

C2115

Praktický úvod do superpočítání

1. 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)

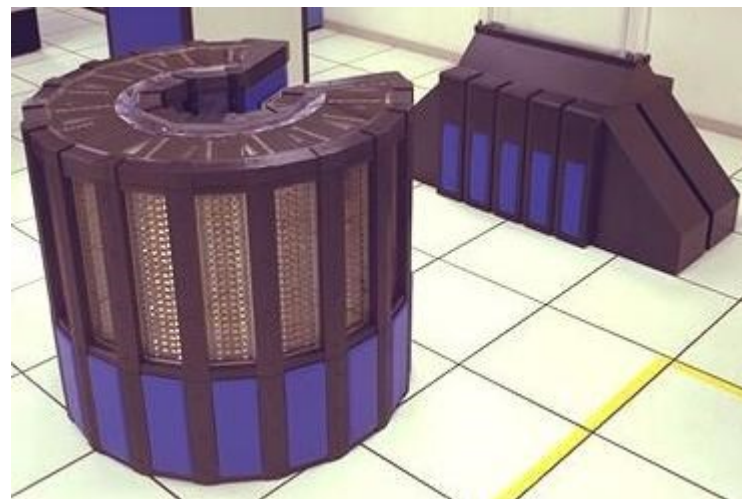
2003 AMD64/EM64T (64 bit)

**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, biologie)
- 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 ...

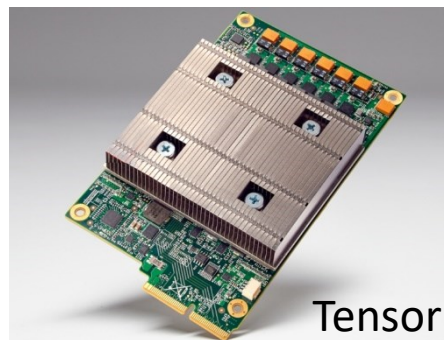
Kvantové počítání

Hardware:

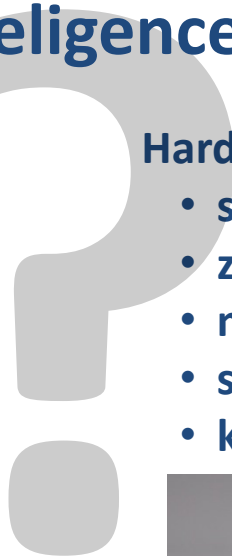
- snižování spotřeby ...
- zvyšování výkonu ...
- masivní využití GPGPU ...
- speciální hardware: TPU, Intel Phi, ARM
- kvantové akcelerátory



D-wave
dwavesys.com





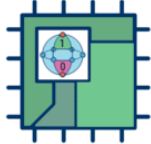





Tensor processing unit (TPU)
google.com



Budoucnost - kvantové počítání

Kvantová výpočetní technika je rychle se rozvíjející technologie, která využívá zákony kvantové mechaniky k řešení problémů příliš složitých pro klasické počítače.

Quantum Computing	Vs.	Classical Computing
 <p>Calculates with qubits, which can represent 0 and 1 at the same time</p>		 <p>Calculates with transistors, which can represent either 0 or 1</p>
 <p>Power increases exponentially in proportion to the number of qubits</p>		 <p>Power increases in a 1:1 relationship with the number of transistors</p>
 <p>Quantum computers have high error rates and need to be kept ultracold</p>		 <p>Classical computers have low error rates and can operate at room temp</p>
 <p>Well suited for tasks like optimization problems, data analysis, and simulations</p>		 <p>Most everyday processing is best handled by classical computers</p>

https://en.wikipedia.org/wiki/Quantum_computing

CBINSIGHTS

Výpočetní centra v ČR

e-INFRA CZ (<https://www.e-infra.cz/>)

- unikátní e-infrastruktura pro výzkum a vývoj v ČR
- poskytuje kapacity a zdroje pro přenos, ukládání a zpracování vědeckých a výzkumných dat

Metacentrum poskytuje nástroje pro náročné výpočty a zpracování dat různorodým uživatelům napříč obory od jednotlivců (typicky student nebo výzkumný pracovník) až po velké vědeckovýzkumné týmy. Zdroje MetaCentra (výpočetní a úložné kapacity, software, speciální hardware, síť) realizující potřeby uživatelů jsou také nehomogenní, disponující různými vlastnostmi, schopnostmi i omezeními.

Výpočetní a úložné zdroje do MetaCentra vkládá CESNET, CERIT-SC a jednotlivé vysoké školy nebo ústavy Akademie věd ČR a jsou rozprostřené geograficky napříč celou ČR a integrované se službami Oddělení datových úložišť CESNETu, které poskytují úložné kapacity pro dlouhodobé uchování dat, zálohování a archivaci.

MetaCentrum koordinuje pořizování nákladného programového a aplikačního vybavení, zajišťuje centrální nákup a správu licencí vybraného licencovaného SW.

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

- OS Debian
 - **Stav 2023**
 - cca **2800 CPU** jader
 - cca **400 GPU** akceleratorů
 - kapacita datových úložišť ~15 PB, ~20 PB archivačních 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.

