

CMM

Center for
Mathematical
Modeling

Introducción

Cálculo de Alto Desempeño

Gonzalo Hernández Oliva
CMM - Universidad de Chile



Descripción

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

Descripción

La metodología incluirá las siguientes actividades:

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

- Laboratorios HPC: 100%
 - L1: Introducción al Lenguaje C - Programación Clusters
 - L2: Programación Paralela de Memoria Compartida
 - L3: Programación Paralela de Memoria Distribuida
 - L4: Programación Paralela Hibrida

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

2) Programación Paralela

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

3) Sistemas Complejos

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

4) Tópicos de Computación Paralela

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

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

Modelación de Sistemas Complejos

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

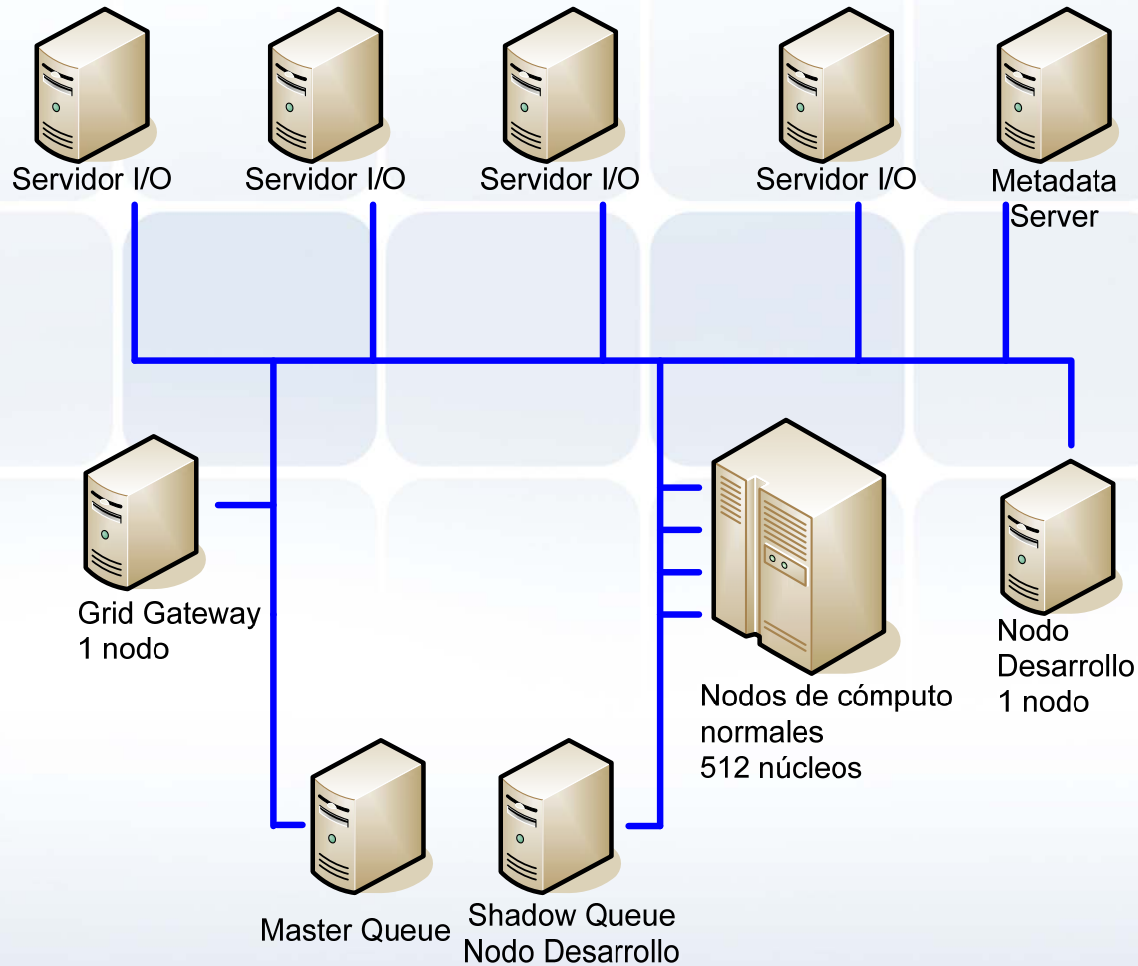
Modelación de Sistemas Complejos

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

NLHPC: National Laboratory for HPC

- 1) Desarrollar y mantener computación confiable y recursos de red para dar acceso a los grupos de investigación chilenos a las capacidades de HPC, para resolver problemas de alta complejidad computacional.
- 2) Participar y estimular la creación de una red de alta capacidad para la transmisión de datos de investigación.
- 3) Desarrollar nuevas aplicaciones industriales que usen HPC, con énfasis especial en los sectores industriales que son estratégicos para el país.
- 4) Crear y promover una red científica en torno al NLHPC, que permitirá mejorar la investigación de sistemas complejos.
- 5) Educación y capacitación de científicos e ingenieros en el uso del HPC.
- 6) Aumentar y promover el role de HPC en la sociedad y el desarrollo.

