

The Birth of HPC Cuba

How supercomputing is being made available to
all Cuban researchers using FOSS

Dr Hector Cruz, UCLV, Cuba
Dieter Roefs, Ghent University, Belgium

FOSDEM'17
Brussels 4 February 2017



HPC Cuba

Our Vision:

- To Make Supercomputing services available to all Cuban scientists

Our Mission:

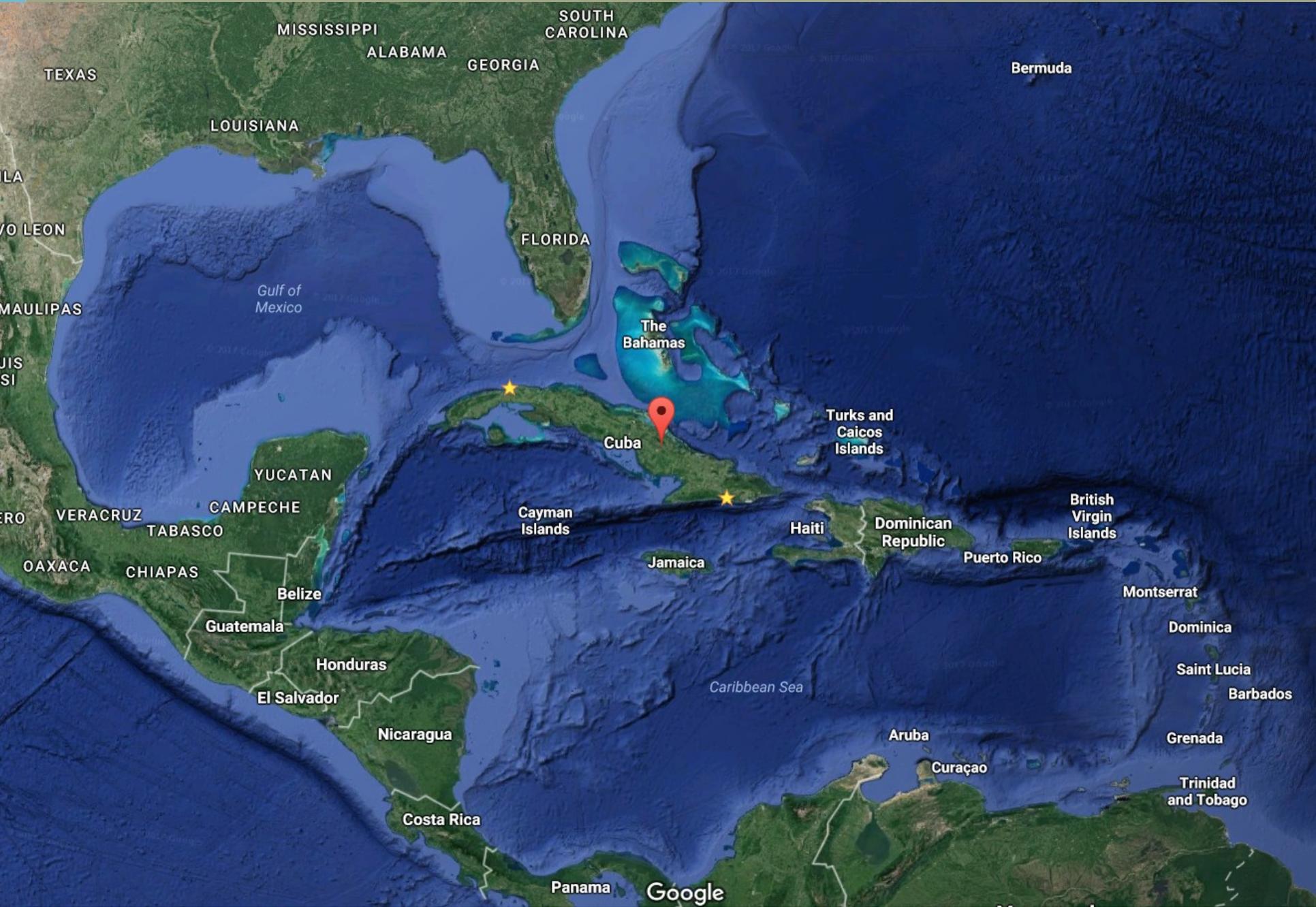
- Provide centralized HPC infrastructure, training and support for researchers from MES Universities, Scientific Institutions,...

HPC Cuba

- *Cuban Centre for Academic Supercomputing*
- “La red Académica de Computación de Alto Desempeño de Cuba”
- Geographic distribution of HPC Infrastructure at Havana, Santa Clara and Santiago de Cuba
- MES backbone (REDUNIV)
- Physical infrastructure at: UCI, UCLV & UO

