

IT4Innovations centrum excellence

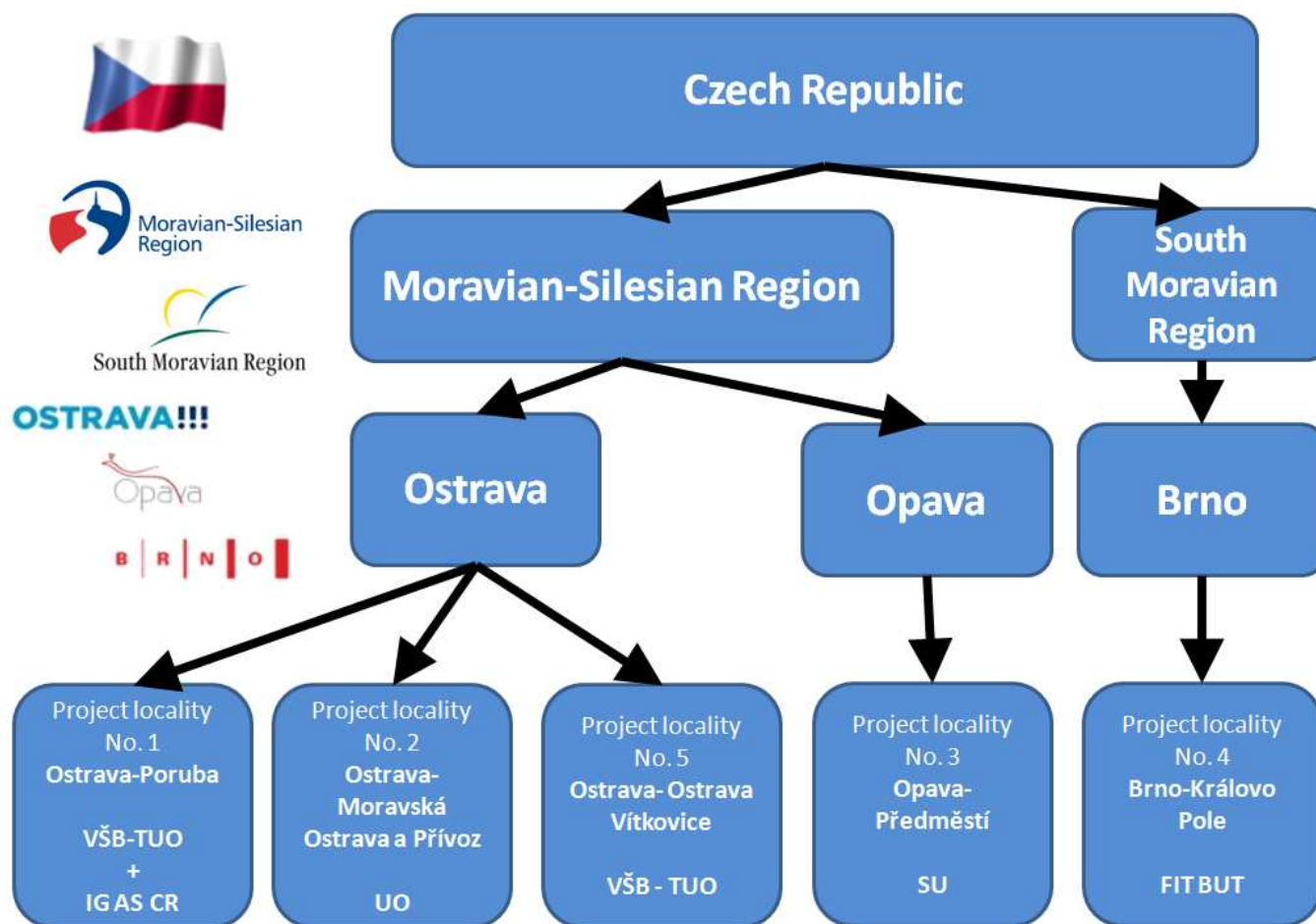
Vít Vondrák & Filip Staněk
VŠB-Technická univerzita v Ostravě

