

C2115

Praktický úvod do superpočítání

I. lekce

Petr Kulhánek

kulhanek@chemi.muni.cz

Národní centrum pro výzkum biomolekul, Přírodovědecká fakulta
Masarykova univerzita, Kamenice 5, CZ-62500 Brno

- **Historie, využití a budoucnost výpočetní techniky**
- **Přehled výpočetních center ČR**
MetaCentrum, CERIT-SC, IT4 Innovation
- **Zahraniční výpočetní centra**
centra dostupná pro zájemce z ČR, Top500

Historie

http://en.wikipedia.org/wiki/History_of_computing_hardware

1800 počátky děrných štítků

1946 ENIAC

1947 objev tranzistoru

1971 Intel 4004 (4 bit)

1974 Intel 8080 (8 bit)

1976 Intel 8086 (16 bit)

1985 Intel 80386 (32 bit)

2001 IA-64 (64 bit)

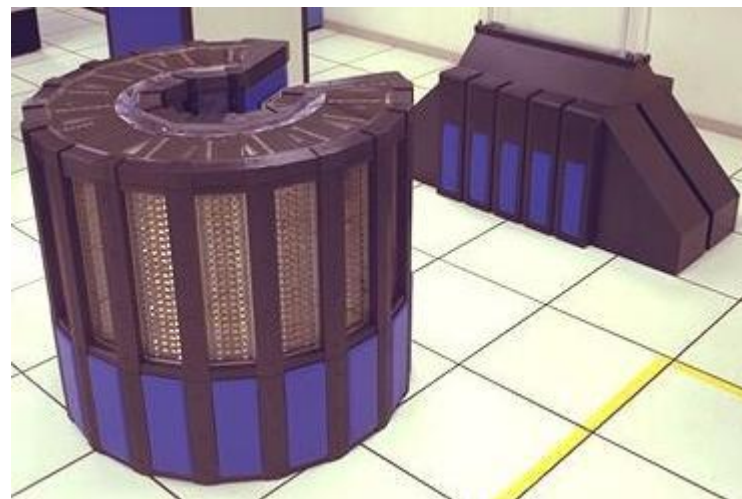
2003 AMD64/EM64T (64 bit)

**2010 Intel Core i7 980X: @3,33 GHz
(6C/12T, Turbo@3,46 GHz): 109 GFLOPS**



<http://www.root.cz>

Pavel Tišnovský, Unixové vykopávky



1985 Cray 2 1,9 GFLOPS

proprietární vektorové CPU

zdroj: wikipedia.org, intel.com

Využití výpočetní techniky

Výpočetní technika (počítače) zasáhla do všech odvětví lidské činnosti a stala se nedílnou součástí našich životů. Dopomohl k tomu především **bouřlivý vývoj** v posledních 20 letech. Výpočetní techniku používáme pro zábavu, k zpracovávání a konzumování informací.

Výpočetní technika (a hlavně superpočítače) se využívají k **řešení numericky náročných** problémů jako jsou:

- simulace počasí, klimatologických a geologických změn (šíření záplav, vln tsunami, zemětřesení)
- návrh nových materiálů a léčiv
- modelování ekonomického vývoje
- **vědeckotechnické výpočty** (**chemie**, fyzika, matematika)
- vojenské účely (simulace jaderných zbraní)
- hledání souvislostí v datech (big data)
- umělá inteligence, autonomní řízení ...

Budoucnost

Simulátor lidského mozku ...

<http://www.humanbrainproject.eu/>

<https://www.humanbrainproject.eu/en/follow-hbp/news/animation-exploring-brain-scales-in-90-seconds/>

Big Data ...

umělá inteligence ...

Autonomní řízení ...

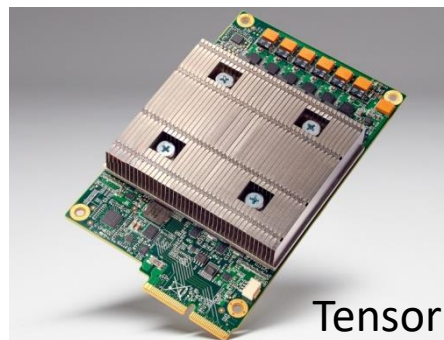
Kvantové počítání ...

