

arnes 



Aktivnosti na področju superračunalništva v Sloveniji

Damjan Harisch, Arnes

Dejan Valh, Institut informacijskih znanosti

dr. Matej Praprotnik, Kemijski inštitut

Mreža znanja 2020, 25. in 26. november



EVROPSKA UNIJA
EVROPSKI SKLAD ZA
REGIONALNI RAZVOJ
NALOŽBA V VAŠO PRIHODNOST

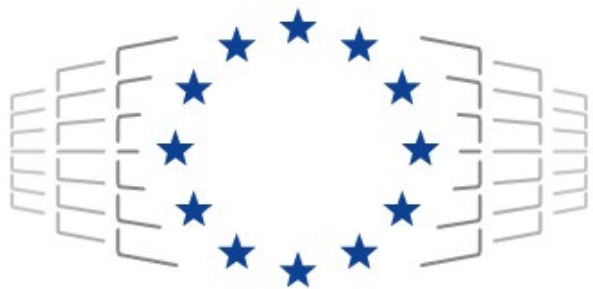


REPUBLIKA SLOVENIJA
MINISTRSTVO ZA IZOBRAŽEVANJE,
ZNANOST IN ŠPORT

Naložbo sofinancirata Republika Slovenija in Evropska unija iz Evropskega sklada za regionalni razvoj

Agenda

1. EuroHPC iniciativa in kompetenčni centri
2. Arnes/SLING kot nacionalni kompetenčni center
 - kompetence, podpora uporabnikom, izobraževanja, sodelovanje z industrijo
3. Nadgradnja Arnesove gruče
4. Superračunalniki operacije HPC RIVR v Sloveniji
 - Trdina, Maister, Vega
5. Aktivnosti koordinacijskega odbora SLING
6. Pravila odprtega dostopa do računskih zmogljivosti



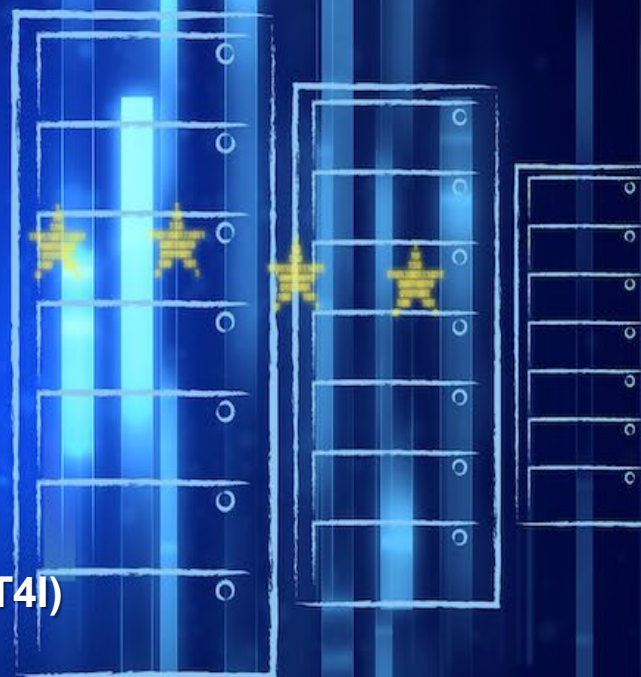
EuroHPC
Joint Undertaking

PRE-EXASCALE SUPERRAČUNALNIKI

- Barcelona Supercomputing Centre, Španija
- CSC – IT Center for Science, Finska (Lumi)
- CINECA, Italija (Leonardo) [SLING]

PETASCALE SUPERRAČUNALNIKI

- IZUM, Slovenija (Vega)
- Sofiatech, Bolgarija
- IT4Innovations National Supercomputing Center, Češka (Euro IT4I)
- Luxprovide, Luksemburg (MeluXina)
- Minho Advanced Computing Centre, Portugalska