Základní informace o projektu

- Projekt se připravuje od roku 2008
- Projekt byl předložen MŠMT v listopadu 2009
- Financování z Evropských strukturálních fondů
- Projekt byl schválen na národní úrovni a v říjnu 2010 bude předložen ke schválení EK
- **Superpočítačové centrum + výzkumné programy + další výzkumné zařízení**

Partneři projektu

IT4Innovations project localities – global scheme

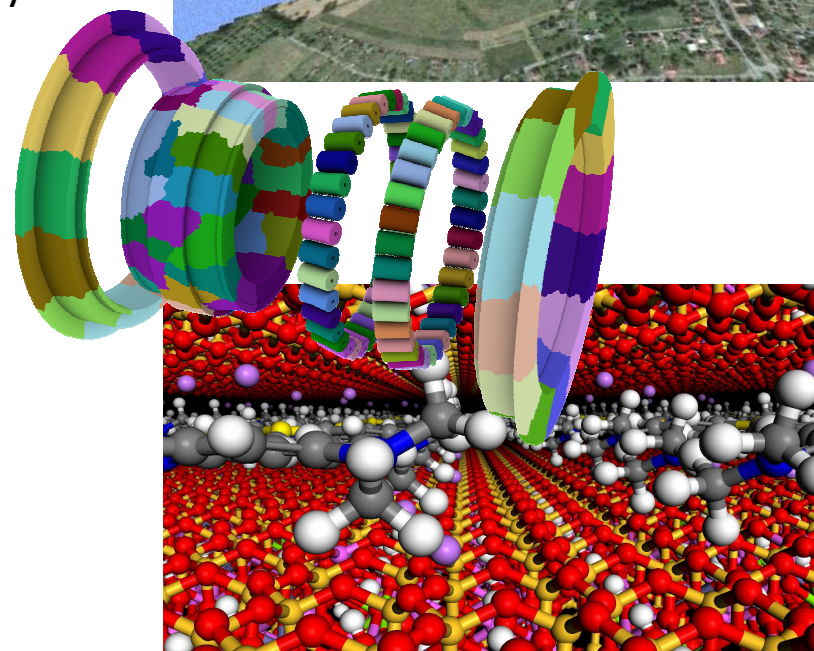


Výzkumný kontext



Současné aktivity v HPC

- Krizové řízení
 - Modelování povodní a znečištění
 - Monitorování a simulace dopravy
- Výpočetní matematika a mechanika
 - Rozsáhlé nelineární konečněprvkové modely
 - Multiškálové a multifyzikální problémy
 - Úlohy optimálního návrhu
 - Modelování neurčitostí
- Výpočetní fyzika a chemie
 - Vývoj nových farmaceutických forem
 - Nanokompozity a nanovlákná
 - Molekulární dynamika
- Výpočetní úlohy v informatice
 - Information retrieval
 - Rozpoznávání multimediálních informací
 - Znalostní báze



Služby v oblasti poskytování výpočetních prostředků

- Správa uživatelů a poskytování prostředků superpočítačového centra
- Instalace a základní provoz vybraných softwarových balíčků
- Zajištění grantové soutěže pro přidělování prostředků superpočítačového centra a přístup k dalším superpočítačovým prostředkům

PRACE & IT4I

- PRACE = Partnership for Advanced Computing in Europe
 - 20 členských zemí
- IT4Innovations = Kontaktní místo PRACE v ČR
 - Přístup k superpočítačovým centřům EU