Hardware:

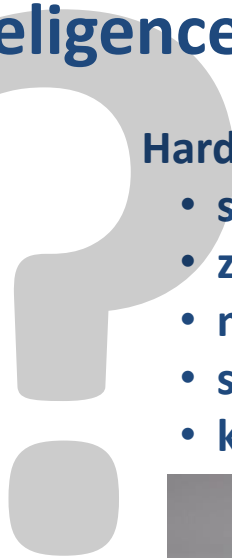
- snižování spotřeby ...
- zvyšování výkonu ...
- masivní využití GPGPU ...
- speciální hardware: TPU, Intel Phi, ARM
- kvantové akcelerátory



D-wave
dwavesys.com



Tensor processing unit (TPU)
google.com



Výpočetní centra v ČR

Cílem projektu **MetaCentrum** je provoz a koordinace distribuované výpočetní infrastruktury a datových úložišť a odpovídajícího podpůrného prostředí v České republice jako součást pan-evropské infrastruktury budované v rámci projektu EGI Inspire.

Vytvoření virtuálního pracovního prostředí MetaCentrum přispívá k podstatně efektivnějšímu využití instalované techniky, umožňuje využití dostupných výpočetních zdrojů pro řešení velmi náročných výpočetních úloh, jejichž zvládnutí je nad možností samostatného pracoviště v ČR.

MetaCentrum je aktivita sdružení **CESNET**.

Centrum CERIT-SC (CERIT Scientific Cloud) je národním centrem poskytujícím flexibilní úložné a výpočetní kapacity a související služby, včetně podpory jejich experimentálního využití. Současně centrum provádí výzkum a vývoj v oblasti flexibilních e-infrastruktur a spolupracuje na výzkumných aktivitách svých uživatelů.

Centrum CERIT-SC vzniká transformací Superpočítačového centra Brno (SCB), které je součástí Ústavu výpočetní techniky (ÚVT) Masarykovy univerzity (MU).

Sdružuje výpočetní zdroje poskytované MetaCentrem, projektem CERIT-SC a dalšími partnery.

- Národní gridová infrastruktura
 - OS Debian
 - ca **15000 CPU** jader
 - **CEITEC/NCBR vlastní zdroje cca 1100** CPU jader
 - ~3 PB úložných diskových polí, ~20 PB hierarchických úložných prostorů
-
- **Účet může získat student libovolné vysoké školy ČR.**
 - Přístup není vázán na konkrétní projekt a je udělen na 1 rok.
 - Prodloužení přístupu je podmíněno odevzdáním výroční zprávy.

Sdružuje výpočetní zdroje poskytované MetaCentrem, projektem CERIT-SC a dalšími partnery.

- Národní gridová infrastruktura
- OS Debian
- ca **12728 CPU** jader
- **CEITEC/NCBR vlastní zdroje cca 1260 CPU** jader
- ~2 PB úložných diskových polí, ~20 PB hierarchických úložných prostorů

**Prakticky: infrastruktura,
klastry, datové úložiště,
zadávání úloh**

- Účet může získat student libovolné vysoké školy ČR.
- Přístup není vázán na konkrétní projekt a je udělen na 1 rok.
- Prodloužení přístupu je podmíněno odevzdáním výroční zprávy.

IT4Innovations je projekt, jehož cílem je vybudovat národní centrum excelentního výzkumu v oblasti informačních technologií.

Základem centra je počítání (computing), který je formulován do tří vzájemně propojených klíčových oblastí výzkumu:

- **IT4People (Information Technology for People)** – výzkum zaměřený na zlepšení kvality života společnosti prostřednictvím moderních informačních technologií.
- **SC4Industry (Supercomputing for Industry)** – superpočítačové výpočty pro řešení průmyslových problémů, modelování v oblasti přírodních věd a nanotechnologií (tvarové optimalizace, návrh materiálů, biomechanické simulace, ...).
- **Theory4IT (Theory for Information Technology)** - oblast zaměřená do základního výzkumu, a to především na rozvoj nových netradičních výpočetních metod (dolování znalostí, teorie mravenišť).

- **Přístup získávají řešitelé úspěšných projektů ve veřejné grantové soutěži.**

Projekt společně připravuje pět subjektů: Vysoká škola báňská-Technická univerzita Ostrava, Ostravská univerzita v Ostravě, Slezská univerzita v Opavě, Vysoké učení technické v Brně a Ústav geoniky AV ČR.