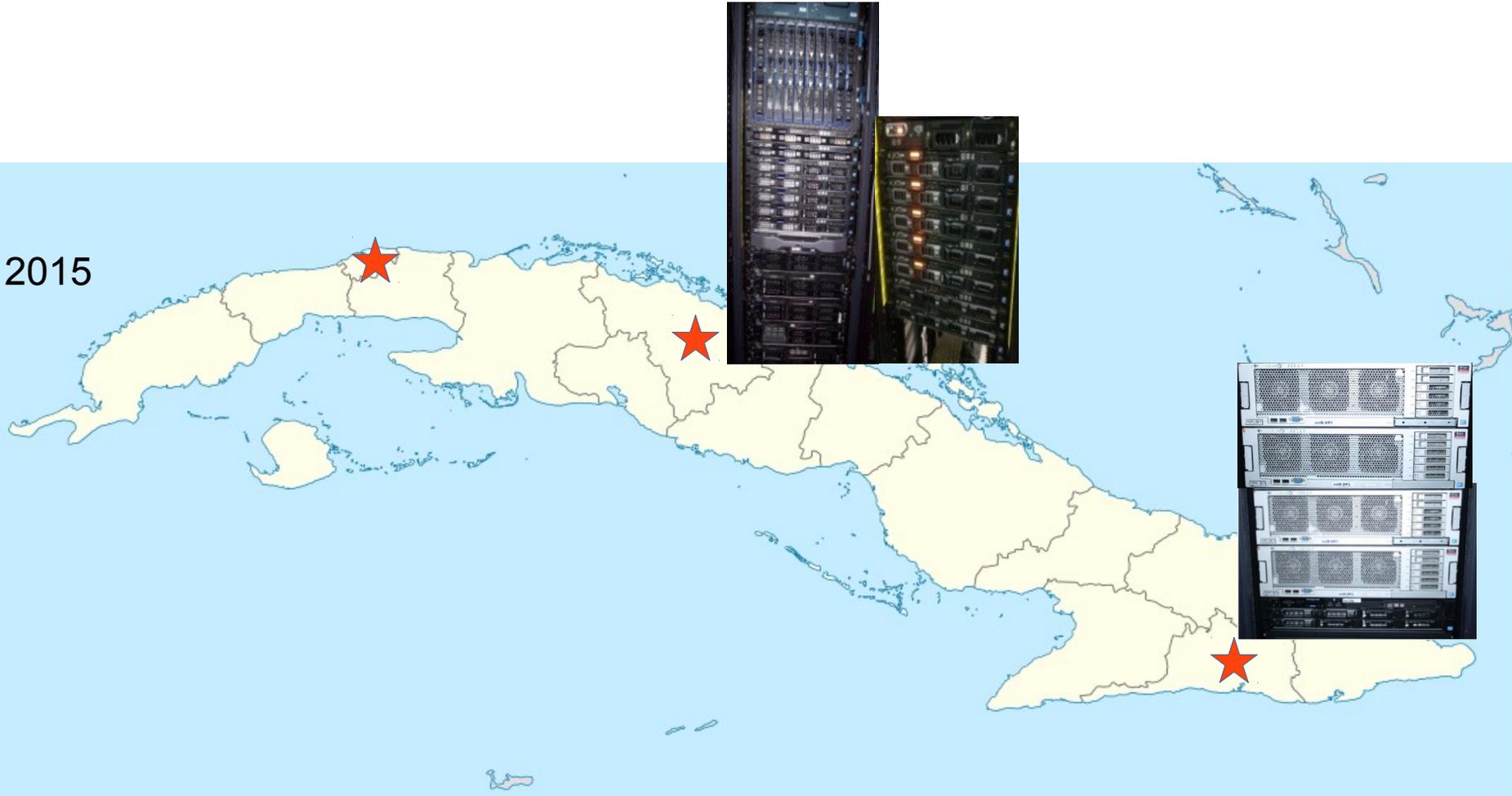
Some Facts About Cuba

- Biggest Island in the Caribbean
 - Tropical Climate
 - Tourist Destination (rapidly growing industry)
- High Educational Standard
- Friendly People, Safest place in the Americas
- American trade Embargo still in effect
 - Limited bandwidth, restricted access
 - Access to hardware problematic



Centers with HPC infrastructure

2015



HPC services for everybody



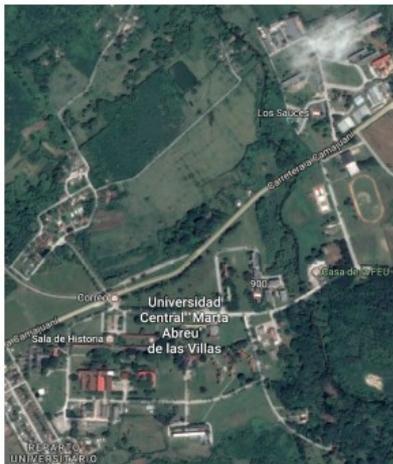
Havana: Universidad de las Ciencias Informaticas



Universidad de las Ciencias Informáticas



Santa Clara: Universidad Central de Las Villas



Santiago de Cuba: Universidad de Oriente



HPC in UO Datacenter



HPC in UCLV Datacenter



HPC UCLV & HPC UCI each

- IBM iDataPlex
- 74 nodes
- 592 cores
- CPU's Intel Xeon Nehalem 2.26GHz
- 12GB RAM/node
- Almost 1TB RAM

BigData UCLV (GPU)

- 2 NVIDIA Tesla K80 CUDA
- 20 nodes (80 Cores)
- 320 GB RAM
- 1.52 TB HDD + 3 TB NAS



HPC2 UO “Palmiche”

- 8 x Dell PowerEdge C6145 (near future: 16)
 - 2 motherboards each one: 16 nodes
 - 32 cores/node
 - CPU's AMD "Magny-Cours" 2.4Ghz
 - 64GB RAM/node
 - Switch Infiniband 2xQDR
 - 512 cores & 1.15TB RAM
-
- Delivered on site late 2016, in production early 2017

NEAR FUTURE (CPU)

UCI (Havana)



UCLV (central)



UO (orient)





