



Високопроизводителни изчисления - High performance computing (HPC)

Ana Proykova

Big Data Summer School
Bankya, 8-15 July 2018



BG05M2OP001-1.001-0004 -C01

Високопроизводителни изчисления/компютри

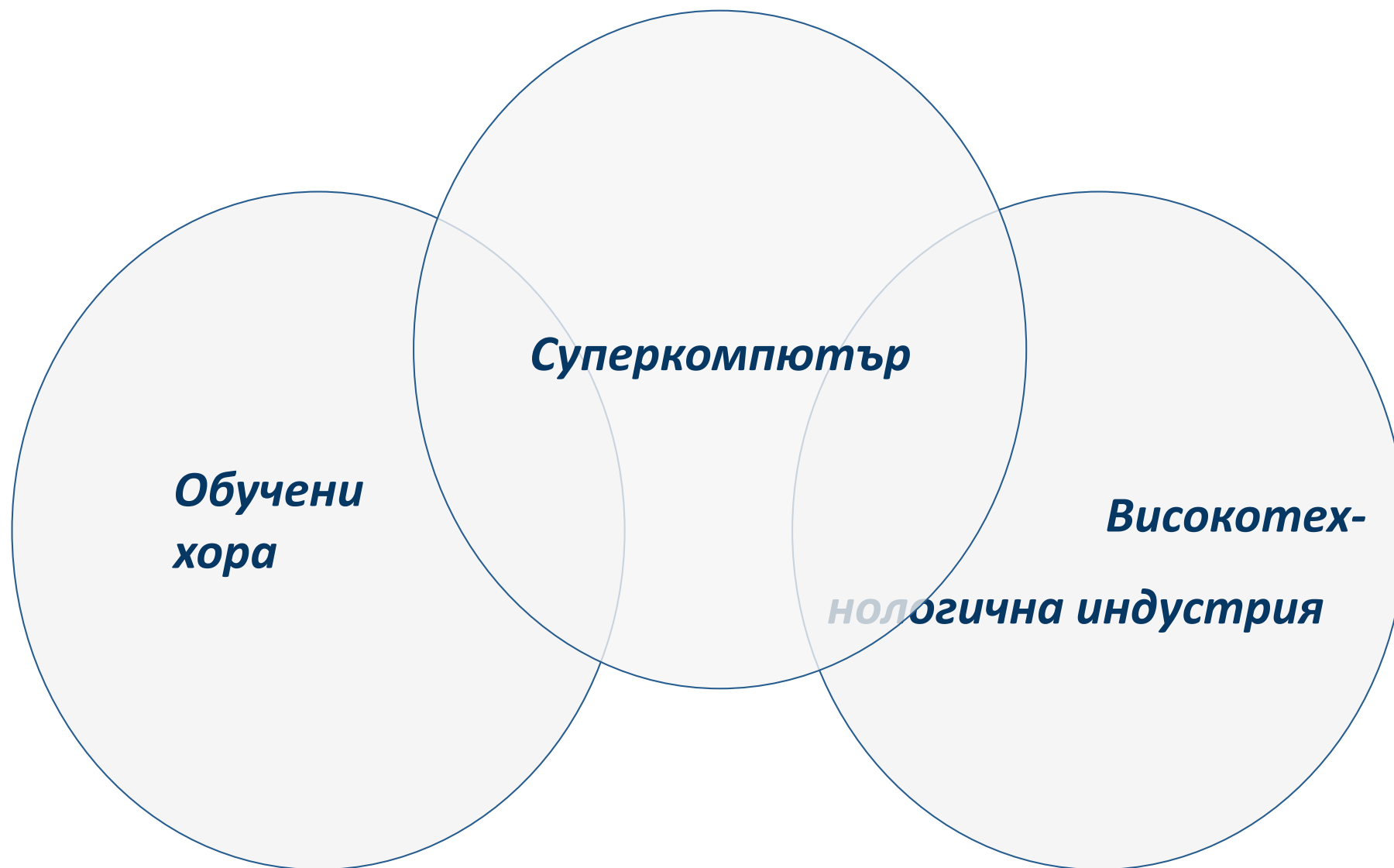
HPC: High Performance Computing

Мащабни изчислителни задачи, изискващи обикновено паралелна работа на множество процесори, към които изискванията са големи, както и към дисковите масиви.

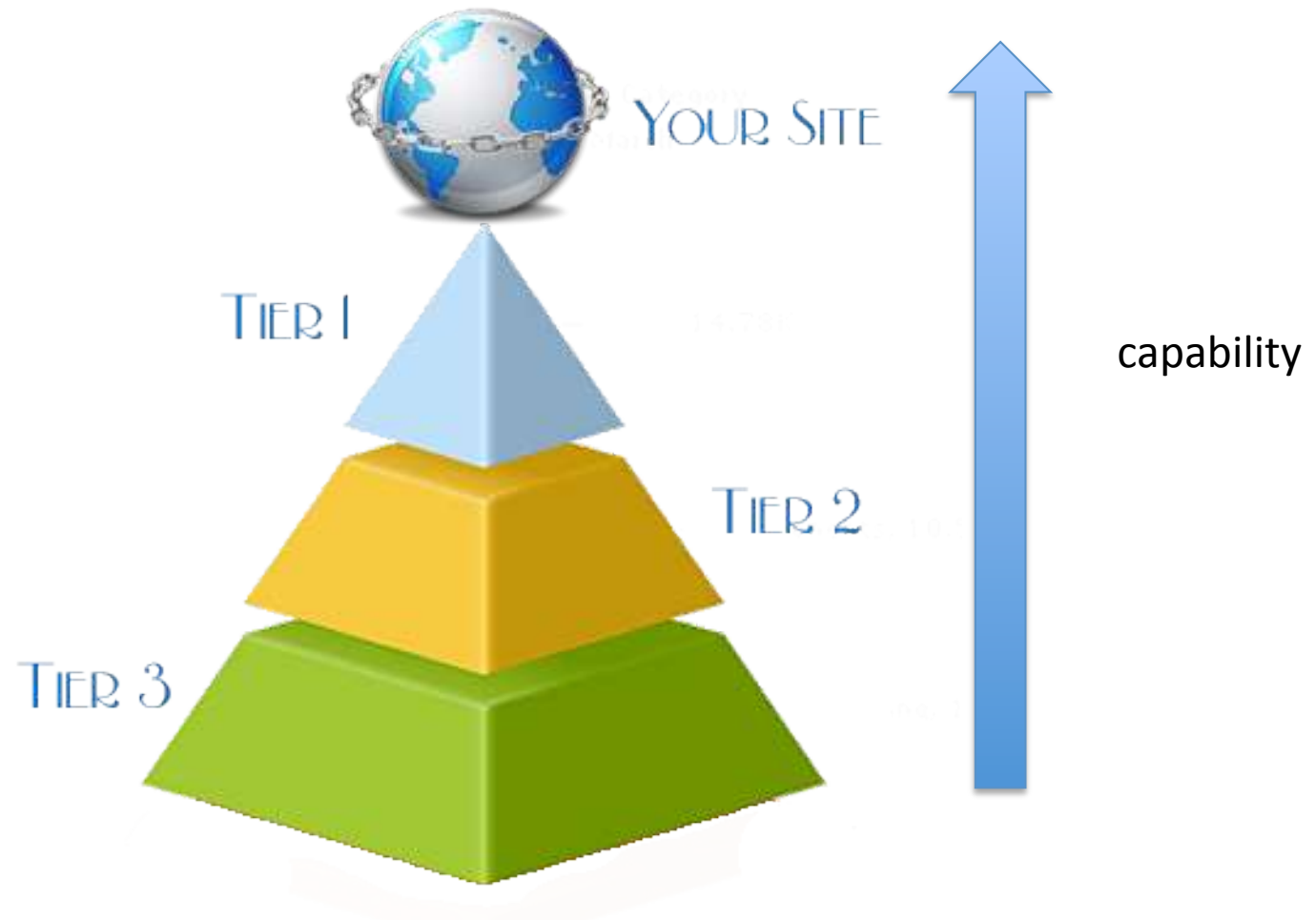
HPC: High performance Computers– grids, clusters

В най-общия случай представляват съсредоточаване на изчислителни ресурси така, че да се постигне изчислителна мощ, която не може да бъде достигната от настолните компютри или работни станции