NLHPC: Levque (Relámpago)



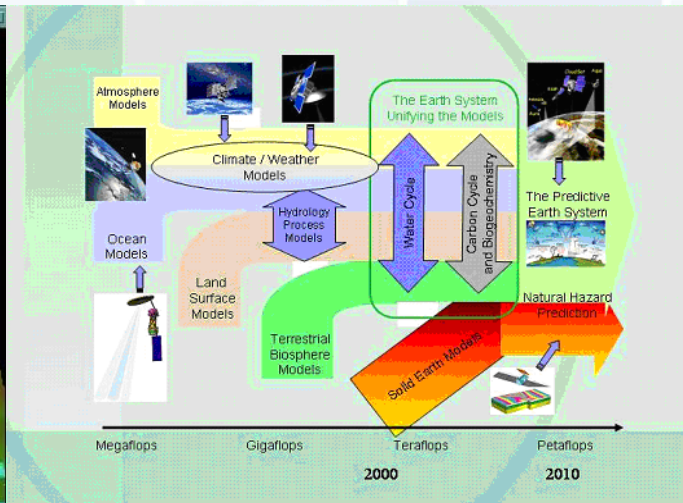
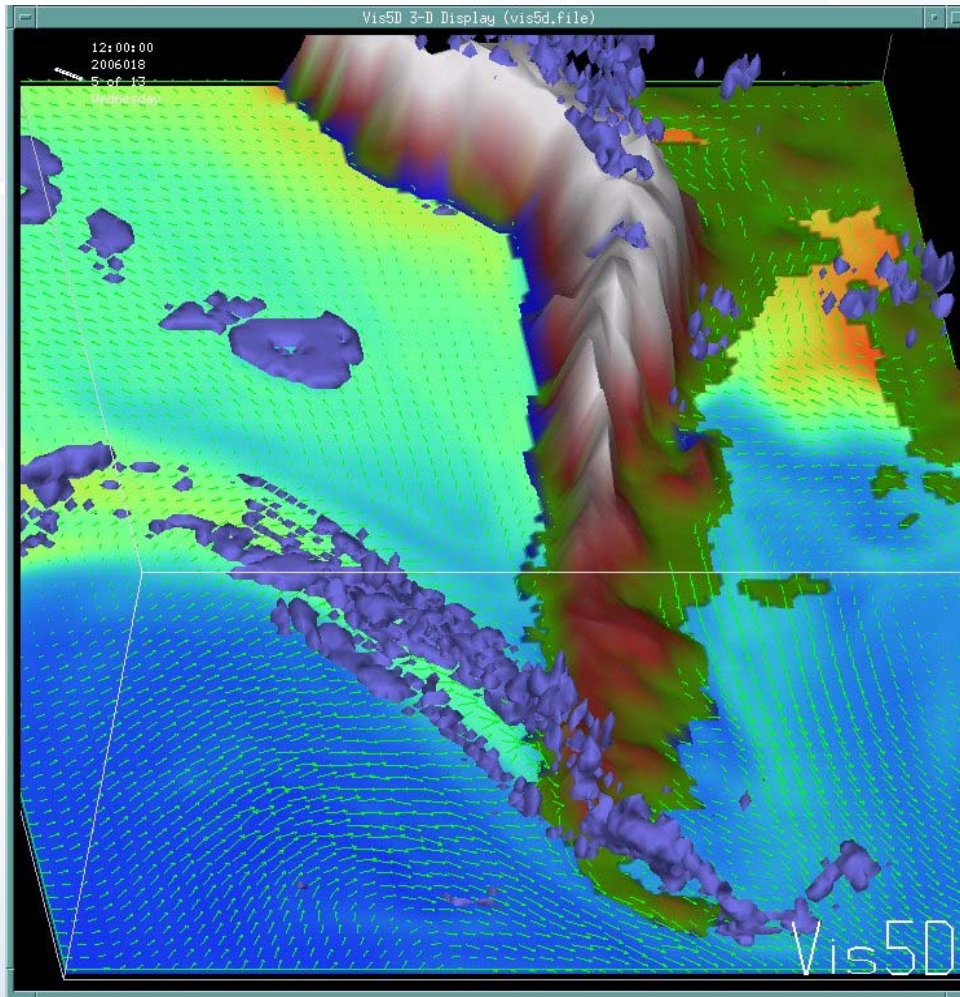
— Red Infiniband para I/O y MPI



