

Εθνική Υπερυπολογιστική Υποδομή ARIS

Ευάγγελος Φλώρος
Εθνικό Δίκτυο Έρευνας και Τεχνολογίας

Δημοκρίτειο Πανεπιστήμιο Θράκης, 24/5/2017

ΕΔΕΤ σε 1'

Πάροχος Internet για τα Ελληνικά Πανεπιστήμια και Ερευνητικά Κέντρα

- 87 σημεία παρουσίας
- 8410 χλμ. οπτικής ίνας
- Διασύνδεση στο πανευρωπαϊκό δίκτυο υψηλών ταχυτήτων GEANT
- GR-IX – Ελληνικό Internet Exchange Point (IXP)

Υπολογιστικές Υπηρεσίες

- Grid Computing
- Cloud Computing
- **High Performance Computing**



- Ο όρος Υπολογιστική Υψηλών Επιδόσεων (High-Performance Computing) αναφέρεται στη χρήση συστημάτων υψηλής κλίμακας για την επίλυση προβλημάτων που απαιτούν μεγάλη υπολογιστική ισχύ.
- **Συνώνυμο της Παράλληλης Επεξεργασίας.** Ένα υπερυπολογιστής αποτελείται από χιλιάδες ή και εκατομμύρια επεξεργαστές συνδεδεμένους μεταξύ του οι οποίοι χρησιμοποιούνται ταυτόχρονα ένα πρόγραμμα κατά την εκτέλεσή του

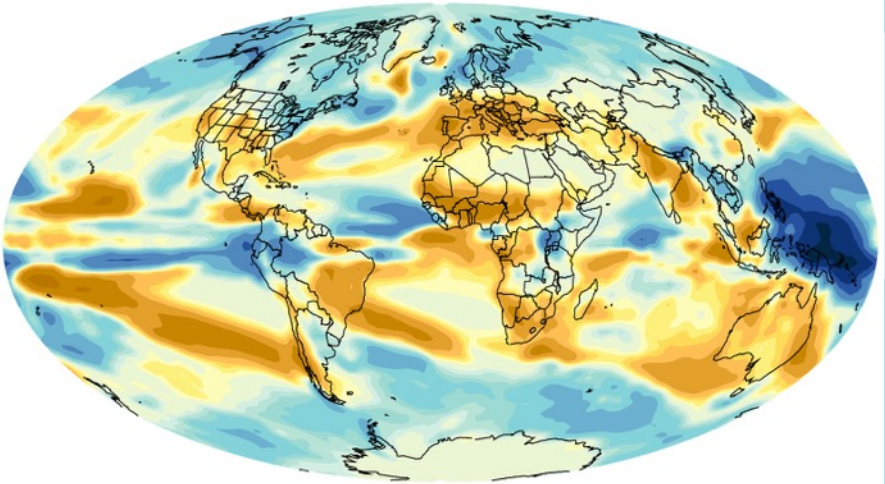
Υπολογιστική Επιστήμη: Ο 3^{ος} πυλώνας της επιστήμης (μαζί με Θεωρία και Πείραμα)

Χρήση μαθηματικών μοντέλων και υπολογισμών για την προσομοίωση περίπλοκων φυσικών φαινομένων:

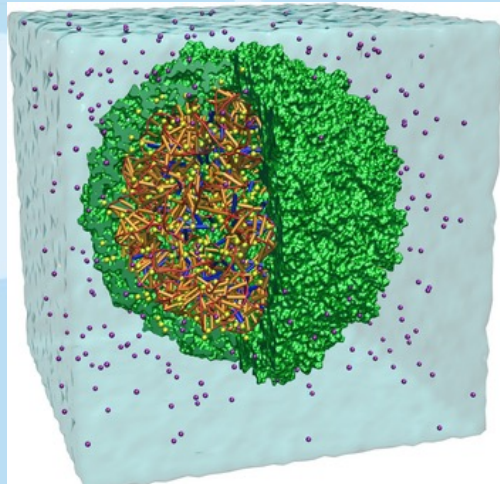
Ασφάλεια, Οικονομία, Ευελιξία, Βελτίωση ακρίβειας, Ελάττωση χρόνου ανάπτυξης.

“Today to out-compete is to out-compute”

