

# Využití HPC pro analýzu velkých dat a pro náročné výpočty

Inovace v ICT



**SLEZSKÁ  
UNIVERZITA**

OBCHODNĚ PODNIKATELSKÁ  
FAKULTA V KARVINĚ

**Ing. Kateřina Slaninová, Ph.D.**

# Obsah přednášky

---

- **Superpočítače**
- **Porovnání výkonnosti počítačů**
- **HPC a práce s velkými daty v Evropě**
  - EuroHPC JU
  - ETP4HPC
  - BDVA
  - PRACE
  - HiPEAC
- **Trendy využití HPC v Evropě a ve světě**
- **Velké výzkumné infrastruktury v ČR a HPC**
  - CESNET
  - CERIT-SC
  - IT4Innovations
- **IT4Innovations národní superpočítačové centrum**

---

# Superpočítače

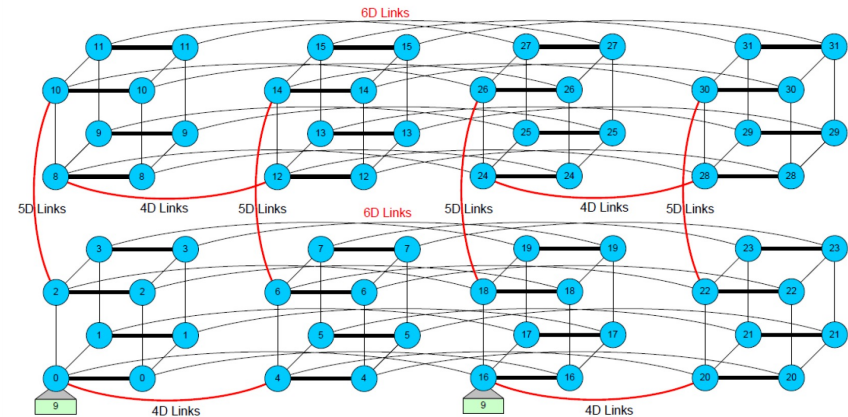
High performance computing (HPC), výpočetní výkon, paralelizace

# Superpočítače



- **Vysoce výkonné počítače, počítače určené pro řešení výpočetně náročných úloh**
- **Propojení více výpočetních uzlů**
- **Velmi rychlá komunikační síť (např. Infiniband, až 200 GB/s)**

**HPC = High Performance Computing**



# Paralelizace

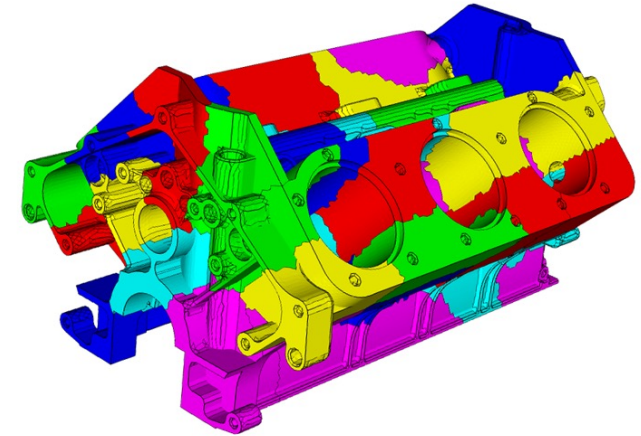
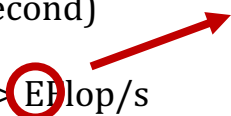
Návrh software nebo systému tak, aby fungoval paralelně.

- **Různé druhy paralelizace**

- Z pohledu algoritmu
  - Speciální úprava algoritmů
  - Řešení náročných úloh lze rozdělit na menší úlohy
- Z pohledu komunikace
  - Práce s velkými daty nebo náročné úlohy vyžadující komunikaci mezi výpočetními uzly
- Z pohledu množství zpracovaných dat
  - Sdílení dat mezi výpočetními uzly (rychlé propojení)

- **Výpočetní výkon**

- **Jednotka Flop/s** (Floating-point Operations Per Second)
  - počet operací v pohyblivé řádové čárce za sekundu
- Současný výkon superpočítačů v rozsahu PFlop/s -> **EFlop/s**



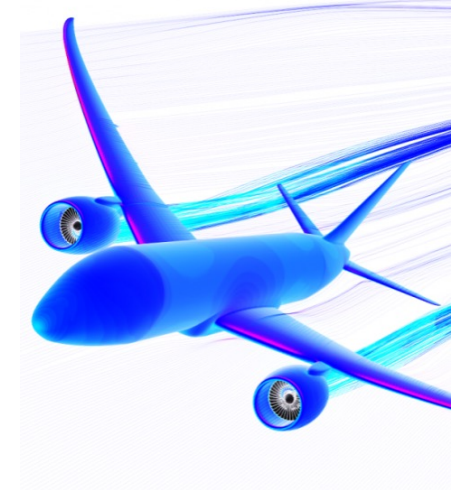
Prefix	Symbol	Násobek	Exponent
kilo	k	1 000	$10^3$
mega	M	1 000 000	$10^6$
giga	G	1 000 000 000	$10^9$
tera	T	1 000 000 000 000	$10^{12}$
peta	P	1 000 000 000 000 000	$10^{15}$
exa	E	1 000 000 000 000 000 000	$10^{18}$

# Paralelizace

Návrh software nebo systému tak, aby fungoval paralelně.

- **Různé druhy paralelizace**

- Z pohledu algoritmu
  - Speciální úprava algoritmů
  - Řešení náročných úloh lze rozdělit na menší úlohy
- Z pohledu komunikace
  - Práce s velkými daty nebo náročné úlohy vyžadující komunikaci mezi uzly
- Z pohledu množství zpracovaných dat
  - Sdílení dat mezi výpočetními uzly (rychlé propojení)

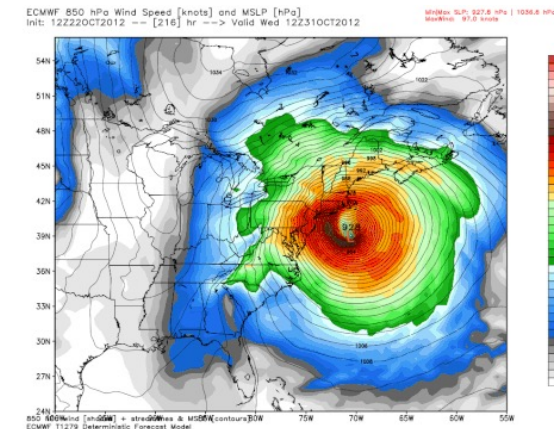


- **Výpočetní výkon**

- **Jednotka Flop/s** (Floating-point Operations Per Second)
  - počet operací v pohyblivé řádové čárce za sekundu
- Současný výkon superpočítačů v rozsahu PFlop/s -> EFlop/s

- **Příklady úloh:**

- Střednědobá a dlouhodobá předpověď počasí
- Bioinformatika, vývoj nových léčiv, analýza DNA sekvencí
- Matematické a fyzikální výpočty, materiálové inženýrství
- Simulace v různých odvětvích
- Digitální dvojčata (digital twins),
- Quantum computing, atd.



# Škálovatelnost - hardware

---

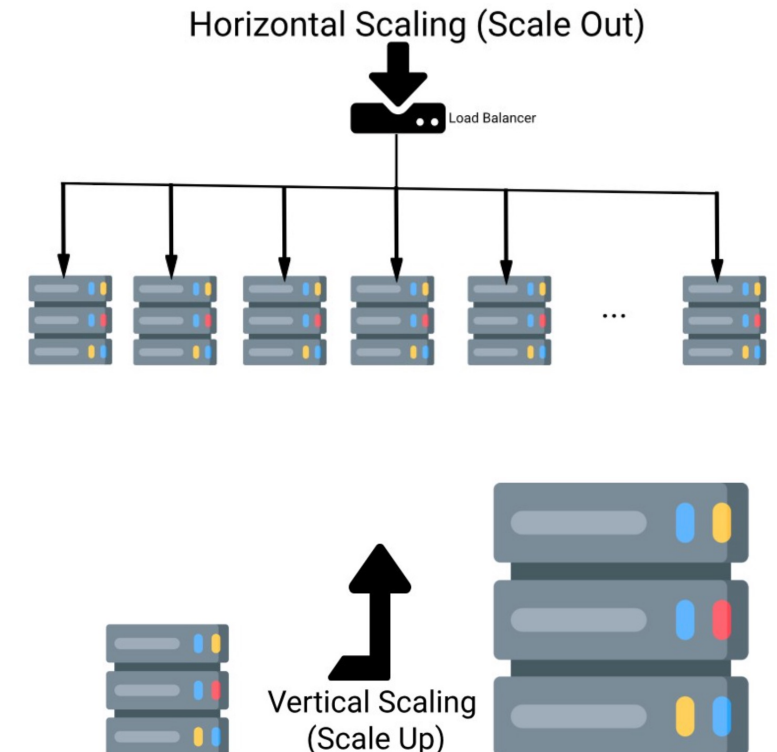
**Schopnost systému zvládnout rostoucí požadavky na výkon za zvýšeného zatížení (nebo klesající nároky na výkon systému).**

- **Horizontální škálování (scale out)**

- Zvýšení kapacity stávajícího HW, který funguje jako jeden logický celek
- Přidání dalších serverů, počítačů, výpočetních uzlů
- Není omezení z hlediska HW
- Např. nárůst uživatelů

- **Vertikální škálování (scale up)**

- Zvyšování výkonnosti serveru, počítače, výpočetního uzlu
- Např. přidání procesorů, paměti, disků, výkonnější grafické karty, atd.
- Většinou urgentní případy, kdy je potřeba rychle reagovat
- Omezení daná používaným HW



# Škálovatelnost - software

---

**Schopnost software přizpůsobit svou kapacitu a funkčnost na základě měnících se uživatelských požadavků (obvykle na výkon a zatížení).**

- Software reaguje pružně při změně zátěže (je alokováno větší/menší množství zdrojů)
- Obvykle dynamická alokace
- Důležitý návrh efektivního kódu s ohledem na škálovatelnost, údržbu, pružnost
- Výběr vhodného algoritmu (výkonnost, prostorová složitost)
- Lepší management paměti (garbage collection)
- Pečlivý výběr použitých knihoven (výkonnost)
- Asynchronní přístup, kde je to vhodné (vyřízení neurgentních požadavků na pozadí)
- Využívání bezstavových transakcí (vyhnout se sdílení dat mezi požadavky)
- Efektivní správa lokálních souborů – využívat na to vhodné prostředky (speciální úložiště k tomu určená)
- Přesun některých server-side sessions na stranu klienta (cookies)
- Umístění aplikací a dat potřebných pro zpracování z pohledu heterogenních systémů (efektivnější komunikace)
- Vertikální vs. horizontální škálovatelnost (přidání HW)
- No SQL databáze (InfluxDB, HDF5 a další)
- Využívání cache, data pre-fetching (memoization, burst buffers atd.)



# HPC a Cloud

---

## Cloud computing

- Dříve typické Horizontální škálování
- Dynamické přizpůsobení výpočetních zdrojů podle požadavků zákazníka (např. Kubernetes)
- Typické úlohy, kdy jednu úlohu je možné rozdělit na mnoho menších úloh
- Embarasingly parallel problems (snadno paralelizovatelné problémy, téměř žádná závislost nebo nutnost komunikace mezi paralelními úlohami nebo výsledky)

## HPC

- Dříve typické Vertikální škálování
- Extrémně velké výpočty, paralelizace řešených problémů
- Typické sdílení dat mezi výpočetními uzly
- Speciální architektury, velmi rychlé propojení mezi výpočetními uzly (Infiniband)

**Propojování HPC a Cloudu**

## Vývoj specializovaného SW umožňujícího snadnější přístup k HPC infrastruktuře

- **HPC in a Cloud** (AWS, Google Cloud, Microsoft Azure, IBM Spectrum Computing, a další)
- **HPC as a Service** (Atos, Cray, IT4I a další)

---

# Porovnávání výkonnosti superpočítačů

Srovnávací testy, žebříčky

# Porovnávání výkonnosti počítačů

---

- **Srovnávací testy (benchmarks)**

- Testy s dobře popsanou dokumentací tak, aby byly zopakovatelné s porovnatelnými výsledky
- Dokumentace obsahuje také podmínky nebo pravidla pro spouštění testů a pro záznam výsledků
  - čas trvání testu
  - konfigurace systému
  - verze použitých knihoven
  - počet výpočetních jader
  - topologie sítě, atd.
- I když bývají specifické, jsou obvykle používány pro vyvození obecných závěrů k chování systému

- **Metodiky pro srovnávání výkonnosti počítačů**

- Mezinárodní žebříčky pro srovnávání, pravidelná aktualizace (např. TOP500)
- Účast v žebříčkách nepovinná, přesto však prestižní



# Porovnávání výkonnosti počítačů – TOP500



- **Neznámější metodika pro měření výkonnosti počítačů (od roku 1993)**
- <https://www.top500.org>
- **Výsledky 2x ročně zveřejňovány na předních světových konferencích zaměřených na superpočítače**
  - Červen: ISC High Performance (Německo) - <https://www.isc-hpc.com>
  - Listopad: Supercomputing, SC (USA) - <https://supercomputing.org>
- **LINPACK Benchmark** (High Performance Linpack, HPL Benchmark)
  - Neřeší celkovou výkonnost daného systému, ale řeší často se vyskytující typ problému, a to vyřešení hustého systému lineárních rovnic
  - Algoritmus veřejně dostupný, je možné jej optimalizovat přímo na daný typ výpočetní infrastruktury
- **Země s nejvýkonnějšími počítači:**
  - Japonsko
  - USA
  - Čína
  - Evropa -> Německo , LUMI

Zdroj: LINPACK Benchmark. <https://www.top500.org/project/linpack/>

# Porovnávání výkonnosti počítačů – TOP500 - svět



Listopad 2021

Rank	System	Cores	Rmax (TFlop/s)	Rpeak (TFlop/s)	Power (kW)
1	<b>Supercomputer Fugaku</b> - Supercomputer Fugaku, A64FX 48C 2.2GHz, Tofu interconnect D, Fujitsu RIKEN Center for Computational Science Japan	7,630,848	442,010.0	537,212.0	29,899
2	<b>Summit</b> - IBM Power System AC922, IBM POWER9 22C 3.07GHz, NVIDIA Volta GV100, Dual-rail Mellanox EDR Infiniband, IBM DOE/SC/Oak Ridge National Laboratory United States	2,414,592	148,600.0	200,794.9	10,096
3	<b>Sierra</b> - IBM Power System AC922, IBM POWER9 22C 3.1GHz, NVIDIA Volta GV100, Dual-rail Mellanox EDR Infiniband, IBM / NVIDIA / Mellanox DOE/NNSA/LLNL United States	1,572,480	94,640.0	125,712.0	7,438
4	<b>Sunway TaihuLight</b> - Sunway MPP, Sunway SW26010 260C 1.45GHz, Sunway, NRCPC National Supercomputing Center in Wuxi China	10,649,600	93,014.6	125,435.9	15,371
5	<b>Perlmutter</b> - HPE Cray EX235n, AMD EPYC 7763 64C 2.45GHz, NVIDIA A100 SXM4 40 GB, Slingshot-10, HPE DOE/SC/LBNL/NERSC United States	761,856	70,870.0	93,750.0	2,589

