

Εθνική Υπερυπολογιστική Υποδομή ARIS

Ευάγγελος Φλώρος
Εθνικό Δίκτυο Έρευνας και Τεχνολογίας

ΕΜΠ, 25/10/2016

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**
- Value added υπηρεσίες



High Performance Computing

- Ο όρος Υπερυπολογιστική (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

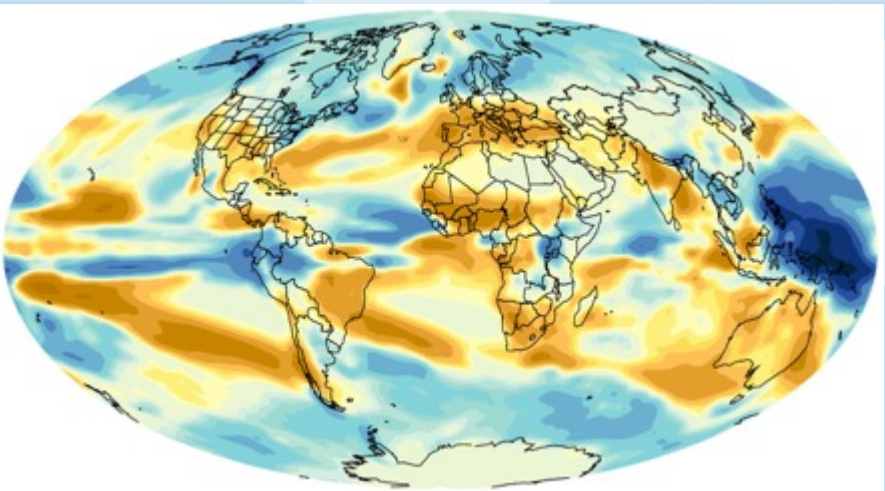
Υπολογιστική Επιστήμη: Ο 3^{ος} πυλώνας της επιστήμης (μαζί με Θεωρία και Πείραμα)

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

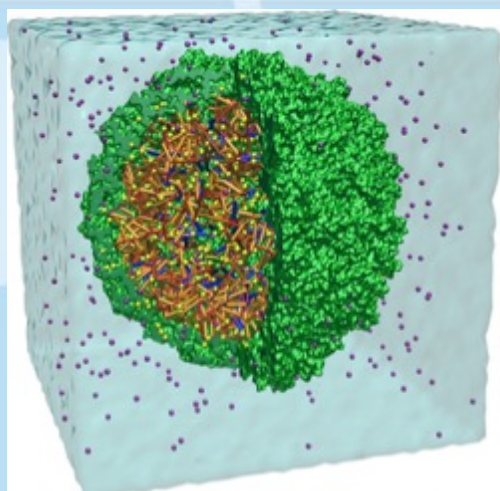
Ασφάλεια, Οικονομία, Ευελιξία, Βελτίωση ακρίβειας, Ελάττωση χρόνου ανάπτυξης.

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

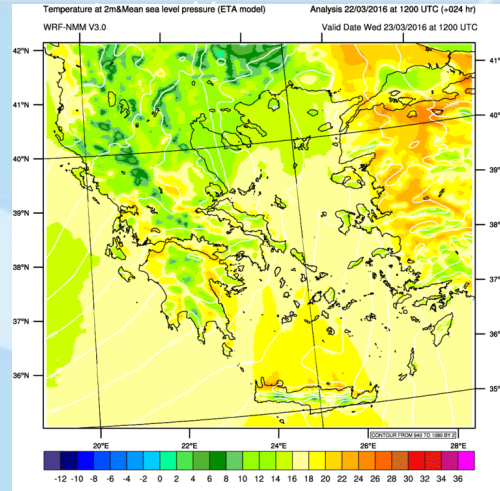
Πεδίο εφαρμογών (ενδεικτικά)



