

Servicio General de Informática Aplicada a la Investigación

Cálculo Científico

Ing. Tec. Rocío Carrillo

Dr. Edu Ogando

Dr. Txema Mercero

SGIker

<http://www.ehu.es/SGI>



Introducción

- Máquinas propias

SGI-IZO

Cálculo Científico

Arina

SFS: Shared File System

Pendolo

Gestión del Servicio

Gestión del Software

Otras Tareas

Estadísticas

Conclusiones

Introducción



Máquinas propias

- Introducción
- Máquinas propias

SGI-IZO

Cálculo Científico

Arina

SFS: Shared File System

Pendolo

Gestión del Servicio

Gestión del Software

Otras Tareas

Estadísticas

Conclusiones

- Las máquinas, normalmente, pertenecían a los investigadores.
- Los propios investigadores administrarán la mayor parte de las máquinas de cálculo.



Figura 1: SP2 y SGI en Donostia.



Historia reciente en la UPV

Antigua máquina de cálculo de la UPV/EHU (Operativa hasta el 2005).

- 4 procesadores Alpha.
- 1 GB RAM
- ...



Figura 2: Bartolo.

Totalmente obsoleta.

- Introducción
- Máquinas propias
- SGI-IZO
- Cálculo Científico
- Arina
- SFS: Shared File System
- Pendolo
- Gestión del Servicio
- Gestión del Software
- Otras Tareas
- Estadísticas
- Conclusiones



Breve historia

Introducción

● Máquinas propias

SGI-IZO

Cálculo Científico

Arina

SFS: Shared File System

Péndulo

Gestión del Servicio

Gestión del Software

Otras Tareas

Estadísticas

Conclusiones

- 2004 La universidad crea el Servicio General de Informática Aplicada a la Investigación.
- En el 2004 se compra el Cluster *Arina*.
- En septiembre del 2004 se incorporan dos técnicos al servicio con amplia experiencia en diferentes áreas de Cálculo Científico, (Química Teórica y Física Teórica).
- En septiembre del 2006 se incorpora otro técnico de apoyo para el proyecto Péndulo.
- A finales de 2006 se amplia *Arina*.



[Introducción](#)

SGI-IZO

- SGIker
- Organigrama
- SGI-IZO

[Cálculo Científico](#)

[Arina](#)

[SFS: Shared File System](#)

[Pendulo](#)

[Gestión del Servicio](#)

[Gestión del Software](#)

[Otras Tareas](#)

[Estadísticas](#)

[Conclusiones](#)

SGI-IZO



Servicios **G**enerales de **I**nvestigación

- Nacen con la vocación de responder y servir de apoyo a la Investigación al más alto nivel.

Introducción

SGI-IZO

● SGIker

● Organigrama

● SGI-IZO

Cálculo Científico

Arina

SFS: Shared File System

Pendolo

Gestión del Servicio

Gestión del Software

Otras Tareas

Estadísticas

Conclusiones



Servicios **G**enerales de **I**nvestigación

- Nacen con la vocación de responder y servir de apoyo a la Investigación al más alto nivel.
- **Están a disposición del propio Organismo, de otros Institutos Públicos y de la Empresa.**

Introducción

SGI-IZO

● SGIker

● Organigrama

● SGI-IZO

Cálculo Científico

Arina

SFS: Shared File System

Pendolo

Gestión del Servicio

Gestión del Software

Otras Tareas

Estadísticas

Conclusiones



Servicios **G**enerales de **I**nvestigación

- Nacen con la vocación de responder y servir de apoyo a la Investigación al más alto nivel.
- **Están a disposición del propio Organismo, de otros Institutos Públicos y de la Empresa.**
- Proporciona no sólo recursos **técnicos (máquinas)**, sino también **recursos humanos (conocimiento)**.

Introducción

SGI-IZO

● SGIker

● Organigrama

● SGI-IZO

Cálculo Científico

Arina

SFS: Shared File System

Pendulo

Gestión del Servicio

Gestión del Software

Otras Tareas

Estadísticas

Conclusiones



Organigrama

Introducción

SGI-IZO

● SGIker

● Organigrama

● SGI-IZO

Cálculo Científico

Arina

SFS: Shared File System

Pendolo

Gestión del Servicio

Gestión del Software

Otras Tareas

Estadísticas

Conclusiones





Servicio **G**eneral de **I**nformática (SGI-IZO) aplicada a la Investigación (Cálculo Científico)

- Asiste a los investigadores en el uso de las estrategias de computación más adecuadas a sus necesidades, y en general, orientarlos en el empleo de ordenadores en sus investigaciones.

Introducción

SGI-IZO

- SGIker
- Organigrama
- SGI-IZO

Cálculo Científico

Arina

SFS: Shared File System

Pendulo

Gestión del Servicio

Gestión del Software

Otras Tareas

Estadísticas

Conclusiones



Servicio **G**eneral de **I**nformática (SGI-IZO) aplicada a la Investigación (Cálculo Científico)

- Asiste a los investigadores en el uso de las estrategias de computación más adecuadas a sus necesidades, y en general, orientarlos en el empleo de ordenadores en sus investigaciones.
- Proporciona recursos de computación propios.

Introducción

SGI-IZO

● SGIker

● Organigrama

● SGI-IZO

Cálculo Científico

Arina

SFS: Shared File System

Pendulo

Gestión del Servicio

Gestión del Software

Otras Tareas

Estadísticas

Conclusiones



Introducción

SGI-IZO

- SGIker
- Organigrama
- SGI-IZO

Cálculo Científico

Arina

SFS: Shared File System

Pendulo

Gestión del Servicio

Gestión del Software

Otras Tareas

Estadísticas

Conclusiones

Servicio General de Informática (SGI-IZO) aplicada a la Investigación (Cálculo Científico)

- Asiste a los investigadores en el uso de las estrategias de computación más adecuadas a sus necesidades, y en general, orientarlos en el empleo de ordenadores en sus investigaciones.
- Proporciona recursos de computación propios.
- Vigilancia tecnológica de los avances que se producen en el Cálculo Científico para su implementación en la UPV/EHU.



Introducción

SGI-IZO

Cálculo Científico

- Cálculo Científico
- Física
- Química
- Matemáticas
- Biología
- Geología
- Ingeniería

Arina

SFS: Shared File System

Pendolo

Gestión del Servicio

Gestión del Software

Otras Tareas

Estadísticas

Conclusiones

Cálculo Científico



Cálculo Científico

Introducción

SGI-IZO

Cálculo Científico

● Cálculo Científico

- Física
- Química
- Matemáticas
- Biología
- Geología
- Ingeniería

Arina

SFS: Shared File System

Pendulo

Gestión del Servicio

Gestión del Software

Otras Tareas

Estadísticas

Conclusiones

Lo podemos definir como la actividad de la Ciencia que mediante el uso de la informática y los ordenadores obtiene conocimiento.

Su característica más notable es su multidisciplinaridad.

Introducción

SGI-IZO

Cálculo Científico

● Cálculo Científico

● Física

● Química

● Matemáticas

● Biología

● Geología

● Ingeniería

Arina

SFS: Shared File System

Pendolo

Gestión del Servicio

Gestión del Software

Otras Tareas

Estadísticas

Conclusiones

- Partículas
- Materiales
- Meteorología
- Cuántica
- Astrofísica
- ...

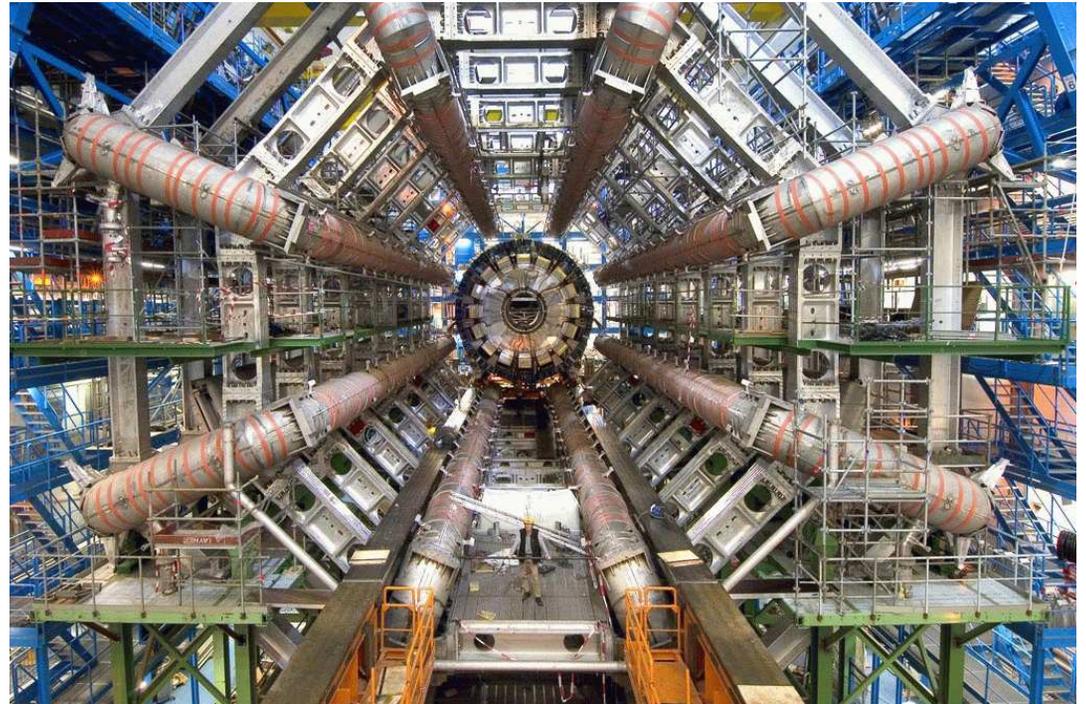


Figura 3: El detector ATLAS del LHC (CERN)

Física de materiales, ciencias planetarias

Introducción

SGI-IZO

Cálculo Científico

● Cálculo Científico

● Física

● Química

● Matemáticas

● Biología

● Geología

● Ingeniería

Arina

SFS: Shared File System

Pendolo

Gestión del Servicio

Gestión del Software

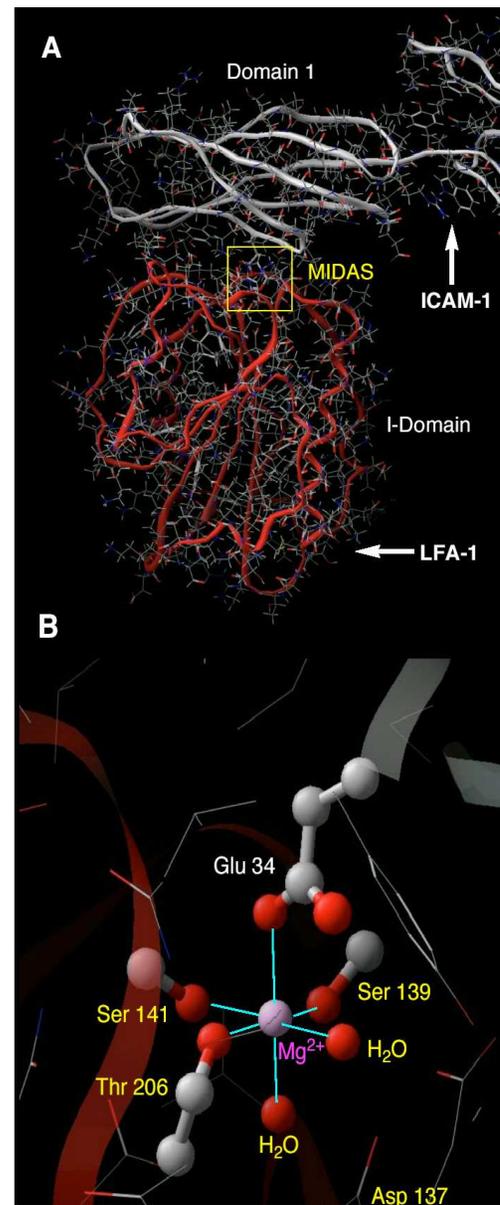
Otras Tareas

Estadísticas

Conclusiones

- Química-Física
- Bioquímica
- Farmacología
- Ingeniería Química
- . . .

