

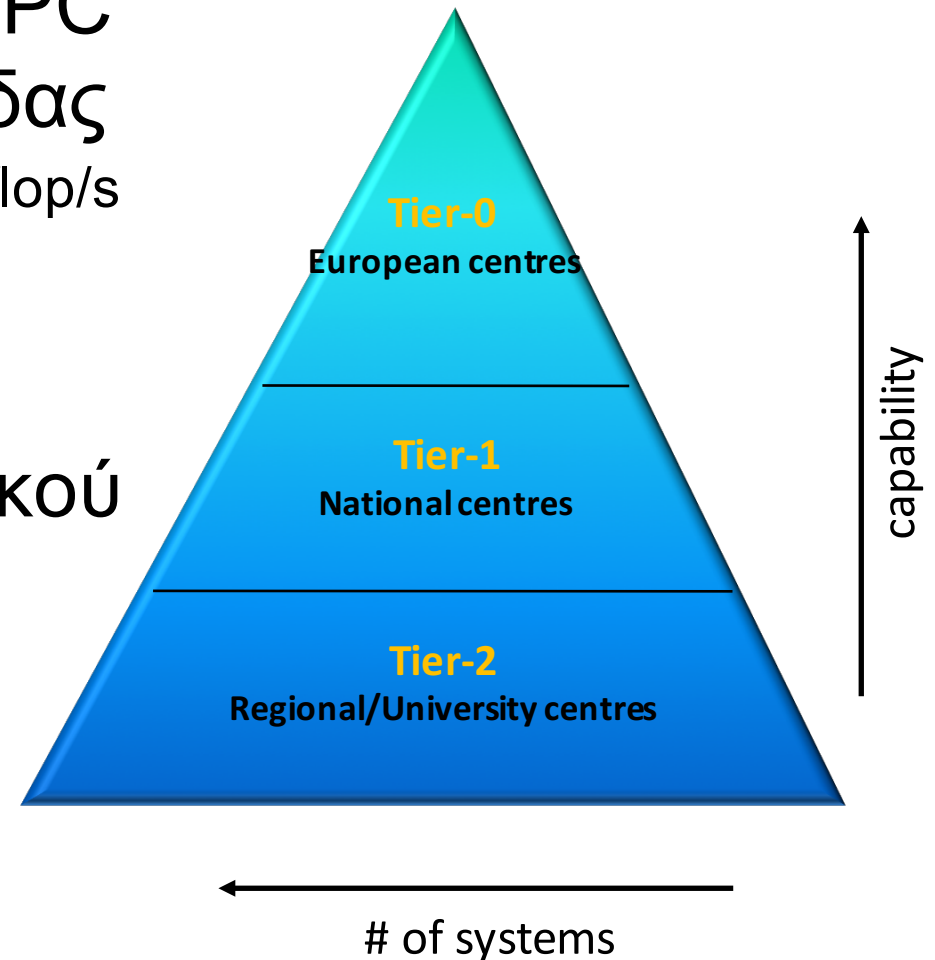
Πολιτική Πρόσβασης στο εθνικό υπερυπολογιστικό σύστημα της ΕΔΕΤ – ARIS, διαδικασίες και βέλτιστες πρακτικές για πρόσβαση στα Ευρωπαϊκά υπερυπολογιστικά συστήματα