- OS Debian
- **Stav 2023**
 - cca **2800 CPU** jader
 - cca **400 GPU** akceleratorů
 - kapacita datových úložišť ~15 PB, ~20 PB archivačních 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 nabízí své výpočetní systémy pro řešení úloh ve výzkumu a vývoji především pro akademická pracoviště a další výzkumné instituce v České republice. Část kapacity je pak dedikována pro rozvoj spolupráce mezi akademickou sférou a průmyslovými partnery, či pro samostatné využití průmyslovými podniky.

O výpočetní čas si instituce mohou **zažádat v rámci veřejných grantových soutěží**, které jsou vypisovány 3x ročně (únor, červen, říjen) pro zaměstnance výzkumných, vědeckých a vzdělávacích organizací.

IT4Innovations pomáhá českým zájemcům také při získání výpočetního času **v evropských superpočítačových centrech sdružených iniciativou PRACE**.

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

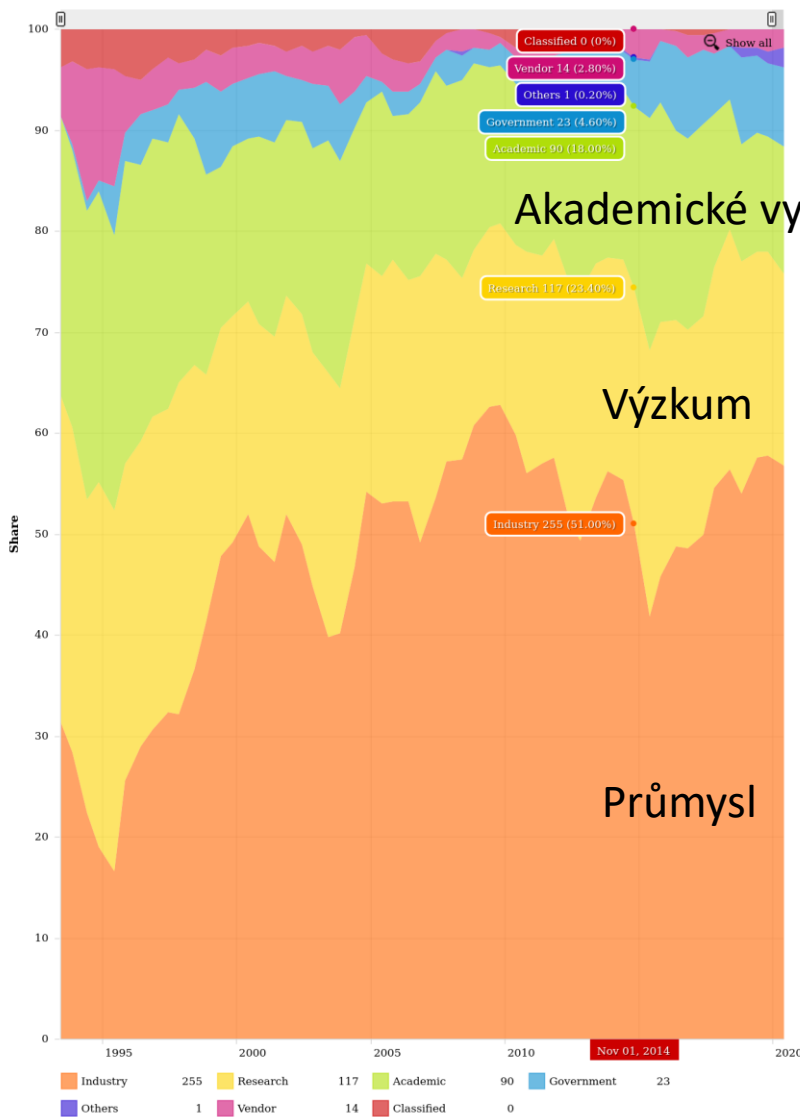
Our simple **TOP500** approach does not define “supercomputer” as such, but we use a benchmark to rank systems and to decide on whether or not they qualify for the TOP500 list. The benchmark we decided on was **Linpack**, which means that systems are ranked only by their ability to solve a set of linear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