Zdroj: <https://www.top500.org/lists/top500/2021/11/>

# Porovnávání výkonnosti počítačů – TOP500 - Evropa



Listopad 2021

Rank	System	Cores	Rmax (TFlop/s)	Rpeak (TFlop/s)	Power (kW)
8	<b>JUWELS Booster Module</b> - Bull Sequana XH2000 , AMD EPYC 7402 24C 2.8GHz, NVIDIA A100, Mellanox HDR InfiniBand/ParTec ParaStation ClusterSuite, Atos Forschungszentrum Juelich (FZJ) Germany	449,280	44,120.0	70,980.0	1,764
9	<b>HPC5</b> - PowerEdge C4140, Xeon Gold 6252 24C 2.1GHz, NVIDIA Tesla V100, Mellanox HDR Infiniband, DELL EMC Eni S.p.A. Italy	669,760	35,450.0	51,720.8	2,252
14	<b>CEA-HF</b> - BullSequana XH2000, AMD EPYC 7763 64C 2.45GHz, Atos BXI V2, Atos Commissariat a l'Energie Atomique (CEA) France	810,240	23,237.6	31,761.4	4,959
18	<b>Marconi-100</b> - IBM Power System AC922, IBM POWER9 16C 3GHz, Nvidia Volta V100, Dual-rail Mellanox EDR Infiniband, IBM CINECA Italy	347,776	21,640.0	29,354.0	1,476

Zdroj: <https://www.top500.org/lists/top500/2021/11/>

# Porovnávání výkonnosti počítačů – Graph500

---



- Srovnání více zaměřeno na datovou zátěž a komplexní datové problémy
- Od roku 2011
- Aktualizován 2x ročně
- Benchmark postaven na grafových algoritmech a prohledávání do šířky
  - Breadth-First Search (BFS)
  - Single Source Shortest Paths (SSSP)
- **Hlavní metrika: Gtep/s** (počet hran zpracovaných za sekundu)
- **Green Graph500** (výkonnost vzhledem ke spotřebě)
- <https://graph500.org>

# Porovnávání výkonnosti počítačů – Graph500 - BFS



RANK	PREVIOUS RANK	MACHINE	VENDOR	TYPE	NETWORK	INSTALLATION SITE	LOCATION	COUNTRY	YEAR
1	1	Supercomputer Fugaku	Fujitsu	Fujitsu A64FX	Tofu Interconnect D	RIKEN Center for Computational Science (R-CCS)	Kobe Hyogo	Japan	2020
2	2	Sunway TaihuLight	NRCPC	Sunway MPP	Sunway	National Supercomputing Center in Wuxi	Wuxi	China	2015
3	3	Wisteria/BDEC-01 (Odyssey)	Fujitsu	PRIMEHPC FX1000	Tofu interconnect D	Information Technology Center The University of Tokyo	Kashiwa Chiba	Japan	2021
4	4	TOKI-SORA	Fujitsu	PRIMEHPC FX1000	Tofu interconnect D	Japan Aerospace eXploration Agency (JAXA)	Tokyo	Japan	2020
5	new	LUMI-C	HPE	HPE Cray EX	HPE Slingshot-10	EuroHPC/CSC	Kajaani	Finland	2021
6	5	OLCF Summit (CPU-Only)	IBM	IBM POWER9		Oak Ridge National Laboratory	Oak Ridge TN	United States	2018

Zdroj: [http://graph500.org/?page\\_id=1009](http://graph500.org/?page_id=1009)



# Porovnávání výkonnosti počítačů – Graph500 - SSSP



RANK	PREVIOUS RANK	MACHINE	VENDOR	TYPE	NETWORK	INSTALLATION SITE	LOCATION	COUNTRY	YEAR
1	1	Tianhe Exascale Prototype Upgrade System	National University of Defense Technology	FT-2000V	TH Express-3	National Supercomputer Center in Tianjin	Tianjin	China	2021
2	2	SuperMUC-NG	Lenovo	ThinkSystem SD530 Xeon Platinum 8174 24C 3.1GHz Intel Omni-Path		Leibniz Rechenzentrum	Garching	Germany	2018
3	new	DepGraph	HUST && Nvidia	DepGraph (+GPU Tesla V100)	Custom	National Engineering Research Center for Big Data Technology and System Services Computing Technology and System Lab Cluster and Grid Computing Lab Huazhong University of Science and Technology	Wuhan	China	2020
4	new	Intel Xeon Gold 5117+NVIDIA Tesla V100	Intel && Nvidia	CPU Intel Xeon Gold 5117+GPU Nvidia Tesla V100	Custom	BDTS && SCTS && CGCL && Huazhong University of Science and Technology	Wuhan	China	2020
5	3	NERSC Cori - 1024 haswell partition	Cray	XC40	Aries	NERSC/LBNL	DOE/SC/LBNL/NERSC	United States	2017

Zdroj: [http://graph500.org/?page\\_id=1011](http://graph500.org/?page_id=1011)

# Porovnávání výkonnosti počítačů – Green500

- **Hodnocení superpočítačů z pohledu jejich efektivnosti s ohledem na spotřebu energie**
- **Spotřeba energie velmi důležitá v souvislosti s budoucími počítači s extrémně velkými výkony**
- **Od roku 2005**
- **<https://www.top500.org>**

Rank	TOP500 Rank	System	Cores	Rmax (TFlop/s)	Power (kW)	Power Efficiency (GFlops/watts)
1	301	<b>MN-3</b> - MN-Core Server, Xeon Platinum 8260M 24C 2.4GHz, Preferred Networks MN-Core, MN-Core DirectConnect, Preferred Networks Preferred Networks Japan	1,664	2,181.2	55	39.379
2	291	<b>SSC-21 Scalable Module</b> - Apollo 6500 Gen10 plus, AMD EPYC 7543 32C 2.8GHz, NVIDIA A100 80GB, Infiniband HDR200, HPE Samsung Electronics South Korea	16,704	2,274.1	103	33.983
3	295	<b>Tethys</b> - NVIDIA DGX A100 Liquid Cooled Prototype, AMD EPYC 7742 64C 2.25GHz, NVIDIA A100 80GB, Infiniband HDR, Nvidia NVIDIA Corporation United States	19,840	2,255.0	72	31.538
4	280	<b>Wilkes-3</b> - PowerEdge XE8545, AMD EPYC 7763 64C 2.45GHz, NVIDIA A100 80GB, Infiniband HDR200 dual rail, DELL EMC University of Cambridge United Kingdom	26,880	2,287.0	74	30.797
5	30	<b>HiPerGator AI</b> - NVIDIA DGX A100, AMD EPYC 7742 64C 2.25GHz, NVIDIA A100, Infiniband HDR, Nvidia University of Florida United States	138,880	17,200.0	583	29.521

Zdroj: <https://www.top500.org/lists/green500/2021/11/>

---

# HPC v Evropě

EuroHPC JU, ETP4HPC, PRACE, CoEs

# HPC v Evropě

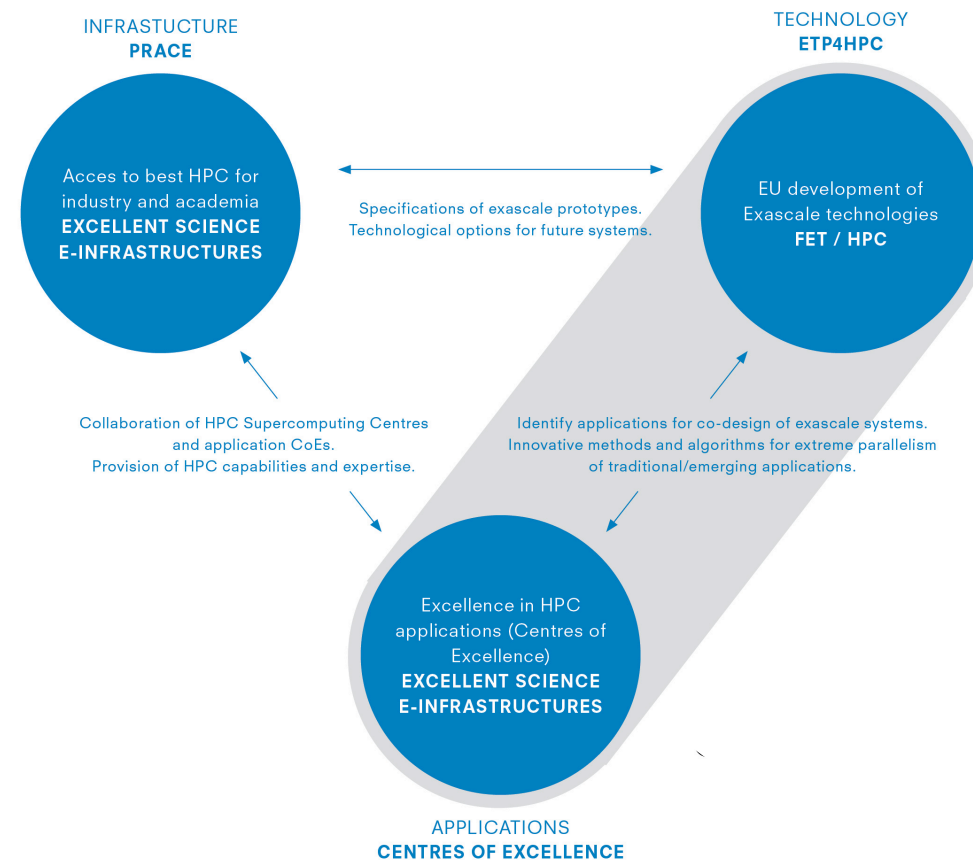
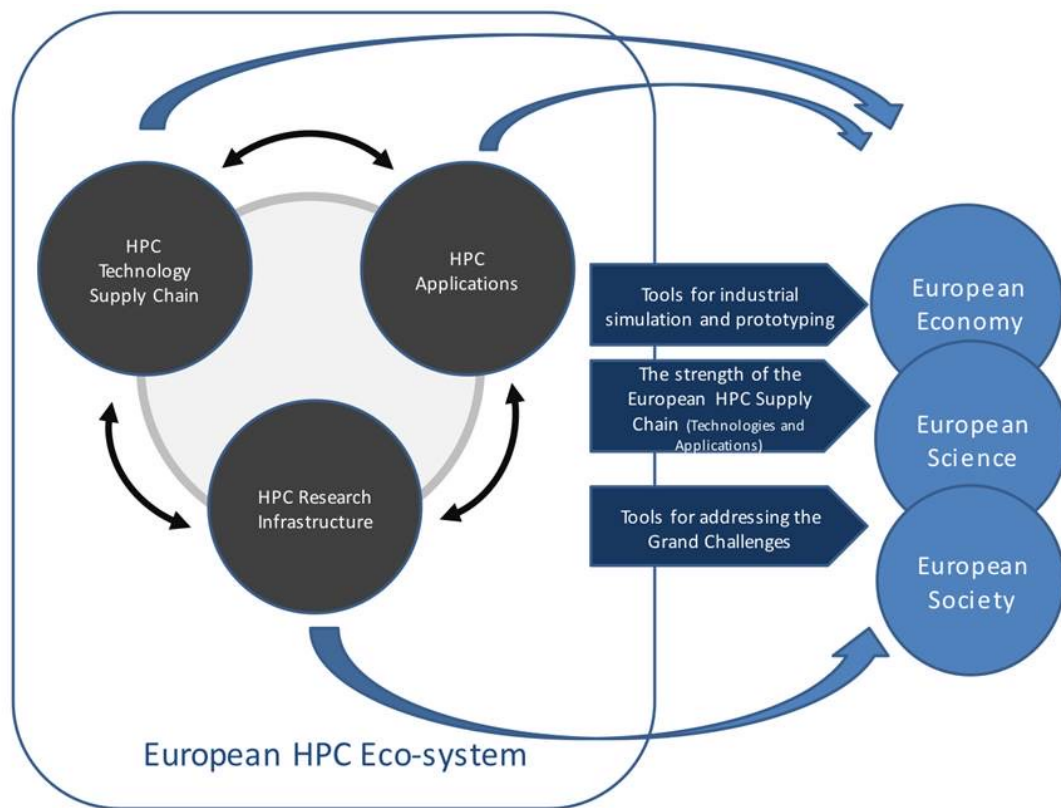
---

- **Koordinace a podpora konkurenceschopnosti Evropské unie vzhledem ke světovému trhu**
- **Vytvořeny instituce a sdružení za tímto účelem**