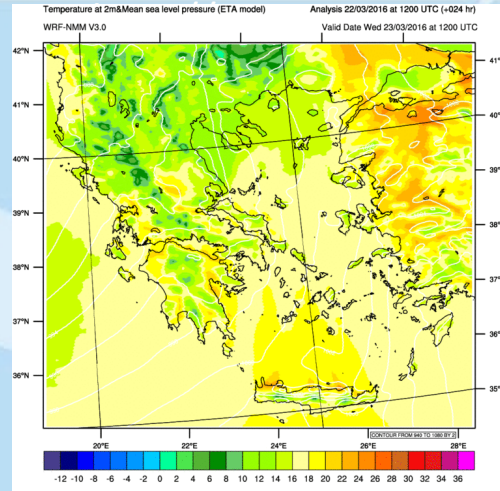
Ενδεικτικά Πεδία εφαρμογών



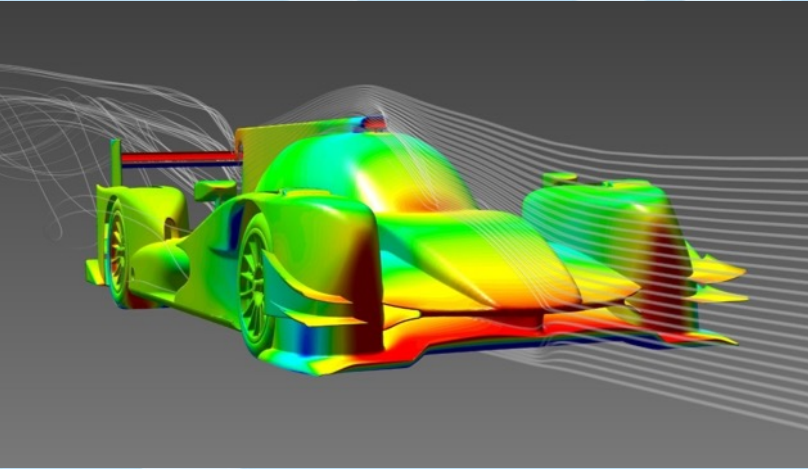
Κλιματολογία – Περιβάλλον



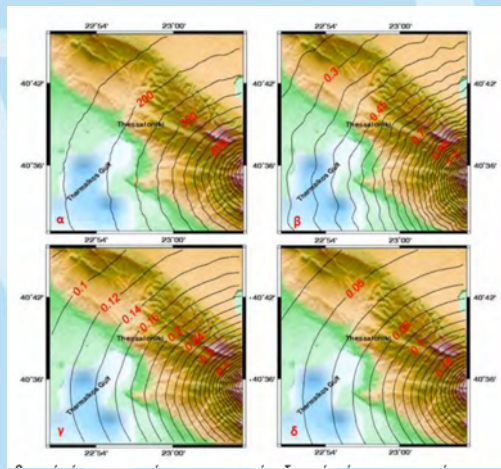
Βιοπληροφορική -
Επιστήμες Ζωής



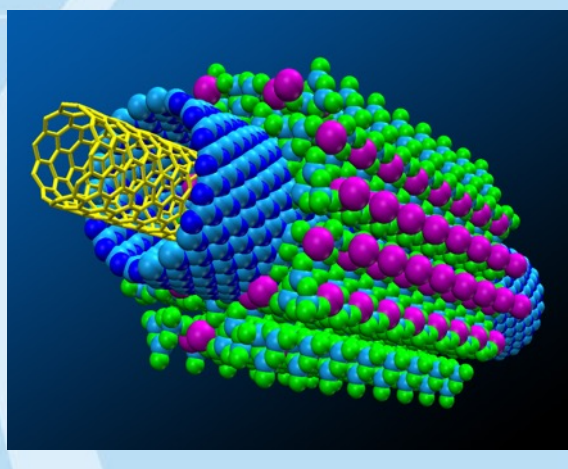
Μετεωρολογία



Μηχανική – Ρευστοδυναμική



Σεισμολογία



Τεχνολογία Υλικών

Partnership for Advanced Computing in Europe

- Διεθνής οργανισμός με έδρα τις Βρυξέλλες.
- Συντονίζει την ανάπτυξη των υποδομών HPC στην Ευρώπη
- Προσφέρει πρόσβαση σε υποδομές επιπέδου Petaflop (Tier-0)



HPC part of the ESFRI Roadmap; creation of a vision involving 15 European countries



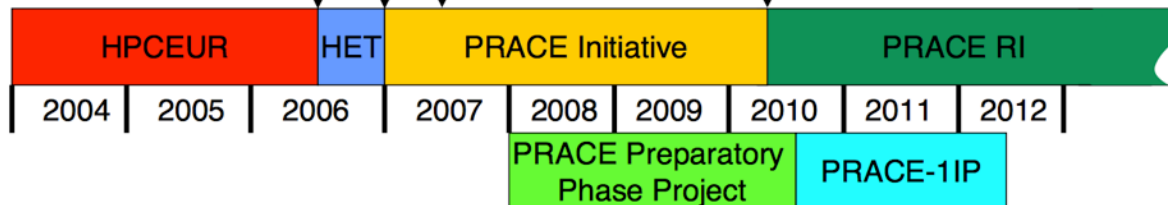
Ελλάδα ιδρυτικό μέλος ως non-hosting member

ΓΓΕΤ προκηρύσσει έργα για τη δημιουργία ερευνητικών δικτύων για το ESFRI

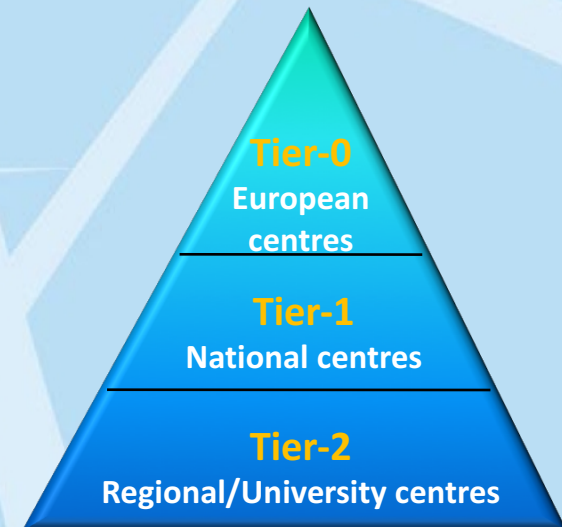
Creation of the Scientific Case

Signature of the MoU

Creation of the PRACE Research Infrastructure



2



«PRACE-GR Ανάπτυξη Εθνικής Υπερυπολογιστικής Υποδομής και Παροχή Συναφών Υπηρεσιών στην Ελληνική Ερευνητική και Ακαδημαϊκή Κοινότητα» - MIS 379417