ΤΕΧΝΙΚΕΣ ΑΠΟΔΟΤΙΚΗΣ ΧΡΗΣΗΣ ΤΟΥ ΕΘΝΙΚΟΥ
ΥΠΕΡΥΠΟΛΟΓΙΣΤΙΚΟΥ ΣΥΣΤΗΜΑΤΟΣ ARIS

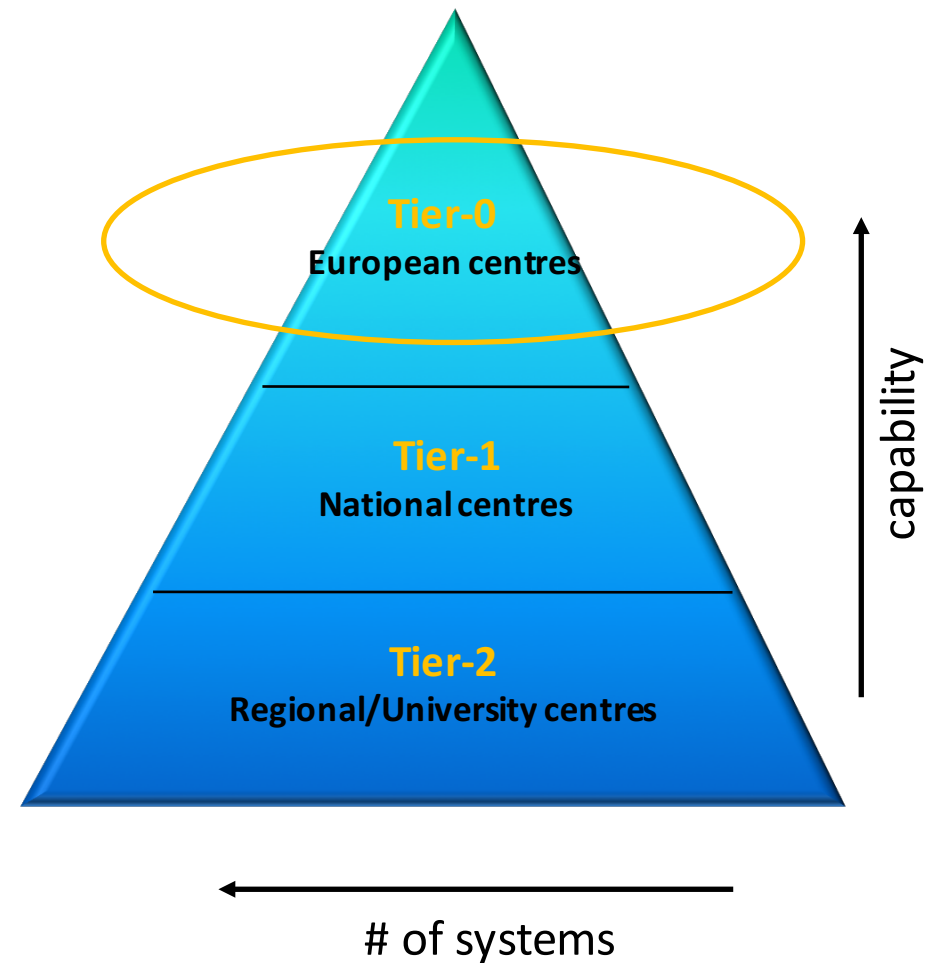
Αθήνα, 17 Δεκεμβρίου 2015

Ιωάννης Λιαμπότης
iliaboti at grnet.gr

- Ευρωπαϊκά συστήματα HPC στην κορυφή της πυραμίδας
 - Tier-0: Ευρωπαϊκά κέντρα Petaflop/s
 - Tier-1: Εθνικά κέντρα
 - Tier-2: Τοπικά / Πανεπιστημιακά κέντρα
- Δημιουργία του Ευρωπαϊκού οικοσυστήματος HPC