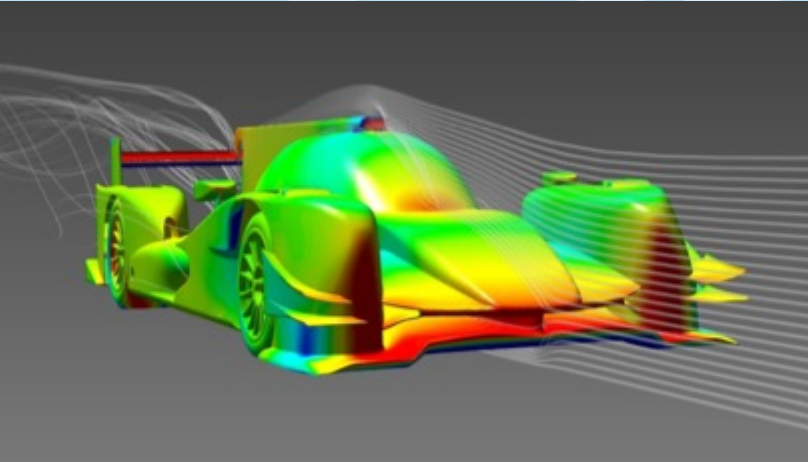
Κλιματολογία – Περιβάλλον



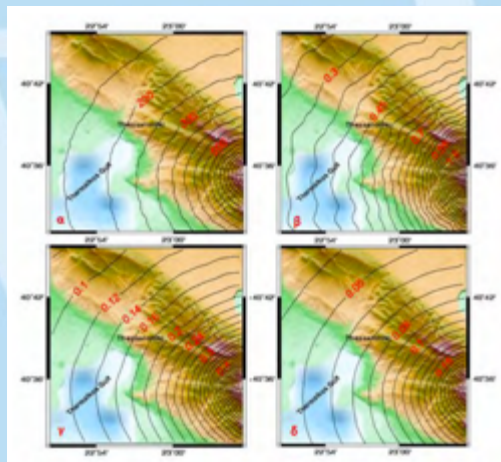
Βιοπληροφορική -
Επιστήμες Ζωής



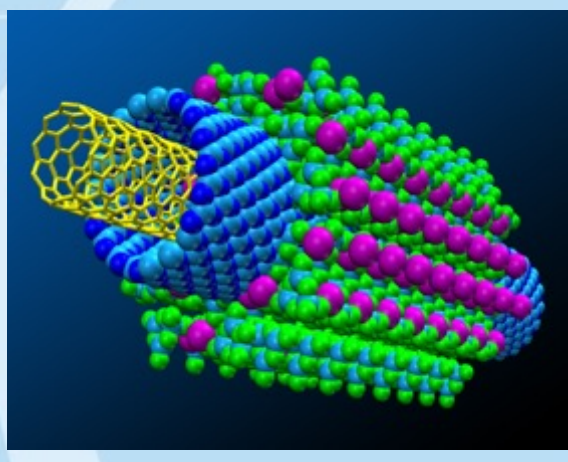
Μετεωρολογία



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



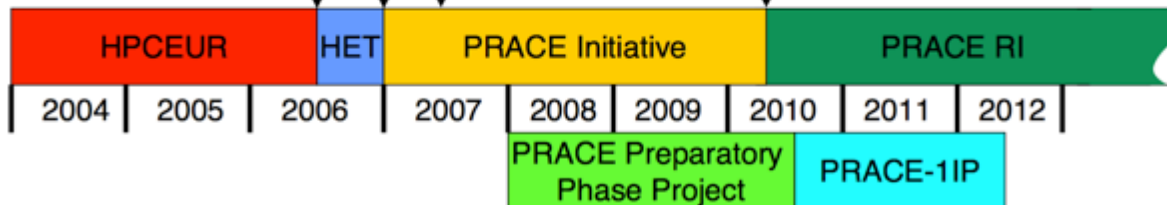
Ελλάδα ιδρυτικό μέλος
ως non-hosting member