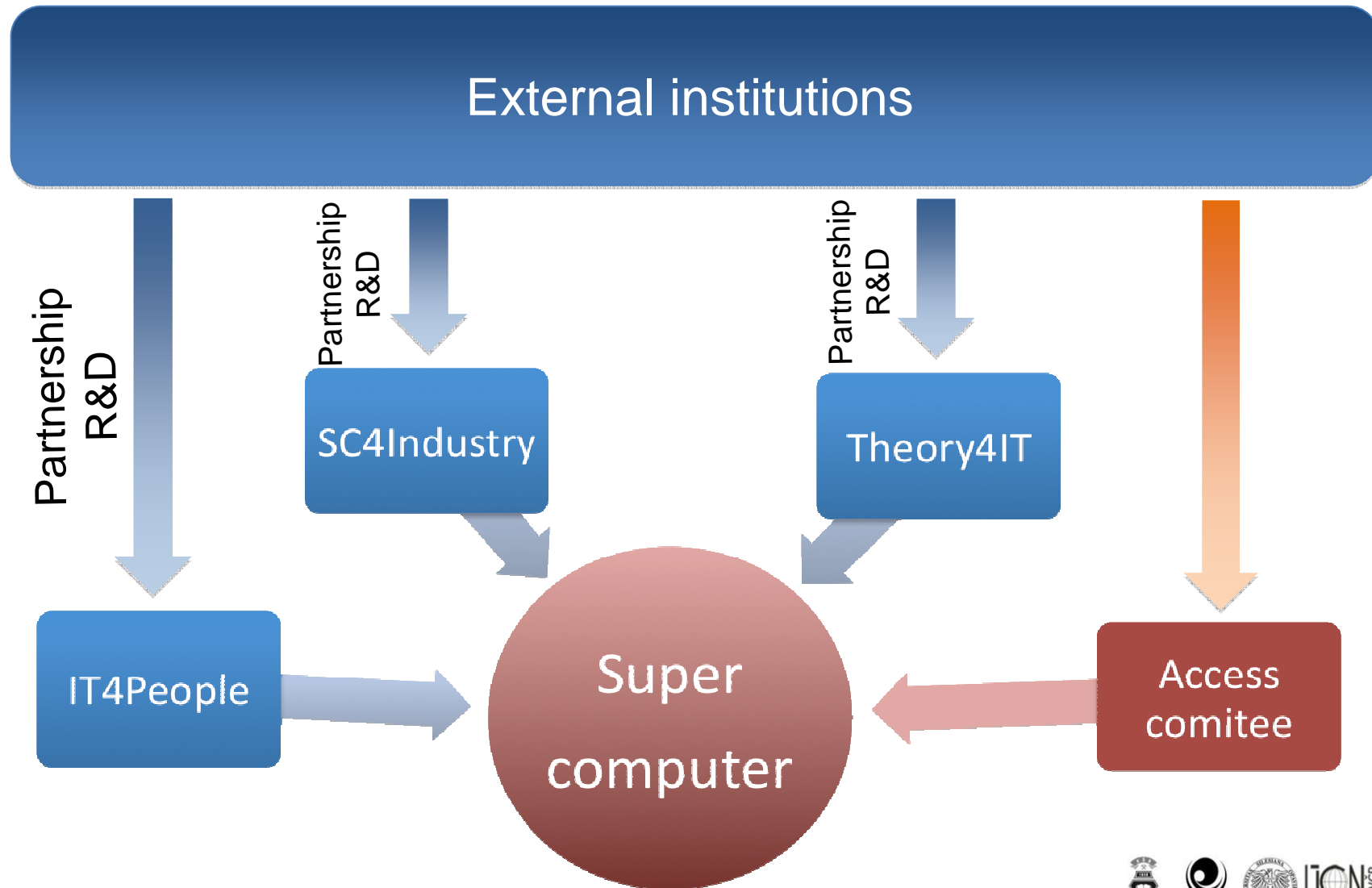


Poradenské a vzdělávací služby v oblasti supercomputingu

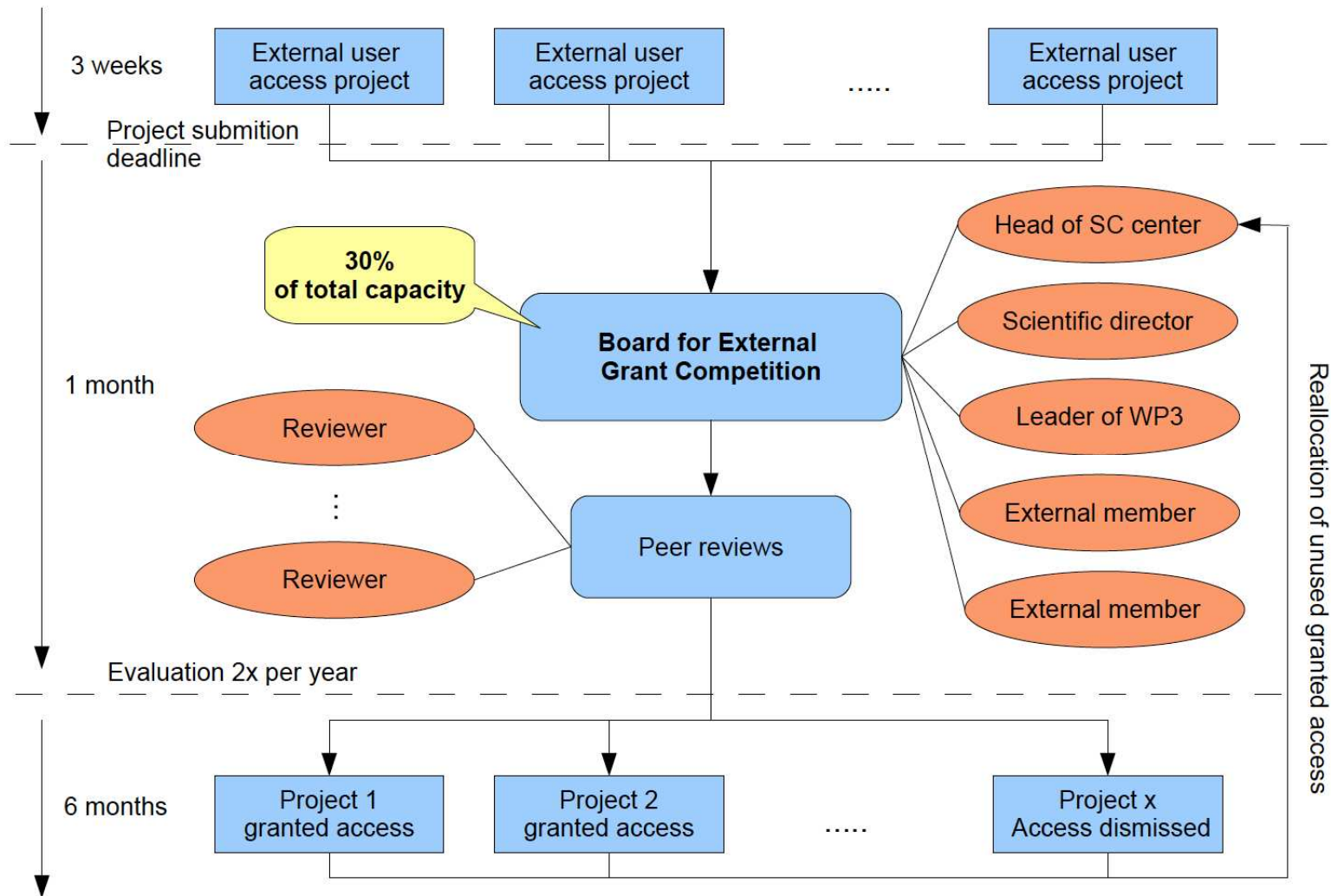
- Poradenství v oblasti využívání prostředků superpočítačového centra
- Poradenství v oblasti využívání softwarových balíčků provozovaných v superpočítačovém centru
- Vzdělávací kurzy a poradenství v oblasti vývoje aplikací pro superpočítače
- Vzdělávací kurzy a poradenství v oblasti optimalizace využití výpočetních prostředků pro řešení výpočetně náročných úloh

Navrhovaný byznys model

- Interní přístup pro vlastní výzkumné programy (50%)
 - Zahrnuje smluvní a projektový výzkum s externími institucemi
- Otevřený přístup pro externí instituce (30%)
- Rezervovaný přístup pro projekty národního významu (20%)



Přidělování výpočetních kapacit



Etapizace nákupů

Projekt je rozdělen do 2 velkých realizačních etap

ETAPA1 – rok 2012

- kontejnerové řešení, menší část IT/storage/network, systém Aladin + storage, pronájem

