

# Εθνική Υπερυπολογιστική Υποδομή ARIS

Ευάγγελος Φλώρος  
Εθνικό Δίκτυο Έρευνας και Τεχνολογίας

Τ.Ε.Υ. Πανεπ. Κρήτης, 16/12/2016

# 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**



- 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<sup>ος</sup> πυλώνας της επιστήμης (μαζί με Θεωρία και Πείραμα)

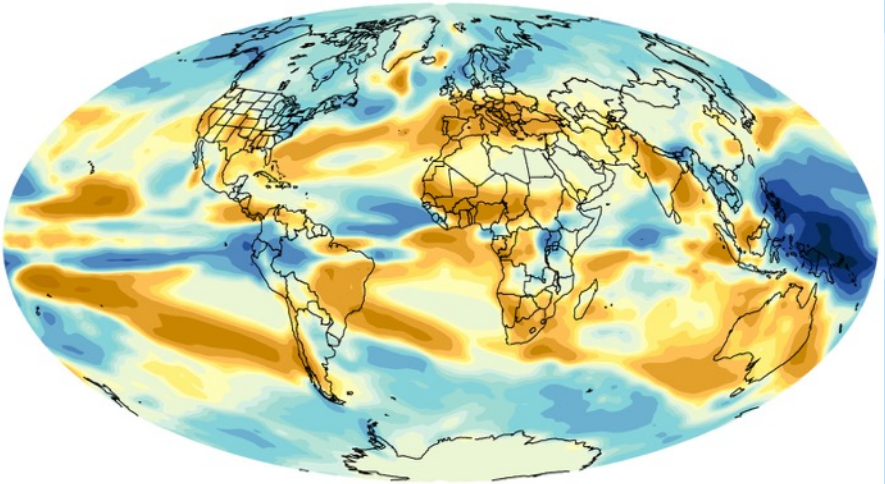
Χρήση μαθηματικών μοντέλων και υπολογισμών για την προσομοίωση περίπλοκων φυσικών φαινομένων:

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

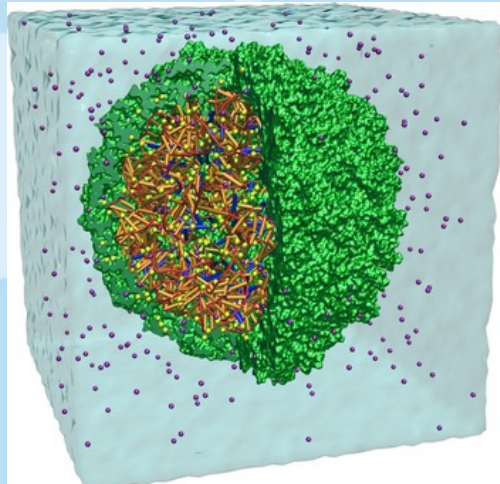
“Today to out-compete is to out-compute”