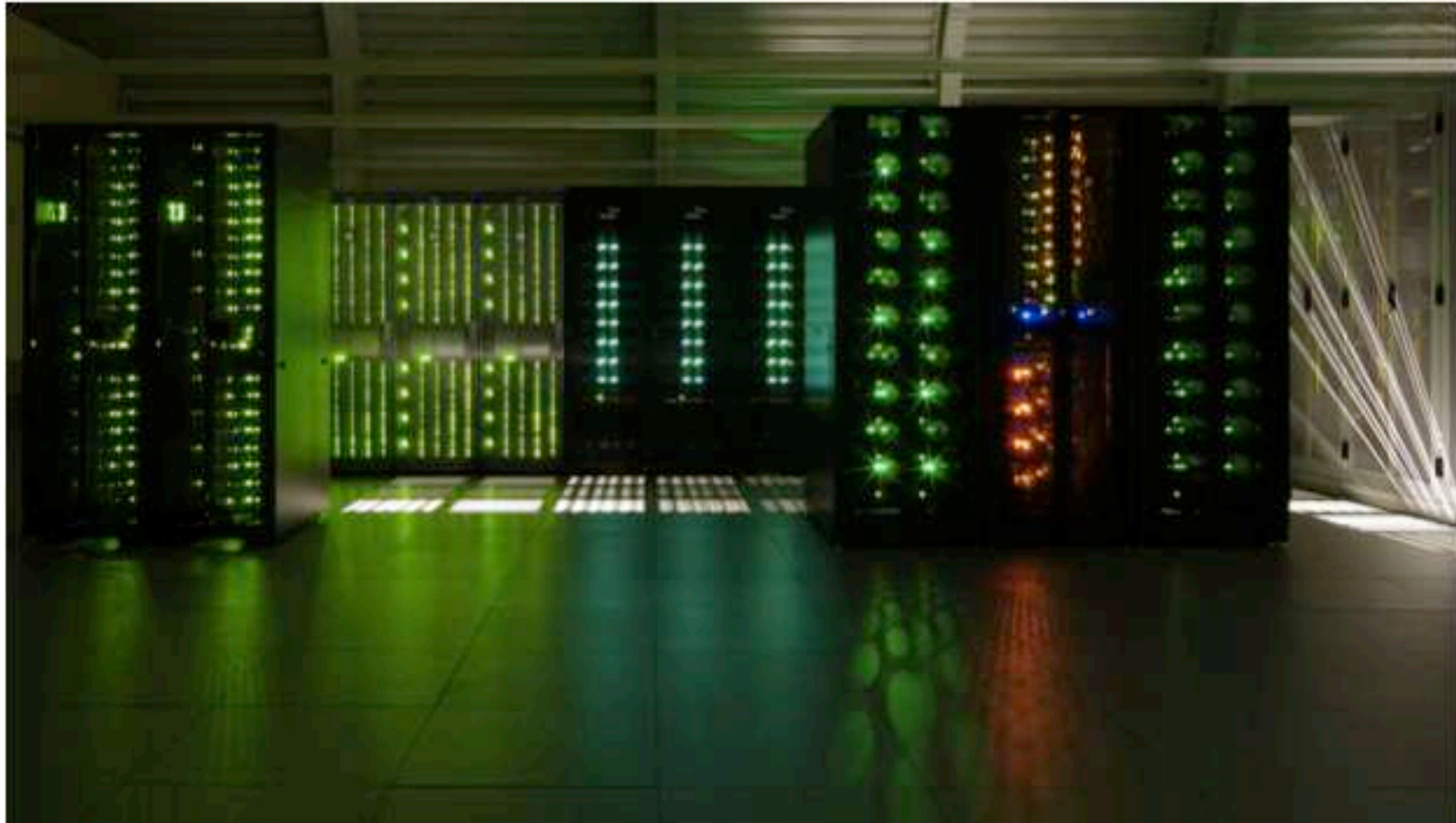
Лаборатория по високопроизводителни изчисления включва



Суперкомпютри - роля:
Tier 0 Глобална
Tier 1 Национална
Tier 2 Област (регион)
Tier 3 Институционална



Университет в Аахен (TIER 3)



Лаборатория по високопроизводителни изчисления nestum.phys.uni-sofia.bg кълъстер NESTUM в София Тех Парк (TIER2)

- откриване 03.2017



Barcelona Supercomputing Centre (TIERO) - BSC

<https://www.bsc.es/marenostrum/marenostrum>

MareNostrum (Средиземно море) е името, което BSC използва, за различните актуализации, направени на най-емблематичния суперкомпютър и най-мощния суперкомпютър в Испания.

Досега са инсталирани четири версии.

MareNostrum – I,II

2004 испанското правителство и IBM подписаха споразумение за изграждането на един от най-бързите компютри в Европа. Изчислителният му капацитет е **42,35 Teraflops** (42,35 трилиона операции в секунда).

2006 капацитетът е двойно увеличен поради голямото търсене от научни проекти - **94,21 Teraflops**. За да се постигне това, той увеличи Броят на процесорите е увеличен: 4 812 -> 10 240

MareNostrum III

2012-2013 MareNostrum постигна върхови резултати от 1.1 Petaflops. Той е съставен от 48 896 процесора Intel Sandy Bridge в 3 056 възли, включително 84 Xeon Phi 5110P в 42 възела, с повече от 115 TB от главната памет и 2 PB от GPFS дисково хранилище

GPFS= General Parallel File System. IBM's shared-disk distributed parallel clustered file system. Shared disks. Switching fabric. I/O nodes.

MareNostrum IV

В края на юни **2017** г. започна да работи MareNostrum IV, който при пълно инсталиране ще има върхова производителност от **13.7 Petaflops**.

2004 - 42,35 Teraflops → 2017 - **13.7 Petaflops**

1 Tera - one million million (10^{12})

1 Peta - one thousand million million (10^{15})

13 години за 1000 пъти увеличение

Суперкомпютърният център на Барселона е в черква
<https://www.atlasobscura.com/places/barcelona-supercomputing-center>



MareNostrum IV (2017)

<https://www.youtube.com/watch?v=y40PGLPYg90>



Grid vs HPC computing

Grid computing е събирането на компютърни ресурси от множество места, за постигане на обща цел. Мрежата може да се разглежда като разпределена система с неактивни работни натоварвания, които включват голям брой файлове.

Grid computing се отличава от конвенционалните високопроизводителни изчислителни системи: в GRID всеки възел е зададен да изпълнява различна задача / приложение.

Грид компютрите също често са по-хетерогенни и географски разпръснати (по този начин не физически свързани), отколкото HPC кълъстерите.

Увод HPC

- **Разбиране на паралелни модели на програмиране**
- **Как да взаимодействате с HPC (компютър)**
- **Познаване на текущите HPC архитектури**
- **Познаване на съществуващите библиотеки за паралелно програмиране**
- **Оценяване на бъдещето на HPC**

Паралелно изчисляване

- **Паралелните изчисления и НРС са тясно свързани**
- **По-високата производителност изисква повече процесори**
- **Разбиране на различните паралелни програми за програмиране ви позволява да разберете как да използвате ресурсите на НРС ефективно**

Хардуер (архитектура)

- Някои хардуерни инсталации са по-добри като ресурс от други
- Избор на подходящ ресурс за вашето приложение
- Паралелизиране на серийното приложение
- Оценка кои са важните части на програмата за постигане на ефективност

Серийни (последователни) изчисления

- Без разбиране за начина, по който работи серийното изчисление е трудно е да се разбере паралелното изчисляване
- Какви са факторите, които са важни за серийното изчисление
- Как компилаторът произвежда изпълним код?
- Кои битове са автоматични и за кои части на програмата трябва да се притеснявам
- Какво може или не може да направи операционната система за мен?

Какво имаме предвид под ”производителност” (performance)?

За научно и техническо програмиране FLOPS
(Операции с плаваща запетая за секунда)

$$1.324398404 + 3.6287414 = ?$$

$$2.365873534 * 2443.3147 = ?$$

Съвременните суперкомпютри, измерени в PFLOPS
(PetaFLOPS) Кило, Мега, Гига, Тера, Пета, Еха = 10^3 ,
 10^6 , 10^9 , 10^{12} , 10^{15} , 10^{18}

- Времето на изпълнение често се използва за специфични кодове
- Другите дисциплини имат свои собствени мерки за производителност: брой кадри в секунда, скорост на достъп до базата данни, ...

