

Implementación de un CLUSTER de alto rendimiento como herramienta para resolver problemas de cómputo científico

Ricardo Acosta Díaz
Miguel Ángel García-Ruiz
Carlos Alfredo Banda Montes
Omner Arturo Barajas Alcalá
Juan Manuel Ramírez Alcaraz
Pedro Damián Reyes
Cesar Rogelio Bustos Mendoza
Facultad de Telemática, Universidad de Colima
Colima, Colima, 28040, México

RESUMEN

En muchas áreas científicas y de ingeniería, por ejemplo en la bioquímica, se realizan exhaustivos cálculos numéricos para realizar modelado, simulaciones basadas en algoritmos complejos y control de algunos procesos propios del área, en las que el uso de las computadoras ha venido en aumento hasta llegar a ser un factor primordial para su desarrollo. Estos procesos generalmente consumen muchos recursos de cómputo y es necesario utilizar supercomputadoras que puedan satisfacer las necesidades de los investigadores. En el presente artículo se propone una alternativa para resolver dicho problema a través de la implementación de clusters de alto rendimiento con software libre, y con la reutilización de equipos con pocas características, lo que reducirá en gran medida la inversión que se tendría que realizar.

Palabras Clave: Procesamiento paralelo, software libre, cómputo de alto rendimiento, cómputo científico, bioquímica.

1. ANTECEDENTES DEL PROYECTO

En varias universidades del mundo existen laboratorios dedicados a la investigación en diferentes áreas científicas. Dichas dependencias no cuentan con los suficientes recursos de cómputo para realizar de manera óptima sus experimentos o trabajos de investigación, teniendo como consecuencia que estos trabajos requieran más tiempo de desarrollo del que se tomaría realizarlos apoyándose en cómputo de alto rendimiento. Una alternativa es el uso de supercomputadoras pero el costo es demasiado elevado llegando a alcanzar varios millones de dólares.

Es por esto que surge la necesidad de contar con una herramienta de cómputo que ofrezca la misma capacidad de procesamiento que una supercomputadora pero a un menor costo, ya que existen instituciones dedicadas a la investigación en donde sus presupuestos no les permiten adquirir una supercomputadora.

Se plantea la solución a este problema con la implementación de un cluster de alto rendimiento que permita hacer uso del equipo de cómputo ya existente, que incluso en algunas ocasiones se considera obsoleto o de mediano rendimiento pero que todo esto acoplado como un recurso unificado puede llegar a tener grandes capacidades de cómputo.

2. INTRODUCCIÓN

Un cluster de alto rendimiento es un conjunto de computadoras utilizadas como un recurso unificado de procesamiento que comparte una administración común [1]. El primer cluster de tipo Beowulf fue desarrollado en la NASA en el año de 1994 por Thomas Sterling y Donald Becker. Este cluster estaba formado por 16 procesadores DX4 interconectados mediante una red Ethernet de 10Mbps [1].

Los principales componentes de un cluster Beowulf son el procesador, memoria principal, red de intercomunicación entre nodos, un sistema de almacenamiento secundario y software que permita la comunicación entre los procesos de diferentes nodos (bibliotecas de envío de mensajes). Se le llama cluster de alto rendimiento ya que se construye con la intención de optimizar los procesos ejecutados tratando de lograr el mayor número de operaciones de punto flotante en el menor tiempo posible [2].

Los procesos que se ejecutan en un cluster corren bajo un entorno de procesamiento paralelo. El procesamiento paralelo consiste en dividir grandes tareas en pequeñas sub tareas que son procesadas paralelamente. El cómputo paralelo ha sido un punto clave en el desarrollo de nuevos algoritmos para optimizar las capacidades de procesamiento y poder desarrollar cómputo de alto rendimiento.

En el año de 1966 Michael J. Flynn introdujo un esquema de clasificación de computadoras que se basaba en la multiplicidad de instrucciones y el flujo de datos que podía manejar cada tipo de computadoras: SISD (Una instrucción un flujo de datos), MISD (Muchas instrucciones un flujo de datos), SIMD (Una instrucción muchos flujos de datos), MIMD (Muchas instrucciones Muchos datos). Los clusters se encuentran clasificados en el último tipo [7].

El uso del cómputo de alto rendimiento en el área científica se ha propagado de manera tal que se ha generado una rama dedicada al cómputo científico y con esto han surgido nuevas metodologías: experimental, teórica y computacional.

