

Computación de Altas Prestaciones

Eduardo Grosclaude

Facultad de Informática, Universidad Nacional del Comahue

Buenos Aires 1400, Neuquén, Tel 0299 - 4490300

oso@uncoma.edu.ar

Resumen

El proyecto de investigación que presentamos se ocupa de varios aspectos relativos a Computación de Altas Prestaciones (High Performance Computing, HPC). Se propone brindar un marco para la formación de postgrado de sus integrantes, insertar temáticas asociadas a HPC en el currículum de las carreras de grado de la FAI, y contribuir a formar profesionales en HPC para atender un área vacante en el medio regional. La temática principal abordada por el proyecto son los clusters híbridos, donde los diferentes nodos están conectados por una red pero a su vez cada nodo dispone de múltiples recursos de cómputo.

1. Contexto

El proyecto Computación de Altas Prestaciones se forma en Enero de 2010, como iniciativa del Departamento de Ingeniería de Computadoras de la Facultad de Informática (FAI), Universidad Nacional del Comahue. El objetivo general del proyecto es adquirir conocimientos para el diseño, desarrollo, gestión y mejora de las tecnologías de hardware y software involucradas en la Computación de Altas Prestaciones (High Performance Computing, HPC) y sus aplicaciones en Ciencia e Ingeniería Computacional.

2. Introducción

Un gran problema transversal de las Ciencias e Ingenierías Computacionales es la aplicación eficiente de modernas herramientas de cómputo paralelo y distribuido. La respuesta a este problema transversal está condensada en

el concepto de Computación de Altas Prestaciones, que abarca todos aquellos principios, métodos y técnicas que permiten abordar problemas con estructuras de cómputo complejas y de altos requerimientos. La resolución de estos problemas involucra conjuntos masivos de datos, una gran cantidad de variables y complejos procesos de cálculo.

Estos métodos y técnicas exigen la utilización de recursos de computación que hasta hoy eran excepcionales. Ejemplos de estos recursos son, por un lado, las supercomputadoras, y por otro, la colaboración de una gran cantidad de computadoras a través de las redes, en diferentes niveles de agregación como clusters, multiclustres y grid. En la actualidad, sin embargo, la industria de la tecnología incluye dispositivos de cómputo paralelo y distribuido en muchos de sus productos. Este proceso de cambio tecnológico implica la llegada de las arquitecturas distribuidas al dominio de los segmentos inferiores de mercado, ubicando los computadores paralelos en el rango de commodities, recursos fáciles de adquirir y mantener, y por lo tanto de uso masivo.

Tanto las arquitecturas de recursos más recientes, multicore y manycores, como las ya existentes de los supercomputadores, clusters y grid, pueden ser comprendidas y operadas bajo los principios de la computación paralela y distribuida, desarrollados hace tiempo, y que ahora cobran una nueva significación. No obstante, las mejores soluciones que van haciéndose factibles, no se logran únicamente con el recurso físico, entendido como el conjunto de dispositivos de cómputo y de comunicaciones, sino que son necesarios nuevos modelos y diseños de software para utilizar eficientemente dichos recursos. No existe al presente, y no parece factible, un mecanismo automático

para esta adaptación. La migración de las soluciones existentes a las nuevas plataformas requiere nuevos esfuerzos de programación, rediseño y reevaluación de metodologías. A veces será necesario adaptar un algoritmo, que resuelve un problema en forma de cómputo secuencial, para ser distribuido en varios procesadores; a veces, el algoritmo necesitará ser desarrollado desde el principio en forma paralela, o la solución completa ser reelaborada bajo otro esquema de pensamiento que contemple desde el inicio el dominio de los recursos.

2.1. Objetivos del proyecto

El proyecto contempla tanto aspectos de hardware como de programación de aplicaciones paralelas, con énfasis en la utilización de nuevas tecnologías, y se propone lograr una comprensión integral de las problemáticas involucradas en las soluciones de HPC. Para esto define los objetivos siguientes.

De formación de recursos humanos

- Formar recursos humanos en el tema de HPC prosiguiendo con los postgrados de los integrantes que están desarrollándose.
- Elaborar propuestas de tesis de postgrado de los integrantes en el tema de HPC.
- Insertar el conocimiento preliminar de la temática de HPC en líneas generales, en nuestras carreras de Ciencias de la Computación, aportando a la modificación de los contenidos de las materias regulares, y dictando instancias ocasionales como cursos y seminarios.

