



**Vilniaus
universitetas**

Įvadas į HPC

Vilniaus universiteto superskaičiavimų infrastruktūra atnaujinama įgyvendinant projektą „Lietuvos GRID ir našių skaičiavimų tinklas (LitGrid-HPC)“ (Nr. 01.1.1-CPVA-V-701-08-0004), finansuojamą Europos Sąjungos struktūrinių fondų Europos regioninės plėtros fondo lėšomis



Kuriame
Lietuvos ateitį

2014–2020 metų
Europos Sąjungos
fondų investicijų
veiksmų programa

HPC mokymų ciklas

1 dalis lapkričio 26 d., 14 val. "Įvadas į HPC"

- Trumpai apie HPC, kas tai yra, kam jo reikia
- Kokie HPC būna, koks yra VU (FF+MIF) ir MIF dalis
- Kaip prisijungti MIF darbuotojams / studentams prie HPC
- SSH raktų kūrimas ir naudojimas Win aplinkoje
- Winscp naudojimas Win aplinkoje
- Papildomų resursų užsakymai (Waldur)

2 dalis, gruodžio 10 d. 14 val. "Užduočių valdymas, naudotojų PĮ ir CPU skaičiavimai HPC infrastruktūroje"

- Slurm komandos darbams paleisti, peržiūrėti.
- Sbatch failas ir jo tipiniai parametrai CPU ir GPU particijoms
- Darbai interaktyviu režimu ir darbai liekantys veikti po atsijungimo (sbatch)
- python/R/julia ar kitų kalbų paketų diegimas
- singularity kontaineriai: atsisiuntimas ir/arba modifikavimas esamų
- darbas su MPI
- Rezultatų išvedimas ir parsisiuntimas į naudotojo pc

3 dalis, gruodžio 15 d. 16 val. "GPU skaičiavimai HPC infrastruktūroje"

- GPU skaičiavimai
- CUDA programinio kodo spartinimui naudojant GPU
- Programavimas Python Jupyter-notebooks su GPU
- Simuliacinių skaičiavimų pavyzdys
- Mašininio mokymo projektas (duomenys/modelis jų įkėlimas/atsisiuntimas)
- Mašininio mokymo pavyzdys naudojant vieną GPU
- Mašininio mokymo pavyzdys naudojant kelis GPU

Ar tikrai reikalingi kompiuteriai ir internetas 😊

"I think there is a world market for maybe five computers."

Thomas Watson, president of IBM, 1943

"There is no reason anyone would want a computer in their home."

Ken Olsen, founder of Digital Equipment Corporation, 1977

"The problem of viruses is temporary and will be solved in two years."

John McAfee, founder of McAfee, 1988

"Almost all of the many predictions now being made about 1996 hinge on the Internet's continuing exponential growth. But I predict the Internet will soon go spectacularly supernova and in 1996 catastrophically collapse."

Robert Metcalfe, founder of 3Com, 1995

"Two years from now, spam will be solved."

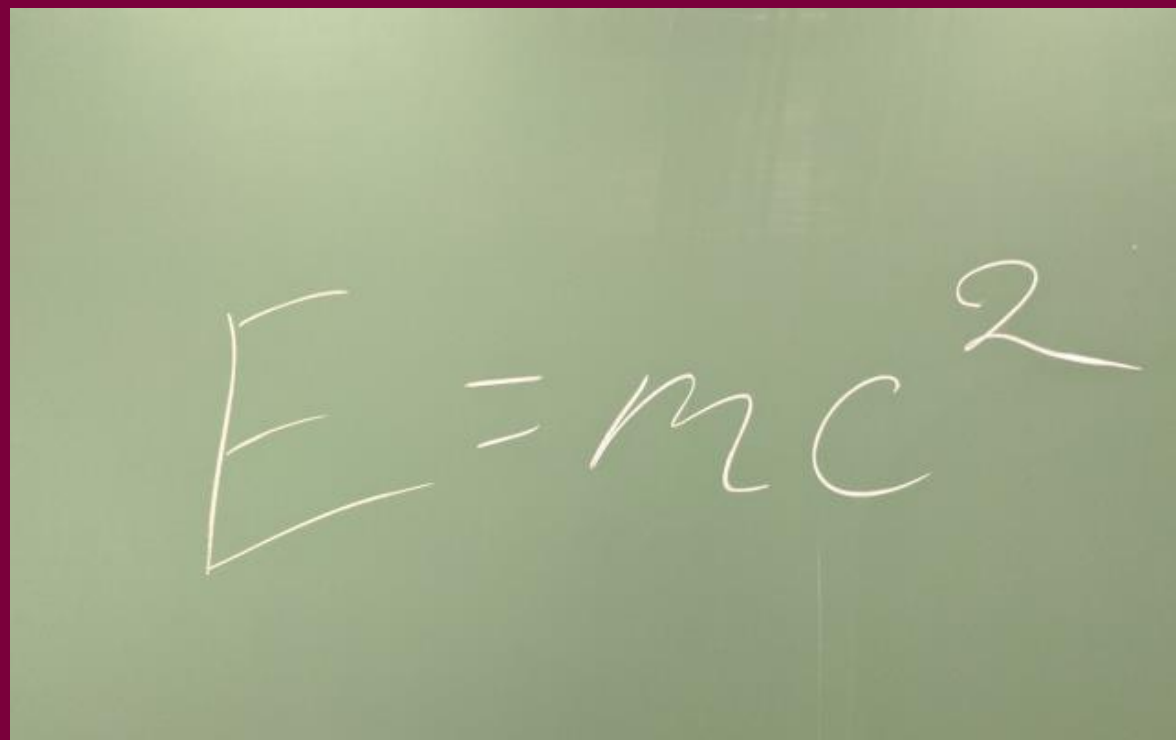
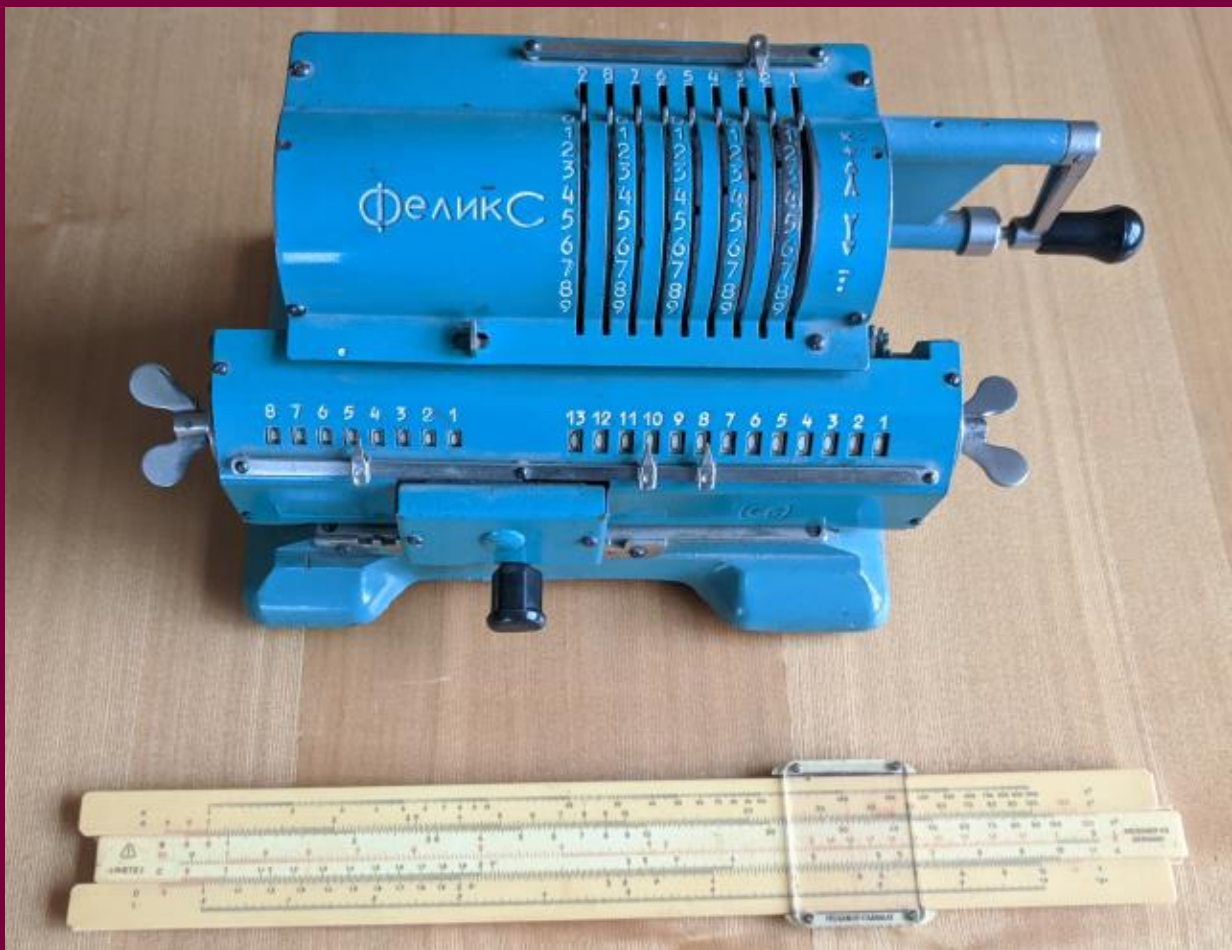
Bill Gates, principal founder of Microsoft, 2004