3. PROBLEMAS EN EL ÁREA CIENTÍFICA Y DE INGENIERÍA

En muchas áreas de la ciencia y tecnología se realizan diferentes procesos que se apoyan de las supercomputadoras para resolver problemas de gran complejidad. En un laboratorio se desarrollan modelos matemáticos basados en teorías en donde se utiliza la ingeniería computacional para resolverlos numéricamente. También se realizan simulaciones de ambientes reales para obtener nuevos resultados experimentales. Realizar estos experimentos y simulaciones en una computadora resulta más barato y más rápido que en un entorno físico. Sin embargo, cabe señalar que en la actualidad las supercomputadoras se utilizan en forma efectiva para realizar despliegues intensivos, complejos y de gran área de despliegue de modelos gráficos, en especial aplicaciones gráficas con estereoscopia para realidad virtual. Se sugiere entonces que los clusters podrían trabajar en conjunto con supercomputadoras para que éstos realicen parte del cálculo numérico, y las supercomputadoras se encarguen además del despliegue gráfico.

El modelado y la simulación son técnicas a las que los investigadores recurren para poder realizar sus experimentos y comprobar nuevas teorías. Algunas de las aplicaciones de estas técnicas se encuentran en el modelado atmosférico para pronosticar el clima, simulación de semiconductores y nuevos materiales, dinámica de fluidos, simulaciones del entorno terrestre, en la astrofísica para el modelado de hoyos negros, en la genética para determinar la secuencia del genoma humano, inteligencia artificial y algoritmos genéticos, tendencias socioeconómicas, entre muchas otras aplicaciones.

Otro de los problemas se da en el proceso enseñanza-aprendizaje de información compleja y abstracta, científica y tecnológica. Tal es el caso de la bioquímica, biología molecular, y materias afines. En ciertos casos es muy difícil crear modelos gráficos en 3D de ciertas moléculas y reacciones fisicoquímicas utilizando computadoras de escritorio. Es por esto que el uso de clusters podría solventar el problema de los cálculos matemáticos para realizar el modelado de estructuras moleculares.

4. HERRAMIENTAS UTILIZADAS EN EL CÓMPUTO CIENTÍFICO

Actualmente existen muchas herramientas que se utilizan para resolver problemas propios del área científica y de ingeniería. Algunas de estas herramientas son de distribución libre, otras son propietarias y algunas otras son desarrolladas por los mismos investigadores. De acuerdo a [3], básicamente podemos clasificar estas herramientas como:

- **BIBLIOTECAS MATEMÁTICAS:** Son aquellas que contienen rutinas matemáticas, métodos numéricos utilizados comúnmente para solucionar ecuaciones matemáticas. Algunas bibliotecas de este tipo son: NAG, IMSL, LAPACK, VISUALNUMERICS.
- **BIBLIOTECAS GRÁFICAS:** Utilizadas para generar resultados basados en gráficos: OPENGL, PGL.
- **BIBLIOTECAS DE ENVÍO DE MENSAJES:** Parte esencial de un cluster de tipo Beowulf. Contienen instrucciones para intercomunicar procesos que se encuentran en diferentes nodos, algunas de las más comunes son: PVM [6], LAM, OPENMP, OMNI, PARA++, MPICH [4].
- **SOFTWARE DE USO CIENTÍFICO:** Software especializado que se utiliza para resolver problemas en

diferentes ramas de las ciencias e ingeniería. Ejemplos de estos son: Unichem, Gaussian, Gamess, Moldem, Demon, Xplor, Fidap, Zetus, Matlab.

- **LENGUAJES DE PROGRAMACIÓN Y COMPILADORES:** Se utilizan para construir nuevas aplicaciones o modificar las ya existentes siempre y cuando esté disponible el código fuente. El lenguaje de programación más utilizado en la comunidad científica es el Fortran.

5. CONFIGURACIÓN Y ADMINISTRACIÓN DE UN CLUSTER DE ALTO RENDIMIENTO

En esta sección vamos a describir la forma en que se desarrolla la configuración y administración del cluster, esto se refiere al armado físico y puesta a punto para correr procesos bajo bibliotecas de envío de mensajes (PVM o MPICH), esto quiere decir, desarrollar un cluster completamente funcional y poder ofrecer computo de alto rendimiento.

Los cluster se pueden clasificar dependiendo de su utilización en cluster de alta disponibilidad y en clusters de alto rendimiento. La diferencia entre ellos es que el de alta disponibilidad proporcionan a los usuarios confiabilidad en el momento de su acceso, es decir, cuando requieran el servicio les será proporcionado con un tiempo de respuesta aceptable y el acceso a datos o recursos exactos, generalmente son servicios con alta demanda por los usuarios por eso se clasifican de alta disponibilidad. Por otra parte los cluster de alto rendimiento son utilizados generalmente en el área científica, en donde la cantidad de información que se requiere procesar es, comúnmente, grande.