Near Future Centers with HPC infrastructure

2017



100% FREE SOFTWARE

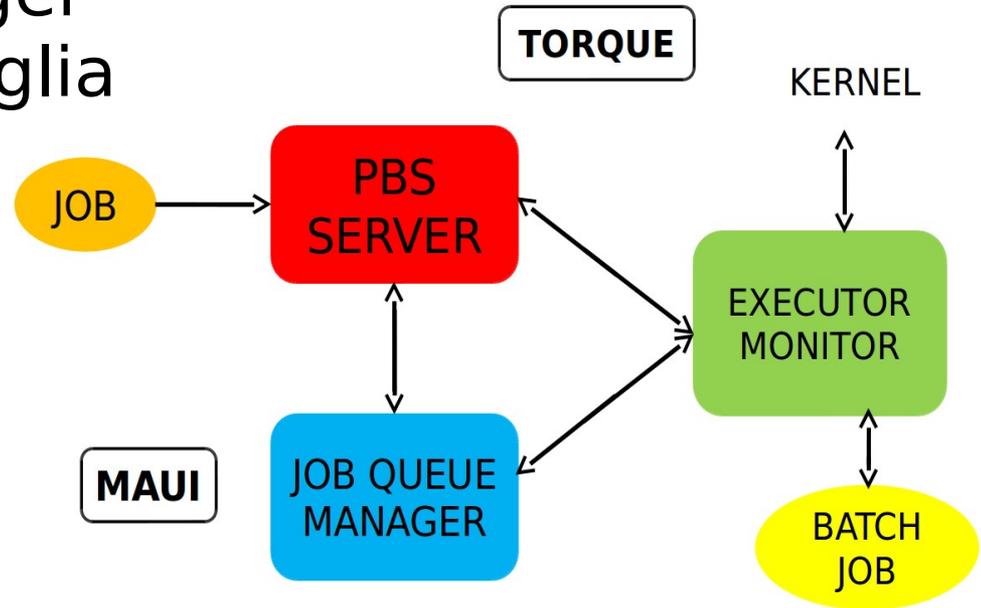
Previous

Debian

TORQUE OpenPBS: resource manager

MAUI: job queue manager

Monitoring: Icinga, Ganglia



Exploring

CentOS

OpenHPC, OpenNebula, CEPHS,...

User Portal (local UCLV)

hpc.uclv.cu

INICIO

GESTOR DE RECURSOS

RECURSOS

ACCESO AL CLÚSTER

HERRAMIENTAS

ADMIN SITE

BUSCAR

Portal del HPC en la UCLV

Usted está visitando el portal del clúster de alto rendimiento (HPC) ubicado en las instalaciones de la [Dirección de Informatización](#) perteneciente a la [Universidad Central "Marta Abreu" de Las Villas](#).

¿Qué es HPC? Es la capacidad de poner a trabajar unidos varios ordenadores con el objetivo de resolver problemas complejos y avanzados en una gran variedad de disciplinas de investigación.

Cada uno de nosotros experimenta los efectos del HPC en nuestra vida del día a día, aunque no seamos conscientes de ello. Por ejemplo, los autos y aviones son diseñados y desarrollados usando técnicas avanzadas de modelado, los medicamentos que utilizamos, por su complejidad son desarrollados a través de complejos modelos matemáticos que requieren grandes capacidades de cálculo, las previsiones meteorológicas serían aún más inexacta sin la ayuda de supercomputadoras.

Nuestra dependencia del HPC aumenta constantemente a medida que penetra más y más en la sociedad. HPC pronto será una tecnología esencial, debido a algunos grandes retos que la sociedad enfrenta, tales como la producción eficiente de energía limpia, la predicción y los impactos del cambio climático, la curación de enfermedades, etc.

Contenido reciente

Colas del sistema manager
Programas manager
Sistema de almacenamiento manager

User Portal (local UO)

Búsqueda ...

HPC UO

High Performance Computing en la Universidad de Oriente

Inicio

Hardware

Aplicaciones

TORQUE

Preguntas Frecuentes

wiki

Contacto

INICIO



HPC UO es un sistema de procesamiento en paralelo GNU/Linux construido en la Universidad de Oriente dedicado a hacer cálculos científicos.

Nuestra **Misión** es: Proveer una infraestructura de HPC a los profesores y estudiantes de la universidad, así como dar soporte técnico a los usuarios.

Nuestro **Lema** es: Dando poder a los investigadores.

HPC UO tiene un total de 132 núcleos de procesadores, 132 GB de memoria RAM y una capacidad de cálculo teórica de 1.0 TFLOPS.

El HPC tiene los compiladores `gcc`, `g++` y `gfortran`, y las bibliotecas `OpenMPI` y `MPICH` para realizar cálculos en paralelo. También tiene programas generales de cálculo tales como `Octave`, programas para cálculos estadísticos como `R` y graficadores como `gnuplot`. Posee además las bibliotecas `BLAS`, `lapack` y `ATLAS`.

El HPC UO puede ser usado por:

- usuarios que no dominan la programación en paralelo pero usan programas (en serie o en paralelo) hechos por terceras personas
- usuarios avanzados que dominan la programación en paralelo y hacen sus propios programas, los compilan y ejecutan



Dando poder a los investigadores

[Página principal](#)

Herramientas

[Lo que enlaza aquí](#)

[Cambios relacionados](#)

[Páginas especiales](#)

[Versión para imprimir](#)

[Enlace permanente](#)

[Información de la página](#)

[Acceder](#)

[Página](#) [Discusión](#)

[Leer](#)

[Ver código](#)

[Ver historial](#)



Página principal

Esta wiki esta dedicada a los usuarios del HPC de la Universidad de Oriente. Contiene información adicional a la del Portal del HPC UO, en especial la información detallada del sistema y cómo usar los recursos para el procesamiento de alto rendimiento.

El contenido de esta wiki es el resultado de la experiencia acumulada por varios usuarios en el trabajo con el HPC. Esperamos que sea de utilidad a los nuevos usuarios.