Výpočetní centra v zahraničí

Project Types:

- **Multi-year Access** is available to major European projects or infrastructures that can benefit from PRACE resources and for which Project Access is not appropriate.
- **Project Access** is intended for individual researchers and research groups including multi-national research groups and has a one year duration. Calls for Proposals for Project Access are issued twice yearly (February and September).
- **Preparatory Access** is intended for resource use required to prepare proposals for Project Access. Applications for Preparatory Access are accepted at any time.

PRACE - členové

Austria: JKU - Johannes Kepler University of Linz

Belgium: DGO6-SPW - Direction générale opérationnelle de l'Économie, de l'Emploi et de la Recherche – Service Public de Wallonie

Bulgaria: NCSA - Executive agency "Electronic communication networks and information systems"

Cyprus: CaSToRC – Computation-based Science and Technology Research Center, The Cyprus Institute

Czech Republic: VŠB - Technical University of Ostrava

Denmark: DeIC - Danish e-Infrastructure Cooperation

Finland: CSC - IT Center for Science Ltd.

France: GENCI - Grand Equipement National de Calcul Intensif

Germany: GCS - GAUSS Centre for Supercomputing e.V

Greece: GRNET - Greek Research and Technology Network S.A.

Hungary: NIIFI - National Information Infrastructure Development Institute

Ireland: ICHEC - Irish Centre for High-End Computing

Israel: IUCC - Inter-University Computation Center

Italy: CINECA - Consorzio Interuniversitario

Norway: SIGMA – UNINETT Sigma AS – The Norwegian Metacenter for Computational Science

The Netherlands: SURFSARA: SARA Computing and Networking Services

Poland: PSNC – Instytut Chemii Bioorganicznej Pan – Institute of Bioorganic Chemistry – Poznan Supercomputing and Networking Center

Portugal: Universidade de Coimbra

Serbia: IPB - Institute of Physics Belgrade

Slovenia: ULFME - University of Ljubljana, Faculty of Mechanical Engineering

Spain: BSC – Barcelona Supercomputing Center – Centro Nacional de Supercomputación

Sweden: Vetenskapsrådet – Swedish Research Council

Switzerland: ETH – Eidgenössische Technische Hochschule Zürich – Swiss Federal Institute of Technology, Zürich

Turkey: UYBHM – Ulusal Yuksek Basarimli Hesaplama Merkezi, Istanbul Technical University – National Center for High Performance Computing

UK: EPSRC – The Engineering and Physical Sciences Research Council

TOP500

<http://www.top500.org/>

TOP500 je projekt, který udržuje seznam 500 nejrychlejších počítačů na světě.

