http://www.grnet.gr

PRACE-GR - Ανάπτυξη Εθνικής Υπερυπολογιστικής Υποδομής και Παροχής Συναφών Υπηρεσιών στην Ελληνική Ερευνητική και Ακαδημαϊκή Κοινότητα

Ευάγγελος Φλώρος, Ιωάννης Λιαμπότης
Εθνικό Δίκτυο Έρευνας και Τεχνολογίας

Τμήμα Μαθηματικών, ΕΚΠΑ 17/12/2015

Γιατί HPC;

Υπολογιστική Επιστήμη: Ο 3ος στυλοβάτης 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.

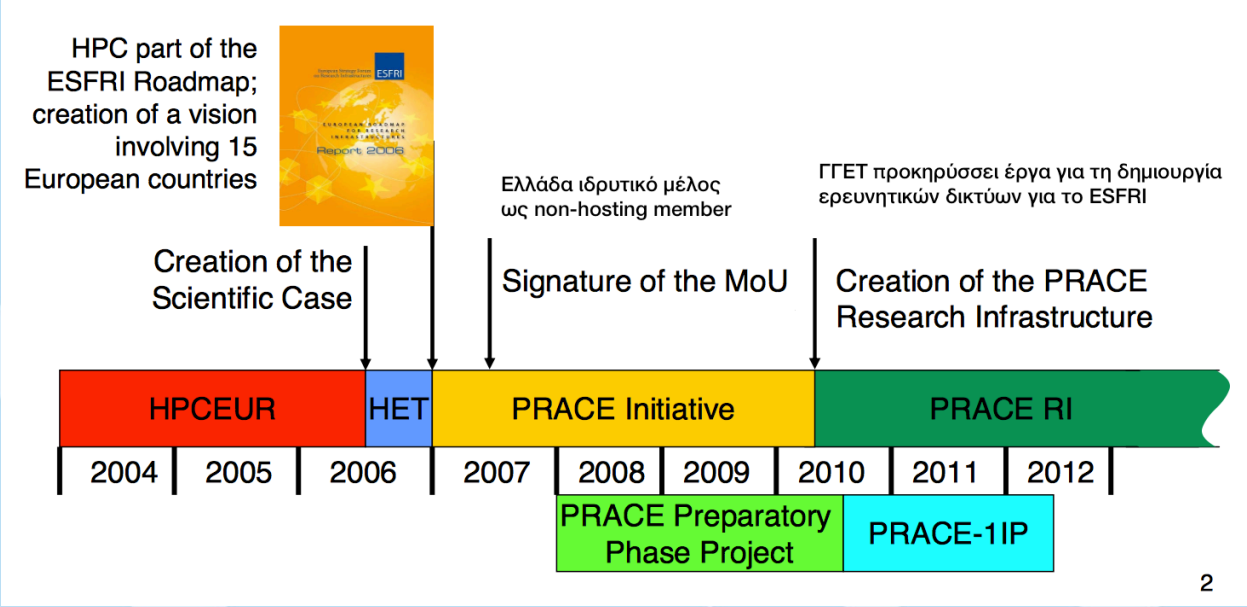
"Today to out-compete is to out-compute"

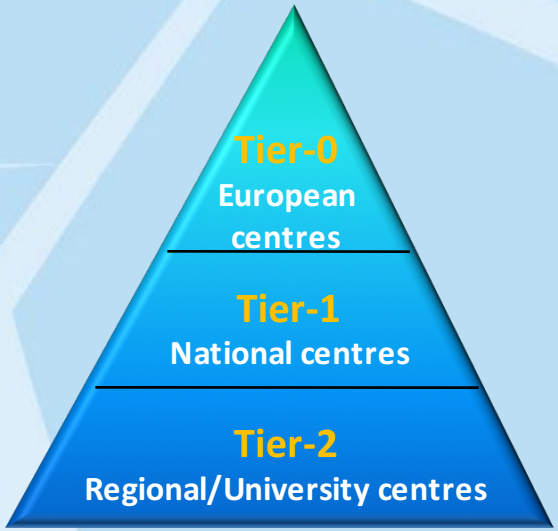
PRACE

http://www.grnet.gr

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)