Listopad 2012

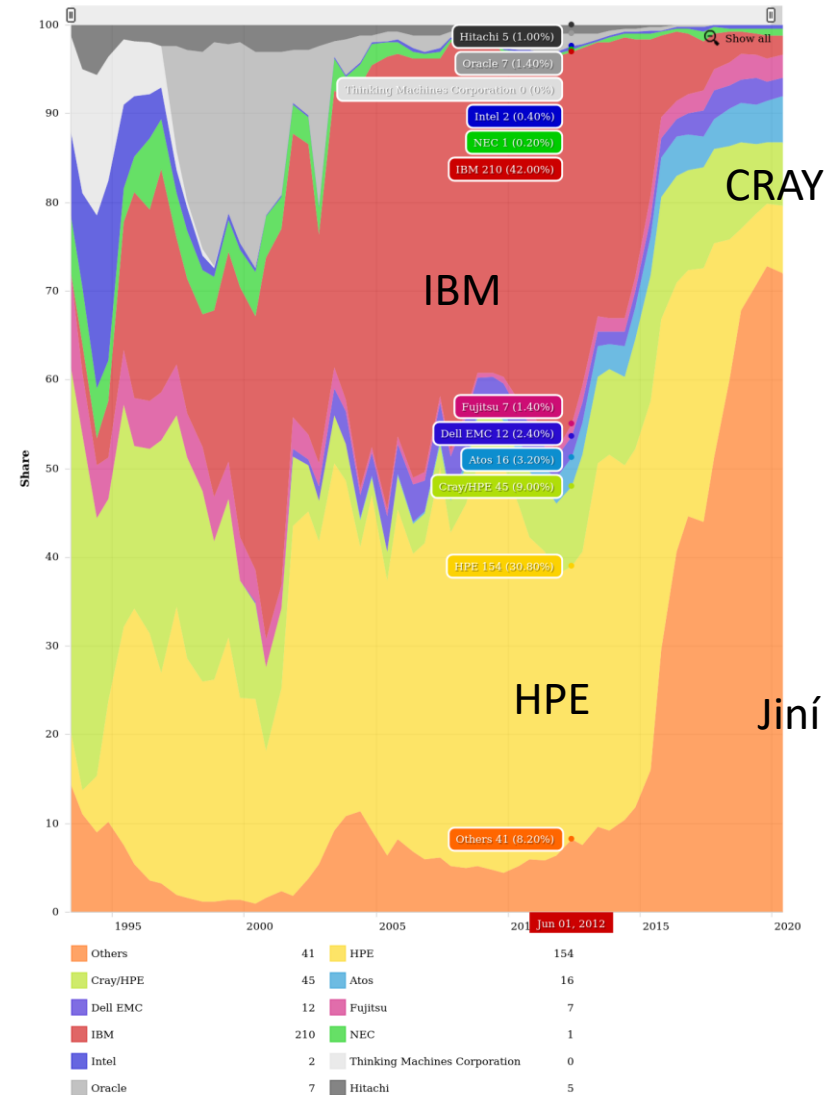
	NAME	SPECS	SITE	COUNTRY	CORES	RMAX PFLOP/S	POWER MW
1	TITAN	Cray XK7, Operon 6274 16C 2.2 GHz + Nvidia Kepler GPU, Custom Interconnect	DOE/OS/ORNL	USA	560,640	17.6	8.3
2	SEQUOIA	IBM BlueGene/Q, Power BQC 16C 1.60 GHz, Custom Interconnect	DOE/NNSA/LLNL	USA	1,572,864	16.3	7.9
3	K COMPUTER	Fujitsu SPARC64 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 – Typ použití / Výrobce