De producción científica

- Contribuir a abonar el desarrollo de las propuestas de tesis de postgrado mediante la producción de publicaciones con referato.

De transferencia

- Relevar los requerimientos de HPC de otros investigadores en Ciencias e Ingeniería Computacional y cooperar en su diagnóstico y/o resolución.

- Detectar necesidades relacionadas con HPC en otras entidades del ámbito regional y plantear correspondientes actividades de transferencia.

Otros

- Acercarse a la realidad del sistema científico nacional en términos de requerimientos y disponibilidades de HPC.
- Conocer las prestaciones, casos de aplicación y mejores prácticas de los productos de hardware y software para HPC que vayan haciéndose disponibles.
- Colaborar con proyectos del universo del Software Libre para el desarrollo o mejoramiento de sistemas relacionados con HPC.

3. Líneas de investigación

Entre los intereses del grupo pueden distinguirse tres ramas temáticas principales: memoria distribuida, memoria compartida, y manycores. Estas tres ramas convergen en una estrategia emergente que son los clusters híbridos, donde los diferentes nodos están conectados por una red pero a su vez cada nodo dispone de múltiples recursos de cómputo.

Los problemas que se presentan en estas arquitecturas son diversos y modifican la forma de programación y optimización de aplicaciones. Estas arquitecturas de cómputo híbridas son visualizadas como el escenario futuro más probable para los potenciales usuarios con quienes nos relacionamos.

3.1. Predicción de performance

Como parte de su relación con dichos usuarios, el grupo colabora con investigadores de la UNC que ejecutan sus aplicaciones científicas en clusters de computadoras. Estos usuarios buscan asesoramiento sobre cómo obtener performance para sus aplicaciones, y sobre cómo mantenerla al ampliar o renovar su equipamiento. A veces, las aplicaciones de estos usuarios provienen de terceros, y su código fuente es cerrado, por lo cual es difícil conocer la

naturaleza de estas aplicaciones para poder emitir una recomendación. Un subgrupo del proyecto se aboca entonces a obtener datos sobre el comportamiento de aplicaciones cerradas, con técnicas de instrumentación de caja negra. El objetivo de esta línea de investigación es definir una metodología simple y efectiva de predicción automática de performance de aplicaciones.

3.2. Manycores

Otra línea de investigación del proyecto aborda la programación sobre arquitecturas manycore, especialmente GPUs. El objetivo de esta línea es reunir conocimiento sobre las mejores prácticas de programación, localización de datos y distribución de procesos de cómputo en clusters híbridos, con nodos provistos de uno o más dispositivos manycore.

4. Resultados y Objetivos

4.1. Predicción de Performance

La actividad de esta línea está centrada en el objetivo de proveer apoyo a grupos de investigadores de la UNC que utilizan aplicaciones paralelas proporcionadas por terceros. Para contestar las principales preguntas sobre las mejores plataformas donde correr esas aplicaciones, en primer lugar se han realizado comparaciones de ejecución de un benchmark bien conocido[1] sobre diferentes escenarios, lo que ha permitido ofrecer algunas recomendaciones a priori sobre la elección de densidad de núcleos en un cluster híbrido[3].

Posteriormente se ha desarrollado una herramienta de software que interviene transparentemente la ejecución y permite obtener trazas o perfiles con prescindencia de los fuentes o módulos objeto de las aplicaciones. El usuario puede escribir las funciones de callback que serán llamadas antes y después de cada invocación a las rutinas de la biblioteca de paso de mensajes, obteniendo las estadísticas que se deseen[4]. La intención final es utilizar esta herramienta para obtener un perfil de ejecución de las aplicaciones que pueda extrapolarse para predecir su rendimiento en diferentes arquitecturas.

4.2. Manycores

Esta línea del proyecto considera la utilización, para propósitos generales, de los dispositivos de cómputo gráfico masivamente paralelos (GPUs). Estos dispositivos, derivados de la industria de la generación de gráficos 3D, como los que suelen verse en los juegos de acción, presentan gran cantidad de núcleos y una arquitectura de memoria sumamente compleja y particular. Para cierta gama de aplicaciones, las GPUs ofrecen posibilidades de performance realmente notables frente a su costo de adquisición.