- [Sitio Web del HPC UO](#)
- [Wiki - Documentación para los usuarios](#)

Contenido [\[ocultar\]](#)

- 1 [Comenzando](#)
- 2 [Información del Sistema](#)
- 3 [Usando el HPC](#)
- 4 [Software y bibliotecas](#)

Comenzando

- [Cuentas de usuario](#)
- [Conectándose al HPC](#)
- [Copiar/extraer ficheros del HPC](#)

Información del Sistema

- [Directorio Home](#)
- [Configuración de los nodos de cómputo](#)
- [Almacenamiento en disco](#)

Usando el HPC

- [Shells](#)
- [Usando el Sistema de Cola](#)
- [Envío de trabajos](#)
- [Cálculo en serie](#)
- [Cálculo en paralelo](#)

Ways to access

HPC.UCLV

[Inicio](#)

[Cola](#)

[Enviar trabajos](#)

[SSH](#)

[Ganglia](#)

[uclv.sctejeda@localhost](#)

Bienvenid@!

HPC. UCLV

<https://master.cluster.uclv.edu.cu>

Colas

Aquí usted puede consultar el estado real de la cola, así como eliminar trabajos con problemas en las colas.

[Ver la Cola...](#)

Enviar trabajos

a través de esta opción puede subir los trabajos para el servidor o crear un script a través de un sencillo ayudante.

[Enviar un nuevo trabajo...](#)

Borrar

¿Ha cometido algunos errores? ¿Su trabajo no terminó? Aquí puede borrar su trabajo utilizando el ID de ejecución.

[Borrar un trabajo...](#)

Resultados

Acceda a los ficheros que resultan de la ejecución de sus trabajos

[Ficheros de resultados...](#)

Ganglia

Acceso al sistema de monitoreo para mantener bajo control los recursos del clúster.

[Ganglia...](#)

Módulos

Listados de módulos disponibles para la ejecución de los trabajos.

[Módulos disponibles...](#)

HPC. UCLV

<https://master.cluster.uclv.edu.cu>

Dirección de Informatización

Universidad Central "Marta Abreu" de Las Villas.

uclv.edu.cu



Queues state via SSH

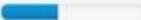
uclv.scteveda@master: ~

```
ort
uclv.scteveda@master:~$ qstat
Job ID          Name                User                Time Use S Queue
-----
3846.master     malla-8-15.1       cujae.jcid         00:00:00 R cimcni
3895.master     Prueba_Error_2     unica.janner        0 Q parallel_short
3908.master     PadcSwan_ultimo    unica.janner        0 Q parallel_long
3923.master     folder             uclv.sandra        00:00:00 C serial_short
3924.master     AC_2               uclv.sandra        00:00:00 C serial_short
3925.master     folder             uclv.sandra        00:00:00 C serial_short
3926.master     AC_4               uclv.mmenese       00:00:00 C serial_short
3927.master     AC_5               uclv.elizabethm    00:00:00 C serial_short
3928.master     AC_6               uclv.elizabethm    00:00:00 C serial_short
3929.master     AC_6               uclv.elizabethm    00:00:00 C serial_short
3930.master     AC_7               uclv.mmenese       00:00:00 C serial_short
3931.master     AC_8               uclv.yudithe       00:00:00 C serial_short
3932.master     AC_9               uclv.yudithe       00:00:00 C serial_short
3933.master     AC_10              uclv.egoya         00:00:00 C serial_short
3934.master     AC_11              uclv.egoya         00:00:00 C serial_short
3935.master     AC_12              uclv.yasserrb      00:00:00 C serial_short
3936.master     AC_13              uclv.yasserrb      00:00:00 C serial_short
3937.master     work_01.pbs        uclv.dic            00:00:00 C serial_short
3938.master     work_01.pbs        uclv.dic            00:00:00 C serial_short
3939.master     work_sleep.pbs     uclv.dic            00:00:00 C serial_short
3940.master     work_sleep1.pbs    uclv.dic            00:00:00 C serial_short
3941.master     work_sleep23.pbs   uclv.dic            00:00:00 C serial_short
3942.master     work_24.pbs        uclv.dic            00:00:00 C serial_short
3943.master     work_ok.pbs        uclv.dic            00:00:00 C serial_short
3944.master     work_mio.pbs       uclv.dic            00:00:00 C serial_short
3945.master     work_02.pbs        uclv.dic            00:00:00 C serial_short
3946.master     work_03.pbs        uclv.dic            00:00:00 C serial_short
3947.master     work_04.pbs        uclv.dic            00:00:00 C serial_short
uclv.scteveda@master:~$
```

Queues state via Web

HPC.UCLV Inicio Cola Enviar trabajos SSH Ganglia uclv.scteveda@localhost

Status Queue

Status	JID	Job name	Owner
Running 	3846	mallá-8-15.1	cujae.jcid
Queued	3895	Prueba_Error_2	unica.janner
Queued	3908	PadcSwan_ultimo	unica.janner
Completed	3923	folder	uclv.sandra
Completed	3924	AC_2	uclv.sandra
Completed	3925	folder	uclv.sandra

Job state via SSH

```
uclv.sctejeda@master: ~  
uclv.sctejeda@master:~$ qstat -f 3908  
Job Id: 3908.master.cluster.uclv.edu.cu  
Job_Name = PadcSwan_ultimo  
Job_Owner = unica.janner@master.cluster.uclv.edu.cu  
job_state = Q  
queue = parallel_long  
server = master.cluster.uclv.edu.cu  
Checkpoint = u  
ctime = Thu Feb 4 15:19:40 2016  
Error_Path = master.cluster.uclv.edu.cu:/home/CLUSTER/unica.janner/Ejemplo  
s/padcswan/Gustav_Pruebal/PadcSwan_ultimo.e3908  
Hold_Types = n  
Join_Path = n  
Keep_Files = n  
Mail_Points = a  
Mail_Users = janner@unica.cu  
mtime = Thu Feb 4 15:19:40 2016  
Output_Path = master:/home/CLUSTER/unica.janner/Ejemplos/padcswan/Gustav_P  
ruebal/e  
Priority = 0  
qtime = Thu Feb 4 15:19:40 2016  
Rerunable = True  
Resource_List.nodect = 5  
Resource_List.nodes = 5:ppn=12  
Resource_List.walltime = 100:00:00  
euser = unica.janner  
egroup = unica.janner  
queue_type = E  
etime = Thu Feb 4 15:19:40 2016  
submit_args = padcswan_cluster_scrip.sh  
fault_tolerant = False  
job_radix = 0  
submit_host = master.cluster.uclv.edu.cu
```

