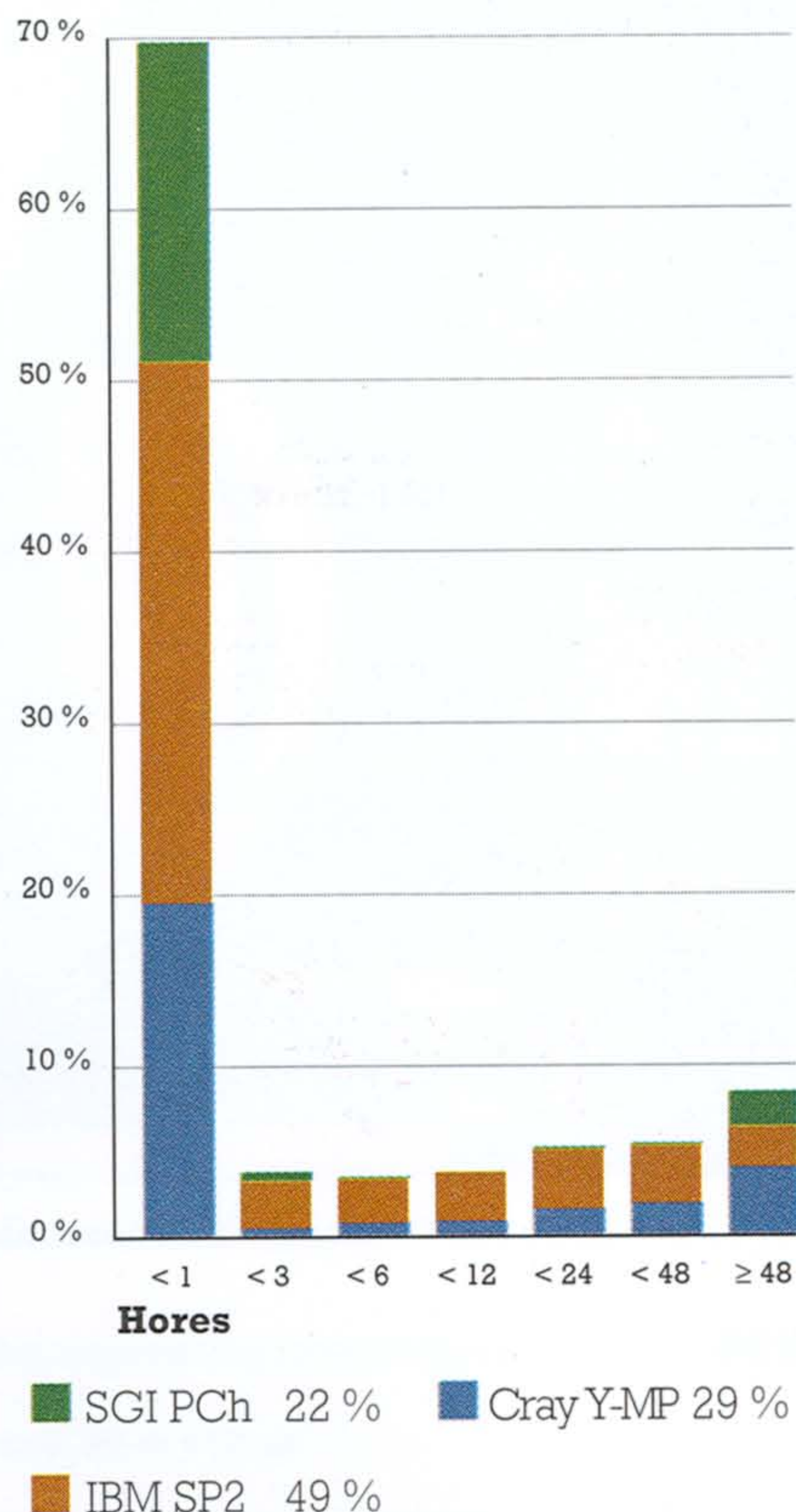
Durant tot l'any s'ha transmès més de 4 TBytes

Consultes per institució



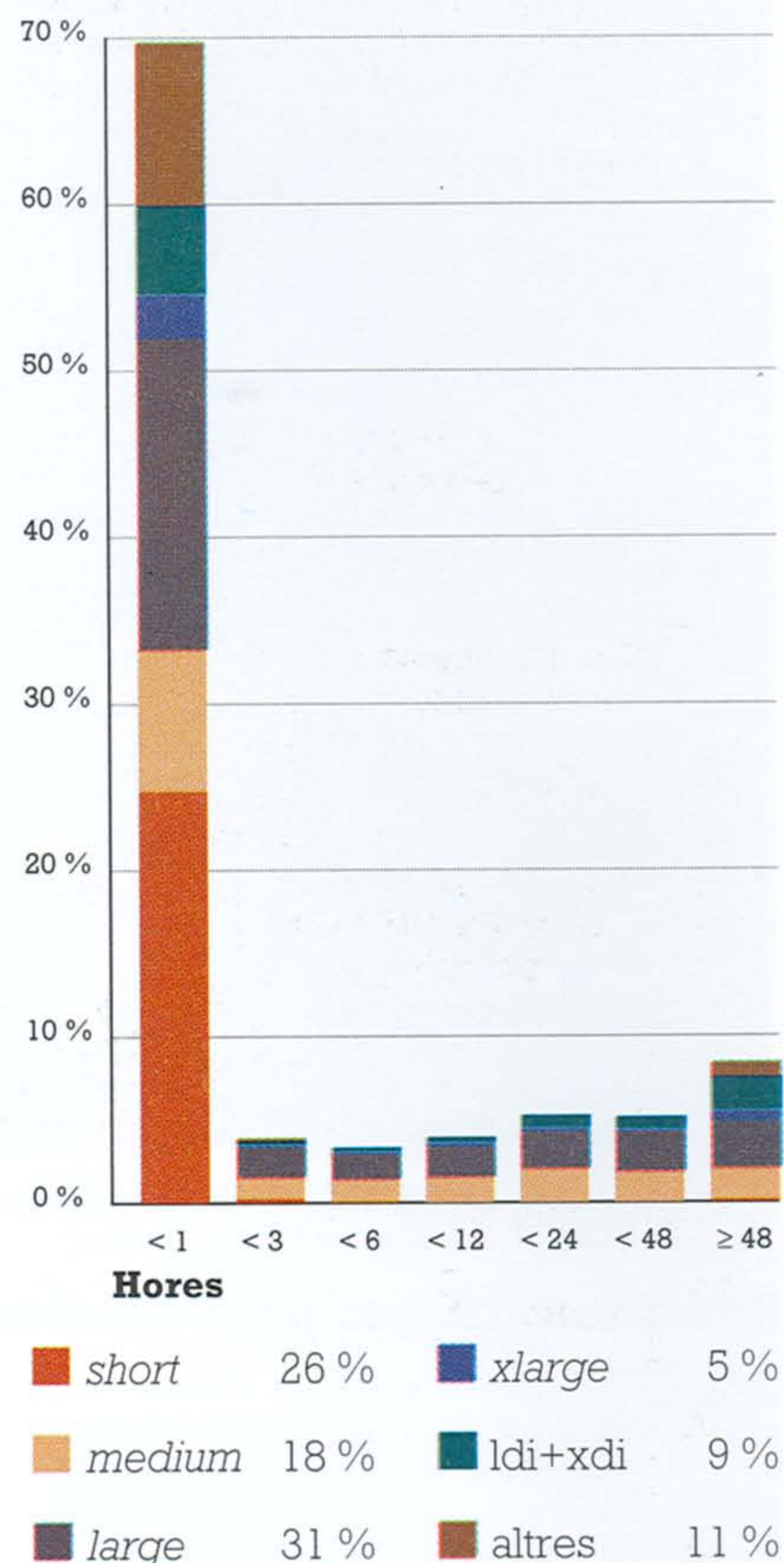
S'han atès en total 960 consultes, majoritàriament per temes de cues de batch i d'ús d'aplicacions.

