

# SC2003 IGNITING INNOVATION

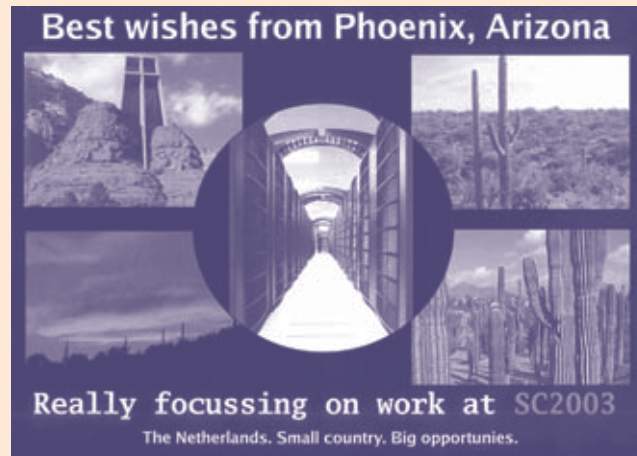
PHOENIX | AZ | NOVEMBER 15 - 21

Arnold Meijster  
a.meijster@rc.rug.nl

*De SCxxx-conferentie vindt jaarlijks plaats in de Verenigde Staten, maar is in feite een mondiaal evenement op het gebied van 'Supercomputing & Communication'. Dit jaar trad Phoenix, de hoofdstad van Arizona, op als gastheer voor de ca. 7000 deelnemers van de conferentie en tentoonstelling annex beurs. Vrijwel iedere organisatie die actief is op het gebied van grootschalige ICT neemt aan dit evenement deel dat plaatsvond van 15 tot 21 november. Arnold Meijster was aanwezig namens de RC-unit HPC/V.*

Supercomputers kunnen worden gedefinieerd als de krachtigste rekenapparaten die in een bepaalde periode op de markt zijn. Qua functie zijn ze veelal te vergelijken met grote wetenschappelijke onderzoeksvoorzieningen voor het verrichten van 'big science'. Supercomputers worden dan ook vooral gebruikt voor technisch-wetenschappelijk onderzoek waarbij grote rekenproblemen moeten worden opgelost.

Bij een deel van het onderzoek is grootschalig rekenwerk een



noodzakelijke voorwaarde voor succesvolle research. Een aantal vakgebieden waarvoor dit typisch geldt: Numerieke Wiskunde (problemen uit de stromingsleer), Chemie (moleculaire dynamica), Sterrenkunde, Medische Wetenschappen (analyse van CT/MRI-scans), Life-Sciences (analyse DNA-sequenties), Informatica (onderzoek naar het (beter) gebruik van supercomputers).

## Best wishes

Ten opzichte van de meeste andere onderzoeksstands kreeg het 'Nederland paviljoen' veel aandacht op de SC2003-beursvloer (circa 36.000 m<sup>2</sup> in totaal), hoewel we natuurlijk niet tegen megagroepen als ASCI opkonden. Met de bezoekers ontstond regelmatig discussie en werd informatie uitgewisseld over de stand van zaken op het gebied van supercomputing in Nederland.

Veel belangstelling was er eveneens voor de typisch Nederland-

se 'give aways': een tulpenbol in een bonbondoosje en een Ansichtkaart met de tekst 'Best wishes from Phoenix, Arizona' met daarop een aantal foto's van cactussen (typische Arizona-plaatjes) en een foto van de Nationale supercomputer 'Teras' in het hart van de kaart. Bezoekers konden hun 'greetings home' bij de stand inleveren, en Nederland betaalde de portokosten. Hoezo 'going Dutch'?

De centrale regie van de Nederlandse stand was in handen van NCF (Stichting Nationale Computerfaciliteiten). NCF is een dochter van NWO die zich ten taak stelt het wetenschappelijk onderzoek aan Nederlandse universiteiten en onderzoeksinstituten te bevorderen door het beschikbaar stellen van geavanceerde computerfaciliteiten zoals supercomputers en virtual reality-systemen (CAVE). Door dit beleid beschikt de Nederlandse weten-



schappelijke gemeenschap over een grote nationale supercomputer (genaamd 'Teras'), die zich in de rekenhal van SARA bevindt. SARA is een onafhankelijke organisatie in Amsterdam die zich heeft gespecialiseerd in reken- en netwerkdiensten voor de wetenschappelijke gemeenschap. Hier zijn de meeste nationale rekenfaciliteiten gehuisvest die door de NCF worden aangeschaft.

De Teras is een supercomputer van het type SGI Origin 3800, die bestaat uit 1024 processoren. De machine heeft een peak-performance van 1 Teraflops (1.000.000.000.000 floating point operaties per seconde), en 1 Tera-byte (1.000.000.000.000 bytes) geheugen.

Daarnaast huisvest SARA ook de opvolger van Teras, de Aster (een anagram), een SGI Altix 3700-systeem, bestaande uit 416 Intel Itanium-2 processoren. Dit systeem beschikt over 832 Gbyte geheugen, en heeft een peak-performance van 2.2 Tera-flop/sec.