## **Evropský HPC ekosystém postaven na 3 základních pilířích:**

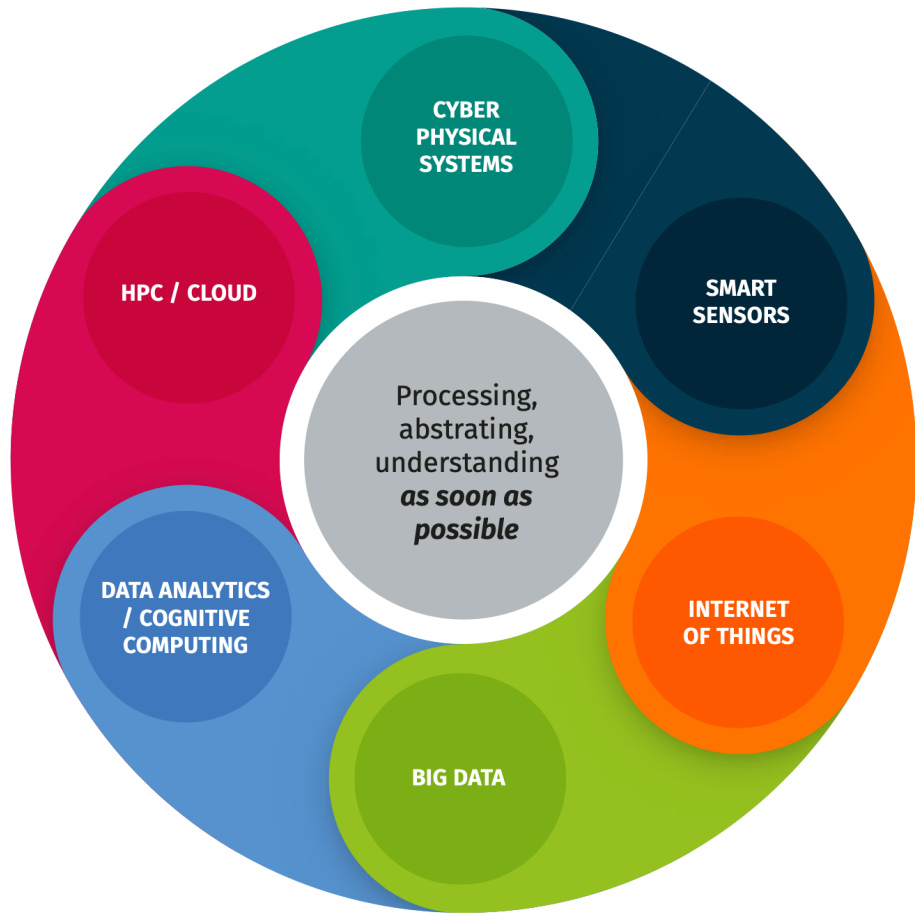
- **Zajištění technologie**
  - Evropská technologická platforma pro HPC ETP4HPC (European Technology Platform for High Performance Computing)
- **Evropská HPC infrastruktura**
  - Reprezentovaná PRACE (Partnership for Advanced Computing in Europe)
- **Odborné znalosti v oblasti využití HPC**
  - Reprezentované Centry excellence CoE (Centres of Excellence for Computing Applications)

# Evropský HPC ekosystém



Zdroj: <https://www.etp4hpc.eu/euexascale.html>

# HPC a Digital continuum



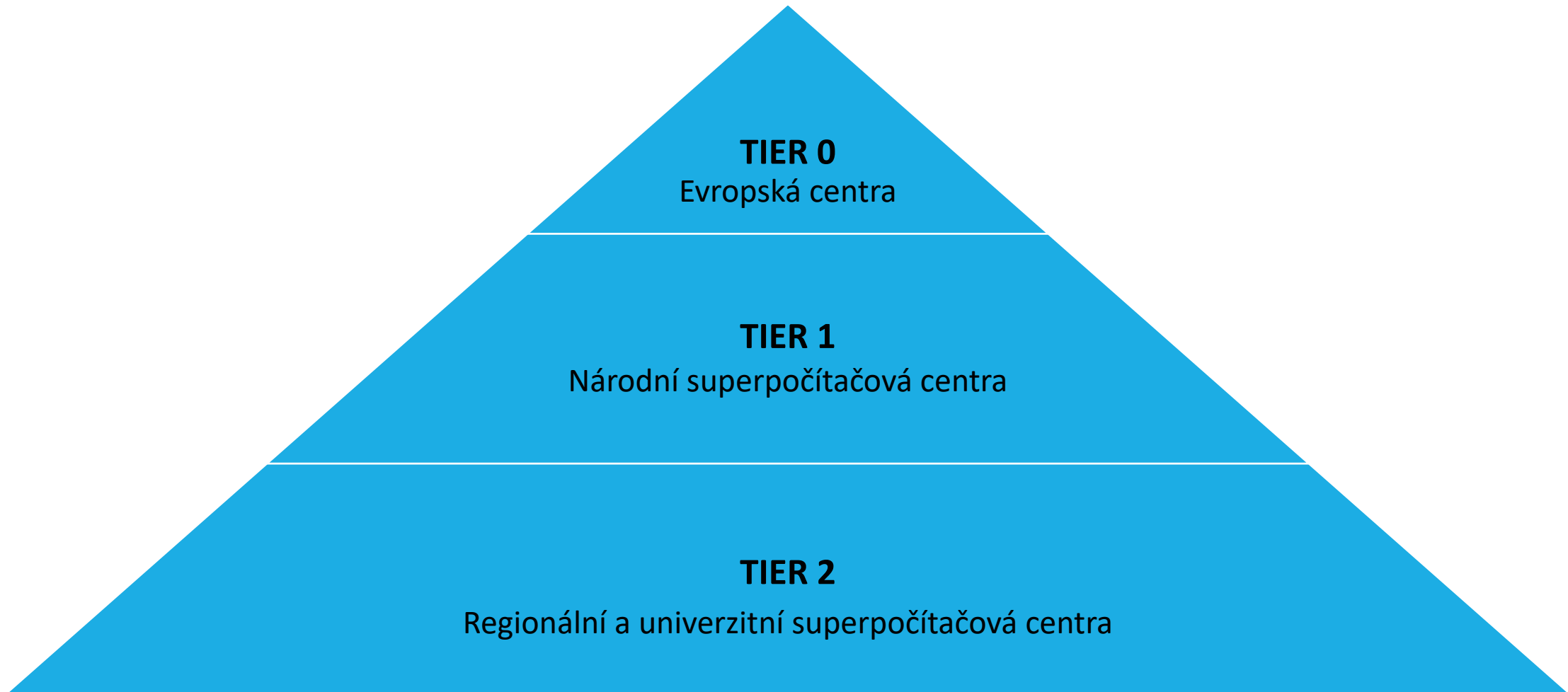
## Nový přístup ke zpracování dat a využití výpočetních prostředků

- **Inteligentní zpracování dat na straně edge (IoT)**
  - Edge, fog computing, stream analýzy
- **Transformace dat ASAP**
- **Spolupráce mezi edge zařízeními a HPC/cloudem**
  - Bezpečnost dat
  - Lepší propustnost sítě
  - Lepší využití HPC/cloudu
- **Vytvoření spojitého toku pro komunikaci a zpracování dat**

Zdroj: SRA 4 [https://www.etp4hpc.eu/pujades/files/ETP4HPC\\_SRA4\\_2020\\_web\(1\).pdf](https://www.etp4hpc.eu/pujades/files/ETP4HPC_SRA4_2020_web(1).pdf)

# Kategorizace superpočítačových center

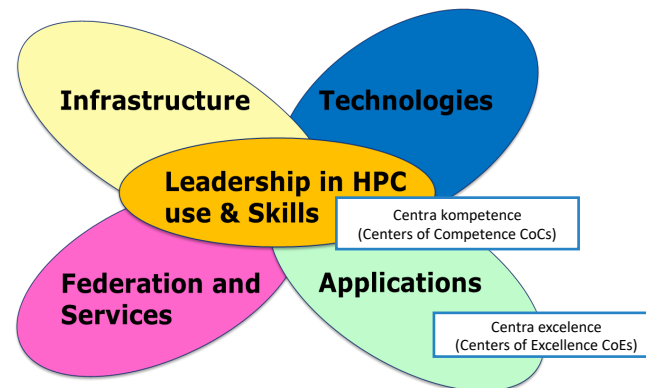
---



# EuroHPC JU (Joint Undertaking)

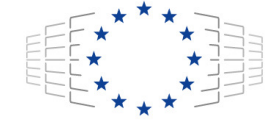


- Evropské sdružení, které má za cíl v rámci spolupráce evropských zemí podpořit cestu k vybudování vlastního evropského exascalového superpočítače do roku 2022/2023 a tím významně přispět k digitalizaci evropské společnosti a průmyslu
- Sdružení založeno v říjnu 2018, sídlo Luxemburg
- Zapojeno 32 evropských států, EU a 2 soukromé subjekty (ETP4HPC a BDVA) - ČR členem od ledna 2018
- **Mise**
  - Vytvoření integrované superpočítačové a datové infrastruktury světové třídy v Evropě
  - Podpora vysoce konkurenceschopného a inovativního ekosystému pro vysoko-výkonnostní počítání a velká data (HPC /Big Data)
- <https://eurohpc-ju.europa.eu>



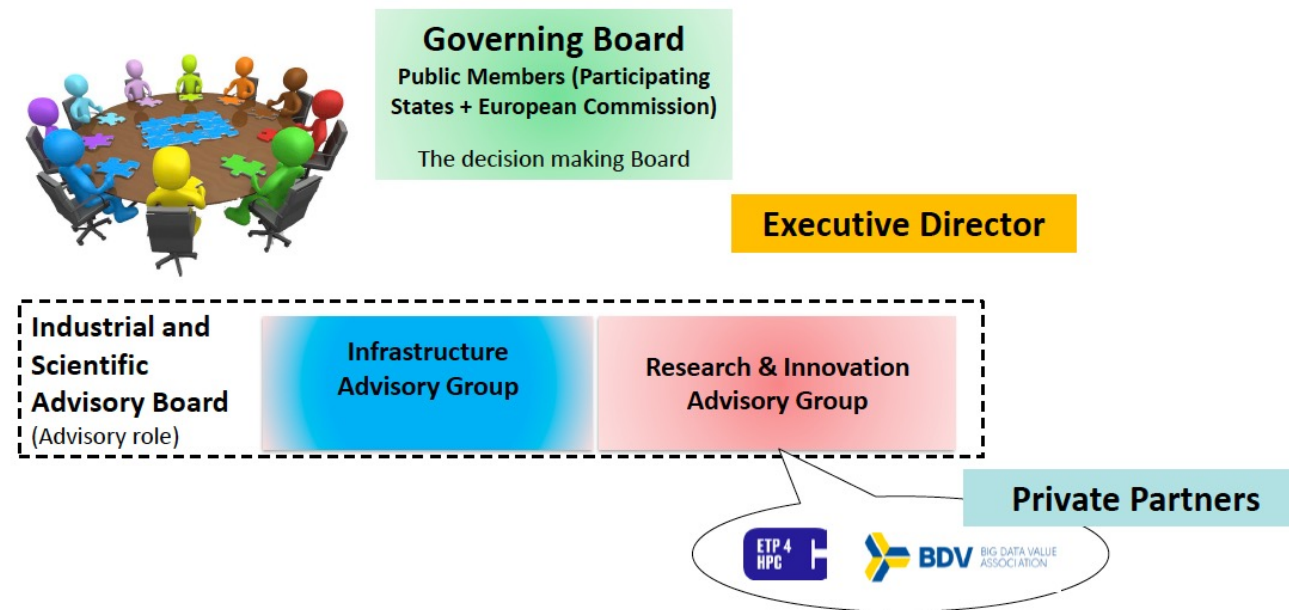


# EuroHPC JU – struktura



**EuroHPC**  
Joint Undertaking

- **Správní rada (Governing Board)**
  - členské státy
  - Evropská komise
- **Průmyslová a vědecká poradní rada (Industrial and Scientific Advisory Board)**
  - Poradní výbor pro infrastrukturu (**Infrastructure Advisory Group - INFRAG**)
  - Poradní výbor pro výzkum a inovace (**Research and Innovation Advisory Group – RIAG**)





## 3 pre-exascale superpočítače (2021-2022)

- LUMI - Kajaani (FI)
- Leonardo - Bologna (IT)
- MareNostrum5 - Barcelona (ES)
- EuroHPC vlastník, spoluvlastnictví 17 členských států

## 5 petascale superpočítačů (2020-2021)

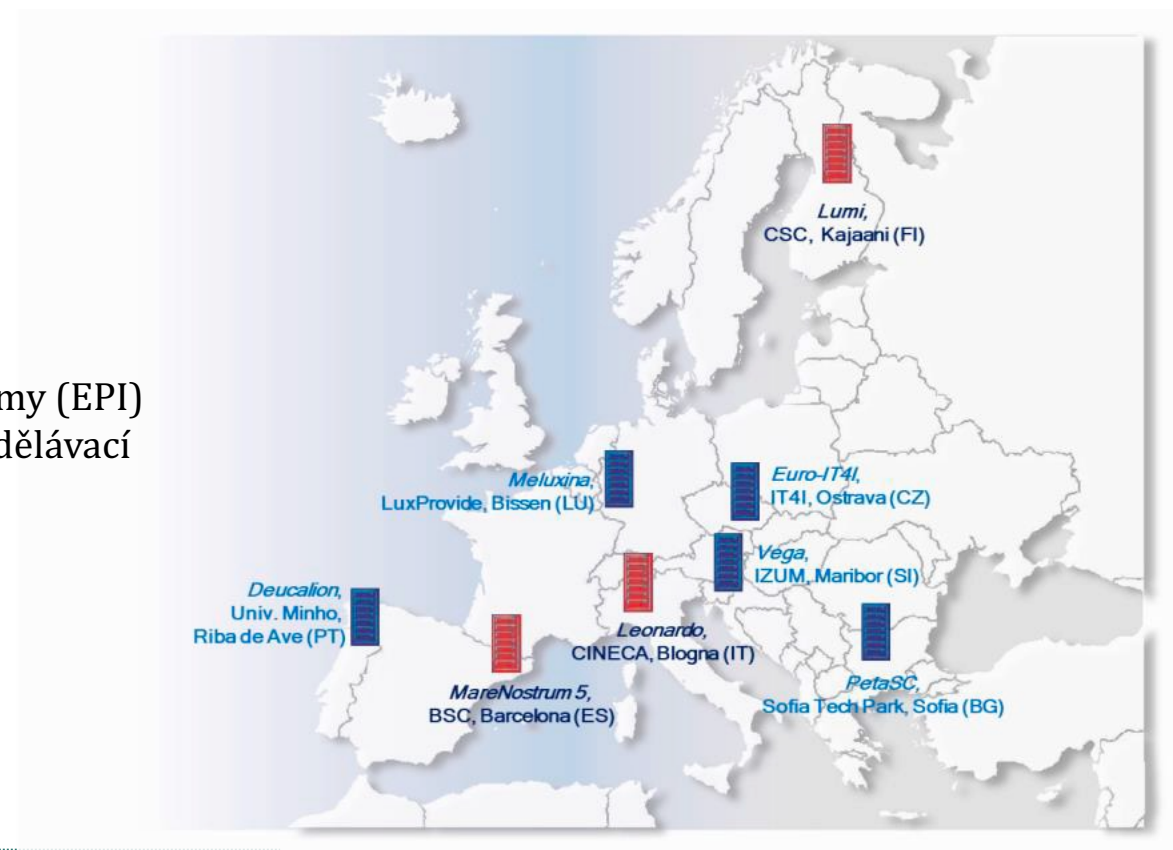
- MeluXina - Bissen (LU)
- Karolina - Ostrava (CZ)
- VEGA - Maribor (SI)
- Deucalion - Guimaraes (PT)
- Discoverer - Sofia (BG)
- Vlastníci členské státy, EuroHPC (35%)

## Podpora HPC ekosystému:

- Vývoj Evropského procesoru pro HPC a exascale pilotní systémy (EPI)
- 32 HPC center kompetence (CoC) propagujících inovace a vzdělávací aktivity ve všech participujících státech
- Podpora průmyslu, MSP

## Poskytování výpočetního času

- Přes Open Access výzvy



- Evropská technologická platforma pro vysoko-výkonnostní výpočty (European Technology Platform for High-Performance Computing)
- <http://www.etp4hpc.eu>
- Definování technologických a výzkumných priorit v oblasti vysoko-výkonnostních výpočtů v Evropě
- Založena v roce 2012
- Sdružuje výrobce HPC technologií, výzkumná centra, koncové uživatele
- **Strategická výzkumná agenda SRA (Strategic Research Agenda)**
  - SRA 4 (2020):  
[https://www.etp4hpc.eu/pujades/files/ETP4HPC\\_SRA4\\_2020\\_web\(1\).pdf](https://www.etp4hpc.eu/pujades/files/ETP4HPC_SRA4_2020_web(1).pdf)
    - Evropské výzkumné priority pro období 2021 - 2024
    - Podklad Evropské komisi a EuroHPC JU pro definování obsahu programových balíčků zaměřených na HPC a HPDA technologie (výzvy v rámci Horizon Europe, Digital Europe, atd.)



