



KIFÜ

Kormányzati
Informatikai
Fejlesztési
Ügynökség

Zoltan Kiss

Head of Department

Report on running the biggest GPU cluster in Hungary

GPU Day 2017

Wigner Research Centre

2017.06.23.

Contents

- The NIIF Programme at KIFÜ
- NIIFP services
- HPC infrastructure
- Access and usage
- PRACE and ELITRANS

The NIIF Program at KIFÜ

National Information Infrastructure Development Program

- Founded at 1986 (amongst the oldest NRENs in Europe)
- NIIF Institute merged into KIFÜ at 2016
- Non-profit public organization

The user community of NIIF

- All universities and higher education institutes
- All the academic research institutes
- Nearly all the public collections (libraries, museums, archives)
- All schools of Hungary
- More than 5000 institutions



Nemzeti Információs
Infrastruktúra Fejlesztési Program

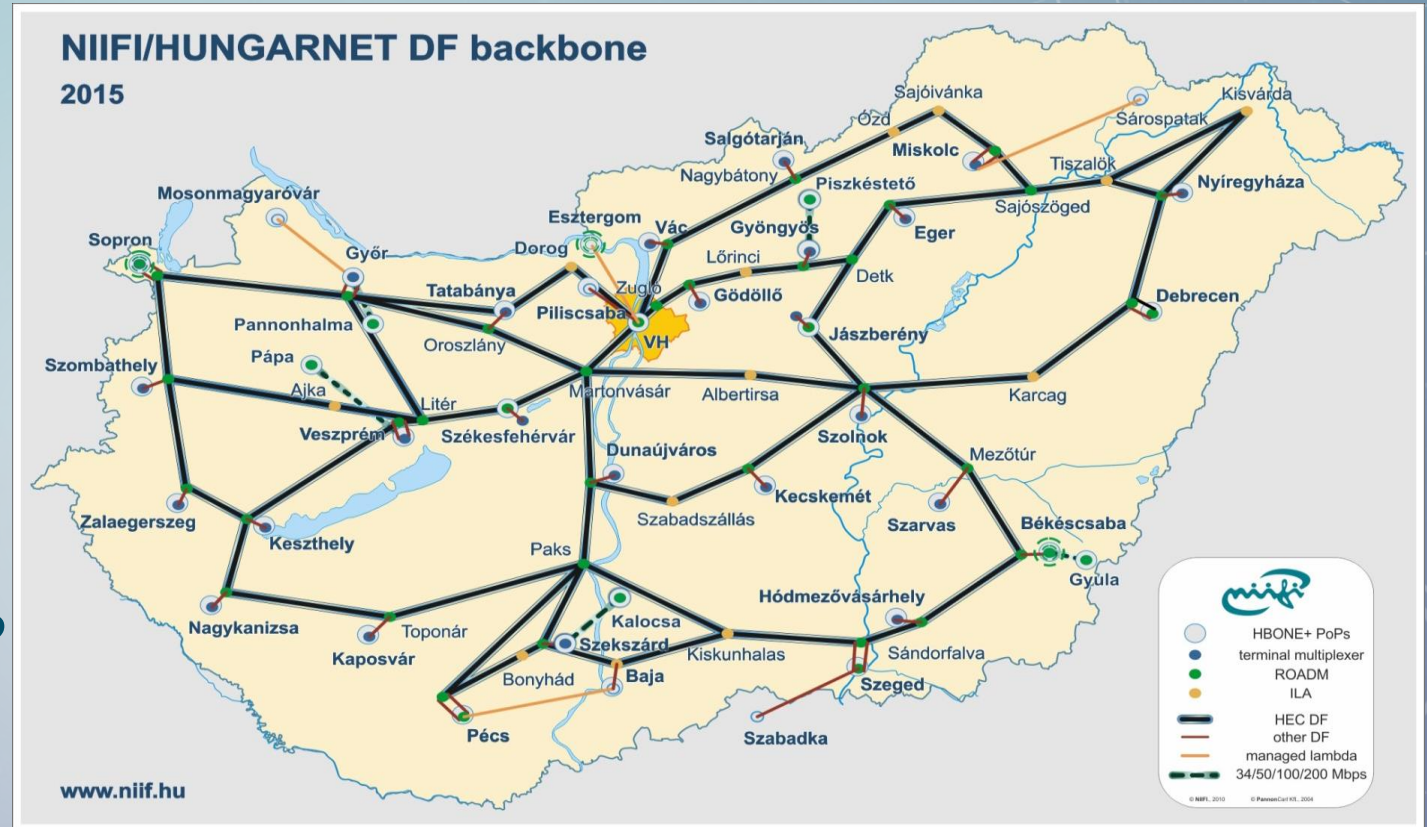
Network

DWDM on DF backbone



CERN-Wigner 100Gbps

ELI-ALPS - GEANT 100Gbps?



Technologies and projects



VoIP



Storage



VIDEOTORIUM



HISTORY OF HPC AT NIIF

2001

Sun E10k

- 60 Gflop/s
- SMP architecture
- 96 UltraSparc processors
- 48 GB memory
- Listed at TOP500 (rank 428.)