ΠΕΠ «Αττική», ΑΞΟΝΑΣ ΠΡΟΤΕΡΑΙΟΤΗΤΑΣ 3: «Ενίσχυση της ανταγωνιστικότητας της καινοτομίας και της ψηφιακής σύγκλισης»



Στόχοι έργου

- Ανάπτυξη υπερυπολογιστικής υποδομής στην Ελλάδα για την **πραγματοποίηση Έρευνας υψηλού επιπέδου** και Ισχυροποίηση του ρόλου της Ελλάδας στον τομέα των Υπερυπολογιστών σε Πανευρωπαϊκό επίπεδο.
- Εκμετάλλευση από **μεγάλο εύρος επιστημονικών πεδίων**.
- Έμφαση στις εφαρμογές υψηλής κλιμάκωσης (μεγάλη παραλληλία).
Χρήση μοντέλων προγραμματισμού MPI και OpenMP
- Επεκτασιμότητα

«Παροχή ψηφιακών υπηρεσιών μέσω της δημιουργίας ενεργειακά αποδοτικού κέντρου δεδομένων» - MIS 311568

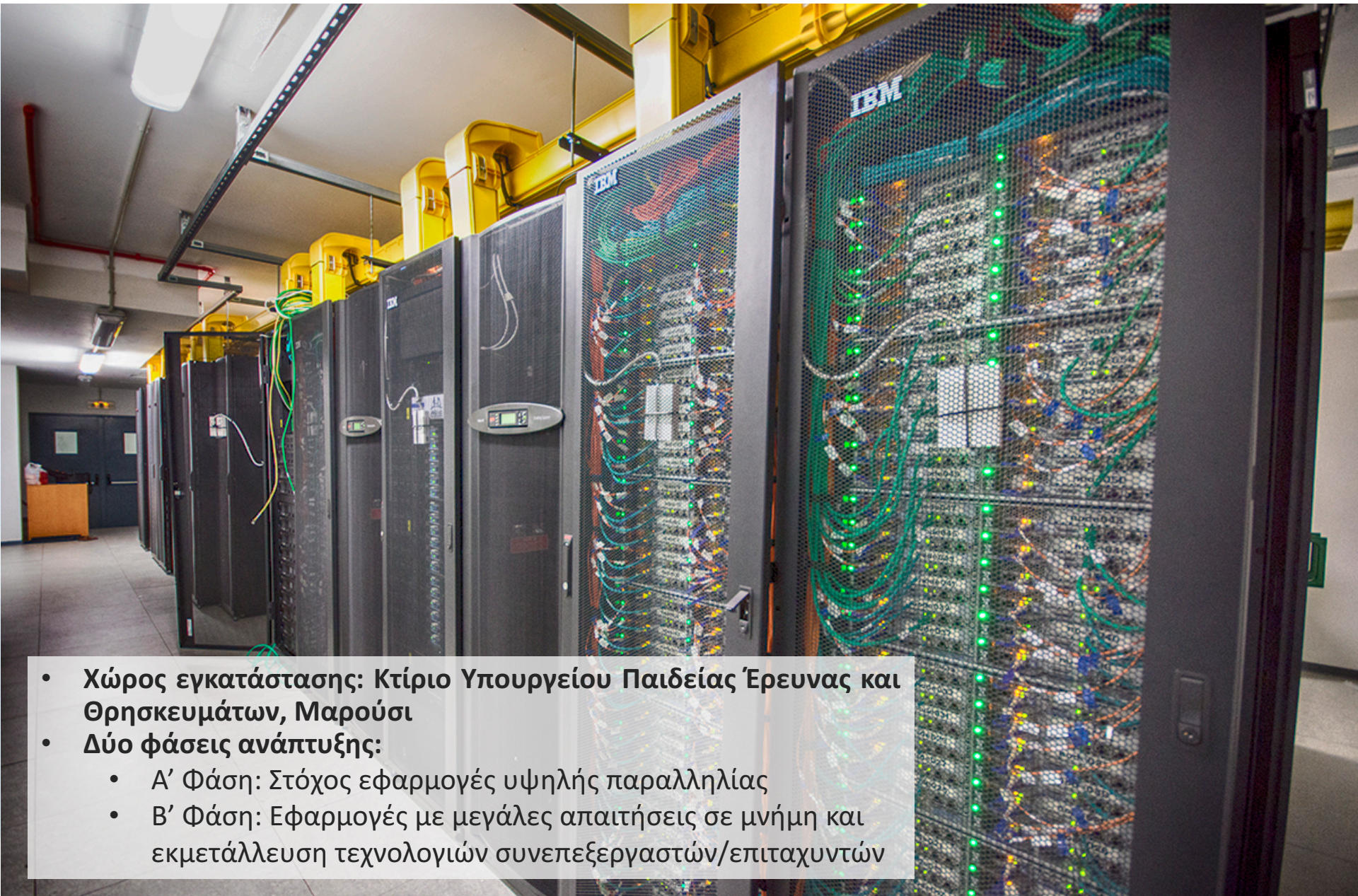
ΕΠ «Ψηφιακή Σύγκλιση», ΑΞΟΝΑΣ ΠΡΟΤΕΡΑΙΟΤΗΤΑΣ 1: «Βελτίωση της παραγωγικότητας με αξιοποίηση των ΤΠΕ»