Temps d'espera per màquina



S'han executat un total de 42.180 treballs, el 70% dels quals han esperat menys d'una hora en cua per iniciar-se.

Temps d'espera per cua



institucions (URV, URL, SCS, etc.). Hi ha hagut 29.113 accessos a la nostra base de dades documental provinents de 8.230 computadors diferents, els quals han accedit a un total de 82.026 pàgines i han transmès un total de 292 MB.

3. Servei de difusió de l'ús i els beneficis de les tecnologies d'altres prestacions, proporcionat pel Departament de Promoció. Aquest servei comprèn:

- L'impuls de l'ús dels recursos del Centre entre el sector públic i les indústries que vulguin participar en projectes de recerca i/o vulguin fer servir els mitjans de supercomputació disponibles.
- La col·laboració en la transferència de tecnologia a la indústria que pugui generar-se a través dels projectes de recerca que es desenvolupen en el Centre.
- El foment de la creació de consorcis de recerca conjunta entre empreses i institucions per experimentar les tecnologies d'altres prestacions.
- La divulgació de l'ús i els beneficis

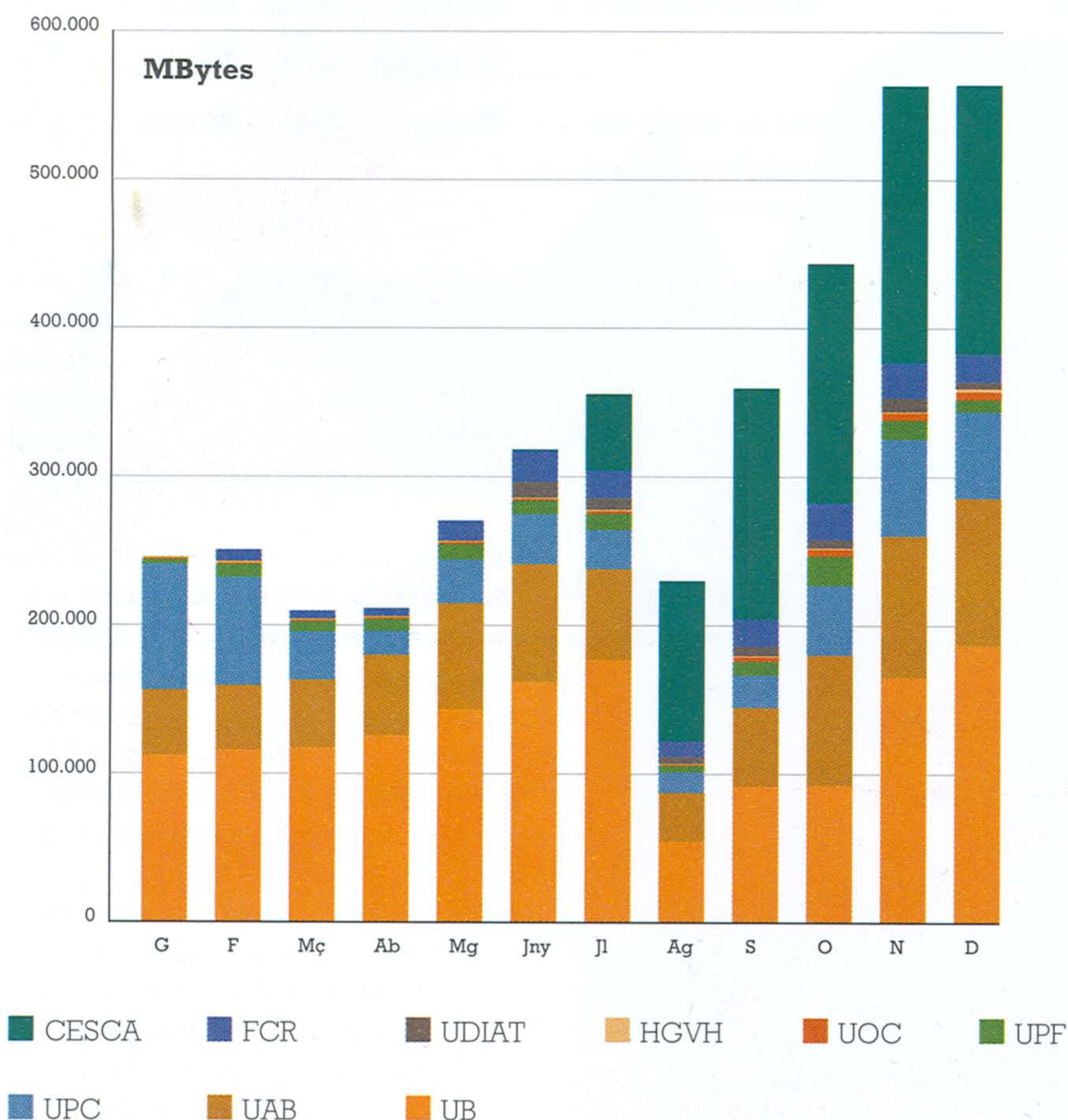


Signatura del conveni amb Oracle: Jorge Edelmann, conseller director general d'Oracle Ibérica, SA i Mateo Valero, director del C⁴



Connectivitat amb UdG, URV i UdL a través del radioenllaç del Centre de Telecomunicacions

Tràfic enviat per punt d'accés. 1996



La gràfica mostra el tràfic que circula per l'Anella Científica, patrocinada per la FCR i Telefónica, per punt d'accés. El tràfic del CESCA inclou el de totes les altres institucions connectades per altres mitjans (radioenllaç, línies punt a punt, etc.) i el de la RedIRIS. Fins al juny, aquest tràfic estava inclòs a la UB on hi havia l'antiga seu social del CESCA.