ΓΓΕΤ προκηρύσσει έργα για τη δημιουργία
ερευνητικών δικτύων για το ESFRI

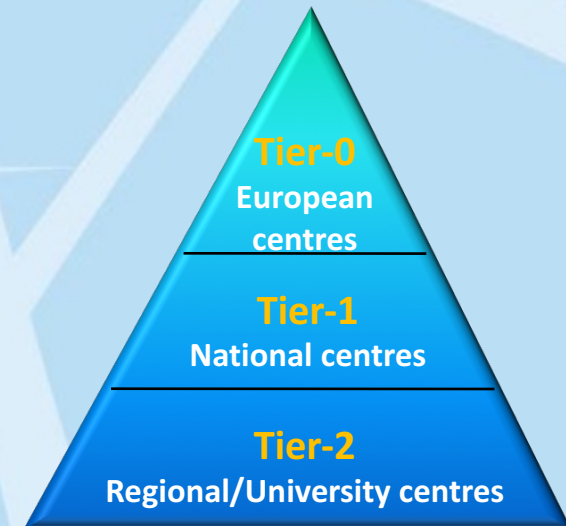
Creation of the
Scientific Case

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

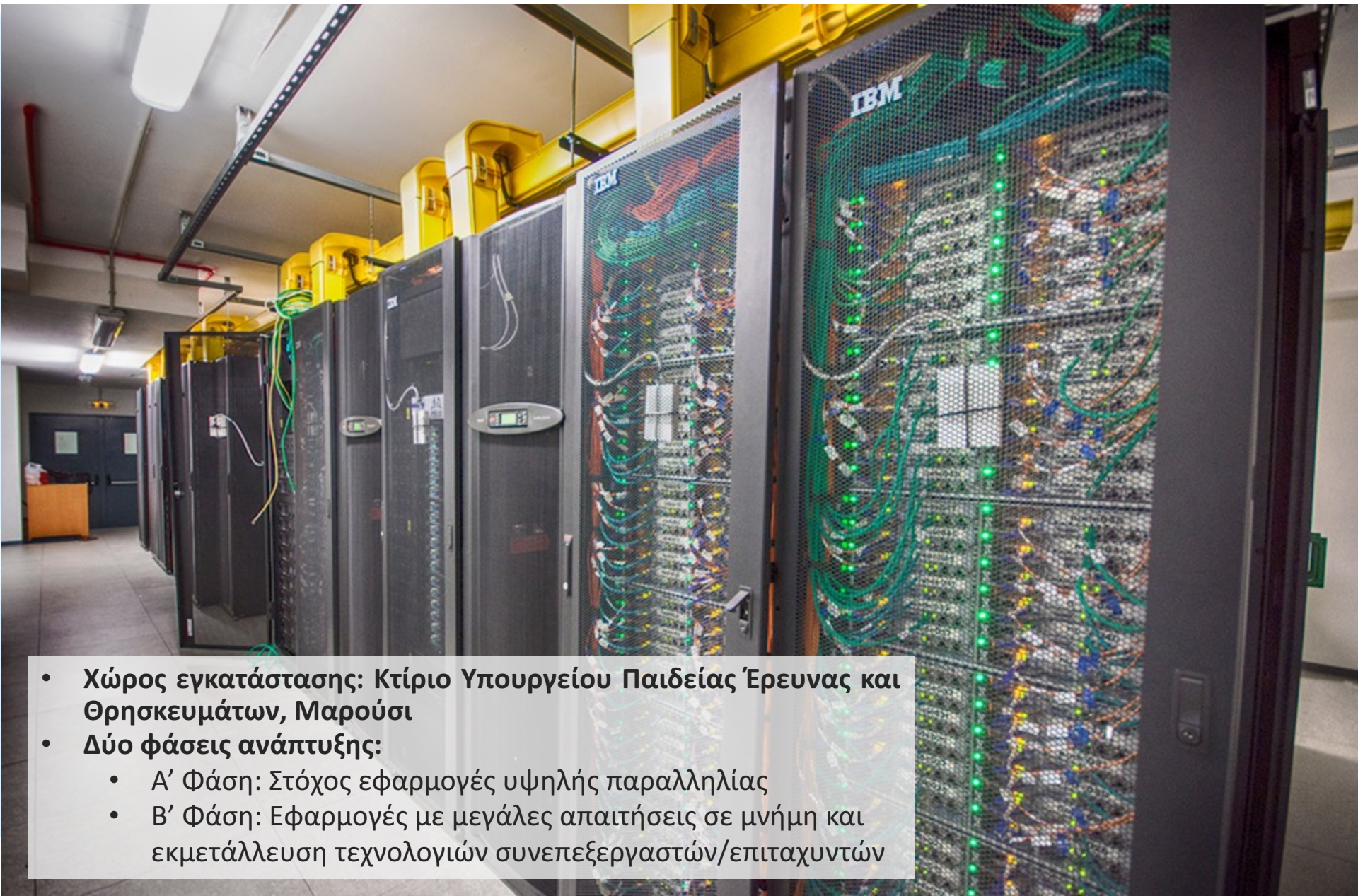
ΕΠ «Ψηφιακή Σύγκλιση», ΑΞΟΝΑΣ ΠΡΟΤΕΡΑΙΟΤΗΤΑΣ 1: «Βελτίωση της παραγωγικότητας με αξιοποίηση των ΤΠΕ»