# BDVA (Big Data Value Association) DAIRO (Data, AI and Robotics aisbl)



SIEMENS



Atos



NOKIA

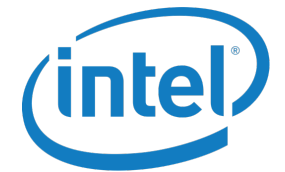
mec

PHILIPS

Insight 

- Mezinárodní nezisková organizace
- Digitální transformace v oblasti velkých dat a umělé inteligence
- Podpora výzkumu a inovací týkajících se oblasti velkých dat (Big Data)
- Podpora konkurenceschopnosti Evropy v oblasti Big Data technologií
- Více než 200 členů z celé Evropy
- Soukromá (průmysl, MaSP), veřejná, akademická sféra
- Realizace Big Data Value PPP programu (Private-public partnership)
- **2021 – přejmenování na DAIRO**
- <http://bdva.eu/>

NEC



Fraunhofer



... a mnoho dalších včetně IT4Innovations



- PRACE (Partnership for Advanced Computing Europe) je mezinárodní nezisková asociace
- Podpora vědeckých objevů a technického výzkumu a vývoje napříč všemi disciplínami s cílem podpořit konkurenceschopnost Evropy
- **Evropská výzkumná infrastruktura** poskytující HPC služby na světové úrovni výzkumníkům jak z akademické, tak z průmyslové sféry
- 25 členů v roce 2017, včetně IT4Innovations (ČR)
- <https://prace-ri.eu>

## Poskytování výpočetního času

- Přes Open Access výzvy
  - Podání projektu na výpočetní čas (cíl projektu, metody, stav současné vědy, přínos projektu, zdůvodnění množství výpočetních prostředků)
  - Recenzní řízení
  - Výzvy pro EuroHPC superpočítače

## Vzdělávací programy, kurzy a školení

- Zaměření na využití výzkumné infrastruktury
- Letní/zimní školy, workshopy

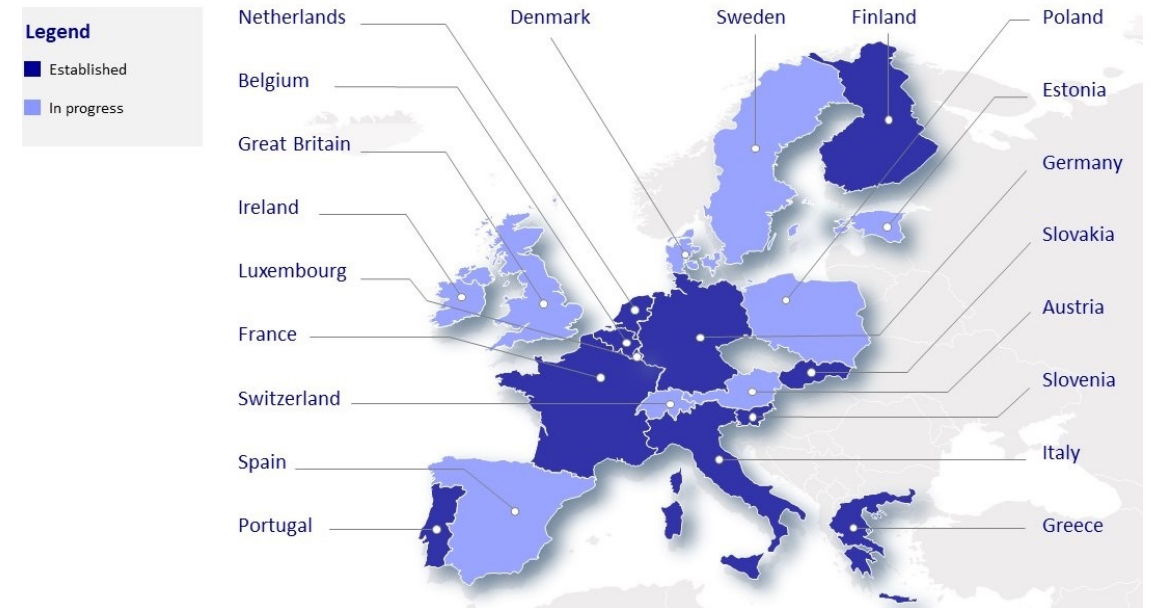
**HiPEAC** (European Network of Excellence on High Performance and Embedded Architecture and Compilation)

- **Projekt pro podporu společné strategie vývoje a implementace Evropského HPC ekosystému**
- <https://www.hipeac.net>
- Největší sociální síť zaměřená na výpočetní systémy na světě
- Sdružuje více než 2000 výzkumníků, průmyslových partnerů a studentů z oblasti výpočetních systémů
- Vzdělávání a kurzy, podpora mobility, propagace HPC, networking mezi členy
- Pořádá konference a letní školy:
  - CSW (Computer Systems Week)
  - HiPEAC conference
  - ACACES (International Summer School on Advanced Computer Architecture and Compilation for High-performance Embedded Systems)



- EOSC (European Open Science Cloud) je prostředí pro hostování a zpracování výzkumných dat na podporu s cílem podpořit vědu v Evropské unii
- Cílová skupina: Evropští vědci, firmy, občané
- Federativní prostředí pro publikování, vyhledávání a znovu použití dat, nástrojů a služeb pro výzkum, inovace a vzdělávání
  - Jednotný přístup
  - FAIR (Findability, Accessibility, Interoperability and Reusability) přístup
    - Findability – dohledatelnost
    - Accessibility – dostupnost, přístupnost
    - Interoperability – vzájemná propojitelnost, standardizace
    - Reusability – opětovná využitelnost
  - Spolehlivá možnost opětovného využití výzkumných dat a všech ostatních digitálních objektů vytvořených během výzkumného životního cyklu (např. metody, software, publikace)

- Iniciativa, která vyvíjí softwarový Framework pro správu, řízení a implementaci společných pravidel, která mohou být aplikována na jakékoliv existující cloud/edge technologie
- Cíl – platí pro data i služby
  - Transparentnost
  - Regulovatelnost
  - Přenositelnost
  - Interoperabilita (propojitelnost)
- Data Spaces – digitální ekosystémy
  - Sběr, výměna dat mezi mnoha účastníky a organizacemi
  - Bezpečnost dat
- Gaia-X HUBs
  - V jednotlivých zemích





# Centra Excellence (Centres of Excellence CoEs)



- Cílem je podpořit přední postavení Evropy v oblasti HPC aplikací a pokrýt důležité oblasti jako obnovitelné zdroje energie, materiály, modely a návrh
- Podpora HPC kódu, výpočetních aplikací, extrémně náročného počítání a dat (exascale a více)

- **Koordinace:** projekt FocusCoE



- BioExcel - Centre of Excellence for Biomolecular Research

- ChEESE - Centre of Excellence in the domain of Solid earth

- CoEC - Centre of Excellence in Combustion

- CompBioMed - Centre of Excellence in Computational Biomedicine

- E-CAM - European infrastructure for computational science applied to simulation and modelling of materials and of biological processes

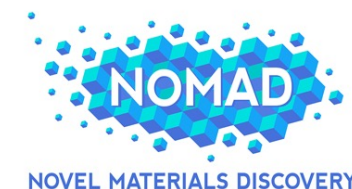
- EoCoE - Energy oriented Centre of Excellence for computer applications



# Centra Excellence (Centres of Excellence CoEs)



- **ESiWACE** - Excellence in Simulation of Weather and Climate in Europe
- **EXCELLERAT** - Centre of Excellence for Engineering Applications
- **HiDALGO** - HPC and Big Data Technologies for Global Systems
- **MaX** - Materials design at the eXascale
- **NOMAD** - Novel Materials Discovery Center Of Excellence
- **PerMedCoE** - Centre of Excellence in Personalised Medicine
- **POP** - Performance Optimisation and Productivity Centre of Excellence
- **RAISE** - Research on AI- and Simulation-Based Engineering at Exascale
- **TREX** - Targeting Real Chemical Accuracy At The Exascale



# Národní Centra Kompetence (National Centres of Competence CCs)

---



- <https://www.eurocc-access.eu>
- Koordinace: **EuroCC projekt** - provázání dosavadních národních center do jednoho integrovaného systému
- Spolupráce s aplikační sférou, vytváření poznatků s vysokým potenciálem pro přímé uplatnění v praxi
- Průmyslově orientovaná architektura, podpora softwarového prostředí a služeb
- Zpřístupnění HPC infrastruktury
- Podpora průmyslu, malých a středních podniků
- Vzdělávání, kurzy

# Digitální Inovační HUBy (DIH)

- Jednotná kontaktní místa (one-stop-shops), která usnadňují firmám digitalizovat jejich podnikání
- Pomáhají firmám v růstu jejich konkurenceschopnosti formou zlepšování jejich business/výrobních procesů, produktů i služeb prostřednictvím digitálních technologií
- Nabízejí přístup ke znalostem a technologiím, které nejsou firmám běžně dostupné
- Poskytují nezávislé expertízy
- Umožňují experimentovat a nalézat nová řešení
- Regionální spojení více partnerů s přesahem mimo region
- Klienti: MSP, velké firmy, organizace veřejné správy, zdravotnická zařízení, start-upy apod.
- Katalog DIHů: <http://s3platform.jrc.ec.europa.eu/digital-innovation-hubs-tool>



---

# Trendy využití HPC v Evropě a ve světě

# Trendy využití HPC I

**Problémy zaměřené na Big data, analýzu dat, umělou inteligenci, modelování a HPC v cloudu.**

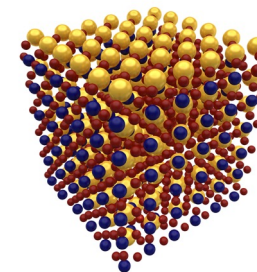
**Některé typické oblasti:**

- **Matematické modelování**

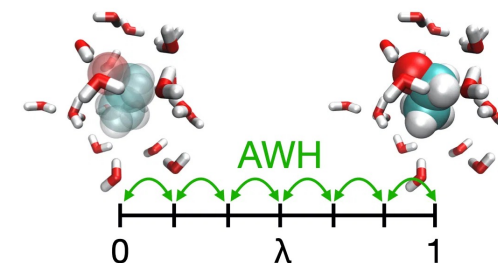
- Využití ve všech oblastech vědy a při vývoji nových technologií
- Numerická řešení matematických modelů vyžadují znalosti různých vědeckých disciplín
- Např. analýza nekonečně dimenzionálních systémů rovnic a jejich diskretizace, řešení konečně dimenzionálních úloh

- **Molekulární dynamika**

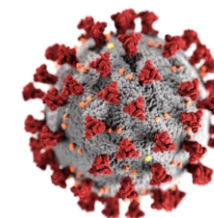
- Analýza dynamiky rozsáhlých makromolekul včetně biologických systémů jako proteiny, nukleové kyseliny (DNA, RNA) a membrány
- Výpočetní výkon často používán k simulacím, predikci či analýze interakcí atomů v systému
- Studium biologických systémů, zpracování/porovnávání genomů a DNA/RNA sekvencí např. pro hledání léčiv, dokování proteinů
- V materiálovém inženýrství a nanotechnologii využití např. pro predikci defektů, lomů, vývoj nových technologií, modelování chemických reakcí atd.



Zdroj: MaX



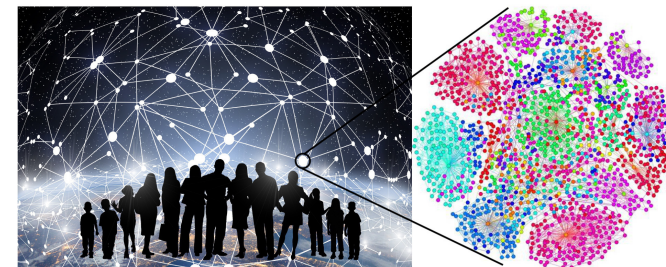
Zdroj: BioExcel



# Trendy využití HPC II

- **Analýza grafů a řešení grafových problémů**

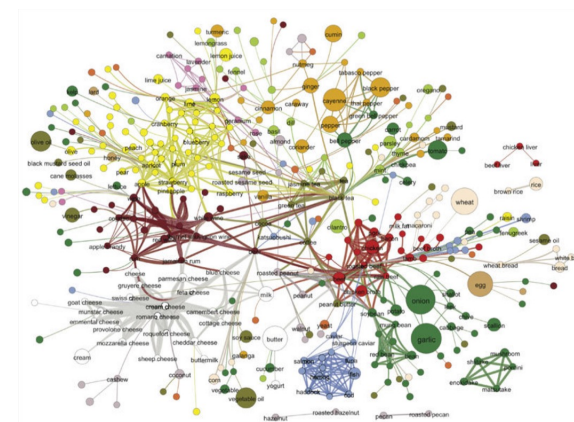
- Obecně metody využívající grafové úlohy, zpracování/analýza rozsáhlých grafů
- Často superpočítače se speciálním HW pro tento typ úloh
- Např. grafy sociálních sítí, proteinových interakcí v živém organismu, dopravní sítě atd.



Zdroj: HiDALGO

- **Simulace**

- Obecně metody využívající náhodnost a statistické vzorkování pro vyřešení problémů
- U výsledků se sice pracuje s určitou mírou nejistoty, ale „síla velkých čísel“ umožňuje nejistotu snížit se zvyšujícím se počtem vzorků
- Např. analýza radiativního rozpadu, Brownova pohybu, nebo všude tam, kde lze předpokládat nejistotu v datech (simulace povodní, geoprostorové analýzy, CFD aerodynamické modelování, modelování dopravního toku, vývoje počasí a klimatických změn, cen akcií na trhu apod.)