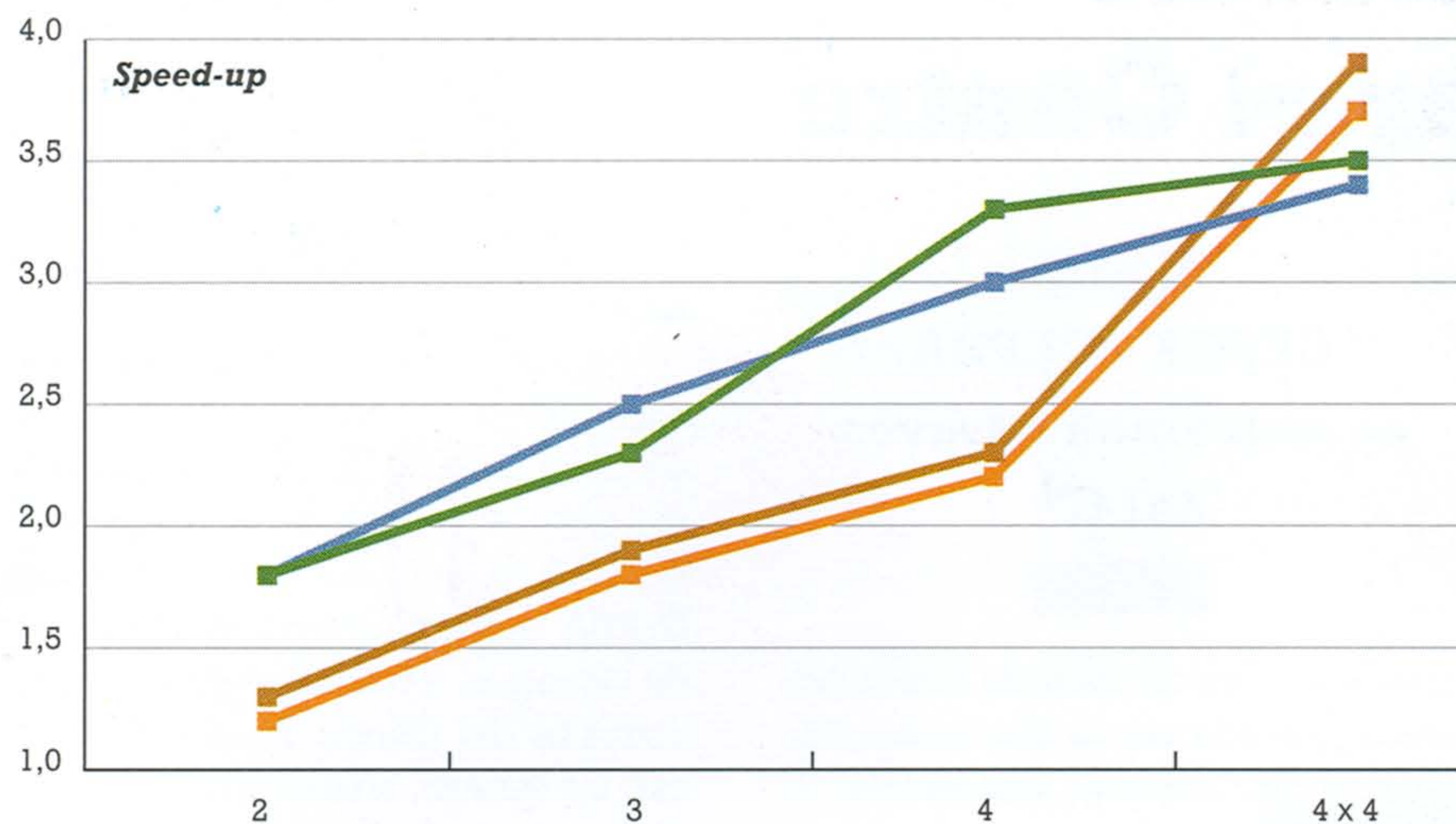
d'aquestes tecnologies per a la nostra comunitat i la notificació als usuaris de les novetats que es produeixen en els nostres serveis a través del TERA-FLOP.

En total, s'han signat tres convenis de col·laboració amb (1) IBM, (2) Oracle, i (3) UPC, Laboratorios Menarini, Dr. Esteve i Almirall; s'ha experimentat l'ús del paral·lelisme amb dues empreses (EyS Consulting i SEAT); s'han rebut 12 visites de diferents entitats (E.T.S.I. Telecomunicacions de la UPV, Grupo de Informática Gráfica Avanzada de la U. de Zaragoza, Asamblea General de CESAER, etc.); s'ha organitzat un congrés a nivell internacional (CUG'96) amb 258 assistents; s'han acollit 47 visitants del programa de mobilitat de la Comissió Europea (HCM, TMR i PECO); i s'han publicat 8 números del TERA-FLOP i 9 de *Primeur*.

4. Servei de formació, proporcionat a través de l'Aula de Supercomputació amb la col·laboració del CEP-BA, orientat a:

- Proporcionar els coneixements ne-

Experimentació en base de dades paral·leles



1. Sobre 7 milions de peticions

- q5c distribució tipus de servei segons any i mes (3 anys)
- q5c2 distribució tipus de servei segons any i mes (2 anys)