ETAPA2 – rok 2014

- nová budova + infrastruktura pro IT, většinová část IT/storage/network

Popis HW – Etapa 1

„malý cluster“

- arch. x86, 4096 jader, 4GB RAM / jádro, IB QDR (fat-tree topologie)

„GPU cluster“

- arch. x86, 800 jader CPU, 24000 jader GPU, 4 GB RAM / jádro, IB QDR

úložná kapacita

- cca. 1 PB storage (5/20/75 % kap. SAS/SATA/tape – HSM)

„systém ALADIN“

- arch. x86/Power, 26 TFLOP/S, 5 PB storage (5/20/75 %),
pravděpodobně SMP/NUMA

POD

Mobilní řešení
Datového centra

ISO kontejner
délka 12.2m, šířka
2.5m, výška 3m

PUE < 1.3



Popis HW – Etapa 2

„velký cluster“

- arch. x86, 32768 jader, 4GB RAM / jádro, IB QDR (fat-tree topologie)

„SMP/NUMA“

- arch. x86, 512 jader, alespoň 2TB RAM, dedikovaný scratch storage

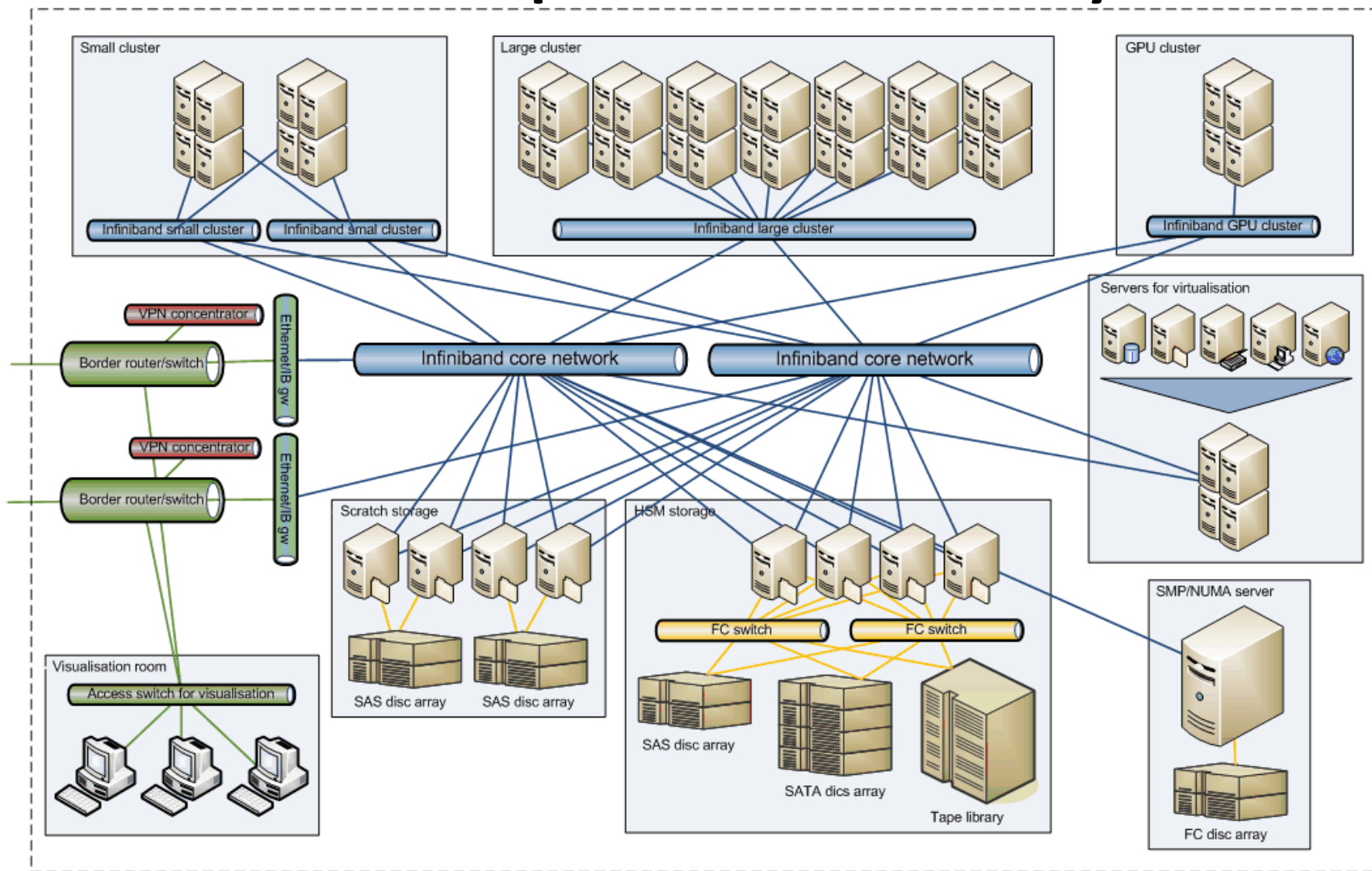
úložná kapacita

- cca. 2.4 PB storage (5/20/75 % kap. SAS/SATA/tape – HSM)

„vizualizační centrum“

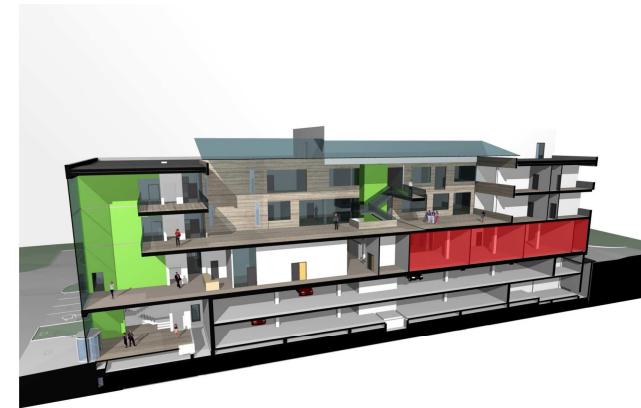
- arch. x86, cca. 10 graf. stanic s GPU, stereoskopická projekce, pre- a post- processing úloh