Segments - Systems Share

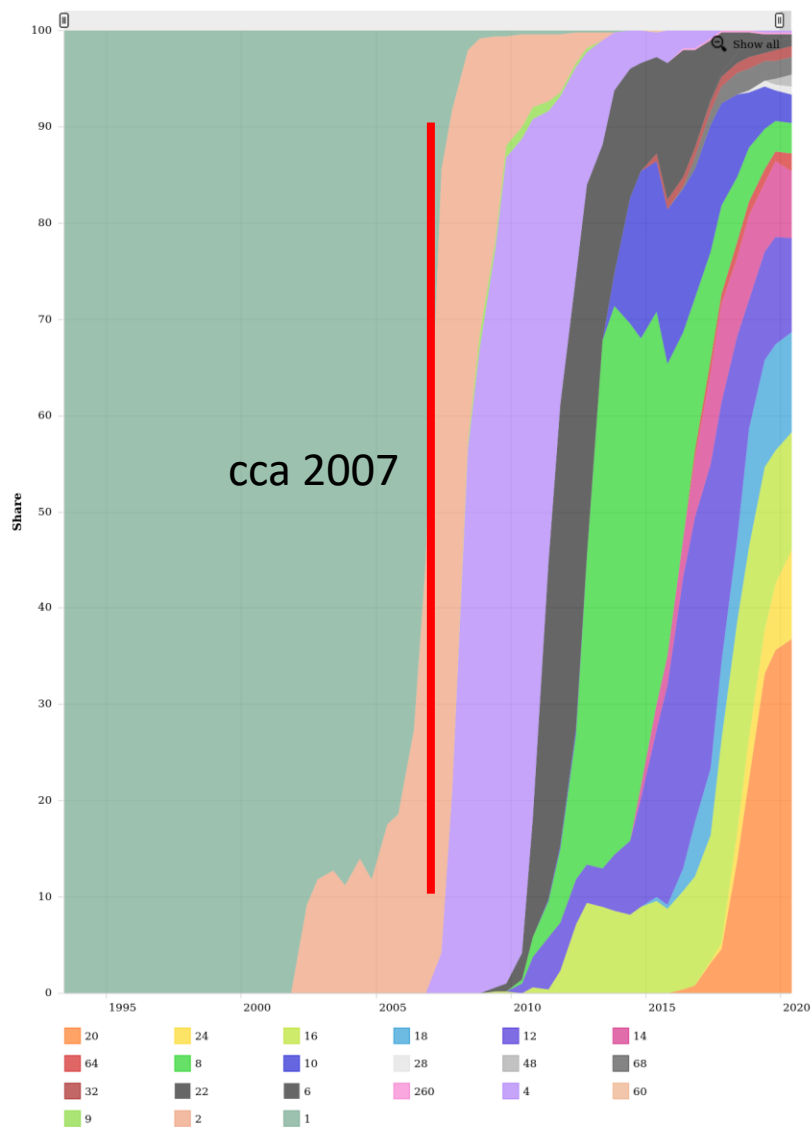


Vendors - Systems Share

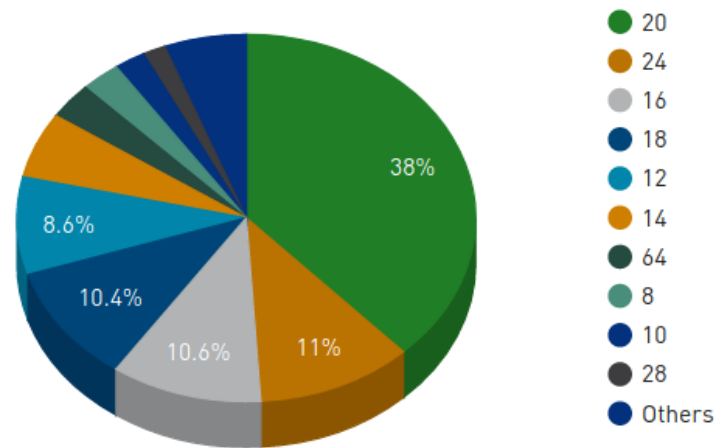


TOP500 – CPU jádra

Cores per Socket - Systems Share

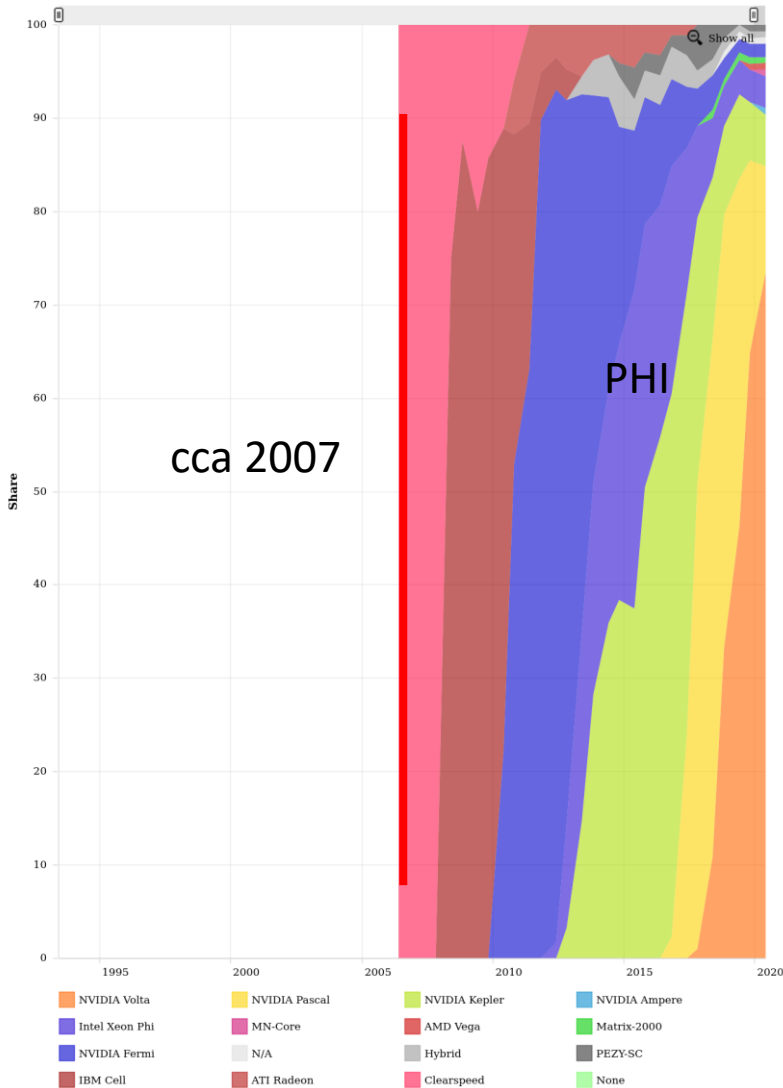


Cores per Socket System Share 2020

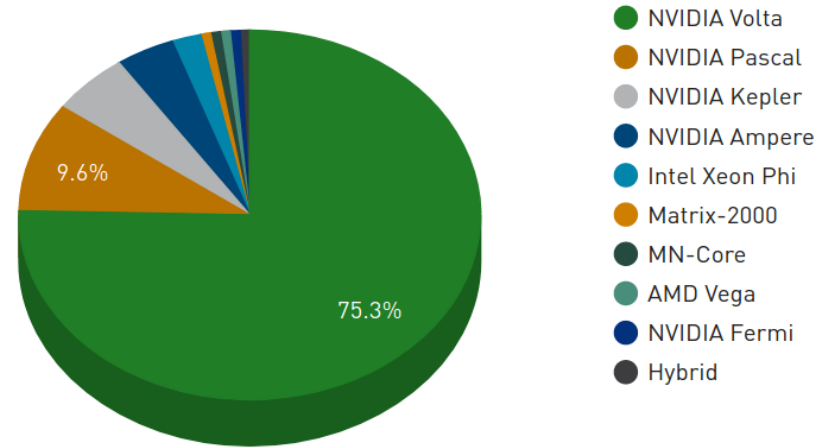