**Kaip tai pasireiškia mūsų
aplinkoje?**



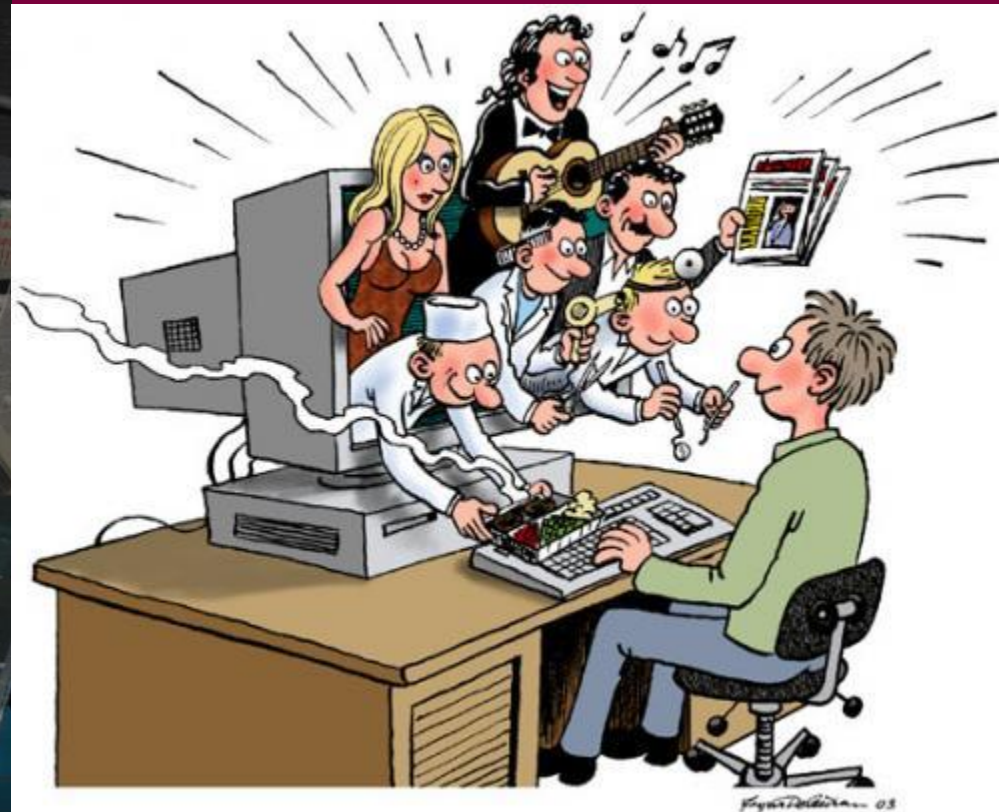
Naudojame tokius įrankius kokius turime 😊