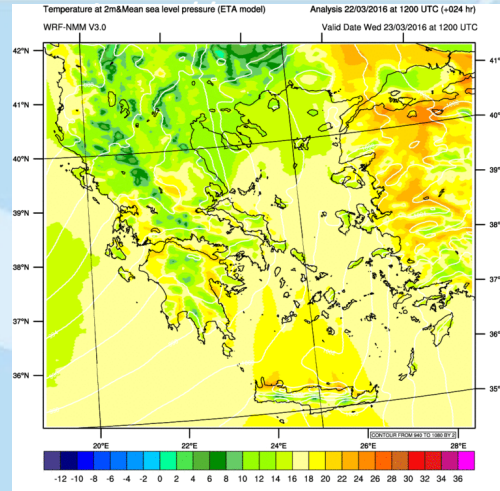
# Ενδεικτικά Πεδία εφαρμογών



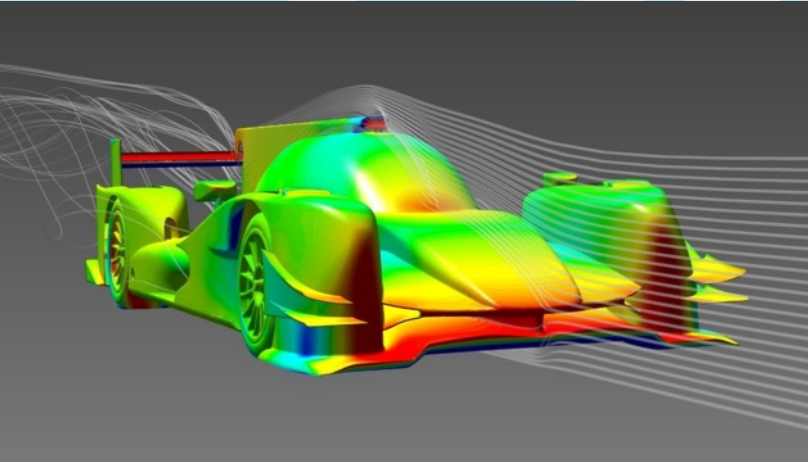
Κλιματολογία – Περιβάλλον



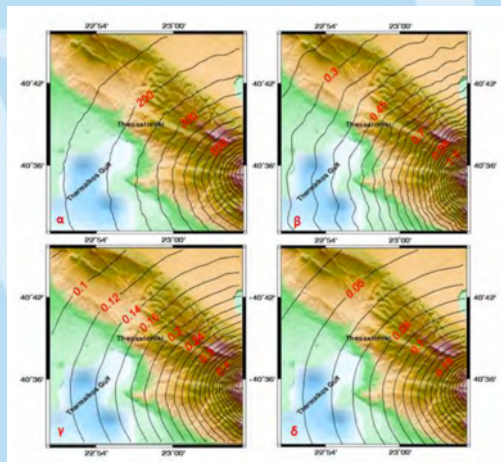
Βιοπληροφορική -  
Επιστήμες Ζωής



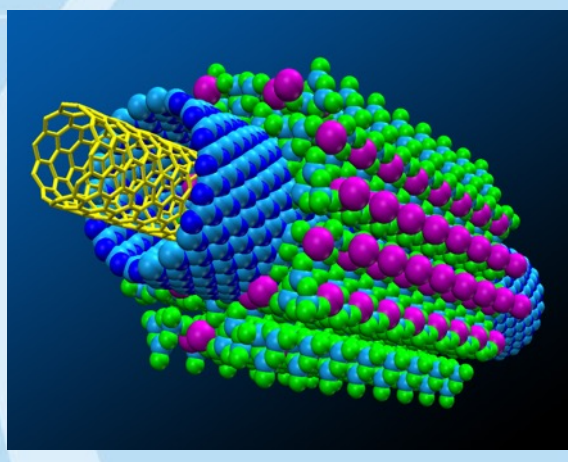
Μετεωρολογία



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



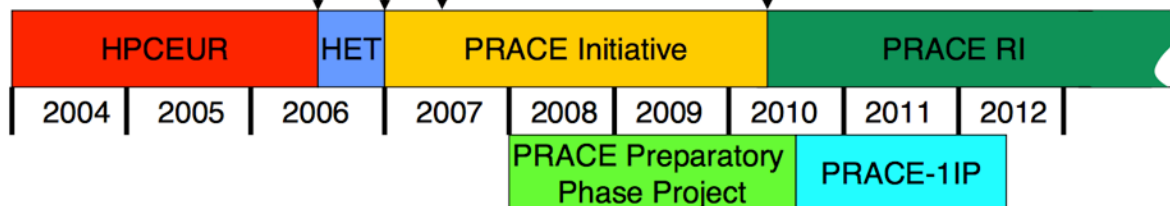
Ελλάδα ιδρυτικό μέλος ως non-hosting member