Προπαρασκευαστική Φάση - HellasHPC

http://www.grnet.gr

35 εταίροι. Ακαδημαϊκά και Ερευνητικά Κέντρα από όλη την Ελλάδα
Διάρκεια 8 μήνες (6/2010-2/2011)

Αποτελέσματα:

- Ανάλυση απαιτήσεων, Αποτέλεσμα πανελλαδικής έρευνας σε όλη την Ελλάδα. 160+ Ερευνητικές Ομάδες, 200+ επιστημονικές εφαρμογές.
- State-of-the-art υπολογιστών υψηλών επιδόσεων
- Πρόταση Εθνικής Στρατηγικής για τις υποδομές HPC
- Μνημόνιο συνεργασίας των μελών του δικτύου

Κύρια συμπεράσματα

- Σημαντική υστέρηση στην Ελλάδα σε υποδομές υπολογιστών υψηλών επιδόσεων.
- Δυσκολία πρόσβασης σε αντίστοιχες υποδομές του εξωτερικού (PRACE Tier-0).
- Αυξημένες ανάγκες Ελλήνων ερευνητών για την πραγματοποίηση υψηλού επιπέδου έρευνας.

Πράξη PRACE-GR

http://www.grnet.gr

ΕΠ «Αττική»

Πρόσκληση 88: Υποβολή Προτάσεων στο πλαίσιο της πράξης «CESSDA – EMSO – ARGO – INFRAFRONTIER – PRACE – Υποστήριξη και ανάπτυξη ελληνικών εταίρων για συμμετοχής στις Κοινοπραξίες των Ευρωπαϊκών Ερευνητικών Υποδομών στα πλαίσια του ESFRI/2006»

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

Ημερομηνία Πρόσκλησης: **5/10/2011**

Υποβολή Τεχνικού Δελτίου Προτεινόμενης Πράξης από ΕΔΕΤ

- Τίτλος «**Ανάπτυξη Εθνικής Υπερυπολογιστικής Υποδομής και Παροχή Συναφών Υπηρεσιών στην Ελληνική Ερευνητική και Ακαδημαϊκή Κοινότητα**»