Разлики от настолните изчисления (Desktop Computing)

- Не се свързате направо с изчислителните възли
- Задачата за изпълнение (job) се изпраща чрез система за планиране (batch)
- Не е GUI-среда
- Споделяте изчислителната система с много потребители
- Ресурсите са по-строго наблюдавани и се контролират:

дисквите квоти

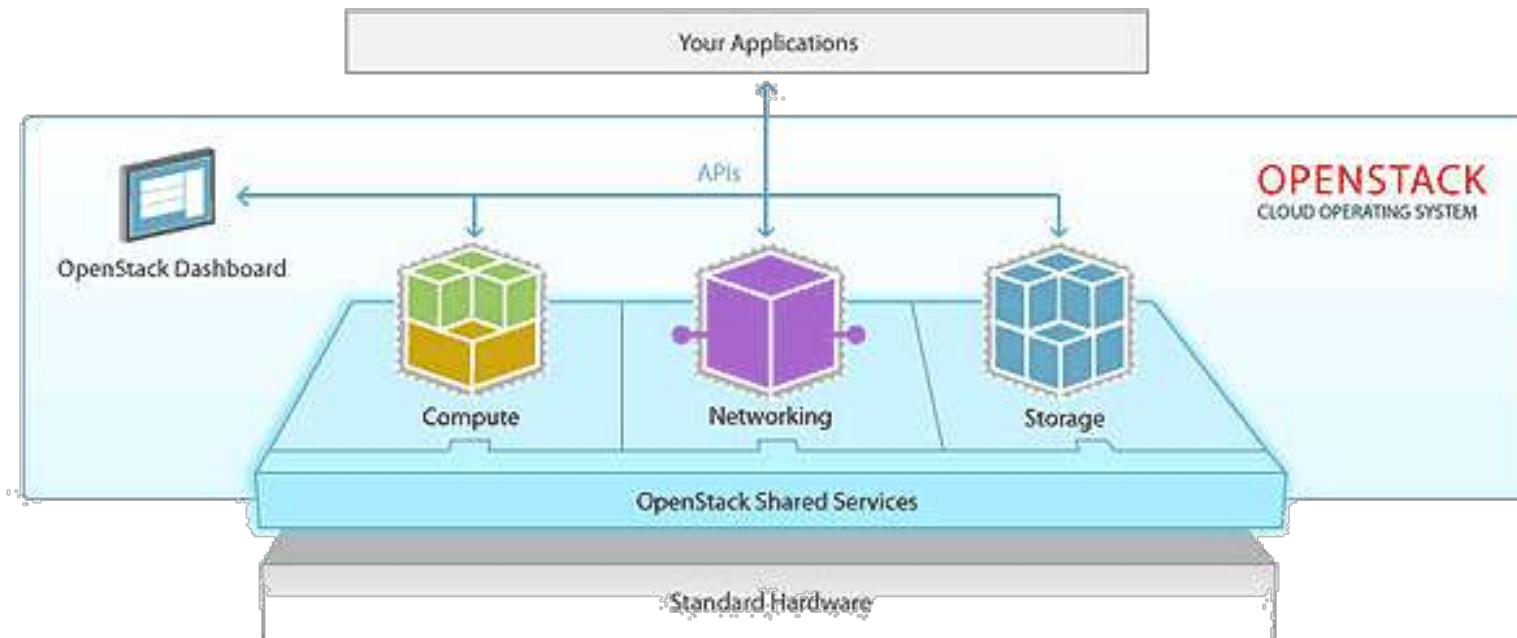
използванто на процесора

Имам ли нужда от HPC@Cloud?

- **Нужда от изчислителни ресурси:**
 - Голямо процесорно натоварване
 - Време
 - Надеждна обработка на големи масиви от данни (Big Data)
 - Гъвкава инфраструктура
- **Допълнителни фактори:**
 - Сигурност на данните
 - Квалифицирана поддръжка

НРС лабораторията в СофияТехПарк

- Удобен интерфейс за потребителите базиран върху облачна технология чрез *OpenStack*
- Концепцията за персонален клъстер
- Допълнителни ресурси при изискване



НРС в София тех парк (TIER2)

- Бизнес приложения – умения
- Предсказание и реакция към случайни явления, с въздействие върху обществото
- Ефективно използване на енергийни ресурси и нови материали
- Дизайн на софтуер и хардуер според нуждите на потребителя



Иновативни софтуерни услуги и инструменти

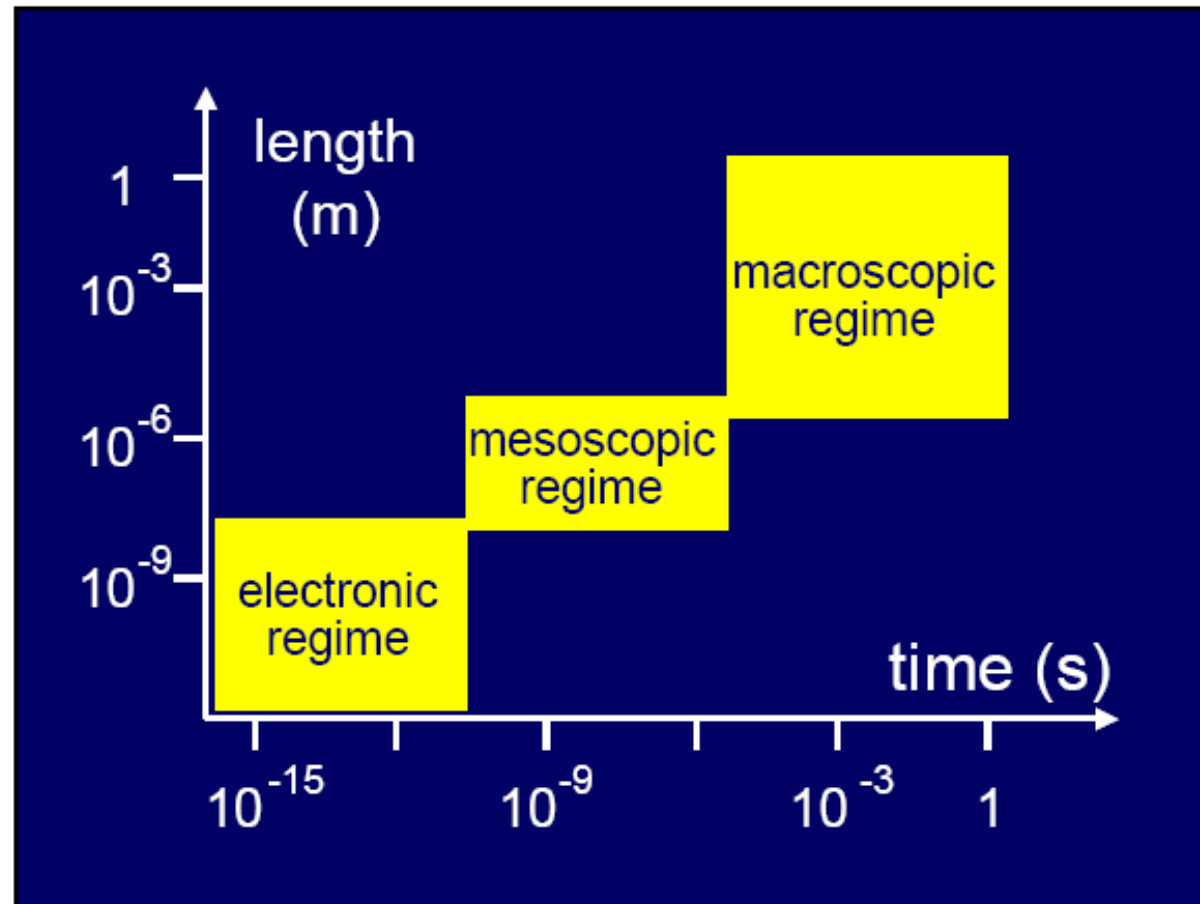
НРС: За цялата верига на Big Data (*)

Големите данни е нововъзникваща област, където новаторската технология предлага нови начини за извличане на **значения** отналичната информация

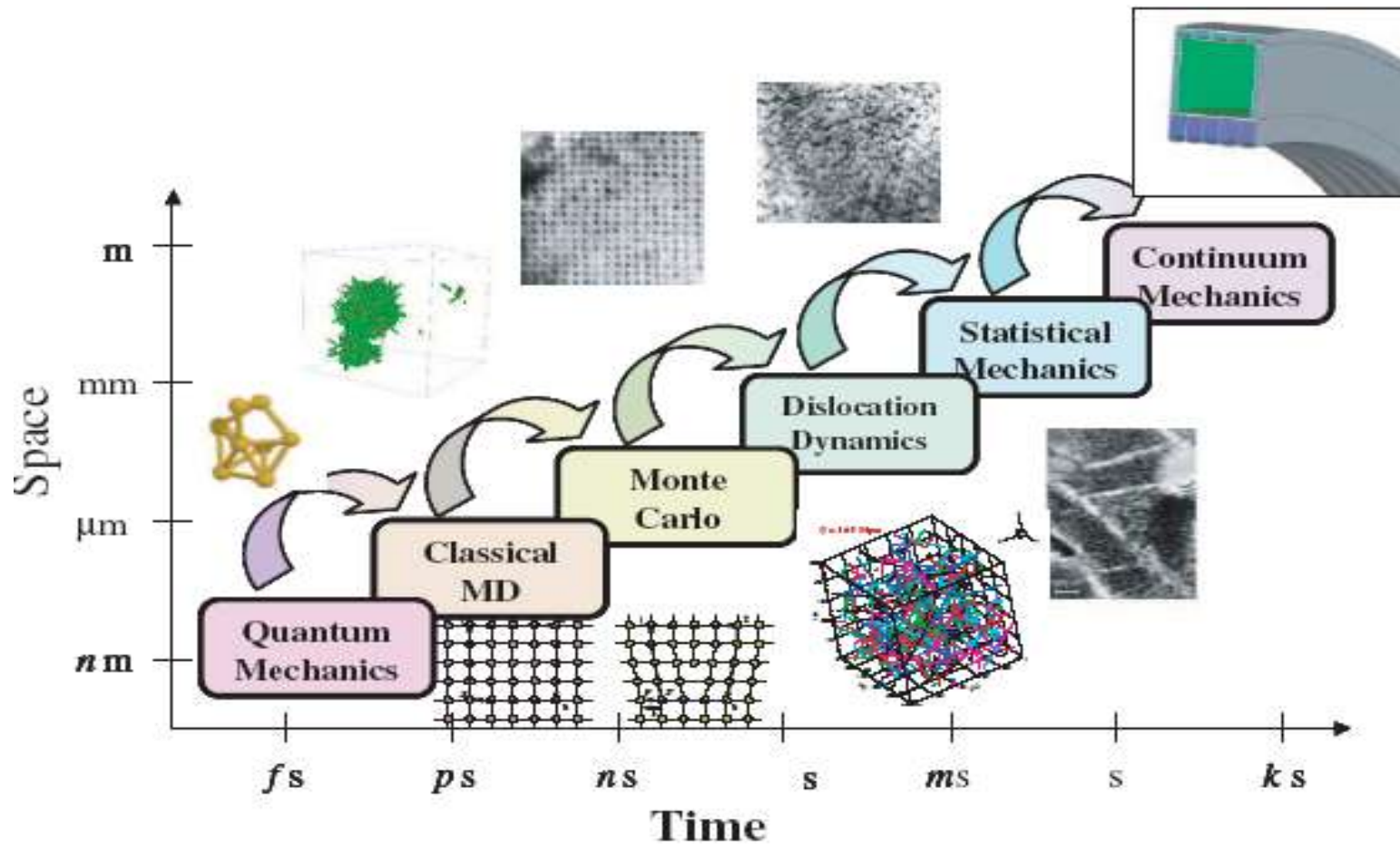
ИТ подходите в социално-икономическата и политическата сфера се използват за реализиране на уеб, хибридни и "родствени" (native) приложения за предоставяне на иновативни услуги на компаниите с научноизследователска и развойна дейност.