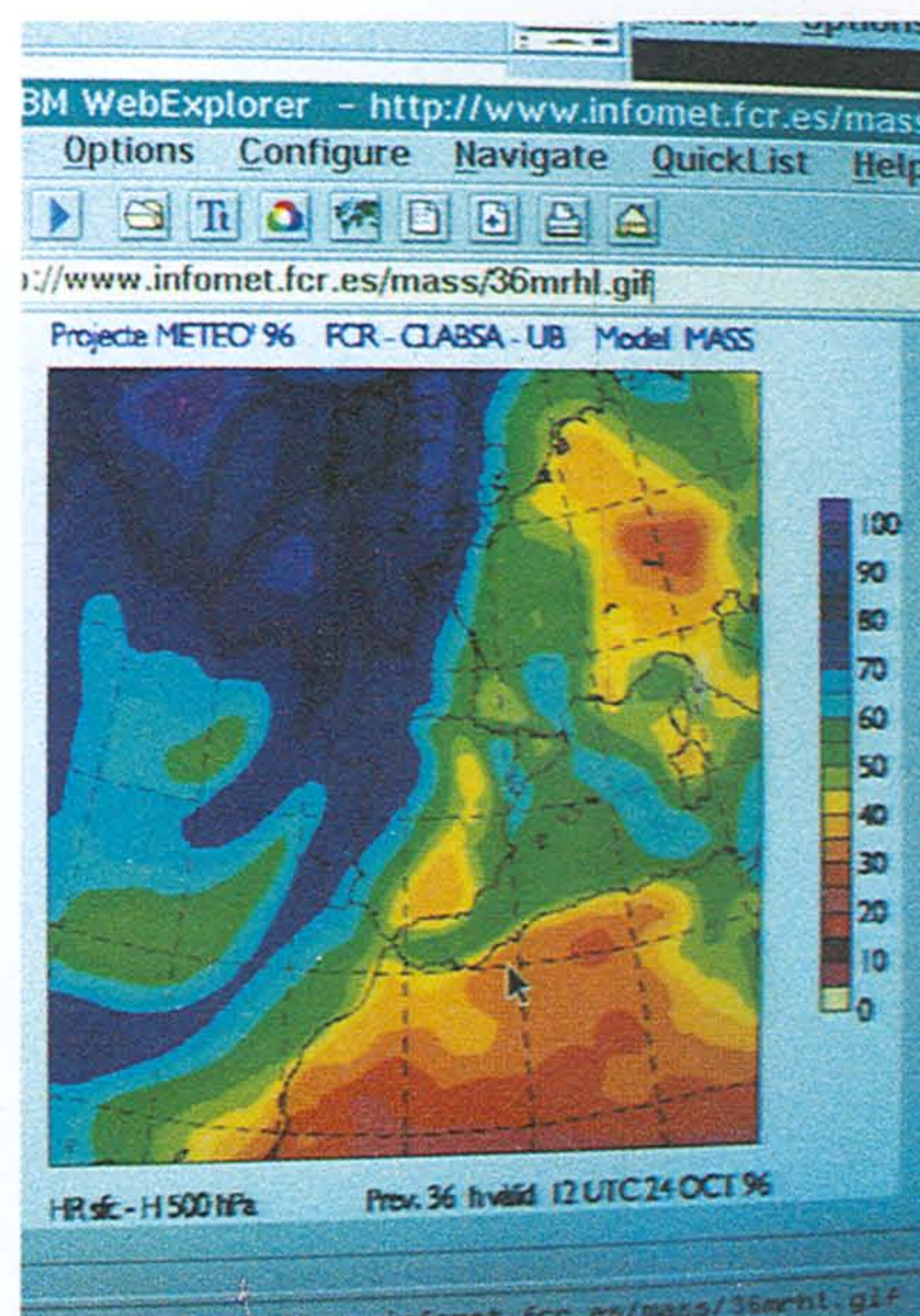
2. Sobre 19 milions de resultats

- q7 distribució resultats patològics segons any, mes i tipus (2 ANYS)
- q9 mitjana valor mèdic segons any, mes i tipus

El càlcul d'altres prestacions no es limita al mercat científicotècnic, sinó que pot també ser usat per l'entorn comercial, com ho demostra l'experiment realitzat per al Consorci Hospitalari de Catalunya on les transaccions han aconseguit un *speed-up* entre 3,4 i 3,9 amb quatre processadors de l'IBM SP2.



L'enllaç amb la xarxa estatal RedIris



La predicció del temps a Catalunya realitzada en el CESCA

cessaris que permetin una explotació eficient de les plataformes disponibles.

- Fer de fòrum on es presenten noves tecnologies, tant a nivell de maquinari com de programari.

- Difondre els resultats i les experiències derivades de l'ús de les plataformes disponibles al Centre i dels treballs de recerca d'altres investigadors d'arreu del món en temes relacionats amb la supercomputació, el paral·lelisme, les comunicacions i amb l'aplicació d'aquestes tecnologies als diferents àmbits de la nostra comunitat.

En total, s'han ofert 12 seminaris amb 283 assistents.



Reunió del Departament d'Assistència Tècnica a la Biblioteca

Canvis estructurals per dinamitzar el Centre

Paral·lelament amb aquestes activitats, 1996 ha estat també caracteritzat pel canvi de seu social, per la reorganització que s'ha realitzat i l'ampliació del Consell de Govern.

A finals de juny el CESCOA va abandonar les instal·lacions de Biològiques, cedides per la Universitat de Barcelona, que havien estat la seva seu des de la seva creació i es va traslladar a l'edifici Nexus, la seva nova seu social. A més es va reformar l'antiga

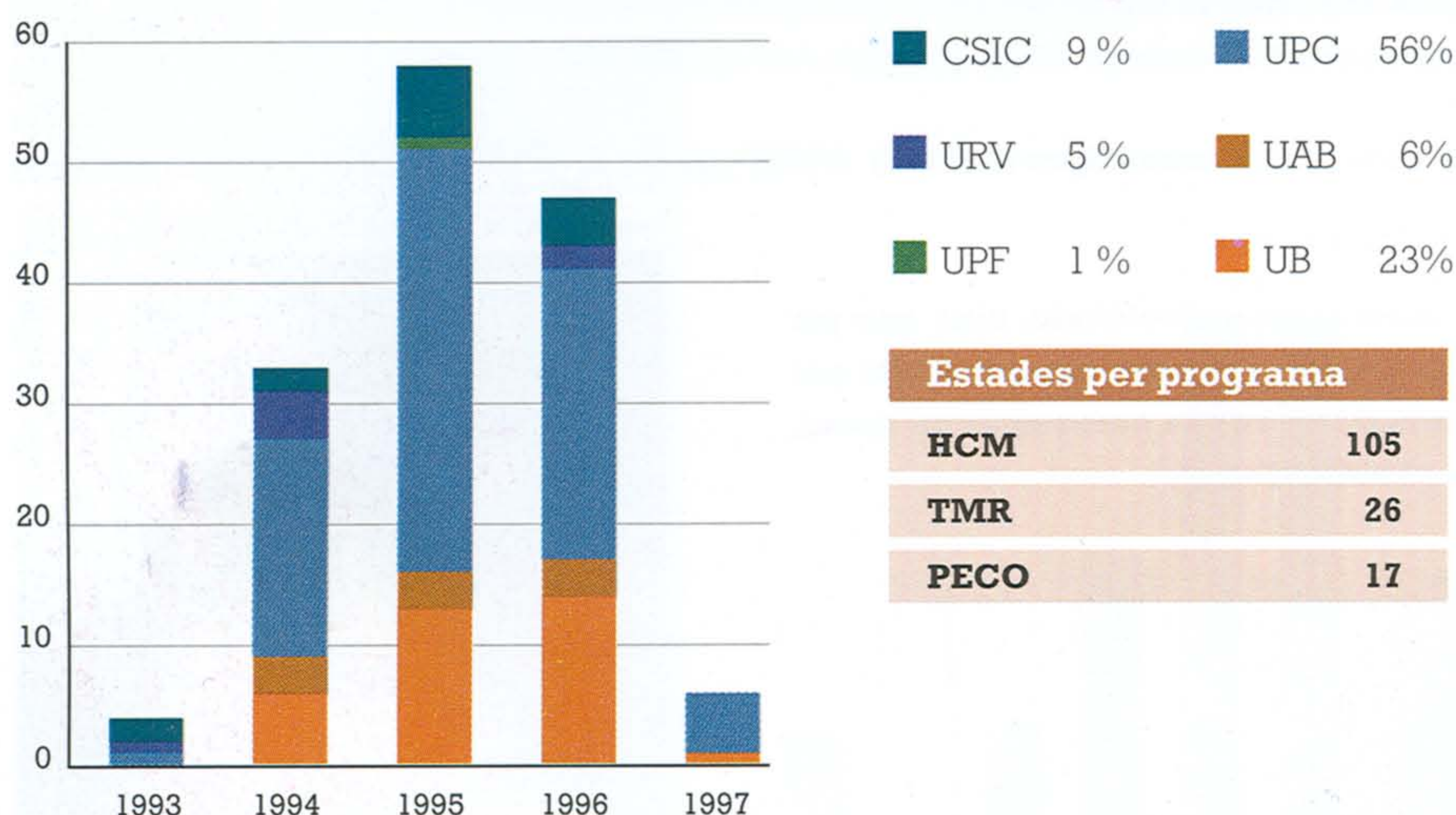
CESCOA i CEPBA es coordinen a través del C⁴

Àrea Nord (ara anomenada Edifici Annexus), cedida per la Universitat Politècnica de Catalunya, per ampliar la Sala d'ordinadors i instal·lar-hi el Laboratori de càlcul (per a cursos i usuaris),

la Sala de Conferències i la Sala de Junes.