NACIONALNI KOMPETENČNI CENTRI HPC

- 34 držav

PODROČJA

- Znanost
- Gospodarstvo (SMP)
- Javne storitve





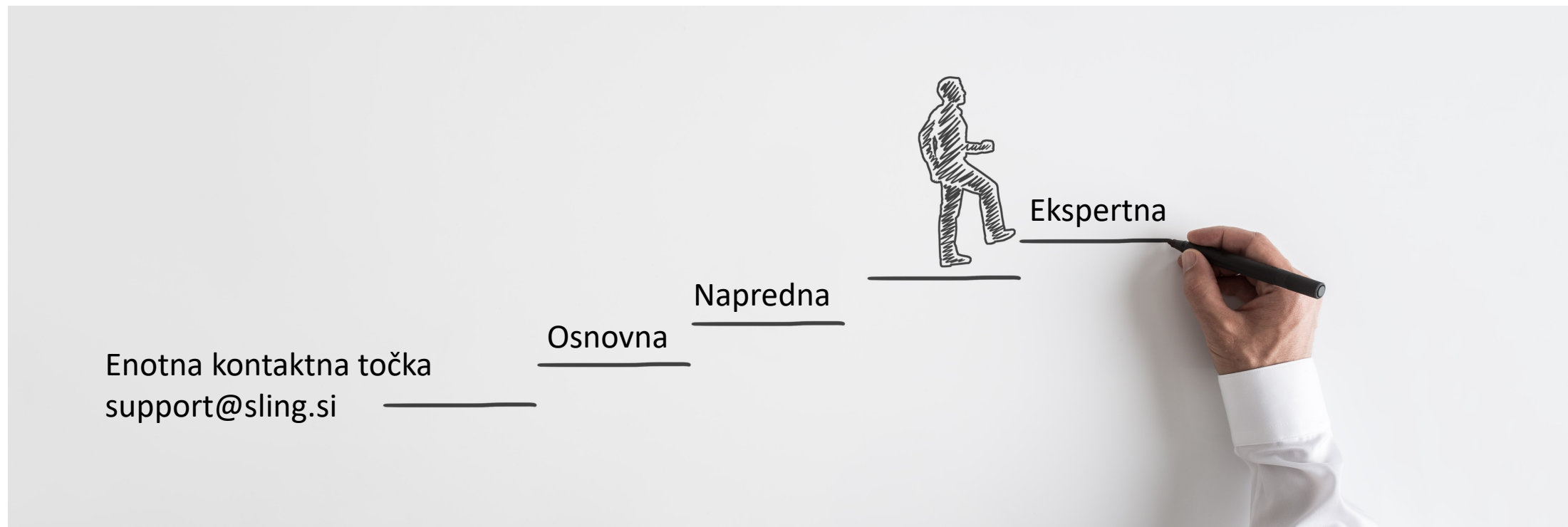
Univerza v Ljubljani



Kompetence

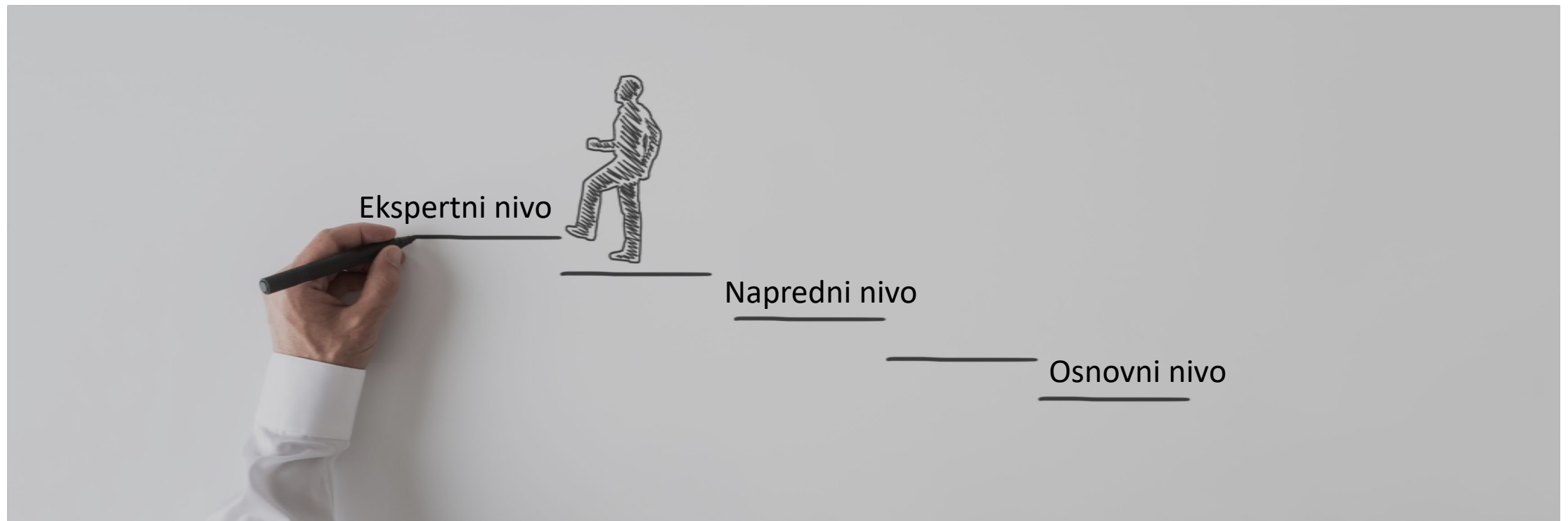


Uporabniška podpora



Izobraževanja

- Treningi
- Seminarji



Sodelovanje z industrijo (srednja in mala podjetja)



NADGRADNJA ARNESOVE GRUČE HPC:

- Novo, hitrejše in večje diskovno polje za podatke
- Nova generacija procesorjev (AMD Epyc Zen2 Rome)
- Do 10 GB pomnilnika na jedro
- Večje število grafičnih pospeševalnikov (50 x Nvidia Tesla V100 16GB)
- Hitro interno omrežje (25/100 Gbit/s) za razpršene obdelave
- Sistem bo podpiral računsko intenzivne obdelave, gradnjo modelov za umetno inteligenco in številna druga raziskovalna področja.
- Sistem bo vključen v Slovensko nacionalno superračunalniško omrežje SLING in dostopen pod pogoji odprtega dostopa SLING.

Superračunalniki operacije HPC RIVR v Sloveniji



REPUBLIKA SLOVENIJA
MINISTRSTVO ZA IZOBRAŽEVANJE,
ZNANOST IN ŠPORT



EVROPSKA UNIJA
EVROPSKI SKLAD ZA
REGIONALNI RAZVOJ
NALOŽBA V VAŠO PRIHODNOST



EuroHPC
Joint Undertaking

- **Trdina**, Fakulteta za informacijske študije Novo Mesto, operacija HPC RIVR
- **Maister**, Univerza v Mariboru, HPC RIVR
- **Vega**, Institut informacijskih znanosti Maribor, HPC RIVR + Euro HPC JU (6 MEUR)



Fakulteta za
informacijske študije
Faculty of information studies



Univerza v Mariboru

IZUM
Institut informacijskih znanosti, Maribor

Superračunalnik Maister



SKUPNA ZMOGLJIVOST 244 TFLOPS

SPLOŠNA RAČUNSKA PARTICIJA:

- 76 računskih vozlišč s procesorji s skupno 4.256 računskimi jedri
- dva procesorja AMD EPYC 32C/64T 7501, 2.0 GHz) na vozlišče
- pomnilnik 512 GB DDR4 (8 GB na jedro) na vozlišče
- dva diska 960 GB SATA SSD na vozlišče

VEKTORSKA RAČUNSKA PARTICIJA:

- 6 računskih vozlišč s skupno 122.880 jedri GPU
- dva procesorja Intel Gold SKL-SP 6128 6C/12T, 3.4 GHz, na vozlišče
- pomnilnik 256 GB DDR4 na vozlišče,
- dva diska 480 GB SATA SSD na vozlišče,
- štiri grafične kartice NVIDIA TESLA V100 32G (5.120 jeder na GPU).

HITRO DISKOVNO POLJE kapacitete 138 TB SSD in

TRAJNO PODATKOVNO POLJE 2 PB HDD (CEPH z vmesniki POSIX, mrežni disk, S3);

POVEZAVA z Ethernet 100 Gb/s in z 2 x 100 Gb/s Infiniband HDR omrežjem.