Upgrades in several steps



NIIF HPC – History and plans



2001 60
Gflop/s

2009 900
Gflop/s

2011 48
Tflop/s

2015 0.5
Pflop/s

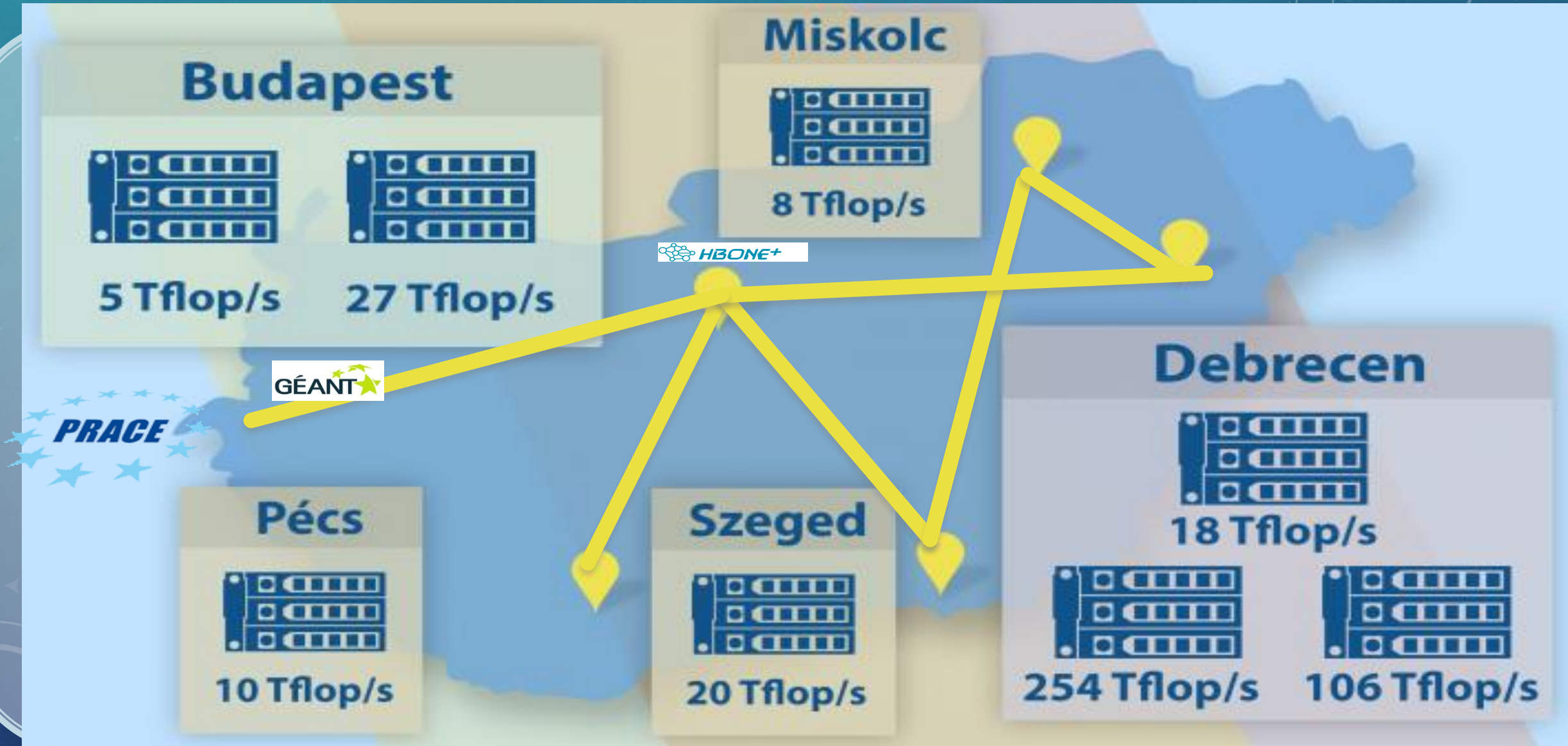
2020 7
Pflop/s ?



TODAY

- Several supercomputers
- Different architectures
- Distributed setup (5 locations)
- CPU + coprocessors + GPU
- 448 Tflop/s total capacity
- 14 Pbytes of storage