El cluster que hemos desarrollado esta clasificado como de alto rendimiento ya que buscamos que adquiera la funcionalidad de herramienta útil para los investigadores de nuestra universidad, con esto obtener la mayor cantidad de procesamiento u operaciones de punto flotante en el menor tiempo posible, por lo tanto ofrecer un servicio de gran utilidad.

Diseño del Cluster de Alto Rendimiento

Una vez que hemos conseguido la orientación acerca del cluster que queremos desarrollar se comienza con la obtención y recopilación de información acerca de la utilidad que nos va proporcionar este tipo de arquitectura, se concluye en el armado de un cluster tipo Beowulf. Esta etapa de documentación incluye el resumen y estudio acerca del estado del arte del “clustering”, lo que nos proporciona los conocimientos necesarios para lograr la configuración y más tarde la implementación ya con un objetivo general, el cómputo de alto rendimiento en el área científica.

El siguiente paso es la obtención del equipo, aquí fue necesario la gestión para la adquisición del equipo necesario para la implementación del cluster, en donde entran las computadoras, concentrador (hub) y una adecuada área de trabajo, además de buscar el software (librerías, programas y utilerías) que se necesitaran en tiempo de ejecución de tareas para el cluster. La topología de interconexión entre los equipos elegida fue la de estrella como se muestra en la figura 1 con la descripción de equipos mostrada en la tabla 1.

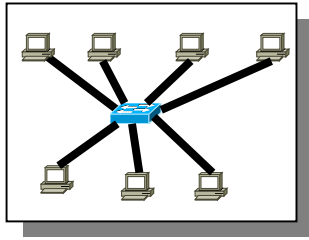


Figura 1 .- Topología utilizada para la interconexión de nodos en el cluster

Cantidad	Equipo	Característica
3	Computadora Acer Serie SN	Intel Pentium III 500 Mhz 128 Mb RAM 13 GB HD Ethernet 10/100 Mb PCI Red Hat Linux 8.0
4	Computadora Acer Serie SE	Intel Pentium III 500 Mhz 128 Mb RAM 13 GB HD Ethernet 10/100 Mb PCI Red Hat Linux 8.0
1	Hub 3 Com	Ethernet 10/100 Mb 16 puertos – 1 uplink

Tabla 1 .- Descripción del equipo utilizado para la implementación del cluster

Instalación del Sistema Operativo

A cada maquina que compone el cluster (nodo) se le instala sistema operativo de libre distribución (Linux Distribución Red Hat versión 8.0), el cual permite manejar programas para el procesamiento paralelo además que soporta diversos sistemas de archivos como PVFS el cual es implementado en el cluster como sistema e archivo distribuido.

Configuración de la red

Para poder integrar el cluster en nuestra red local es necesario que se encuentren en la misma red LAN, ya que se debe llevar a cabo la comunicación constante para el procesamiento paralelo. Es por esto que se hizo uso de direcciones IP reservadas como privadas (la red 192.168.0.X).

Configuración del Cluster

Un cluster tipo Beowulf funciona con una de dos bibliotecas de envío de mensajes: MPI (Message Passing Interface) o con PVM (Parallel Virtual Machine) [5].Figura 2

Cuando estas bibliotecas son compiladas, pasan información entre las máquinas (o nodos) del cluster. Ambos usan el protocolo de comunicación TCP/IP. También usan el comando rsh para ejecutar las sesiones entra las máquinas. Este comando permite correr comandos UNIX remotamente.

Es necesaria la configuración correcta entre nodos, estableciendo confianza y cerciorándose que las bibliotecas de

envío de mensaje se encuentren correctamente configuradas, así como las utilerías gráficas que permitan observar procesos y ligas entre los nodos.

Administración del Cluster

Una vez que se ha configurado el cluster, se debe orientar hacia una función, esto es, darle alguna utilidad. En este caso un cluster de alto rendimiento.

El cluster cuenta con el sistema de archivos NFS (Network File System), el cual es utilizado para montar el directorio “/home” del nodo maestro en todos los demás nodos componentes, esto como medida para que los usuarios registrados se encuentren dados de alta en todos los equipos y por lo tanto sus aplicaciones.