Ταυτότητα έργου

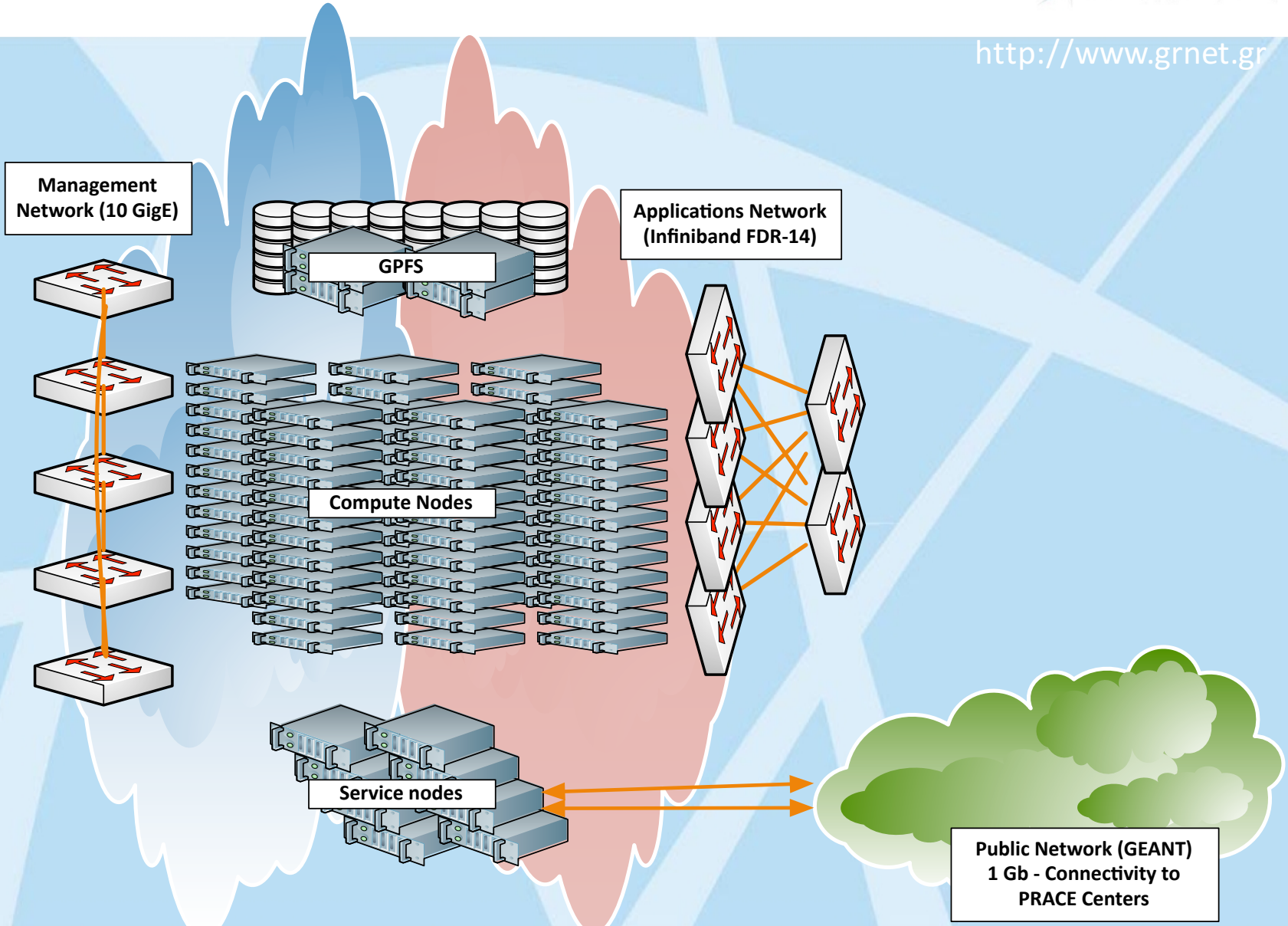
- Ημ. Ένταξης: **9/7/2012**
- Κωδικός Πράξης (ΟΠΣ): **379417**
- Προϋπολογισμός: **3.500.000,00** ευρώ
- Κωδικός ΣΑ: **Ε0138**
- Κωδικός ΣΑΕ: **2012ΣΕ01380017**
- Ημερομηνία Ολοκλήρωσης επιλεξιμότητας: **Σεπτέμβριος 2015**

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 επιδόσεις (TFlops)** – Μεγάλος αριθμός κόμβων, Ελάχιστη επίδοση **160 Tflop/s.** Ιδανικό για εφαρμογές υψηλής κλιμάκωσης (μεγάλη παραλληλία). MPI και OpenMP
- Δικτύωση υψηλών επιδόσεων/χαμηλής καθυστέρησης.
- Παράλληλο σύστημα αρχείων, υψηλών επιδόσεων. Ικανοποιητικός αποθηκευτικός χώρος (Τουλάχιστον **500TB**+)
- Απαραίτητο λογισμικό ανάπτυξης – Επιστημονικές βιβλιοθήκες
- Επεκτασιμότητα

Αρχιτεκτονική συστήματος

http://www.grnet.gr



Κέντρο δεδομένων ΕΔΕΤ

http://www.grnet.gr

1η Φάση

- 2009 παραχώρηση χώρου στο κτήριο του Υπουργείου Παιδείας στο Μαρούσι
- Κατασκευή και λειτουργία από το 2010 (**DC1**)
- Φιλοξενία υποδομής cloud ~okeanos
- UPS, Μ/Σ μέση τάσης, Γεννήτρια

2η Φάση

- Προσθήκη 2 επιπλέον Computer Rooms (**DC2**, **DC3**). Συνολικό εμβαδό για φιλοξενία IT ~180 m^2
- 2 δωμάτια για UPS (6x250 KVA) + Συσσωρευτές
- Πεδία μέσης/χαμηλής τάσης
- Πυρασφάλεια / Έλεγχος πρόσβασης / Παρακολούθηση κλπ

Κατασκευή Χώρου Φιλοξενίας

grnet
Διασυνδέοντας την Έρευνα και την Εκπαίδευση

Πριν **Μετά**

DC2

DC3

UPS/Battery room

Υποστηρικτικός εξοπλισμός - UPS

grnet
Διασυνδέοντας την Έρευνα και την Εκπαίδευση

- 6 x APC MGE Galaxy 7000
- 1,5 MW μέγιστη υποστηριζόμενη κατανάλωση
- 1500 KVA UPS