EuroHPC
Joint Undertaking

- Razpis od aprila do julija 2020
- Vrednost 17,2 M EUR
- Podpis pogodbe z dobaviteljem Atos 1. 10. 2020
- Predviden zagon marec 2021

IZUM
Institut informacijskih znanosti, Maribor



V E G A

H P C



Superračunalnik Vega

DELOVNA ZMOGLJIVOST (R_{max}): 6,8 petaflops (CPU+GPU=>3,8+3)

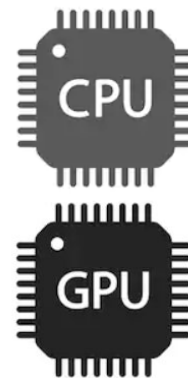
NAJVIŠJA ZMOGLJIVOST (R_{peak}): 10,1 petaflops

RAČUNSKA PARTICIJA CPU:

- 960 vozlišč skupaj, dva procesorja na vozlišče,
- skupaj 1920 procesorjev ali 122.800 jeder

RAČUNSKA PARTICIJA GPU:

- 60 vozlišč, štiri grafične kartice na vozlišče
- 240 grafičnih kartic (1.658.880 CUDA FP32 jeder)



VISOKOZMOGLJIVI DISKOVNI SISTEM:

- skupna (surova) kapaciteta 1 PB
- diski NVMe z visoko vzdržljivostjo DWPD=3
- paralelni distribuirani datotečni sistem Lustre



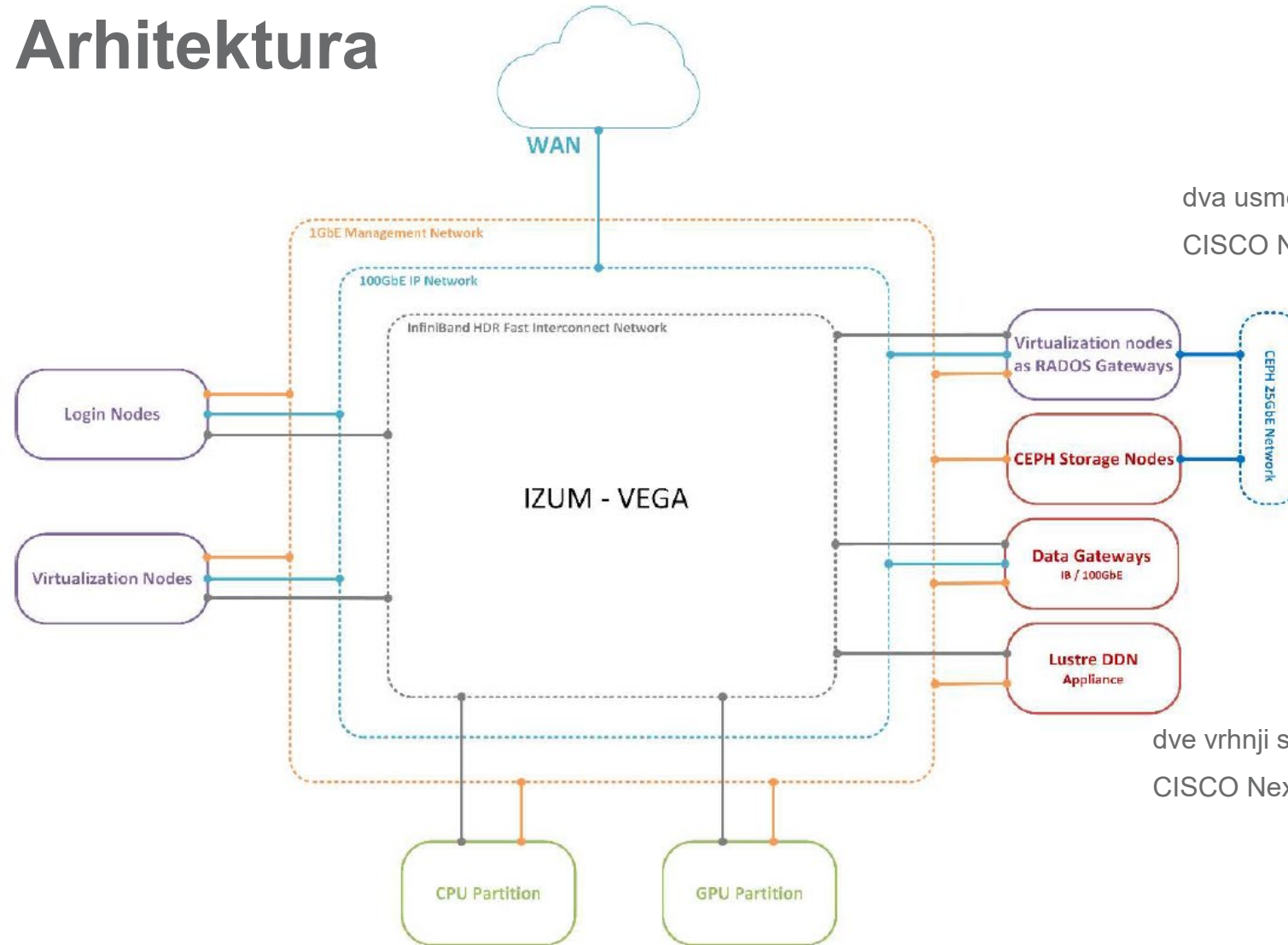
DISKOVNI SISTEM Z VELIKO KAPACITETO:

- za trajno shranjevanje
- skupna (surova) kapaciteta 23 PB (uporabna 18 PB)
- rešitev Ceph za blokovni in datotečni dostop do diskovnih kapacitet