Modelación Climática y Atmosférica

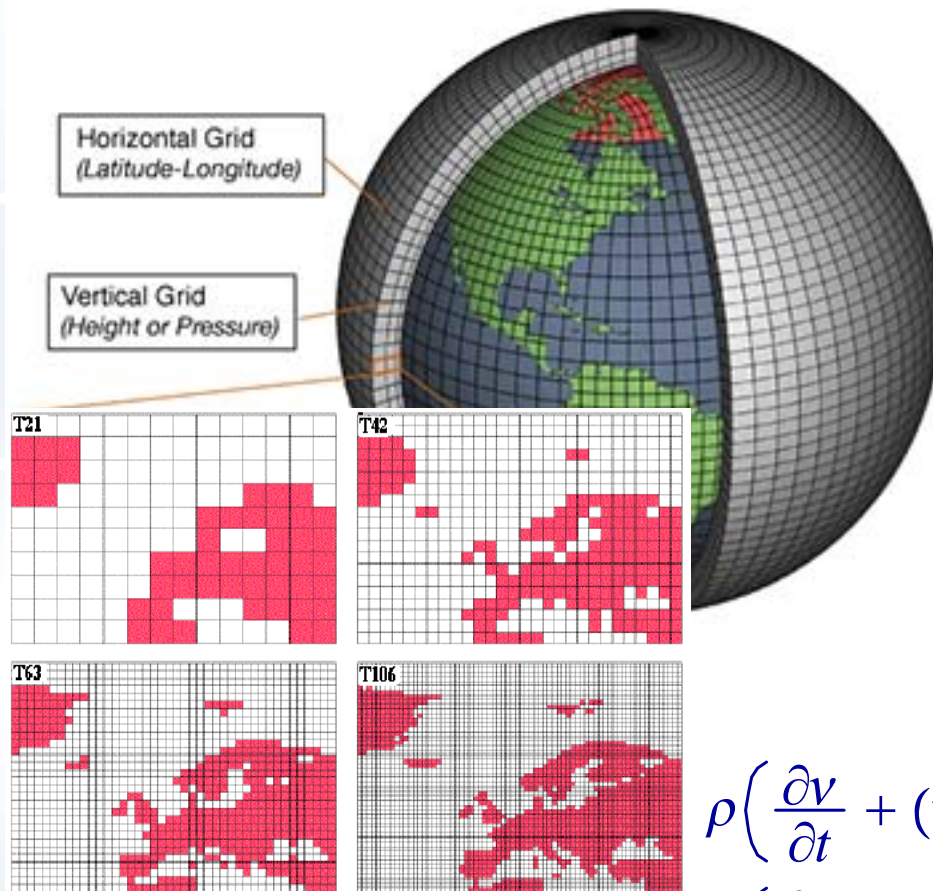
- Modelamiento climático y atmosférico
- Mejora del modelo actual de predicción del clima
- Problemas inversos: Emisiones consistente con la calidad del aire.
- Impacto de la contaminación en el clima de la región
- Red Europea – Latinoamericana para la evaluación del cambio climático: Estudio del efecto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