1990 – pirmasis WEB serveris

Vilniaus
universitetas

Internetas dabar



Popiežiaus inauguracija 2005



Popiežiaus inauguracija 2013





Vilniaus
universitetas

2018

Vilniaus
universitetas

2021

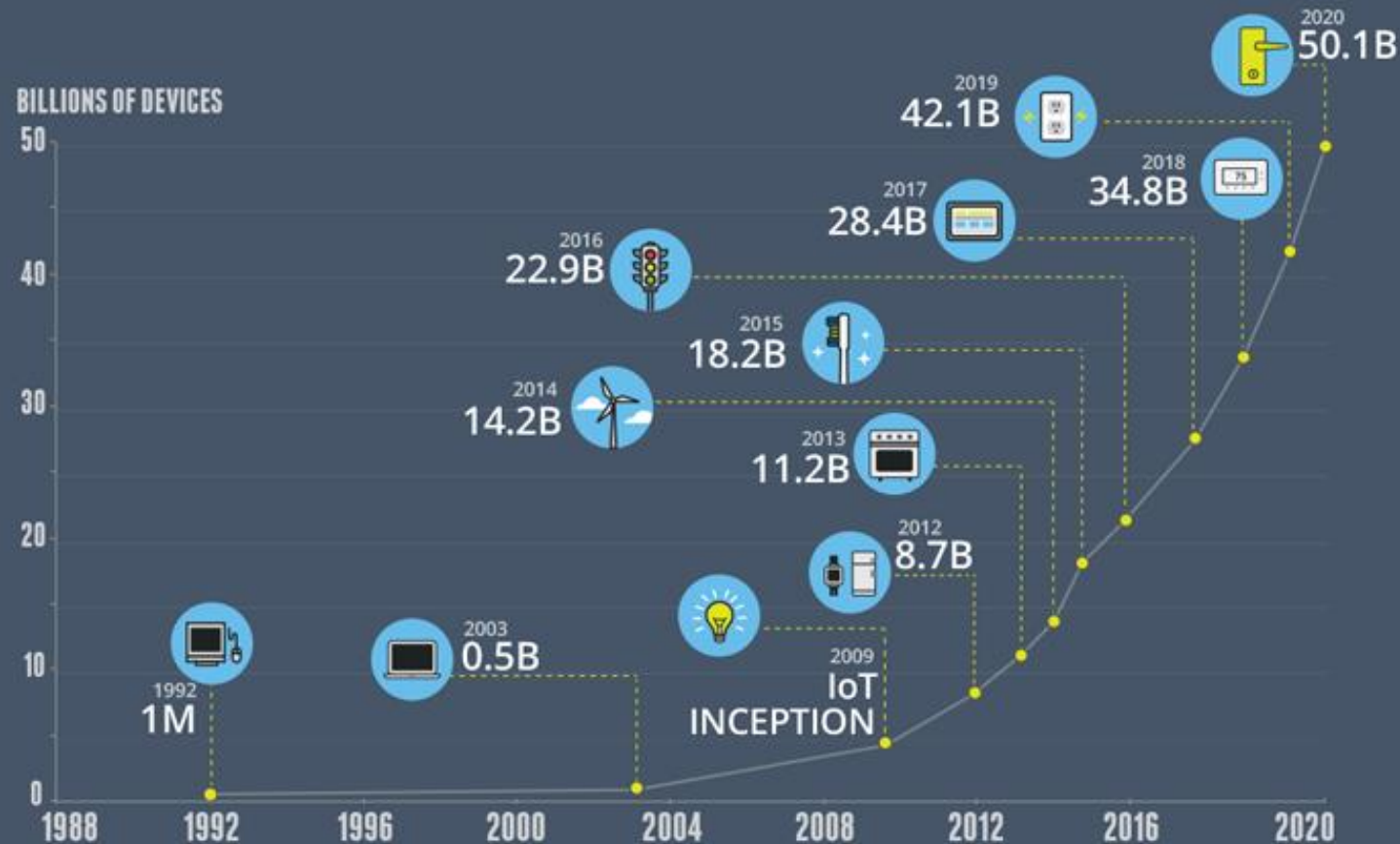


Kiek įrenginių Internete? (Šaltinis – NCTA)