Konečná podoba architektury SC



Budova – DC parametry

- 450 m² pro servery a storage
 - 80 m² pro síťové prvky
- Projektovaná kapacita až 2.7 MW
 - 4x DRUPS – 950kVA/760kW
 - 500 litrů nádrž pro naftu
- PUE 1.34–1.5 (100-60% využití)
 - využití tzv. “freecooling-u” (294 kW)
 - chlazení vodou na úrovni racků
- N+1 redundance napájení i chlazení
- Vysoká úroveň zabezpečení přístupu
 - biometrika



Software vybavení

- **Vývojový software**
 - Kompilátory C/C++, Fortran, Java (GNU, Intel, PGI)
 - Knihovny LINPACK, LAPACK, MPI, PETSc, Trilinos, Elmer
 - Intel Cluster Toolkit, Totalview
 - Matlab & Simulink
- **CAD/CAM/CAE software**
 - ANSYS - CFX, Fluent, LS-DYNA
 - MSc. Software – Nastran, Patran, Adams, Marc
 - Pro/E, Catia, OrCAD
 - Comsol Multiphysics
- **Geologie, hydrologie, geoinformatika**
 - GRASS, ESRI (ARC-GIS)
 - DHI MIKE, HEC-HMS, HEC-RAS
 - MODFLOW, FEFLOW
- **Chemie, fyzika**
 - Materials Studio
 - Gaussian, MolPro
- **Software pro SPC**
 - Zálohovací software
 - Monitorovací software
 - Software pro správu
 - Plánovače