TOP500 benchmark

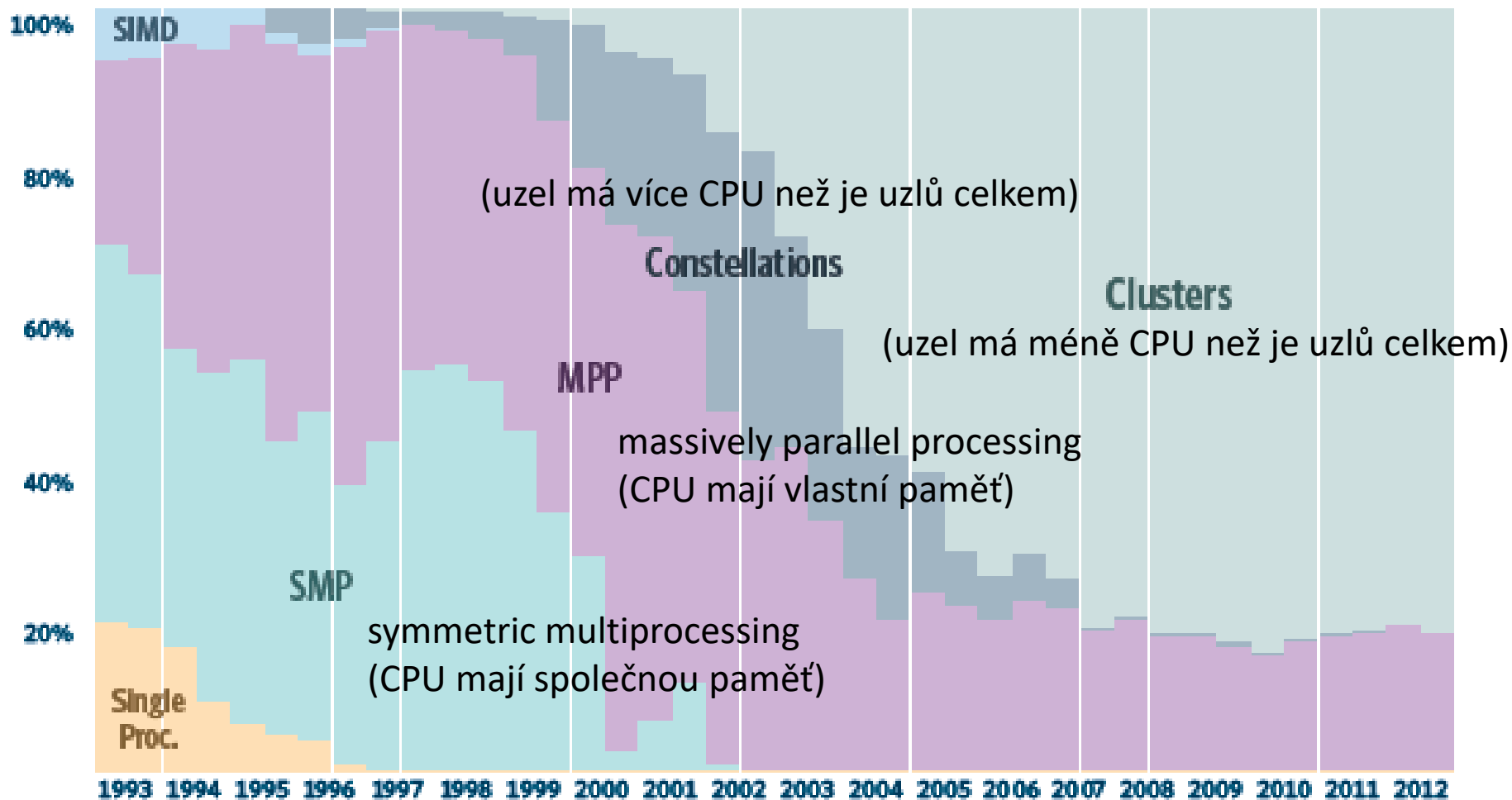
Our simple **TOP500** approach does not define “supercomputer” as such, but we use a benchmark to rank systems and to decide on whether or not they qualify for the TOP500 list. The benchmark we decided on was **Linpack**, which means that systems are ranked only by their ability to solve a set of linear equations, $Ax = b$, using a **dense random matrix A**.

Listopad 2012

	NAME	SPECS	SITE	COUNTRY	CORES	RMAX PFLOP/S	POWER MW
1	TITAN	Cray XK7, Operon 6274 16C 2.2 GHz + Nvidia Kepler GPU, Custom Interconnect	DOE/OS/ORNL	USA	560,640	17.6	8.3
2	SEQUOIA	IBM BlueGene/Q, Power BQC 16C 1.60 GHz, Custom Interconnect	DOE/NNSA/LLNL	USA	1,572,864	16.3	7.9
3	K COMPUTER	Fujitsu SPARC64 VIIIfx 2.0GHz, Custom Interconnect	RIKEN AICS	Japan	705,024	10.5	12.7
4	MIRA	IBM BlueGene/Q, Power BQC 16C 1.60 GHz, Custom Interconnect	DOE/OS/ANL	USA	786,432	8.16	3.95
5	JUQUEEN	IBM BlueGene/Q, Power BQC 16C 1.60 GHz, Custom Interconnect	Forschungszentrum Jülich	Germany	393,216	4.14	1.97