Job state via Web

Completed PadcSwan_ultimo (3908)

Timing

Time start	19:12:00 on 31/12/1969
Walltime	100:00:00
To end	100% 

Files

Only owner can see this

Mail

Owner	unica.janner
Queue	parallel_long

Close

Status Queue

Status

Running 

Queued

Queued

Completed

Completed	3924	AC_2	uciv.sandra
Completed	3925	folder	uciv.sandra

Script via ssh

```
uclv.sctejeda@master: ~  
GNU nano 2.2.6 File: prueba.pbs  
#!/bin/bash  
#PBS -l nodes=1:ppn=4  
#PBS -l walltime=01:20:00  
#PBS -q test  
#PBS -N prueba  
#PBS -j oe  
  
cd $PBS_O_WORKDIR  
#####  
# A partir de este punto comienza a poner sus instrucciones, por ejemplo:  
#####  
  
module avail  
module load MPICH/3.0.4-GCC-4.8.1  
echo "starting"  
mpiexec ./CPI  
echo "finish"  
  
[ Read 20 lines ]  
^G Get Help ^O WriteOut ^R Read File ^Y Prev Page ^K Cut Text ^C Cur Pos  
^X Exit ^J Justify ^W Where Is ^V Next Page ^U UnCut Text ^T To Spell
```

Script via Web

HPC.UCLV Inicio Cola Enviar trabajos SSH Ganglia uclv.scteveda@localhost

General Options

Script Name .pbs

Job name

Export Env Variables Yes No

HFault Tolerance Yes No

Rerunable Job Yes No

Resource Handling

Resource list :

Require GPUs Yes No

Queue selection

Priority

Walltime : :

Submission Time : : :

Output stream options

Research groups using UCLV HPC facilities

Centros	Cantidad
CUJAE	2
REDUC	1
ICIMAF	1
ISM	2
UCLV	42
UH	5
UHO	1
ULT	2
UNICA	2
UO	2
VUB	1
UNB	4
TOTAL	65

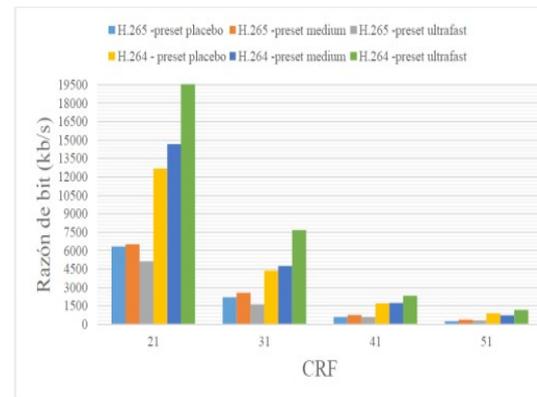
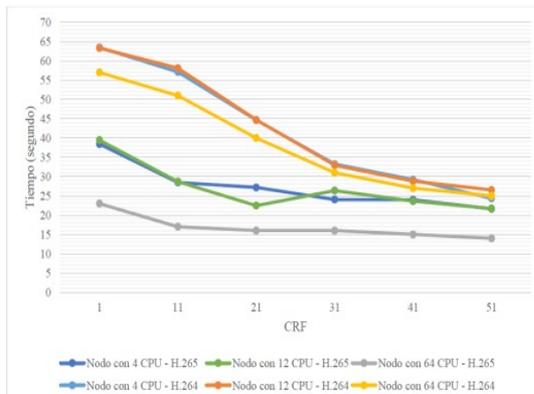


Scientific Results

High Efficiency Video Encoding using HPC for Ultra High Definition Digital TV in Cuba

Serafin W. Perez Cuellar, Universidad Central Marta Abreu de las Villas
(from UCLV on HPC UO)

Efficiency of the H.265 codec on a cluster with *ffmpeg*. Parameter optimization for codifying videos to be used on the digital TV of Cuba.