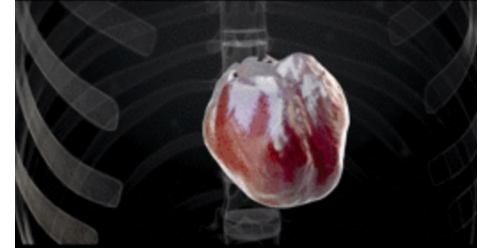


# Trendy využití HPC III

---

- **Zpracování grafiky a multimédií**

- Např. 3D vizualizace a renderování obrazu
- Kódování/dekódování obrazu, zpracování obrazu a jeho analýza, počítačově generovaná grafika
- Využití v různých oblastech jako zdravotnictví, bezpečnost, doprava, zpracování radarových snímků, vizualizace a modelování v průmyslu, astrologie, nebo i filmový a herní průmysl



Zdroj: CompBioMed

- **Vysoce výkonné datové analýzy obecně (HPDA)**

- Analýza a zpracování velkých dat (Big Data)
- Prolíná se s výše uvedenými oblastmi (např. finanční analýzy, datové analýzy různého typu, analýzy spojené s grafovými úlohami)
- Často využívány metody umělé inteligence (AI, Artificial intelligence) a zejména pak intenzivně se rozvíjející oblast strojového učení (machine learning)
- Identifikace správného nastavení vstupních parametrů (hyperparameter search) apod.





# Trendy využití HPC IV

---

- **Digitální dvojčata (digital twins)**

- Vytvoření digitální reprezentace fyzického objektu nebo systému (replika ve virtuálním světě pomocí odpovídajících matematických modelů)
- Digitální dvojče získává vstupní data ze sensorů svého dvojčete z reálného světa
- **Cíl:**
  - Simulace objektu v reálném čase, identifikace potenciálních problémů, optimalizace výkonu
  - Také zpětná vazba při návrhu produktu (v případě prototypů)
- **Typické příklady:**
  - Výroba – simulace procesů v továrnách (výrobní linky)
  - Automobilový průmysl – autonomní vozidla, návrh nových materiálů, konstrukční problémy
  - Zdravotnictví – simulace orgánů člověka, predikce zdravotního stavu pacienta
  - Klimatologie a počasí - modely počasí, predikce, digitální model země (Destination Earth)
  - Urbanistická oblast – budovy, celá města (Smart Cities)

- **Kvantové počítače**

- Podpora vývoje kvantových počítačů (HW)
- Vývoj kvantových simulátorů



Zdroj: Digipredict



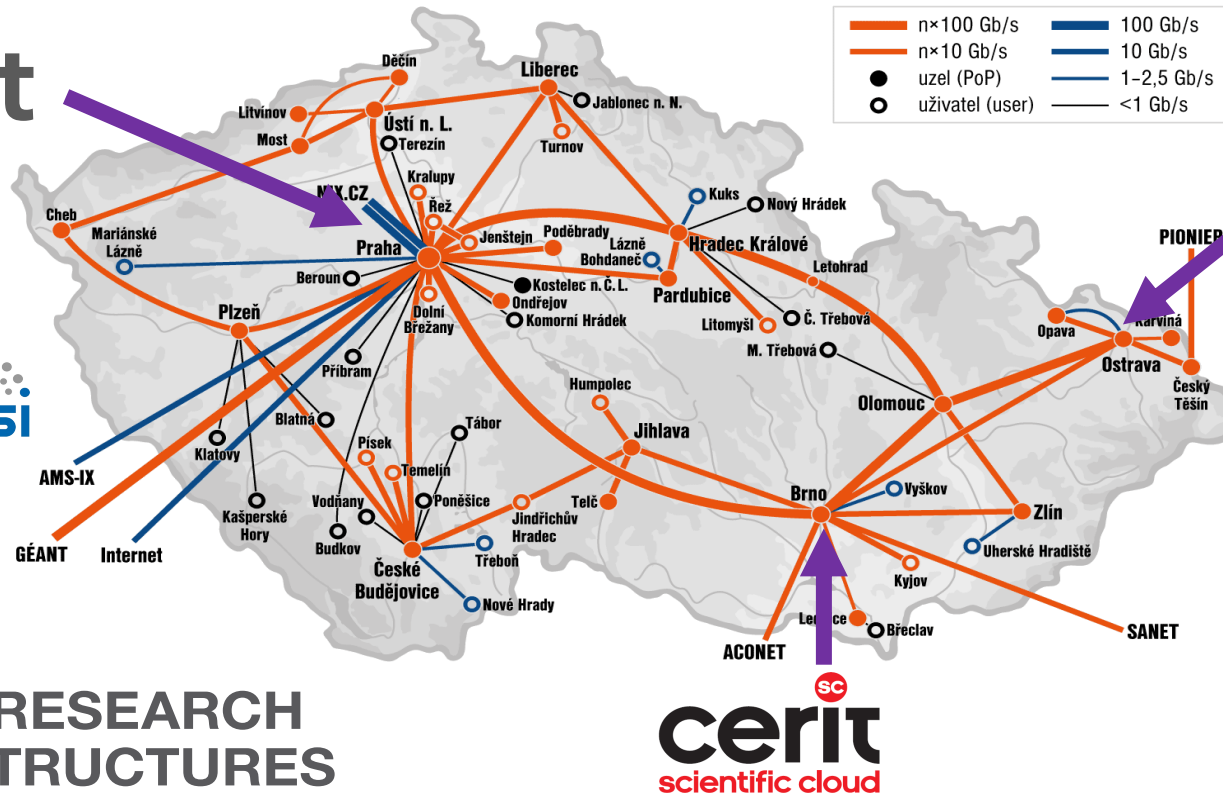
Zdroj: Destination Earth

---

# HPC v České republice

Velké výzkumné infrastruktury, Národní superpočítačové centrum

- Velké národní infrastruktury pro výzkum, experimentální vývoj a inovace podporované Ministerstvem mládeže a tělovýchovy
- Poskytování vysoce kvalitních a dostatečně dimenzovaných ICT služeb pro výzkumnou komunitu



VSB TECHNICAL UNIVERSITY OF OSTRAVA

IT4INNOVATIONS NATIONAL SUPERCOMPUTING CENTER



EuroHPC Joint Undertaking



BIG DATA VALUE ASSOCIATION



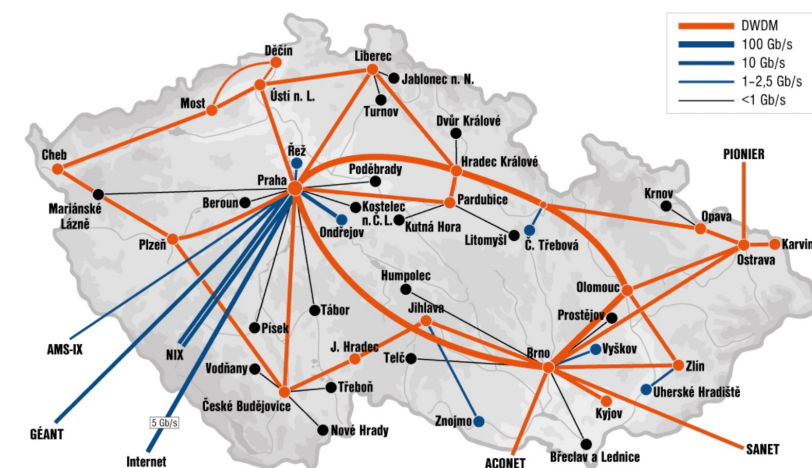
LARGE RESEARCH INFRASTRUCTURES

cerit scientific cloud

<https://www.e-infra.cz/o-nas/clenove>

- <https://www.cesnet.cz>
- e-infrastruktura pro výzkum a vývoj ČR, která představuje transparentní prostředí pro přenos, ukládání a zpracování vědeckých dat pro subjekty zabývající se výzkumem a vývojem
- Poskytuje vysoce propustnou národní komunikační síť, národní gridovou infrastrukturu, infrastrukturu velkokapacitních úložišť a prostředí pro spolupráci distribuovaných výzkumných týmů
- Sdružení vysokých škol a Akademie věd ČR
- Národní akademická federace identit **eduID.cz**
- **Národní síť pro výzkum a vzdělávání** (National Research and Education Network NREN)
- **Národní gridová infrastruktura** (National Grid Infrastructure NGI)
- Součástí panevropské páteřní sítě pro výzkum a vzdělávání **GÉANT** a panevropské gridové infrastruktury **EGI** (sdružuje datová centra a poskytovatele cloudu napříč Evropou a ve světě)

## Topologie sítě



Zdroj: <http://docplayer.cz/5549416-Souhrnny-pohled-na-sluzby-e-infrastruktury-cesnet.html>

# CERIT-SC (Scientific Cloud)

- <https://www.cerit-sc.cz>
- Centrum výzkumu, vzdělávání a inovací CERIT Scientific Cloud
- Centrum je součástí kapacit Ústavu výpočetní techniky Masarykovy univerzity v Brně
- Národní centrum poskytující výpočetní kapacity a související služby, datová úložiště
- Uzel Národní gridové infrastruktury MetaCentrum (NGI)
  - Virtuální prostředí umožňující využití dostupných výpočetních zdrojů pro řešení náročnějších výpočetních úloh, jejichž řešení není možné v rámci samostatného pracoviště
  - K dispozici akademickým a výzkumným institucím pro spolupráci v oblasti výpočtů a ukládání dat
  - Napojení na Evropské Gridové Infrastruktury (EGI)



Zdroj: <https://www.metacentrum.cz/cs/>

# IT4Innovations

## Národní superpočítačové centrum

VŠB – Technická univerzita v Ostravě

- **Národní superpočítačové centrum**
- **Provoz nejvýkonnějších superpočítačových technologií v České republice**
- **Provozuje několik superpočítačů**
  - Anselm, Salomon (vyřazeny)
  - Barbora
  - DGX-2
  - Karolina (2021)
  - LUMI (2022)
- **Výzkumné a vývojové centrum se silnými mezinárodními vazbami**
  - Zapojení v řadě mezinárodních projektů
- **Výzkumné laboratoře**
  - Laboratoř pro náročné datové analýzy a simulace
  - Laboratoř vývoje paralelních algoritmů
  - Laboratoř modelování pro nanotechnologie
  - Laboratoř pro big data analýzy
  - Laboratoř pro výzkum infrastruktury
- <https://www.it4i.cz>



## Zapojení v mezinárodních organizacích

- Od roku 2011 členem celoevropské výzkumné infrastruktury **PRACE**
- Od roku 2016 zapojeno v **ETP4HPC** (European Technology Platform for High-Performance Computing)
- Od roku 2018 participuje na přípravě evropského sdružení **EuroHPC JU** (zapojení ČR od 2019)
- V současnosti **Digitální Inovační Hub** (DIH) evidovaný evropskou komisí na podporu inovací v oblasti HPC, numerických simulací a pokročilých datových analýz primárně v malých a středních podnicích
- **Centrum kompetence pro HPC** v České Republice
- Od roku 2018 členem **ICT Innovation for Manufacturing SMEs**
- Od roku 2019 člen **BDVA/DAIRO**
- Od roku 2019 člen **EUDAT**
- Od roku 2020 člen **HiPEAC**





# IT4Innovations - Infrastruktura



2013 – Anselm

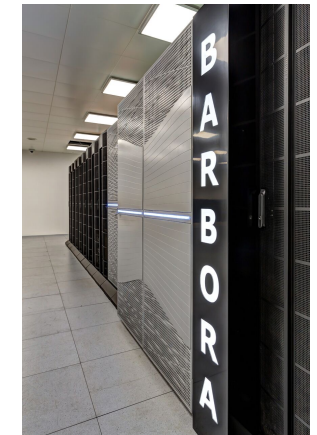


2019 – Nvidia DGX-2

2014 - budova



2019 – Barbora



2015 - Salomon



2021 – Karolina

**V současnosti již mimo provoz – od roku 2021 umístěn v technickém muzeu – Dolní oblast Vítkovic v Ostravě**

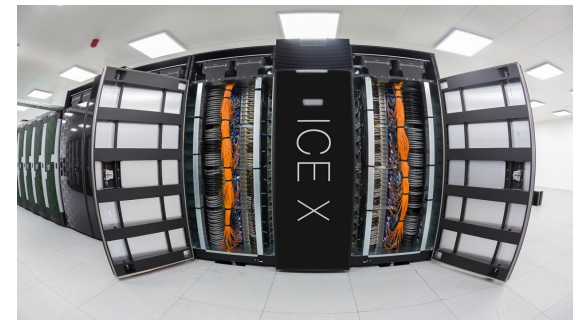
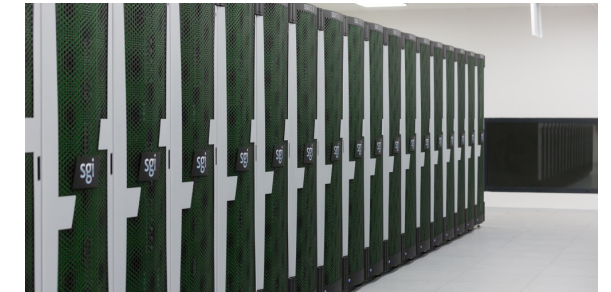
- **209 compute nodes**
- **3 344 Intel Sandy bridge cores**
- **15 136 GB RAM (64, 96, 512)**
- **24 nVidia Tesla K20**
- **4 Intel Xeon Phi (240 cores)**
  
- **Rpeak 94TFlop/s**
- **Rmax 73TFlop/s (LINPACK)**



# IT4Innovations - Salomon

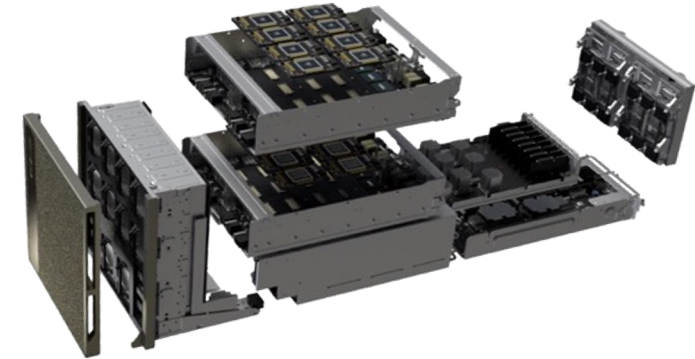
**V současnosti již mimo provoz**

- **1 008 compute nodes**
- **24 192 Intel Haswell cores**
- **129 024 GB RAM (128)**
- **864 Intel Xeon Phi 7120P (52 704 cores)**
  