Modelación Climática y Atmosférica



Modelación Climática y Atmosférica

Pronóstico: Ecuaciones Primitivas



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

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

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

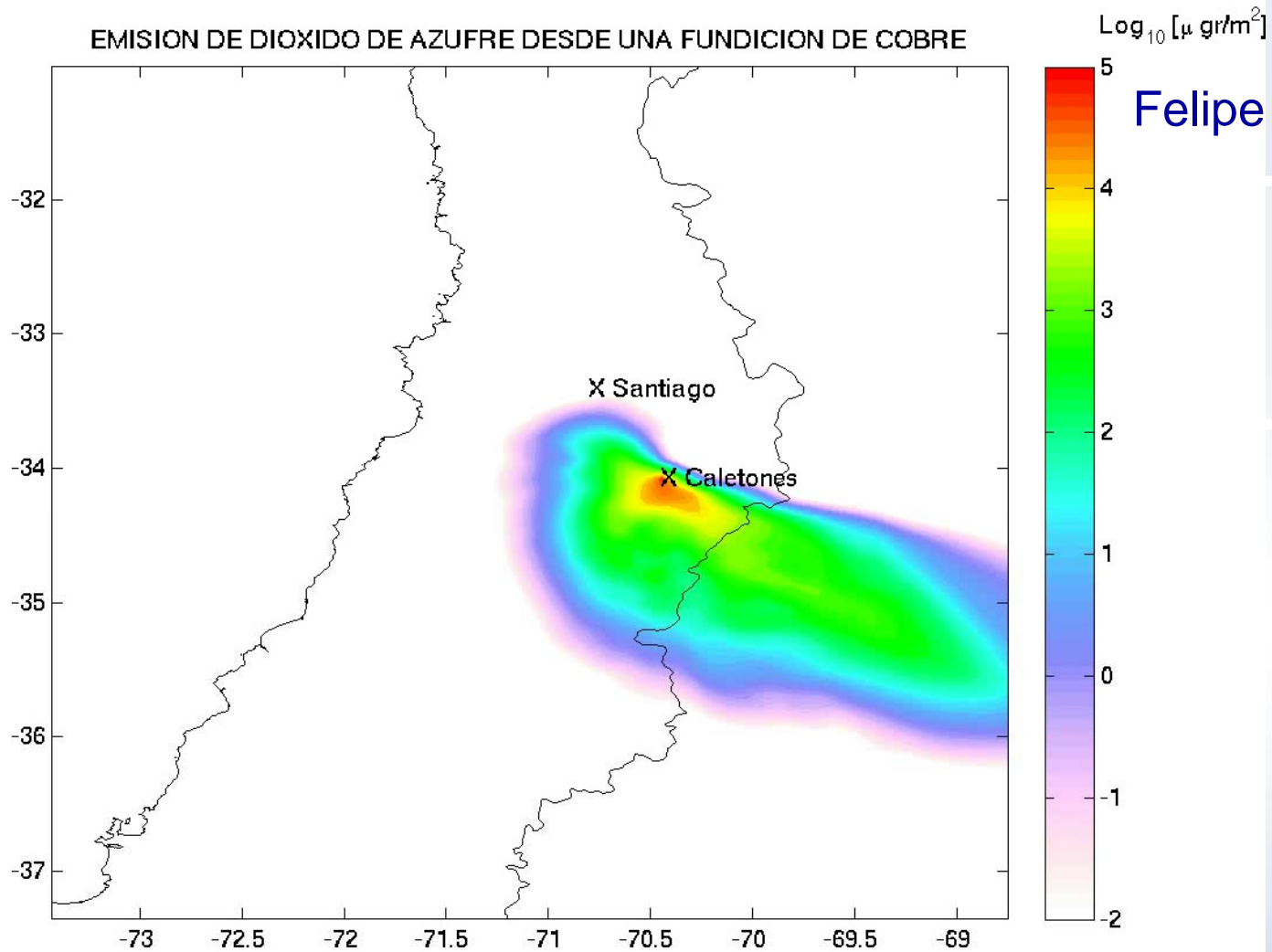
$$\frac{\partial h}{\partial t} = -(\mathbf{v} \cdot \nabla) h + E - P$$