Vilniaus
universitetas

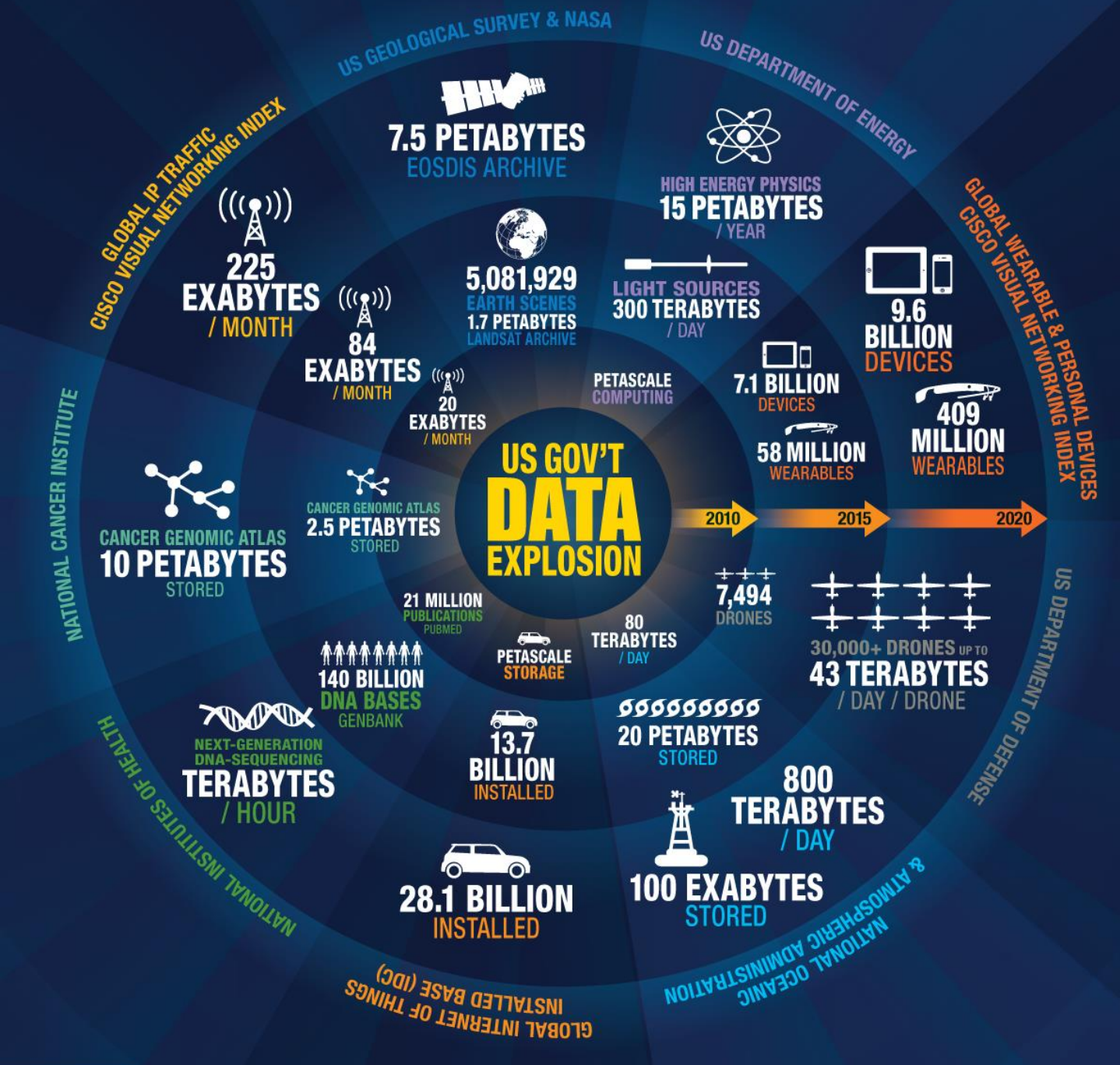
GROWTH IN THE INTERNET OF THINGS

THE NUMBER OF CONNECTED DEVICES WILL EXCEED **50 BILLION** BY 2020

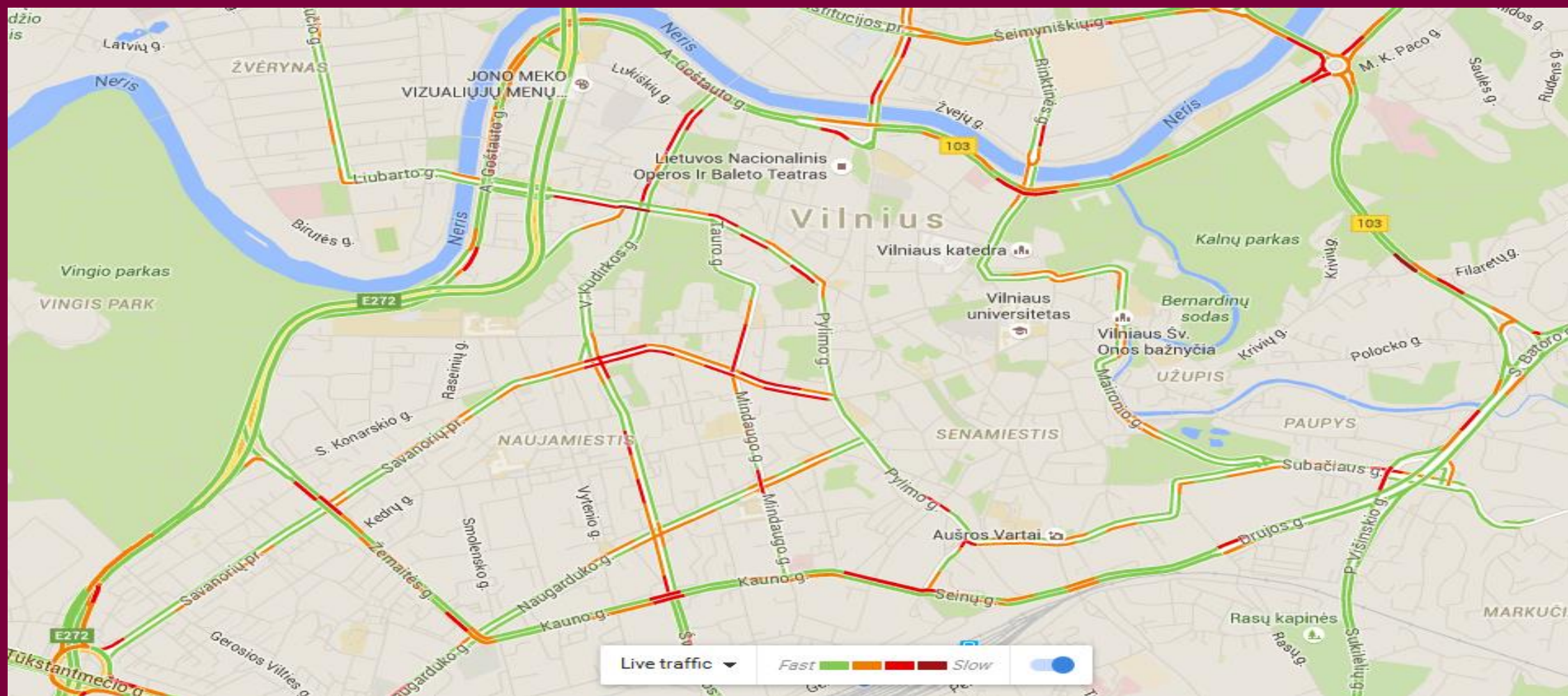


Source: Cisco

Ką gi jie daro?

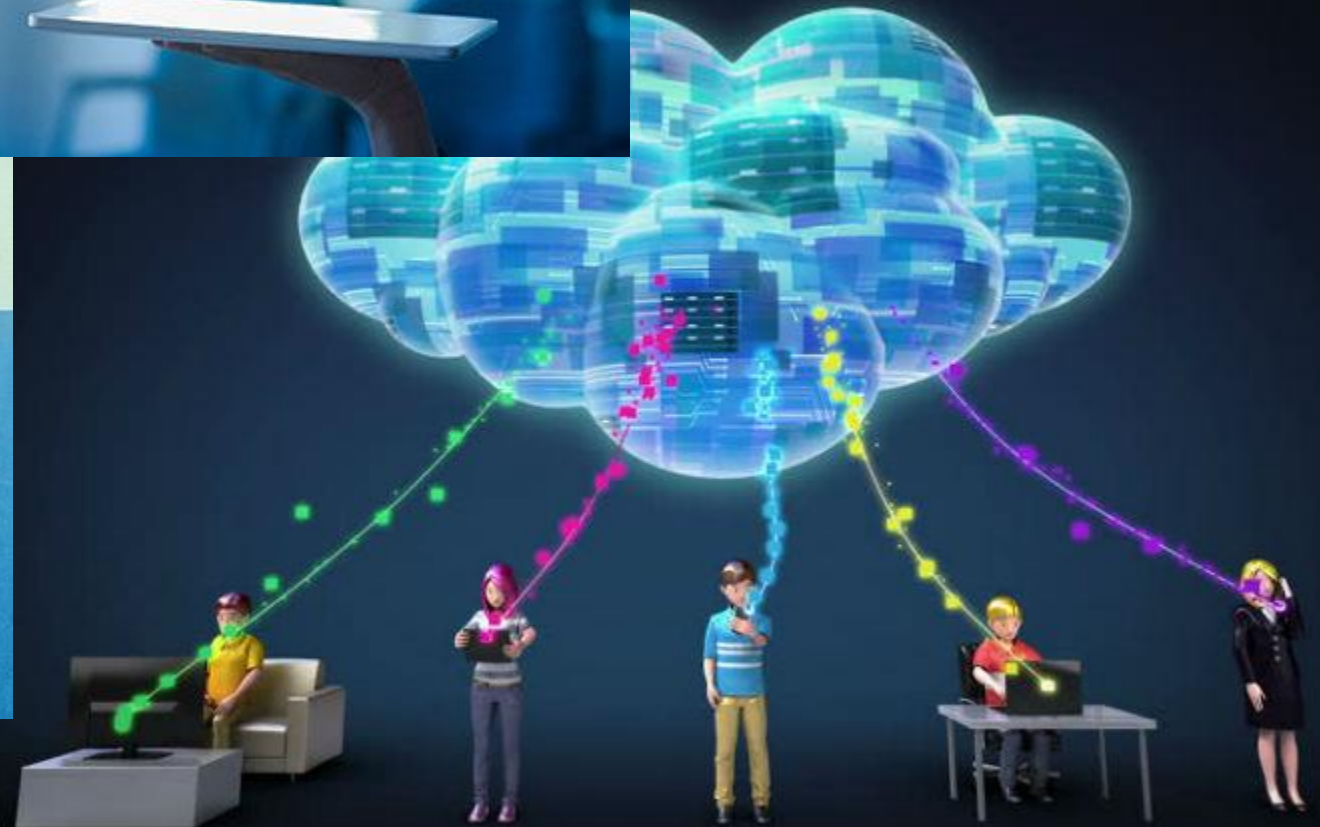
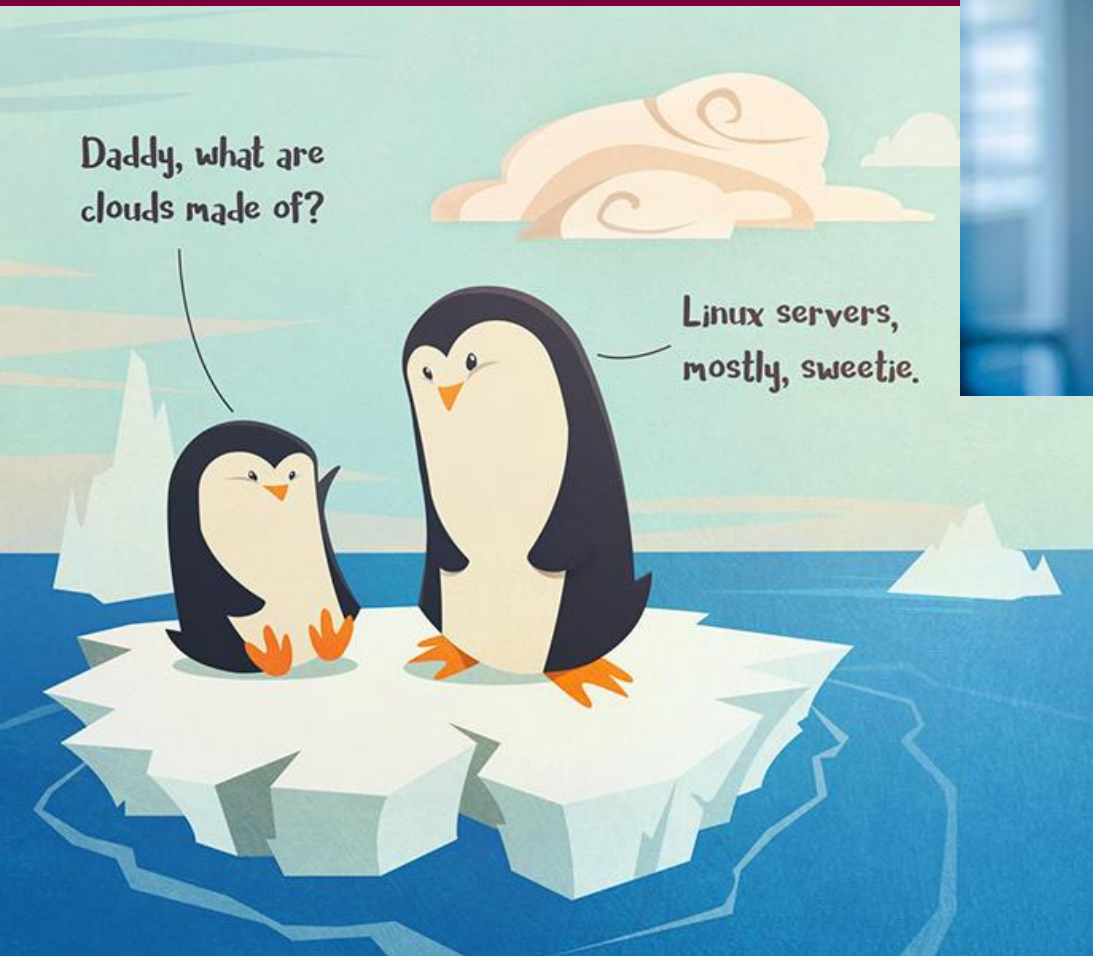


Kam reikalingi duomenys?