L'estructura i les funcions del personal del Centre també s'han adaptat als nous estatuts i al conveni de creació del C⁴ en què les activitats del CESCOA es coordinen amb les del CEPBA, ambdós aprovats pel Consell de Govern el 4 d'octubre de 1995. Les activitats del Centre s'han reorientat cap als serveis, abandonant-se la línia de desenvolupament de projectes que es va iniciar l'any 1993. Aquests ser-

Programes de Mobilitat: visites per institució

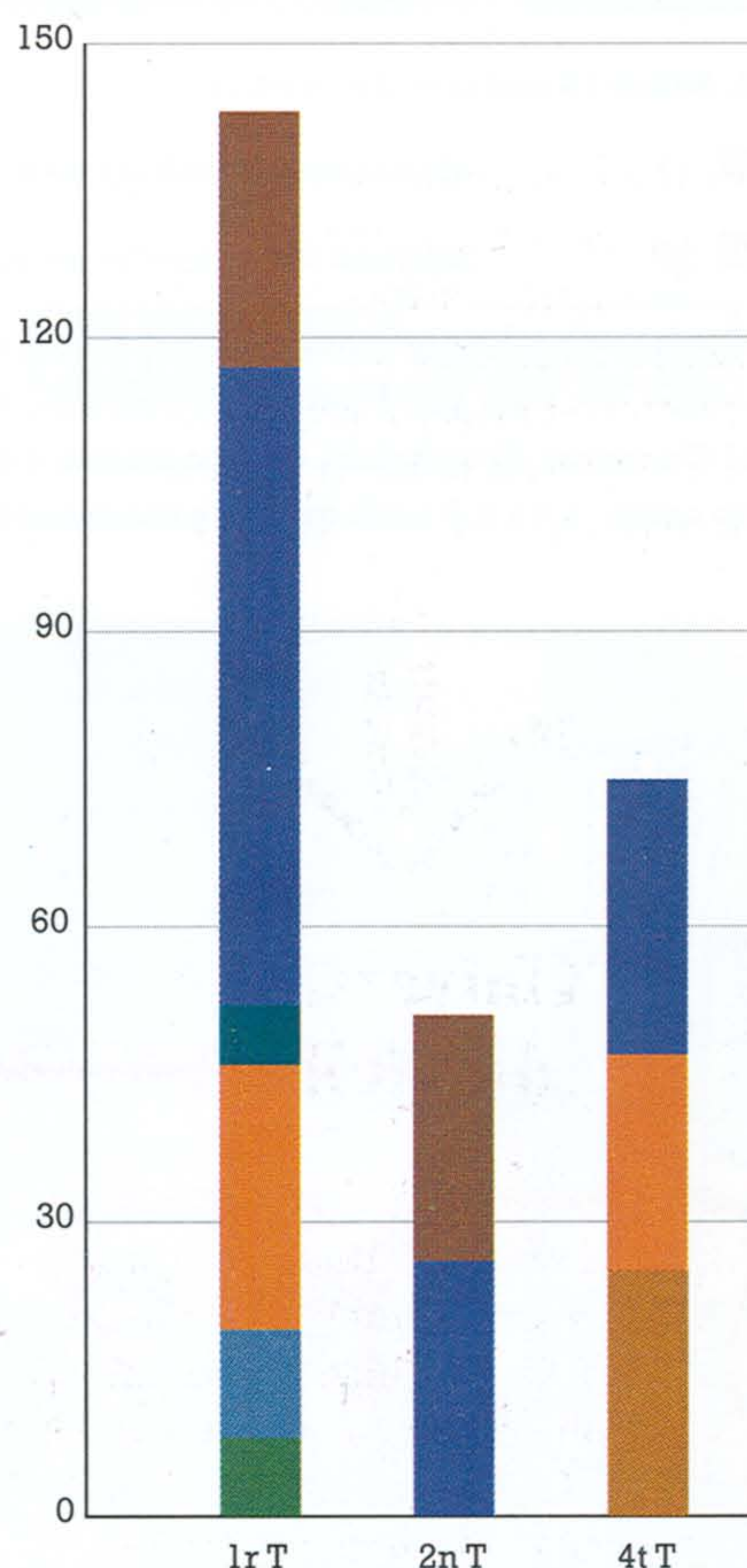


Els Programes de Mobilitat (HCM, TMR i PECO) patrocinats per la Comissió Europea faciliten l'ús dels nostres recursos als investigadors europeus que vulguin fer una estada amb un dels grups de recerca de les nostres institucions patrocinadores. El motiu que figuri el 1997 en una memòria d'activitats del 1996 és que són estades aprovades l'any 1996.

Història d'activitats 1994-96

	1994	1995	1996
Potència punta (Gflop/s)	1,49	3,83	23,92
Nre. usuaris	300	350	363
Nre. projectes	40	86	179
Hores computacionals	29.792	30.258	270.183
Tràfic Anella (GB)	509	1.836	4.252
Serveis empreses	9	11	5
Congressos (assistents)	1 (76)		1 (258)
TERAFLOP		12	8
Programes de mobilitat	33	58	47
Aula Supercomputació		467	283