Στόχοι έργου

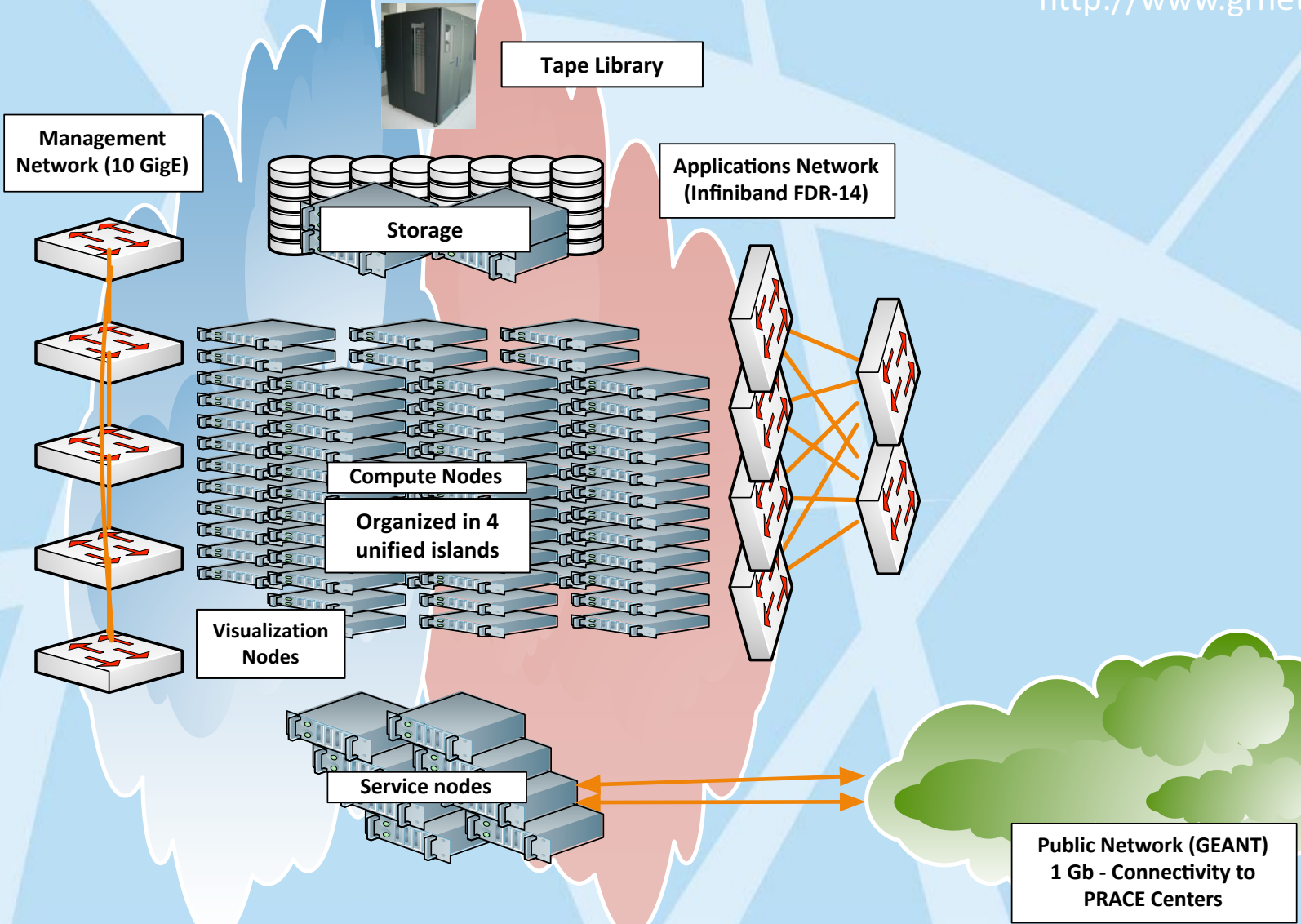
- **Επέκταση Κέντρου Δεδομένων ΕΔΕΤ στο Κτίριο του Υπουργείου Παιδείας στο Μαρούσι**
- Δημιουργία Πράσινου Κέντρου Δεδομένων στο Λούρο
- Προμήθεια υπολογιστικού εξοπλισμού για παροχή υπηρεσιών υπολογιστικού νέφους
- Προμήθεια υπολογιστικού εξοπλισμού για εξειδικευμένες επιστημονικές εφαρμογές.

ARIS (Advanced Research Information System)



- Χώρος εγκατάστασης: Κτίριο Υπουργείου Παιδείας Έρευνας και Θρησκευμάτων, Μαρούσι
- Δύο φάσεις ανάπτυξης:
 - Α' Φάση: Στόχος εφαρμογές υψηλής παραλληλίας
 - Β' Φάση: Εφαρμογές με μεγάλες απαιτήσεις σε μνήμη και εκμετάλλευση τεχνολογιών συνεπεξεργαστών/επιταχυντών

Αρχιτεκτονική συστήματος



Thin island

426 κόμβοι

IBM NeXtScale,
2 x Intel Xeon E5-2680v2 (8.520 cores συνολικά).
64GB μνήμης, Diskless.

Phi island

18 κόμβοι

Dell PowerEdge R730,
2 x Intel Xeon
E5-2660v3, 64 GB μνήμης,
2 x Intel Xeon Phi 7120P,
1.2TB local HD.