- **Rpeak 2PFlop/s**
- **Rmax 1.5Flop/s (LINPACK)**

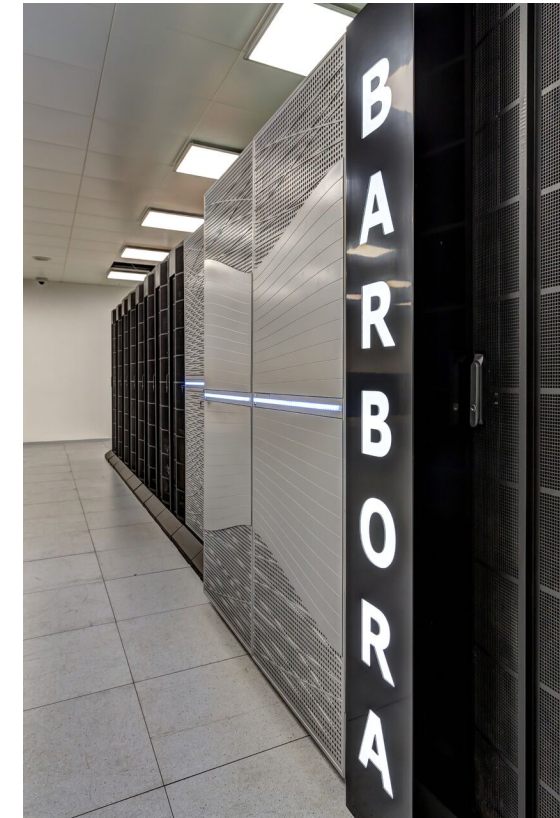


# IT4Innovations – NVidia DGX-2

- **Pro výpočty umělé intelligence**
- **Rpeak až 130 TFlop/s**
- **Akcelerátory pro datová centra 16 x NVIDIA Tesla V100 GPU**
  - 16x2560 FP64 cores
  - 16x5120 FP32 cores
  - 16x640 tensor cores
  - 1.5 TB RAM, 512GB HBM
- **2x24 x86\_64 Xeon Platinum jader, celkem 48**
  - instruction set AVX-512
- **NVLINK network interconnecting GPGPU**
  - 12x NVSwitch, propustnost 2.4TB/s in bisection
- **Připojení do okolní infrastruktury 8x100Gb/s Infiniband/Ethernet**
- **NVMe SSD storage 30TB**



- **Rpeak: 849 Tflop/s**
- **Atos Bull Sequana**
- **192 výpočetních uzlů, 2x18 jádrový Cascade Lake 6240**
  - AVX-512 instruction set, 192GB RAM
- **8x GPU nodes, 2x12 cores, 192GB RAM**
  - 4x Nvidia Tesla V100 per node, 16GB HBM2, 192 RAM
- **1x tlustý uzel, 8x16 jádrový Intel Skylake, 6TB RAM**
- **Infiniband HDR, 200Gb/s link speed, 4 islands, fat tree topology**
- **Burst buffer accelerated SCRATCH 310TB, 28GB/s**
- **Small HOME, 25TB**
- **22.4TB NVMe over Fabric**
  - accessible remotely on all nodes
- **PBS-Pro scheduler**



- **Jeden z 5 petascale systémů podporovaných EuroHPC JU**
- **Rpeak: 15,2PFlop/s**
- **R\_Max: 9,1PFlop/s (LINPACK)**
- **R\_AI: 350PFlop/s (DeepLearning)**
- **Univerzální část: 2,3PFlop/s (LINPACK) (720 serverů)**
- **Akcelerovaná část:**
  - 11,6 PFlop/s (LINPACK) (72 serverů, 8GPU každý)
  - 360 PFlop/s (DeepLearning)
- **Část pro datové analýzy: 24 TB sdílené paměti**
- **Cloud partitition: 192 TFlop/s (LINPACK) (36 serverů)**
- **Vysokorychlostní síť: až 200 Gb/s**
- **Datové úložiště: více než 1,4 PB pro vysokorychlostní zpracování uživatelských dat rychlostí až 1 TB/s**

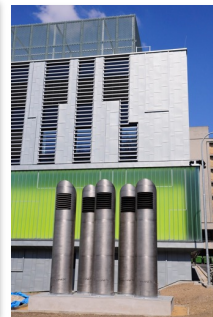




Chlazení teplou a studenou vodou, rekuperační systém



Záložní zdroje energie UPS 2x2,5MVA



OxyReduct – protipožární opatření

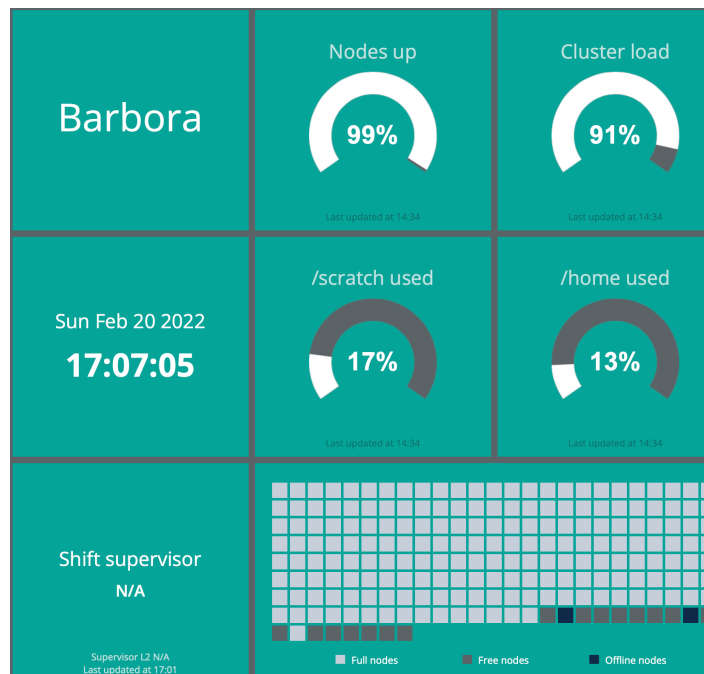


- **Open access výzvy pro poskytování výpočetního času (EuroHPC, LUMI)**
  - Projektové výzvy 3x ročně (únor, červen, říjen) pro výzkumníky a zaměstnance vědeckých a vzdělávacích institucí
  - Podléhá recenznímu řízení
- **Ředitelská fronta (Director's discretion)**
  - Možno požádat kdykoliv. Výpočetní čas je přiřazován nepravidelně vzhledem k volným kapacitám IT4Innovations
  - Např. Výjimečné projekty, komerční výzkum
- **Vzdělávací a školicí aktivity**
  - Každoročně více než 10 akcí ročně
  - PRACE letní/zimní školy
  - Školící centrum PRACE, NVIDIA
- **Podpora uživatelům výpočetní infrastruktury**

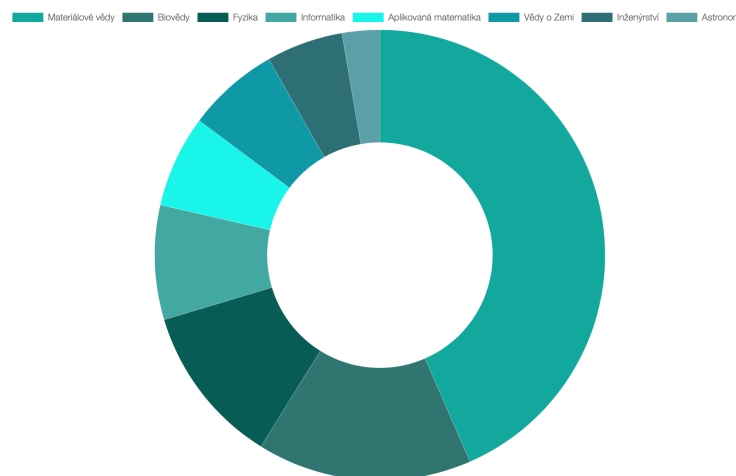


## Aktuální stav vytížení uzlů:

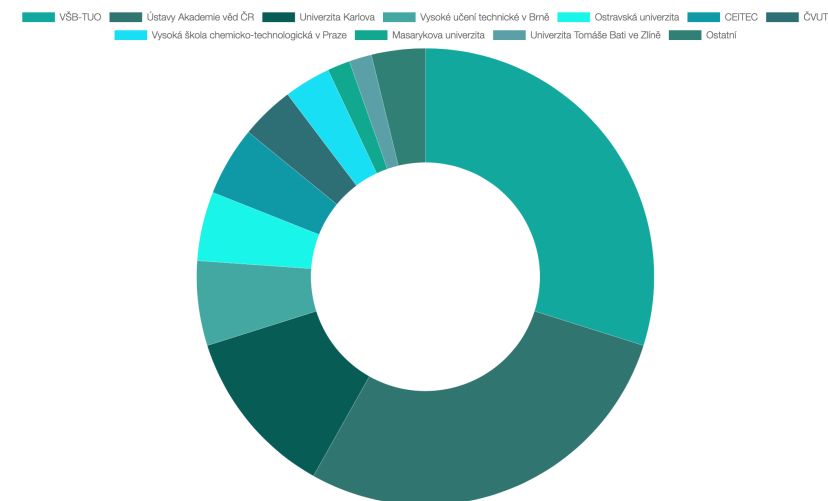
- <https://extranet.it4i.cz/dash/karolina>
- <https://extranet.it4i.cz/dash/barbora>



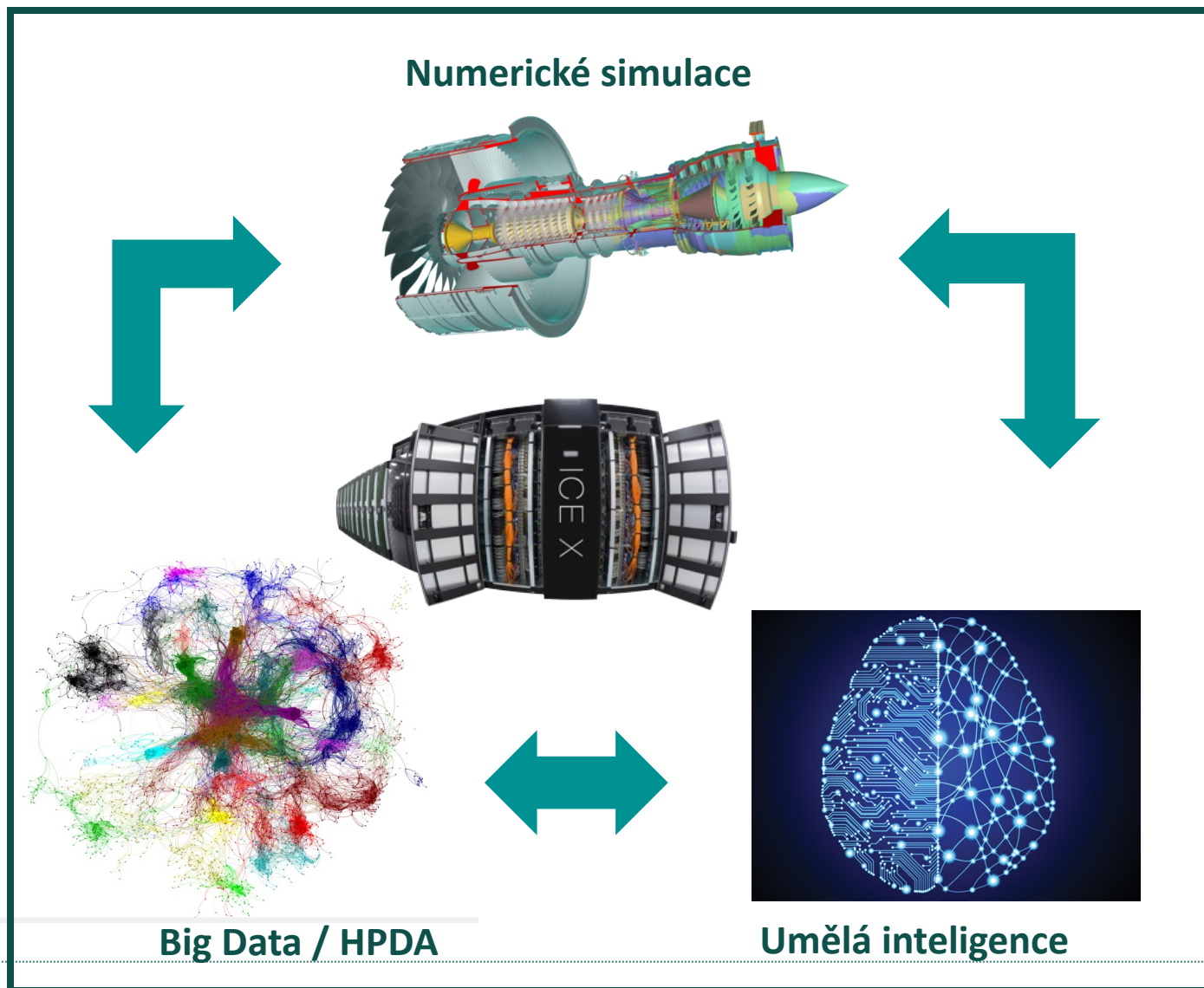
## Počty projektů v jednotlivých vědních oblastech v 2020 [%]



