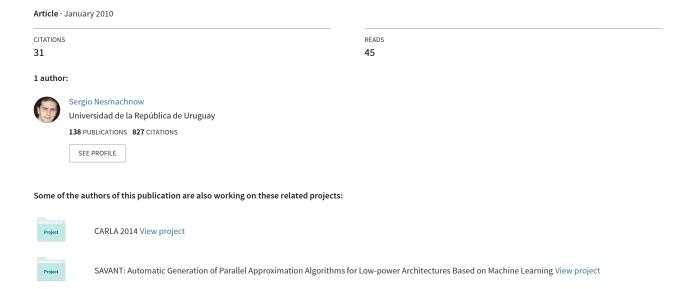
Computación científica de alto desempeño en la Facultad de Ingeniería, Universidad de la República



Computación científica de alto desempeño en la Facultad de Ingeniería, Universidad de la República

Las técnicas de computación científica de alto desempeño se especializan en la resolución eficiente de problemas complejos con altos requisitos de cómputo, frecuentes en diversas ramas de la ingeniería. Desde hace más de 20 años en la Facultad de Ingeniería de la Universidad de la República se ha trabajado en esta línea de investigación, que se ha potenciado recientemente por la adquisición de una infraestructura de cómputo de alto desempeño y la creación de un núcleo interdisciplinario que reúne a investigadores del área.

Computación científica de alto desempeño

Las técnicas de computación científica de alto desempeño se aplican para resolver eficientemente problemas complejos con altos requisitos de cómputo. Este tipo de problemas son frecuentes en la simulación numérica de problemas en diversos ámbitos de la ingeniería, en especial cuando se trabaja sobre escenarios realistas de grandes dimensiones.

Mediante la utilización simultánea de varios recursos de cómputo, las técnicas de computación de alto desempeño son capaces de trabajar cooperativamente para resolver problemas complejos aplicando métodos de descomposición que permiten trabajar en paralelo sobre subproblemas de menor complejidad que el original.

En la Facultad de Ingeniería de la Universidad de la República se ha trabajado en esta línea de investigación desde hace más de 20 años, enfocándose principalmente en la aplicación de las técnicas para la resolución eficiente de problemas en diversas ramas de la ingeniería.

Recientemente, la línea de investigación ha recibido un importante impulso a partir de dos iniciativas institucionales: la adquisición de una infraestructura de cómputo de alto desempeño y la creación de un núcleo interdisciplinario que reúne a investigadores del área.

Computación de alto desempeño



Mediante la utilización coordinada de múltiples recursos de cómputo, las técnicas de computación de alto desempeño son capaces de resolver problemas complejos en tiempos de cómputo razonable. Aplicando estrategias de división de datos (descomposición de dominio) o de paralelismo de control (descomposición funcional), permiten alcanzar el poder de cómputo necesario para la resolución eficiente de problemas que involucran el trabajo con complejos modelos matemáticos o grandes volúmenes de datos.

El cluster FING

El cluster FING es la infraestructura de cómputo de alto desempeño de la Facultad de Ingeniería. Fue adquirido en el segundo semestre de 2008 con fondos del llamado de Fortalecimiento de Equipamientos para la Investigación de la Comisión Sectorial de Investigación Científica de la Universidad de la República.

La arquitectura del cluster FING sigue el modelo de agregación de recursos de cómputo con capacidad de funcionamiento autónomo (*cluster*), potenciada por el uso de software específico que permite su integración para la resolución cooperativa de problemas complejos. Este mecanismo de diseño permite disponer de una infraestructura con un poder de cómputo razonable para nuestro ámbito nacional, mediante la integración de componentes individuales de bajo costo. La arquitectura de cluster permite lograr excelentes valores de escalabilidad para la resolución de problemas complejos y brinda la mejor relación costo/desempeño entre las arquitecturas de su tipo. Los clusters de computadores han dominado la escenas de los computadores de alto desempeño a nivel mundial desde mediados de la década de 1990, tal como puede comprobarse en la lista de los computadores más potentes del mundo en www.top500.org.

Sobre la infraestructura de alto desempeño instalada en Facultad de Ingeniería es posible utilizar técnicas de cómputo específicas para mejorar la eficiencia de la resolución de problemas complejos, especialmente aquellos que trabajan con complicados modelos matemáticos y/o numéricos, aquellos que requieren llevar a cabo simulaciones sobre escenarios realistas y aquellos que demandan el poder de cómputo necesario para procesar enormes volúmenes de datos.

Inicialmente integrado por 72 recursos de cómputo, en la actualidad el cluster FING cuenta con un total de **1088** recursos de cómputo y su pico teórico de desempeño alcanza los **1600 GFlops** (1.6×10¹² operaciones de punto flotante por segundo), convirtiéndose de esta forma en un recurso 500 veces más potente que un computador tradicional. Actualmente, el cluster FING es la infraestructura de alto desempeño con mayor poder de cómputo disponible en el país.