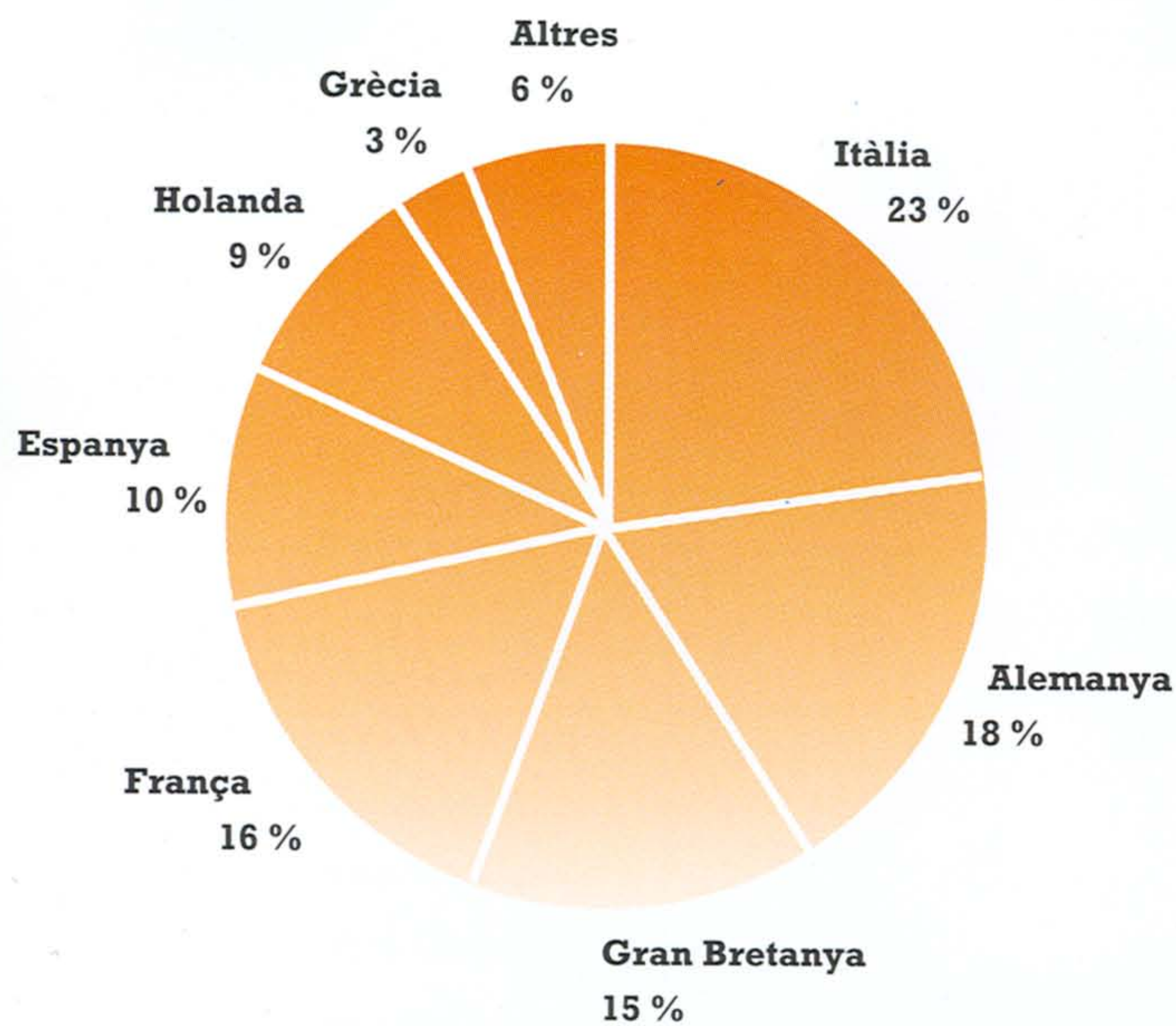
La formació



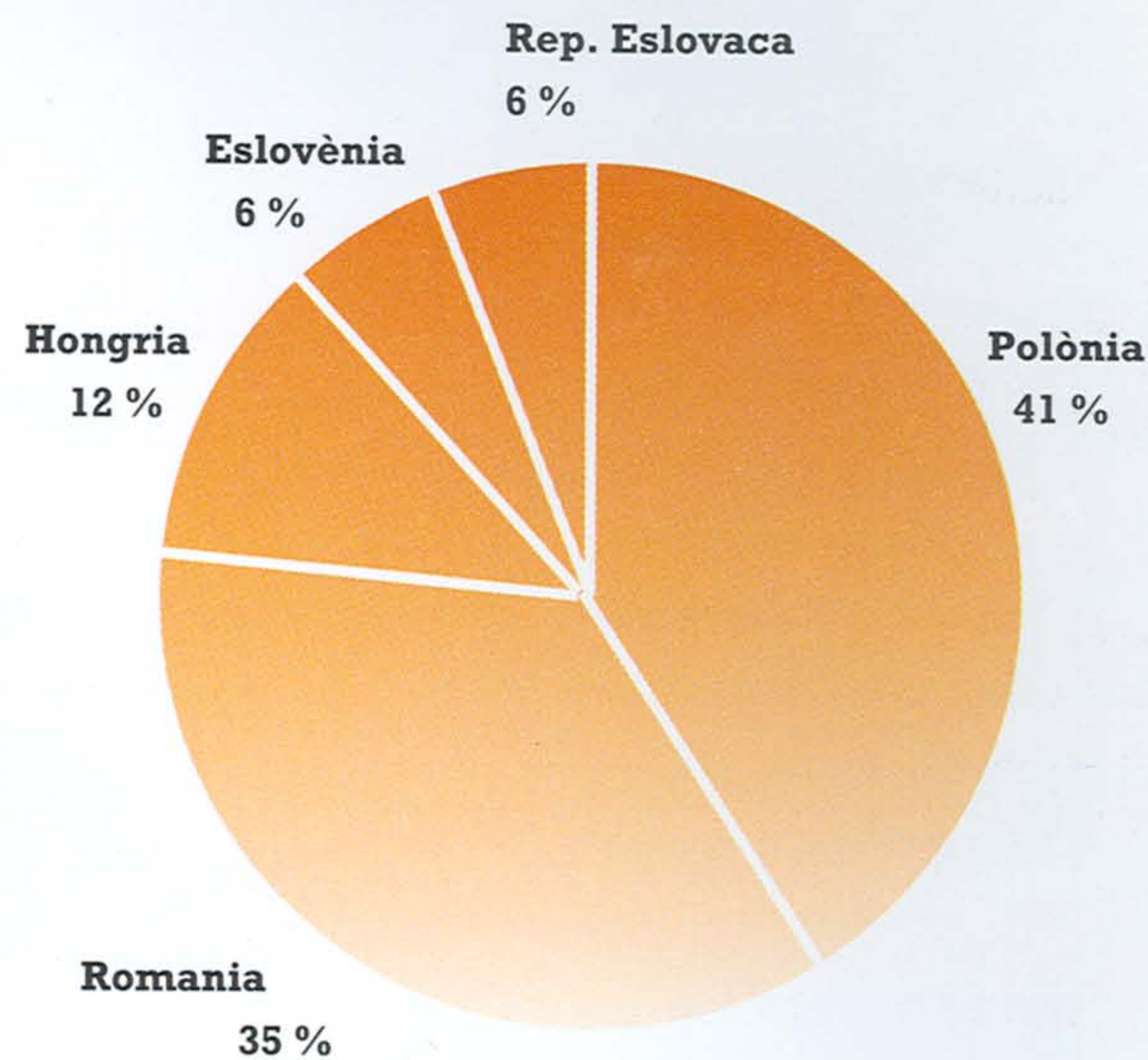
- Tutorial
- Entorn prog.
- Maquinari
- Paral·lelisme
- Comunicacions
- Monogràfic
- Altres