Στόχοι έργου

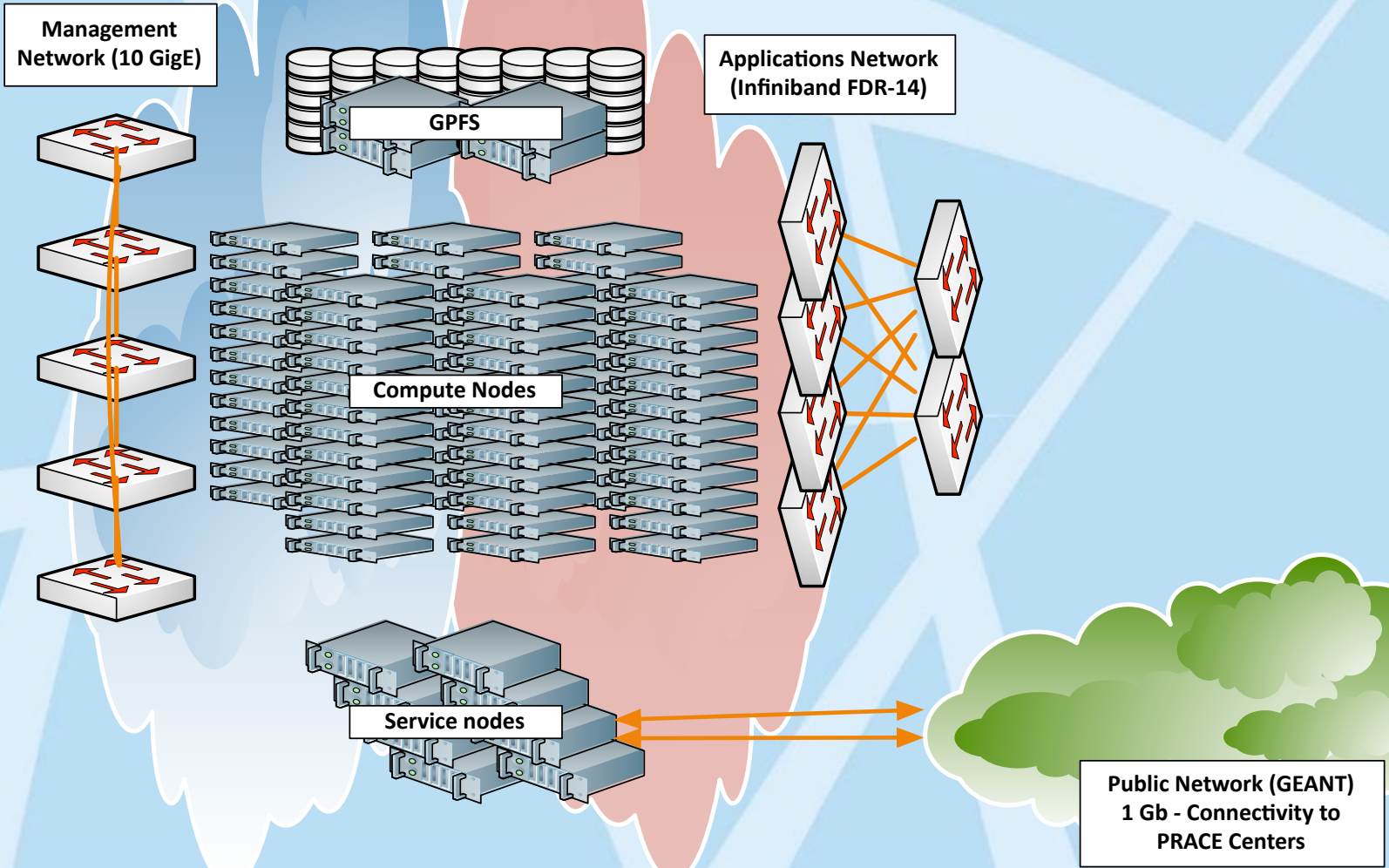
- **Επέκταση Κέντρου Δεδομένων ΕΔΕΤ στο Κτίριο του Υπουργείου Παιδείας στο Μαρούσι**
- Δημιουργία Πράσινου Κέντρου Δεδομένων στο Λούρο
- Προμήθεια υπολογιστικού εξοπλισμού για παροχή υπηρεσιών υπολογιστικού νέφους
- Προμήθεια υπολογιστικού εξοπλισμού για εξειδικευμένες επιστημονικές εφαρμογές.