Fat island

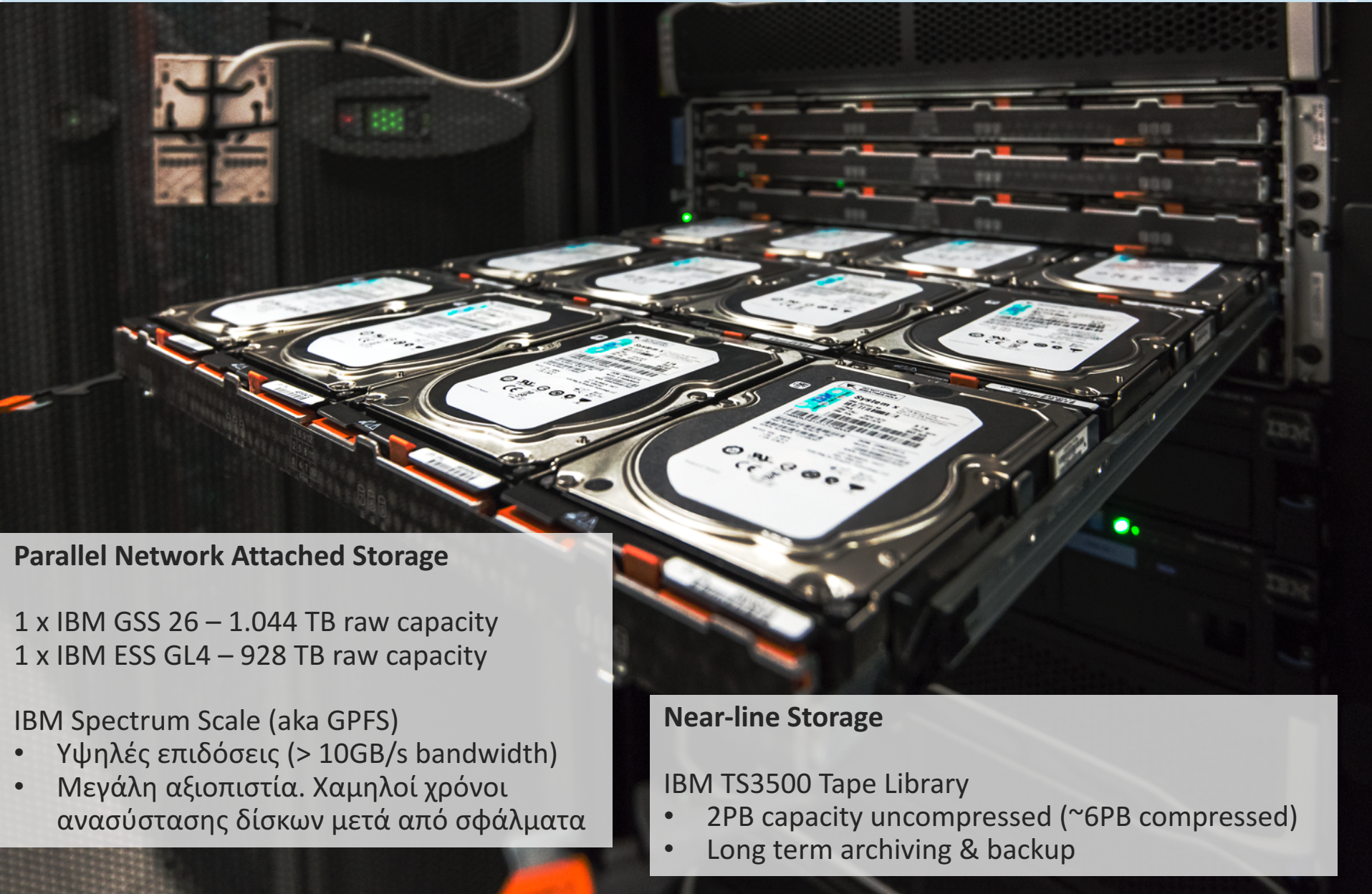
44 κόμβοι

Dell PowerEdge R820,
4 x Intel Xeon E5-4650v2,
512 GB μνήμης,
1.2TB local HD.

GPU island

44 κόμβοι

Dell PowerEdge R730,
2 x Intel Xeon
E5-2660v3, 64 GB μνήμης,
2 x GPU NVidia K40,
1.2TB local HD.