Το οικοσύστημα HPC



Τα Tier-0 HPC συστήματα του PRACE



BlueGene/Q 5.87 Petaflop/s
PRACE@GCS@Jülich



Bull Cluster Curie 1.8 Petaflop/s
PRACE@GENCI@CEA



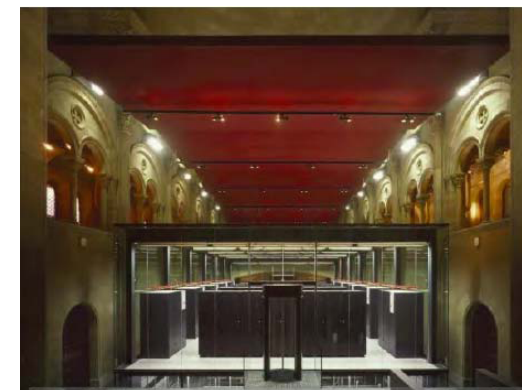
BlueGene/Q 1 Petaflop/s
PRACE@CINECA



CRAY HORNET 4 Petaflop/s
PRACE@GCS@HLRS

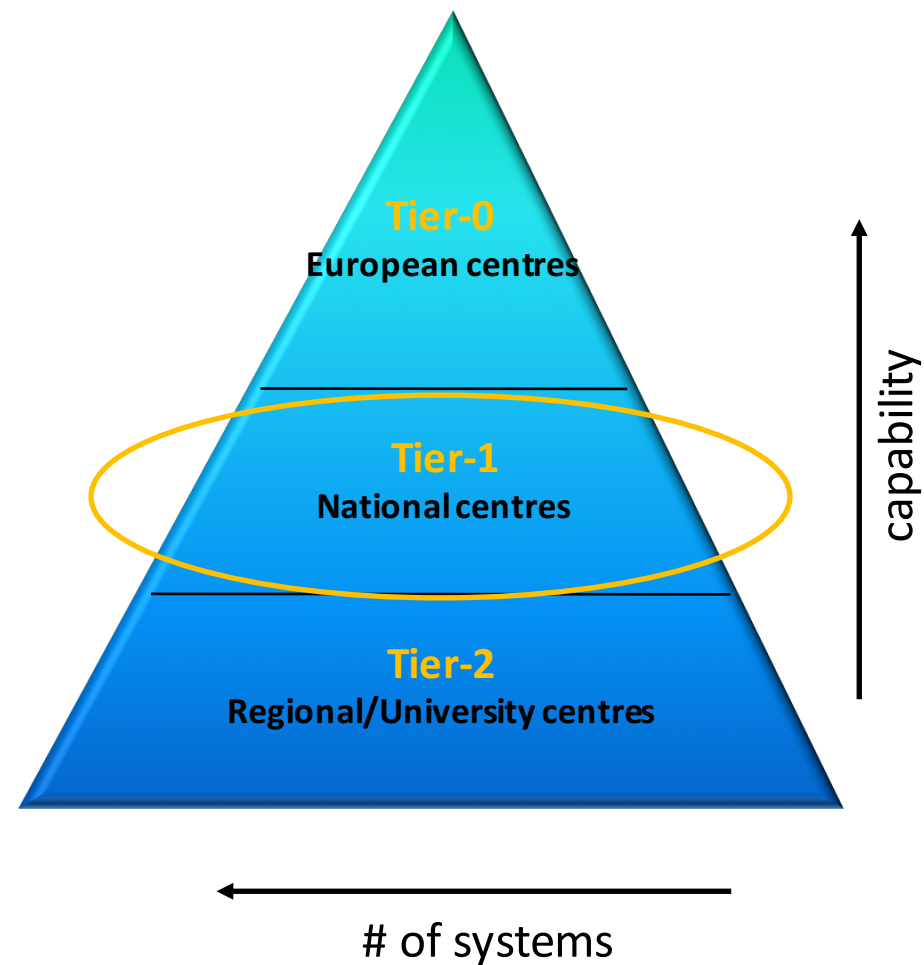


IBM SuperMUC 3 Petaflop/s