TOP500 – Akcelerátory/Koprocesory

Accelerator/CP Family - Systems Share

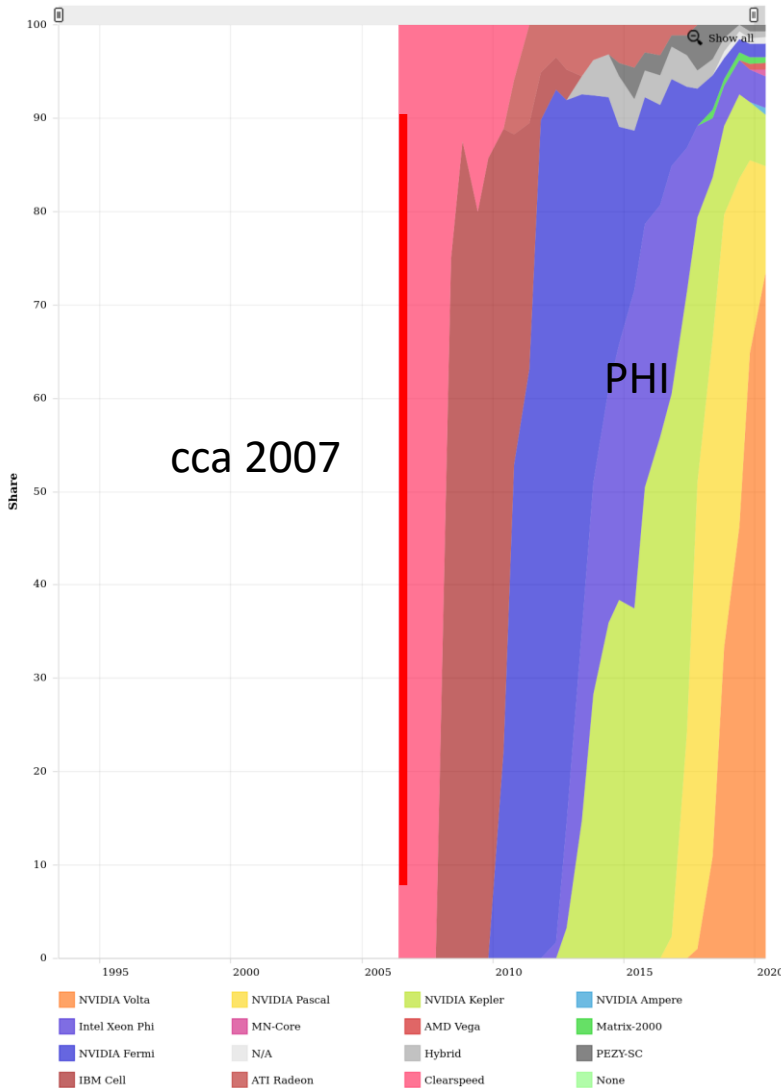


Accelerator/CP Family System Share 2020

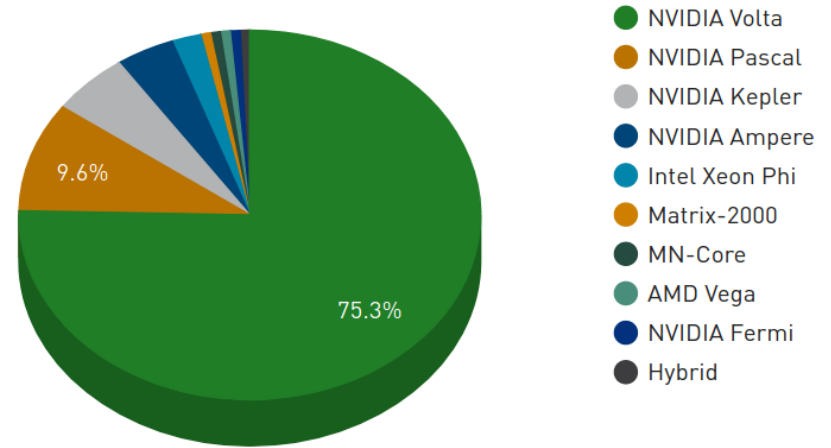


TOP500 – Akcelerátory/Koprocesory

Accelerator/CP Family - Systems Share