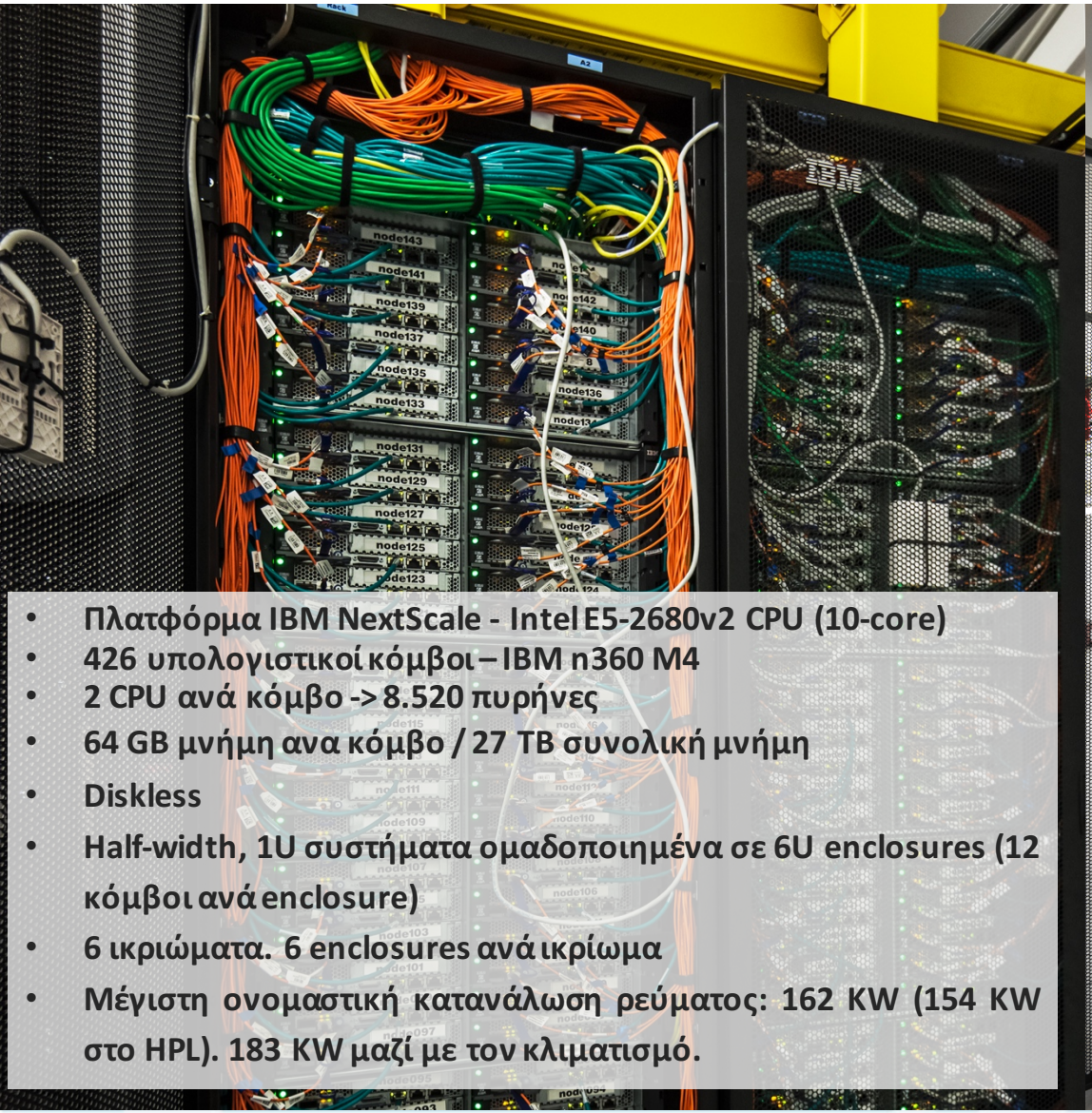
* Οι φωτογραφίες είναι προσφορά του PC Magazine