Kur duomenys apdorojami?

Vilniaus
universitetas



Skaičiavimai reikalingi



[F1: How advances in CFD are ushering in the 'Software Car' era. \(sportskeeda.com\)](https://sportskeeda.com)

[A Supercomputer's Covid-19 Analysis Yields a New Way to Understand the Virus | Elemental \(medium.com\)](https://medium.com)

Pramogų verslo skaičiavimo poreikiai

Vaizdo efektams pagaminti
reikėjo 4000 serverių telkinio:

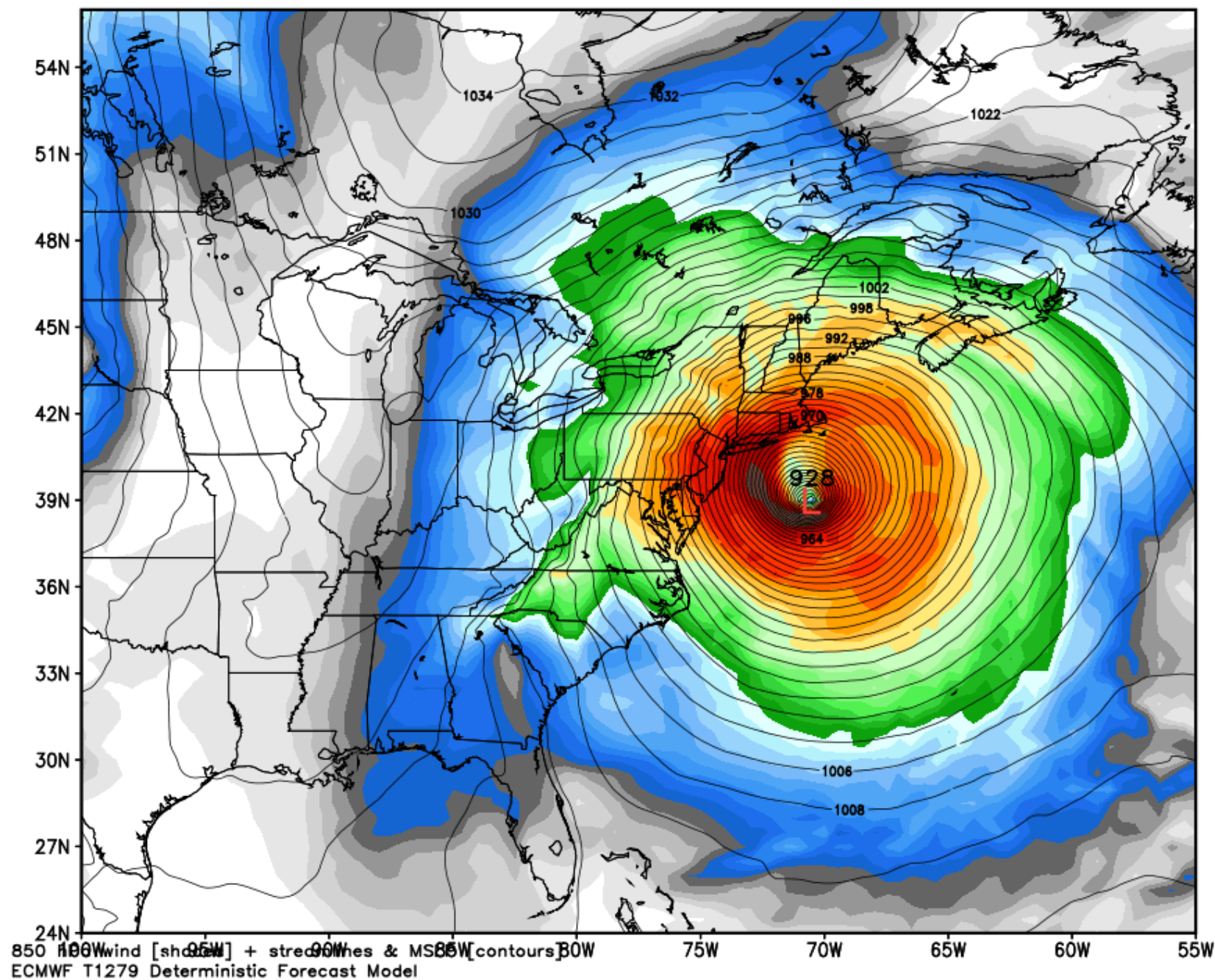
- 35000 CPU branduolių
- 104 TB RAM
- 3 PB saugyklos

~195 nr. Top 500 HPC tuo metu



ECMWF 850 hPa Wind Speed [knots] and MSLP [hPa]
Init: 12Z22OCT2012 -- [216] hr --> Valid Wed 12Z31OCT2012