HPC Infrastructure



NIIF HPC – 448 Tflop/s



5.5 Tfps
27 Tfps



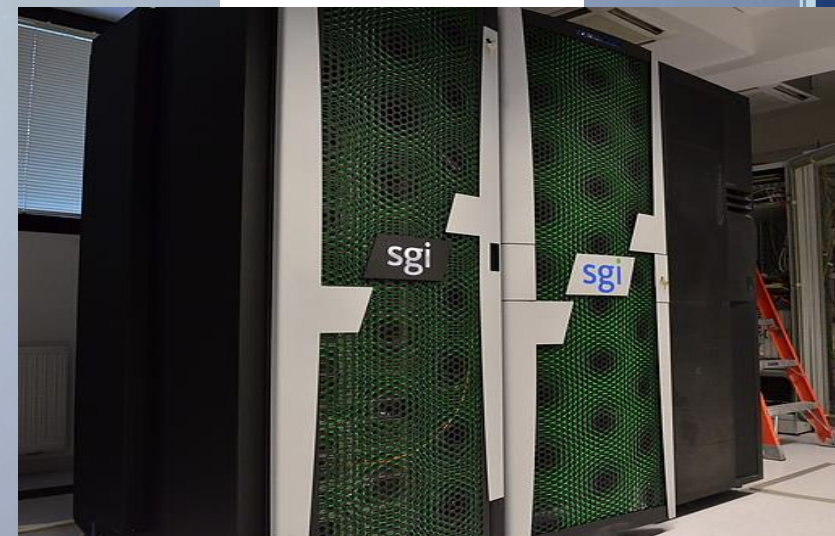
10.5 Tfps
254 Tfps








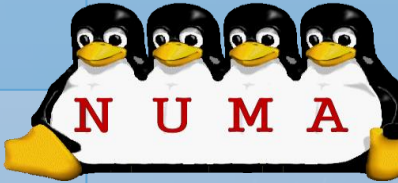
20 Tfps
106 Tfps



18 Tfps
8 Tfps





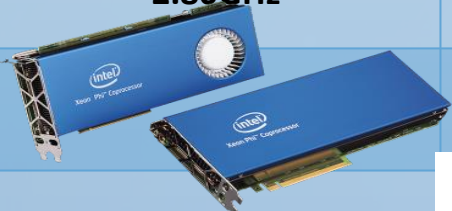
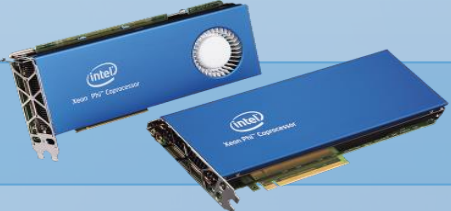
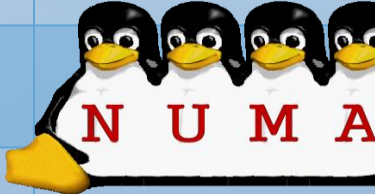




HPC Infrastructure

Location	 Budapest	 Szeged	 Debrecen	 Pécs
Type	HP CP4000BL	HP CP4000BL	SGI ICE8400EX	SGI UV 1000
CPU / node	2	4	2	192
Core / CPU	12	12	6	6
Memory / node	66 GB	132 GB	47 GB	6 TB
Memory / core	2.6 GB	2.6 GB	2.6 GB	5 GB
CPU	AMD Opteron 6174 @ 2.2GHz	AMD Opteron 6174 @ 2.2GHz	Intel Xeon X5680 @ 3.33 GHz	Intel Xeon X7542 @ 2.66 GHz
GPU	-	2 * 6 Nvidia M2070	-	-
Intel Xeon Phi	-		-	
Linpack performance (Rmax)	5 Tflops	20 Tflops	18 Tlops	10 Tflops
Compute nodes	32	50	128	1
Dedicated storage	50 TB	250 TB	500 TB	500 TB
IC	IB QDR	IB QDR	IB QDR	Numalink 5


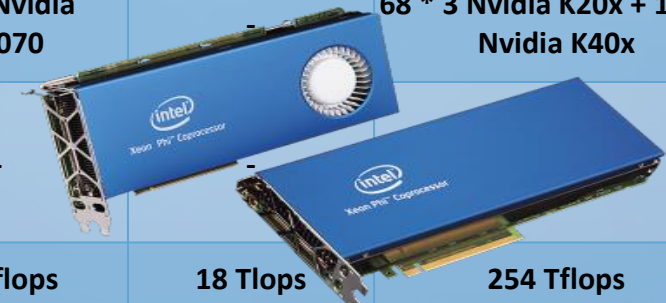
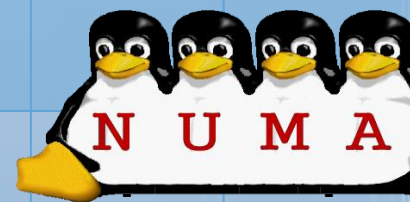


HPC Infrastructure

Location	Budapest2		LEO (DB2)		Apollo (DB3)		Miskolc
Type		HP SL250s		HP SL250s		HP Apollo 8000	 SGI UV 2000
CPU / node		2		2		2	44
Core / CPU		10		8		8	8
Memory / node		63 GB		125 GB		128 GB	1.4 TB
Memory / core		3 GB		7.5 GB		8 GB	4 GB
CPU		Intel Xeon E5-2680 v2 @ 2.80GHz		Intel Xeon E5-2650 v2 @ 2.60GHz		Intel Xeon E5-2670	Intel Xeon E5-4627 v2 @ 3.33 GHz
GPU				68 * 3 Nvidia K20x + 16 * 3 Nvidia K40x			
Intel Xeon Phi		14 * 2 * Intel(R) Xeon Phi(TM) MIC SE10/7120				45 * 2 * Intel(R) Xeon Phi(TM) MIC SE10/7120	-
Linpack performance (Rmax)		27 Tflops		254 Tflops		106 Tflops	8 Tflops
Compute nodes		14		84		45	1
Dedicated storage		500 TB		585 TB		585 TB	240 TB
IC		IB FDR		IB FDR		IB FDR	Numalink 6



HPC Infrastructure

Location	Budapest	Budapest2	Szeged	Debrecen	LEO (GPU)	Apollo (Phi)	Pécs	Miskolc
Type	HP CP4000BL	HP SL250s	HP CP4000BL	SGI ICE8400EX	HP SL250s	HP Apollo 8000	SGI UV 1000	SGI UV 2000
CPU / node	2	2	4	2	2	2	192	44
Core / CPU	12	10	12	6	8	8	6	8
Memory / node	66 GB	63 GB	132 GB	47 GB	125 GB	128 GB	6 TB	1.4 TB
Memory / core	2.6 GB	3 GB	2.6 GB	2.6 GB	7.5 GB	8 GB	5 GB	4 GB
CPU	AMD Opteron 6174 @ 2.2GHz	Intel Xeon E5-2680 v2 @ 2.80GHz	AMD Opteron 6174 @ 2.2GHz	Intel Xeon X5680 @ 3.33 GHz	Intel Xeon E5-2650 v2 @ 2.60GHz	Intel Xeon E5-2670	Intel Xeon X7542 @ 2.66 GHz	Intel Xeon E5-4627 v2 @ 3.33 GHz
GPU			2 * 6 Nvidia M2070			68 * 3 Nvidia K20x + 16 * 3 Nvidia K40x		
Intel Xeon Phi	-	14 * 2 * Intel(R) Xeon Phi(TM) MIC SE10/7120	-	-	-	45 * 2 * Intel(R) Xeon Phi(TM) MIC SE10/7120	-	-
Linpack performance (Rmax)	5 Tflops	27 Tflops	20 Tflops	18 Tlops	254 Tflops	106 Tflops	10 Tflops	8 Tflops
Compute nodes	32	14	50	128	84	45	1	1
Dedicated storage	50 TB	500 TB	250 TB	500 TB	585 TB (with Phi)	585 TB (with GPU)	500 TB	240 TB
IC	IB QDR	IB FDR	IB QDR	IB QDR	IB FDR	IB FDR	Numalink 5	Numalink 6