ΓΓΕΤ προκηρύσσει έργα για τη δημιουργία ερευνητικών δικτύων για το ESFRI

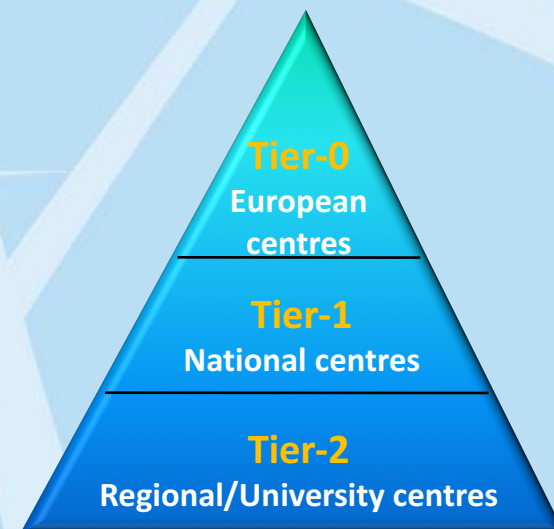
Creation of the Scientific Case

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»

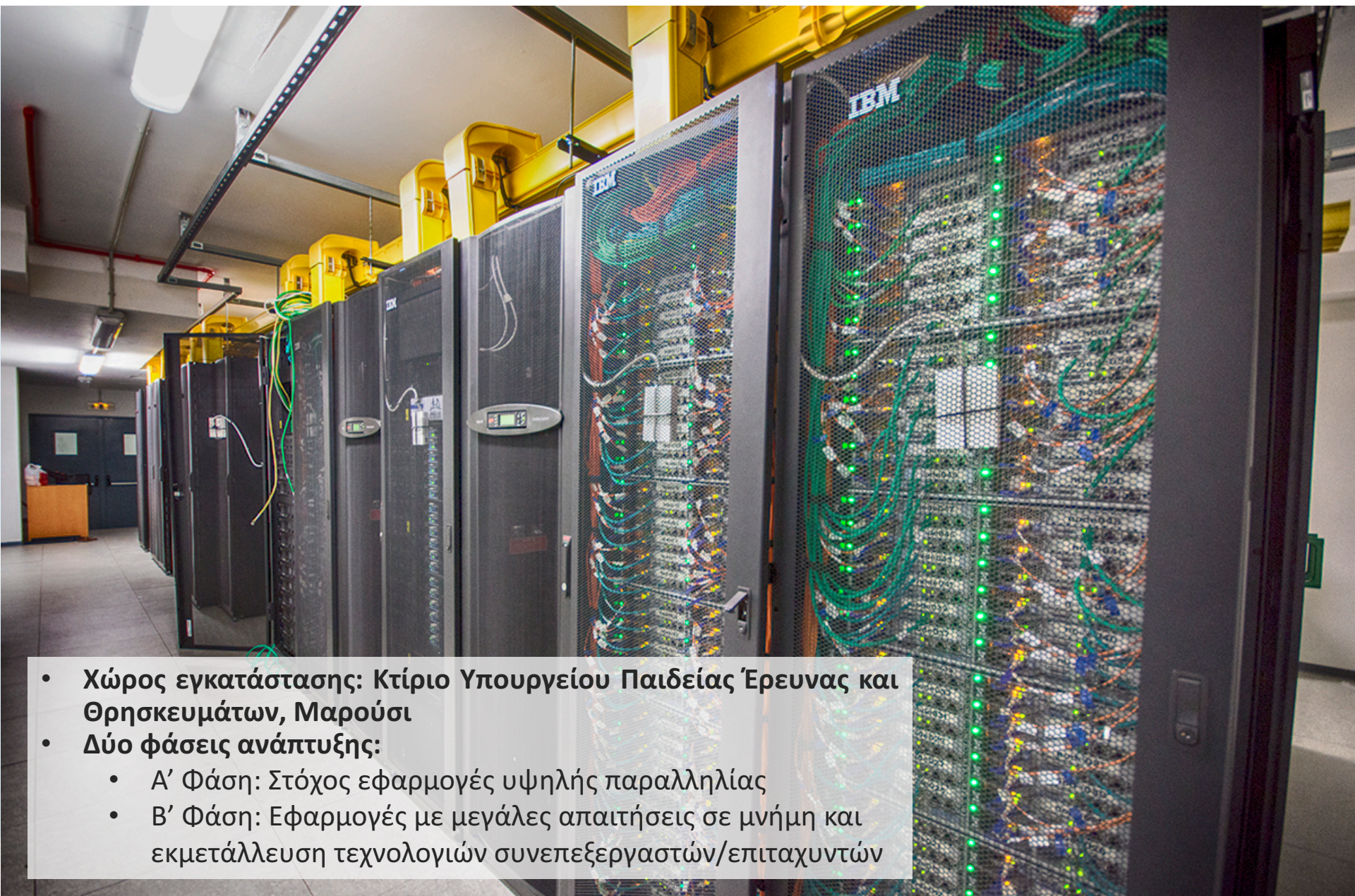


### Στόχοι έργου

- **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.



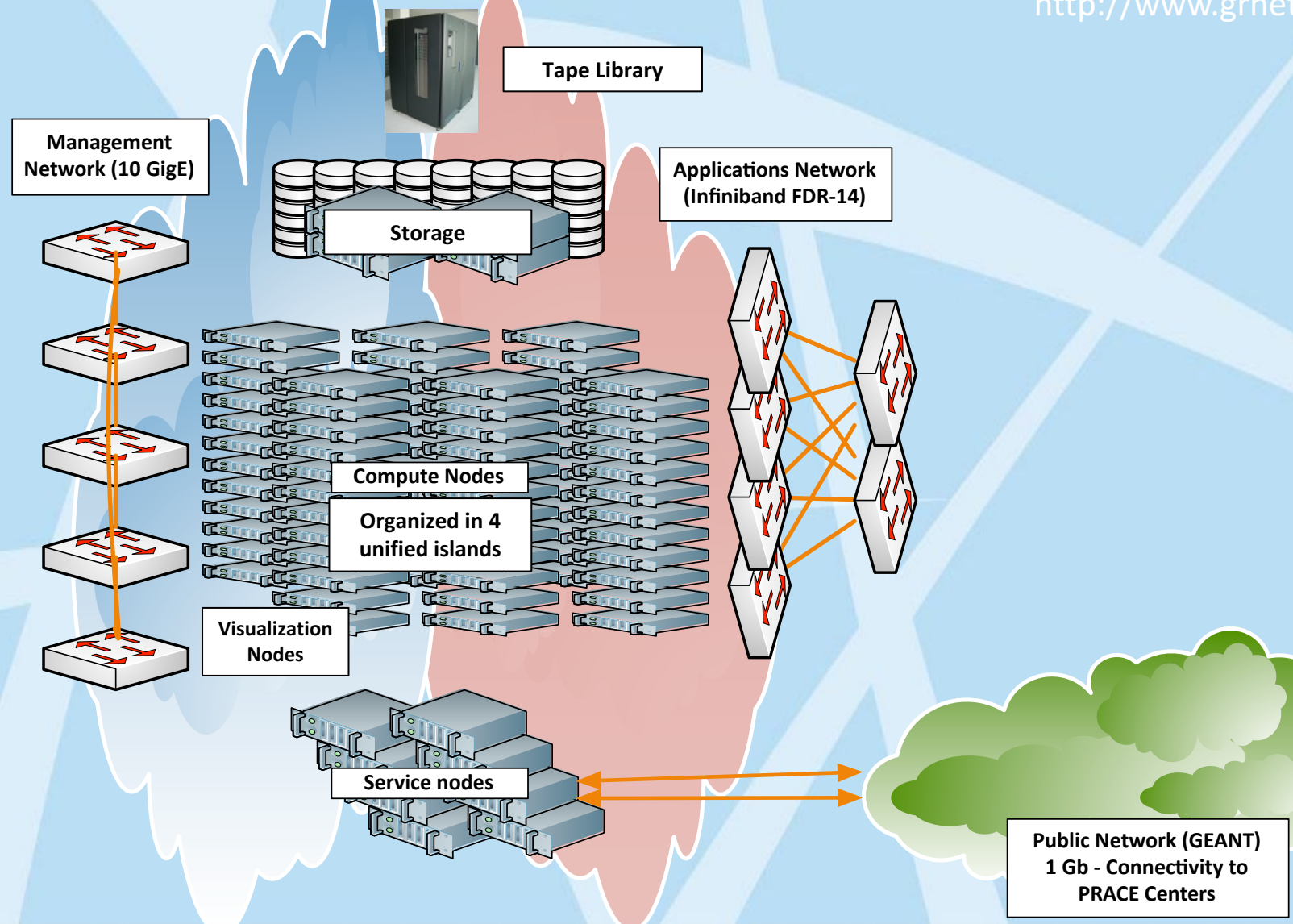
# ARIS (Advanced Research Information System)