- 540 Συσσωρευτές 12V 69,5AH
- 15 τόνοι σε 6 ικριώματα βαρέος τύπου

ΕΣΠΑ 2007-2013
ΕΥΡΩΠΑΪΚΗ ΕΝΩΣΗ
ΠΕΠ
ΕΛΛΗΝΙΚΗ ΔΗΜΟΚΡΑΤΙΑ
Υπουργείο Παιδείας & Θρησκευμάτων

… και εγένετο ARIS

Σύστημα υπολογιστικών κόμβων

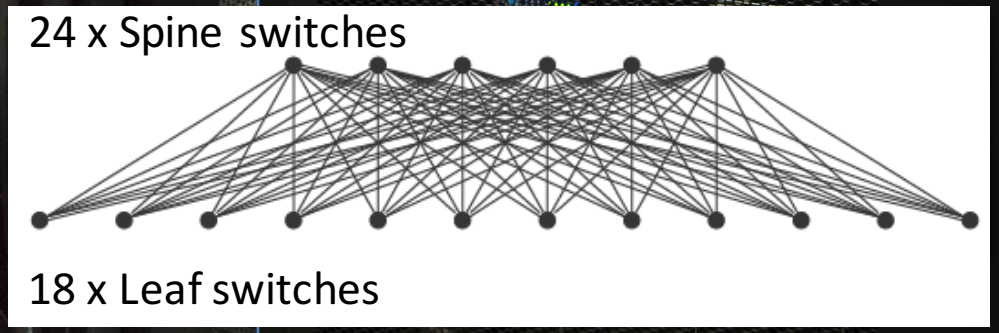


- Πλατφόρμα IBM NextScale - Intel E5-2680v2 CPU (10-core)
- 426 υπολογιστικοί κόμβοι – IBM n360 M4
- 2 CPU ανά κόμβο -> 8.520 πυρήνες
- 64 GB μνήμη ανα κόμβο / 27 TB συνολική μνήμη
- Diskless
- Half-width, 1U συστήματα ομαδοποιημένα σε 6U enclosures (12 κόμβοι ανά enclosure)
- 6 ικριώματα. 6 enclosures ανά ικρίωμα
- Μέγιστη ονομαστική κατανάλωση ρεύματος: 162 KW (154 KW στο HPL). 183 KW μαζί με τον κλιματισμό.

Δίκτυο Εφαρμογών

Infiniband FDR-14 56 Gbps

- **Mellanox Director Switch SX6536**
- **Υλοποίηση τοπολογία Fat Tree Full Non-blocking (1:1)**
- **~ 450 καλώδια QSFP+ Optical**
- **~ 5 Km οπτικής καλωδίωσης**



Αποθηκευτικό σύστημα

IBM GSS 26

- **2 x MD Servers, IBM System x3650 M4**
- **6 JBODs x 58 HDDs x 3 TBs = 1.044 TB (~1PB) συνολικός αποθηκευτικός χώρος (raw)**
- **2 x NFS Gateway Servers**

IBM Elastic Storage (aka GPFS)

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

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**

Σύστημα κλιματισμού

- Χρήση τεχνολογίας κλειστού θερμού διαδρόμου (Hot Aisle Containment - HACS) APC by Schneider Electric
- 4 InRow μονάδες AC (πλεονασμός N+1) της APC. 2xACRP 502 + 2xACPC ARPP 502
- 4 Ψύκτες συνολικής ισχύος (πλεονασμός 2N). ERAF1222 της UNIFLAR. 4x117 KW ψυκτική ισχύς
- Υποστήριξη Intelligent Free Cooling

Λογισμικό Εφαρμογών

http://www.grnet.gr

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)          molden/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

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

Υπολογισμός μέγιστης θεωρητικής απόδοσης:

#Nodes x #CPUperNode x #CoresPerCPU x CPUFreq x InstrPerCycle = Gflop/s

Για το ARIS:

426 x 2 x 10 x 2,8 GHz x 8 = **190.848 Gflops (190,85 Tflops)**

HPL και Top500

High-Performance Linpack (HPL)

- Επίλυση πυκνού συστήματος γραμμικών εξισώσεων. Καταγράφει την σταθερή απόδοση (sustained performance) που επιτυγχάνει ένα υπολογιστικό σύστημα κατά την επίλυσή του.
- Χρήση MPI/OpenMP για την παράλληλη εκτέλεση σε μεγάλης κλίμακας συστήματα.
- Το πιο δημοφιλές benchmark για την αξιολόγηση υπερυπολογιστών παγκοσμίως.