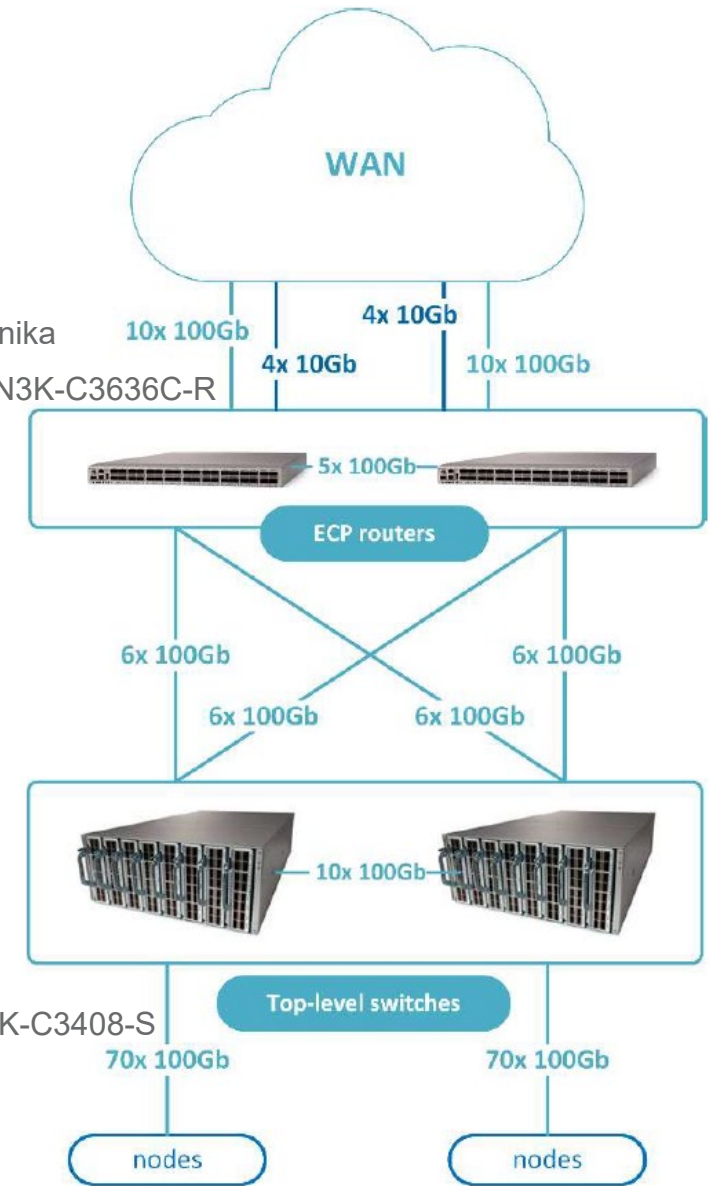
 BullSequana XH2000

Arhitektura



dva usmerjevalnika

CISCO Nexus N3K-C3636C-R

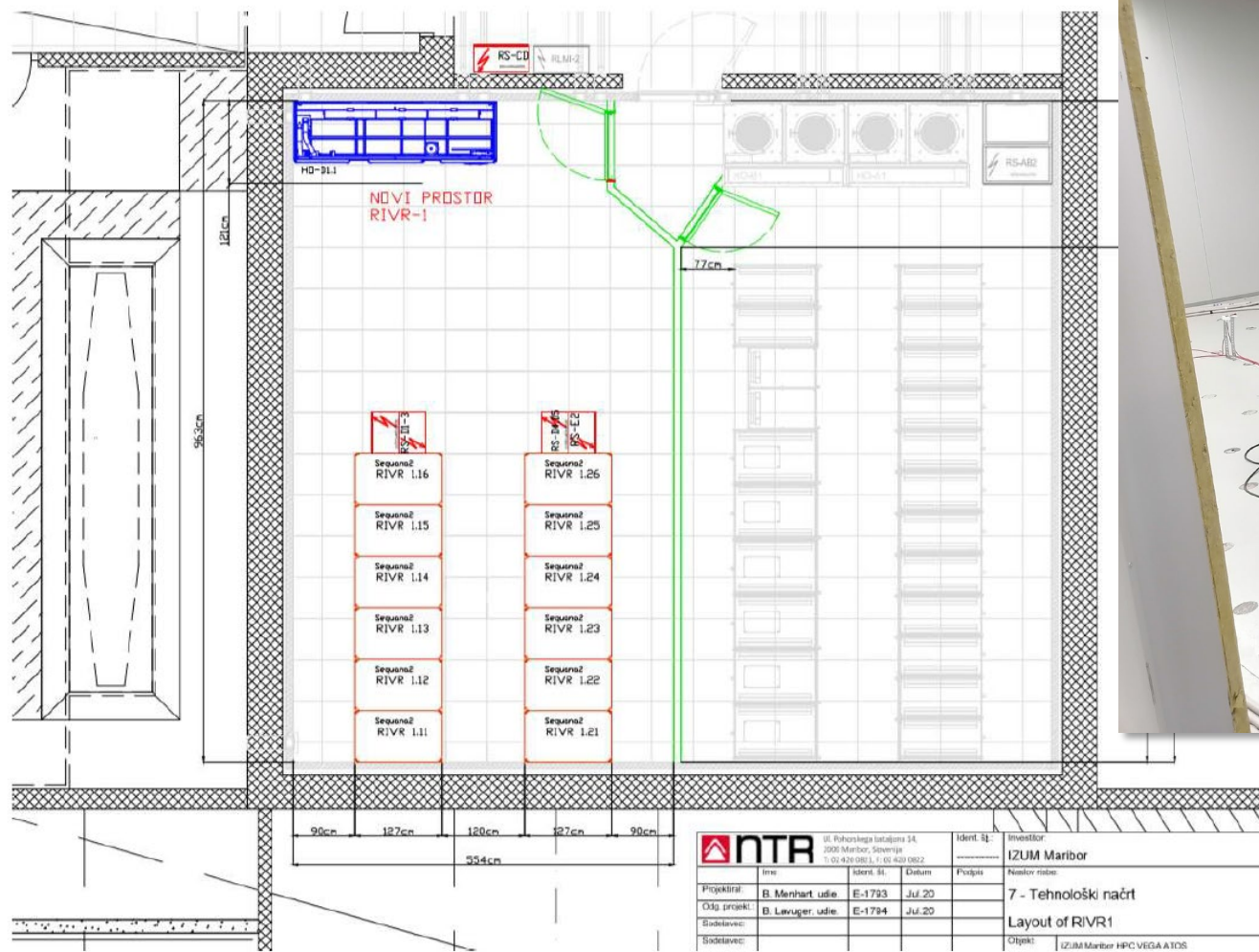


dve vrhnji stikali

CISCO Nexus N3K-C3408-S

RIVR 1 Layout

Umestitev (1)



Skupna poraba električne energije:
830 kW od skupnih 938 kW
 Predviden izkoristek električne moči RIVR1
 (Power Usage Effectiveness - PUE): **1,12**

Strežniški kabineti hlajeni s tekočino

PDU + Power Management Controller

Up to 6 x 15kW PSU shelves
DLC & hot-pluggable

Up to 32 compute blades
Technologies provided by:

- Intel
- Nvidia
- ARM
- AMD

DLC & hot-pluggable

Up to 3 Hydraulic chassis for Direct Liquid Cooling

- Inlet water temperature up to 40°C
- N+1 redundancy



42U cabinet front view



42U cabinet rear view

4 to 20 Blades on the front side

4 to 12 Blades on the rear side

Up to 2 Management network switches
hot-pluggable

Up to 10 Interconnect Network Switches Technologies:

- BXI
- Mellanox HDR
- High-speed Ethernet

DLC & hot-pluggable

Flexible mid plane
Allows for:

- routing customization
- mixed interconnect bandwidths
- two possible topologies (Full Fat Tree and DragonFly+)