El grupo tiene en preparación un laboratorio constituido por 16 nodos de doble núcleo equipados con una GPU por nodo. Las GPUs seleccionadas pertenecen, en iguales proporciones, a las dos principales casas fabricantes, NVIDIA y ATI. El objetivo de esta línea es conocer y comparar las diferentes arquitecturas y lenguajes de programación para estos dispositivos, con especial énfasis en OpenCL por su carácter de estándar abierto.

El laboratorio es compartido con cursos regulares de la Facultad, lo que por un lado limita el espacio de tiempo disponible para ensayos, y por otro lado implica que el software y ambiente de los equipos debe mantenerse sin modificación para las clases. Por estos motivos el grupo ha creado un dispositivo de software para asistir al arranque en frío o reset del hardware, selección de la imagen de arranque y provisión de la misma a través de la red. Todas estas operaciones pueden realizarse en forma remota gracias a dicho dispositivo. La meta para esta etapa es contar con un panel de control del cluster híbrido para poder arrancar o reiniciar los equipos desde cualquier lugar de la red, en horarios sin otra actividad, y poder restablecer la personalidad habitual de los equipos al momento de las clases.

5. Formación de Recursos Humanos

El proyecto contempla diversos aspectos de formación de recursos humanos. Por un lado, pretende conformar un marco propicio para la formación de postgrado de algunos de sus integrantes. Por otro lado, se propone insertar temáticas asociadas a HPC en el curriculum de las carreras de grado de la FAI. Finalmente, intenta lograr la ca-

pacidad de formar profesionales en HPC para solventar las necesidades de los potenciales usuarios en la región de influencia de la UNC. Estos potenciales usuarios comprenden tanto entidades gubernamentales, industriales o comerciales, como el conjunto de los propios investigadores de la UNC.

Uno de los objetivos del grupo es el acercamiento a la realidad nacional en materia de HPC. El aprovechamiento racional de las nuevas capacidades instaladas es clave para las Ciencias e Ingenierías Computacionales en la era de las e-Ciencias. Aunque las actuales políticas educativas y científicas de Estado buscan absorber parte de este impacto creando estructuras de recursos compartidas e integradas para todo el sistema científico nacional, el proceso de unión a este sistema no será trivial, y deberá recibir apoyo de personal especializado, que en nuestra Universidad es un área de vacancia. Por esto, aunque no se considera una línea de investigación, el proyecto promueve en general la capacitación de sus integrantes en administración y operación de recursos de cómputo compartidos, destinando tiempos a conocer mecanismos y herramientas de clustering y de integración de recursos.

Uno de los integrantes del proyecto se encuentra actualmente en vías de formular su tesis de Magister en Cómputo de Altas Prestaciones de la UNLP sobre la línea de investigación de Predicción de Performance, con los antecedentes y objetivos mencionados en este trabajo. En el sitio de acceso público [2] se mantiene el estado de avance del proyecto, información de contacto, publicaciones del equipo, noticias y otros datos. Se agradecerán contactos y sugerencias de la comunidad interesada.

Referencias

- [1] NASA advanced supercomputing (NAS) division home page. <http://www.nas.nasa.gov/>.
- [2] Proyecto Cómputo de Altas Prestaciones. <http://hpc.uncoma.edu.ar/>.
- [3] Eduardo Grosclaude, Claudio Zanellato, Javier Balladini, Rodolfo del Castillo, and Silvia Castro. Considering Core Density in Hybrid Clusters. In *39° Jornadas Argentinas de Informática e Investigación Operativa (JAIIO)*, HPC, volume 164, pages 3300–3312, CABA, Buenos Aires, Argentina, August 2010.
- [4] Eduardo Grosclaude, Claudio Zanellato, Javier Balladini, Rodolfo del Castillo, and Silvia Castro. Profiling MPI Applications with Mixed Instrumentation. In *Workshop de Procesamiento Distribuido y Paralelo - CACIC 2010: XVI Congreso Argentino de Ciencias de la Computación*, pages 132–141, Morón, Buenos Aires, Argentina, October 2010.