NIIF SUPERCOMPUTING SERVICES

High utilization

~250 user projects

Application areas:

- chemistry, physics, biology, astrophysics, geology, information technology, mathematics, geophysics, engineering, hydrology, medical research, life sciences, meteorology, agro sciences, economics, etc.

NIIF HPC SERVICES

Aggregated computing capacity: ~ 448 Tflop/s

Dedicated Nx10Gbps optical interconnection between the locations

NIIF storage service: 14 PBytes

Commercial application licenses (Matlab, Gaussian, Maple, Intel, PGI, SGI Suite)

User support

PRACE integration

Access to the resources

Open only for the NIIF community members (5000 organizations!)

Entirely dedicated to research and education

Only for non-commercial usage

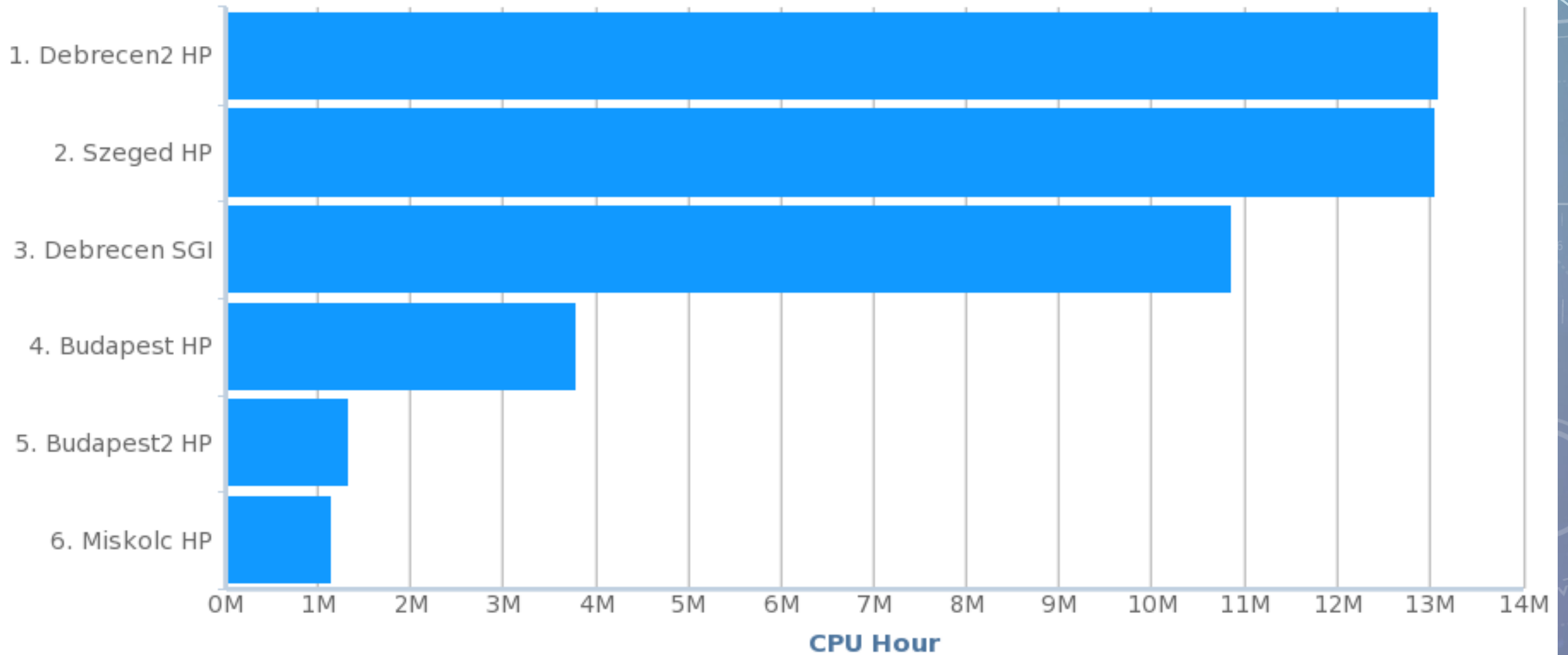
Free of charge

Preliminary review of the subscriptions (project proposals)