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

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

Modelación Climática y Atmosférica

Pronóstico: Ecuaciones Primitivas



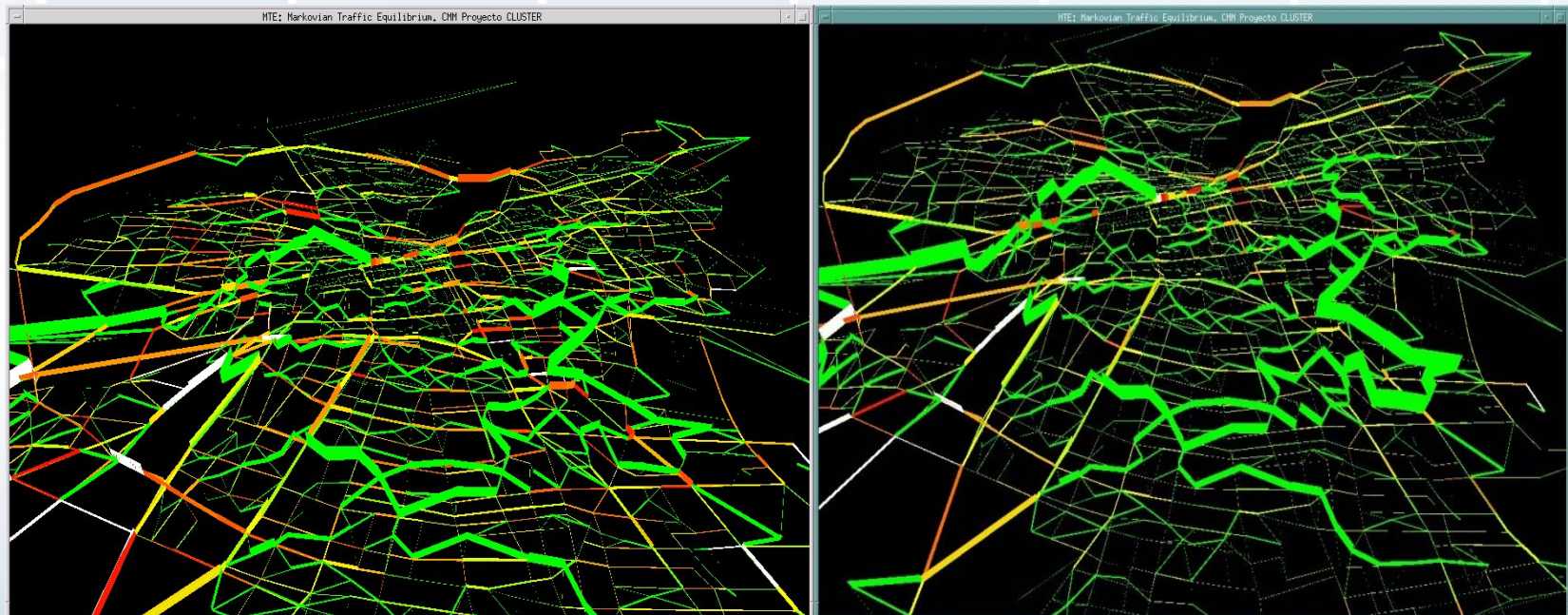
Felipe Macias

Modelación de Sistemas de Transporte

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

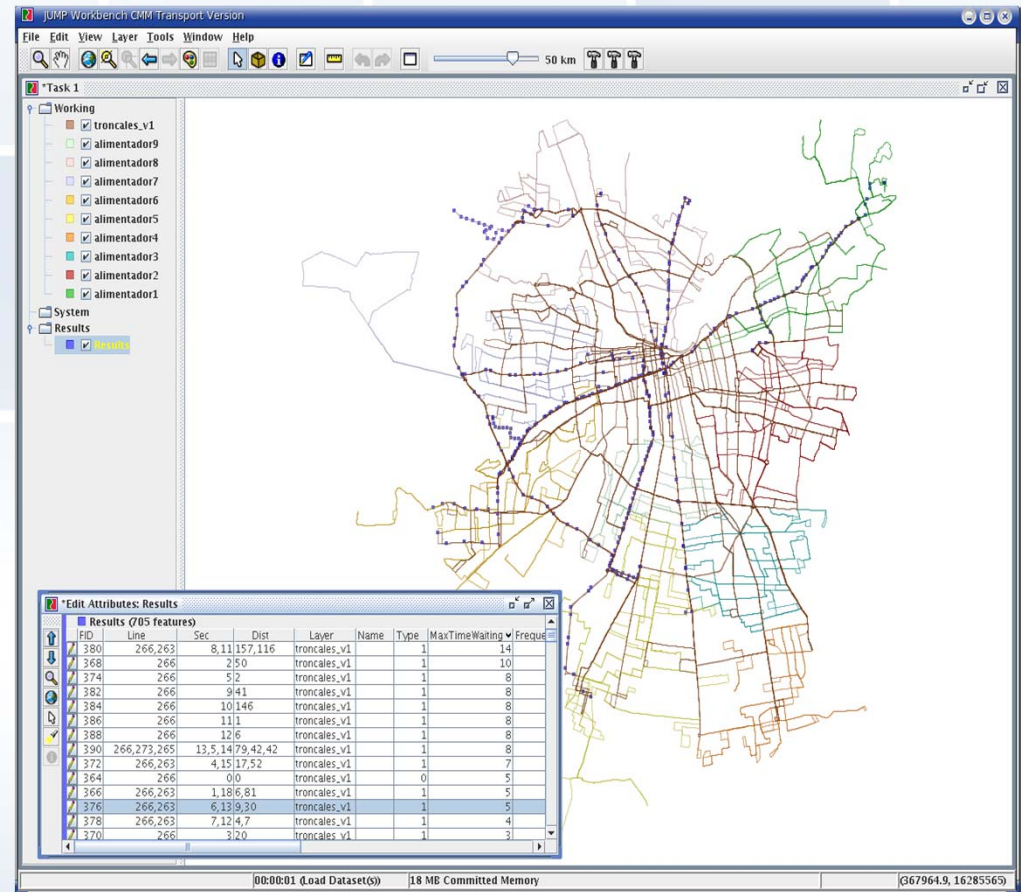
Modelación de Sistemas de Transporte

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



Modelación de Sistemas de Transporte