Química orgánica, química física, bioquímica, . . .





Matemáticas

Introducción

SGI-IZO

Cálculo Científico

● Cálculo Científico

● Física

● Química

● Matemáticas

● Biología

● Geología

● Ingeniería

Arina

SFS: Shared File System

Pendolo

Gestión del Servicio

Gestión del Software

Otras Tareas

Estadísticas

Conclusiones

- Babbage: inventa la primera máquina programable.
- Ada: la primera programadora.
- Boole: Desarrolla la Teoría de los circuitos lógicos.
- Turing: sentó las bases de la Informática moderna.
- ...



Figura 4: El primer ordenador.

Criptografía, inteligencia artificial, estadística...



Proyecto Genoma humano no se hubiese podido llevar a cabo sin potentes ordenadores.

- Identificar ≈ 25000 genes.
- Identificar las secuencias de $3 * 10^9$ da bases.
- Almacenar la información en bases de datos.
- Analizar y estudiar los datos.
- ...



Bioinformática, genómica, ecología, ...

Introducción

SIG-IZO

Cálculo Científico

- Cálculo Científico
- Física
- Química
- Matemáticas
- **Biología**
- Geología
- Ingeniería

Arina

SFS: Shared File System

Pendolo

Gestión del Servicio

Gestión del Software

Otras Tareas

Estadísticas

Conclusiones



Durante 3 años el ordenador más potente del mundo fue el Earth Simulator y está orientado al estudio de la Tierra.

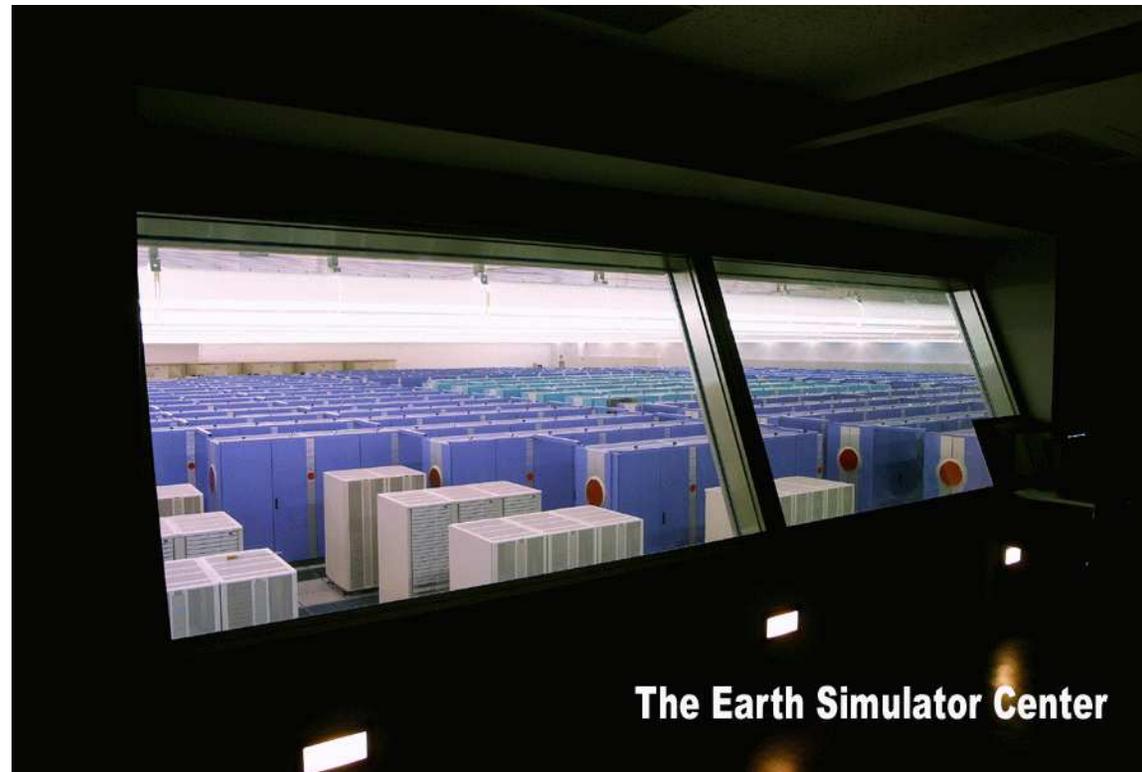


Figura 5: Ordenador más potente del mundo entre 2002 y 2005.

Introducción

SGI-IZO

Cálculo Científico

- Cálculo Científico
- Física
- Química
- Matemáticas
- Biología
- Geología
- Ingeniería

Arina

SFS: Shared File System

Pendolo

Gestión del Servicio

Gestión del Software

Otras Tareas

Estadísticas

Conclusiones



Ingeniería

Introducción

SGI-IZO

Cálculo Científico

- Cálculo Científico
- Física
- Química
- Matemáticas
- Biología
- Geología
- Ingeniería

Arina

SFS: Shared File System

Pendulo

Gestión del Servicio

Gestión del Software

Otras Tareas

Estadísticas

Conclusiones

- Dinámica de fluidos.
- Transmisión de calor.
- Resistencia de estructuras.
- Diseño mecánico.
- ...

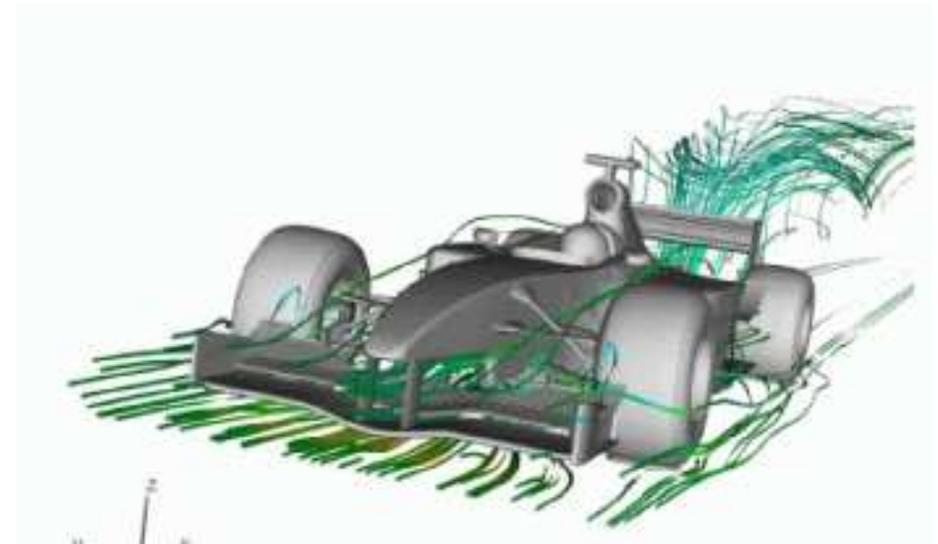


Figura 6: Estudio aerodinámico de un Fórmula-1.

Ingeniería nuclear, Ingeniería química



Introducción

SGI-IZO

Cálculo Científico

Arina

- Características
- Otras características
- Galería
- Rendimiento

SFS: Shared File System

Pendolo

Gestión del Servicio

Gestión del Software

Otras Tareas

Estadísticas

Conclusiones

Arina



Características

Introducción

SGI-IZO

Cálculo Científico

Arina

● Características

● Otras características

● Galería

● Rendimiento

SFS: Shared File System

Pendulo

Gestión del Servicio

Gestión del Software

Otras Tareas

Estadísticas

Conclusiones

Características técnicas

- 2 Nodos duales de conexión y compilación.
- 56 microprocesadores de cálculo Itanium 2 1.3 GHz, L3 3 MB.
- 32 microprocesadores de cálculo Itanium 2 1.6 GHz, L3 6MB.
- 40 microprocesadores de cálculo Opteron 2.4GHz, L2 1MB.
- Sistema de Archivos Paralelo (SFS).
- Red de conexión infiniband.
- Linux Redhat AS 4 (Update 4).



Características técnicas

- 2 Nodos duales de conexión y compilación.
Arina: Itanium2 1.3 GHz, 2GB RAM.
Maiz: Opteron 2.4 GHZ, 4Gb RAM.
- 56 microprocesdores de cálculo Itanium2 1.3 GHz.
- 32 microprocesdores de cálculo Itanium2 1.6 GHz.
- 40 microprocesdores de cálculo Opteron 2.4GHz.
- Sistema de Archivos Paralelo (SFS).
- Red de conexión infiniband.
- Linux Redhat AS 4 (Update 4).

Introducción

SGI-IZO

Cálculo Científico

Arina

● Características

● Otras características

● Galeria

● Rendimiento

SFS: Shared File System

Pendolo

Gestión del Servicio

Gestión del Software

Otras Tareas

Estadísticas

Conclusiones



- Introducción
- SGI-IZO
- Cálculo Científico
- Arina
 - Características
 - Otras características
 - Galería
 - Rendimiento
- SFS: Shared File System
- Pendulo
- Gestión del Servicio
- Gestión del Software
- Otras Tareas
- Estadísticas
- Conclusiones

Características técnicas

- 2 Nodos duales de conexión y compilación.
- 56 microprocesadores de cálculo Itanium2 1.3 GHz.
 - 10 nodos con 4 procesadores y 4 Gb de memoria RAM.
 - 4 nodos con 4 procesadores y 16 Gb de memoria RAM.
- 32 microprocesadores de cálculo Itanium2 1.6 GHz.
- 40 microprocesadores de cálculo Opteron 2.4 GHz.
- Sistema de Archivos Paralelo (SFS).
- Red de conexión infiniband.
- Linux Redhat AS 4 (Update 4).