Users must report periodically

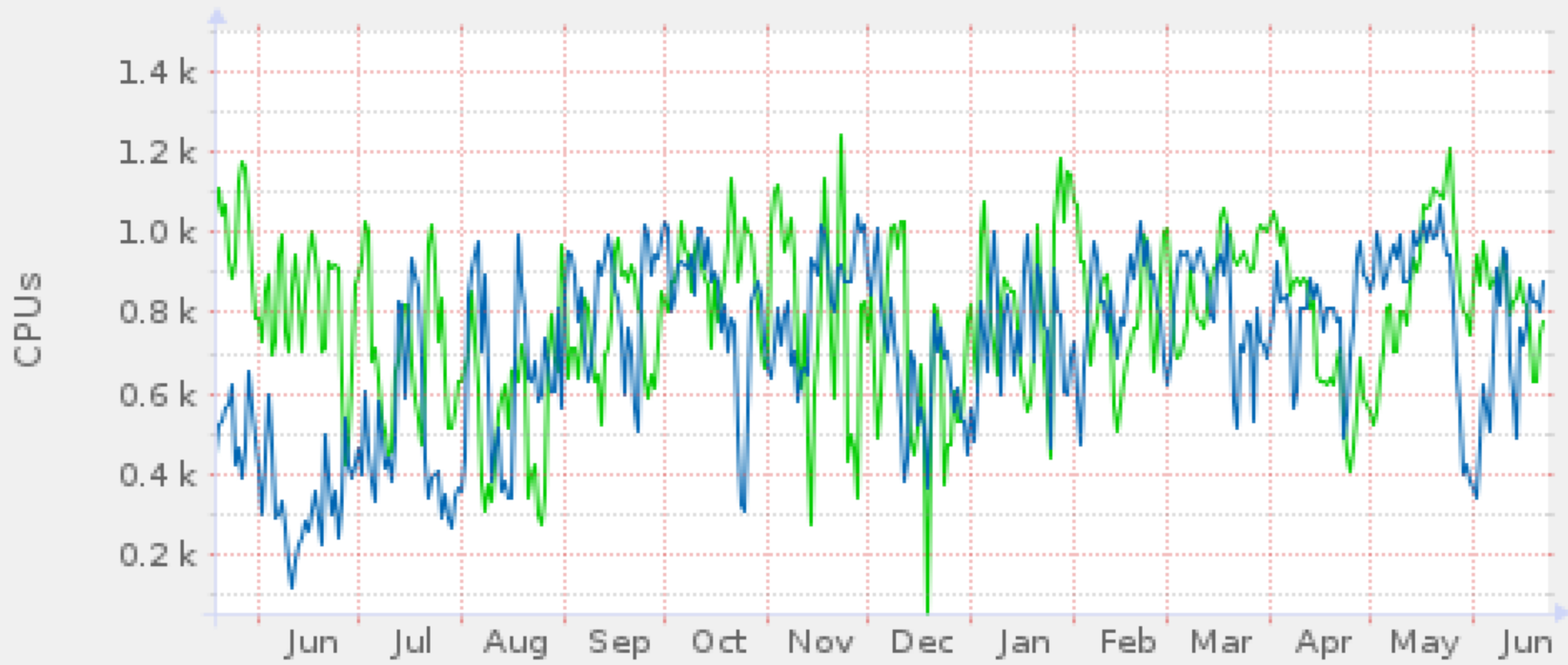
1 Year CPUh usage

CPU Hours: Total: by Resource



CPU Hours: Total

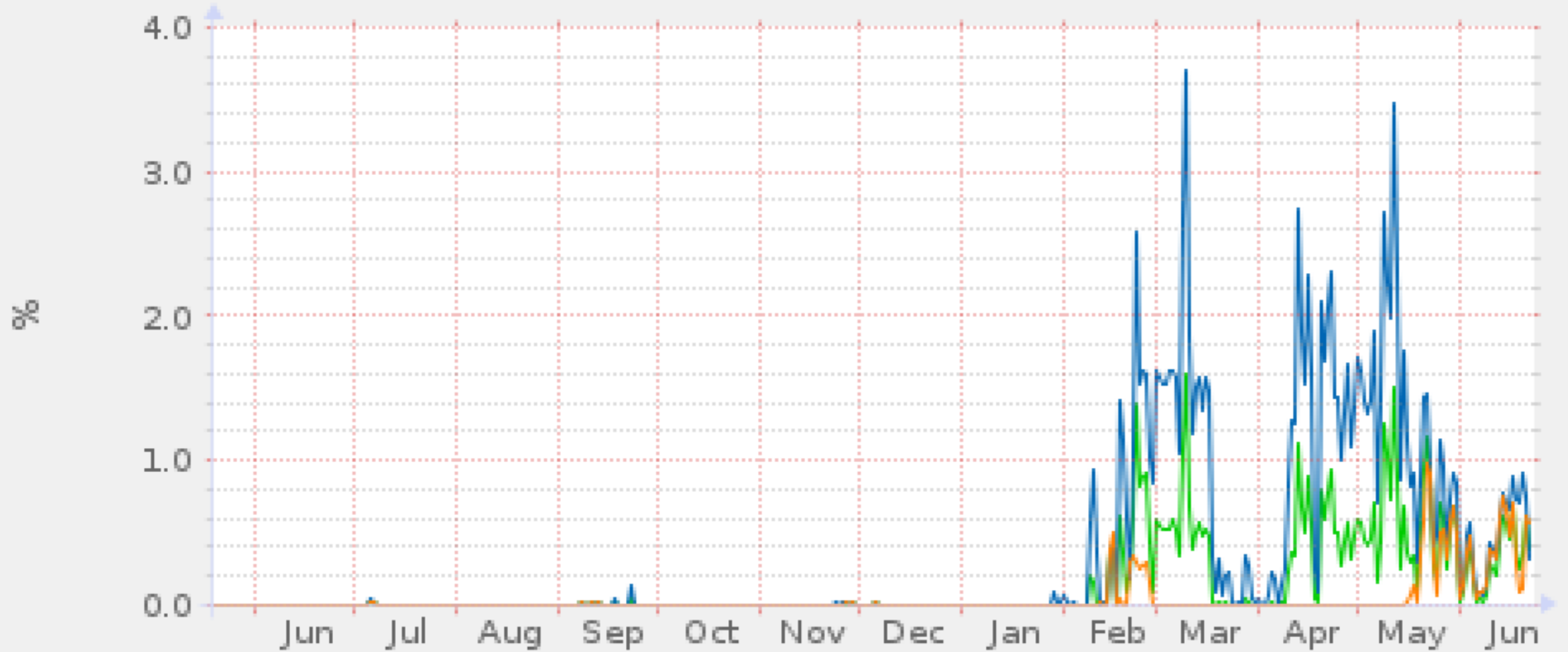
CPUs in use in slurm queue - by year



	Cur:	Min:	Avg:	Max:
■ Leo CPUs	778.14	0.00	789.57	1.29k
■ Apollo CPUs	880.67	0.00	714.50	1.08k
Last update: Thu Jun 22 12:45:21 2017				