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



Proyecto MORPHEX

Redes Booleanas en Biología

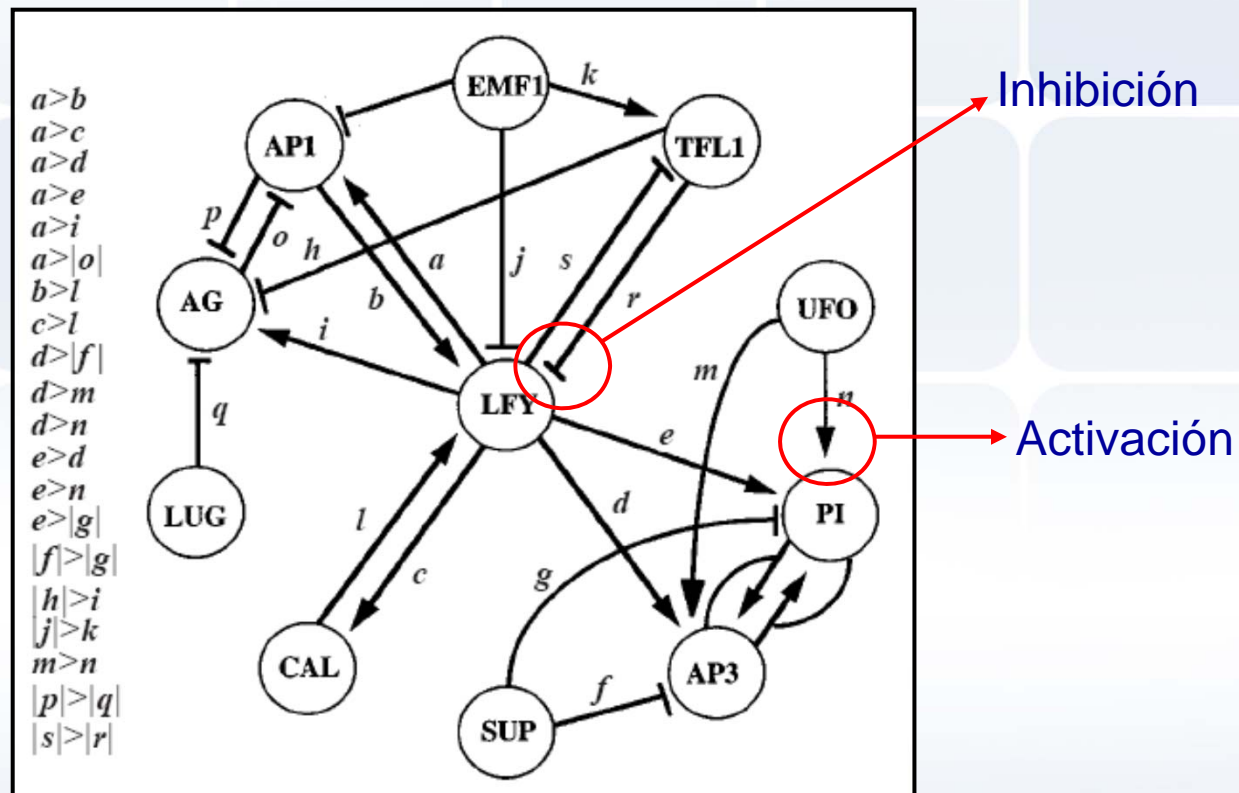
- El objetivo de este proyecto es modelar y simular redes de regulación genética que intervienen en la morfogénesis de plantas y animales.
- De esta forma se podrá comprender mejor su estructura y dinámica
- Una de estas plantas es la *Arabidopsis Thaliana*.
- En la red de regulación genética, las interacciones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