- Introducción
- SGI-IZO
- Cálculo Científico
- Arina
 - Características
 - Otras características
 - Galería
 - Rendimiento
- SFS: Shared File System
- Pendulo
- Gestión del Servicio
- Gestión del Software
- Otras Tareas
- Estadísticas
- Conclusiones

Características técnicas

- 2 Nodos duales de conexión y compilación.
- 56 microprocesadores de cálculo Itanium2 1.3 GHz.
- 32 microprocesadores de cálculo Itanium2 1.6 GHz.
4 nodos con 8 procesadores y 16 Gb de memoria RAM.
- 40 microprocesadores de cálculo Opteron 2.4GHz.
- Sistema de Archivos Paralelo (SFS).
- Red de conexión infiniband.
- Linux Redhat AS 4 (Update 4).



Características

Características técnicas

- 2 Nodos duales de conexión y compilación.
- 56 microprocesadores de cálculo Itanium 2 1.3 GHz.
- 32 microprocesadores de cálculo Itanium 2 1.6 GHz.
- 40 microprocesadores de cálculo Opteron 2.4GHz.
 - 4 nodos con 4 procesadores (Dual-Core) y 16 Gb de memoria RAM.
 - 1 nodos con 4 procesadores (Dual-Core) y 32 Gb de memoria RAM.
- Sistema de Archivos Paralelo (SFS).
- Red de conexión infiniband.
- Linux Redhat AS 4 (Update 4).

Introducción

SGI-IZO

Cálculo Científico

Arina

● Características

● Otras características

● Galeria

● Rendimiento

SFS: Shared File System

Pendulo

Gestión del Servicio

Gestión del Software

Otras Tareas

Estadísticas

Conclusiones



Características técnicas

- 2 Nodos duales de conexión y compilación.
- 56 microprocesadores de cálculo Itanium 2 1.3 GHz.
- 32 microprocesadores de cálculo Itanium 2 1.6 GHz.
- 40 microprocesadores de cálculo Opteron 2.4GHz.
- Sistema de Archivos Paralelo (SFS).
 - 4 Servidores Duales Xeon 3.2 GHz, 4GB RAM (2 para datos y 2 para metadatos).
 - 6 cabinas SATA (12 HD SATA 160 GB c/u).
 - Almacenamiento neto de 4.7 TB.**
- Red de conexión infiniband.
- Linux Redhat AS 4 (Update 4).

Introducción

SGI-IZO

Cálculo Científico

Arina

● Características

● Otras características

● Galeria

● Rendimiento

SFS: Shared File System

Pendulo

Gestión del Servicio

Gestión del Software

Otras Tareas

Estadísticas

Conclusiones



Características técnicas

- 2 Nodos duales de conexión y compilación.
- 56 microprocesadores de cálculo Itanium 2 1.3 GHz.
- 32 microprocesadores de cálculo Itanium 2 1.6 GHz.
- 40 microprocesadores de cálculo Opteron 2.4GHz.
- Sistema de Archivos Paralelo (SFS).
- Red de conexión infiniband.
Ancho de banda de 1GB/s
Baja latencia.
- Linux Redhat AS 4 (Update 4).

Introducción

SGI-IZO

Cálculo Científico

Arina

● Características

● Otras características

● Galeria

● Rendimiento

SFS: Shared File System

Pendulo

Gestión del Servicio

Gestión del Software

Otras Tareas

Estadísticas

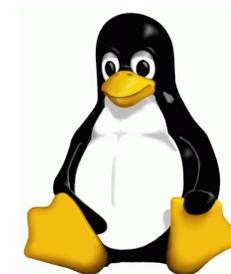
Conclusiones



- Introducción
- SGI-IZO
- Cálculo Científico
- Arina
 - Características
 - Otras características
 - Galería
 - Rendimiento
- SFS: Shared File System
- Pendulo
- Gestión del Servicio
- Gestión del Software
- Otras Tareas
- Estadísticas
- Conclusiones

Características técnicas

- 2 Nodos duales de conexión y compilación.
- 56 microprocesadores de cálculo Itanium 2 1.3 GHz.
- 32 microprocesadores de cálculo Itanium 2 1.6 GHz.
- 40 microprocesadores de cálculo Opteron 2.4GHz.
- Sistema de Archivos Paralelo (SFS).
- Red de conexión infiniband.
- Linux Redhat AS 4 (Update 4).





Otras características

Introducción

SGI-IZO

Cálculo Científico

Arina

● Características

● Otras características

● Galería

● Rendimiento

SFS: Shared File System

Pendulo

Gestión del Servicio

Gestión del Software

Otras Tareas

Estadísticas

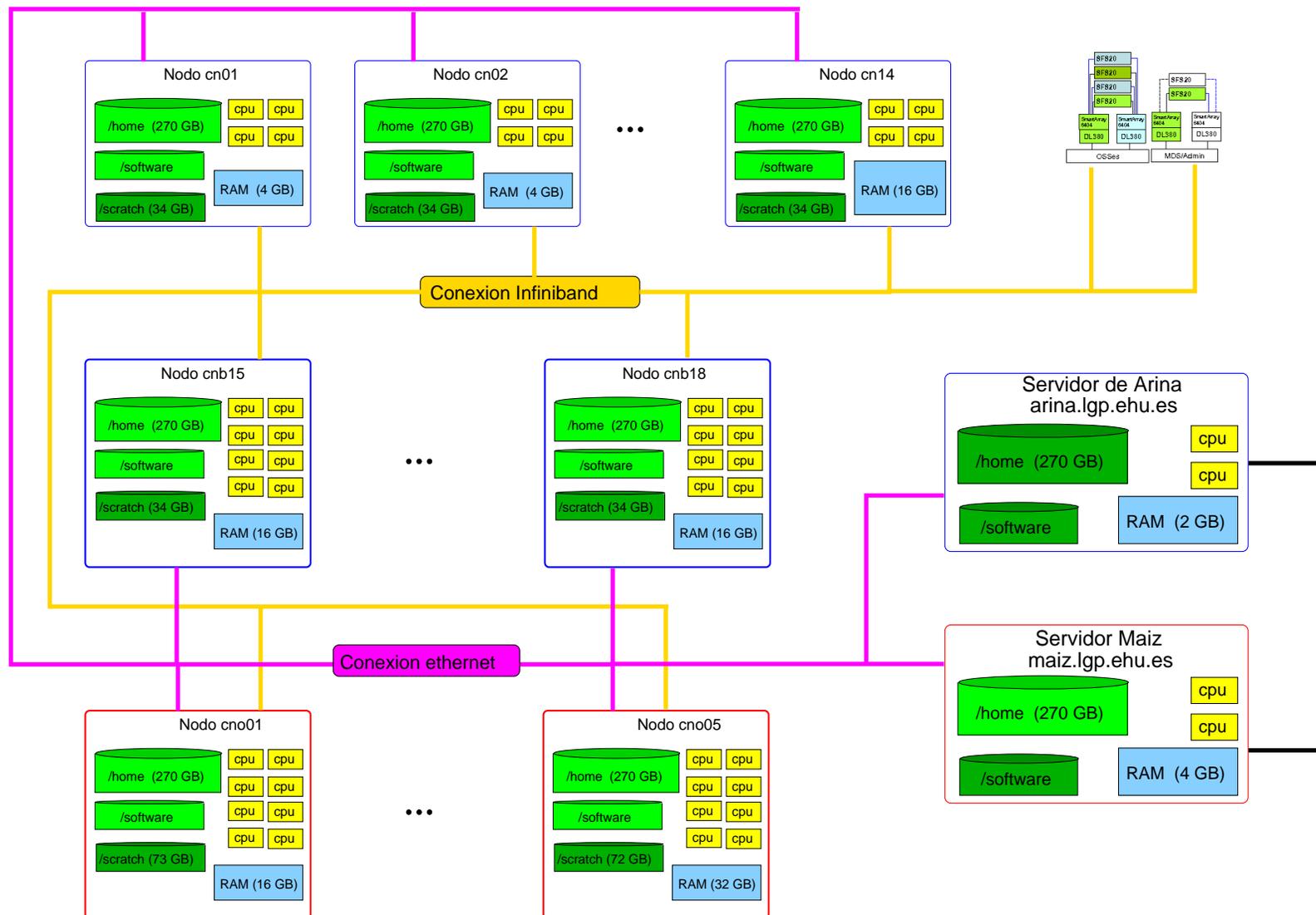
Conclusiones

- Elementos redundantes: fuentes de alimentación, ventiladores, . . .
- Servicio técnico del proveedor de hardware/software.
- Infraestructura y personal adicional (CIDIR).
 - ◆ Situada en una sala de servidores.
 - ◆ UPS y grupo electrógeno.
 - ◆ Copias de seguridad diarias de los archivos.
 - ◆ Vigilancia y monitorización (Big Brother).



Configuración

- Introducción
- SGI-IZO
- Cálculo Científico
- Arina**
 - Características
 - Otras características
 - Galería
 - Rendimiento
- SFS: Shared File System
- Pendulo
- Gestión del Servicio
- Gestión del Software
- Otras Tareas
- Estadísticas
- Conclusiones





Galeria

Introducción

SGI-IZO

Cálculo Científico

Arina

- Características
- Otras características
- **Galeria**
- Rendimiento

SFS: Shared File System

Pendulo

Gestión del Servicio

Gestión del Software

Otras Tareas

Estadísticas

Conclusiones





Galería



Introducción

SGI-IZO

Cálculo Científico

Arina

- Características
- Otras características
- **Galería**
- Rendimiento

SFS: Shared File System

Pendolo

Gestión del Servicio

Gestión del Software

Otras Tareas

Estadísticas

Conclusiones



Galeria (frontal cálculo)



Introducción

SGI-IZO

Cálculo Científico

Arina

- Características
- Otras características
- **Galeria**
- Rendimiento

SFS: Shared File System

Pendulo

Gestión del Servicio

Gestión del Software

Otras Tareas

Estadísticas

Conclusiones



Galería (frontal cálculo)

- Introducción
- SGI-IZO
- Cálculo Científico
- Arina**
 - Características
 - Otras características
 - **Galería**
 - Rendimiento
- SFS: Shared File System
- Pendolo
- Gestión del Servicio
- Gestión del Software
- Otras Tareas
- Estadísticas
- Conclusiones





Galería (almacenamiento)

Introducción

SGI-IZO

Cálculo Científico

Arina

- Características
- Otras características
- **Galería**
- Rendimiento

SFS: Shared File System

Pendolo

Gestión del Servicio

Gestión del Software

Otras Tareas

Estadísticas

Conclusiones





Galería (trasera)