PRACE@GCS@LRZ



MareNostrum 1 Petaflop/s
PRACE@BSC

Το οικοσύστημα HPC



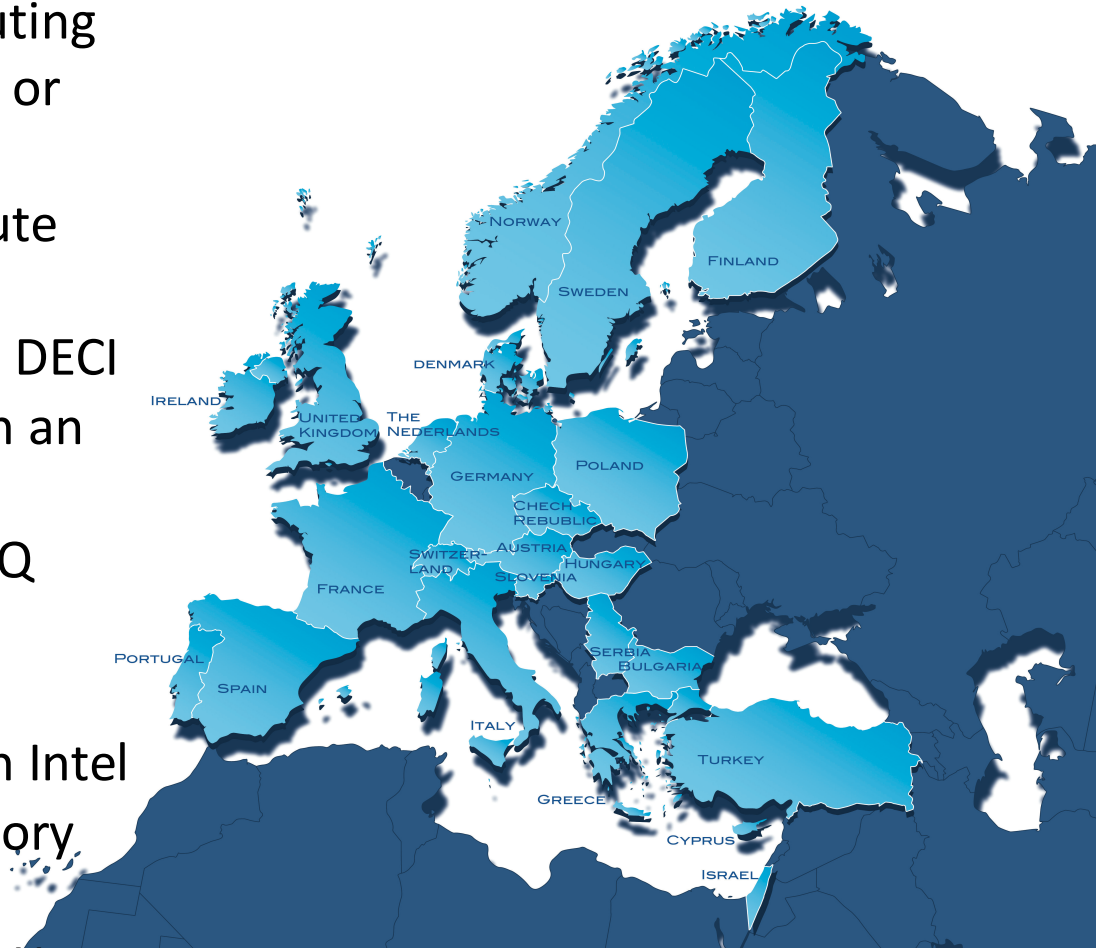


DECI: Πρόγραμμα ανταλλαγής πόρων

- Οι Πόροι που δίνουμε επιστρέφονται
- Για την διεύρυνση των διεθνών συνεργασιών
- Δυνατότητα χρήσης πόρων που δεν είναι διαθέσιμοι σε μια χώρα (GPU, Xeon Phi, κλπ)
- Αξιολόγηση στην χώρα εργασίας των ερευνητών