El cluster FING

La instalación del Cluster FING potenció el trabajo de proyectos interdisciplinarios de investigación en varias temáticas de la ingeniería, tales como la simulación de modelos hidráulicos y de corrientes, la física computacional, la resolución de problemas complejos de optimización combinatoria, la simulación atmosférica y los pronósticos climáticos, la simulación de sistemas de energía eléctrica, el análisis de la física de medios granulares con aplicación a la astronomía, la búsqueda en espacios topológicos de gran orden, los métodos de computación gráfica y la simulación de motores. Al disponer de la infraestructura de alto desempeño ha permitido mejorar decisivamente la capacidad de abordar en el ámbito nacional problemas complejos y ampliar el horizonte de los proyectos de investigación relacionados, permitiendo abordar instancias realistas de aplicación directa en la práctica científica e industrial.

Para el año 2011 está prevista la integración del Cluster FING en la infraestructura grid de alto desempeño en el marco del proyecto GISELA (Grid Initiatives for e-Science communities in Europe and Latin America), que permitirá proveer y disponer de un recurso de computación distribuida para la ejecución de aplicaciones con altos requisitos de cómputo. La infraestructura grid a implementar en el marco del proyecto GISELA estará distribuida en 18 países de Latinoamérica y Europa, estimándose que será capaz de proveer XXX GFlops de procesamiento para la resolución de complejos problemas científicos.

ESTRUCTURA DEL CLUSTER FING

- 9 Dell Power Edge Servers (18 procesadores Xeon quad core E5430, 2.66GHz.)
- 6 Sun Fire X2100 (6 procesadores Opteron dual core, 2.66 GHz)
- 4 HP Proliant DL180 G6 (8 procesadores Xeon quad core E5520, 2.26 GHz.)
- 1 Tesla GPU server (2 procesadores Xeon quad core E5530, 2.66 GHz. y 4 NVIDIA C1060 [960 núcleos de 1.33 GHz.])
- 172 GB de memoria RAM
- Power Connect switch
- Gigabit Ethernet LAN
- 10 TB de almacenamiento, 30 kVA de respaldo de batería

El cluster FING es autogestionado mediante aportes de los proyectos de investigación que utilizan su infraestructura, y puede ser utilizado gratuitamente por estudiantes e investigadores de la Facultad de Ingeniería, de otros servicios de la Universidad de la República y de entidades asociadas a actividades de enseñanza, investigación y extensión. El mecanismo de financiación autogestionado permitió incrementar notoriamente el poder de cómputo del cluster durante el año 2009, adquiriendo nodos de cómputo por un monto igual a la inversión inicial realizada en 2008. Asimismo, se ha contado con el apoyo del Programa de Desarrollo de las Ciencias Básicas (PEDECIBA) quien ha aportado financiación para el uso del cluster por parte de los estudiantes de posgrado (maestría y doctorado) en áreas relacionadas con la de computación de alto desempeño. El PEDECIBA también financió la realización del I Seminario Multidisciplinario de Computación Científica de Alto Desempeño, evento de difusión y divulgación que reunió a investigadores, estudiantes y público interesado en las temáticas afines en abril de 2009. Más detalles sobre la infraestructura del cluster FING, las actividades de formación e investigación, los mecanismos de acceso a la plataforma de cómputo, etc. pueden consultarse en el sitio web www.fing.edu.uy/cluster.

Núcleo Interdisciplinario de Computación Científica de Alto Desempeño

Motivado por el éxito de las actividades desarrolladas en los años 2008 y 2009 en torno al cluster FING, el grupo de investigadores que utilizan técnicas matemáticas y computacionales para la resolución de problemas científicos se ha integrado recientemente en el Núcleo Interdisciplinario de Computación Científica de Alto Desempeño (NICCAD). Este nuevo equipo de trabajo tiene como objetivos particulares la formación científica en áreas de matemática aplicada, modelación numérica, simulación y computación de alto desempeño, así como la capacitación de recursos humanos para colaborar con la orientación en el uso de las técnicas utilizadas. En la actualidad, integran el NICCAD doce grupos de investigación de las facultades de Ciencias, Ingeniería y Química de la Universidad de la República. Más detalles sobre los grupos de investigación y sus principales líneas de trabajo pueden consultarse en el sitio web www.fing.edu.uy/grupos/niccad.

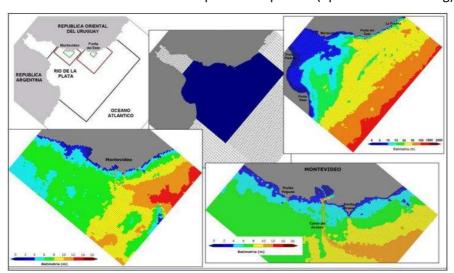
Se espera que la reciente creación del NICCAD impulse el trabajo conjunto de investigadores provenientes de diferentes disciplinas, que al mismo tiempo enfocan su análisis a través de los métodos ofrecidos por la computación científica de alto desempeño.