Introducción

SGI-IZO

Cálculo Científico

Arina

- Características
- Otras características
- **Galería**
- Rendimiento

SFS: Shared File System

Pendolo

Gestión del Servicio

Gestión del Software

Otras Tareas

Estadísticas

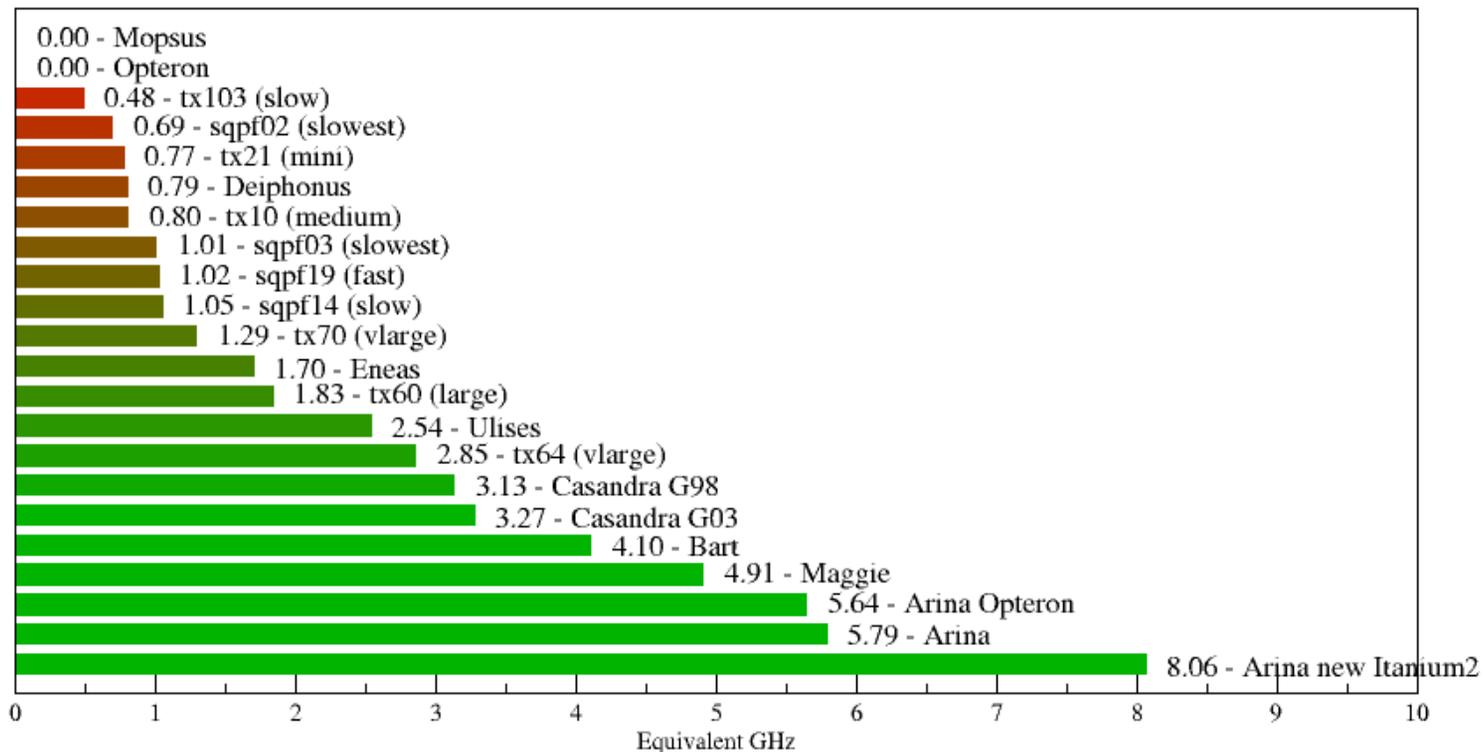
Conclusiones



Rendimiento

Benchmark de GAUSSIAN

Bench_04 - CH₃B(CF₂Cl)₃⁻ B3LYP/6-311G(d,p) Frequency



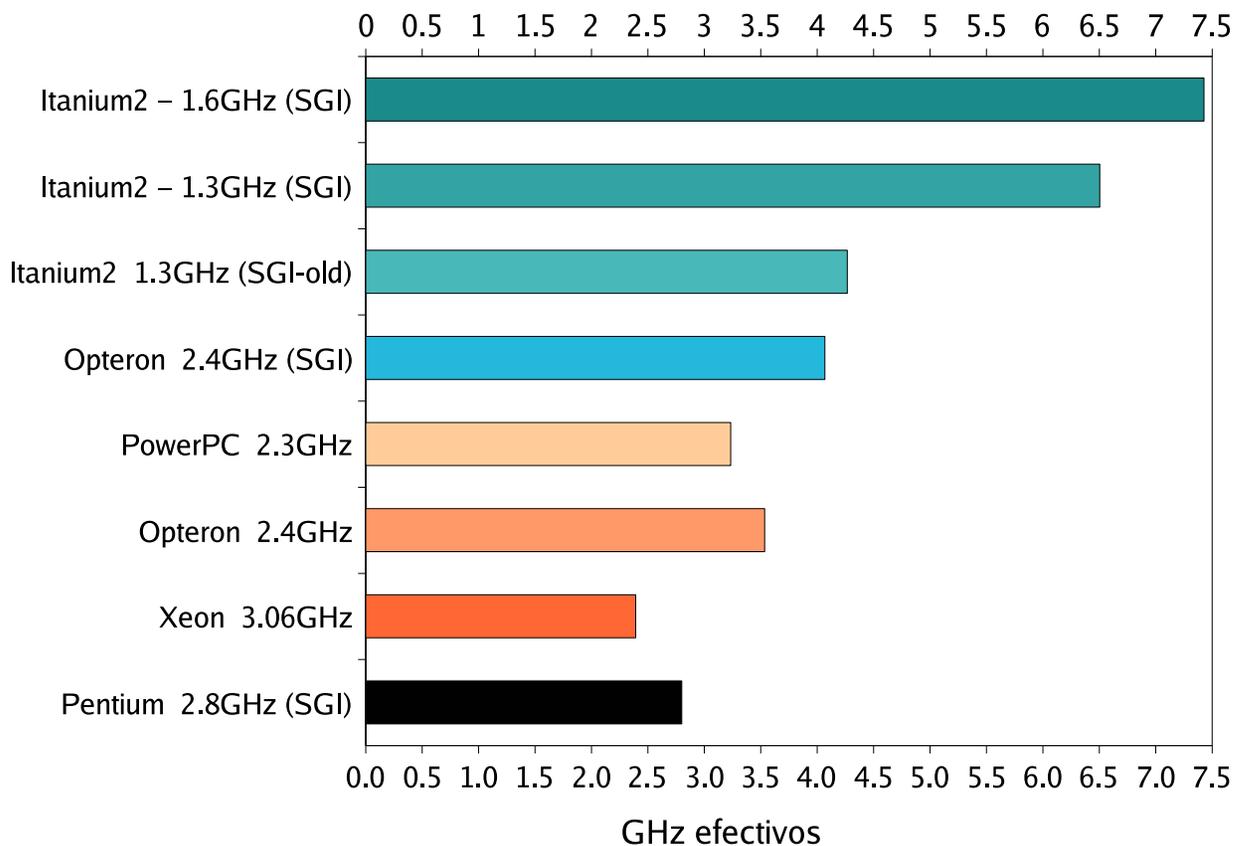
I. Silanes más info: <http://www.sc.ehu.es/powgep99/dcytp/teoricos/staff/inaki/?id=gaussian>

- Introducción
- SGI-IZO
- Cálculo Científico
- Arina**
 - Características
 - Otras características
 - Galeria
 - Rendimiento
- SFS: Shared File System
- Pendulo
- Gestión del Servicio
- Gestión del Software
- Otras Tareas
- Estadísticas
- Conclusiones



Rendimiento

Benchmark de VASP



Arina y Maiz son superiores a otros ordenadores.

- Introducción
- SGI-IZO
- Cálculo Científico
- Arina**
 - Características
 - Otras características
 - Galería
 - **Rendimiento**
- SFS: Shared File System
- Pendulo
- Gestión del Servicio
- Gestión del Software
- Otras Tareas
- Estadísticas
- Conclusiones



Rendimiento

Itanium vs. Opteron

- Itanium
- Opteron

Introducción

SGI-IZO

Cálculo Científico

Arina

- Características
- Otras características
- Galería
- Rendimiento

SFS: Shared File System

Pendolo

Gestión del Servicio

Gestión del Software

Otras Tareas

Estadísticas

Conclusiones



Itanium vs. Opteron

■ Itanium

- ◆ Baja frecuencia de reloj, pero realiza 4 operaciones en coma flotante por ciclo.
- ◆ Mucha cache (3 y 6 MB de L3).
- ◆ EPIC, Predication, speculation, prediction.
- ◆ **Bajo rendimiento en operaciones con enteros (2 operaciones por ciclo).**
- ◆ **Bajo rendimiento en PHP y java.**
- ◆ **Alto consumo eléctrico.**

■ Opteron

Introducción

SGI-IZO

Cálculo Científico

Arina

- Características
- Otras características
- Galeria
- Rendimiento

SFS: Shared File System

Pendulo

Gestión del Servicio

Gestión del Software

Otras Tareas

Estadísticas

Conclusiones



Rendimiento

Itanium vs. Opteron

- Itanium
- Opteron
 - ◆ Alta frecuencia de reloj.
 - ◆ Ejecución directa de aplicaciones de 32 bits (java y php).
 - ◆ Mucha cache (2MB de L2).
 - ◆ Controladora de memoria integrada.
 - ◆ **Realiza 2 operaciones en coma flotante por ciclo.**