## Využití superpočítače jednotlivými institucemi v 2020 [%]



# IT4Innovations – Výzkumné aktivity



## Výzkum & vývoj



## Společnost



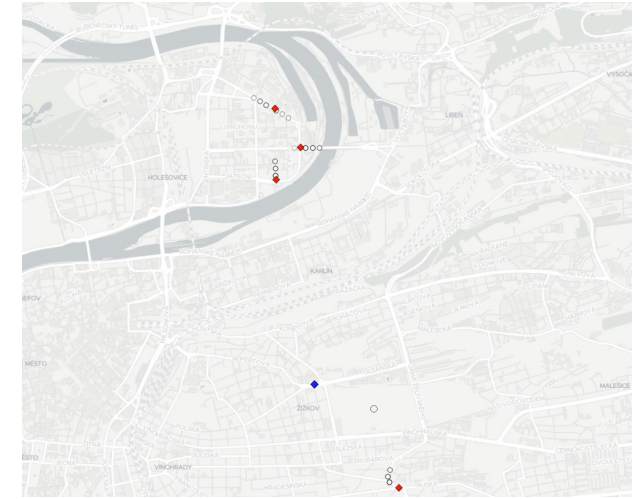
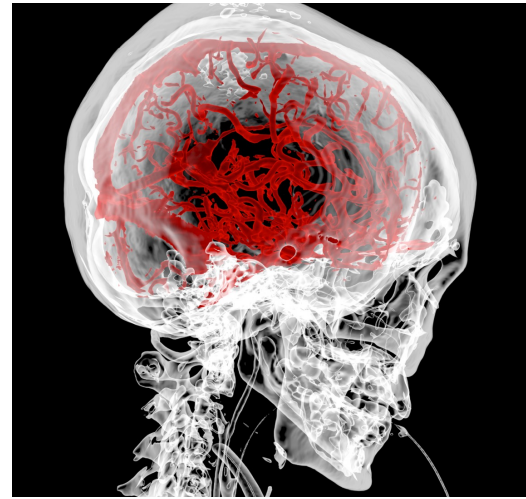
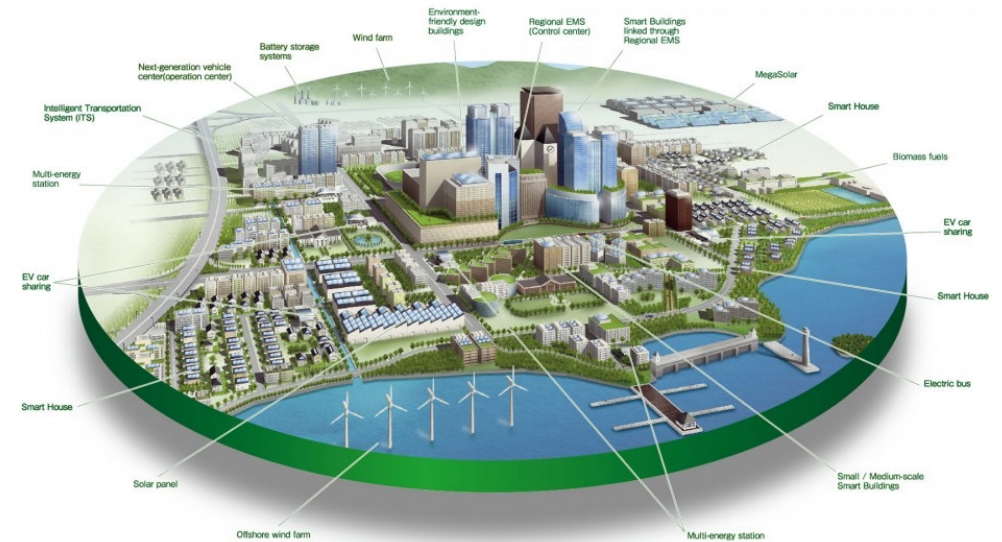
## Průmysl



# IT4Innovations – Komplexní průmyslové nebo vědecké úlohy

## Technologie digitálních dvojčat

- Numerické modely
- Zpracování dat
- Umělá inteligence
- Pokročilé vizualizace
- Propojení a komunikace



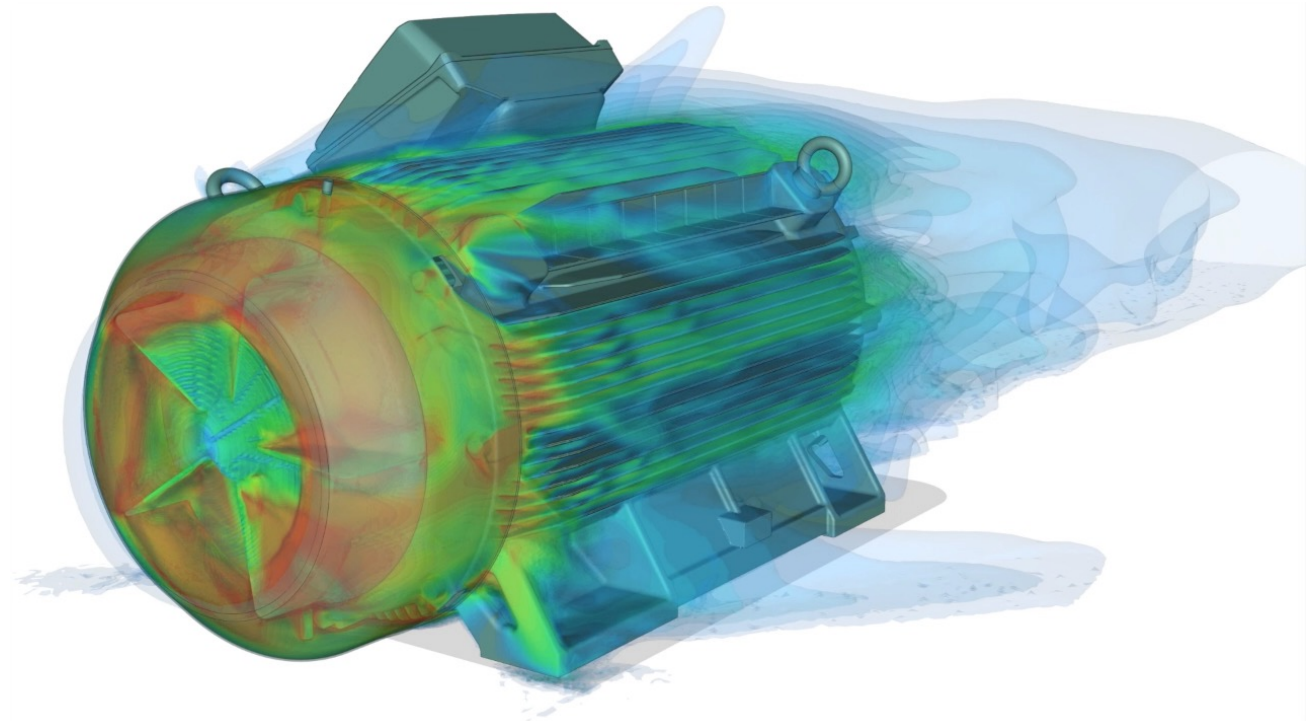
# IT4Innovations - Technologie digitálních dvojčat (Digital Twin)

## Komplexní nelineární multifyzikální problém – elektrický motor

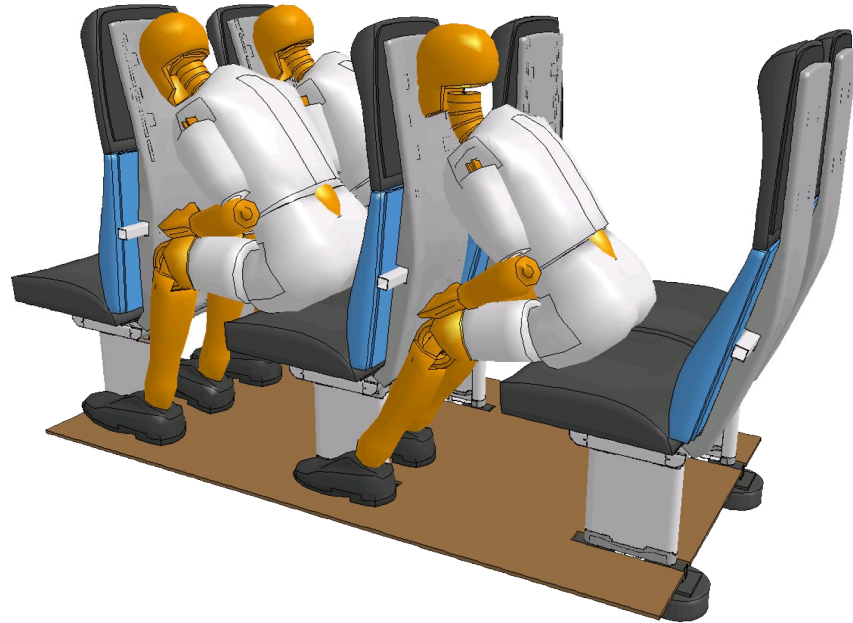
- **Elektrická pole**
- **Electromagnetismus**
- **Transfer tepla**
  - Teplo generované magnetismem
  - Chladicí systém
- **Strukturální mechanika**
  - Strukturální integrita
  - Vibrace způsobené pohybem
  - high speed motors
  - Ovlivnění electromagnetismem
- **Aktivní chladicí systém**
  - Proudění vzduchu
- **Akustika**
  - Generovaná prouděním vzduchu
  - Generovaná elektromagnetismem
  - Generovaná vibracemi
- **Predikce únavy materiálu**
- **Inteligentní kontrolní systémy**

One complex transient simulation

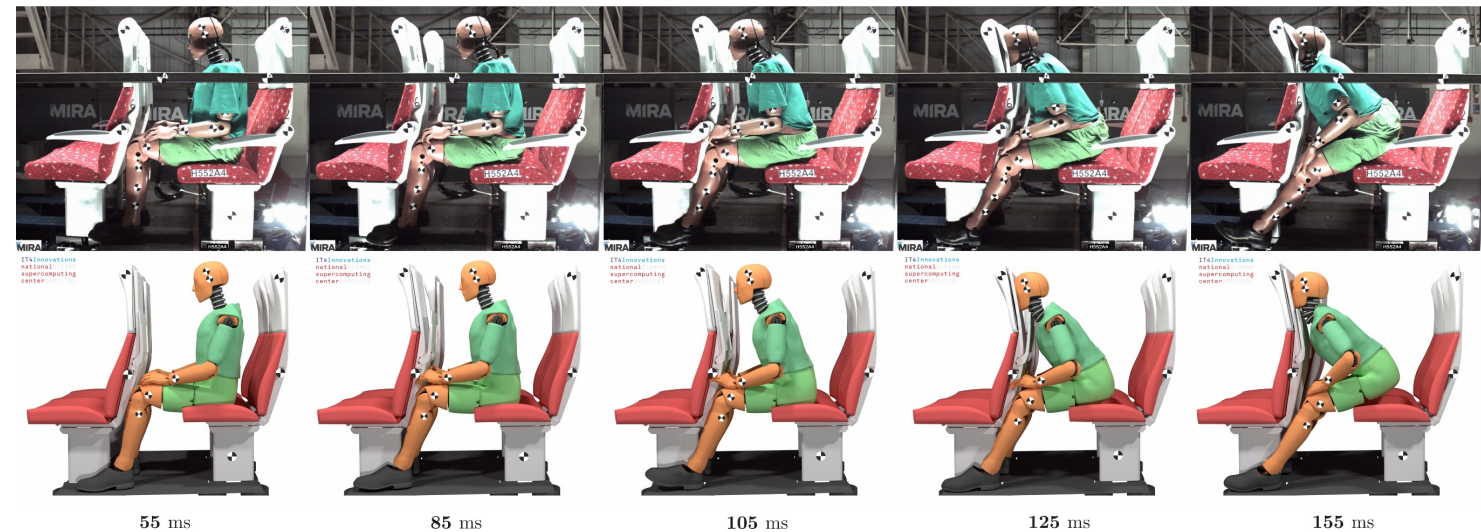
- 35 hours / 1200 Cores on Salomon **by open source code**
- “Standard” powerful workstation
- 256GB RAM 30 Cores ~2 months!



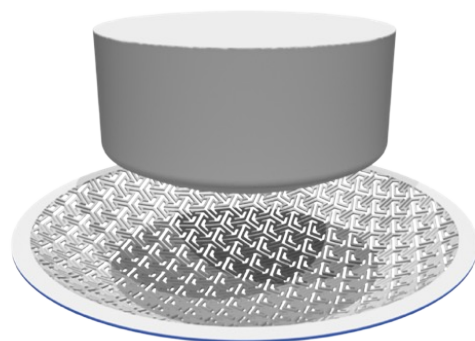
SIEMENS



- Strojírnoství, doprava
- Vývoj vlakových sedaček
- Simulace nárazových zkoušek
- Navrženo několik prototypů
- Certifikace podle normy GM/RT2100

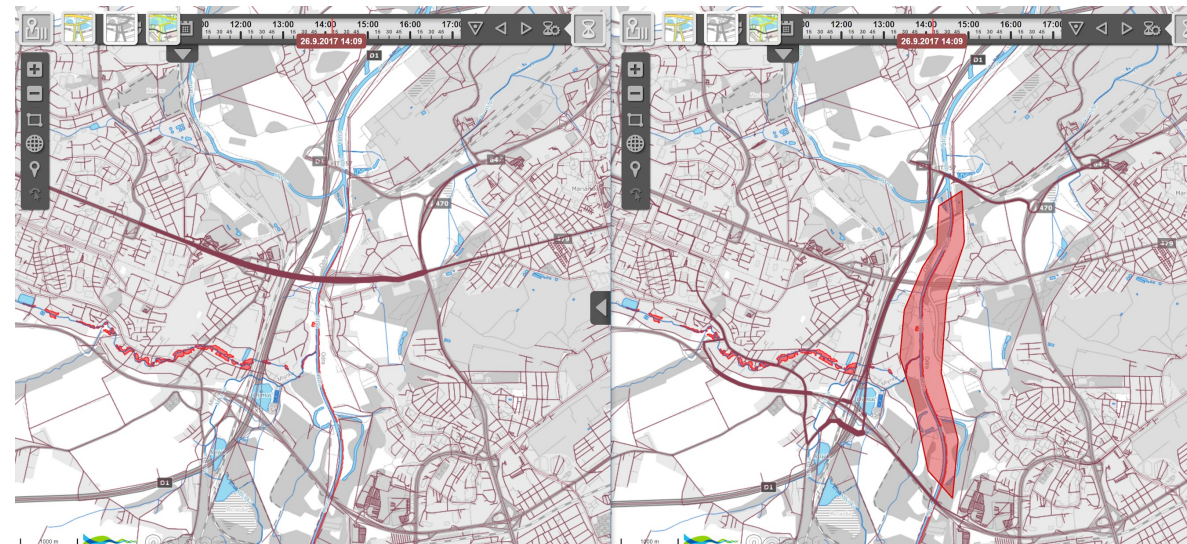


INVENT  
MEDICAL



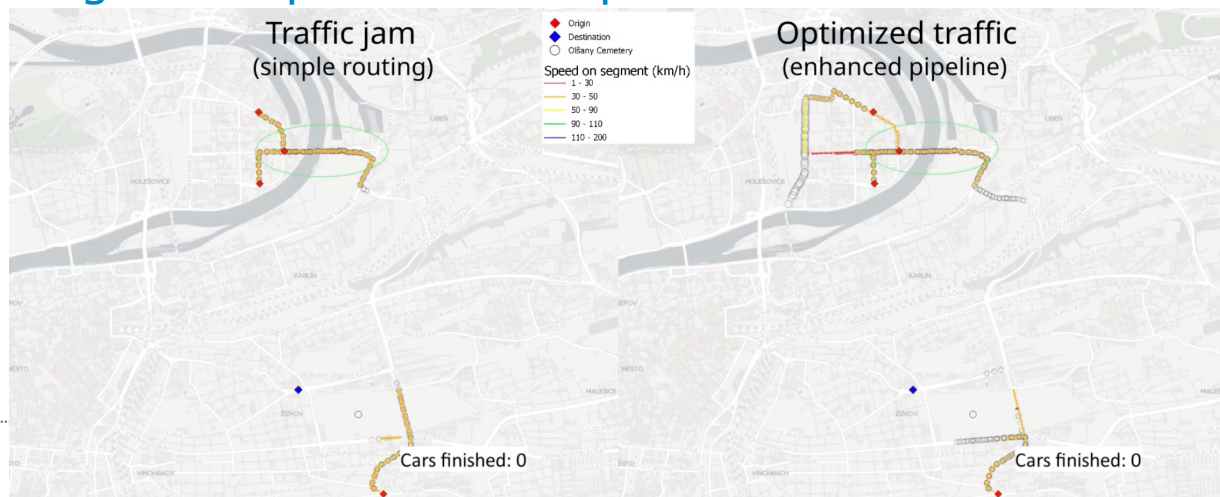
- Zdravotnická technika
- Dětské kraniální ortézy
- Algoritmy pro automatickou úpravu ortéz
- Využití metod numerického modelování pro určení tuhosti ortéz