The BullSequana XH2000 cabinet

Računska vozlišča hlajena s tekočino

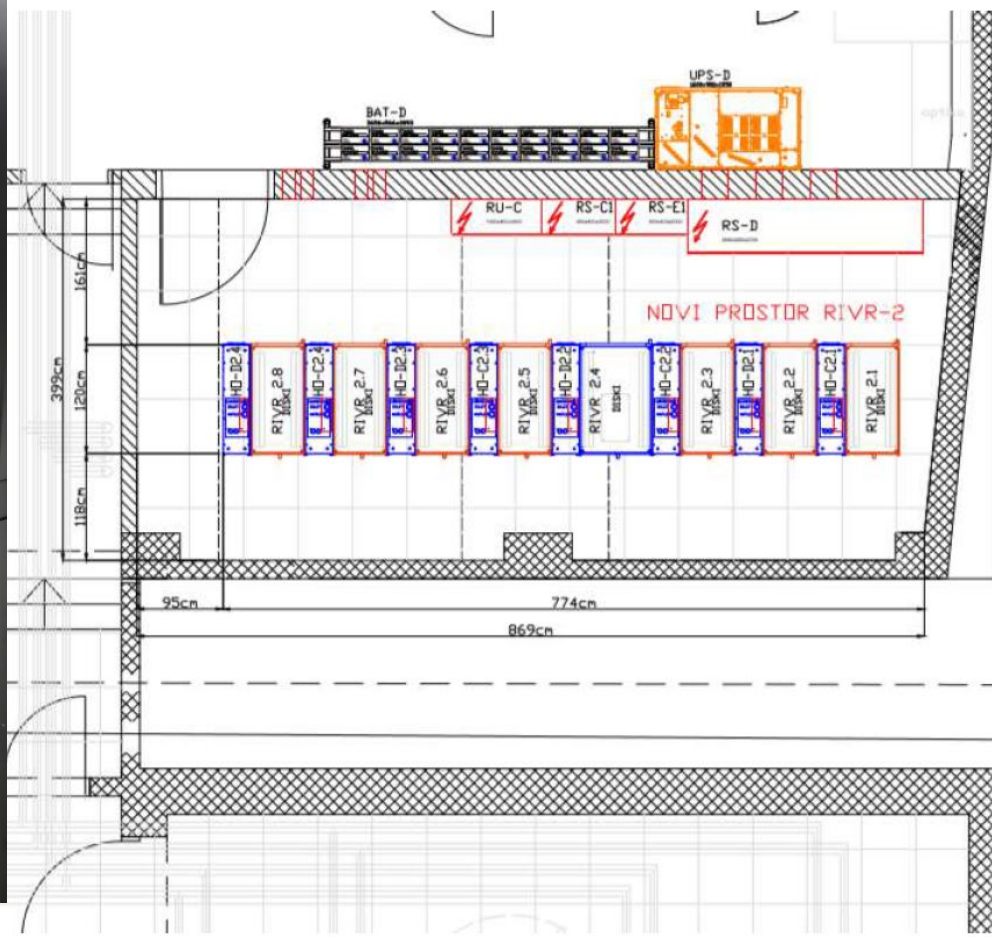


- 320 računskih rezin s tremi vozlišči CPU
- 80% ali 768 vozlišč z 256 GB pomnilnika DDR4 na vozlišče
- 20 % ali 192 vozlišč (20%) s 512 GB pomnilnika na vozlišče
- dva procesorja AMD Epyc 7H12 s 64 jedri, frekvence 2.6 GHz, porabe 280 W
- en lokalni disk 1.92 TB M.2 SSD
- povezljivost 1 x 100 Gb/s, Infiniband HDR100

- 60 računskih rezin z enim vozliščem GPU
- vsa vozlišča z 512 GB pomnilnika DDR4
- enaki procesorji in diski kot pri vozliščih CPU
- povezljivost 2 x 100 Gb/s, Infiniband HDR100
- štiri grafične kartice Nvidia A100:
 - pomnilnik HBM2 kapacitete 40 GB
 - prepustnost pomnilnika 1555 GB/s
 - 108 procesorjev Stream
 - 6912 jeder FP32 CUDA
 - 6912 jeder INT32 CUDA
 - 3456 jeder FP64 CUDA
 - 432 novih jeder Tensor

RIVR 2 Layout

Umestitev (2)

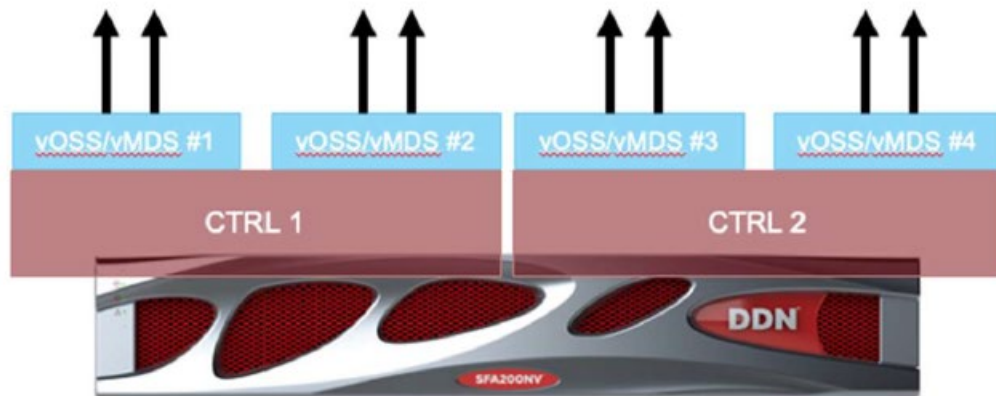


Poraba električne energije: **108 kW**

Predviden izkoristek električne moči v RIVR2: **1,66**

SKUPNI PREDVIDEN IZKORISTEK ELEKTRIČNE MOČI (RIVR1+RIVR2): 1,182

Diskovne kapacitete (zračno hlajenje)

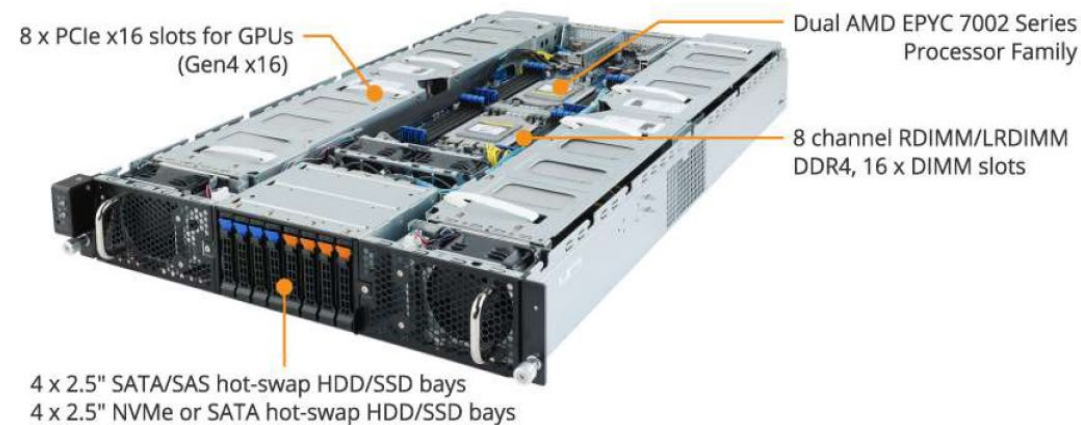


- 10 sistemov DDN
- 23 diskov 6.4 TB NVMe na sistem
- uporabne kapacitete 111 TB na sistem
- 4 vgrajeni virtualni strežniki za Lustre
- povezljivost 8 x 100 Gb/s, Infiniband HDR100