Intel Phi card usage - by year



	Cur:	Min:	Avg:	Max:
■ Total_avg	394.50m	0.00	136.76m	3.00
■ First_card	310.20m	0.00	327.18m	6.73
■ Second_card	563.74m	0.00	43.10m	3.80

Last update: Thu Jun 22 12:50:59 2017

GPU usage based on Reports

- 25% of project reportedly using GPUs
- 56% is willing to use in the future
- 28% wants GPU resources to be developed

Examples of scientific work:

Efficient Correlation-Free Many-States Lattice Monte Carlo on GPUs (**GTC 2017**)

Dynamical formation signatures of **black hole binaries** in the first detected mergers by LIGO

Automatic Whistler Detector and Analyzer system: Implementation of the analyzer algorithm (**plasma sphere monitoring network**)

Critical dynamics on a large human Open Connectome network (**human brain research**)

New Fold-A Homology Based Model for the ABCG2/BCRP Multidrug Transporter (**cancer, stem cells**)

Ensemble docking-based virtual screening yields novel spirocyclic JAK1 inhibitors (**cancer, etc**)



Kormányzati
Informatikai
Fejlesztési
Ügynökség

HPC Portal



Bejelentkezve: Dr. Próba István (kilépés)

Saját adatok

Hírek

Projektek

Szolgáltatások
állapota

Hibabejelentés

Grid Portal

HPC Wiki

probaprojekt

nanographene

fluorinfra

Projekt információk

Teljes név: HPC Portal Próba projekt 01
Projekt azonosító: probaprojekt
Adminisztrátor felhasználók: Dr. Próba István
CPU idő havi kvóta: 850 cpuh
Felhasznált CPU idő: 235 cpuh

Havi kvóta:

budapesti szupergép 01: 21.46%

debreceni szupergép 01: 60.32%

pécsi szupergép: 95.17%

szegedi szupergép: 13.81%

Általános leírás:

Tanulmányunkban az önerősítéses polipropilén kompozit (SRPPC) lemezek ultrahangos hegesztéssel előállított átlapoló kötéselt vizsgáltuk, alapul véve a kompozit lemezek tulajdonságait...

CPU idő igénylés

Projekt lezárás

Felhasználók

Felhasználó név	Login név	Felhasznált CPU idő	Státusz
Dr. Próba István*	pp01-drproba	82 cpuh	admin
Teszt Tamás	pp01-teszt	20 cpuh	aktív
Dr. Dolgos Dénes	pp01-drdenes	60 cpuh	passzív
Munka Miklós	pp01-munkam	12 cpuh	aktív

mintamarta@inviteduser.com

meghívó küldve: 2014.07.02 (2)



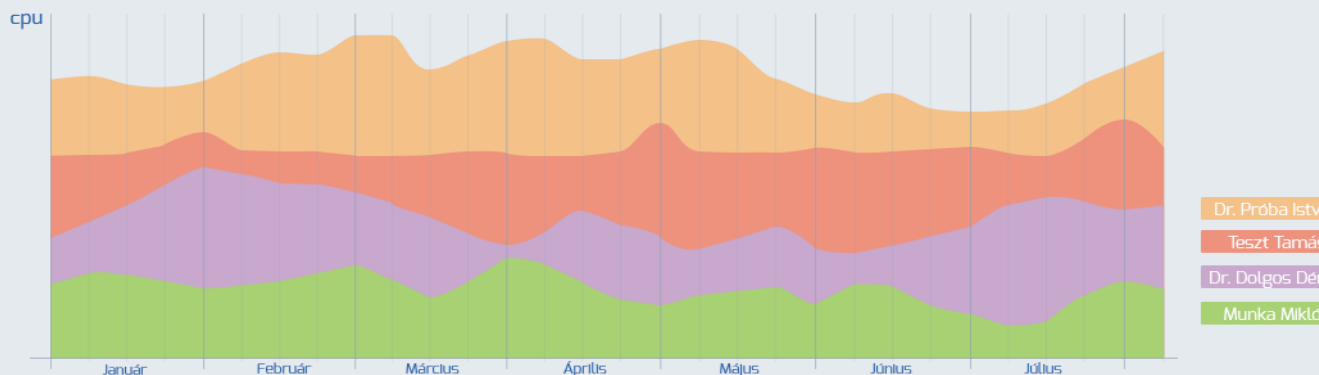
segitosandor@meghivott.hu

meghívó küldve: 2014.06.19 (1)