### HPC/V

Naast het beleid om systemen centraal in Amsterdam op te stellen, voert de NCF het zogenaamde flankerende beleid, wat er op neerkomt dat bij een aantal instituten ook supercomputers worden geplaatst van een afwijkend type. Mede door dit beleid beschikt de RUG over een Cray SV1e, een supercomputer met 32 processoren, met een peak-performance van 64 Gigaflops (64.000.000.000 floating point operaties per seconde), en 32Gbyte geheugen.

NCF stelt ook geld beschikbaar voor de parallelisatie van computerprogramma's. Een wetenschapper die zijn code eens op een supercomputer wil proberen, kan hiervoor contact op te nemen met de unit High Performance Computing and Visualiza-

tion (HPC/V) van het universitair rekencentrum (RC) in Groningen.

Geïnitieerd door SARA werd in het Nederlandse paviljoen een demonstratie verzorgd met een passief stereo-opstelling van SARAgene, een data-mining-applicatie voor genomics-onderzoek. Deze applicatie heeft SARA ontwikkeld in nauwe samenwerking met de Pharmaceutical Research & Development department van Johnson & Johnson.

Door gebruik te maken van de derde dimensie van een virtuele 3D-wereld kan er meer informatie getoond worden dan op een gewone 2D-desktop. Daardoor kunnen grote hoeveelheden data tegelijkertijd worden gevisualiseerd en op verschillende niveaus worden onderzocht. Op deze manier kan de onderzoeker op hetzelfde moment locaties van genen, sequenties, moleculaire structuren, metabolische paden en expressie-informatie van grote aantallen eiwitten bestuderen.

SARAgene kan het beste worden gebruikt in combinatie met een VR-display-systeem, zoals een ImmersaDesk™, een passief stereo projectiesysteem, of een CAVE™(-achtige) immersive VR-omgeving.

Gedurende de ochtenden demonstreerden SARA, de unit HPC/V van het RC, het Erasmus MC (Rotterdam) en SURFnet de recentelijk ontwikkelde, collaboratieve versie van SARAgene op een groot projectiescherm met gebruik van passief stereo en hoofd-/hand-tracking. Met drie verschillende Bioinformatica-sites in Nederland (SARA, RUG, Erasmus MC) was er 's avonds (Nederlandse tijd, 's ochtends in Phoenix) een verbinding met de Nederlandse stand in Phoenix.

Gebruikmakend van de twee Reality Cubes (CAVE's) bij de RUG en bij SARA, en een ImmersaDesk op

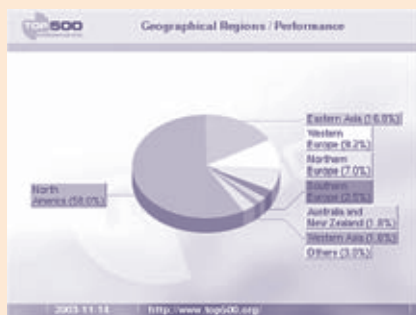
het Erasmus MC werd gezamenlijk een aantal genomics-databases geraadpleegd met gebruik van videoconferencing voor de onderlinge interactie. Sponsor van het project was SURFnet, de organisatie die verantwoordelijk is voor het computernetwerk van het hoger onderwijs en onderzoeksinstituten in Nederland.

Naast deze VR-demonstratie bestond de bijdrage van de RUG uit een demonstratie van een parallel algoritme voor het filteren van volume datasets op basis van de vorm van structuren in de dataset. Het algoritme implementeert een zgn. 'connected set filter' uit een tak van de beeldbewerking die bekend staat onder de naam 'Mathematische Morfologie'.

De presentatie bestond uit een posterpresentatie door de auteurs - A. Meijster (RC-HPC/V), M.A. Westenberg (IWI: Instituut voor Wiskunde en Informatica) en M.H.F. Wilkinson (eveneens IWI) - en een demonstratie van het algoritme op een cluster bestaande uit 9 Pentium 4-processoren. De demonstratie betrof het filteren van MRI-datasets op basis van het wel of niet langgerekt zijn van een structuur. Een dergelijk filtercriterium toont op dergelijke datasets een zeer fraaie real-time segmentatie van bloedvatstructuren.

### Top 500

Naast de onderzoeksconsortia, was er natuurlijk de commercie. Het overgrote deel van de beursvloer was gereserveerd voor de grote spelers op het gebied van High Performance Computing en Networking zoals SGI, CRAY, AMD, IBM, Cisco, en Sun. Voor hen geldt duidelijk 'bigger is better'. Complete High-end-systemen werden live gedemonstreerd, vaak gecombineerd met flitsende 3D-visualisaties door middel van grote VR-projectieschermen.