Introducción

SGI-IZO

Cálculo Científico

Arina

- Características
- Otras características
- Galería
- Rendimiento

SFS: Shared File System

Pendulo

Gestión del Servicio

Gestión del Software

Otras Tareas

Estadísticas

Conclusiones



Introducción

SGI-IZO

Cálculo Científico

Arina

SFS: Shared File System

- SFS system
- SFS system
- SFS system

Pendolo

Gestión del Servicio

Gestión del Software

Otras Tareas

Estadísticas

Conclusiones

SFS: Shared File System



SFS system

Introducción

SGI-IZO

Cálculo Científico

Arina

SFS: Shared File System

- SFS system
- SFS system
- SFS system

Pendulo

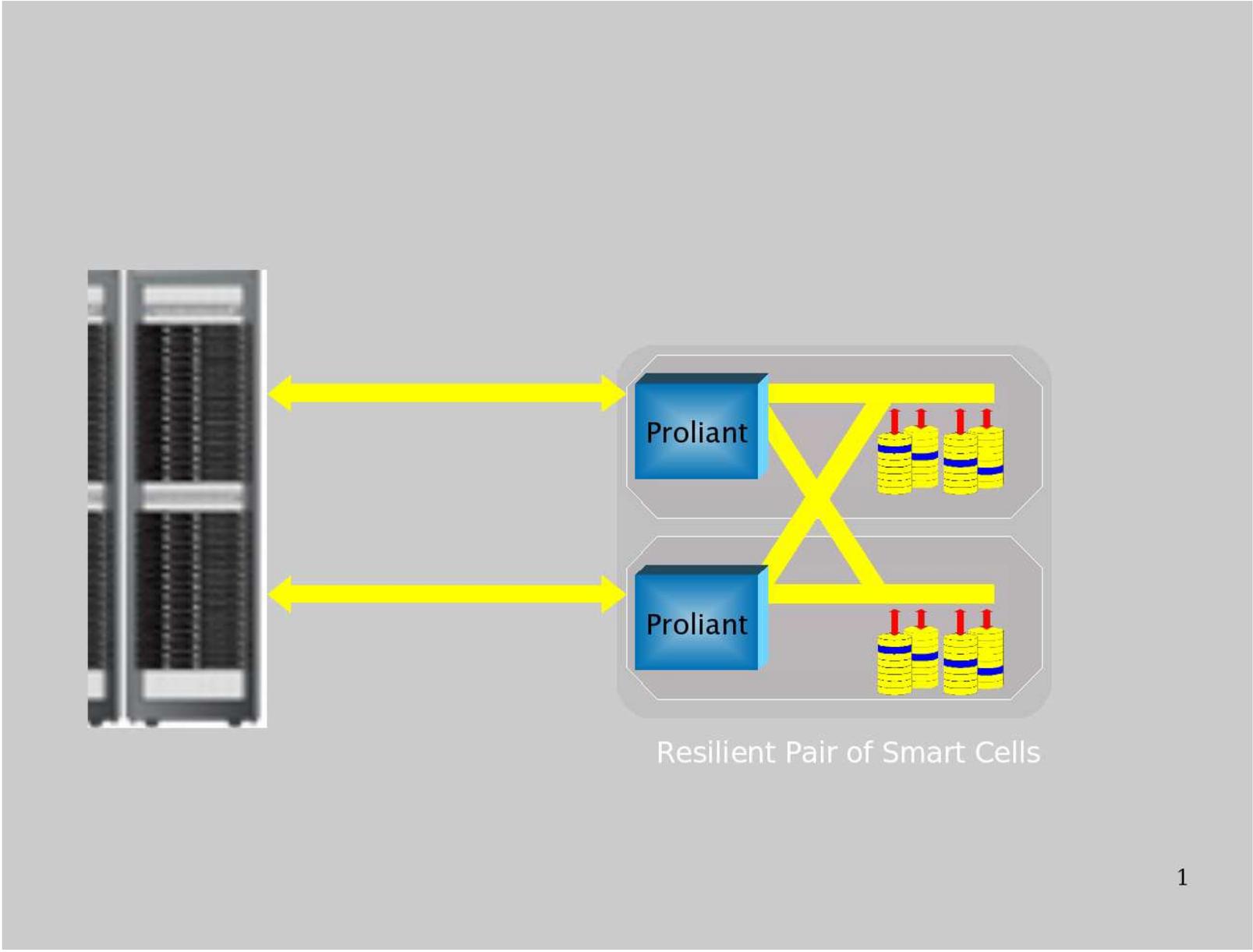
Gestión del Servicio

Gestión del Software

Otras Tareas

Estadísticas

Conclusiones





SFS system

Introducción

SGI-IZO

Cálculo Científico

Arina

SFS: Shared File System

● SFS system

● SFS system

● SFS system

Pendulo

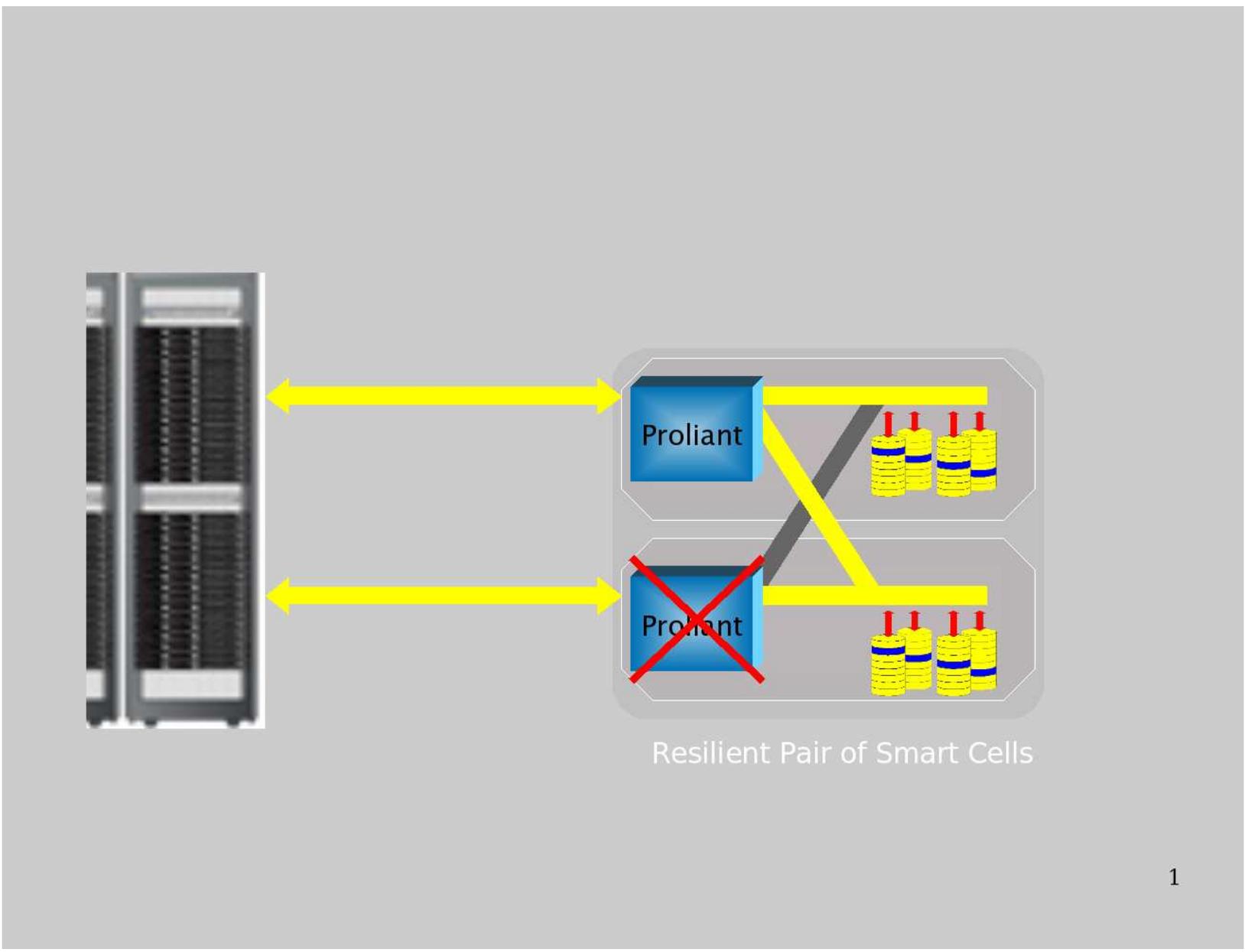
Gestión del Servicio

Gestión del Software

Otras Tareas

Estadísticas

Conclusiones



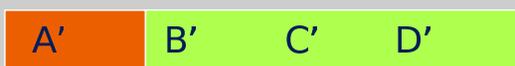
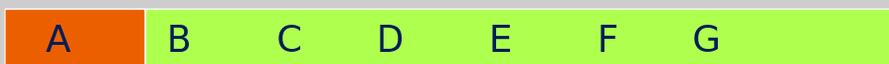


SFS system

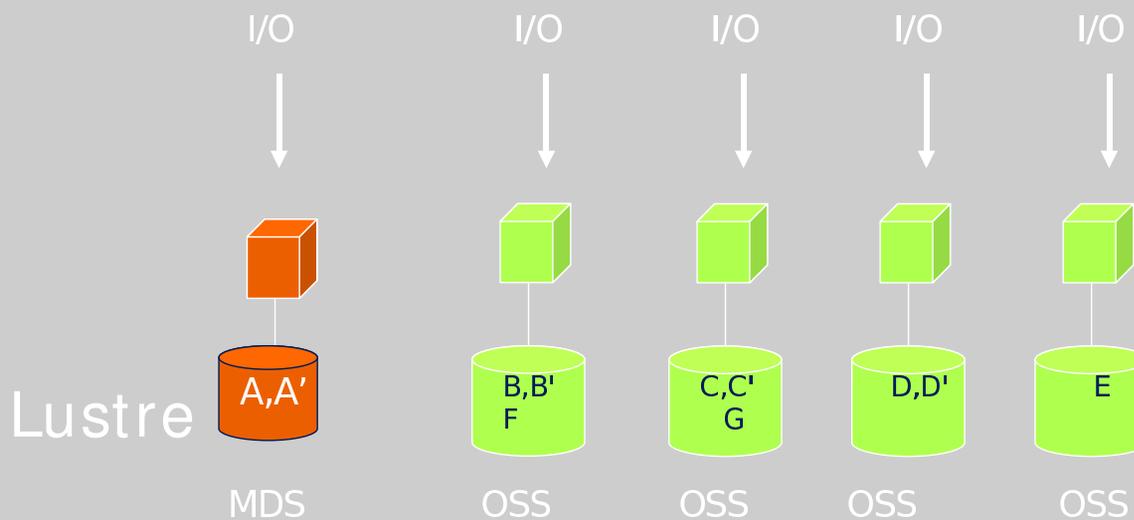
File

Metadata

data



Data is striped across several servers



- Introducción
- SGI-IZO
- Cálculo Científico
- Arina
- SFS: Shared File System
 - SFS system
 - SFS system
 - SFS system
- Pendulo
- Gestión del Servicio
- Gestión del Software
- Otras Tareas
- Estadísticas
- Conclusiones



Introducción

SGI-IZO

Cálculo Científico

Arina

SFS: Shared File System

Pendulo

- Aulas infrautilizadas
- Proyecto Pendulo
- Funcionamiento
- Perspectiva de futuro

Gestión del Servicio

Gestión del Software

Otras Tareas

Estadísticas

Conclusiones

Pendulo

Aulas infrautilizadas

Aulas docentes y de libre uso: horario reducido.



Ordenadores apagados fuera del horario de apertura al público.