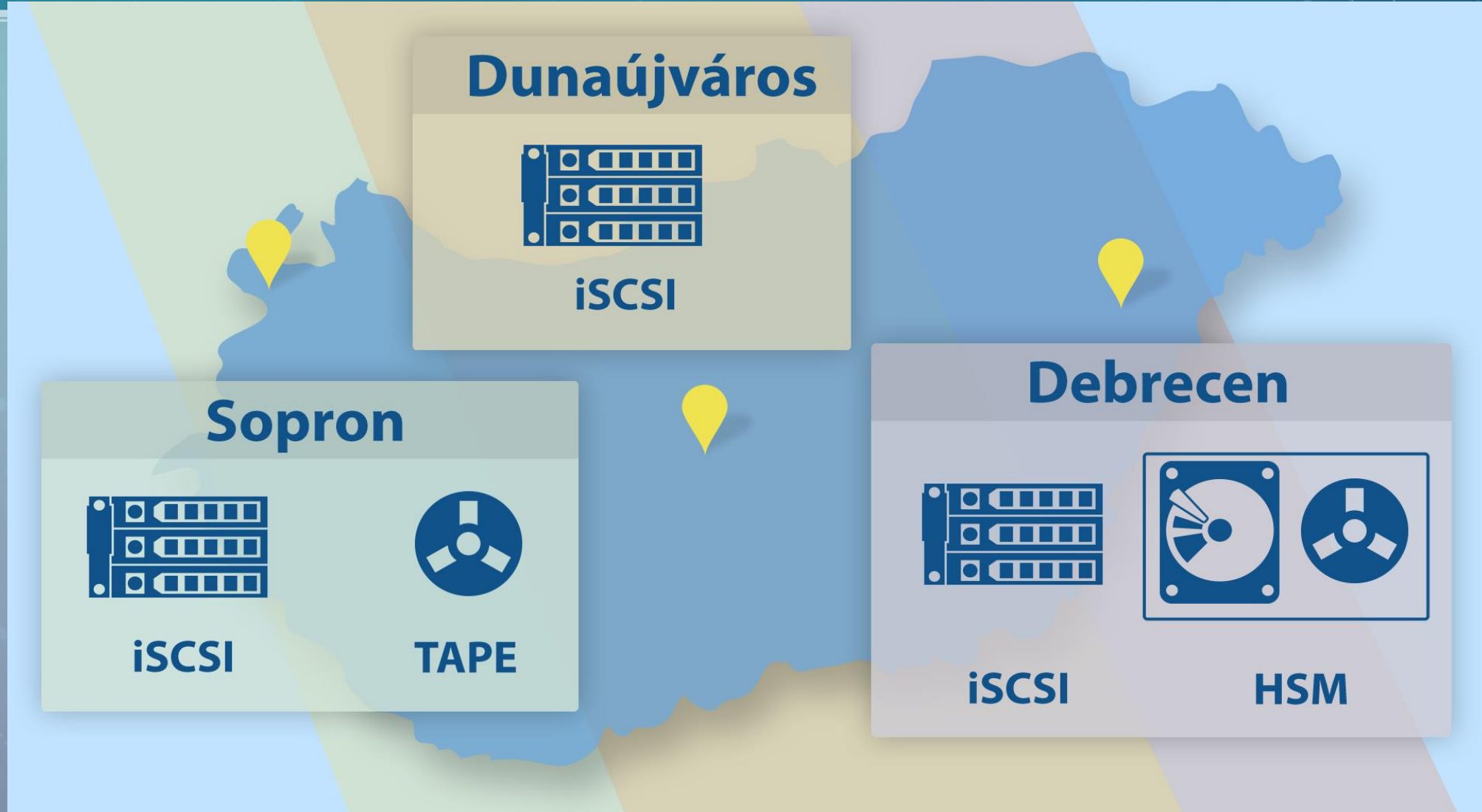


Meghívó küldése

Statisztikai adatok



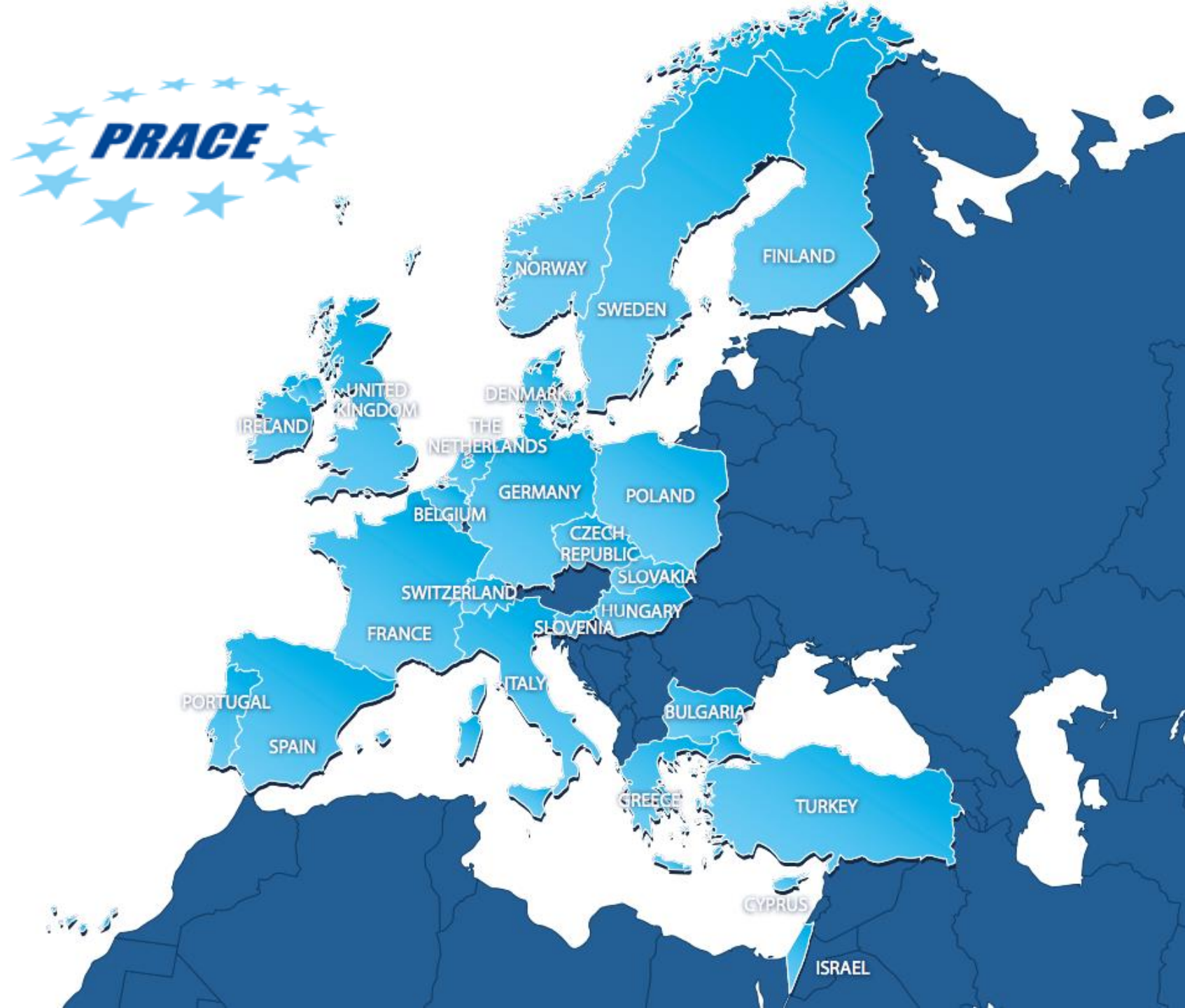
Storage ~ 14Pbyte





Kormányzati
Informatikai
Fejlesztési
Ügynökség

- 25 member
- 6 Tier-0 sites
- Including Top 3 (Piz Daint)



PRACE

- European HPC cooperation
- A whole ecosystem of HPC resources and services, including education and training
- PRACE research projects (1IP, 2IP, 3IP, 4IP, 5IP)
- Hierarchical infrastructure
- World class resources
- 6 Tier-0 centres, and 23 Tier-1 centres

HPC Training

- PATC
- Seasonal Schools
- Workshops
- Conferences

International HPC
Summer School

HPC Class



SHOOTING
STARS
PLAY THE GAME

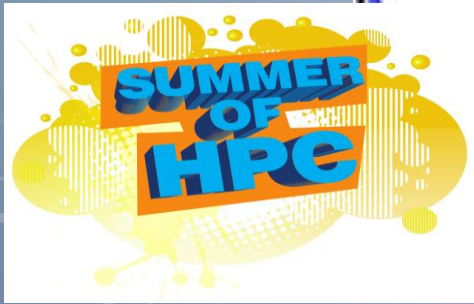
DARE TO THINK
THE IMPOSSIBLE.

Knowledge
Base

Optimalisation +
Enabling

Training
Portal

MooC



ELI: 'The CERN of laser research'

- Pillars: SZEGED, ~Bukarest, ~Prága

Preparation for joint operation

- Joint operation of 3 pillars
- Interaction with e-Infras:
 - **GÉANT (KIFÜ is member + offering resources)**
 - **PRACE (KIFÜ is member +representing +resources)**
 - EGI (KIFÜ is member)
 - EUDAT (collaborating)



4 HPC projects are already running

- Laser-plasma interactions
- Ultrafast electronic processes in two-dimensional materials
- Simulation of laser electron acceleration with lasers
- Monte Carlo simulations with Geant4

‘We could allocate whole LEO with PIC applications’





HPC.NIIF.HU



Hozzáférés az erőforrásokhoz