Min|Max SLP: 927.8 hPa | 1036.6 hPa
MaxWind: 97.0 knots



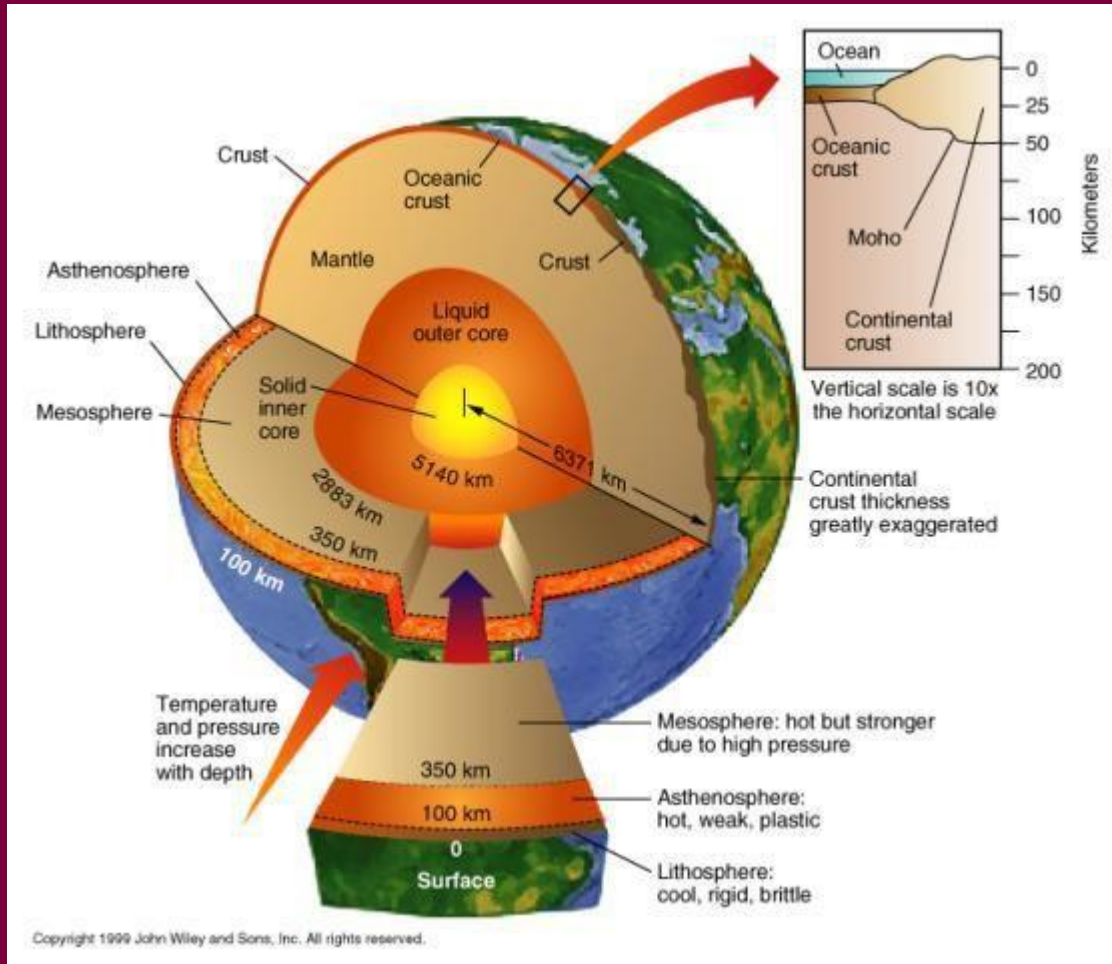
Vilniaus
universitetas

Ką
skaičiuoja
mokslinkai?

Orų
prognozes

Ką skaičiuoja mokslininkai?

Vilniaus
universitetas

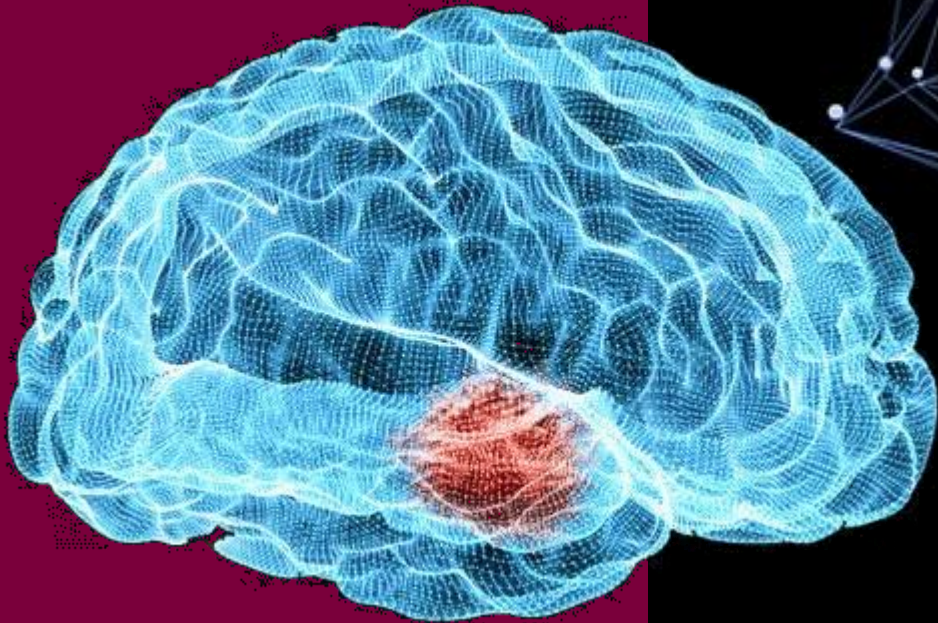


Modeliuoja Žemės planetos sandarą

Ką skaičiuoja mokslininkai?

Vilniaus
universitetas

Modeliuoja
žmogaus
smegenis



Su kuo skaičiuoja?



Su kuo skaičiuoja?



Pirmas superkompiuteris

CDC 6600, pagamintas
1964.

Price - \$2,370,000

Power - 30 kW @ 208 V 400 Hz

OS - SCOPE, KRONOS

CPU - 60-bit processor @ 10 MHz

Memory - Up to 982 kilobytes (131000 x
60 bits)

https://en.wikipedia.org/wiki/CDC_6600

Kas galingesnis?

PROCESSING POWER COMPARED

by Experts Exchange



Cray-2 Supercomputer

Apple iPhone 4



PROCESSING POWER COMPARED

by Experts Exchange



Tianhe-2 Supercomputer

PlayStation 4s



Cray-2 (1985) = iPhone 4 (2010)

Tianhe-2 (2013) = 18400 Playstation 4s (2013)

Kokių skaičiavimo resursų reikia mokslininkams?

Vilniaus
universitetas



©RIKEN

2011 TOP 1 K computer, 8 TFlops, SPARC64 VIIIfx 2.0GHz, Tofu interconnect Fujitsu

Koks superkompiuteris našiausias?

Vilniaus
universitetas

- * Performance **442,010 TFlop/s**
(theoretical **537,212 TFlop/s**)
- * **7,630,848 cores**
- * **5,087,232 GB of memory**
- * OS - Red Hat Enterprise Linux
- * CPU - A64FX 48C 2.2GHz
- * 29,899.23 kW
(Optimized: **26248.36 kW**)

Supercomputer Fugaku





Supercomputer Fugaku: RIKEN Center for Computational Science
No.1 from Jun 2020 until Nov 2020



Summit: DOE/SC/Oak Ridge National Laboratory
No.1 from Jun 2018 until Nov 2019



Sunway TaihuLight: National Supercomputing Center in Wuxi
No.1 from Jun 2016 until Nov 2017



Tianhe-2 (MilkyWay-2) : National University of Defense Technology
No.1 from Jun 2013 until Nov 2015



Titan: Oak Ridge National Laboratory
No.1 in Nov 2012



Sequoia: Lawrence Livermore National Laboratory
No.1 in Jun 2012

ilniaus
niversitetas

**TOP 1
nuo
2012**

<https://www.top500.org/resources/top-systems/>

TOP 10 November 2021 (www.top500.org)

Vilniaus
universitetas

Rank	Site	System	Cores	Rmax (TFlop/s)	Rpeak (TFlop/s)	Power (kW)
1	Japan - RIKEN Center for Computational Science	Supercomputer Fugaku – Fujitsu, A64FX 48C 2.2GHz, Tofu interconnect D	7,630,848	442,010.0	537,212.0	29,899
2	United States - DOE/SC/Oak Ridge National Laboratory	Summit - IBM Power System AC922, IBM POWER9 22C 3.07GHz, NVIDIA Volta GV100, Dual-rail Mellanox EDR	2,414,592	148,600.0	200,794.9	10,096
3	United States - DOE/NNSA/LLNL	Sierra - IBM Power System S922LC, IBM POWER9 22C 3.1GHz, NVIDIA Volta GV100, Dual-rail Mellanox EDR	1,572,480	94,640.0	125,712.0	7,438
4	China - National Supercomputing Center in Wuxi	Sunway TaihuLight - Sunway MPP, Sunway SW26010 260C 1.45GHz, Sunway (NRCPC)	10,649,600	93,014.6	125,435.9	15,371
5	United States - DOE/SC/LBNL/NERSC	Perlmutter - HPE Cray EX235n, AMD EPYC 7763 64C 2.45GHz, NVIDIA A100 SXM4 40 GB, Slingshot-10, HPE	761,856	70,870	93,750	2,589
6	United States - NVIDIA Corporation	Selene - NVIDIA DGX A100, AMD EPYC 7742 64C 2.25GHz, NVIDIA A100, Mellanox HDR Infiniband	555,520	63,460.0	79,215.0	2,646
7	China - National Super Computer Center in Guangzhou	Tianhe-2A - TH-IVB-FEP Cluster, Intel Xeon E5-2692v2 12C 2.2GHz, TH Express-2, Matrix-2000 (NUDT)	4,981,760	61,444.5	100,678.7	18,482
8	Germany - Forschungszentrum Juelich (FZJ)	JUWELS Booster Module - Bull Sequana XH2000 , AMD EPYC 7402 24C 2.8GHz, NVIDIA A100, Mellanox HDR InfiniBand/ParTec ParaStation ClusterSuite, Atos	449,280	44,120.0	70,980.0	1,764
9	Italy - Eni S.p.A.	HPC5 - PowerEdge C4140, Xeon Gold 6252 24C 2.1GHz, NVIDIA Tesla V100, Mellanox HDR Infiniband, Dell EMC	669,760	35,450.0	51,720.8	2,252
10	Microsoft Azure - Azure East US 2	Voyager-EUS2 - ND96amsr_A100_v4, AMD EPYC 7V12 48C 2.45GHz, NVIDIA A100 80GB, Mellanox HDR Infiniband, Microsoft Azure	253,440	30,050	39,531.2	