Cray toonde zijn nieuwste vector-supercomputer, de Cray X1. Cray claimt met deze machine over de meest krachtige processoren ter wereld te beschikken en staat met deze machine op de plaatsen 19, 20 en 21 van de prestigieuze 'Top 500 list' van supercomputers in de wereld. Inderdaad een bijzonder knappe prestatie voor een systeem met 'slechts' 252 processoren, vooral als we dit vergelijken met de Nederlandse supercomputers die veel meer processoren aan boord hebben (de Aster staat op plaats 41, de Teras op 497). Tevens is het erg knap om te kunnen overleven in een wereld waarin de grote klassieke supercomputers worden verdrongen door het bouwen van clusters van pc's en Grids van clusters ('constellations'). Vandaag de dag bestaat de top 500 voor nog slechts 33% uit echte klassieke supercomputers, terwijl de overige 67% wordt gevuld met 41.6% clusters en 25.4% constellations.

De positie van een systeem in de Top 500-lijst wordt bepaald met behulp van een benchmark-programma, *Linpack*. De benchmark bestaat uit het oplossen van een groot stelsel lineaire vergelijkingen. Omdat dit een probleem is waarbij de computer het geheugen in een regelmatig patroon adresseert, scoren traditionele supercomputers goed op dit probleem en worden resultaten verkregen die dicht bij de peak-performance van een systeem kunnen liggen.

Negen van de Top10-systemen, 50% van alle 500 systemen, en 58% van de totale beschikbare rekenkracht is geïnstalleerd in de Verenigde Staten. Op de tweede plaats komt Azië (met 16.8% van de rekenkracht), gevolgd door West-Europa (met 9.2%). We doen dus nog mee, maar het is goed om je je plaats te realiseren.

## LOFAR

IBM presenteerde haar nieuwste paradepaardje, de Blue Gene. Deze machine maakt deel uit van een groot onderzoeksproject van IBM in dezelfde lijn waarin IBM een aantal jaren geleden een immense schaakcomputer (Deep Blue) heeft gebouwd die tegen de (toenmalige) wereldkampioen schaken Gary Kasparov speelde (en won).

IBM noemt deze Blue Gene-machine een 'Teraflop in a box', wat inderdaad vrij aardig de lading dekt. De machine is niet veel groter dan een gewone koelkast van ongeveer een kubieke meter, maar levert wel 2 Tera-flop performance, met 384 processoren in zo'n box. Deze machine kwam op de Top 500-lijst binnen op plaats 76, maar IBM gaat meerdere van deze 'systeempjes' koppelen tot een 128-voudige omvang voor het Lawrence Livermore National Laboratory in Californië.

Dat betekent dat die machine nummer 1 zal staan op de lijst met 256 Tera-flops, gevolgd door de huidige nummer 1 (the earth simulation center, Japan) met een 'schamele' 35 Tera-flops. Eén van de belangrijkste applicaties waarop IBM zich richt, is de simulatie van het vouwen van menselijke proteïnen, vandaar de naam Blue Gene.

Maar natuurlijk is de machine ook breder inzetbaar. ASTRON en IBM hebben op woensdag 19 november tijdens de conferentie een 'Memorandum of Understanding' getekend. De IBM Blue Gene-supercomputer is een goede kandidaat voor de supercomputer van LOFAR. IBM en ASTRON bekijken de mogelijkheden om samen te werken in het onderzoek en de ontwikkeling van een LOFAR-supercomputer.

Tenslotte wil ik een laatste Nederlandse inbreng niet onvermeld la-

ten. De gezamenlijke inspanning van het 'Bandwidth lust team' leverde de 'SuperComputing 2003 Bandwidth Challenge award' voor data-transfer op. De data werd uitgewisseld tussen drie stands (Caltech, SLAC, en LANL) via drie 10Gbit/sec. links vanaf SCInet (het netwerk van de SC2003-organisatie) naar vier landen (VS, Nederland, Zwitserland en Japan). De belangrijke link vanuit Chicago naar Amsterdam werd verzorgd door SURFnet.

Typische transfer-rates van 3 tot 5 Gbits per seconde werden gemeten, terwijl peak transfers van 23Gbit/s werden gemeten. Een totale effectieve netwerkbelasting van meer dan 90% werd bereikt, wat overigens een dramatisch negatief effect had op de interactieve gezamenlijke demo van het programma SARAGene. Gelukkig duurde deze exercitie minder dan een uur, en er is toch maar een nieuw record geplaatst door maar liefst 6.6 Terabytes aan data in 48 minuten rond te 'pompen'.

De deelnemers aan de SC2003 konden terugblikken op een geslaagde poging om de Nederlandse stand van zaken betreffende High Performance Computing and Networking te demonstreren op mondiaal niveau. Ik hoop dat dit initiatief wederom een vervolg krijgt in 2004, als het HPC-circus is neergestreken voor de SC2004 in Pittsburgh.



*Arnold Meijster is werkzaam bij de unit High Performance Computing and Visualization (HPC/V) van het RC.*

## Links

- Meer informatie over de SCxxx-conferentie: [www.sc-conference.org/](http://www.sc-conference.org/)
- De website van ASCI: [www.sandia.gov/ASCI/](http://www.sandia.gov/ASCI/)
- De Top 500-lijst is te bekijken op: [www.top500.org](http://www.top500.org)
- Meer informatie over de unit HPC/V: [www.rug.nl/rc/hpcv](http://www.rug.nl/rc/hpcv)