- 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**

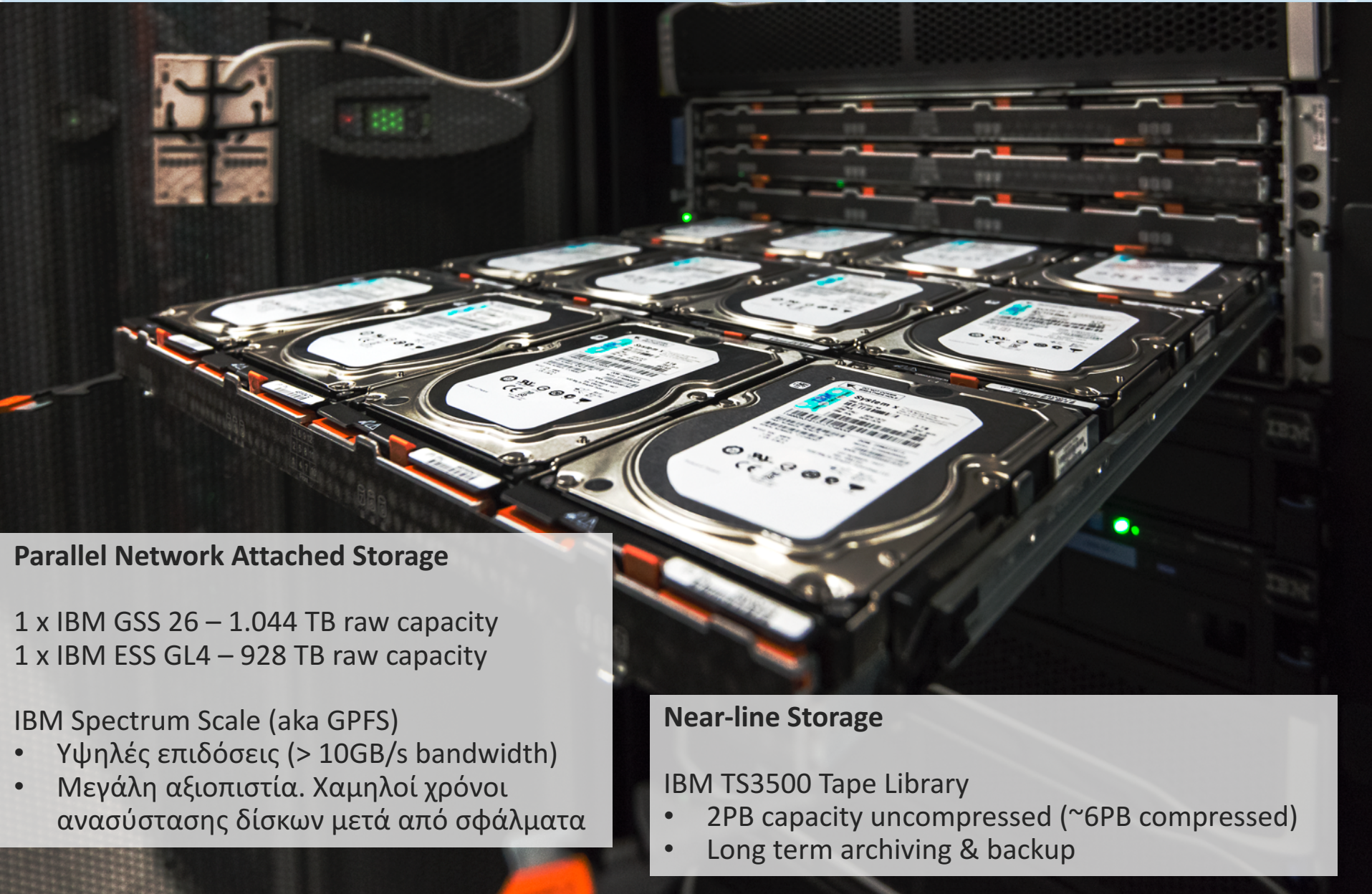
Dell PowerEdge R820,  
**4 x Intel Xeon E5-4650v2,**  
512 GB μνήμης,  
1.2TB local HD.