Паралелни изчисления на сложни системи и процеси

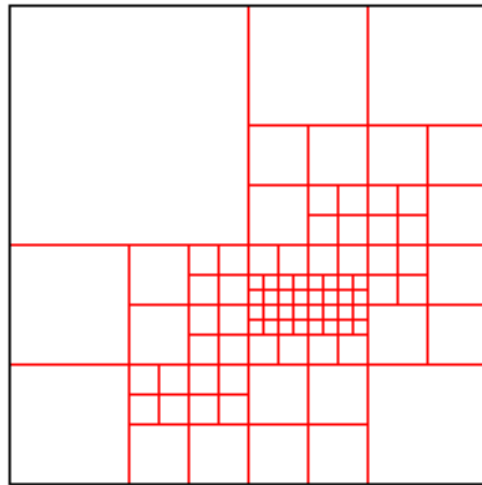
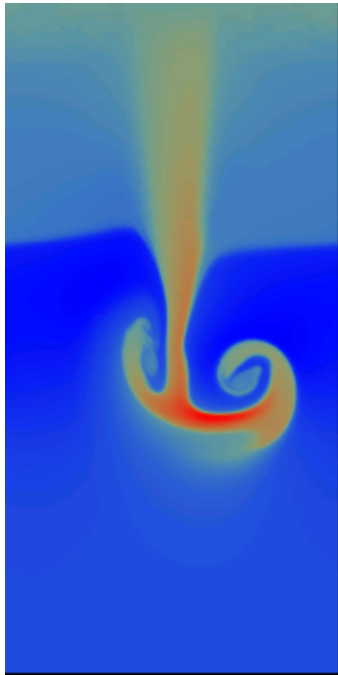
- **Квантова информатика – Изучаване динамичното поведение на комплексни квантово-механични системи**
- **Нано технологии – Изследване механичните и електронни свойства на нано размерни обекти**
- **Моделиране на климата и синоптични прогнози – Създаване на реалистични модели за кратко-срочно и дългосрочно предсказване на времето. Изгражданане на единна метео база данни и асимилирането и в моделите.**
- **Биофизика – Моделиране на биологични процеси**



The time-scales

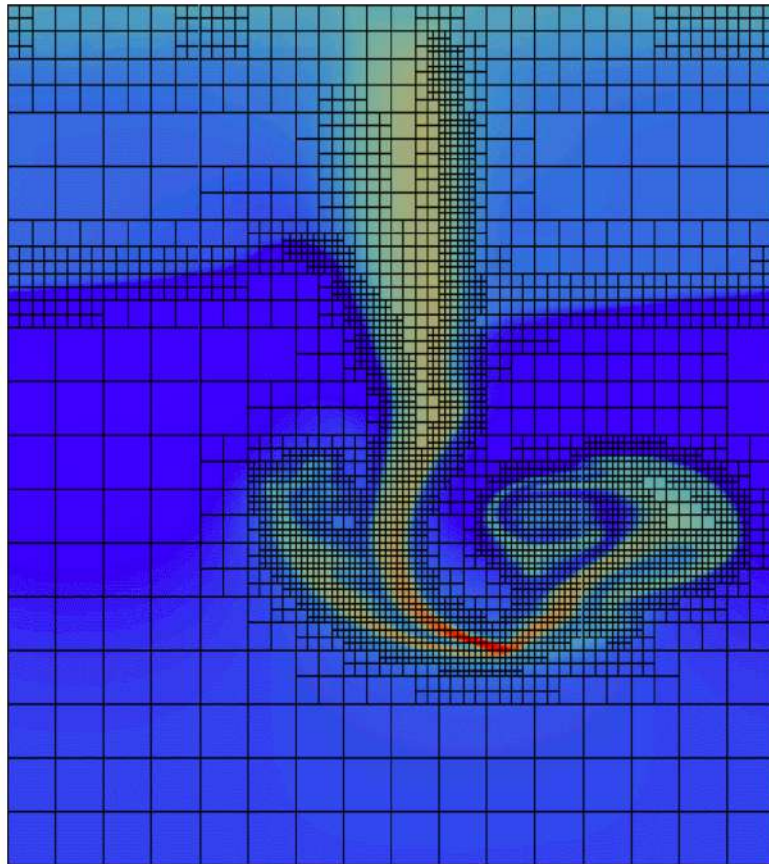


Мащабиране на мрежата - обработка на локализирани структури: груби и фини мрежи



- за покриване на критични участъци от груба мрежа с области от по-фини мрежи, които са с подходящ размер и форма

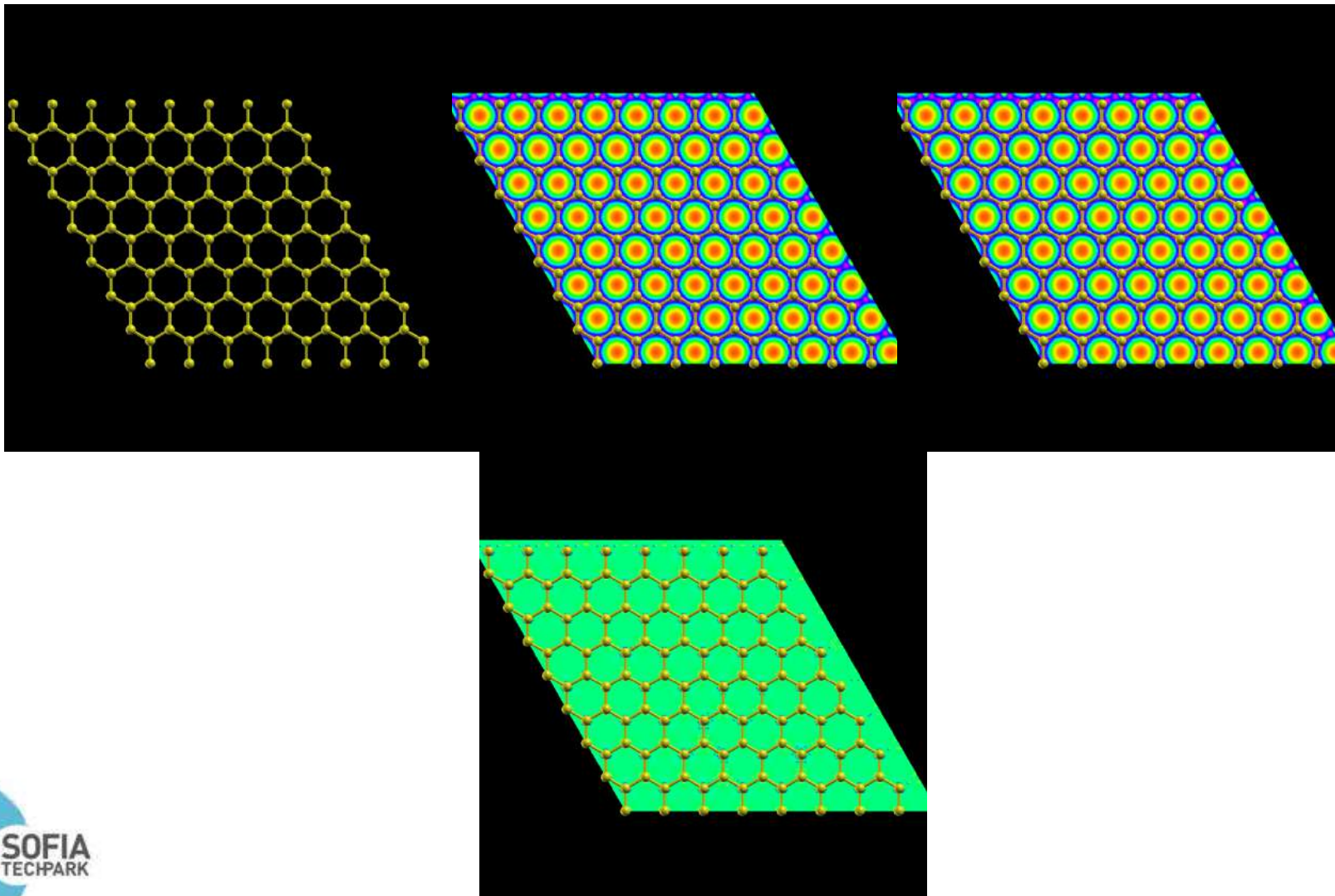
Динамика - адаптивен аспект на оптимизирането на изчислителната мрежа