- 61 vozlišč za shranjevanje podatkov
- vsa vozlišča z 256 GB pomnilnika DDR4
- dva procesorja Intel 4214R (12 jeder, 2.4 GHz, 100 W)
- dva diska 6,4 TB NVMe za sistem
- 24 diskov 16 TB
- povezljivost 2 x 25 Gb/s Ethernet (do privatnega internega omrežja Ceph, naprej večkrat 100 Gb/s)

Zahtevana prepustnost obdelave podatkov je do 400 GB/s s hitrim visokozmogljivim diskovnim sistemom in do 200 GB/s diskovnim sistemom velike kapacitete.

Vozlišča za prijavo



- 4 vozlišča za prijavo (CPU login node)
- 256 GB pomnilnika DDR4 na vozlišče
- enaka procesorja kot v računskem vozlišču CPU (7H12)
- dva lokalna diska 7.6 TB NVMe
- povezljivost:
 - 1 x 100 Gb/s, Infiniband HDR100
 - 2 x 100 Gb/s, Ethernet

- 4 vozlišča za prijavo (GPU login node)
- 256 GB pomnilnika DDR4 na vozlišče
- procesor AMD Epyc 7452 (32 jeder, 2.35 GHz, 155W)
- ena grafična kartica Nvidia A100
- dva lokalna diska 7.6 TB NVMe
- povezljivost:
 - 1 x 100 Gb/s, Infiniband HDR100
 - 2 x 100 Gb/s, Ethernet

Vozlišča za virtualizacijo in servisne strežnike

- 30 vozlišč za virtualne gostitelje in za servisne strežnike
- 512 GB pomnilnika DDR4 na vozlišče
- dva procesorja AMD Epyc 7502 (32 jeder, 2.5 GHz, 180 W)
- dva lokalna diska 7.6 TB NVMe
- povezljivost:
 - 1 x 100 Gb/s, Infiniband HDR100
 - 2 x 100 Gb/s, Ethernet

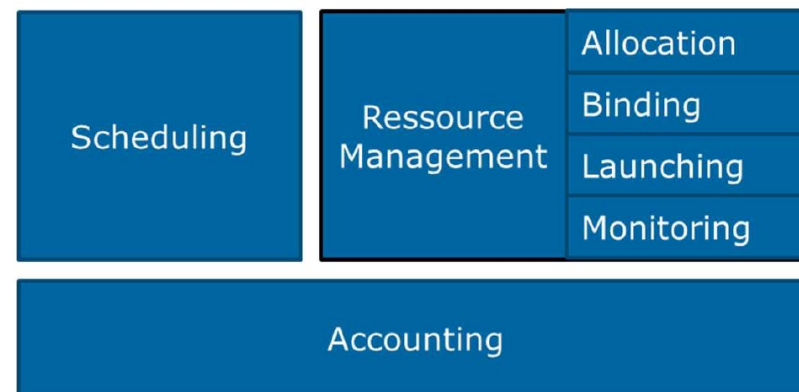
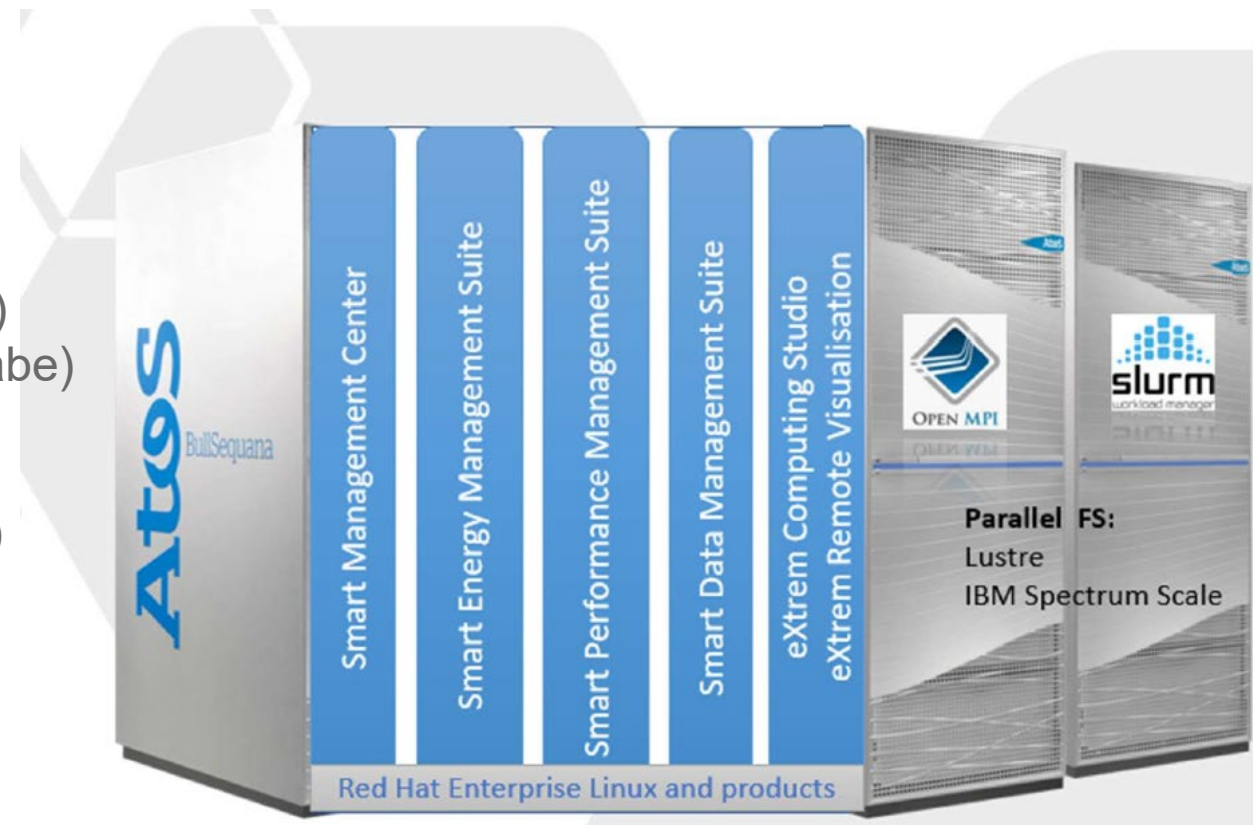