2005m VU MIF superkompiuteris nr.1

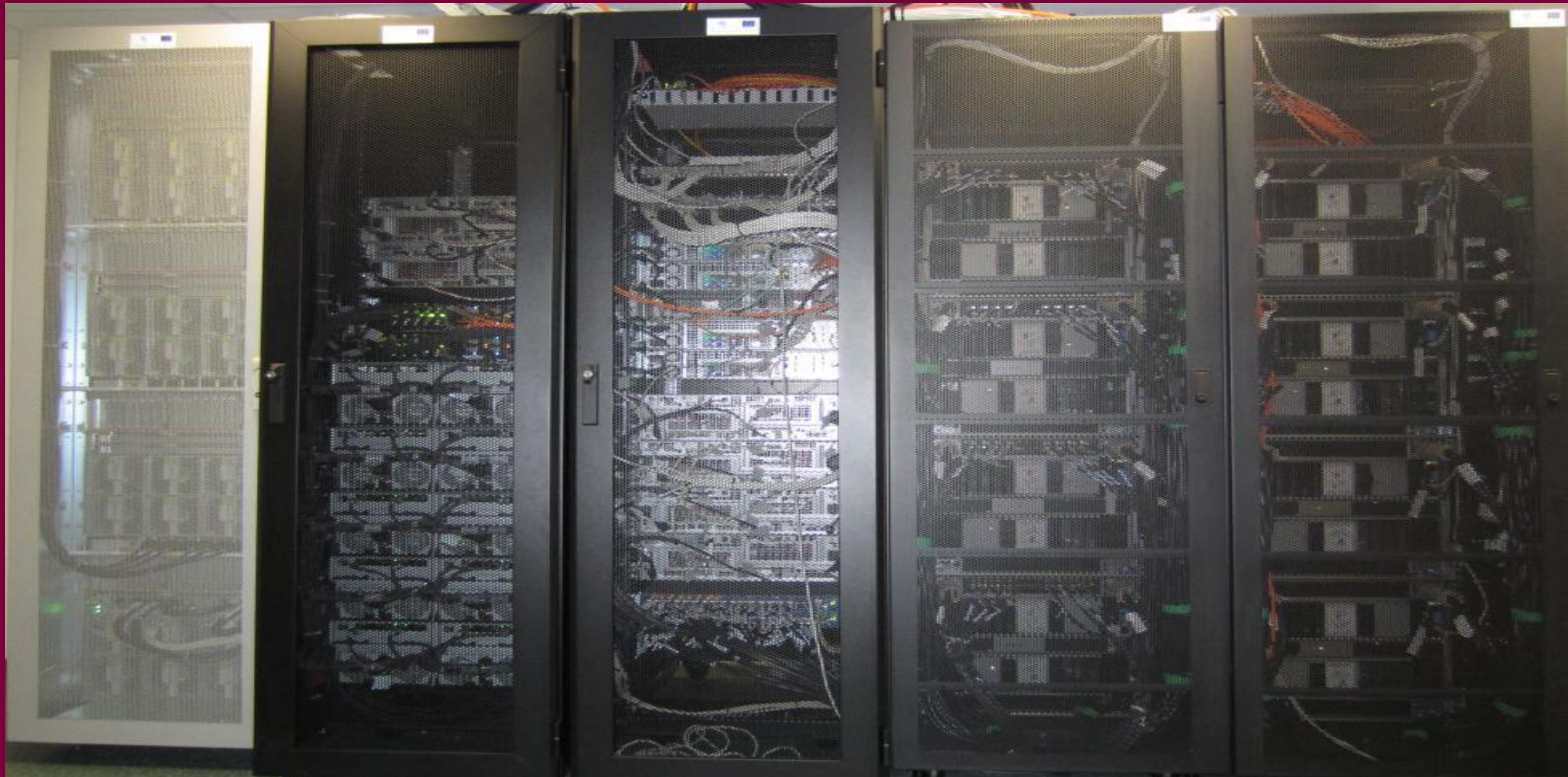
Vilniaus
universitetas



* Bendras teorinis našumas ~ 2 TFLOPS * Duomenų saugykla ~ 8 TB (RAW)

2011m VU MIF superkompiuteris nr.2

Vilniaus
universitetas



* Bendras teorinis našumas ~ 20 TFLOPS

2021m VU superkompiuteris

Vilniaus
universitetas



VU HPC – tai Vilniaus universiteto aukšto našumo skaičiavimų, paskirstytų skaičiavimų ir elektroninių paslaugų infrastruktūra, sukurta ES Struktūrinių fondų lėšomis. Ji skirta kurti ir palaikyti e-infrastruktūrai, reikalingai akademinėi visuomenei, viešajam sektoriui, užsienio partneriams bei kitiems vartotojams. Lietuvos GRID našių skaičiavimų tinklas (LitGrid-HPC) projekto infrastruktūra yra sukoncentruota dviejuose atviros prieigos superkompiuterių lokacijose, apjungtuose dedikuota linija:

- Vilniaus universiteto Matematikos ir informatikos fakultete,
- Vilniaus universiteto Fizikos fakultete



Vilniaus universiteto superskaičiavimų infrastruktūra atnaujinama įgyvendinant projektą „Lietuvos GRID ir našių skaičiavimų tinklas (LitGrid-HPC)“ (Nr. 01.1.1-CPVA-V-701-08-0004), finansuojamą Europos Sąjungos struktūrinių fondų Europos regioninės plėtros fondo lėšomis



* Bendras teorinis našumas ne mažesnis nei 0,5 Pflops DP

2021m VU superkompiuterio MIF dalis

Vilniaus
universitetas



- * Bendras teorinis našumas:
 - * CPU ~ 112 TFLOPS DP
 - * GPU ~ 4PFLOPS DL (249 TFLOPS DP)

CPU telkinys

Teorinis našumas ~ 112 TFLOPS DP

9 šasi po 4 serverius = 36 serveriai:

- CPU: 2 x Intel® Xeon® Gold 6252 Processor
= 48 Cores
- RAM 384GiB
- SSD – priklauso nuo sistemos
- Tinklas:
 - MGT 1Gbit/s
 - 2x10Gbit/s
 - Infiniband 4xEDR(100Gbit/s)



GPU telkinys

Teorinis našumas ~ 3PFLOPS DL (187,2 TFLOPS DP)