Parallel Network Attached Storage

- 1 x IBM GSS 26 – 1.044 TB raw capacity
- 1 x IBM ESS GL4 – 928 TB raw capacity

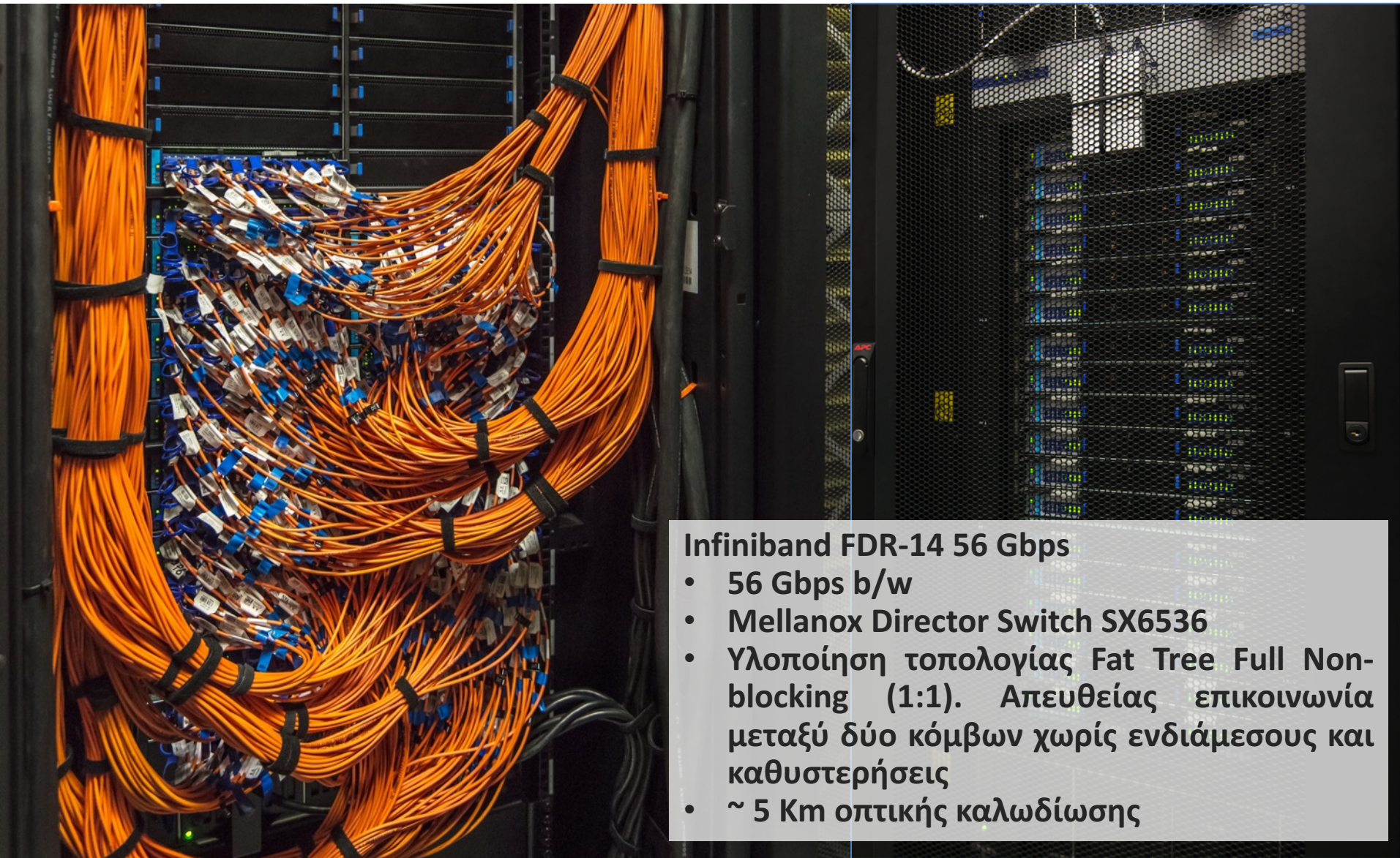
IBM Spectrum Scale (aka GPFS)

- Υψηλές επιδόσεις (> 10GB/s bandwidth)
- Μεγάλη αξιοπιστία. Χαμηλοί χρόνοι ανασύστασης δίσκων μετά από σφάλματα

Near-line Storage

IBM TS3500 Tape Library

- 2PB capacity uncompressed (~6PB compressed)
- Long term archiving & backup



Infiniband FDR-14 56 Gbps

- 56 Gbps b/w
- Mellanox Director Switch SX6536
- Υλοποίηση τοπολογίας Fat Tree Full Non-blocking (1:1). Απευθείας επικοινωνία μεταξύ δύο κόμβων χωρίς ενδιάμεσους και καθυστερήσεις
- ~ 5 Km οπτικής καλωδίωσης

Κόμβοι υποστήριξης



Κόμβοι υποστήριξης/υπηρεσιών

- IBM System x3650 M4, 2U, 2 x E5-2640v2 8C 2.0 GHz, 128 GB DDR3 Main Memory, 4 x 600 GB SAS HD.
- 2 x Κόμβοι διαχείρισης / Management Nodes
- 2 x Κόμβοι σύνδεσης / Login Nodes
- 10 x Κόμβοι υπηρεσιών - PRACE