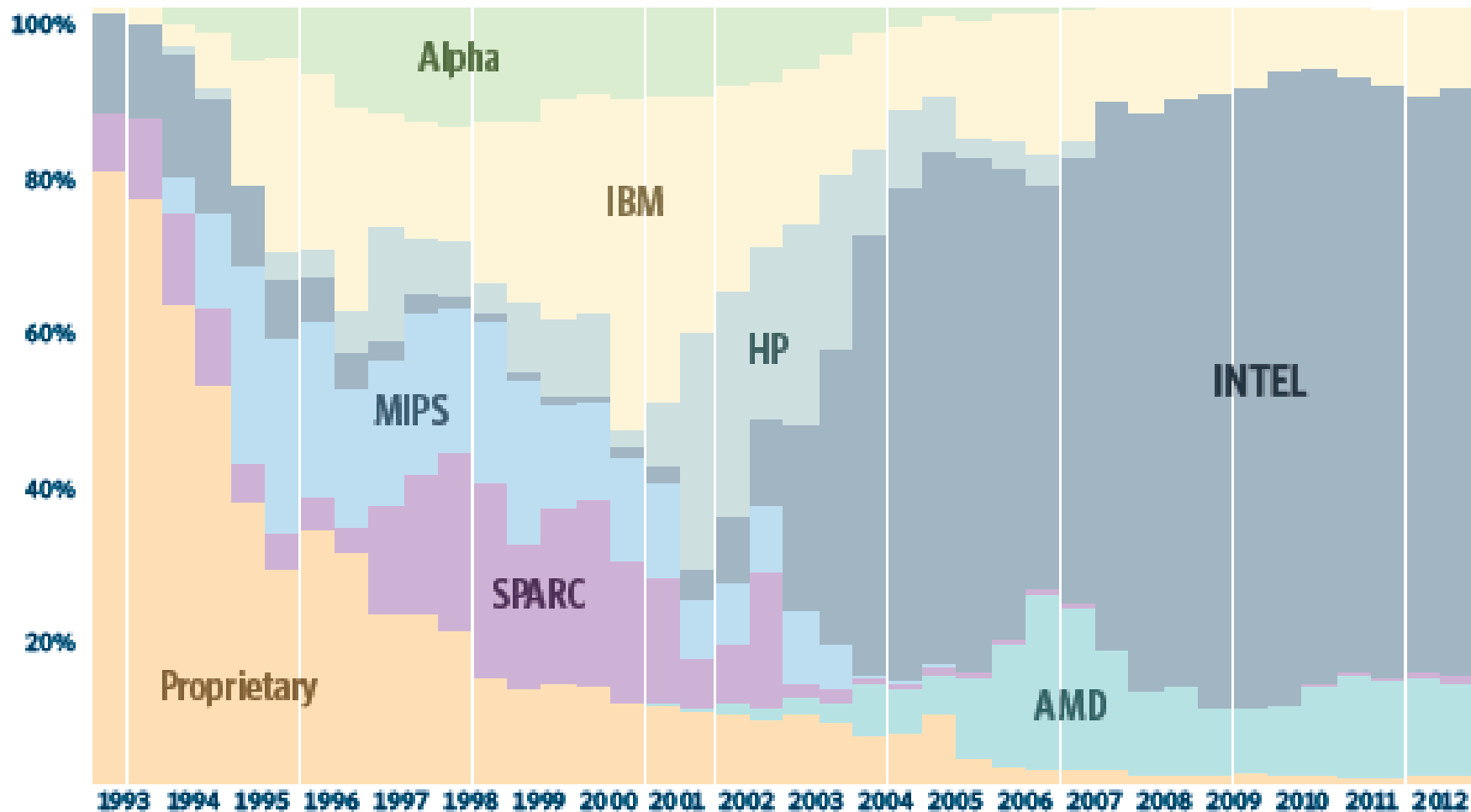
TOP500 – Topologie

ARCHITECTURES



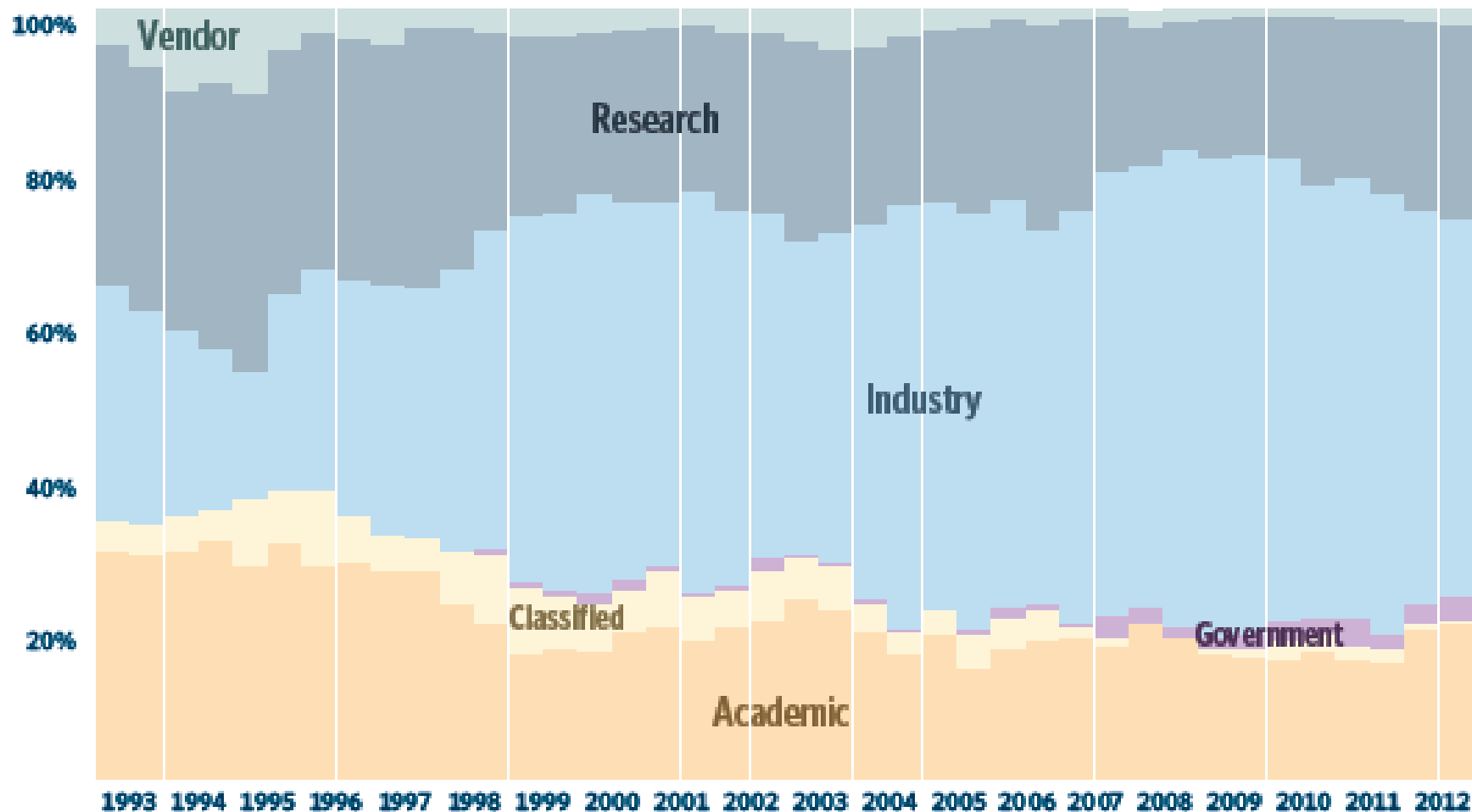
TOP500 – CPU architektura

CHIP TECHNOLOGY



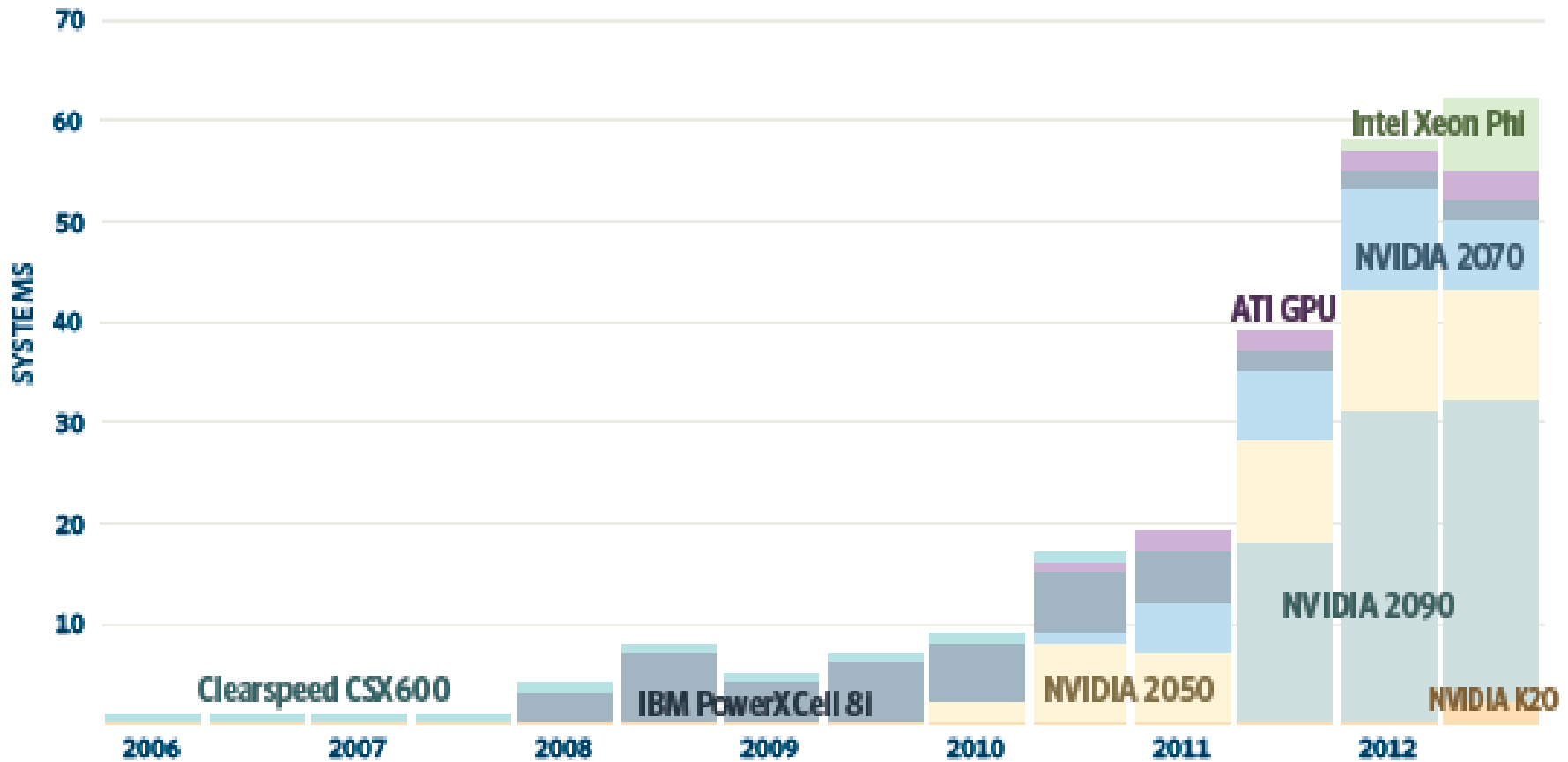
TOP500 – Typ použití

INSTALLATION TYPE



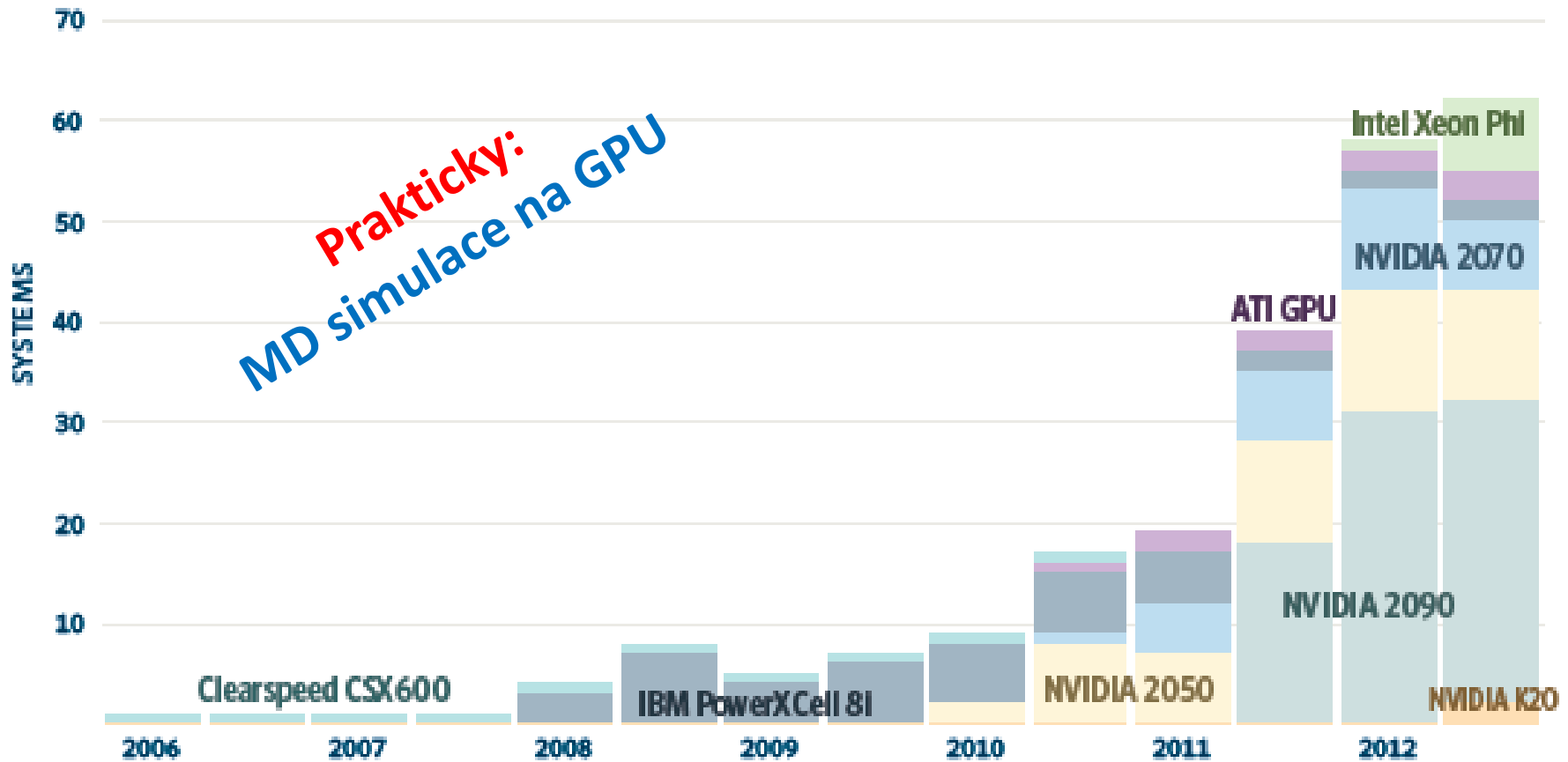
TOP500 – Akcelerátory/Koprocesory

ACCELERATORS/CO-PROCESSORS



TOP500 – Akcelerátory/Koprocesory