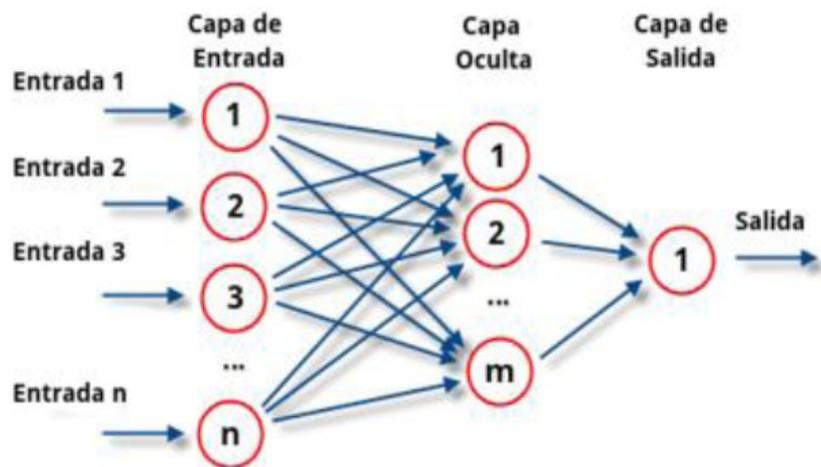


Scientific Results

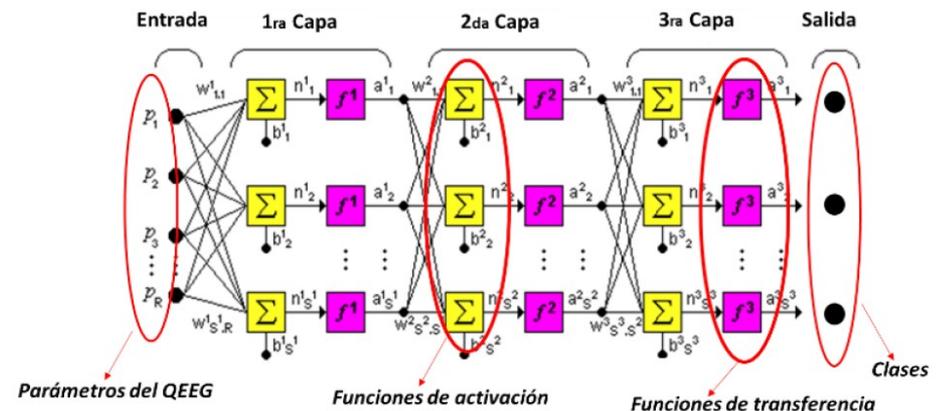
Application of artificial intelligence (AI) techniques to electroencephalographic (EEG) signals

Lisdeiby Traba Rosales, Msc, Thaimy Gonzalez Rubio, Neuroscience and Image and Signal Processing Center (**CENPIS**)

Classification of the states of profound sedation in the F4 electroencephalographic (EEG) channel using artificial neural networks; 9 spectral parameters of the quantitative EEG and artificial neural networks were used. The states of sedation located in the EEG signals were classified with 95% effectiveness.



Neural Network



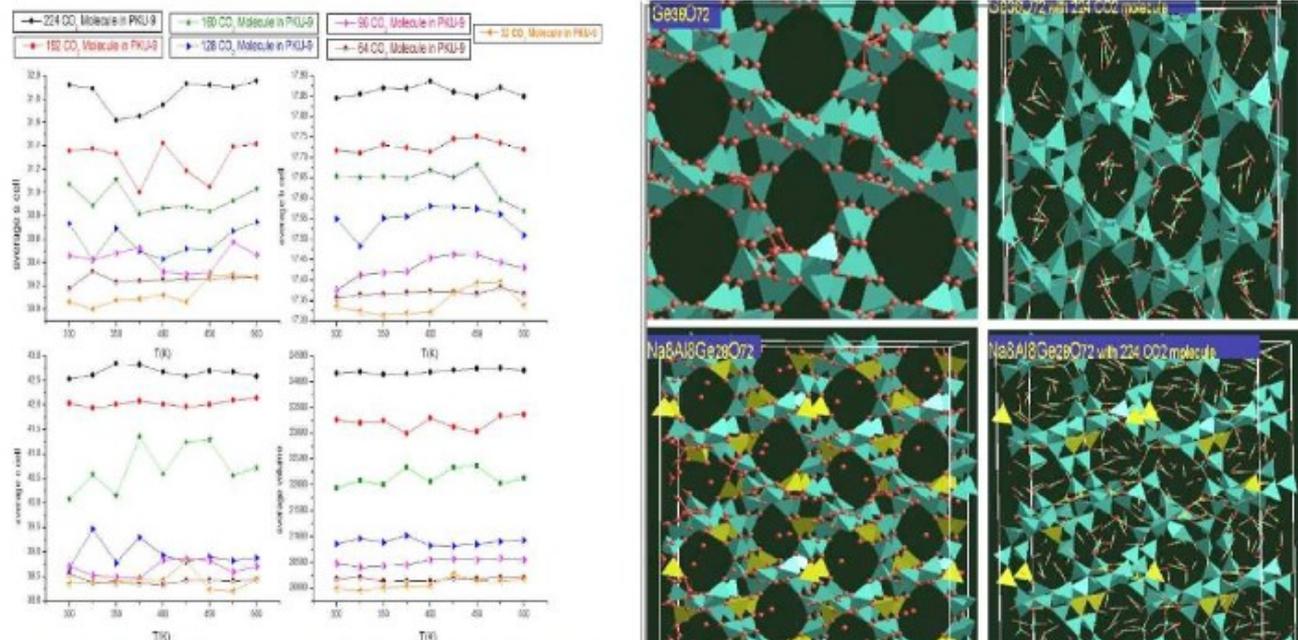
RNA architecture

Scientific Results

Loading-dependent diffusion of CO₂ in PKU-9 Zeolite nanoporous system: A molecular dynamics simulation study

Dr. Jorge Arce Molina, Dewi W. Lewis, **Higher Mining and Metallurgical Institute**, University of Readingknights, **UK**

Molecular dynamics simulation in order to understand the microscopic dynamics underlying the macroscopic properties of industrial interest such as the separation of mixtures of molecules.