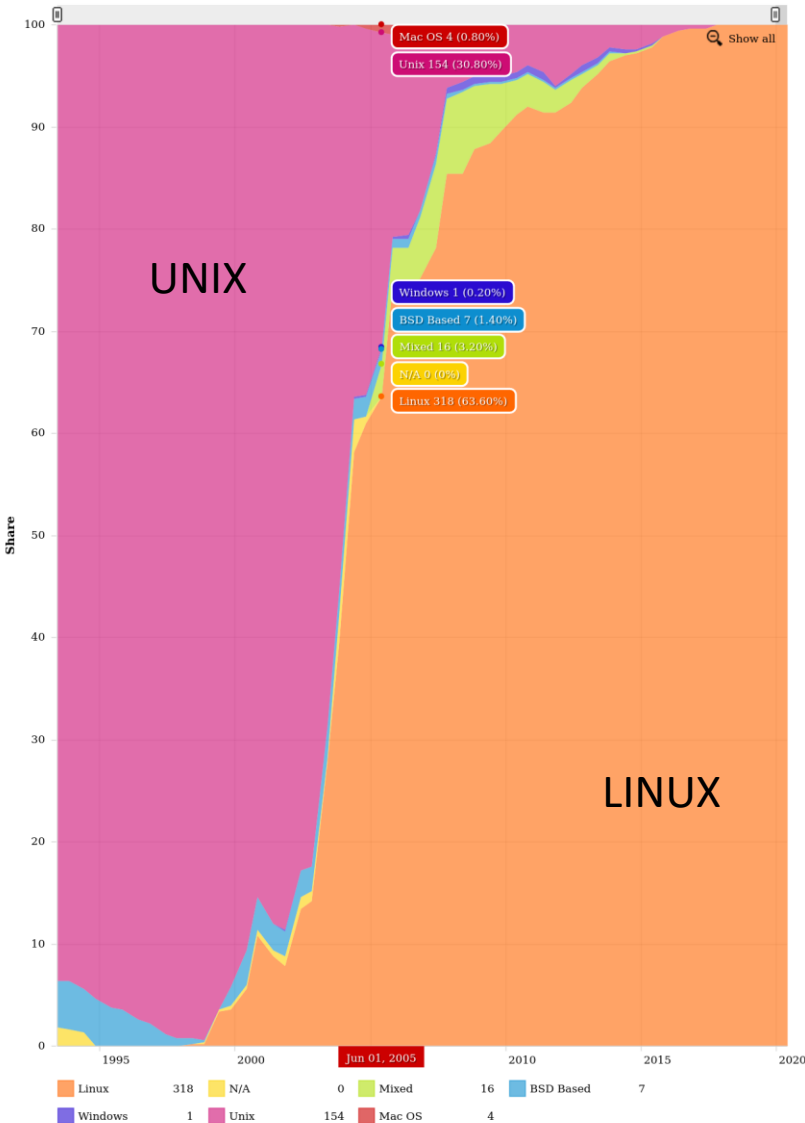
Accelerator/CP Family System Share 2020



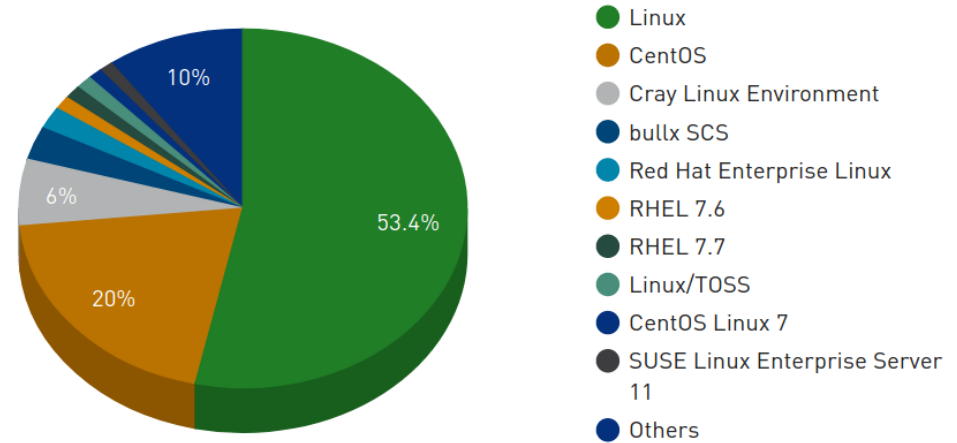
Prakticky:
MD simulace na GPU

TOP500 – OS

Operating system Family - Systems Share



Operating System System Share 2020



MetaCentrum (Debian)
CERIT-SC (CentOS)
IT4I (CentOS)
WOLF (Ubuntu)