A hozzáférés alapja egy **regisztrációs űrlap**, amelynek során a kutatócsoport egy projekttel pályázik erőforrásra. A pályázat során megadja a szükséges erőforrásokat és a HPC projekt céljait, időtartamát.

A beküldött pályázat pozitív értékelése után a projektet a rendszer létrehozza, annak beállításait elérhetővé teszi a **HPC portál** felületén. A belépéshez **EduID azonosító** szükséges.

Itt lehetséges felhasználókat hozzáadni a projekthez, hogy számításokat indíthassanak a szuperszámítógépen.

A felhasználók ezután a portálra belépve megadhatják a HPC hozzáféréshez szükséges kulcsukat, amely automatikusan frissül a szuperszámítógépeken.

Az utolsó lépés az erőforrás igénylés a számításoknak leginkább megfelelő rendszeren. Ez a folyamat a portálon keresztül kényelmesen elindítható, követhető.

Tudásbázis

HPC Wiki

HPC Wiki: Részletes HPC adatok, használata.



HPC media

Videotorium csatorna:

oktató és bemutató videók a gépekről és a hozzáférésről, online szuperszámítógépes kurzusok.



VIDEOTORIUM

HPC bemutató



A Novum 2015. Szeptember 19-i ismeretterjesztő adása a szuperszámítógépekről

eduID

Projekt igénylés (Igénylő)

Bírálat, elfogadás (NIIFI)

HPC user meghívása (Igénylő)

Kulcs megadása (HPC user)



KIFÜ

Kormányzati
Informatikai
Fejlesztési
Ügynökség



NIIFI HPC team

hpc-support@niif.hu

Thank You!

Zoltán Kiss

kiss.zoltan@niif.hu



Nemzeti Információs
Infrastruktúra Fejlesztési Program