Introducción

SGI-IZO

Cálculo Científico

Arina

SFS: Shared File System

Pendolo

● Aulas infrautilizadas

● Proyecto Pendolo

● Funcionamiento

● Perspectiva de futuro

Gestión del Servicio

Gestión del Software

Otras Tareas

Estadísticas

Conclusiones



¿Qué es Péndulo?

GRID de cálculo científico que pretende utilizar los ordenadores de las aulas docentes informáticas durante el horario en que dichas aulas permanecen inactivas.

Aula de Campus y aula de Cursos de la Biblioteca Central.



Introducción

SGI-IZO

Cálculo Científico

Arina

SFS: Shared File System

Péndulo

● Aulas infrautilizadas

● Proyecto Pendulo

● Funcionamiento

● Perspectiva de futuro

Gestión del Servicio

Gestión del Software

Otras Tareas

Estadísticas

Conclusiones



Funcionamiento

Funcionamiento dual Windows - Linux:

- **Diurno:** S.O. Windows. Durante el horario de apertura para los alumnos.

Hora de cierre del aula.



Reinicio automático en Linux.

- **Nocturno:** S.O. Linux. Funcionamiento del cluster.

Horario próximo a la apertura de la sala.



Reinicio automático en Windows.

Introducción

SGI-IZO

Cálculo Científico

Arina

SFS: Shared File System

Pendolo

● Aulas infrautilizadas

● Proyecto Pendolo

● **Funcionamiento**

● Perspectiva de futuro

Gestión del Servicio

Gestión del Software

Otras Tareas

Estadísticas

Conclusiones



Perspectiva de futuro

- Hardware común más potente.
Procesadores de doble núcleo.
Redes de conexión más rápidas.
- Implantación de tecnologías GRID en la universidad.
- Participación en GRIDs internacionales.

Introducción

SGI-IZO

Cálculo Científico

Arina

SFS: Shared File System

Pendolo

● Aulas infrautilizadas

● Proyecto Pendulo

● Funcionamiento

● **Perspectiva de futuro**

Gestión del Servicio

Gestión del Software

Otras Tareas

Estadísticas

Conclusiones



[Introducción](#)

[SGI-IZO](#)

[Cálculo Científico](#)

[Arina](#)

[SFS: Shared File System](#)

[Pendulo](#)

Gestión del Servicio

- Políticas
- Gestión del Servicio
- Administración de recursos

[Gestión del Software](#)

[Otras Tareas](#)

[Estadísticas](#)

[Conclusiones](#)

Gestión del Servicio



Introducción

SGI-IZO

Cálculo Científico

Arina

SFS: Shared File System

Pendolo

Gestión del Servicio

● Pólíticas

● Gestión del Servicio

● Administración de recursos

Gestión del Software

Otras Tareas

Estadísticas

Conclusiones

Política de un uso racional.



Reparto del tiempo de cálculo en base a méritos científicos.

Política de un proceso o hilo en cada procesador.



Sistema de colas PBSpro.



Gestión del Servicio

- Cualquier investigador de la UPV/EHU puede solicitar tiempo de cálculo dando de alta un proyecto a través de la página web del servicio (<http://www.ehu.es/SGI>).

Introducción

SGI-IZO

Cálculo Científico

Arina

SFS: Shared File System

Pendolo

Gestión del Servicio

● Políticas

● Gestión del Servicio

● Administración de recursos

Gestión del Software

Otras Tareas

Estadísticas

Conclusiones



Gestión del Servicio

- Cualquier investigador de la UPV/EHU puede solicitar tiempo de cálculo dando de alta un proyecto a través de la página web del servicio (<http://www.ehu.es/SGI>).
- Este proyecto pasa por un panel evaluador y se le concede un número de horas de cálculo de acuerdo al resultado de la evaluación.

Introducción

SGI-IZO

Cálculo Científico

Arina

SFS: Shared File System

Pendulo

Gestión del Servicio

● Políticas

● Gestión del Servicio

● Administración de recursos

Gestión del Software

Otras Tareas

Estadísticas

Conclusiones



Gestión del Servicio

Introducción

SGI-IZO

Cálculo Científico

Arina

SFS: Shared File System

Pendolo

Gestión del Servicio

● Políticas

● **Gestión del Servicio**

● Administración de recursos

Gestión del Software

Otras Tareas

Estadísticas

Conclusiones

- Cualquier investigador de la UPV/EHU puede solicitar tiempo de cálculo dando de alta un proyecto a través de la página web del servicio (<http://www.ehu.es/SGI>).
- Este proyecto pasa por un panel evaluador y se le concede un número de horas de cálculo de acuerdo al resultado de la evaluación.
- Investigadores/Empresas externos deberán ponerse en contacto con los técnicos.



Gestión del Servicio

Introducción

SGI-IZO

Cálculo Científico

Arina

SFS: Shared File System

Pendolo

Gestión del Servicio

● Políticas

● Gestión del Servicio

● Administración de recursos

Gestión del Software

Otras Tareas

Estadísticas

Conclusiones

- Cualquier investigador de la UPV/EHU puede solicitar tiempo de cálculo dando de alta un proyecto a través de la página web del servicio (<http://www.ehu.es/SGI>).
- Este proyecto pasa por un panel evaluador y se le concede un número de horas de cálculo de acuerdo al resultado de la evaluación.
- Investigadores/Empresas externos deberán ponerse en contacto con los técnicos.
- El uso de CPU se factura a 6 centimos/hora a los investigadores adscritos a la UPV/EHU.



Gestión del Servicio

Introducción

SGI-IZO

Cálculo Científico

Arina

SFS: Shared File System

Pendolo

Gestión del Servicio

● Políticas

● Gestión del Servicio

● Administración de recursos

Gestión del Software

Otras Tareas

Estadísticas

Conclusiones

- Cualquier investigador de la UPV/EHU puede solicitar tiempo de cálculo dando de alta un proyecto a través de la página web del servicio (<http://www.ehu.es/SGI>).
- Este proyecto pasa por un panel evaluador y se le concede un número de horas de cálculo de acuerdo al resultado de la evaluación.
- Investigadores/Empresas externos deberán ponerse en contacto con los técnicos.
- El uso de CPU se factura a 6 centimos/hora a los investigadores adscritos a la UPV/EHU.
- A las empresas externas se les aplican tarifas dependiendo de los requisitos que necesiten.



Gestión del Servicio

Introducción

SGI-IZO

Cálculo Científico

Arina

SFS: Shared File System

Pendolo

Gestión del Servicio

● Políticas

● Gestión del Servicio

● Administración de recursos

Gestión del Software

Otras Tareas

Estadísticas

Conclusiones

- Cualquier investigador de la UPV/EHU puede solicitar tiempo de cálculo dando de alta un proyecto a través de la página web del servicio (<http://www.ehu.es/SGI>).
- Este proyecto pasa por un panel evaluador y se le concede un número de horas de cálculo de acuerdo al resultado de la evaluación.
- Investigadores/Empresas externos deberán ponerse en contacto con los técnicos.
- El uso de CPU se factura a 6 centimos/hora a los investigadores adscritos a la UPV/EHU.
- A las empresas externas se les aplican tarifas dependiendo de los requisitos que necesiten.



El sistema de colas permite gestionar de forma ordenada y automatizada los trabajos que son enviados a ejecución.

Sistema de Colas PBS

- Límites por servidor.
- Límites por nodo.
- Límites por usuario.
- Límites por grupo.
- Límites por cola.
- Prioridades por el reparto del tiempo de cálculo.
- Prioridades de usuario y colas según uso.
- *Parámetros tratados dinámicamente.*

Introducción

SGI-IZO

Cálculo Científico

Arina

SFS: Shared File System

Pendulo

Gestión del Servicio

● Políticas

● Gestión del Servicio

● Administración de recursos

Gestión del Software

Otras Tareas

Estadísticas

Conclusiones

Buenas prácticas de los usuarios

Se ha optimizado preprocesando los trabajos.

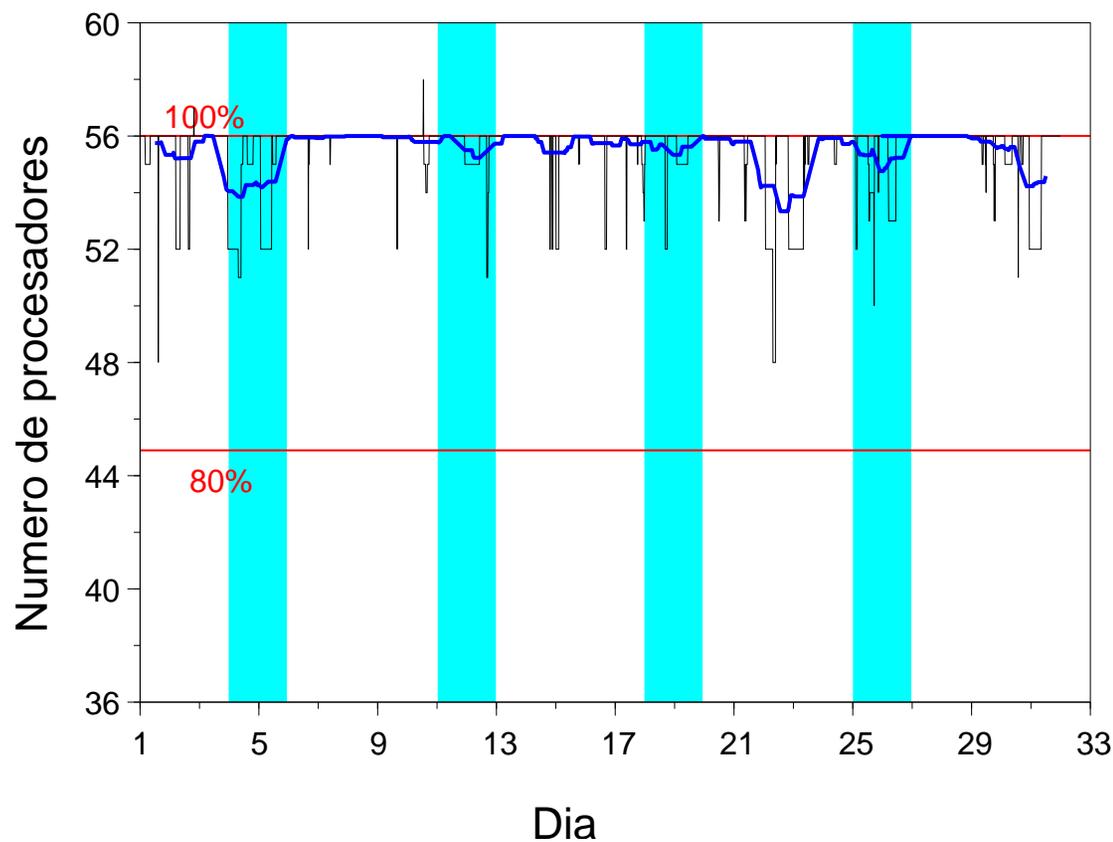


Figura 7: Rendimiento de Arina en Marzo de 2006.