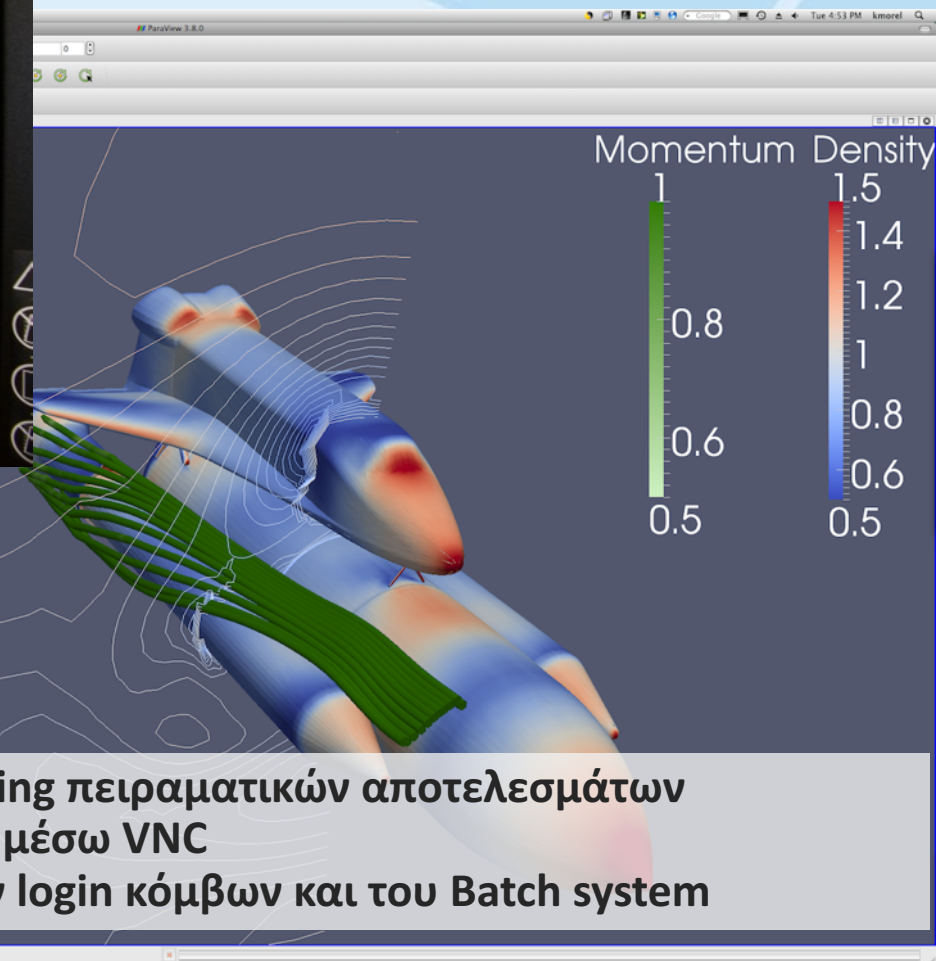
Visualization Nodes

<http://www.grnet.gr>

2 x Dell Precision 7910

- 2 x Intel Xeon Processor E5-2630 v4 (10C, 2.2GHz)
- 256GB 2400MHz DDR4
- 2 x NVIDIA Quadro M5000 8GB

Vectors Normals
Number of Sides 6
 Capping
Radius 0.01
Vary Radius OFF
Radius Factor 1
 Use Default Normal
Default Normal 0 0 1



- Image/Video rendering πειραματικών αποτελεσμάτων
- Interactive σύνδεση μέσω VNC
- Πρόσβαση μέσω των login κόμβων και του Batch system

Υποδομές φιλοξενίας



- Χρήση τεχνολογίας κλειστού θερμού διαδρόμου (Hot Aisle Containment - HACS)
- 2 ξεχωριστοί θερμοί διάδρομοι με InRow μονάδες AC (πλεονασμός N+1 ανά νησίδα)
- 4 Ψύκτες συνολικής ισχύος 468 KW (πλεονασμός N+1). Υποστήριξη Intelligent Free Cooling

Υποδομές Φιλοξενίας- UPS

* Οι φωτογραφίες είναι προσφορά του PC Magazine

- 1,5 MW μέγιστη υποστηριζόμενη κατανάλωση
- 1500 KVA UPS
- 540 Συσσωρευτές 12V 69,5AH



Λειτουργικό σύστημα

- Red Hat Enterprise Linux 6.7
- CentOS 6.7

Batch System

- SLURM 14.11.8 (Simple Linux Utility for Resource Manager)



Εργαλεία ανάπτυξης – Compilers

- Intel Cluster Studio XE
- PGI Cluster Development Kit (CDK)
- GNU

Επιστημονικές εφαρμογές

```
----- /apps/modulefiles/applications -----
abinit/7.10.4(default)      gopenmol/3.00(default)      molder/5.2(default)        nwchem/6.5(default)        towhee/7.1.0(default)
bigdft/1.7.6(default)      gromacs/4.5.7               molekel/5.4.0(default)     octave/4.0.0(default)      vmd/1.9.2(default)
cdo/1.7.0(default)         gromacs/4.6.7               mpqc/2.3.1(default)        octopus/4.1.2(default)    wrf/3.4.1/hybrid
code_saturne/4.0.1/intel   gromacs/5.0.5               namd/2.10/hybrid/memopt    openbabel/2.3.2(default)   wrf/3.4.1/purempi
cosmo-art/131108_5.00(default) gromacs/5.0.6(default)     namd/2.10/hybrid/normal    openmd/2.2(default)        wrf/3.7/hybrid
cp2k/2.6.1(default)       gromacs/5.1                 namd/2.10/purempi/memopt   paraview/4.3(default)      wrf/3.7/purempi
dlpoly/2.20                gromacs/5.1-rc1             namd/2.10/purempi/normal   qhull/2012.1               wrf-chem/3.7(default)
dlpoly/4.07(default)       lammps/15May15(default)     ncarg/6.3.0(default)       quantum-espresso/5.2.0(default) wrf-chem/3.7-hybrid
gamess-US/2014R1(default)  mdynamix/5.2.7(default)     ncview/2.1.5(default)      R/3.2.1(default)
```

Επιστημονικές βιβλιοθήκες

```
----- /apps/modulefiles/libraries -----
atlas/3.11.34(default)     glpk/4.55                   libsmm/gnu                 netcdf-c/4.3.3.1/intel    parmetis/4.0.3/intel
boost/1.58.0(default)     gsl/1.16/gnu(default)       libsmm/intel              netcdf-combined/4.3.3.1/intel pnetcdf/1.6.1/gnu
cgnslib/3.2.1/intel       hdf5/1.8.12/gnu             libxc/2.2.2               netcdf-fortran/4.4.2/gnu   pnetcdf/1.6.1/intel
elpa/2015.05.001/intel(default) hdf5/1.8.12/intel          med/3.0.8/intel           netcdf-fortran/4.4.2/intel scalapack/2.0.2/gnu(default)
fftw/2.1.5                hdf5/1.8.15/gnu             metis/5.1.0               openblas/0.2.14/gnu/int4   scalapack/2.0.2/intel
fftw/3.3.4/avx(default)   hdf5/1.8.15/intel          netcdf/3.6.3/intel        openblas/0.2.14/gnu/int8   szip/2.1(default)
fftw/3.3.4/sse2           jasper/1.900.1(default)     netcdf/4.1.3/gnu          openblas/0.2.14/intel/int4 udunits2/2.2.19(default)
flame/5.0/gnu             libint/1.1.5                netcdf/4.1.3/intel       openblas/0.2.14/intel/int8 voro++/0.4.6(default)
flame/5.0/intel          libjpeg-turbo/1.4.1(default) netcdf-c/4.3.3.1/gnu      parmetis/4.0.3/gnu
```