Programes de Mobilitat: visites per país d'origen

HCM i TMR



PECO



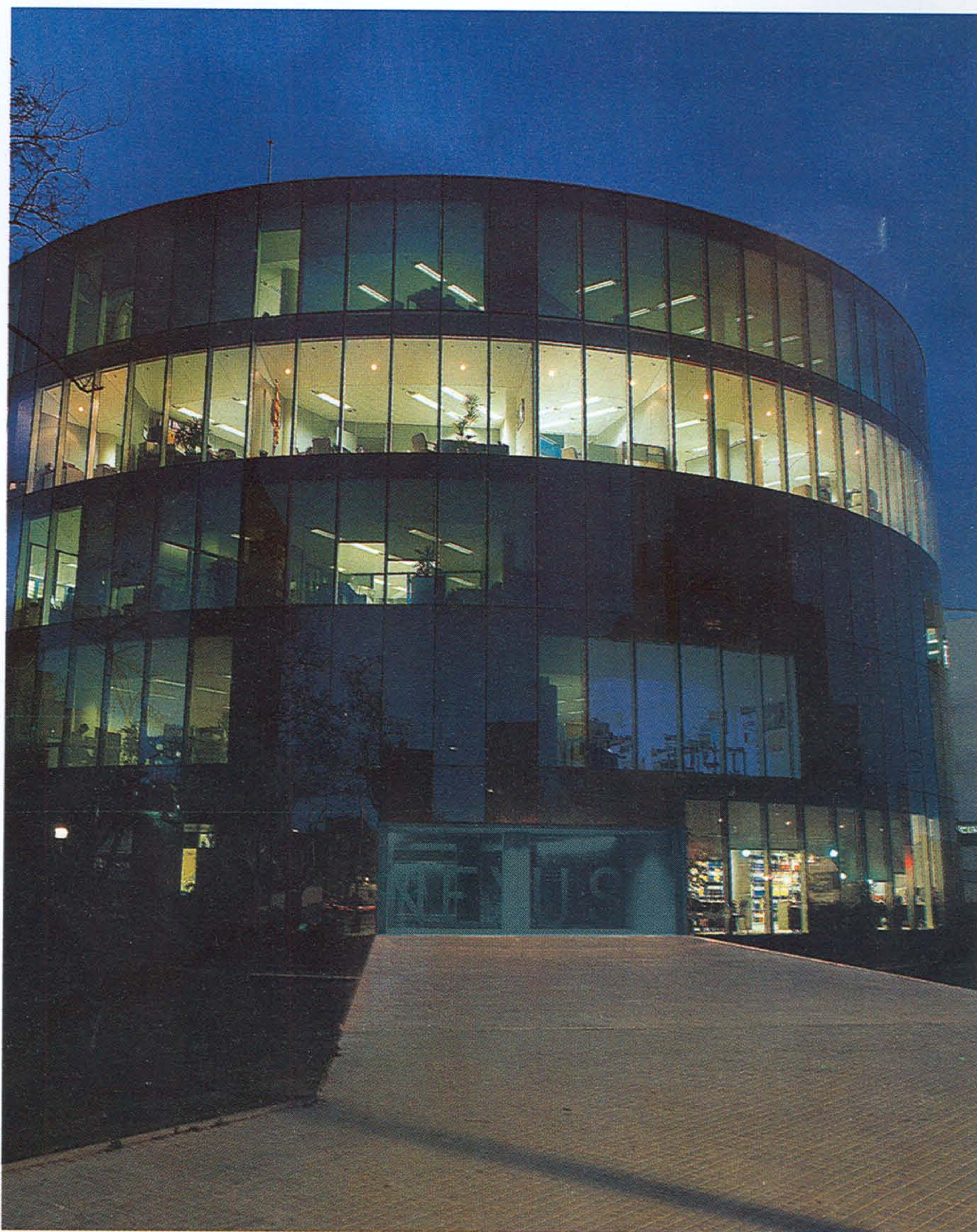
veis s'han distribuït en els tres departaments mencionats anteriorment.

Finalment cal mencionar la incorporació de la Universitat de Lleida al Consorci de manera que ara set de les vuit universitats públiques catalanes en formen part.



**Universitat
de Lleida**

En resum, 1996 ha estat un any en el qual s'ha augmentat la potència de càlcul disponible per als nostres usuaris; s'han consolidat els serveis de supercomputació; s'ha adaptat i consolidat l'organització del CESCA als acords adoptats a finals de 1995 pel Consell de Govern i s'han posat els fonaments tant per ampliar-los amb altres serveis addicionals com per expandir-los a altres institucions així com per preparar el futur de l'Anella Científica.



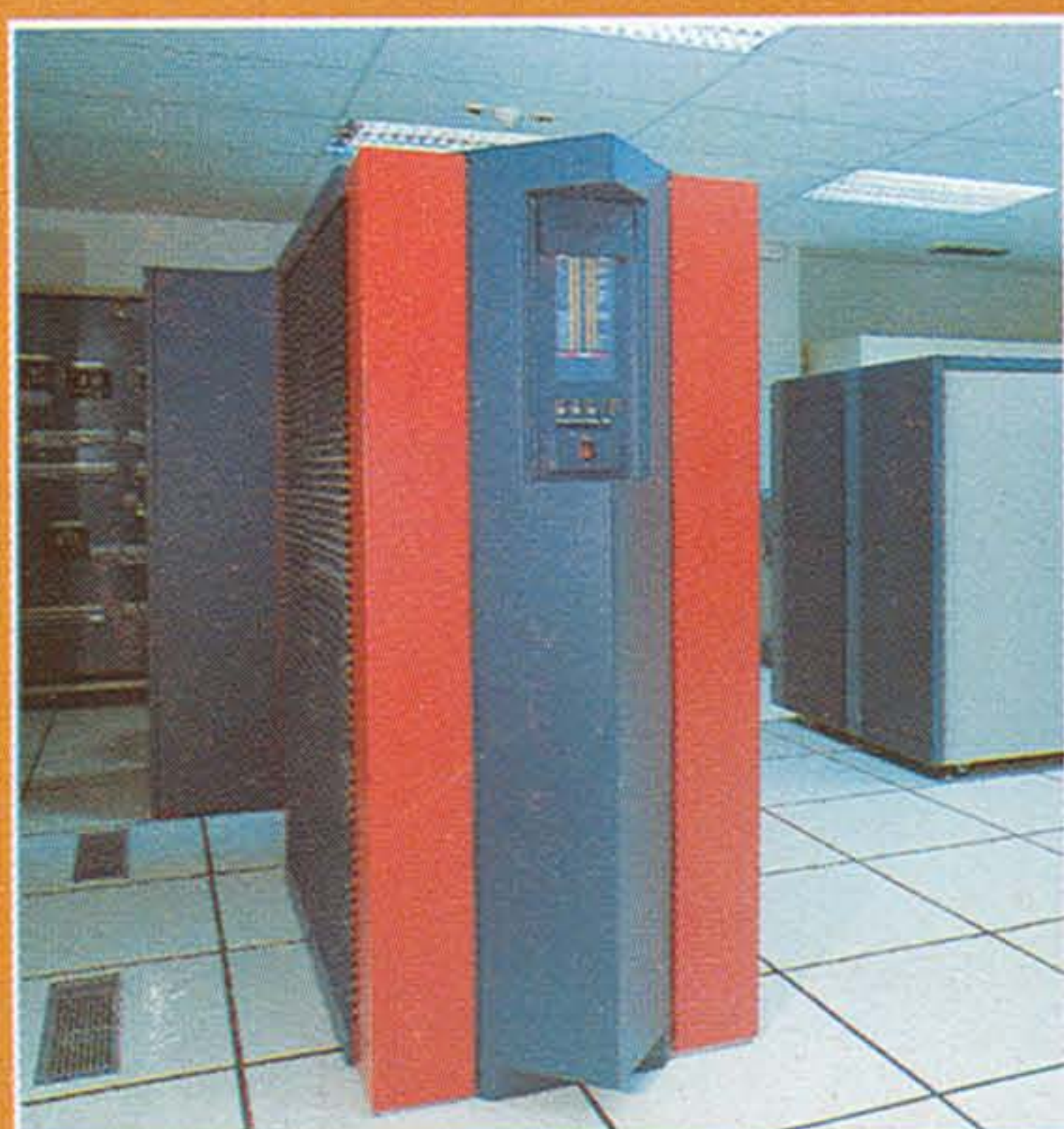
La nova seu social del CESCA a l'Edifici Nexus