Top500.org

- Λίστα με τα 500 ισχυρότερα συστήματα του κόσμου
- Διατηρείται από το 1993. Ανακοινώνεται 2 φορές το χρόνο στα συνέδρια SuperComputing (Νοέμβριος) και International SuperComputing (Ιούνιος)

ARIS στο Top500

http://www.grnet.gr

Επιδόσεις ARIS

- Τιμή που κατατέθηκε: 169,73 Tflops
- Τελική τιμή που έχει επιτευχθεί: 179,83 Tflops


TOP 500 CERTIFICATE
The List.

ARIS - IBM NeXtScale nx360M5, Intel Xeon E5-2680v2 10C 2.8GHz, Infiniband FDR14

Greek Research and Technology Network, Greece

is ranked

No. 468

among the World's TOP500 Supercomputers

with 169.73 Tflop/s Linpack Performance

in the 45th TOP500 List published at ISC15 in Frankfurt, Germany, July 13th, 2015.

Congratulations from the TOP500 Editors

Erich Strohmaier, NERSC/Berkeley Lab
Jack Dongarra, University of Tennessee
Horst Simon, NERSC/Berkeley Lab
Martin Meuer, Prometeus

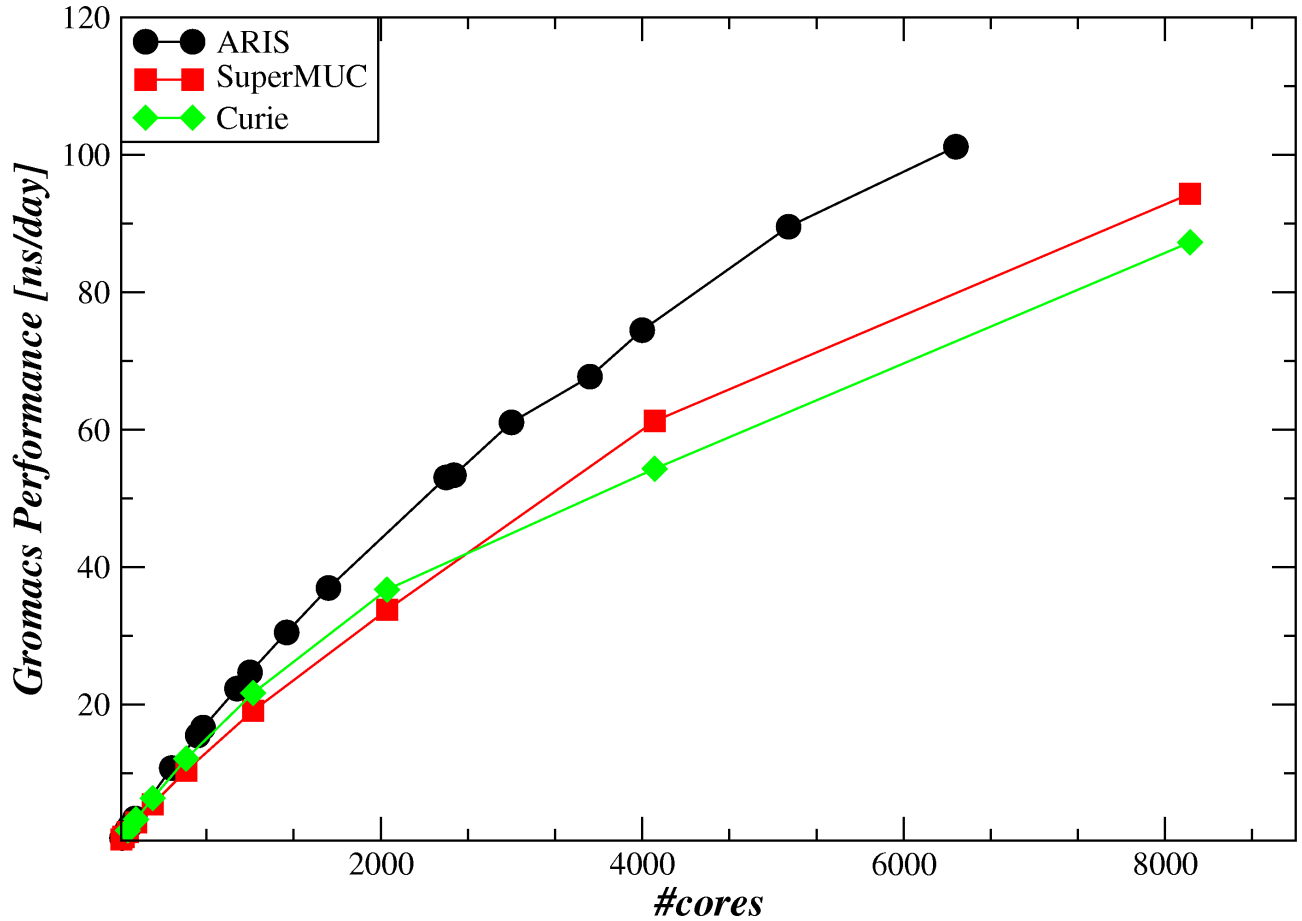
Θέση στη λίστα June 2015: 468

- Πολύ καλή αποδοτικότητα(efficiency).

$$R_{Max}/R_{Peak} = 179,83/\ 190,85 = \mathbf{94\%}\ \text{Αποδοτικότητα}$$

- Εξαιρετικό για την εκτέλεση εφαρμογών με μαθηματικά παρόμοια του HPL
- Αλλά... Η αλήθεια είναι ότι το HPL λέει λίγα πράγματα για την πραγματική απόδοση ενός συστήματος (και θεωρείτε και μάλλον ξεπερασμένο ως benchmark)

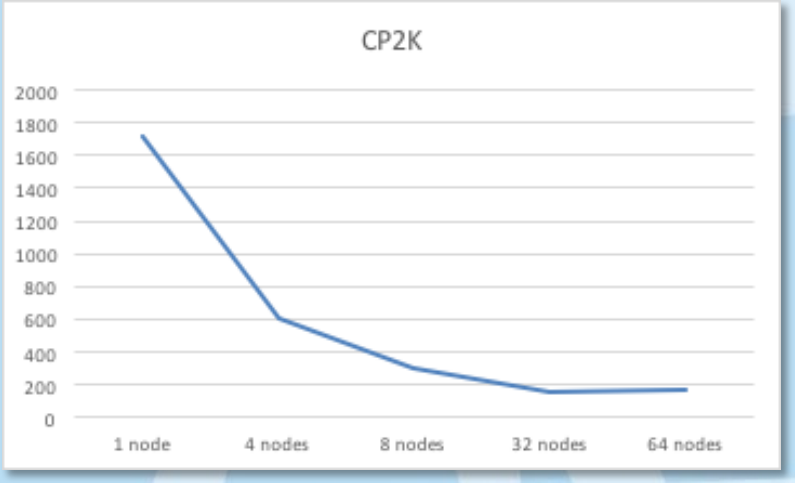
Πόσο γρήγορο είναι το σύστημα πραγματικά;