CMM Proyecto MORPHEX

Center for Mathematical Modeling

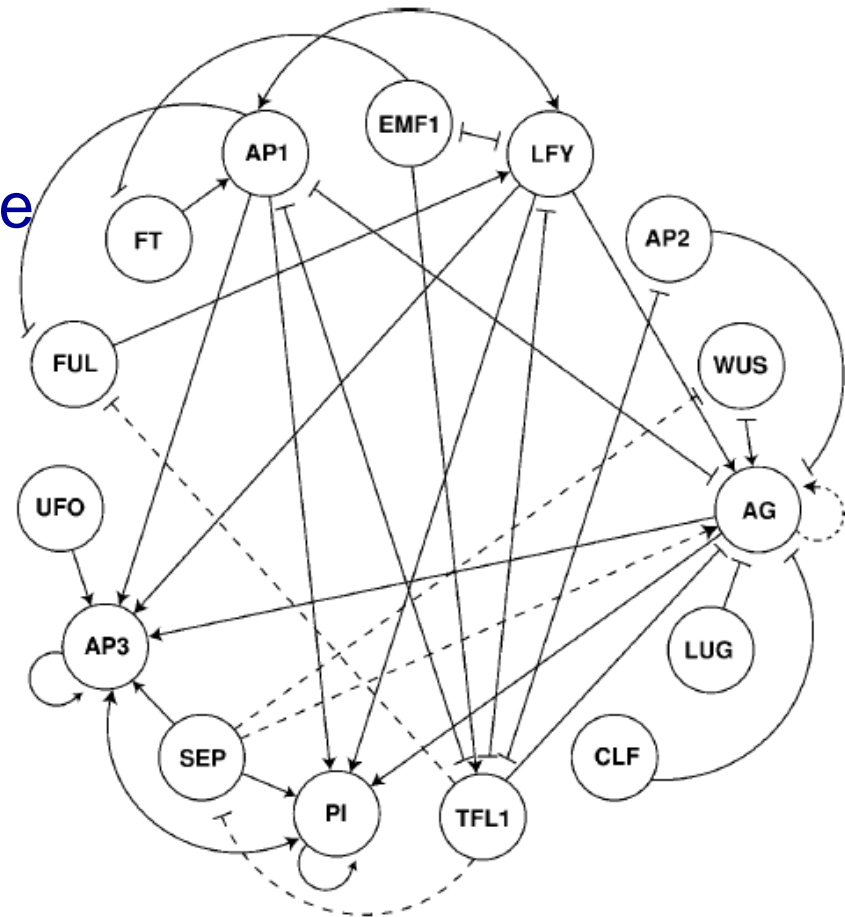
Redes Booleanas en Biología

- Primer modelo:



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

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



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

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

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

- Implementa diferentes esquemas deterministas de actualización:

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

Proyecto MORPHEX

Redes Booleanas en Biología

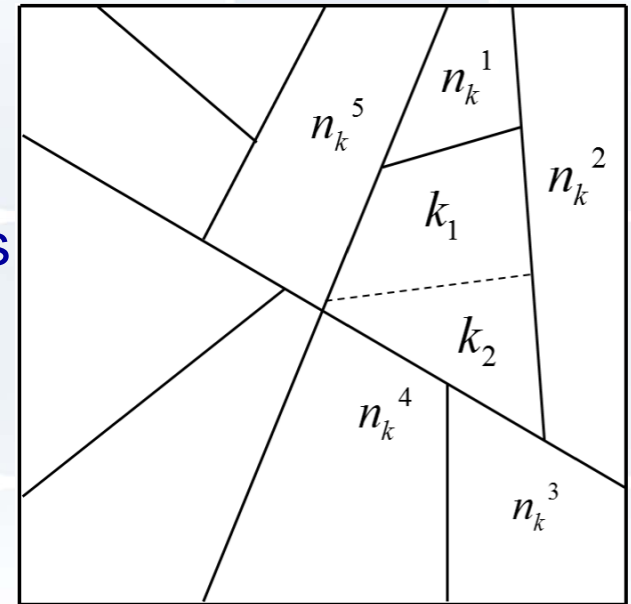
- Boolean Networks Numerical Dynamics:
 - Para un bloque de iteración dado calcula todos los atractores en el hipercubo.
 - Para todos los bloques de iteración calcula todos los atractores en el hipercubo.
 - Visualiza la dinámica para una condición inicial dada.
 - Calcula algunas estadísticas de la dinámica
- La librería se programó en Matlab[®] y utiliza algunos comandos del *Random Boolean Network Toolbox*:

Christian Schwarzer, Logic System Laboratory
Swiss Federal Institute of Technology in Lausanne