Para lograr una apropiada administración se implementaron servicios que facilitaran las tareas de actualización, recuperación e interacción con el usuario final (investigador). Algunos servicios esenciales son el Secure Shell (SSH), el cual proporcionara al cliente una interfaz de trabajo donde pueda administrar sus recursos y manejar sus propias aplicaciones. Algunos otros servicios de administración como el rlogin, rexec manipulados por scripts permiten la actualización automática, es decir, que alguna tarea dentro del cluster puede hacerse en forma directa desde un nodo maestro y a la vez se cree por omisión en todos los nodos restantes.

Ya que el acceso al cluster se realiza en forma remota, permitiendo conexión por medio de Internet, se ve la necesidad de crear un firewall (ip tables) que proteja los nodos, entonces lo que interactúa directamente con el usuario es el “master” (nodo que crea la maquina virtual, o cabecera que guía los procesos). El servicio de ftp le permite subir sus códigos, librerías, utilerías, etc. necesarios para desarrollar su trabajo.

Se cuenta con un sistema de archivos virtual (PVFS Parallel Virtual File System), con una dimensión de 40 GB para almacenamiento de utilerías y recursos que les serán proporcionados a los usuarios.

Entonces con esta administración descrita anteriormente se puede proporcionar el servicio de procesamiento de alto rendimiento, el cual se detalla en la sección de implementación.



Figura 2 .- XPVM. Software utilizado para monitoreo de distribución de procesos en el Cluster

6. IMPLEMENTACIÓN DE UN CLUSTER DE ALTO RENDIMIENTO COMO HERRAMIENTA PARA RESOLVER PROBLEMAS DE CÓMPUTO CIENTÍFICO

La implementación de un cluster para resolver problemas en el área científica empieza con la misma identificación del problema por parte del investigador o los investigadores.

En la resolución de problemas científicos a gran escala interactúan tres tipos: experimental, teórica y computacional [7]. Por esto es necesario contar con la suficiente infraestructura humana que domine cada una de estas áreas como programadores, administradores e investigadores. Ver Figura 3.

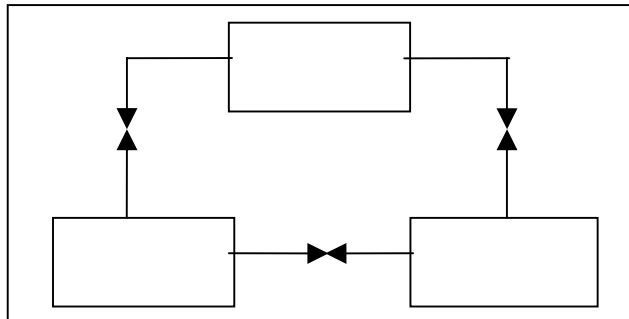


Figura 3 .- Disciplinas involucradas en la solución de un problema científico apoyado en el cómputo de alto rendimiento.

Los científicos que desarrollan teorías plantean modelos matemáticos, los cuales pueden ser resueltos mediante la ingeniería computacional apoyándose en los métodos numéricos. En base a los resultados obtenidos de estos procesos los investigadores pueden plantear nuevas teorías o reconstruir las ya existentes.

Un tipo de investigación científica de suma importancia es la experimentación, la cual toma los modelos matemáticos desarrollados en la parte teórica y puede utilizar métodos físicos o numéricos para llevar a cabo su función.

Utilizando métodos numéricos la ingeniería computacional apoya el área experimental mediante simulaciones, modelados de entornos reales, análisis de datos, control de entornos virtuales, etc. Después de haber procesado los datos proporcionados por el área experimental, el área computacional genera nuevos resultados los cuales podrían sugerir nuevas teorías.

Dentro del tipo de investigación computacional, la implementación de un cluster y el desarrollo de algoritmos optimizados resulta una herramienta poderosa, proporcionando así una excelente capacidad de cómputo para el procesamiento de datos.

A continuación se presenta un ejemplo de la utilización de un cluster ejecutando aplicaciones de uso científico. Dichas aplicaciones trabajan en conjunto para realizar modelados moleculares. El software utilizado fue BABEL, POV CHEM y MPI POV.

BABEL. Convierte archivos gráficos de un formato a otro para que sean accesibles y puedan ser utilizados por diversos programas de edición y visualización de gráficos.

POV CHEM. Visualizador de archivos PDB (Protein Data Bank), convirtiéndolo a un archivo POV (Persistence of Vision) y así poder ser renderizado.

MPI POV. Renderiza imágenes POV mediante procesos paralelos

7. PRUEBAS REALIZADAS

Se realizaron pruebas con una imagen (molécula de ADN) generada por el POV CHEM, generando una imagen de cualquier tamaño.