Zajímavosti

Fugaku, 1. místo, 2021

<https://www.youtube.com/watch?v=v1z4oENZJtY>

pustit video

Sunway TaihuLight, 1. místo, 2017

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

K – computer, 3. místo, 2012

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

TITAN, 1. místo, 2012

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

Cvičení 1

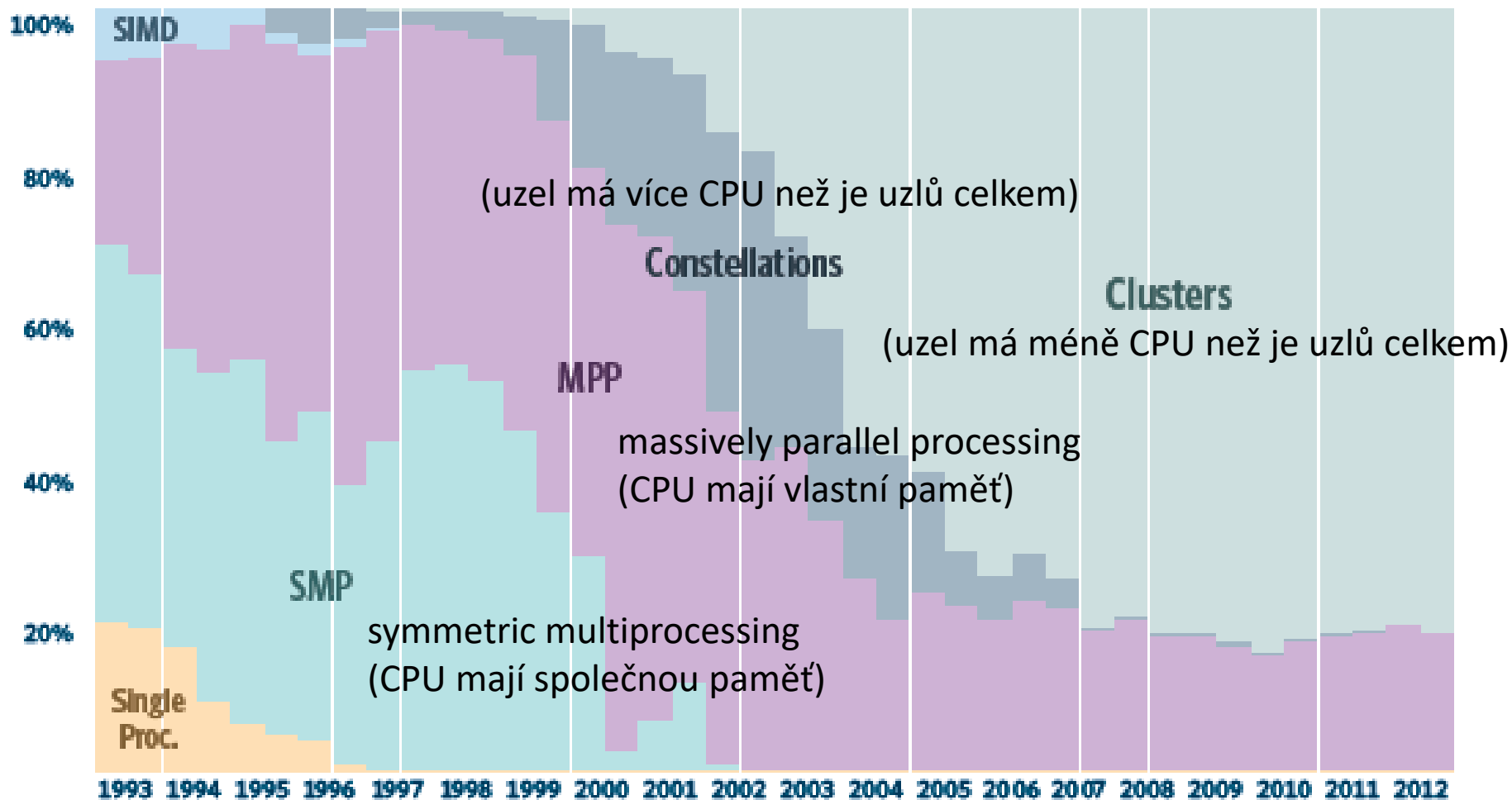
1. Co udává jednotka FLOPS?
2. Jak se jmenuje nejrychlejší superpočítač uvedený v žebříčku TOP500? Jaký je jeho výkon a energetická spotřeba? Jaký typ CPU používá?
3. Na jakou pozici se posunul superpočítač FUGAKU, který byl na první pozici v žebříčku TOP500 v roce 2021?
4. V roce 2015 činila průměrná spotřeba energie v ČR na byt 3 279 kWh (ENERGO 2015). Kolik bytů by pokrylo svoji roční spotřebu 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?

TOP500 1995-2012

starší, ale přehlednější grafy ...