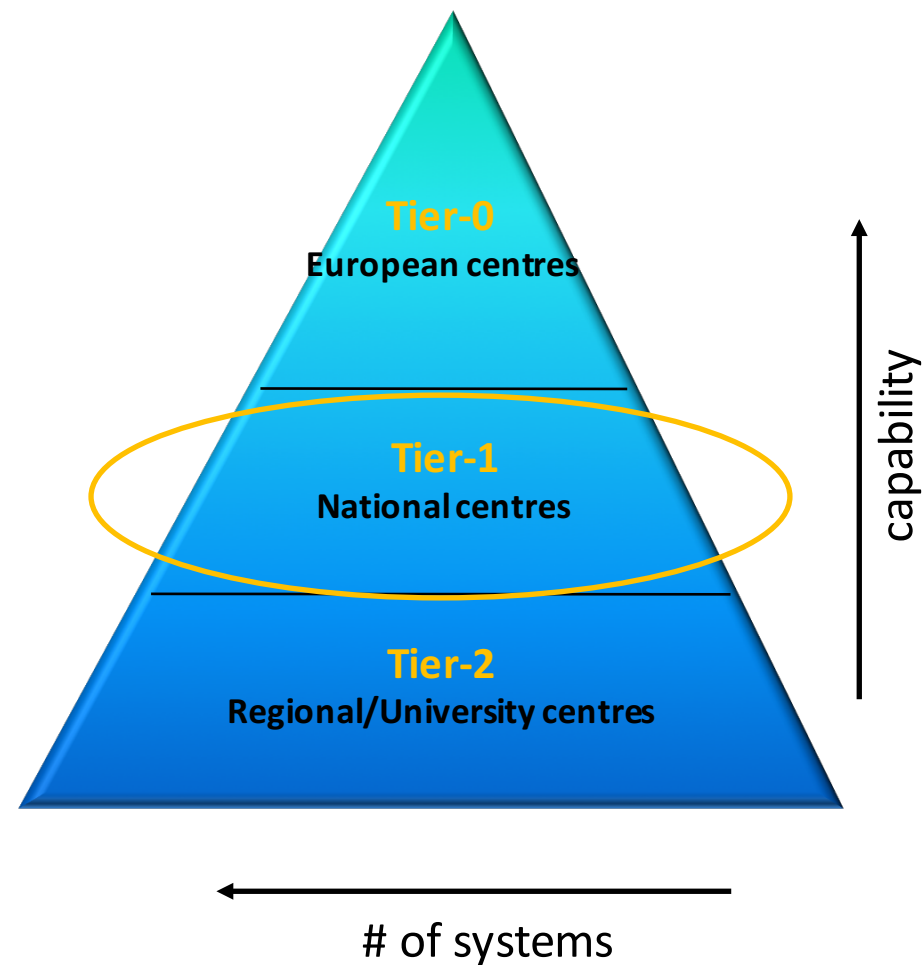


- **Cray:** Around 65% of the DECI computing resources are available on Cray XC30 or Cray XC40 systems, equating to approximately 55 million Cray compute core hours,
- **IBM Blue Gene/Q:** Around 7% of the DECI computing resources are available on an IBM BG/Q system, equating to approximately 25 million Blue Gene/Q compute core hours,
- **Clusters:** Around 28% of the DECI computing resources are available on Intel clusters (various processor and memory configurations) and hybrid systems (clusters with GPGPU accelerators or Xeon Phi Co-processors) equating to around 30 million compute core hours.



Πολιτική πρόσβασης στο εθνικό σύστημα HPC

Το οικοσύστημα HPC (υπενθύμιση)



- Να συμβάλει στην αποτελεσματική χρήση της υποδομής με σκοπό την παραγωγή εξαιρετικών επιστημονικών και ερευνητικών αποτελεσμάτων
- Να μεγιστοποιήσει το αντίκτυπο των ερευνητικών προγραμμάτων
- Να εξασφαλίσει δίκαιη πρόσβαση, προς όλη την Ελληνική πανεπιστημιακή και ακαδημαϊκή κοινότητα, στους διαθέσιμους πόρους
- Να διευκολύνει την μετάβαση των Ελλήνων χρηστών στις υποδομές επιπέδου Tier-0 του PRACE

- ανταγωνιστική και διαφανής διαδικασία αξιολόγησης των προτάσεων
- από το στάδιο της υποβολής των προτάσεων μέχρι την τελική απονομή πόρων
- δίκαια κατανομή των διαθέσιμων υπολογιστικών πόρων
- να εξασφαλιστεί η εμπιστοσύνη των χρηστών στην μεθοδολογία

- Διαφάνεια
- Αξιολόγηση από εμπειρογνώμονες
- Διαχείριση συγκρούσεων και συμφερόντων
- Απόρρητο
- Προτεραιοποίηση
- Αποφυγή παράλληλης αξιολόγησης
- Ισότητα προς την επιστήμη
- Αποφυγή του τοπικισμού
- Καλή και αποτελεσματική επικοινωνία

Βήμα 1
Αρχικοποίηση
διαδικασίας

1.1
Στόχοι
χρηματοδοτικ
ού
οργανισμού

1.2
Πολιτική
κατανομής
πόρων

1.3
Επιλογή
μελών των
επιτροπών

1.4
Επιλογή
μελών των
ομάδων
υποστήριξης

Βήμα 2
Προετοιμασία
πρόσκλησης και
υποβολή
προτάσεων.

2.1
Ανακοίνωση
πρόσκλησης

2.2
Υποβολή
προτάσεων

2.3
Έλεγχος
συμμόρφωσης

Πρόταση για εφαρμογή
παραγωγής

Πρόταση για εφαρμογή
προετοιμασίας /
ανάπτυξης

Βήμα 3
Διαδικασία
αξιολόγησης και
επεξεργασίας
προτάσεων

3.1
Ανάθεση
αξιολογητών

3.2
Τεχνική
αξιολόγηση
προτάσεων

*3.3
Επιστημονική
αξιολόγηση
(Αξιολογητές)