Los resultados de rendimiento obtenidos para una imagen con resolución de 5000 x 3000 de una molécula ADN fueron:

Cantidad de Nodos	Tiempo en Segundos
2	10018
4	4000
7	2265

Tabla 2 .- Tabla comparativa de rendimiento del Cluster

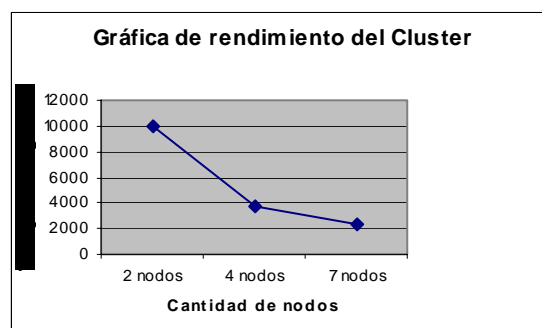


Figura 4 .- Gráfica comparativa del rendimiento del cluster

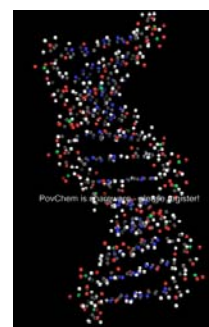


Figura 5 .- Imagen obtenida de una molécula de ADN

8. CONCLUSIONES Y TRABAJO FUTURO

Las demandas de cómputo de alto rendimiento en las áreas de investigación científica y tecnológica día a día demandan mayores capacidades de procesamiento. El uso de las supercomputadoras es una alternativa para satisfacer las demandas de cómputo de instituciones dedicadas a la investigación, pero el alto costo de una máquina de tal magnitud representa una enorme inversión económica. En los últimos años, el desarrollo de mejor hardware y redes de alta velocidad

han dado paso a la proliferación de los cluster en las áreas científicas, ya que pueden proporcionar tanto poder de procesamiento como una supercomputadora pero a un menor costo, además de presentar otras ventajas como escalabilidad y flexibilidad, aunque también tienen desventajas como un mayor espacio físico utilizado y requerimientos de infraestructura humana mejor capacitada.

En etapas posteriores de este proyecto, se planea el desarrollo de aplicaciones que optimicen la utilización del cluster para resolver problemas de las áreas científicas y tecnológicas de la Universidad de Colima. Otra actividad en el proyecto será el estudio del uso del cluster en conjunto con una supercomputadora, la cual tiene alto rendimiento en gráficas, para así visualizar los resultados gráficos obtenidos en el cluster, y utilizar las imágenes calculadas por el cluster en ambientes virtuales. De esta forma, los usuarios podrían interactuar y percibir información de manera más efectiva con los modelos gráficos. Los modelos gráficos e imágenes de bioquímica así generados podrán servir además para aplicarse en clases, aprovechando la infraestructura de visualización del Laboratorio de Realidad Virtual de la Universidad de Colima.

Aportaciones

Como aportaciones en general, podemos decir que este trabajo de investigación y desarrollo proporciona una infraestructura para la enseñanza de cómputo paralelo, además de la posibilidad de tener el poder de cómputo adecuado para realizar cálculos científicos complejos que facilitarían el trabajo de investigación de científicos y tecnólogos de la Universidad de Colima.

Agradecimientos

Agradecemos a la Universidad de Colima por brindarnos los medios para la investigación para desarrollar este proyecto.

9. REFERENCIAS

- [1] Sitio Web. Sitio oficial de investigación sobre cluster en la UNAM. <http://clusters.unam.mx>. 2003.
- [2] David HM Spector. Building Linux Clusters. O'Really. 2000.
- [3] Mark Baker, Cluster Computing White Paper. University of Portsmouth, UK, Technical Report, 2000.
- [4] <http://www-unix.mcs.anl.gov/mpi/mpich/>. Sitio Web con documentación acerca de MPICH.
- [5] <http://www.beowulf.org>, Sitio Web mantenido por los desarrolladores del cluster Beowulf, Donald Becker.
- [6] PVM: Parallel Virtual Machine A Users' Guide and Tutorial for Networked Parallel Computing. Al Geist, Adam Beguelin, Jack Dongarra, Weicheng Jiang, Robert Manchek, Vaidy Sunderam. 1994 Massachusetts Institute of Technology
- [7] Cluster Computing. Architectures, Operating Systems, Parallel Processing and Programming Languages. Richard S. Morrison. GNU General Public Licensed. 2003