ARIS (Advanced Research Information System)

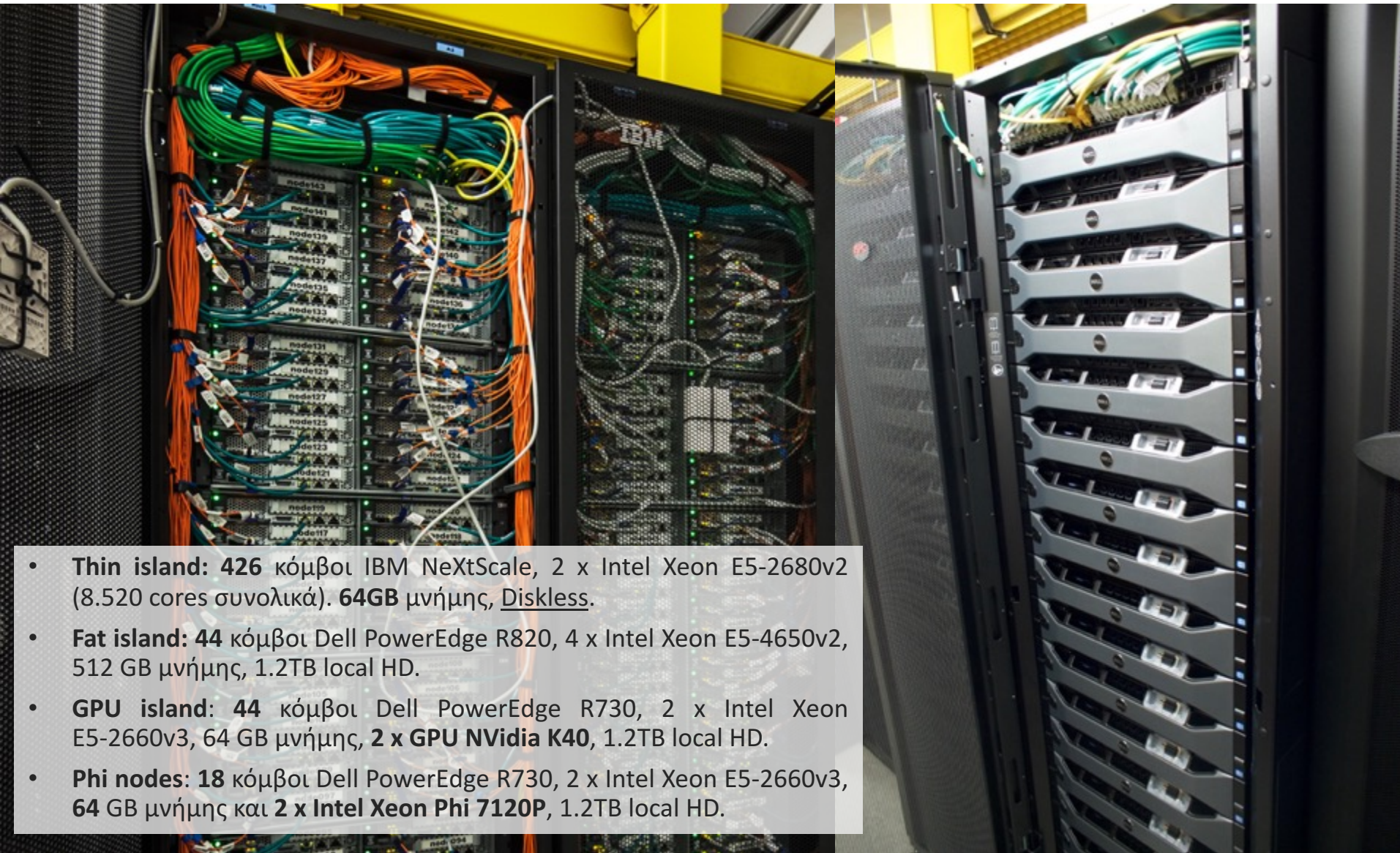


- Χώρος εγκατάστασης: Κτίριο Υπουργείου Παιδείας Έρευνας και Θρησκευμάτων, Μαρούσι
- Δύο φάσεις ανάπτυξης:
 - Α' Φάση: Στόχος εφαρμογές υψηλής παραλληλίας
 - Β' Φάση: Εφαρμογές με μεγάλες απαιτήσεις σε μνήμη και εκμετάλλευση τεχνολογιών συνεπεξεργαστών/επιταχυντών