Βήμα 4
Διαδικασία
κατανομής των
πόρων

4.1
Κατάταξη
προτάσεων

*4.2
Αποτίμηση
αποτελεσμάτων
και κατανομή
διαθέσιμων
πόρων

4.3
Ανακοίνωση
τελικών
αποτελεσμάτ
ων

Βήμα 5
Διαδικασία
εκτέλεσης και
αποτίμησης
αποτελεσμάτων
έργων

5.1
Έναρξη έργου

5.2
Παρακολούθησ
η έργου

5.3
Συγγραφή
τελικής
έκθεσης

5.3
Διάχυση
αποτελεσμάτ
ων έργου

* για προτάσεις εφαρμογών παραγωγής

Κατηγορίες έργων και κατανομής πόρων

Είδος έργου	Περιγραφή
Παραγωγής	Έχουν την τεχνική αρτιότητα για να εκμεταλλευτούν του διαθέσιμους πόρους και έχουν επιλεγεί μέσω της διαδικασίας peer review
Προετοιμασίας	Έχουν περάσει το στάδιο ανάπτυξης και χρειάζονται επικύρωση της τεχνικής αρτιότητας (π.χ. ικανότητα κλιμάκωσης) ώστε να μπορέσουν να προχωρήσουν σε κατάσταση παραγωγής.
Ανάπτυξης	Ανάπτυξης παράλληλων εφαρμογών χρήσης της εθνικής υπερ υπολογιστικής υποδομής.
Εκπαίδευσης	Εκπαίδευσης (είτε άμεσα συνδεδεμένα με την ΕΔΕΤ Α.Ε. είτε με την μορφή διάθεσης πόρων σε πανεπιστήμια και εκπαιδευτικά ιδρύματα.

- Προσοχή στις προτεραιότητες κάθε πρόσκλησης και τα κριτήρια αξιολόγησης
- Το τεχνικό κομμάτι είναι εξίσου σημαντικό όσο και το επιστημονικό
- Καλός υπολογισμός των υπολογιστικών πόρων που ζητούνται και καλή τεκμηρίωση
- Οι προτάσεις για έργα παραγωγής πρέπει να αντιμετωπίζονται σαν προτάσεις για χρηματοδοτούμενα έργα. Οι πόροι που παρέχονται έχουν υψηλό κόστος

- Περιγραφή εφαρμογής, Επιστημονικό και Κοινωνικό όφελος.
 - Περιγραφή προβλήματος, state of the art, references, καινοτομία, τι θα μελετήσουμε και τι αποτελέσματα θα έχει η μελέτη που δεν είναι δημοσιευμένα
 - Ερωτήματα (άλυτα) στα οποία θα απαντήσει η έρευνα.
 - Εμπειρία Ομάδας στο επιστημονικό τομέα, αλλά και στα υπολογιστικά συστήματα.
 - 1 – 3 σελίδες

- Περιγραφή εφαρμογών και λογισμικού που θα χρησιμοποιηθεί.
 - Αναφορά στο λογισμικό αλλά και στις συγκεκριμένες συναρτήσεις / μεθόδους που θα χρησιμοποιηθούν και είναι συναφείς με τους σκοπούς του έργου και τους αλγόριθμους που θα χρησιμοποιηθούν
 - Ποιο είναι το μέγεθος του προβλήματος που προσπαθούμε να λύσουμε;
 - 0.5 – 1 σελίδα

- Γιατί χρειαζόμαστε HPC και ένα σύστημα σαν το ARIS
 - Ποια είναι η κλιμακοσιμότητα της εφαρμογής σε σχέση με το μέγεθος του προβλήματος μας;
 - Τι μέθοδος παραλληλοποίησης χρησιμοποιείτε; MPI, OpenMP, Hybrid?
 - Αποδείξεις: Πλήρης αναφορά για το που έχει τρέξει ο κώδικας με παρόμοια με τα δεδομένα που προβλήματός σας (Όνομα συστήματος, cpu type, μνήμη κλπ)