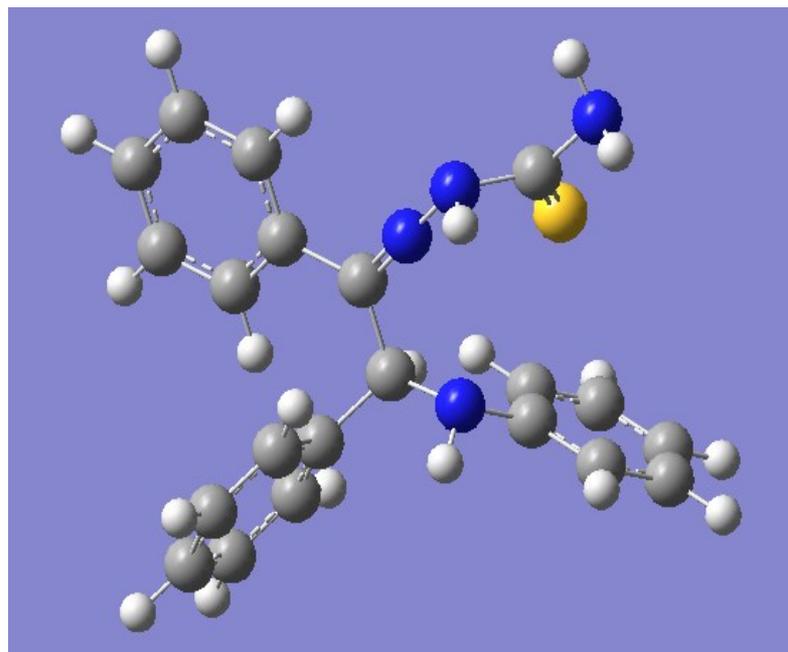
Scientific Results

***Ab initio* study of an organic molecule**

Dr. America Garcia, Wilfredo Valdes, Dept of Chemistry, University of Oriente

To find the most stable configuration of the molecule in dimethylsulfoxide.
46 atoms, 46 bond lengths, 46 angles, 46 dihedral angles.
494 basic Cartesian functions, 892 gaussian primitives, 178 parameters and
132 degrees of freedom.

Desktop with 16GB: “out of memory”
HPC UO: 15 minutes.



Scientific Results: more articles...

- Galpert, D.; del Río García, S.; Herrera, F.; Ancede Gallardo, E.; Antunes, A.; Agüero-Chapin, G., **An Effective Big Data Supervised Imbalanced Classification Approach for Ortholog Detection in Related Yeast Species**, BioMed Research International, vol. 2015, Article ID 748681, 12 pages, 2015. doi:10.1155/2015/748681.ISSN: 2314-6133 (Print) ISSN: 2314-6141 (Online). JCR Impact Factor 2014 IF = 1.579.
- Companioni Brito, C.; Galpert, D.; Ancede Gallardo, E.; Antunes, A.; Agüero-Chapin, G. (2015). **Esquema de evaluación de algoritmos supervisados y no supervisados de detección de genes ortólogos en levaduras Saccharomycete manejando el desbalance de los datos**. In: Memorias del Congreso Internacional de la Sociedad Cubana de Matemática y Computación (COMPUMAT 2015) Ciudad de la Habana, Cuba.
- Galpert, D.; del Río García, S.; Herrera, F.; Ancede Gallardo, E.; Antunes, A.; Agüero-Chapin, G. (2015). **Pairwise Ortholog Detection in Related Yeast Species by Using Big Data Supervised Classifications**. In: sciforum-00629: SECTION: Statistics, Artificial Intelligence, Data Science, Complex Networks Analysis - CONFERENCE MOL2NET. MDPI AG Basel Switzerland. <http://sciforum.net/conference/MOL2NET-1/page/allcontributions>
- E. O. Guerra, V. A. Reguera, R. D. Souza, E. G. Fernández, and M. E. Pellenz, **stematic construction of common channel hopping rendezvous strategies in cognitive radio networks**, EURASIP Journal on Wireless Communications and Networking, 2015:134, 2015.
- Nápoles, G.; Grau, I.; Bello, R., Grau, R. (2014) **Two-steps learning of Fuzzy Cognitive Maps for prediction and knowledge discovering on the HIV-1 drug resistance**. Expert Systems with Applications. Vol. 41, pp. 821-830. Elsevier. <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0957417413006246>
- Nápoles, G.; Grau, I.; Bello, R. (2014): **Determining positions associated with drug resistance on HIV-1 proteins: a computational approach**. 12th European Conference on Evolutionary Computation, Machine Learning and Data Mining in Computational Biology, EVOBio 2014. Lecture Notes in Computer Sciences 8602, pp. 902-914. Springer-Verlag. http://link.springer.com/chapter/10.1007/978-3-662-45523-4_73
- Grau, I.; Nápoles, G.; Garcia, M.M. (2013): **Predicting HIV-1 protease and reverse transcriptase drug resistance using Fuzzy Cognitive Maps**. Congress on Pattern Recognition, CIARP 2013. Part II, Lecture Notes in Computer Sciences 8259, pp. 190-197. Springer-Verlag. http://link.springer.com/chapter/10.1007/978-3-642-41827-3_24
- Análisis de la Escalabilidad del cálculo paralelo de medidas de similitud entre pares de genes**, Revista de Ciencias Informáticas. Vol. 10, No. 3, julio-septiembre, 2016. ISSN: 2227-1899. RNPS: 2301.<http://rcci.uci.cu>. Pág. 130-143

Strengthen sysadmin capacity

- Dedicated HPC group in each university (UCI, UCLV, UO)
- Workshops, presentations, trainings with **Belgian experts**

Build-up national user base

- Workshops for potential HPC users
- Dialogue with researchers to identify needs
- Identify potential partners: MES, pharma, research, hospitals,...
- Facilitate remote access