Αρχιτεκτονική συστήματος



Υπολογιστικοί κόμβοι

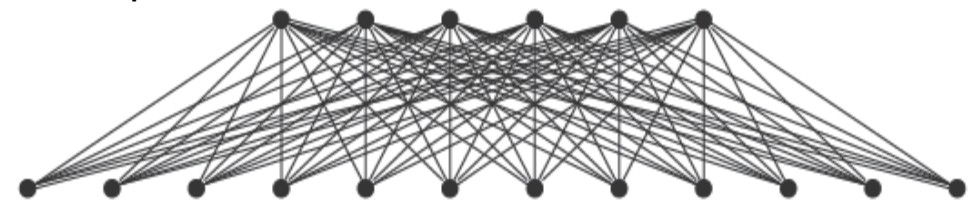




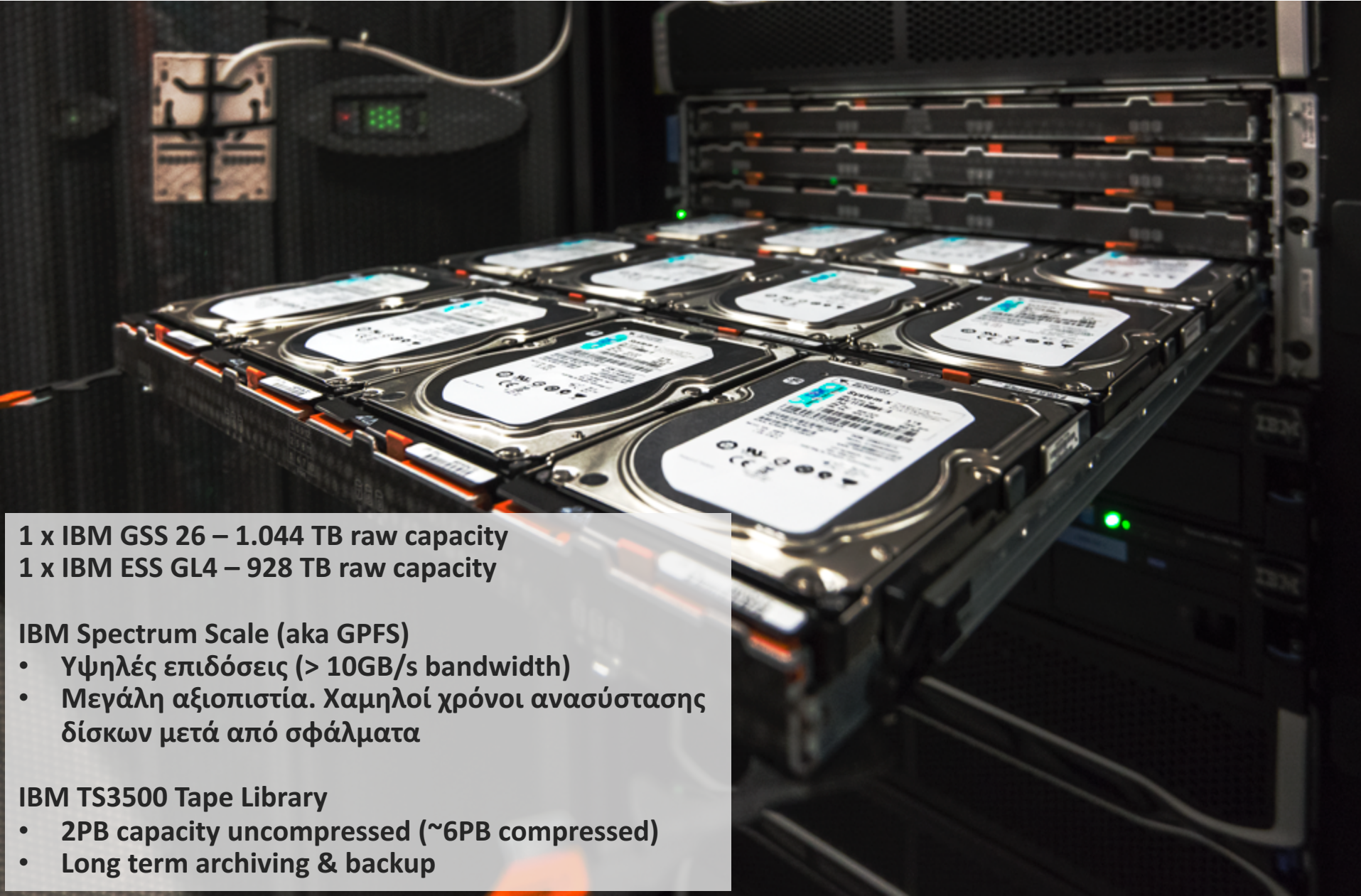
Infiniband FDR-14 56 Gbps

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

24 x Spine switches



27 x Leaf switches



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

IBM TS3500 Tape Library

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