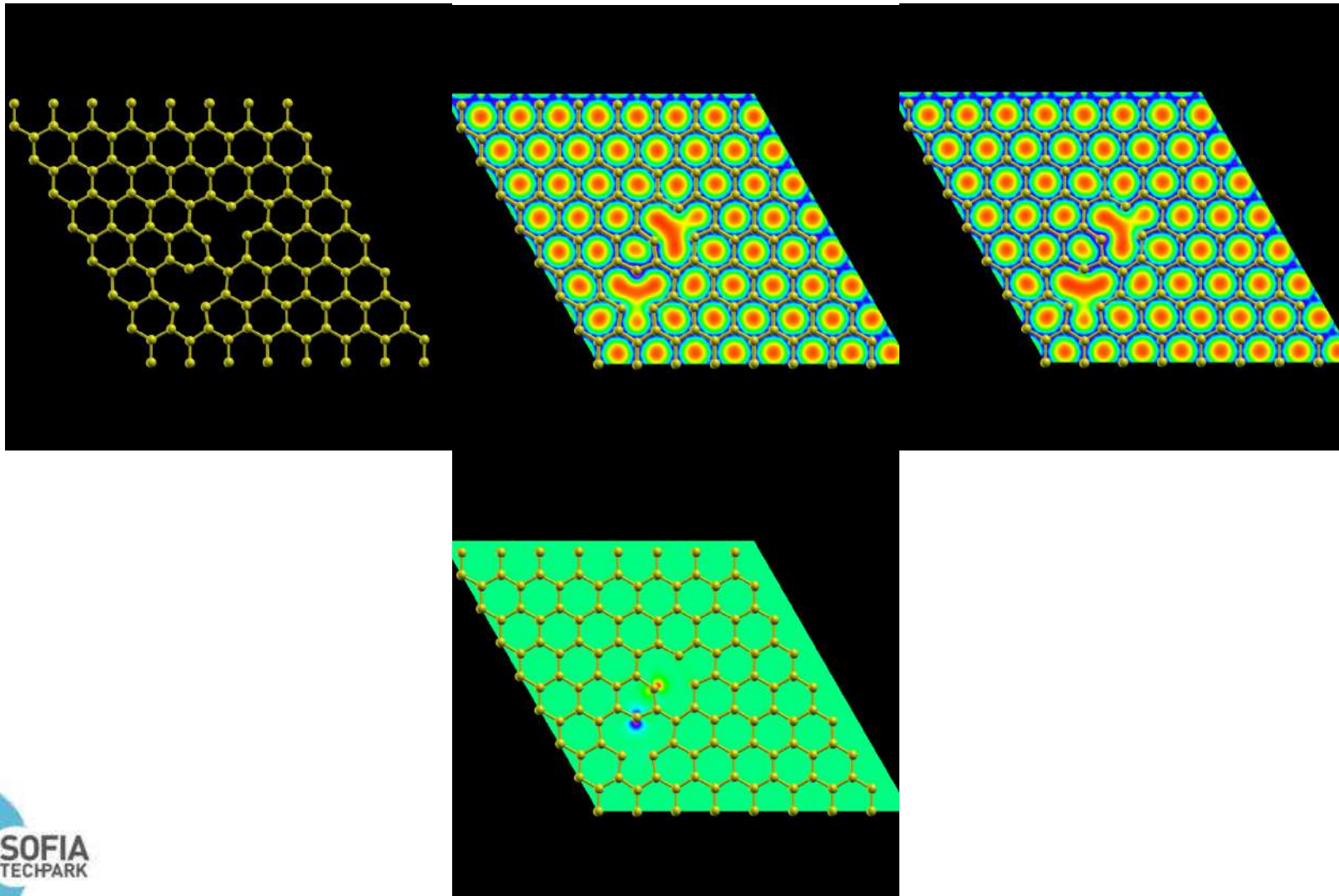
- С растежа и проникването на вихровите структури и съответното образуване на градиенти на плътността се създават мрежи с висока разделителна способност, където е необходимо (и премахнати, когато няма повече нужда).

Този клъстер от рафинирани мрежи следва цялостната еволюция.

In silico – магнитен момент на перфектен графен



In silico – магнитен момент на дефектен графен



Computational details (1)

- spin-polarized density functional theory
Quantum Espresso code
- The density functional for exchange-correlation energy of the many-electron system is the Perdew, Burke, Ernzerhof (PBE) Generalized Gradient Approximation

Computational details (2)

Pseudo potential: Valence electrons experience weak effective potential in the core region

The pseudo potential in our calculations:

GIPAW norm conserving

PAW stands for Projector Augmented Waves

GIPAW = Gauge-including PAW

Computational details (3)

The wave-functions at each k-point are represented by the numerical coefficients of a finite set of plane waves determined by a kinetic energy cut-off at 55 Ry (~ 748 eV).

QE generates uniform grids of k-points, equivalent to Monkhorst-Pack grids. The results are for 30x30x1 k-point grid.

Computational details (4)

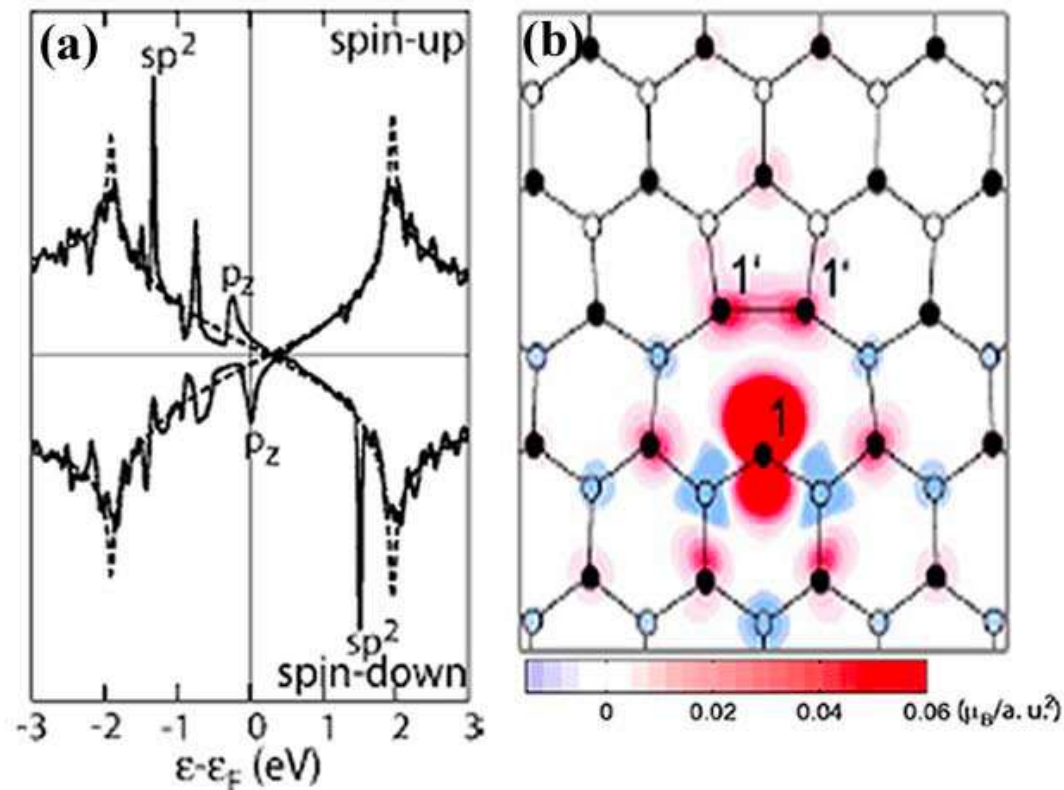
The vacuum layer thickness in the periodic boundary conditions was 12 Å.

Axis of collinear magnetization normal to graphene surface is considered.