## 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)

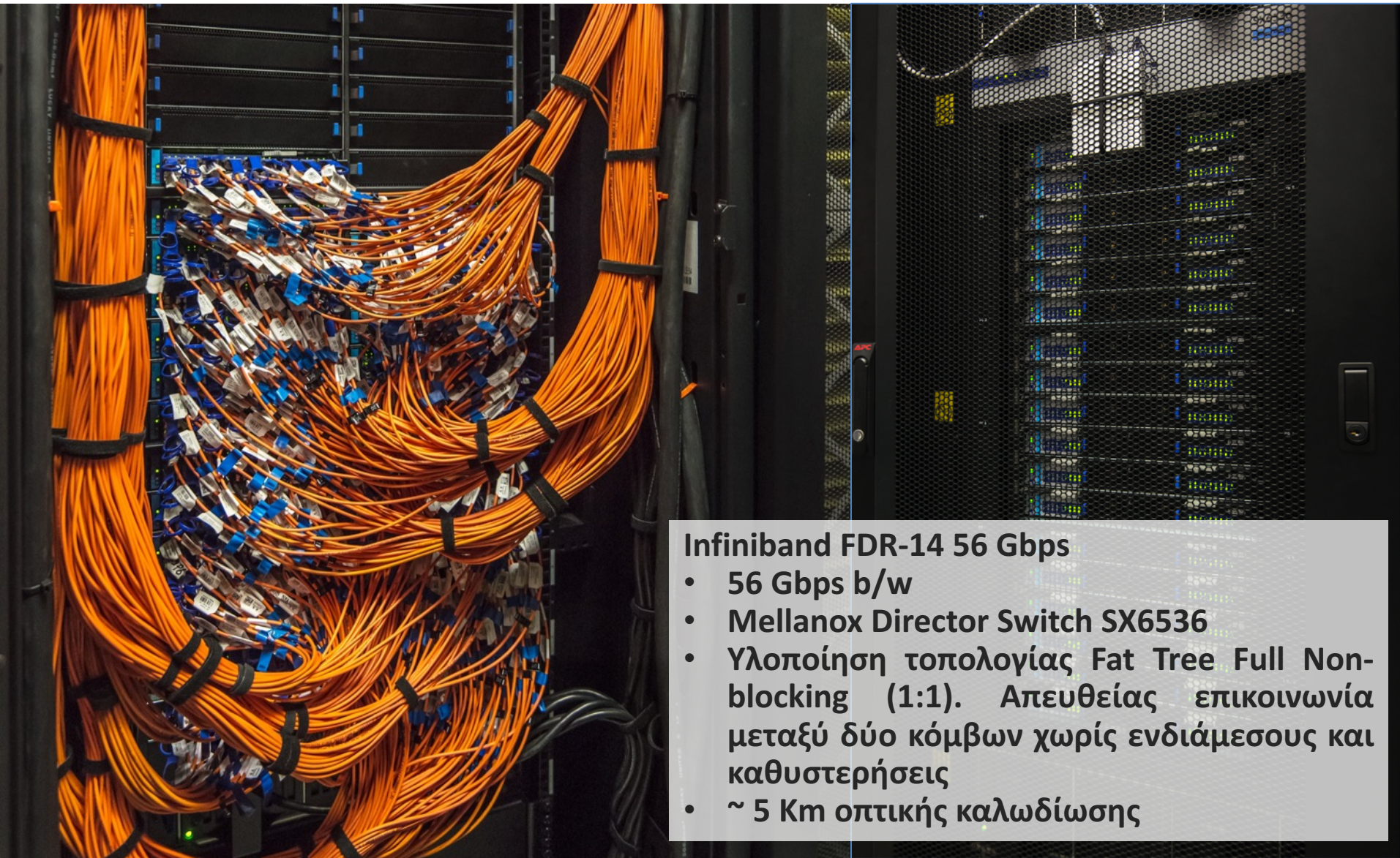
- Υψηλές επιδόσεις (> 10GB/s bandwidth)
- Μεγάλη αξιοπιστία. Χαμηλοί χρόνοι ανασύστασης δίσκων μετά από σφάλματα