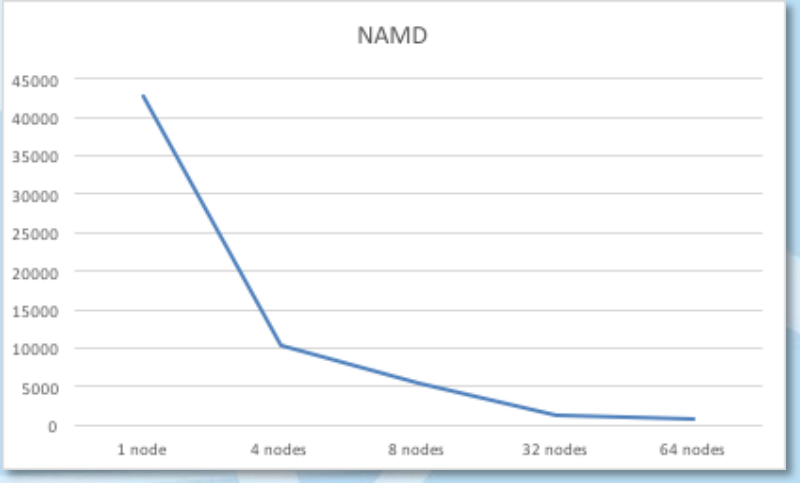


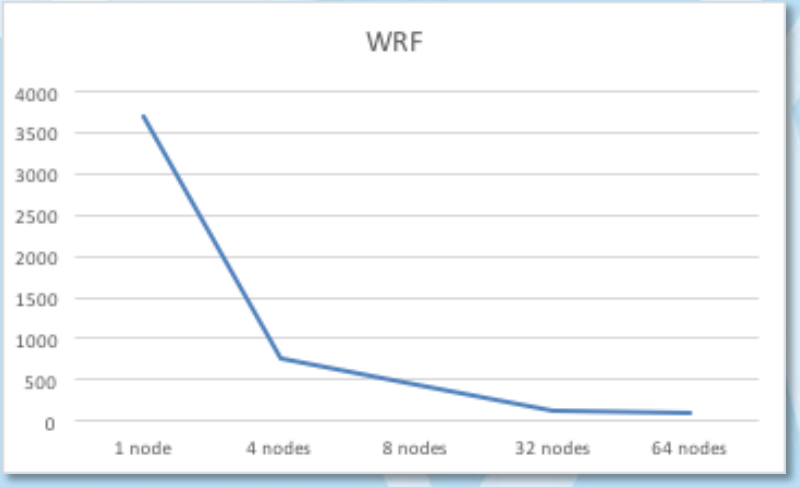
Lignocellulose, 3.3 M atoms, Reaction Field

Πόσο γρήγορο είναι το σύστημα πραγματικά;

Κλιμάκωση WRF, NAMD και CP2K



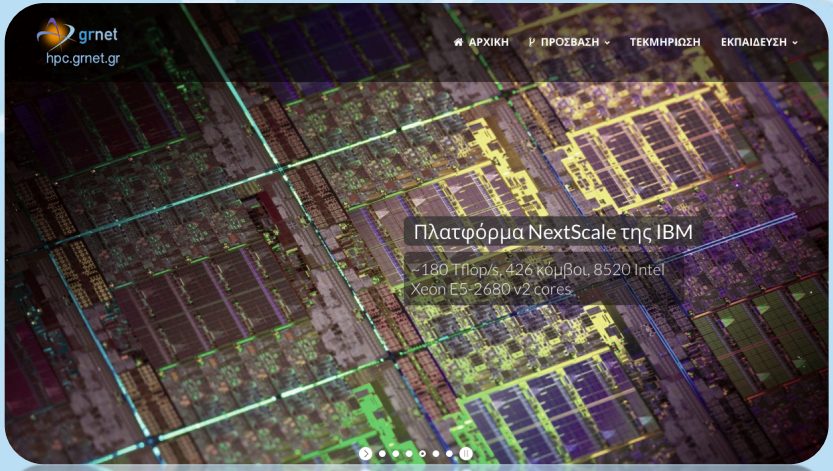




Υπηρεσίες υποστήριξης χρηστών

http://www.grnet.gr

- Ομάδα Διαχείρισης και υποστήριξης HPC
  - Διαχείριση λειτουργία υποδομής
  - Υποστήριξη χρηστών σε λειτουργικά προβλήματα
  - Υποστήριξη εφαρμογών - Μεταφορά και βελτιστοποίηση εκτέλεσης εφαρμογών στο σύστημα.
  - Ανάπτυξη τεκμηρίωσης
  - Εκπαίδευση
  - Συμβουλευτικές υπηρεσίες



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

Πολιτική Πρόσβασης

- 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

Επέκταση & Βιωσιμότητα Υποδομής

- **PRACE-GR: Πρώτη φάση ανάπτυξης HPC υποδομών**

- **Δεύτερη φάση – Νέες δυνατότητες**
  - Ικανοποίηση εφαρμογών διαφορετικού υπολογιστικού προφίλ και **Big Data**
    - Μεγάλη κεντρική μνήμη (Fat Nodes)
    - Νεες αρχιτεκτονικές: GPUs, Accelerators
  - Επέκταση αποθηκευτικών δυνατοτήτων
  - Μακρόχρονη αρχειοθέτηση δεδομένων (Archiving)

- **Βιωσιμότητα υποδομής και παρεχόμενων υπηρεσιών για τα επόμενα χρόνια**

ΕΡΩΤΗΣΕΙΣ