Spolupráce s CESNET & NGI

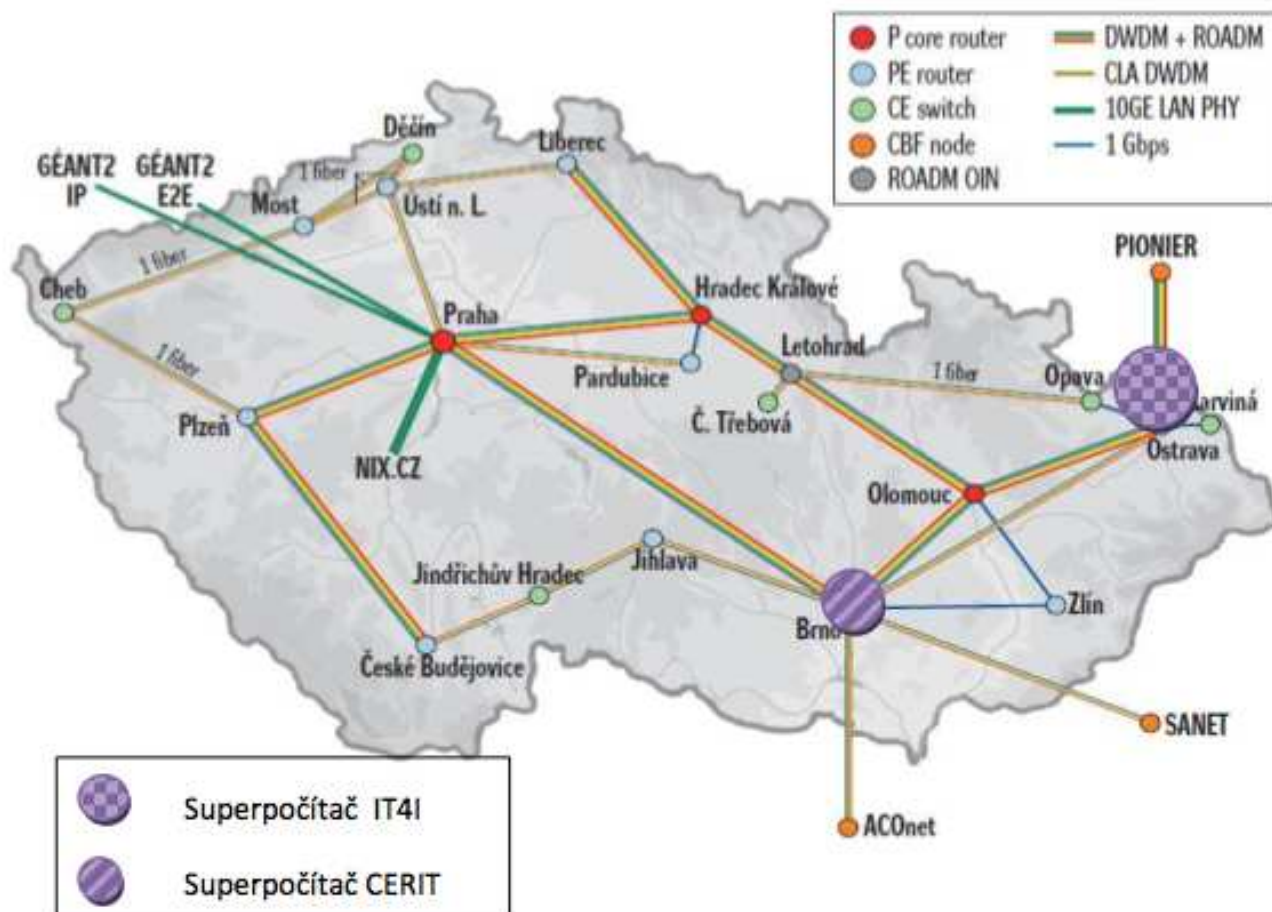
- V obou etapách je primárním poskytovatelem síťové konektivity CESNET:
- ETAPA1 – max. 2 linky 10 Gb/s
- ETAPA2 – více linek pravděpodobně již na 40/100 Gb/s technologii. Topologicky nezávislé až do budovy.
- Dlouhodobá archivace dat prostřednictvím NGI.
- Spolupráce na GRIDových iniciativách – vyčlenění části IT infrastruktury pro potřeby GRIDového počítání v ČR.



IT4Innovations

Centrum excellence

ESFRI roadmap





- www.it4innovations.eu
- www.it4i.eu
- www.it4innovations.cz
- www.it4i.cz