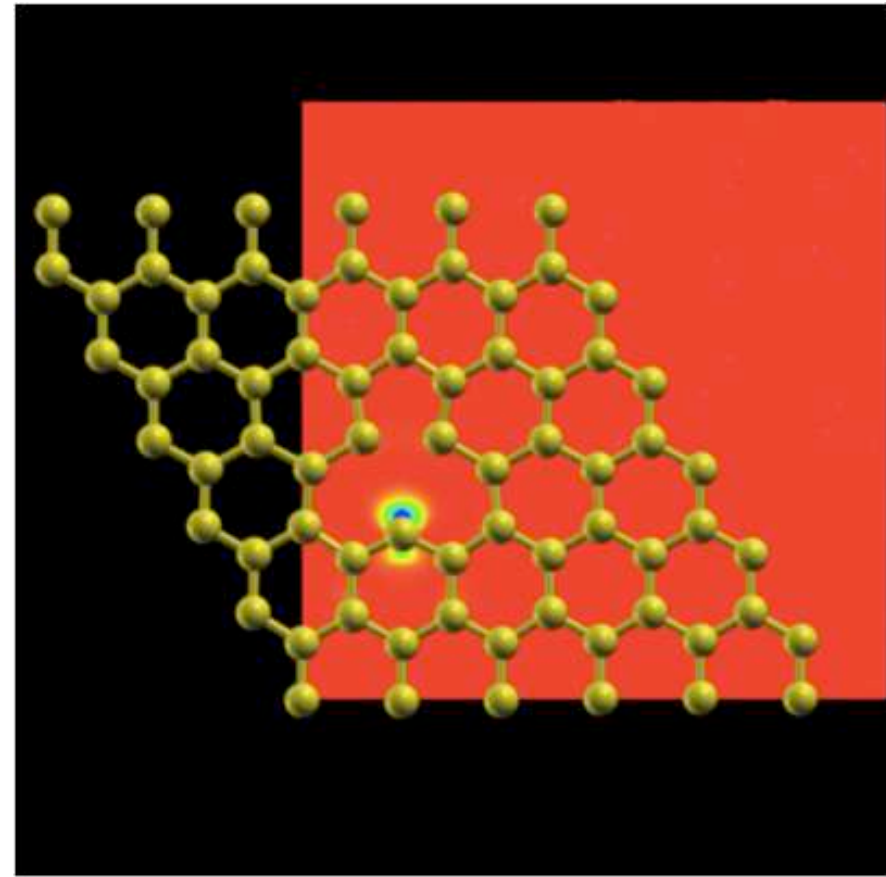
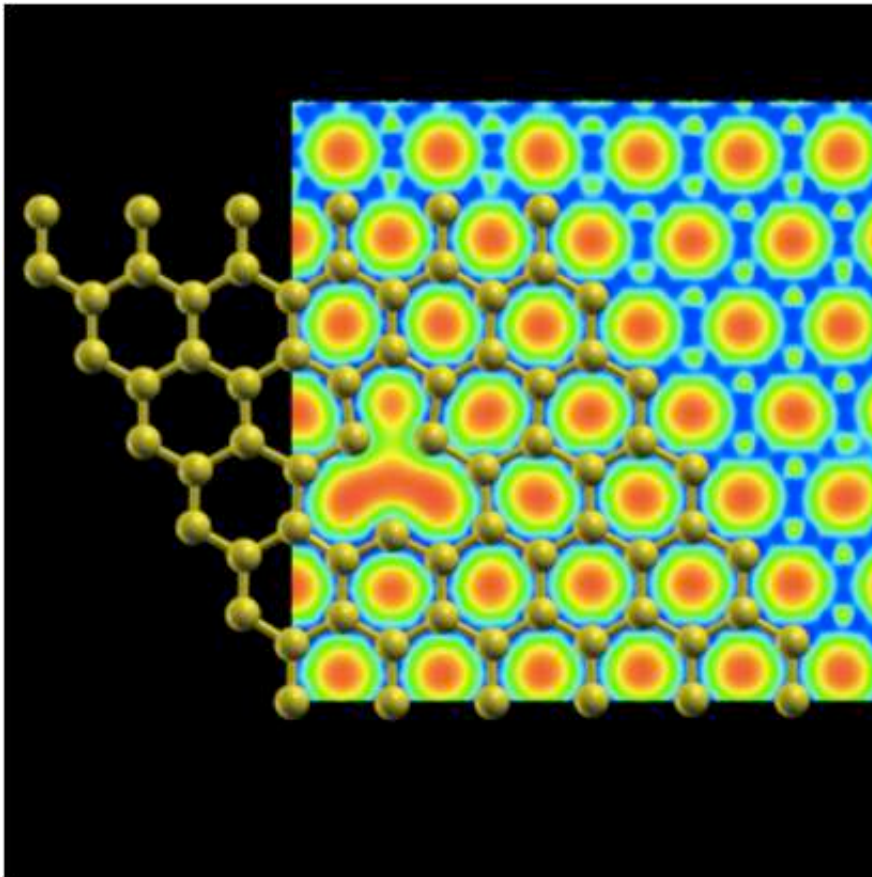
Irradiation induced vacancies

(a) DoS: dashed lines for ideal graphene

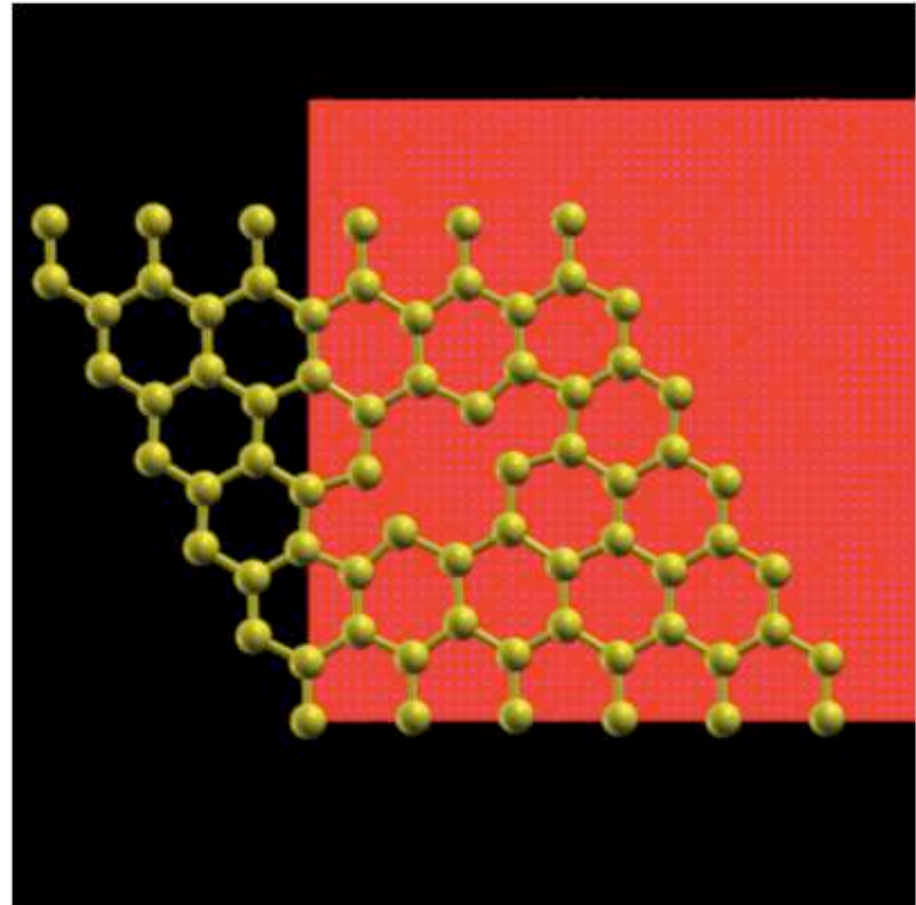
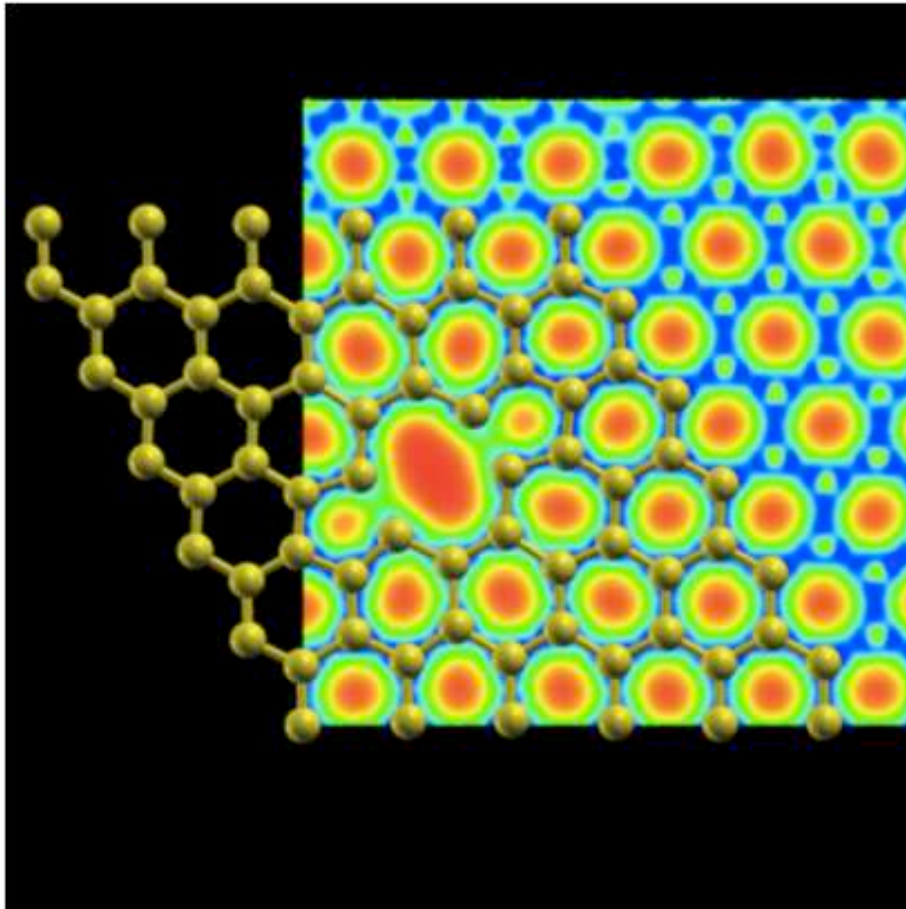
(b) Spin density projection around defects