## 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



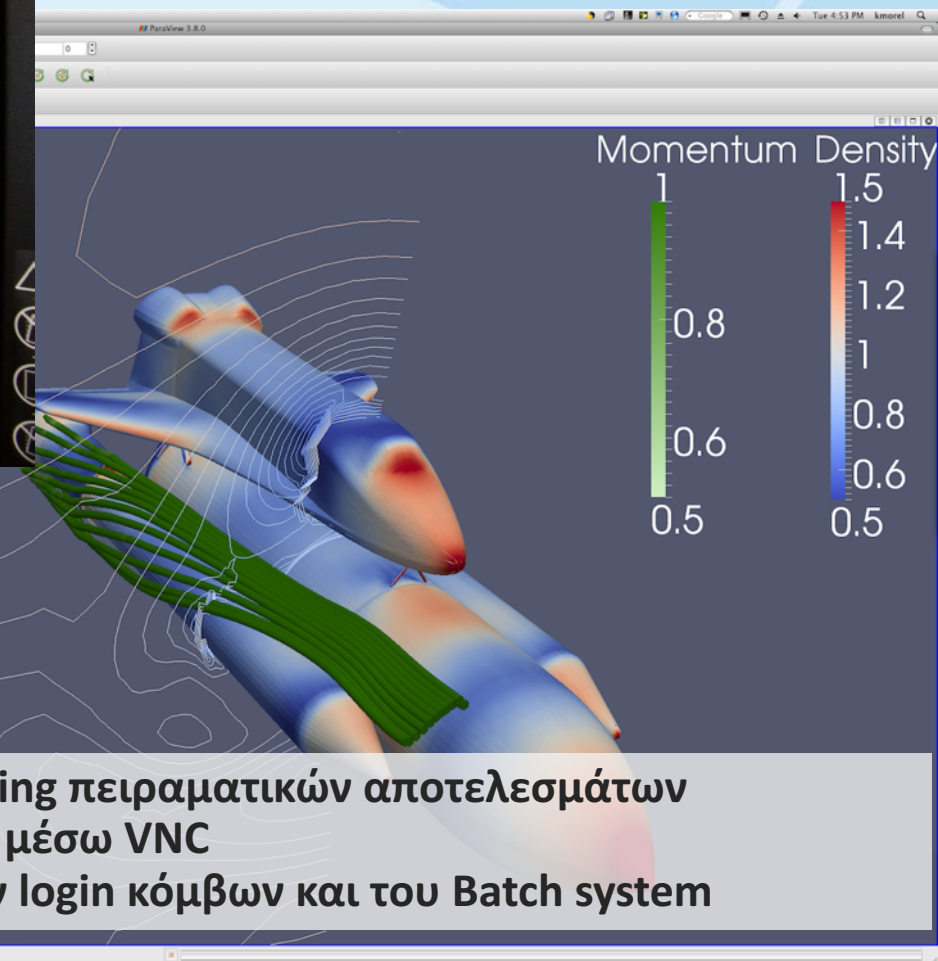
# Visualization Nodes

<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

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

\* Οι φωτογραφίες είναι προσφορά του PC Magazine



## Λειτουργικό σύστημα

- Red Hat Enterprise Linux 7.2
- CentOS 6.8

## Batch System

- SLURM 16.05.4 (Simple Linux Utility for Resource Management)