Απόδοση Συστήματος

<http://www.grnet.gr>

Peak Performance (R_{Peak}) vs Sustained Performance (R_{Max})

Υπολογισμός μέγιστης θεωρητικής απόδοσης:

$$\#Nodes \times \#CPUperNode \times \#CoresPerCPU \times CPUFreq \times InstrPerCycle = Gflop/s$$

Συνολική Θεωρητική Απόδοση Υποδομής = 444 TFlop/s

ARIS στο Top500

- Επιδόσεις με βάσει το **High Performance Linpack**
- Τιμή που κατατέθηκε: **169,73 Tflops**
- Τελική τιμή που έχει επιτευχθεί: **179,83 Tflops**
(* αφορά τις επιδόσεις του thin island)



- Σημαντικός παράγοντας εξασφάλισης **βέλτιστης χρήσης** του συστήματος
- **Δίκαιη και ισότιμη πρόσβαση** στο σύνολο της ελληνικής ερευνητική κοινότητας
- Βασισμένη σε **διεθνείς βέλτιστες πρακτικές** και συστάσεις

Βασικοί άξονες:

- Περιοδικές προσκλήσεις για εφαρμογές παραγωγής
- Αξιολόγηση σε τεχνικό και επιστημονικό επίπεδο με χρήση peer-review
- Συνεχείς προσκλήσεις για εφαρμογές προετοιμασίας
- Διαθεσιμότητα πόρων για δράσεις εκπαίδευσης
- Διάθεση πόρων στα πλαίσια διεθνών συνεργασιών
- Δωρεάν πρόσβαση για έρευνα και ανάπτυξη στην Ελλάδα

Χρήση Συστήματος

<http://www.grnet.gr>

205
έργα

350+
επιστήμονες

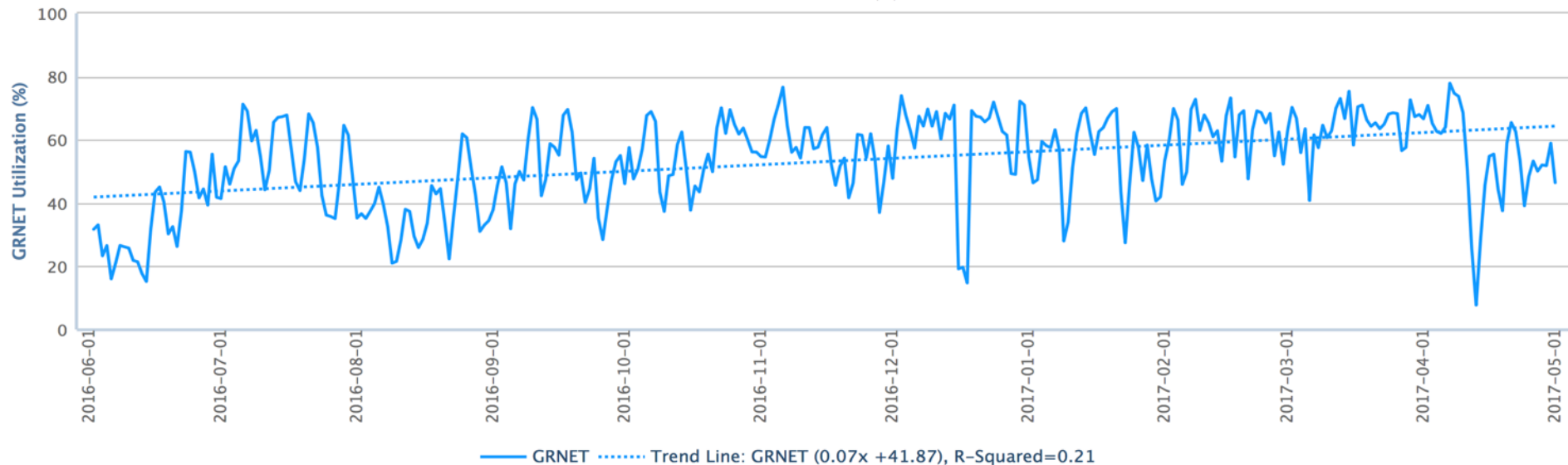
>300.000
Jobs successfully
completed

130M
Core hours
έχουν αποδοθεί

3
προσκλήσεις
έργων
παραγωγής

23
Ιδρύματα

GRNET Utilization (%)



Χρήσιμοι Σύνδεσμοι

Κεντρική σελίδα υπηρεσίας: <http://hpc.grnet.gr>

Τεκμηρίωση συστήματος: <http://doc.aris.grnet.gr>

Γενικές πληροφορίες: hpc-info@lists.grnet.gr

Πληροφορίες για την πρόσβαση: hpc-access@lists.grnet.gr

Τεχνική υποστήριξη: support@hpc.grnet.gr

- Διαχείριση & λειτουργία υποδομής
- Υποστήριξη χρηστών σε λειτουργικά προβλήματα
- Υποστήριξη εφαρμογών - Μεταφορά και βελτιστοποίηση εκτέλεσης εφαρμογών στο σύστημα
- Συγγραφή τεκμηρίωσης
- Εκπαίδευση χρηστών

ΕΡΩΤΗΣΕΙΣ