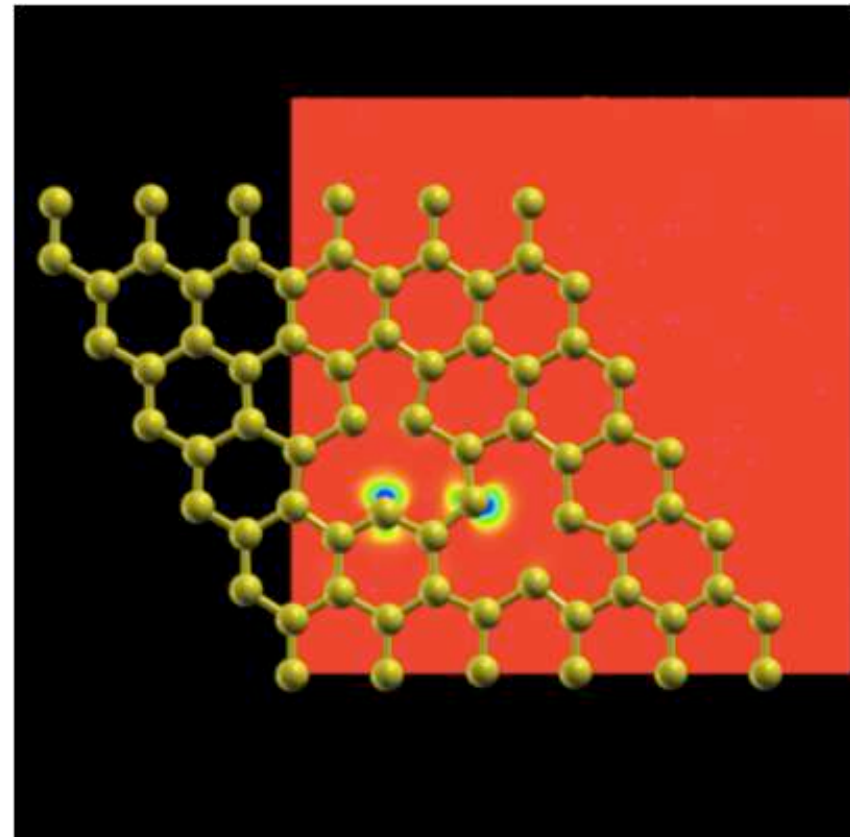
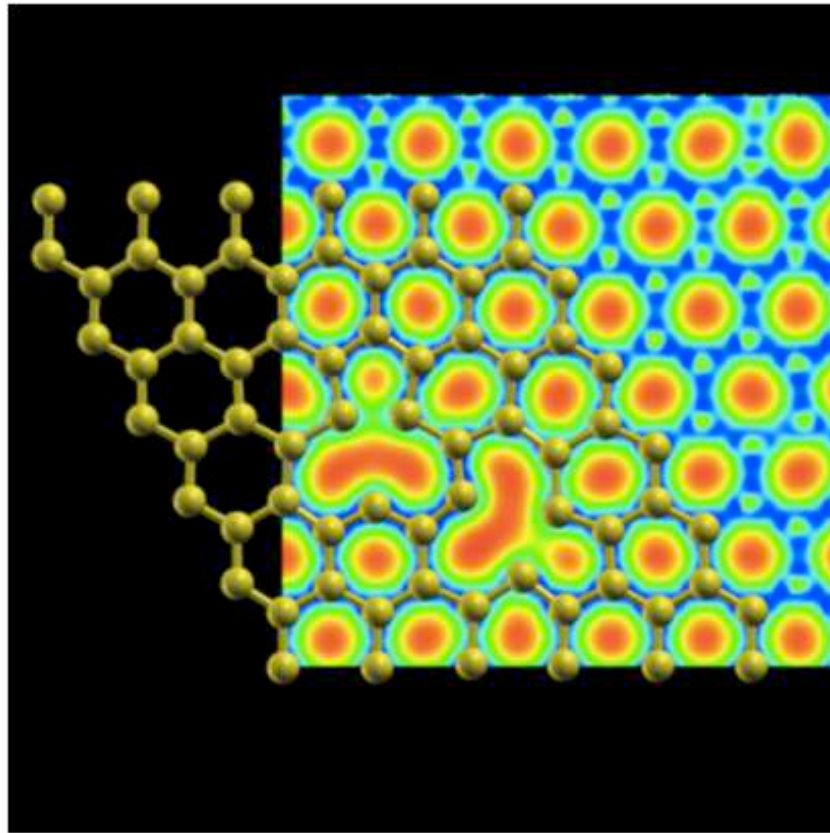
A single vacancy produces a magnetic moment
 $1.53 \mu\text{B}$, perpendicular to the surface