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

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

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



* Οι φωτογραφίες είναι προσφορά του PC Magazine



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

157
έργα

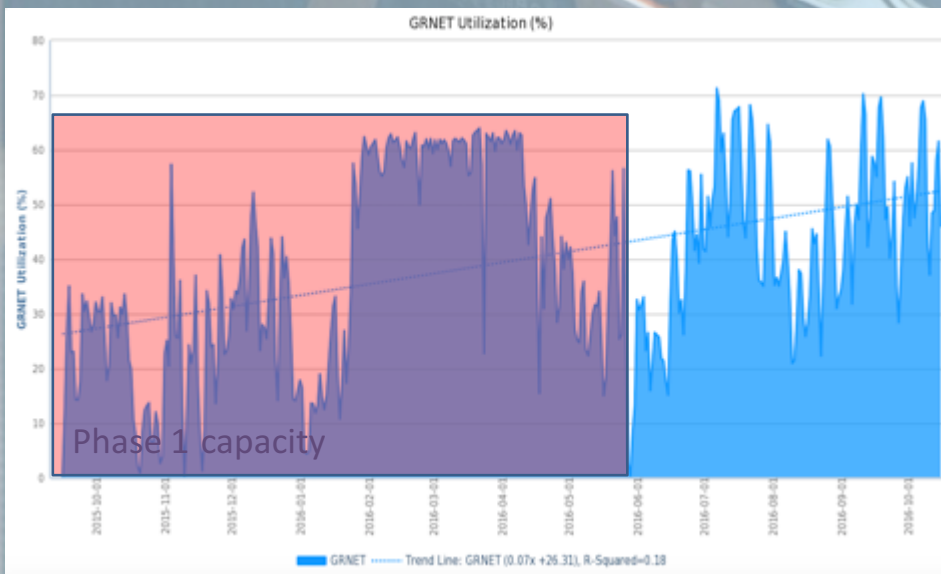
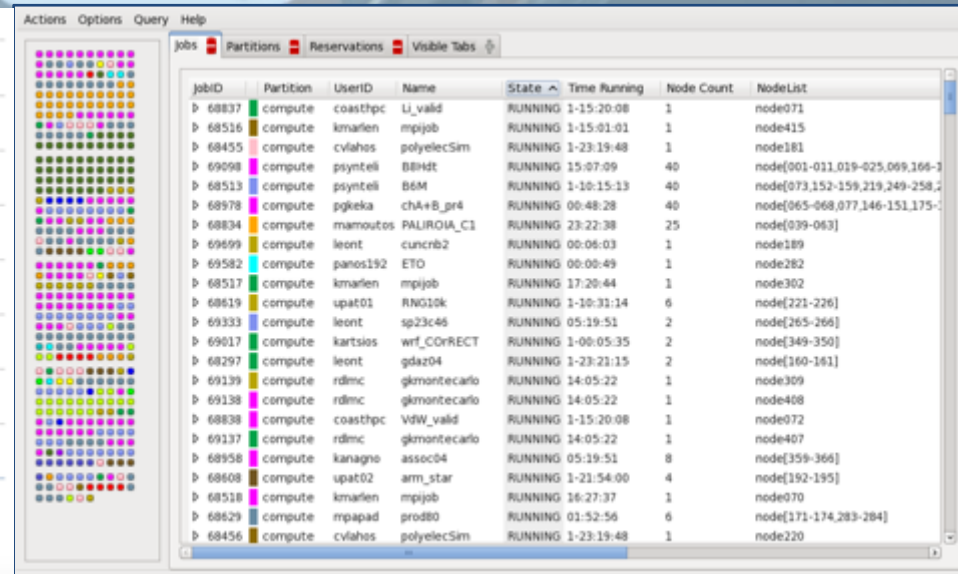
330+
επιστήμονες