Monitorización y control de los recursos

- Introducción
- SGI-IZO
- Cálculo Científico
- Arina
- SFS: Shared File System
- Pendolo
- Gestión del Servicio**
 - Políticas
 - Gestión del Servicio
 - Administración de recursos
- Gestión del Software
- Otras Tareas
- Estadísticas
- Conclusiones

Monitorización de Arina - Mozilla Firefox

File Edit View Go Bookmarks Tools Help

http://www.ehu.es/SGI/monitorweb/principal.php?view=week&d=16&m=1&a=2007

Monitorización de Arina

Ayuda Euskara Castellano English

Ver mes 16 Enero 2007 Ver

Numero de procesadores

Dia

Referencias
Numero de procesadores
Promedio de 24 Horas

100%
80%

Última actualización:
16/Enero/2007 13:42

| Información actual | |
|-----------------------|-----|
| Número de CPUs en uso | 120 |
| Número de CPUs libres | 8 |
| Número de CPUs total | 128 |

Diciembre 2006

| | | | | | | |
|----|----|----|----|----|----|----|
| L | M | M | J | V | S | D |
| | | | 1 | 2 | 3 | |
| 4 | 5 | 6 | 7 | 8 | 9 | 10 |
| 11 | 12 | 13 | 14 | 15 | 16 | 17 |
| 18 | 19 | 20 | 21 | 22 | 23 | 24 |
| 25 | 26 | 27 | 28 | 29 | 30 | 31 |

Enero 2007

| | | | | | | |
|----|----|----|----|----|----|----|
| L | M | M | J | V | S | D |
| 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | 7 |
| 8 | 9 | 10 | 11 | 12 | 13 | 14 |
| 15 | 16 | 17 | 18 | 19 | 20 | 21 |
| 22 | 23 | 24 | 25 | 26 | 27 | 28 |
| 29 | 30 | 31 | | | | |

Febrero 2007

| | | | | | | |
|----|----|----|----|----|----|----|
| L | M | M | J | V | S | D |
| | | | 1 | 2 | 3 | 4 |
| 5 | 6 | 7 | 8 | 9 | 10 | 11 |
| 12 | 13 | 14 | 15 | 16 | 17 | 18 |
| 19 | 20 | 21 | 22 | 23 | 24 | 25 |
| 26 | 27 | 28 | | | | |

Done



Introducción

SGI-IZO

Cálculo Científico

Arina

SFS: Shared File System

Pendolo

Gestión del Servicio

Gestión del Software

- Problemática actual
- Software accesible
- Software adquirido por el SGI

Otras Tareas

Estadísticas

Conclusiones

Gestión del Software



Problemática actual

Introducción

SGI-IZO

Cálculo Científico

Arina

SFS: Shared File System

Pendolo

Gestión del Servicio

Gestión del Software

● Problemática actual

● Software accesible

● Software adquirido por el SGI

Otras Tareas

Estadísticas

Conclusiones

Gestión de software propietario

- La mayoría del software de cálculo actual es propietario de los grupos de investigación.
- Dependiendo de las licencias, no puede ser usado por otros grupos diferentes de la UPV/EHU.
- Duplicidad de licencias.

Tras una solicitud y evaluación el SGI comprará software para que pueda ser accesible a todos los investigadores de la universidad.



Software accesible

Se puede solicitar la instalación o compilación de software.

- Software de libre distribución.
- Cada usuario emplea sus propios programas.
- Software corporativo adquirido por la universidad.
- Software corporativo adquirido por el SGI-IZO.

Introducción

SGI-IZO

Cálculo Científico

Arina

SFS: Shared File System

Pendolo

Gestión del Servicio

Gestión del Software

● Problemática actual

● **Software accesible**

● Software adquirido por el SGI

Otras Tareas

Estadísticas

Conclusiones



Software adquirido por el SGI

Introducción

SGI-IZO

Cálculo Científico

Arina

SFS: Shared File System

Pendulo

Gestión del Servicio

Gestión del Software

● Problemática actual

● Software accesible

● Software adquirido por el SGI

Otras Tareas

Estadísticas

Conclusiones

CFX

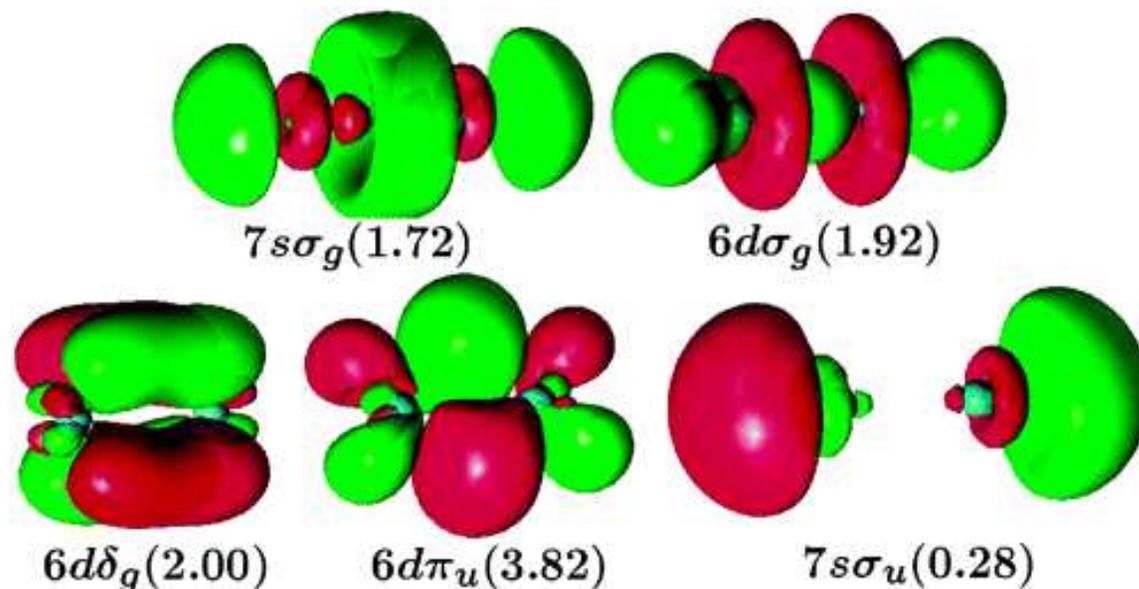
- Programa que realiza cálculos de Dinaámica de Fluidos, procesos con fluidos, flujos, transferencias de calor y/o reacciones químicas . . .
- Simulación de difusión de gases en la atmosfera, evolución de incendios, aerodinámica de diferentes máquinas . . .



- Introducción
- SGI-IZO
- Cálculo Científico
- Arina
- SFS: Shared File System
- Pendolo
- Gestión del Servicio
- Gestión del Software**
 - Problemática actual
 - Software accesible
 - **Software adquirido por el SGI**
- Otras Tareas
- Estadísticas
- Conclusiones

MOLCAS

- Programa que realiza cálculos muy precisos de la estructura electrónica de moléculas (MCSCF, CASPT2, ...).



Molecular orbitals forming the quintuple bond in Pa₂.



Software adquirido por el SGI

Introducción

SGI-IZO

Cálculo Científico

Arina

SFS: Shared File System

Pendolo

Gestión del Servicio

Gestión del Software

● Problemática actual

● Software accesible

● Software adquirido por el SGI

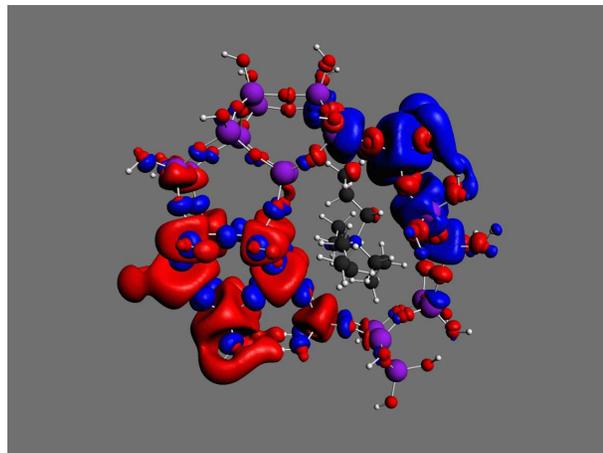
Otras Tareas

Estadísticas

Conclusiones

ADF

- Programa que realiza cálculos de la estructura electrónica de moléculas utilizando DFT con funciones de Slater
- Cálcula propiedades espectroscopicas de cualquier molécula.
- Sobresale en los cálculos que incluyen metales pesados y/o metales de transición.



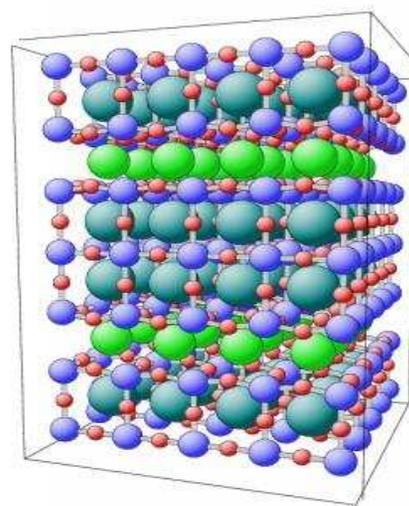


Software adquirido por el SGI

- Introducción
- SGI-IZO
- Cálculo Científico
- Arina
- SFS: Shared File System
- Pendolo
- Gestión del Servicio
- Gestión del Software**
 - Problemática actual
 - Software accesible
 - **Software adquirido por el SGI**
- Otras Tareas
- Estadísticas
- Conclusiones

WIEN2K

- Programa que realiza cálculos de la estructura electrónica de sólidos utilizando DFT, all-electron,
- Predice las energías de banda, geometrías en equilibrio.
- Emisión en Rayos X, espectros de absorción . . .

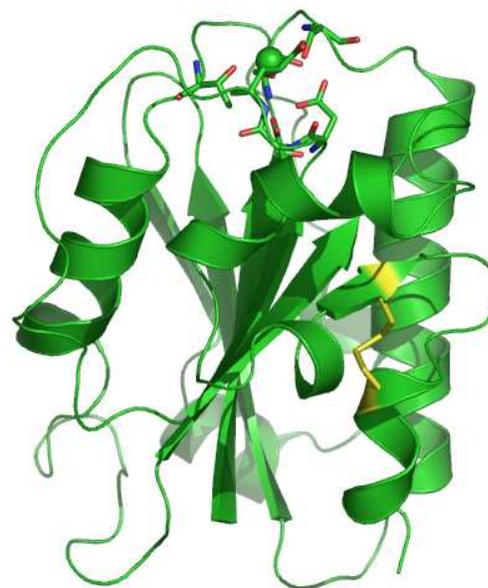




- Introducción
- SGI-IZO
- Cálculo Científico
- Arina
- SFS: Shared File System
- Pendolo
- Gestión del Servicio
- Gestión del Software**
 - Problemática actual
 - Software accesible
 - **Software adquirido por el SGI**
- Otras Tareas
- Estadísticas
- Conclusiones

QSite

- Programa que realiza cálculos QM/MM combina Jaguar y el campo de fuerza OPLS-AA para realizar diferentes estudios sobre interacciones entre proteínas y ligandos.