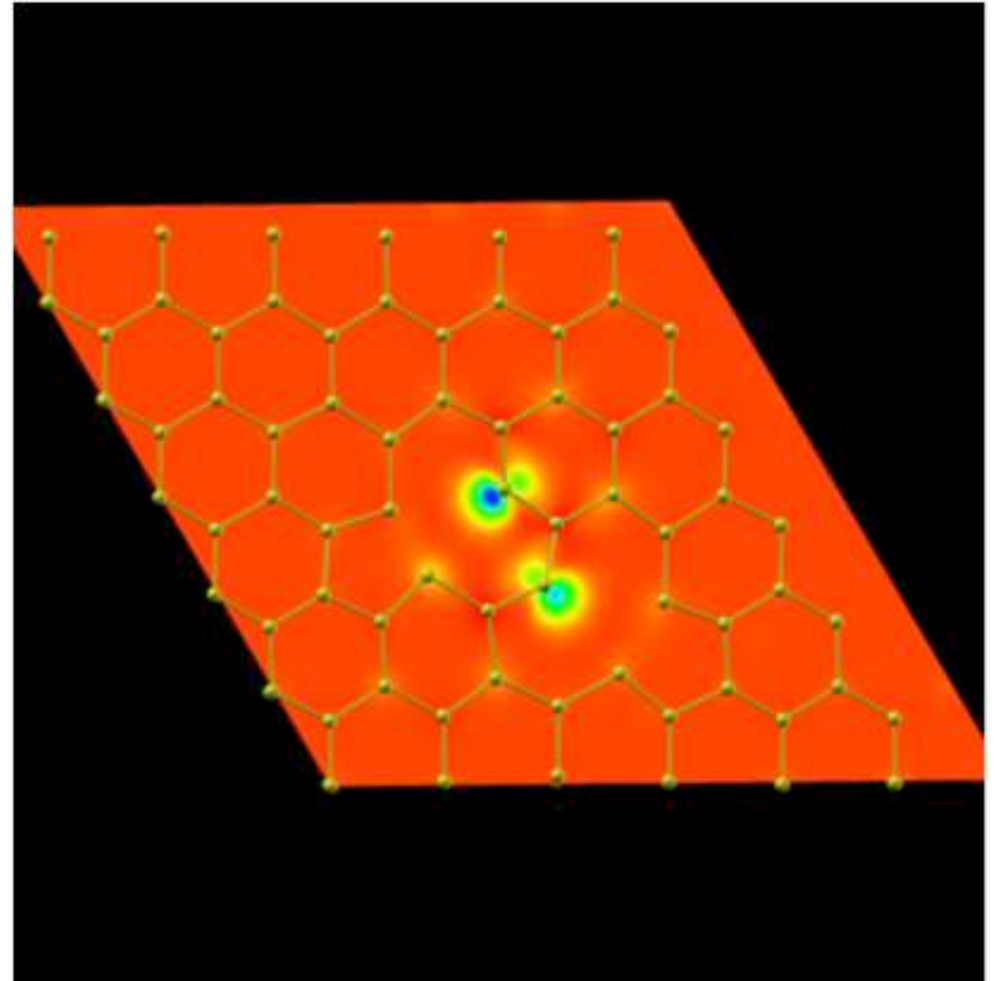
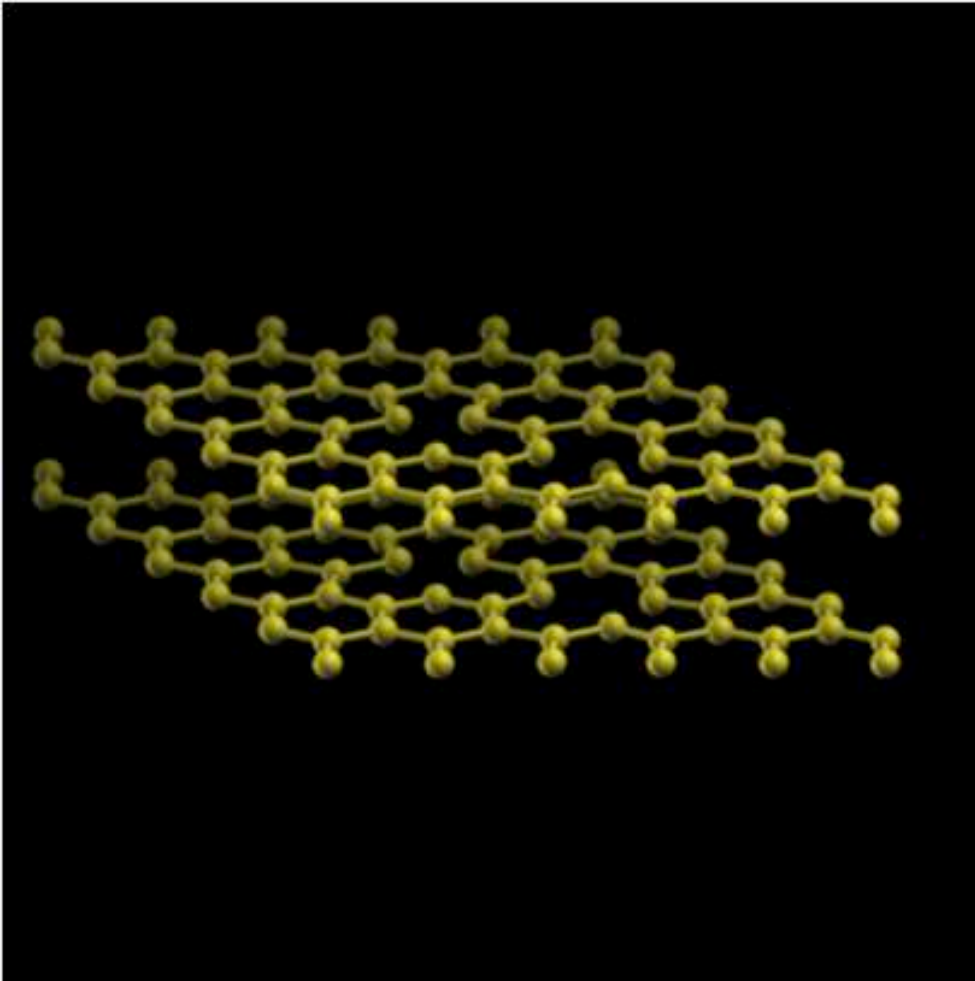
This double vacancy does not induce magnetic moment



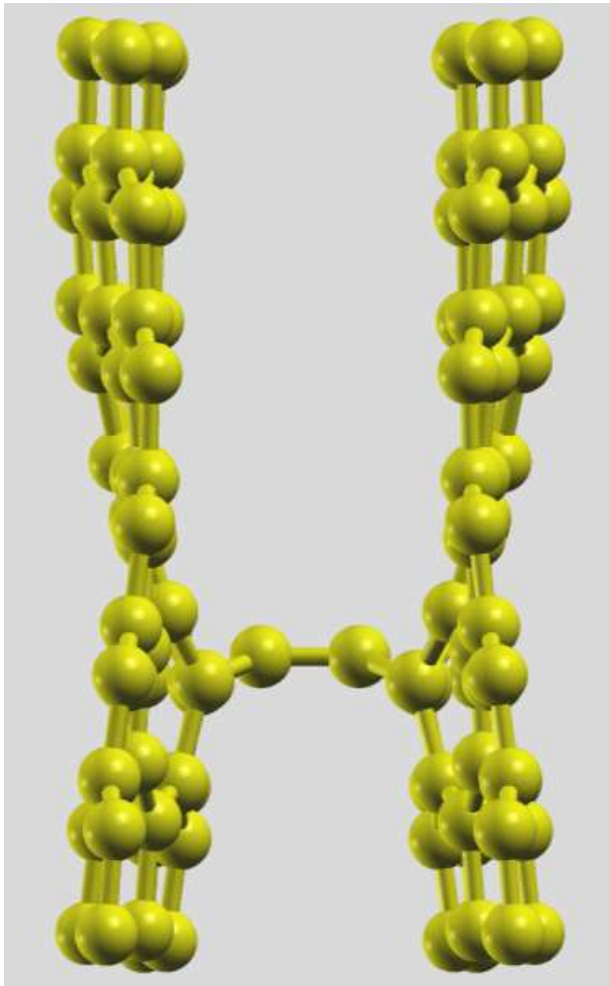
This double vacancy induces $2.93 \mu\text{B}$ instead of $3.06 \mu\text{B}$
– non-collinear arrangement?



Bilayer graphene (AA stack) with vacancies



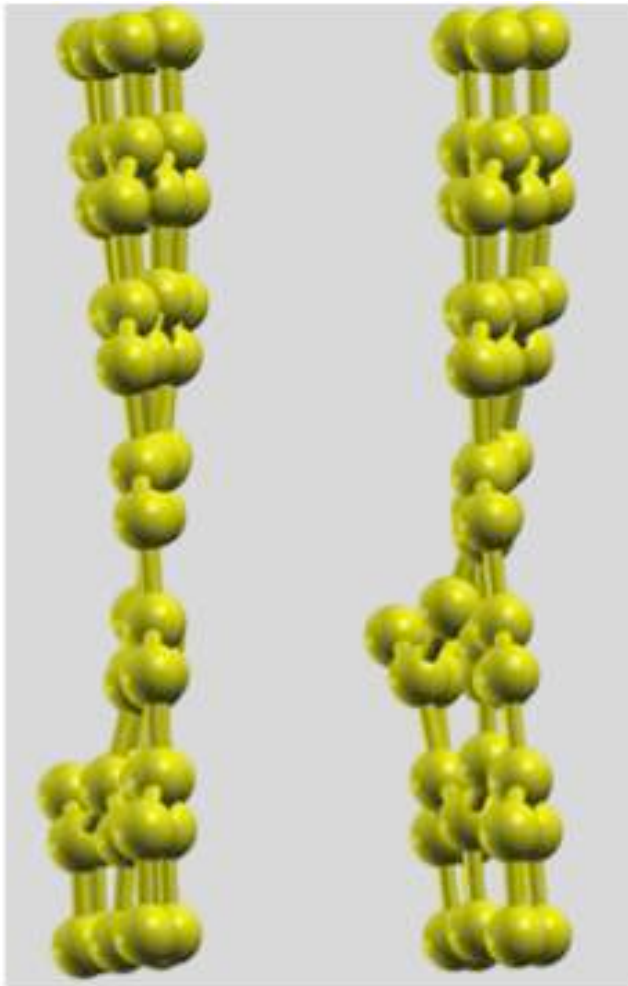
Vacancies in the two sheets on the top of each other (bond)



The reduction of the magnetic moment due to the interlayer bonding is **an important result.**

It shows that if the vacancies are very close to let bond formation between the atoms with dangling bonds in the different graphene layers, the magnetic moment of the system is reduced

Vacancies in the two layers are opposite to each other (no bond)



the closest distance
between the two layers
is 3.44 \AA

(initially the distance was
set to 3.3 \AA).

The longest distance
(upper and lower parts)
is 5.03 \AA .

Изчисления с големи обеми от данни

Когато работното натоварване на НРС ГРИД и НРС клъстера, като описаните по-горе, са в комбинация с големи обеми от данни, получените приложения изискват бърз и надежден достъп до различни видове дискове за съхранение на данни.

НРС приложения в тази категория включват геномика, обработка на изображения с висока разделителна способност, 3D предаване на анимация, симулации, сеизмична обработка, машинно обучение.

БЕЛЕЖКА

Имайте предвид, че в тази категория НРС има прилики с "големи данни", но различни цели.

Големите данни се използват, за да отговорят на въпроси, които **не сте знаели да зададете**, или за откриване на корелации и модели в големи и разнообразни масиви от данни.

Примери за големи данни включват анализ на уебсайтовете, откриване на финансови измами, потребителски настроения, анализ и рекламни разположения.

БЛАГОДАРЯ ЗА ВНИМАНИЕТО