Ostale tehnološke posebnosti arhitekture

- Infiniband topologija Dragonfly+
- Štiri naprave za prehod prometa IP med nizkolatenčnim omrežjem Infiniband in omrežjem Ethernet
- 10 PFLOPS (max) pri porabi 1 MW na približno 100 m²
- HPC Vega bi se danes uvrstil med 50 najhitrejših superračunalnikov na svetu

Programska oprema

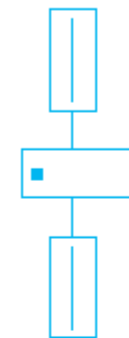
- Atos Smart Management Center (upravljanje)
- Atos Bull Energy Optimizer (optimizacija porabe)
- Atos Performance Toolkit (spremljanje zmogljivosti)
- Red Hat Enterprise Linux (operacijski sistem)
- BlueBanquise and Ansible (orkestracija)
- Red Hat Virtualization (virtualizacija)
- Bull Slurm (razporejanje računskih kapacitet)
- Singularity (vsebniki)
- Icinga, Prometheus (nadzor)
- ...
- Intel Parallel Studio XE Cluster Edition Linux (8)
- 400 Matlab licenc (ločeno nabavljeno v okviru projekta HPC RIVR)



Primeri uporabe HPC (Vega in ostalih)

- učenje algoritmov v okviru strojnega učenja in umetne inteligence,
- testiranje optimizacijskih algoritmov za probleme z velikim številom spremenljivk,
- obdelave in izgradnja jezikovnih modelov in analiza besedil,
- analiza medicinskih slik in razvoj modelov v medicinski fiziki,
- obdelava posnetkov iz kriomikroskopije,
- personalizirana medicina ter bioinformatika v genomiki in proteomiki,
- računska kemija in raziskave molekul in materialov iz osnovnih načel («kvantna kemija»),
- simulacija in analiza biomolekularnih sistemov in bioloških makromolekul,
- simulacije fluidov in vedenja materialov,
- preračuni za jedrske reaktorje in računalniške simulacije plazme,
- izdelava simulacij in analiza rezultatov s trkalnikov na področju fizike osnovnih delcev,
- simulacije kvantnih več delčnih sistemov na področju fizike močno koreliranih elektronskih sistemov,
- simulacije in analiza vremenskih in podnebnih podatkov in modelov

**MACHINE
LEARNING**



**OPEN
SCIENCE DATA**



**ADVANCED
MODELS**



GENOMICS



HUMANITIES



CHEMISTRY



PHYSICS





Aktivnosti koordinacijskega odbora SLING

- Delovanje strokovnega foruma SLING
- Mednarodno sodelovanje
 - EuroHPC, PRACE, EGI, ...
 - mednarodna konferenca ASHPC21
- Pravila dostopa do računskih zmogljivosti
 - odprti dostop
 - industrijski dostop
 - dostop širše skupnosti (Community Access)

Aktivnosti strokovnega foruma SLING

- srečanja, strokovne delavnice, medsebojni prenos znanja,
- ekspertna izobraževanja (RHEL, Ceph, RHEV, Ansible, Atos SW for Vega ...),
- priprava navodil za uporabnike,
- svetovanje pri implementaciji sistema Vega,
- priprava sistema za podporo uporabnikom na nacionalni ravni.



IMPORTANT DATES

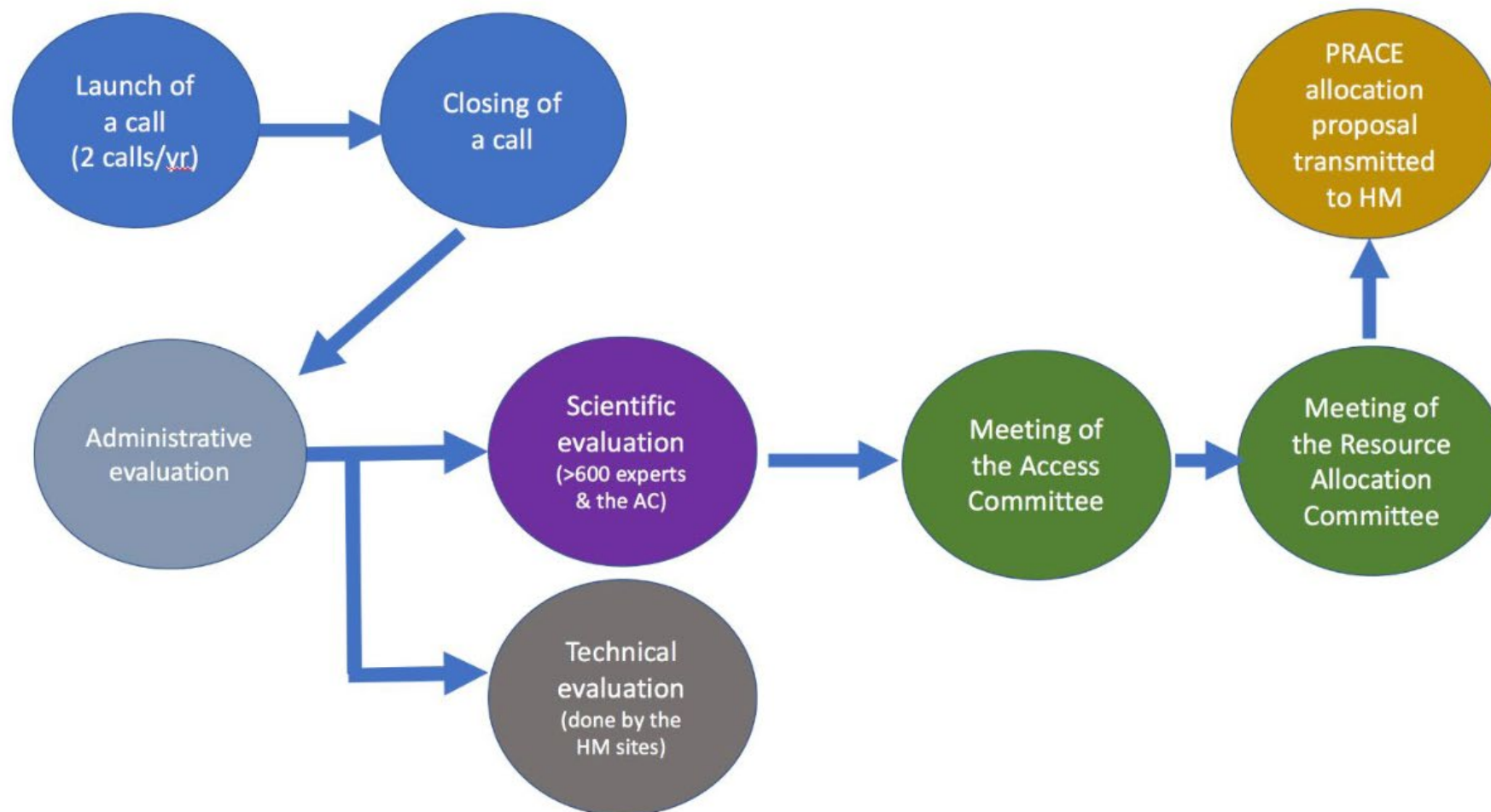
- ✓ Mid of January'21 → call for contributions
- ✓ Mid of March'21 → submission deadline for contributed papers and posters
- ✓ Mid of April'21 → communicate decision about acceptance as a talk or poster to authors
- ✓ End of April'21 → decision about conference mode depending on the COVID-19 situation: on-site & virtual or virtual only