Integrina Ifa1 (picture provided by Eider Sansebastián)



Software adquirido por el SGI

Introducción

SGI-IZO

Cálculo Científico

Arina

SFS: Shared File System

Pendolo

Gestión del Servicio

Gestión del Software

● Problemática actual

● Software accesible

● Software adquirido por el SGI

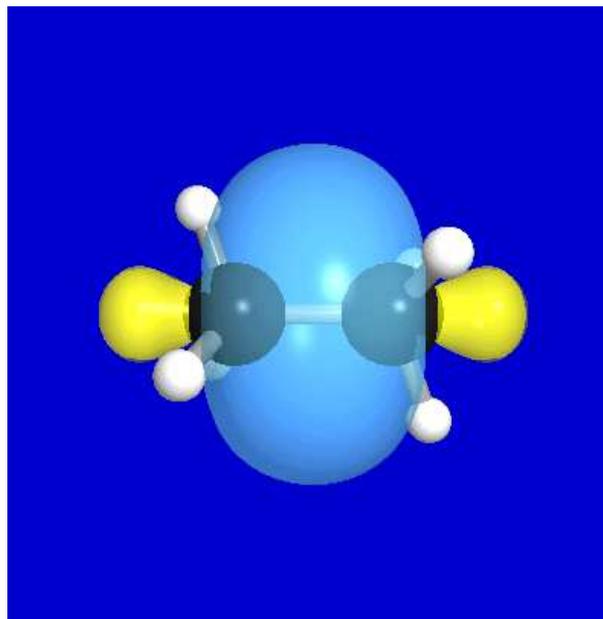
Otras Tareas

Estadísticas

Conclusiones

NBO5 y NBOView

- Se integra con la mayoría de los paquetes *Ab-Initio* (G03, NWchem, GAMESS...)
- Realizar análisis de los Orbitales Naturales que permiten comprender mejor los enlaces moleculares.





Introducción

SGI-IZO

Cálculo Científico

Arina

SFS: Shared File System

Pendulo

Gestión del Servicio

Gestión del Software

Otras Tareas

● Otras Tareas

Estadísticas

Conclusiones

Otras Tareas



Introducción

SGI-IZO

Cálculo Científico

Arina

SFS: Shared File System

Pendulo

Gestión del Servicio

Gestión del Software

Otras Tareas

● Otras Tareas

Estadísticas

Conclusiones

Formación Usuarios

- Se utilizan diferentes herramientas para la formación de los usuarios en el correcto uso de los recursos computacionales:
 - ◆ Página Web del servicio <http://www.ehu.es/sgi/>
 - ◆ Lista de distribución de Arina.
 - ◆ Email para aclarar dudas y/o corregir errores.
 - ◆ Wikipedia.
- Cursos 2007
 - ◆ Febrero se prevé impartir un curso de introducción a Linux enfocado al correcto uso de los recursos del SGI.



Introducción

SGI-IZO

Cálculo Científico

Arina

SFS: Shared File System

Pendolo

Gestión del Servicio

Gestión del Software

Otras Tareas

● Otras Tareas

Estadísticas

Conclusiones

Formación Usuarios

- Se utilizan diferentes herramientas para la formación de los usuarios en el correcto uso de los recursos computacionales:
 - ◆ Página Web del servicio <http://www.ehu.es/sgi/>
 - ◆ Lista de distribución de Arina.
 - ◆ Email para aclarar dudas y/o corregir errores.
 - ◆ Wikipedia.
- Cursos 2007
 - ◆ Febrero se prevé impartir un curso de introducción a `Linux` enfocado al correcto uso de los recursos del SGI.
 - ◆ Febrero Descripción y uso de la nueva configuración.



Introducción

SGI-IZO

Cálculo Científico

Arina

SFS: Shared File System

Pendolo

Gestión del Servicio

Gestión del Software

Otras Tareas

● Otras Tareas

Estadísticas

Conclusiones

Formación Usuarios

- Se utilizan diferentes herramientas para la formación de los usuarios en el correcto uso de los recursos computacionales:
 - ◆ Página Web del servicio <http://www.ehu.es/sgi/>
 - ◆ Lista de distribución de Arina.
 - ◆ Email para aclarar dudas y/o corregir errores.
 - ◆ Wikipedia.
- Cursos 2007
 - ◆ Febrero se prevé impartir un curso de introducción a `Linux` enfocado al correcto uso de los recursos del SGI.
 - ◆ Febrero Descripción y uso de la nueva configuración.
 - ◆ Abril Curso Introdutorio a MOLCAS.



Introducción

SGI-IZO

Cálculo Científico

Arina

SFS: Shared File System

Pendulo

Gestión del Servicio

Gestión del Software

Otras Tareas

● Otras Tareas

Estadísticas

Conclusiones

Formación Usuarios

- Se utilizan diferentes herramientas para la formación de los usuarios en el correcto uso de los recursos computacionales:
 - ◆ Página Web del servicio <http://www.ehu.es/sgi/>
 - ◆ Lista de distribución de Arina.
 - ◆ Email para aclarar dudas y/o corregir errores.
 - ◆ Wikipedia.
- Cursos 2007
 - ◆ Febrero se prevé impartir un curso de introducción a `Linux` enfocado al correcto uso de los recursos del SGI.
 - ◆ Febrero Descripción y uso de la nueva configuración.
 - ◆ Abril Curso Introdutorio a MOLCAS.
 - ◆ Curso introductorio a CFX.



Introducción

SGI-IZO

Cálculo Científico

Arina

SFS: Shared File System

Pendolo

Gestión del Servicio

Gestión del Software

Otras Tareas

● Otras Tareas

Estadísticas

Conclusiones

Formación Usuarios

- Se utilizan diferentes herramientas para la formación de los usuarios en el correcto uso de los recursos computacionales:
 - ◆ Página Web del servicio <http://www.ehu.es/sgi/>
 - ◆ Lista de distribución de Arina.
 - ◆ Email para aclarar dudas y/o corregir errores.
 - ◆ Wikipedia.
- Cursos 2007
 - ◆ Febrero se prevé impartir un curso de introducción a `Linux` enfocado al correcto uso de los recursos del SGI.
 - ◆ Febrero Descripción y uso de la nueva configuración.
 - ◆ Abril Curso Introdutorio a MOLCAS.
 - ◆ Curso introductorio a CFX.
 - ◆ Curso de programación en paralelo.



[Introducción](#)

[SGI-IZO](#)

[Cálculo Científico](#)

[Arina](#)

[SFS: Shared File System](#)

[Pendulo](#)

[Gestión del Servicio](#)

[Gestión del Software](#)

[Otras Tareas](#)

Estadísticas

● Usuarios 2006

● Publicaciones

[Conclusiones](#)

Estadísticas



Usuarios 2006

Introducción

SGI-IZO

Cálculo Científico

Arina

SFS: Shared File System

Pendolo

Gestión del Servicio

Gestión del Software

Otras Tareas

Estadísticas

● Usuarios 2006

● Publicaciones

Conclusiones

- 2006 98 % de utilización entre Enero-Octubre.
- 57 usuarios realizaron cálculos en Arina.
- 8 usuarios consumieron más de 1000 días de cálculo, y 30 más de 100.
- Mayoritariamente Químicos y Físicos, también hay informáticos, ingenieros, biólogos . . .
- 134 cuentas y 27 proyectos han sido dado de alta para el 2007.



Publicaciones

Introducción

SGI-IZO

Cálculo Científico

Arina

SFS: Shared File System

Pendolo

Gestión del Servicio

Gestión del Software

Otras Tareas

Estadísticas

● Usuarios 2006

● Publicaciones

Conclusiones

- Hasta la fecha se han producido 27 artículos científicos, 2 DEA's y 2 tesis doctorales en los que se ha utilizado Arina.
- Una publicación 1500 días de cálculo.
- Estos artículos están recopilados en la página del servicio:
<http://www.ehu.es/sgi>



Publicaciones

Introducción

SGI-IZO

Cálculo Científico

Arina

SFS: Shared File System

Pendolo

Gestión del Servicio

Gestión del Software

Otras Tareas

Estadísticas

● Usuarios 2006

● Publicaciones

Conclusiones

| Grupo | Campo | Pub | Tesis | DEA | días/pub |
|-----------------------|--------|-----|-------|-----|----------|
| J. A. Lozano | Infor. | 1 | | | 1002 |
| J.M. Gutierrez-Zorri. | Quími. | 1 | | | 417 |
| J. A. Fernández | Quími. | 1 | | | 288 |
| C. Palomo | Quími. | 3 | | | 513 |
| X. López | Quími. | 7 | 1 | 1 | 1398 |
| J. M. Ugalde | Quími. | 8 | 1 | 1 | 1664 |
| F. Cossio | Quími. | 1 | | | 2672 |
| I. Juaristi | Física | 2 | | | 230 |
| A. Sánchez-Lavega | Física | 1 | | | 258 |
| A. Salazar | Física | 1 | | | 26 |
| M. Perez Mato | Física | 1 | | | 1750 |



Introducción

SGI-IZO

Cálculo Científico

Arina

SFS: Shared File System

Pendolo

Gestión del Servicio

Gestión del Software

Otras Tareas

Estadísticas

Conclusiones

● Conclusiones

Conclusiones



Conclusiones

Introducción

SGI-IZO

Cálculo Científico

Arina

SFS: Shared File System

Pendolo

Gestión del Servicio

Gestión del Software

Otras Tareas

Estadísticas

Conclusiones

● Conclusiones

- Existe un servicio para dar apoyo de los investigadores.
- Se ha dotado de recursos computacionales y humanos al servicio.

- Se ha creado un servicio que ofrece, además de alto poder computacional, recursos humanos a los investigadores de la UPV/EHU y está también a disposición de otros institutos públicos y empresas.



Más Información

<http://www.ehu.es/sgi>

Eduardo Ogando (Dr. Física)
CIDIR Bizakia
Tel 946015022

Txema Mercero (Dr. Química)
Kimika Fakultatea (Donostia)
Tel 943015312

Gracias por su amable atención.

Introducción

SIG-IZO

Cálculo Científico

Arina

SFS: Shared File System

Pendulo

Gestión del Servicio

Gestión del Software

Otras Tareas

Estadísticas

Conclusiones

● Conclusiones