## 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)     ncarq/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

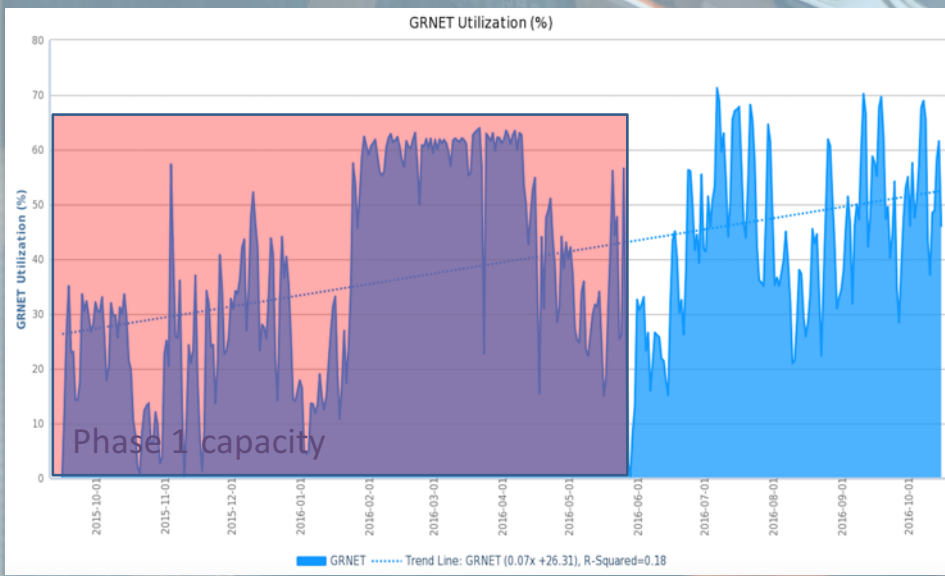
330+  
επιστήμονες

3  
προσκλήσεις  
έργων  
παραγωγής

23  
Ιδρύματα

86.598.258  
Core hours  
έχουν αποδοθεί

3.660  
Χρόνια  
Επεξεργασίας



Actions Options Query Help

Jobs Partitions Reservations Visible Tabs

JobID	Partition	UserID	Name	State	Time Running	Node Count	NodeList
▷ 68837	compute	coasthpc	Li_valid	RUNNING	1-15:20:08	1	node071
▷ 68516	compute	kmarlen	mpjob	RUNNING	1-15:01:01	1	node415
▷ 68455	compute	cvlahos	polyelecSim	RUNNING	1-23:19:48	1	node181
▷ 69098	compute	psynteli	B8Hdt	RUNNING	15:07:09	40	node[001-011,019-025,069,166-1
▷ 68513	compute	psynteli	B6M	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	cuncnb2	RUNNING	00:06:03	1	node189
▷ 69582	compute	panos192	ETO	RUNNING	00:00:49	1	node282
▷ 68517	compute	kmarlen	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	1-00:05:35	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	VdW_valid	RUNNING	1-15:20:08	1	node072
▷ 69137	compute	rdimc	gkmontecarlo	RUNNING	14:05:22	1	node407
▷ 68958	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	kmarlen	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](mailto:hpc-info@lists.grnet.gr)

Πληροφορίες για την πρόσβαση: [hpc-access@lists.grnet.gr](mailto:hpc-access@lists.grnet.gr)

Τεχνική υποστήριξη: [support@hpc.grnet.gr](mailto: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