Aplicaciones del cluster FING

Las principales aplicaciones del cluster FING se orientan a la resolución de problemas complejos con aplicación directa en diversos ámbitos de la industria nacional. Entre las áreas de aplicación pueden mencionarse la hidráulica aplicada, las telecomunicaciones, la gestión energética, los pronósticos climáticos, los métodos de optimización, y otros. Como ejemplo de aplicaciones que demandan cómputo intensivo y han utilizado el cluster FING para la resolución eficiente de los problemas relacionados se presenta a continuación un caso de estudio sobre la modelación numérica de corrientes del Río de la Plata.

El análisis de las corrientes del Río de la Plata tiene una importancia vital en el estudio de la principal vía marítima del país, con aplicaciones directas al sector económico del transporte y a la preservación del medio ambiente. Dos proyectos de investigación han estudiado la simulación numérica de corrientes y de flujos a superficie libre utilizando el cluster FING. Los proyectos se han enfocado en los problemas de ingeniería relacionados con el diseño de muelles, puertos y de pilas y estribos de puentes, el diseño de vehículos marinos y fluviales de transporte de cargas y el análisis de su comportamiento en zonas de navegación restringidas, sin descuidar los problemas medioambientales de dispersión de contaminantes, arrastre de sedimentos y erosión local.

Se desarrolló un modelo tridimensional baroclínico para representar las características de las corrientes en la zona del Río de la Plata y su frente marino, basado en un modelo numérico que utiliza una aproximación a través de volúmenes finitos para discretizar el dominio de cálculo. Se implementó la metodología de modelos encajados, que permite anidar grillas de resolución espacial creciente, incorporando a los modelos locales resultados de mayor escala. De esta forma es posible estudiar áreas cada vez más cercanas a la región de interés, refinando el modelo original y aumentando la precisión de los resultados. La estrategia de modelos encajados permite la ejecución en paralelo, que se implementó sobre memoria distribuida a través del paradigma de pasaje de mensajes utilizando el estándar MPI (Message Passing Interface). Además, el modelo permite la utilización de paralelismo en memoria compartida mediante la utilización de directivas de computación OpenMP (open MultiProcessing).

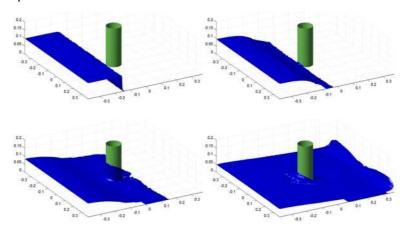


Modelo de grillas anidadas para el estudio de corrientes del Río de la Plata

El análisis del desempeño computacional del modelo de corrientes del Río de la Plata en el Cluster FING permitió comprobar el beneficio de aplicar las técnicas de computación de alto desempeño para reducir el tiempo de cómputo. Los tiempos de simulación pueden reducirse en un factor lineal respecto al número de recursos de cómputo utilizados, permitiendo abordar dominios de mayor escala y utilizar grillas que otorguen mayor precisión en los resultados.

Complementariamente, el modelo que analiza los flujos a superficie libre permite la simulación numérica de flujos viscosos o turbulentos, tridimensionales y con transporte de escalares, utilizando mallas curvilíneas estructuradas por bloques. Este modelo permite estudiar los patrones de flujo en torno a pilas y estribos de puentes, un tema de suma importancia considerando el crecimiento y la rehabilitación de la infraestructura vial y portuaria del país, y los efectos de sobrecalado (squat) y wake wash en buques de carga que navegan en aguas poco profundas, fenómenos con importantes implicaciones económicas, de seguridad y medioambientales, y que afectan al tráfico de pasajeros y mercaderías en rutas que se desarrollan total o parcialmente en zonas de navegación restringidas.

Se han analizado casos de estudio correspondientes a la rotura de una presa en escenarios sin obstáculos y con obstáculos, estudiando la interacción entre cuerpo fluido y aire y cuerpo fluido y obra respectivamente.



Caso de estudio: rotura de una presa que enfrenta un obstáculo cilíndrico

La implementación del modelo de flujos a superficie libre ha incorpora el uso de la computación paralela sobre multiprocesadores mediante directivas de OpenMP, aprovechando la descomposición del dominio en bloques de malla. El análisis de desempeño permitió comprobar que es posible reducir los tiempos de cómputo en un factor de hasta 6 al utilizar 8 recursos de cómputo, permitiendo la simulación de escenarios realistas en tiempos razonables. En la actualidad se está trabajando en una implementación de memoria distribuida que permita aprovechar la escalabilidad de recursos de cómputo del Cluster FING.

Perspectivas

Los proyectos presentados ejemplifican cabalmente la utilidad de la infraestructura de cómputo de alto desempeño de la Facultad de Ingeniería, Universidad de la República, para la resolución eficiente de problemas complejos con altos requisitos de cómputo. Las actividades de formación, investigación y difusión en el área de computación de alto desempeño desarrolladas en los dos últimos años han potenciado los trabajos en las temáticas afines y la reciente creación del NICCAD proporciona un marco institucional para el desarrollo de nuevas iniciativas de trabajo interdisciplinario. La conjunción de estas actividades proporciona un nuevo ámbito para la aplicación de las técnicas de computación científica de alto desempeño en la resolución de problemas de ingeniería de relevancia en el ámbito nacional.