3
προσκλήσεις
έργων
παραγωγής

23
Ιδρύματα

86.598.258
ώρες επεξεργασίας
έχουν αποδοθεί

3.660
Χρόνια
Επεξεργασίας

JobID	Partition	UserID	Name	State	Time Running	Node Count	NodeList
▷ 68837	compute	coasthpc	Li_valid	RUNNING	1-15-20:08	1	node071
▷ 68516	compute	lmarlen	mpjob	RUNNING	1-15-01:01	1	node415
▷ 68455	compute	cvlahos	polyelecSim	RUNNING	1-23-19:48	1	node181
▷ 69099	compute	psyntell	BEHdt	RUNNING	15-07-09	40	node[001-011,019-025,069,106-1
▷ 68513	compute	psyntell	BEM	RUNNING	1-10-15:13	40	node[073,152-159,219,249-258,2
▷ 68978	compute	pgkeka	chA+B_pr4	RUNNING	00-48:28	40	node[065-068,077,146-151,175-1
▷ 68834	compute	mamoutos	PALIROIA_C1	RUNNING	23-22:38	25	node[039-063]
▷ 69699	compute	leont	cuncrb2	RUNNING	00-06:03	1	node189
▷ 69582	compute	panos192	ETD	RUNNING	00-00:49	1	node282
▷ 68517	compute	lmarlen	mpjob	RUNNING	17-20:44	1	node302
▷ 68619	compute	upat01	RNG10k	RUNNING	1-10-31:14	6	node[221-226]
▷ 69333	compute	leont	sp23c46	RUNNING	05-19:51	2	node[265-266]
▷ 69017	compute	kartsios	wrf_CORRECT	RUNNING	1-09-05:35	2	node[349-350]
▷ 68297	compute	leont	gdaz04	RUNNING	1-23-21:15	2	node[160-161]
▷ 69139	compute	rdimc	gkmontecarlo	RUNNING	14-05:22	1	node309
▷ 69138	compute	rdimc	gkmontecarlo	RUNNING	14-05:22	1	node408
▷ 68838	compute	coasthpc	V5W_valid	RUNNING	1-15-20:08	1	node072
▷ 69137	compute	rdimc	gkmontecarlo	RUNNING	14-05:22	1	node407
▷ 68956	compute	kanagno	assoc04	RUNNING	05-19:51	8	node[359-366]
▷ 68608	compute	upat02	arm_star	RUNNING	1-21-54:00	4	node[192-195]
▷ 68518	compute	lmarlen	mpjob	RUNNING	16-27:37	1	node070
▷ 68629	compute	mpapad	prod80	RUNNING	01-52:56	6	node[171-174,283-284]
▷ 68456	compute	cvlahos	polyelecSim	RUNNING	1-23-19:48	1	node220

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