ASHPC21

Welcome to the first Austrian-Slovenian HPC Meeting
May 31st – June 2nd, 2021

Pravila odprtega dostopa (povzeto po PRACE)

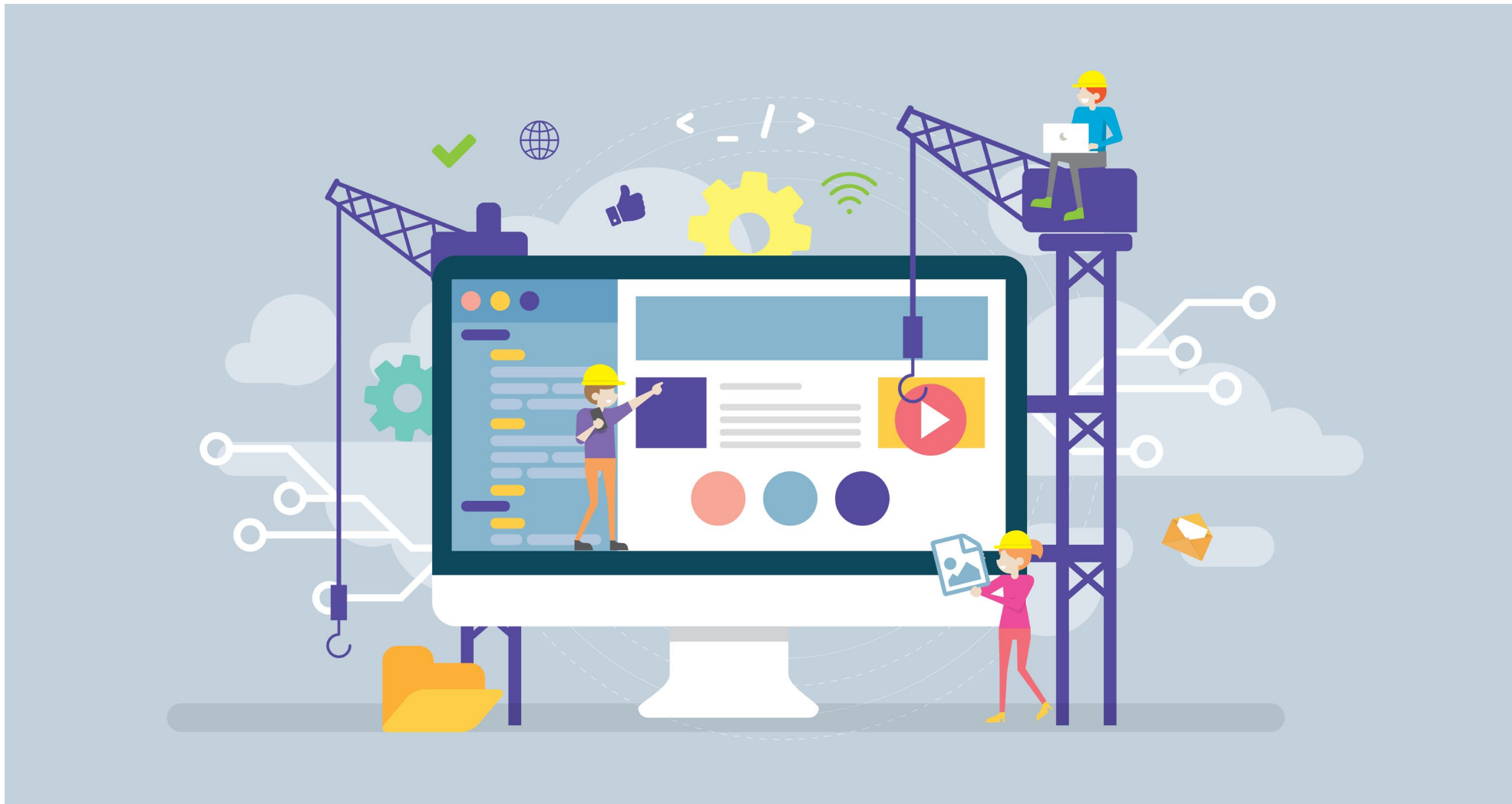
Review process overview & administrative assessment



Povzetek pravil odprtega dostopa

- **KOMISIJA ZA DOSTOP:** predsednik, podpredsednik, panel ekspertov (znanstvene discipline)
- **TIPI DOSTOPOV:** nacionalni odprti dostop SLING (1), namenska lastniška uporaba (2), souporaba po dogovoru (3)
- **ALOKACIJA VIROV:** računske (1), diskovne (2), omrežne (3) kapacitete in zahteve po ekspertni pomoči uporabnikom (4)
- **UPRAVIČENOST:** vsi, ki imajo dostop do omrežja Arnes (1), industrijski raziskovalni centri (2), tuji raziskovalci vpleteni v domače projekte (3), s strani domačih entitet potrjeni veliki mednarodni znanstveni in raziskovalni centri (4)
- **TIPI PROJEKTOV:**
 - Razred A: Zelo veliki projekti tipa PRACE (velikostni razred do 10 mio jeder ur)
 - Razred B: Običajni projekti (recimo do 1,5 mio jeder ur)
 - Razred C: Razvojni projekti za raziskave in testiranje (100 k jeder ur)
 - Razred D: Projekti za merjenje zmogljivosti, testiranje, razvoj in skaliranje (10 k)
- **POROČILA IN PONOVI DOSTOPI:**
 - Poročila glede na tip projekta, možna obnova

Vsi dosedanji uporabniki bodo uvrščeni v tipe projektov razreda D ali C.



www.sling.si
www.sling.si/sling/eurocc

Vprašanja?

damjan.harisch@arnes.si

dejan.valh@izum.si

matej.praprotnik@ki.si

arnes 