1st National HPC Sysadmin Workshop – February 2016, UCLV



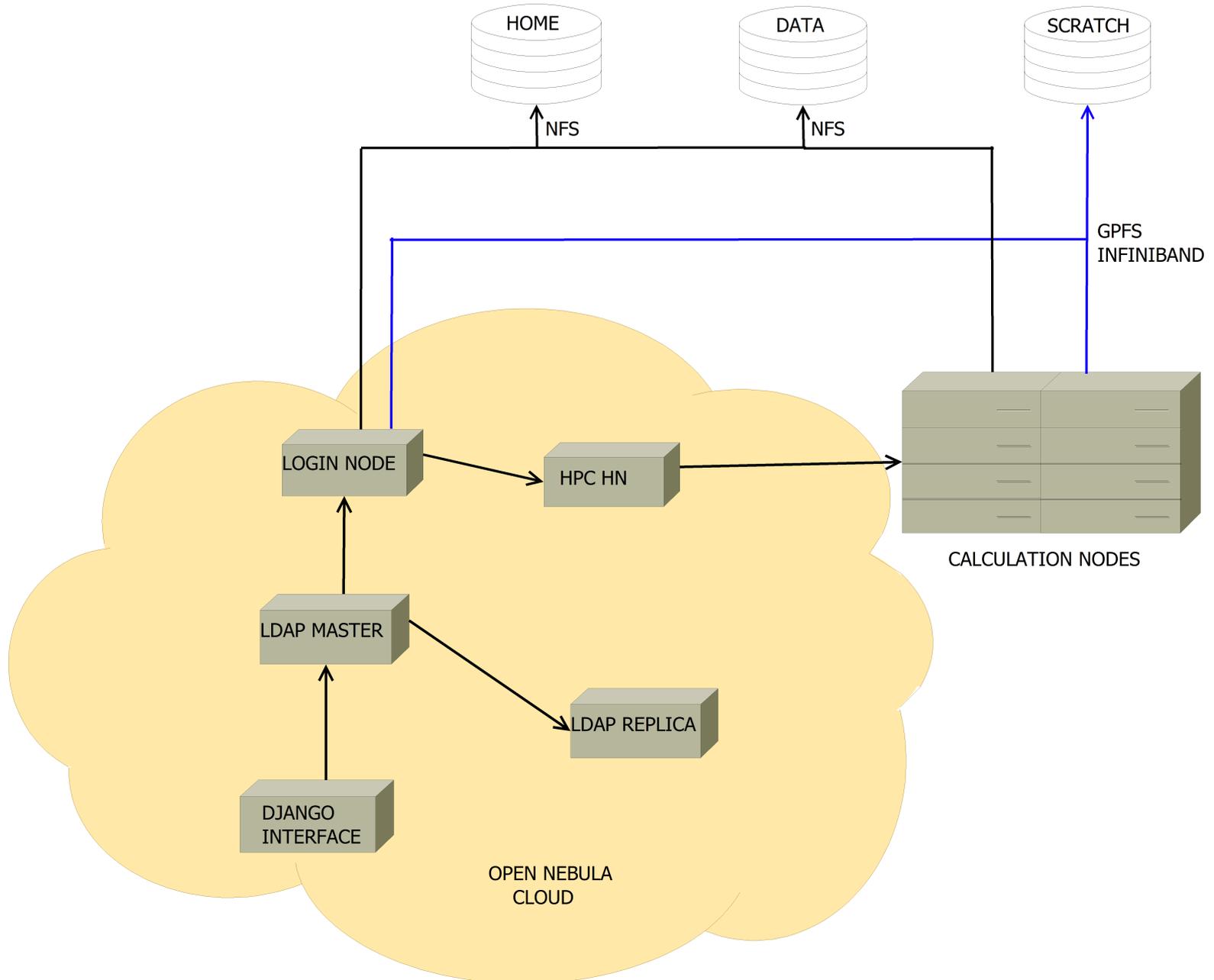
Obstacles

- Interconnectivity
- REDUNIV: separate channel for HPC
- Outside of MES: open SSH port 22 (filtered, IP/user specific)
- Frequent electrical outages
- US Trade Embargo (What will Trump do?)

Future Steps

- Central LDAP, master + replication
- National user portal (Django) for registration, job submission,...
- Storage Upgrade
- Train more local experts
- Make easy users package installations

USER MANAGEMENT



HPCUGENT.GITHUB.COM/EASYBUILD

- Easy installation of software on HPC
- Automatic resolving of dependencies
- International development community
- Set up Master Thesis programme
- Made in Cuba: e.g. Yade for EasyBuild

More Cuban developers are joining!



```
uclv.jrbosch@master:~$ module load EasyBuild
```

```
uclv.jrbosch@master:~$ eb Yade-1.20.0-foss-2016a-Python-2.7.11.eb --force --robot
```

```
== temporary log file in case of crash /tmp/eb-Hyy8RA/easybuild-VwYRYM.log
```

```
== resolving dependencies ...
```

```
== processing EasyBuild easyconfig /home/CLUSTER/uclv.jrbosch/easyconfigs/Yade/Yade-1.20.0-foss-2016a-Python-2.7.11.eb
```

```
== building and installing Yade/1.20.0-foss-2016a-Python-2.7.11...
```

```
== fetching files...
```

```
== creating build dir, resetting environment...
```

```
== unpacking...
```

```
== patching...
```

```
== preparing...
```

```
== configuring...
```

```
== building...
```

```
== testing...
```

```
== installing...
```

```
== taking care of extensions...
```

```
== postprocessing...
```

```
== sanity checking...
```

```
== cleaning up...
```

```
== creating module...
```

```
== permissions...
```

```
== packaging...
```

```
== COMPLETED: Installation ended successfully
```

```
== Results of the build can be found in the log file /home/CLUSTER/uclv.jrbosch/.local/easybuild/software/Yade/1.20.0-foss-2016a-Python-2.7.11/easybuild/easybuild-Yade-1.20.0-20160608.165428.log
```

```
== Build succeeded for 1 out of 1
```

```
== Temporary log file(s) /tmp/eb-Hyy8RA/easybuild-VwYRYM.log* have been removed.
```

```
== Temporary directory /tmp/eb-Hyy8RA has been removed.
```

```
uclv.jrbosch@master:~$ █
```

Human Capacity Building

- Training of Cuban HPC experts in Belgium
- Training of Cuban HPC experts **in Cuba**
- VLIR Funding
- Volunteer work
- Ticket, transport, accommodation, per diem
- Combine work with pleasure

We need HPC experts like you to join!

Get Involved!

Vision of HPC Cuba

To Make Supercomputing services available to all Cuban scientists

Contact

Hector Cruz Enriquez <hacruz@uclv.edu.cu>
Dieter Roefs <Dieter.Roefs@UGent.be>