Fragmentation Models with Neighborhood Interaction

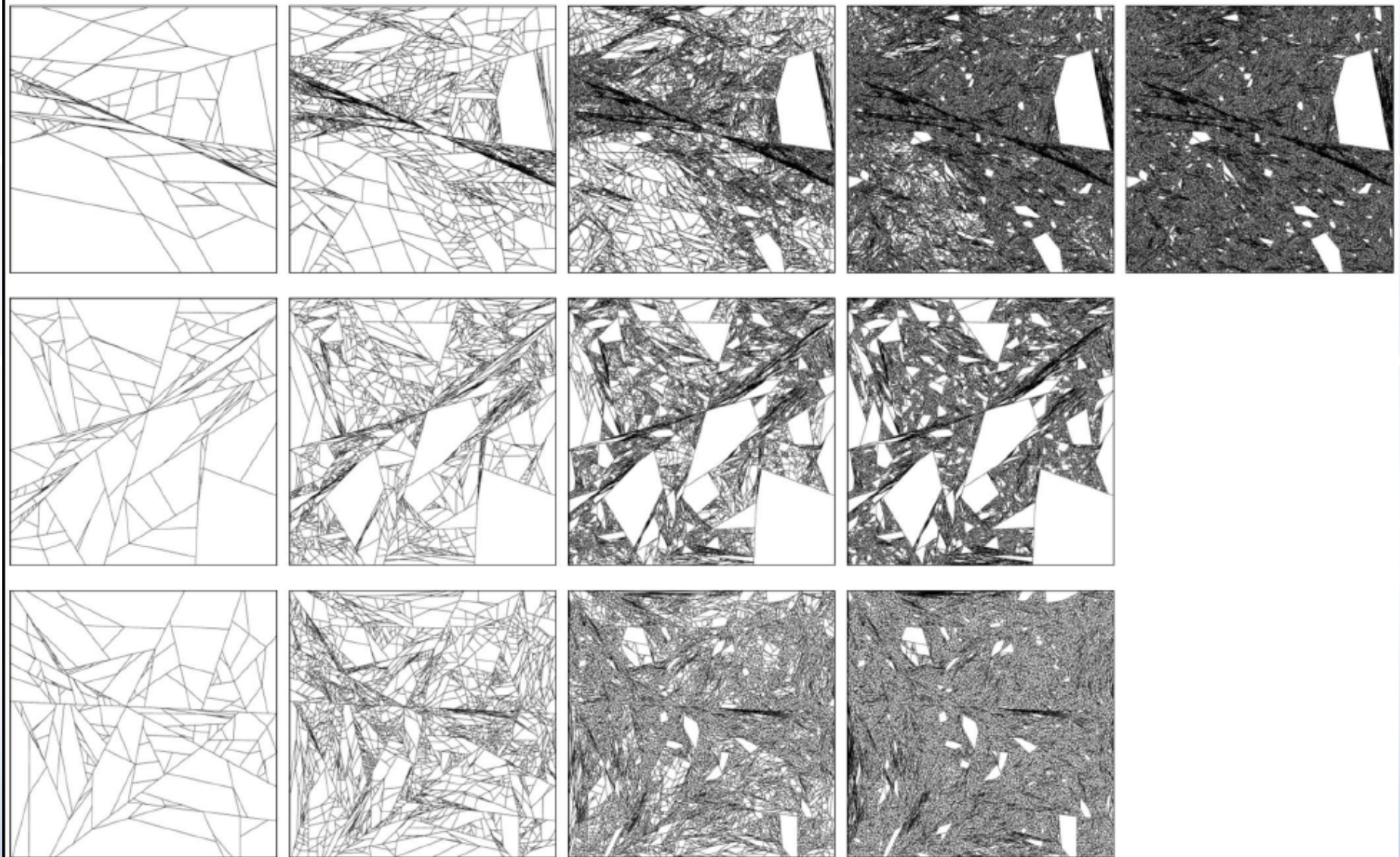
Definición del modelo:

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

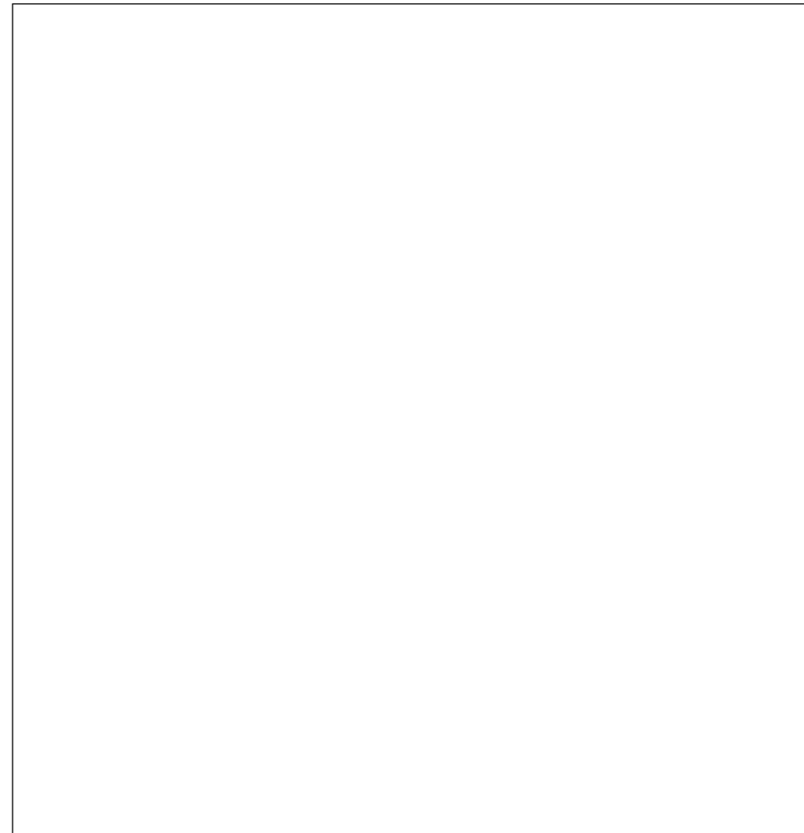


$$f_{i_k,k} \propto \int_{\partial B_{i_k,k}} \underline{\underline{\sigma}} \vec{n} = \text{length}(\partial B_{i_k,k})$$

Fragmentation Models with Neighborhood Interaction



Fragmentation Models with Neighborhood Interaction



Fragmentation Models with Neighborhood Interaction

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