3 NVIDIA DGX-1 serveriai:

- GPU: 8 x NVIDIA Tesla V100 32GB SMX2
- CPU: 2 x Intel® Xeon® E5-2698 v4 Processor
= 40 Cores
- RAM: 512GiB
- SSD: 7,68 TiB (RAW)
- Tinklas:
 - MGT 1Gbit/s
 - 2x10Gbit/s
 - 4x Infiniband 4xEDR(100Gbit/s)



Power GPU telkinys

Teorinis našumas ~ 1PFLOPS DL (62,4 TFLOPS DP)

2 IBM Power9 AC922 serveriai:

- GPU: 4 x NVIDIA Tesla V100 32GB SMX2
- CPU: 2 x IBM Power 9 Processor
= 32 Cores
- RAM: 1TiB
- SSD: 3,84 TiB (RAW)
- Tinklas:
 - MGT 1Gbit/s
 - 2x10Gbit/s
 - 2x Infiniband 4xEDR(100Gbit/s)



HPC duomenų saugyklų modulis

MDS mazgas 19,2 TiB:

- 2x Dell EMC PowerEdge 640 tarnybinė stotis
- 1x Dell EMC ME4024 duomenų saugykla

OSS mazgas 750 TiB:

- 8x Dell EMC PowerEdge 640 tarnybinė stotis
- 2x Dell EMC ME4084 duomenų saugykla
- 2x Dell EMC ME484 diskų plėtimo lentyna



HPC tinklo modulis

Didelio pralaidumo ir mažo vėlinimo mazgas:

- 6x Mellanox SB7800 InfiniBand 100Gbps EDR komutatorius



Didelio našumo Ethernet tinklo mazgas:

- 3x Dell EMC S4048-ON LAN 10 Gbps komutatorius



Valdymo tinklo mazgas:

- 3x Dell EMC S3048-ON LAN 1 Gbps komutatorius

„Mobilūs“ moduliai

Mobili Siemens ir Raspberry dėžutė:

- 2x Raspberry-Pi 4 Model B 2GB RAM su maitinimo blokeliais
- 2x Siemens - Simatics S7-200 CPU module
- 2x Siemens - Simatics NET CP243-1 Communication processor
- 2x Siemens - Simatics S7-1200 simulator module
- 2x impulsinis maitinimo šaltinis HDR-60-24
- 2x Siemens Sematic Net industrial ethernet Rj45 cord
- 1x Siemens Sematic STEP 7 Basic v16 programinė įranga (4x DVD + USB) ir licencija
- 1x Siemens Sematic OPC UA S7-1200 Basic licencija
- 1x MicroTik hAP ac² Dual-concurrent Access Point

Mobilus kibernetinis modulis:

- 1x Peli Super-V-7U-M6 konteineris
- 1x Elektros paskirstymo įrenginys
- 1x Cisco ISR4331/K9 maršrutizatorius
- 1x DellEMC Networking S3124P LAN komutatorius
- 1x DellEMC PowerEdge R740 tarnybinė stotis
- 1x DellEMC Smart-UPS SRT 3000VA/2700W nepertraukiamo maitinimo šaltinis



Kur rasti daugiau informacijos?

ITAPC informacija - <http://mif.vu.lt/> -> Paslaugos -> [IT atviros prieigos centras](#)

Naujasis HPC - <https://mif.vu.lt/itwiki/hpc>

- Dar vyksta testavimas ir derinimas, bet jau galite naudotis

Senasis HPC - <http://mif.vu.lt/cluster/>

- Dabar veikia tik Beta telkinys
- Ateityje resursai bus prijungti prie naujojo HPC valdymo sistemos

Kiekvienas MIF darbuotojas ir studentas gali atlikti skaičiavimus abejose sistemose. Dabartiniu metu per mėnesį galima skaičiuoti 100 val. su CPU telkiniu, ir 6 val. su GPU telkiniais.

Kaip prisijungti?

Kiekvienas VU MIF tinklo naudotojas gali prisijungti prie HPC sistemų be papildomos registracijos. Bet resursai, kuriais galima naudotis yra apriboti.

Savitarnos portalas [Waldur](#) leis prisijungti visiems VU naudotojams ir atlikti skaičiavimus su tipiniais apribojimais.

Norint gauti daugiau laiko skaičiavimams reikia užpildyti [ITAPC paslaugų užsakymo formą](#) ir pateikti ten nurodytu adresu.

Kaip prisijungti?

- Prisijunkite į Linux aplinką su savo VU MIF naudotojo vardu ir slaptažodžiu
 - VU MIF klasėje arba viešame terminale
 - `ssh uosis.mif.vu.lt`
- Su komanda **klist** patikrinkite ar turite galiojantį Kerberos raktą (ticket). Jei rakto nėra arba jo galiojimo laikas pasibaigęs, tai reikia įvykdyti komandą **kinit**.
- Jungiatės į mazgą **hpc** su komanda **ssh hpc** (turi nereikalauti slaptažodžio).
- **Pirmą kartą** prisijungus turi praeiti **5min**, kad galėtumėte naudotis resursais.

Kaip prisijungti su SSH raktais?

- Jei neturite SSH raktų, instrukciją kaip juos susikurti Windows aplinkoje aprašyta https://mif.vu.lt/itwiki/duk:ssh_key
- Prieš naudodant šį būdą, reikia:
 - bent kartą prisijungti su Kerberos
 - susikurti `~/.ssh` katalogą
 - į jį įdėti savo **viešąjį ssh raktą** (OpenSSH formatu) į failą `~/.ssh/authorized_keys`.
- Dabar galite su **ssh**, **sftp**, **scp**, **putty**, **winscp** ar kitomis **ssh** protokolą palaikančiomis programomis prisijungti į **hpc.mif.vu.lt** su savo **ssh privačiu raktu** nurodydami savo VU MIF naudotojo vardą (turi nereikalauti prisijungimo slaptažodžio, bet gali reikalauti jūsų ssh privataus rakto slaptažodžio).

Failų perkėlimas į / iš HPC

VU MIF HPC bendra failų sistema yra pasiekama **/scratch/lustre** kataloge.

Kiekvienam naudotojui yra sukuriamas **/scratch/lustre/home/username** katalogas, kur username - PST naudotojo vardas.

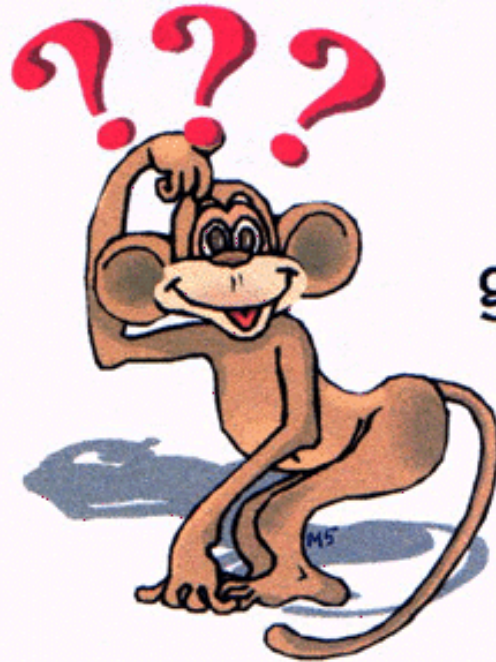
Šios failų sistemos failai yra vienodai pasiekiami visuose skaičiavimo mazguose ir mazge hpc.

Failams perkelti galite naudoti:

- **Sftp**
- **Scp**
- **Winscp**
- ...

Prašome šiuos katalogus naudoti tik pagal paskirtį ir atlikus skaičiavimus - išsivalyti.

Klausimai?



Questions
are
guaranteed in
life;
Answers
aren't.