ACCELERATORS/CO-PROCESSORS



Zajímavosti

K – computer, 3. místo, 2012

<http://www.youtube.com/watch?v=UJPslu9OaTc>

pustit video

TITAN, 1. místo, 2012

<https://www.youtube.com/watch?v=AdylAE1lgg0>

Sunway TaihuLight, 1. místo, 2017

<https://www.youtube.com/watch?v=t0HDwE3mGP0>

Cvičení 1

1. Co udává jednotka FLOPS?
2. Jak se jmenuje nejrychlejší superpočítač uvedený v žebříčku TOP500? Jaký je jeho výkon a energetická spotřeba? Jaký typ CPU používá?
3. Na jakou pozici se posunul superpočítač TITAN, který byl na první pozici v žebříčku TOP500 v roce 2012? Byla změněna jeho HW konfigurace?
4. V roce 2014 činila průměrná spotřeba energie na jednoho obyvatele domácnosti v ČR 1400 kWh. Kolik osob by pokrylo svoji roční spotřebu z energie, kterou spotřebovává nejvýkonnější počítač světa dle žebříčku TOP500?
5. Odhadněte na co se elektrická energie v superpočítači přemění a v jakém procentuálním zastoupení.
6. Jak se jmenují superpočítače v IT4I?
7. Z čeho se skládají (uved'te klíčové technologie)?
8. Na jaké příčce žebříčku TOP500 se nacházejí?
9. Jaký procesor máte ve vašem mobilním telefonu? Kolikrát je výkonnější než superpočítač Cray 2 z roku 1985? [do protokolu nemusíte uvádět]