Els nostres serveis

Des de l'any 1991, el Centre de Supercomputació de Catalunya ofereix serveis de càlcul d'altres prestacions a universitats, centres de recerca i empreses

Assistència Tècnica

- Suport usuaris
- Documentació
- Instal·lació aplicacions
- Gestió supercomputadors



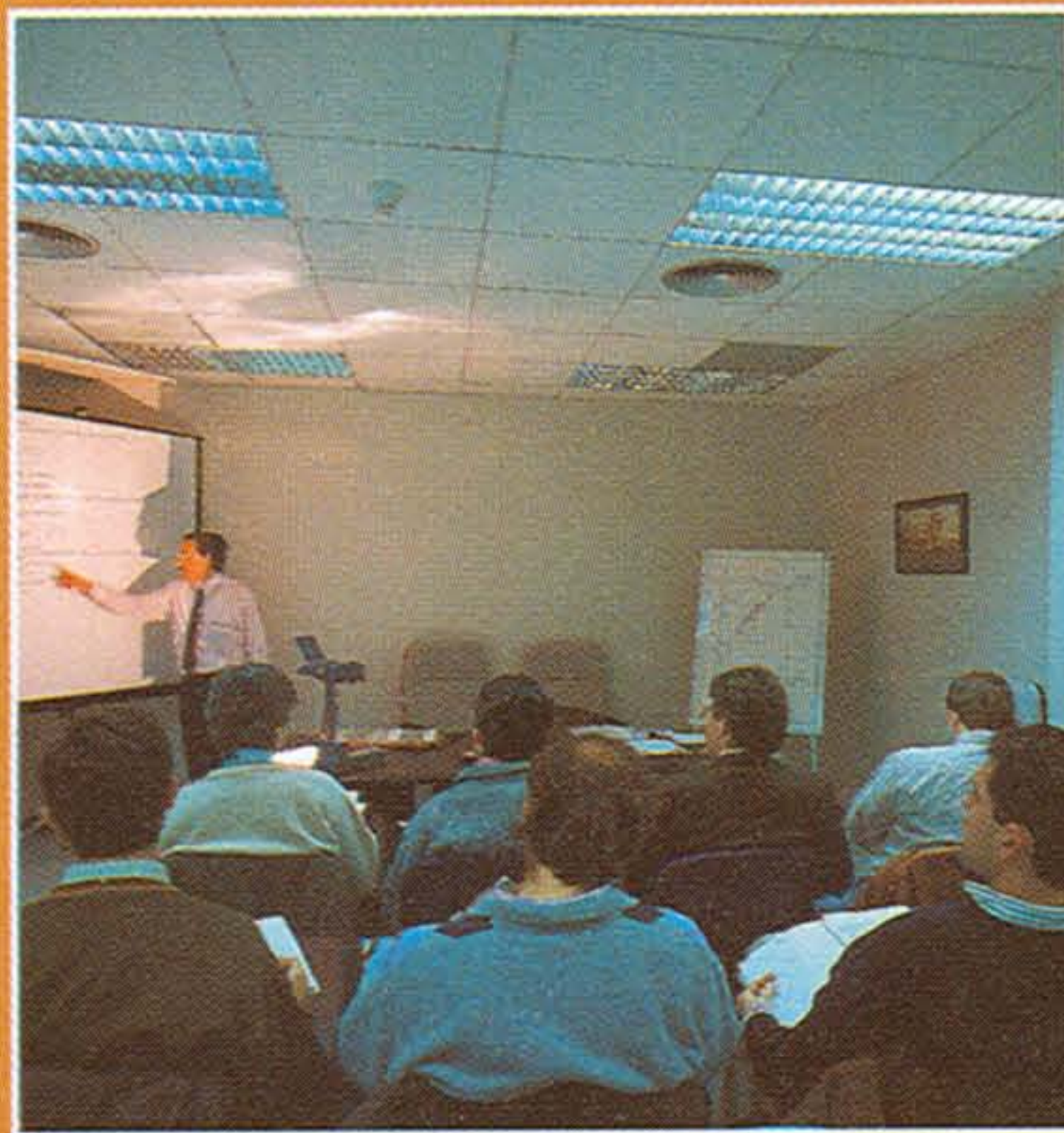
Promoció

- Difusió ús i beneficis
- Captació nous usuaris
- Creació de consorcis
- Transferència de tecnologia



Comunicacions i Operacions

- Suport institucions
- Coordinació serveis
- Servidors WWW, e-mail
- Gestió infraestructura



Formació

- Ús maquinari
- Ús programari
- Fòrum noves tecnologies
- Difusió treballs realitzats

Des de l'any 1993, el CESCA també gestiona l'Anella Científica

Edita



AMB EL SUPORT DE



Generalitat de Catalunya



FUNDACIÓ CATALANA PER A LA RECERCA

Universitat de Barcelona

Universitat Autònoma de Barcelona

Universitat Politècnica de Catalunya

Universitat de Girona

Universitat Rovira i Virgili

Universitat de Lleida

CSIC

TERAFLOP

DIRECTOR

Miquel Huguet

COORDINADOR

Carles Flamerich

REDACCIÓ

Anna Solana

COL·LABORADORS

Eduard Aiguadé

Joan Cambras

Caterina Parals

DISSENY I PRODUCCIÓ

Subirà & Associats

MAQUETACIÓ

Rosa Álvarez

CESCA

Gran Capità, 2-4

08034 Barcelona

Tel. (93) 205 64 64

Fax: (93) 205 69 79

E-mail:

teraflop@cesca.es

DIPÒSIT LEGAL: B-33512-94

ISSN: 1134-6671