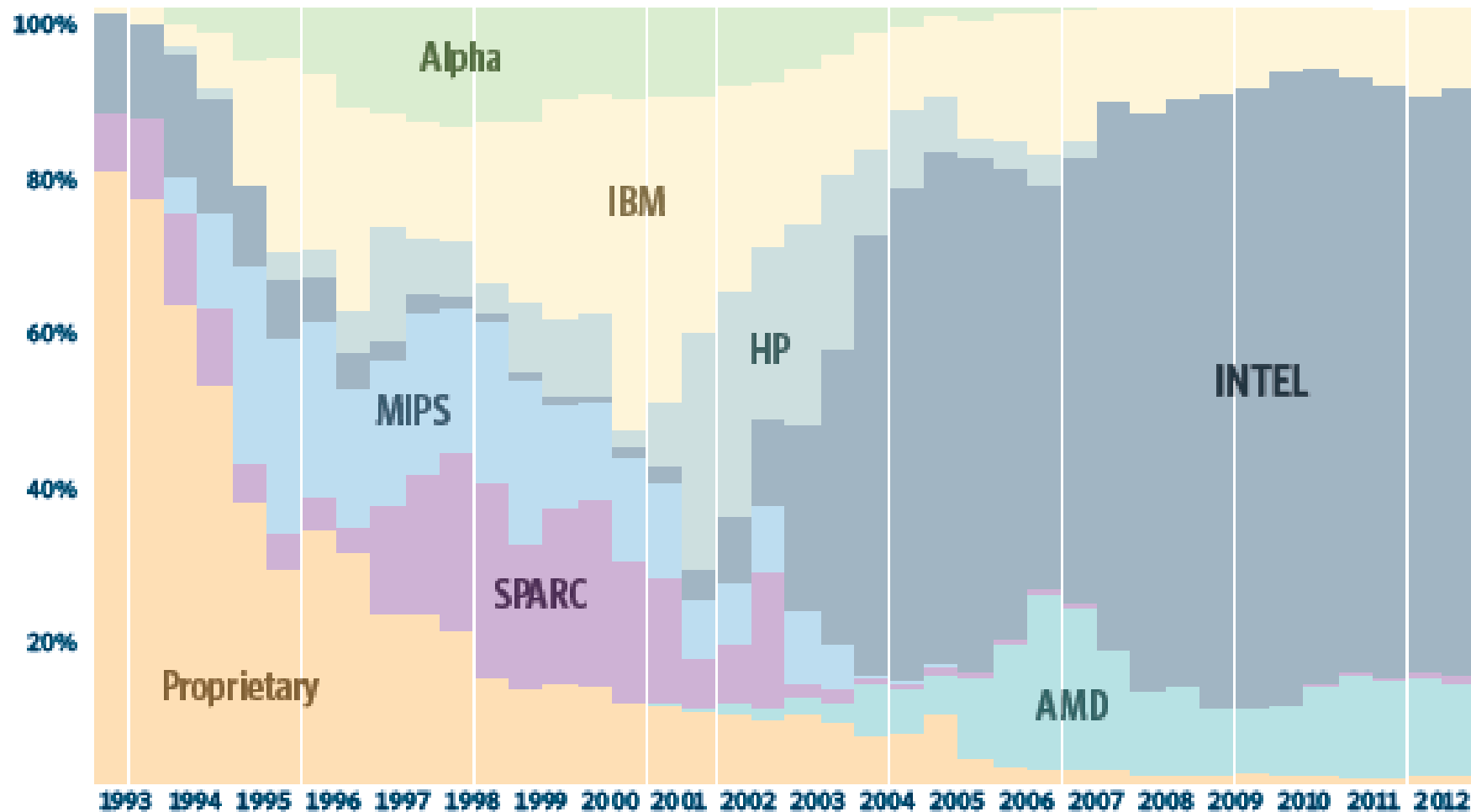
TOP500 – Topologie

ARCHITECTURES



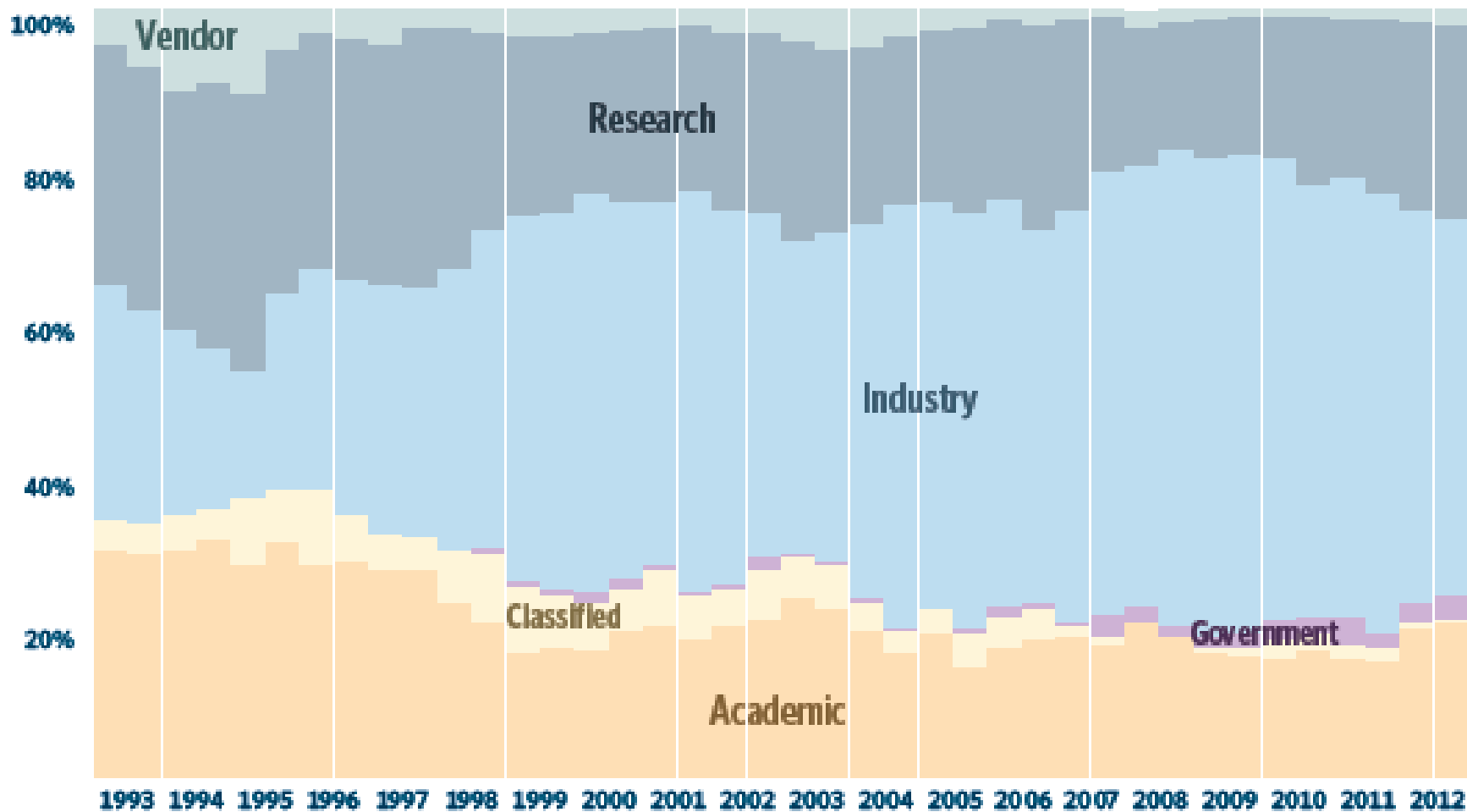
TOP500 – CPU architektura

CHIP TECHNOLOGY



TOP500 – Typ použití

INSTALLATION TYPE



TOP500 – Akcelerátory/Koprocesory

ACCELERATORS/CO-PROCESSORS