Biomedical Research Foundation, Academy
of Athens

Center of Basic Research I, Pharmacology-
Pharmacotechnology Division

Molecular Modeling and Drug Design Group

– Πίνακας κλιμάκωσης

	sec/step			
	CURIE		JUGENE	
cores	NAMD	GROMACS	NAMD	GROMACS
32	0.46	0.096	0.411	0.910
64	0.26	0.05	0.405	0.440
128	0.133	0.027	0.406	0.400
256	0.072	0.014	0.215	0.270
512	0.041	0.008	0.115	0.190
1024	0.023	0.134	0.069	0.140
2048	0.017	0.004	0.047	0.020
4096	-	0.0047	0.045	0.016
8192	-	0.0038	0.042	0.020

Δεν έχω δεδομένα; Κάνω αίτηση για preparatory access για να δημιουργήσω τον Παραπάνω πίνακα

– Υπολογισμός συνολικών core hours

Run type	# Runs	# Steps/Run	Walltime (seconds)/Step	# CPU cores	Total core hours/Type Run
1	6	250,000,000	0.006*	2048	5,120,000
2	1	600,000,000	0.006	2048	2,048,000
3	1	600,000,000	0.006	2048	2,048,000
4	1	200,000,000	0.017	2048	1,934,222
TOTAL					11,150,222

Because our scaling calculations have been performed with a system size of 400,000 atoms (walltime/step = 0.004s), while our proposed studies is 600,000 atoms, we have accordingly scaled our time step to a walltime of 0.006s)

Δεν έχω δεδομένα; Κάνω αίτηση για preparatory access για να δημιουργήσω τον Παραπάνω πίνακα

– Μνήμη

- Προσοχή αν ζητάμε μεγαλύτερη μνήμη αν core από αυτή που διαθέτει το κάθε node
- Αν η μνήμη ανά core > 2.8 Gb και < 57 GB πρέπει αν αναφέρουμε το γιατί και αν τελικά θα χρησιμοποιήσουμε λιγότερα cores σε κάθε node. (χωρίς αυτό η πρόταση μπορεί να κοπεί στην τεχνική αξιολόγηση)
- Αν η μνήμη ανά node > 57 GB τότε η εφαρμογή ΔΕΝ μπορεί να τρέξει και δεν θα γίνει δεκτή.

Δεν έχω δεδομένα; Κάνω αίτηση για preparatory access για να δημιουργήσω τον Παραπάνω πίνακα

– Max cores

- Δηλώνουμε το μέγιστο αριθμό cores για **ένα** run.
- Αν το max cores είναι πάνω από 20 (που είναι το αναμενόμενο) ή εφαρμογή είναι κατά πάσα πιθανότητα παραλληλοποιημένη με MPI
- Αν θέλουμε να τρέξουμε ταυτόχρονα (όχι παράλληλα) πολλά jobs τότε το δηλώνουμε σαν max concurrent jobs.

Δεν έχω δεδομένα; Κάνω αίτηση για preparatory access για να δημιουργήσω τον Παραπάνω πίνακα

– Βιβλιοθήκες και εφαρμογές

- Αν ζητάμε commercial libraries (που δεν διαθέτει το ARIS (βλέπε documentation) τότε πρέπει να αναφέρουμε αν έχουμε το licence, αλλιώς η εφαρμογή δεν περνάει την τεχνική αξιολόγηση.

Δεν έχω δεδομένα; Κάνω αίτηση για preparatory access για να δημιουργήσω τον Παραπάνω πίνακα

Biomedical Research Foundation, Academy
of Athens

Center of Basic Research I, Pharmacology-
Pharmacotechnology Division

Molecular Modeling and Drug Design Group

- Σύντομα θα ανακοινωθεί πρόσκληση για την εγγραφή αξιολογητών για τις προτάσεις παραγωγής σε εθνικό και διεθνές επίπεδο (DECI - Tier-1)
- Η βοήθεια όλων σας είναι πολύτιμη

- <https://hpc.grnet.gr>
- <http://doc.aris.grnet.gr>
- <http://events.hpc.grnet.gr>
- Για γενικές ερωτήσεις: hpc-info@lists.grnet.gr
- Για ερωτήσεις σχετικά με την πρόσβαση στο ARIS, αλλά και στο PRACE (αν χρειάζεστε τοπική υποστήριξη): hpc-access@lists.grnet.gr
- Για επίλυση προβλημάτων χρηστών: support@hpc.grnet.gr
- PRACE access: peer-review@prace-ri.eu
- PRACE: <http://www.prace-ri.eu>

- Ερωτήσεις;