# IT4Innovations - Dopravní simulace



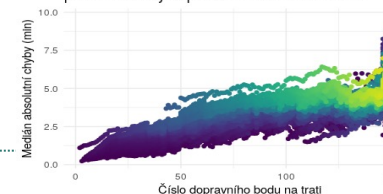
HPC

## Self-adaptive navigační systém a globální pohled na dopravní infrastrukturu



IXPERTA

Medián absolutní chyby, skupiny tras které mají průměrnou chybu predikcí nižší než 30 minut



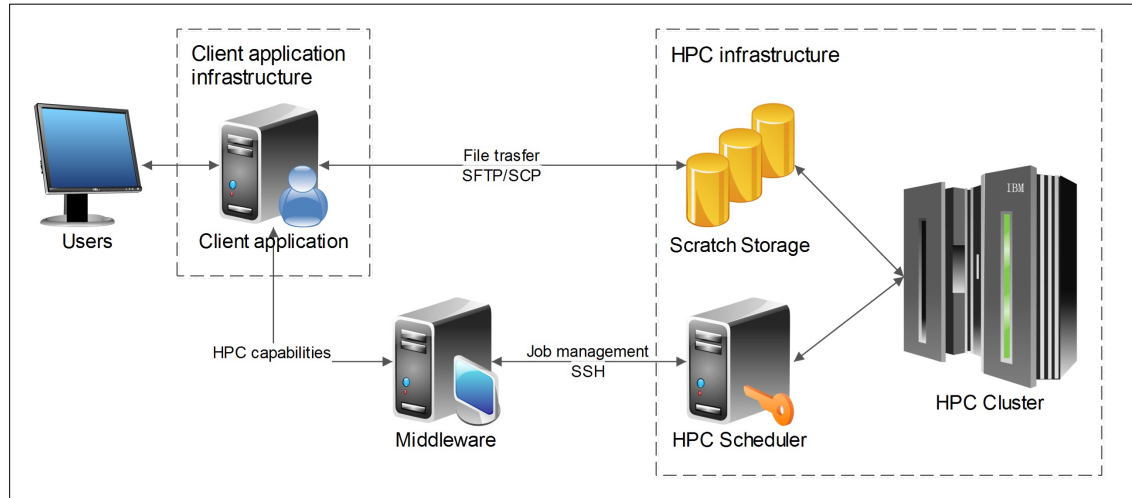
## Predikce zpoždění vlaků



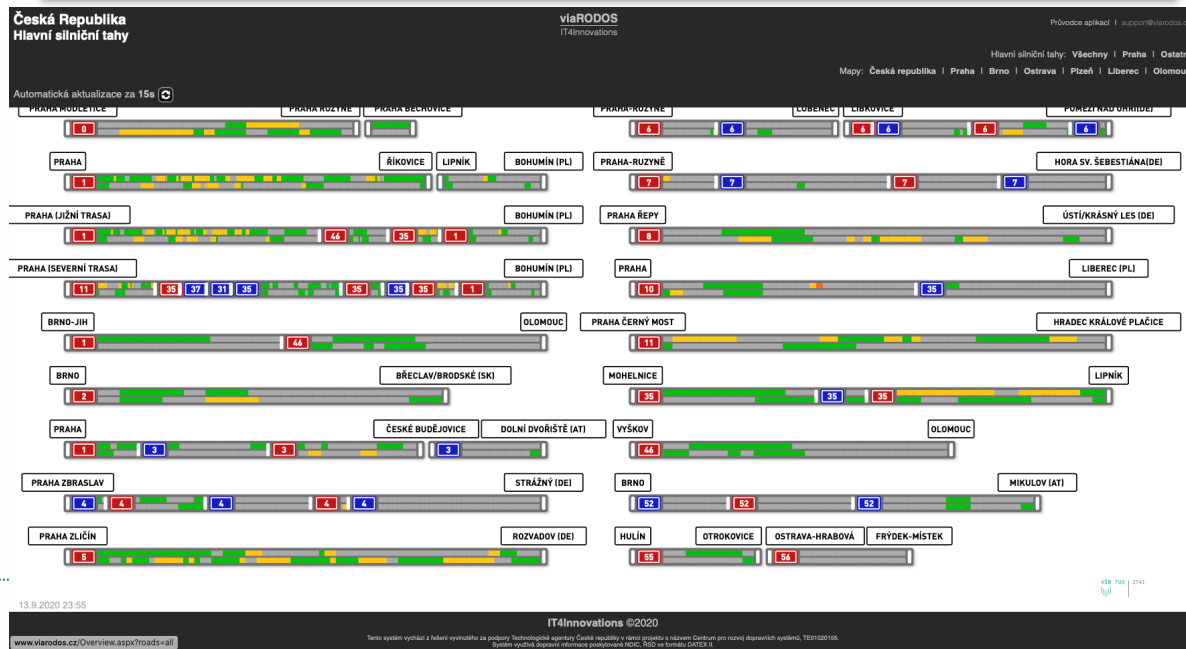
UMĚLÁ INTELIGENCE

# IT4Innovations - Vývoj inteligentních systémů

High-End Application Execution Middleware: <https://heappe.eu/web/>



HPC-ready platform for Massively Parallel Sequencing



Urban Thematic Exploitation Platform



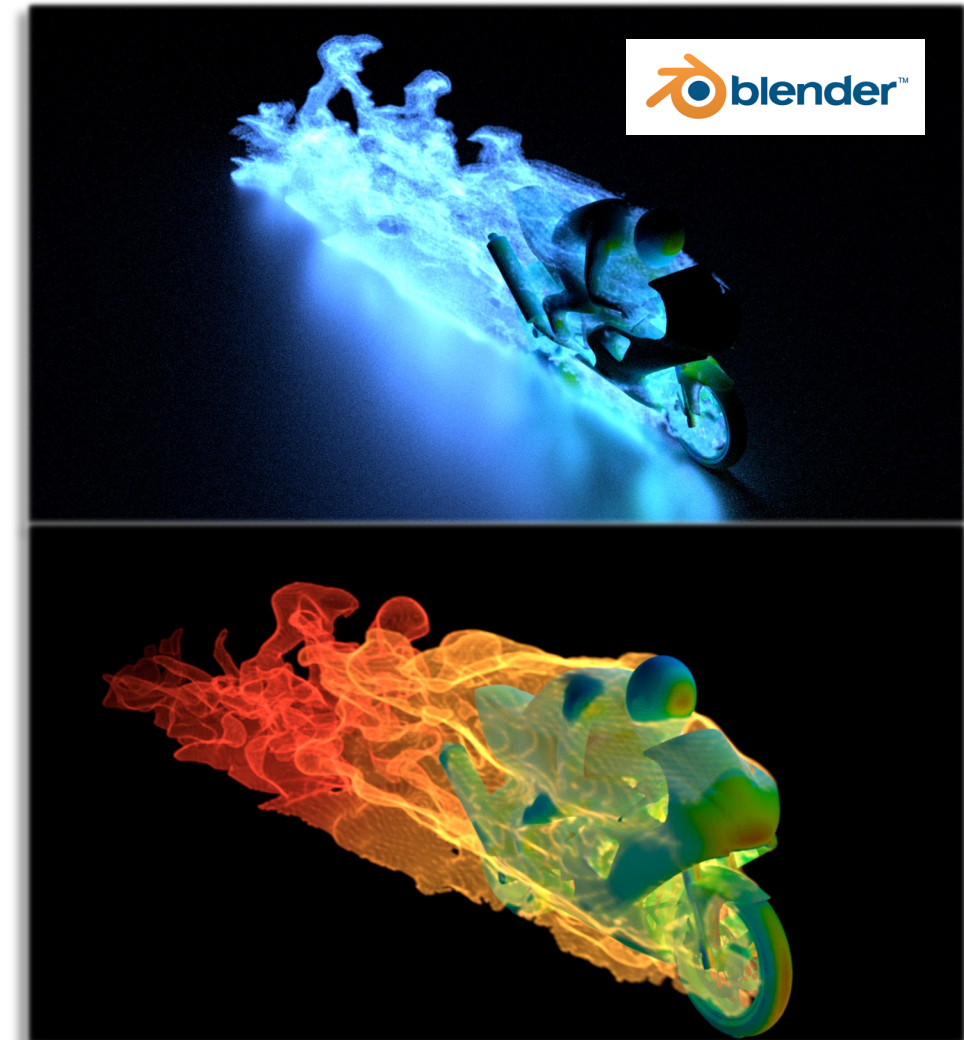
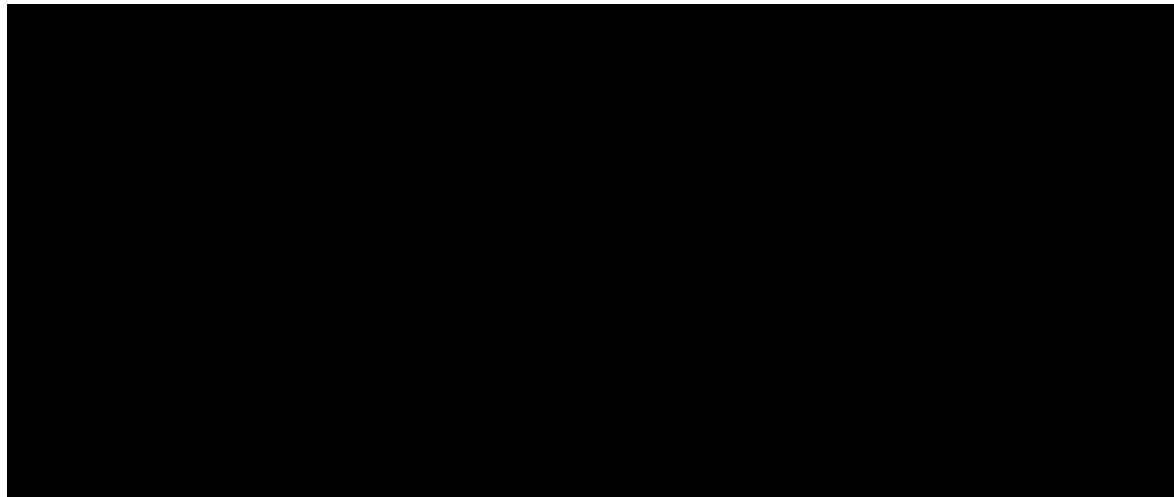
# IT4Innovations - Rendering and visualization

VSB TECHNICAL  
UNIVERSITY  
OF OSTRAVA

IT4INNOVATIONS  
NATIONAL SUPERCOMPUTING  
CENTER

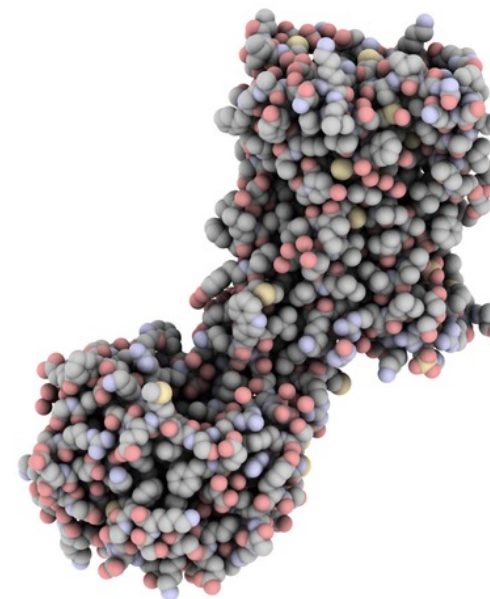
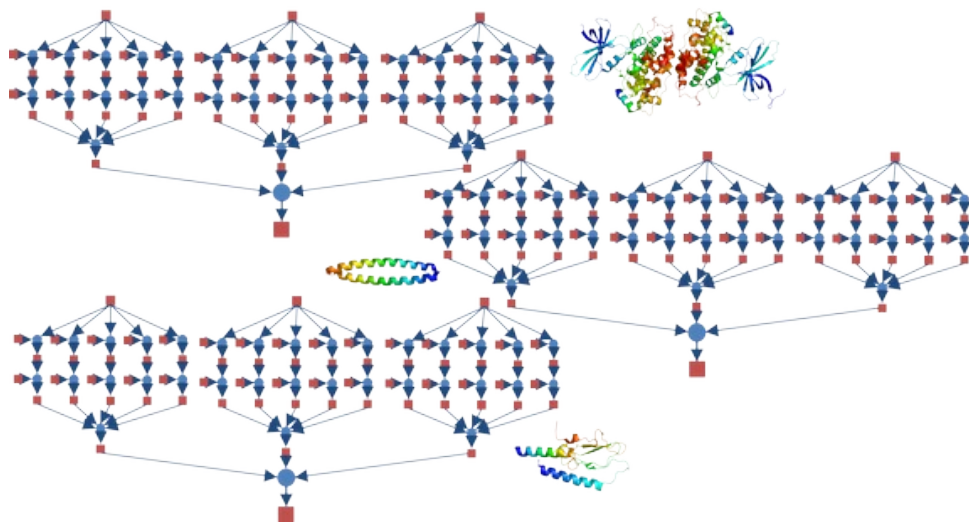
Rendering-as-a-Service Platforma pro superpočítače založený na Blenderu

Vědecké vizualizace pomocí Blender a COVISE



“The Blender Institute conducts open/free software projects and makes open/free movies shared as free culture. National Supercomputing Center IT4Innovations in the Czech Republic is a partner that helped us realise that and it has been appreciated by millions.” - *Ton Roosendaal*

## Informační technologie & farmaceutický průmysl

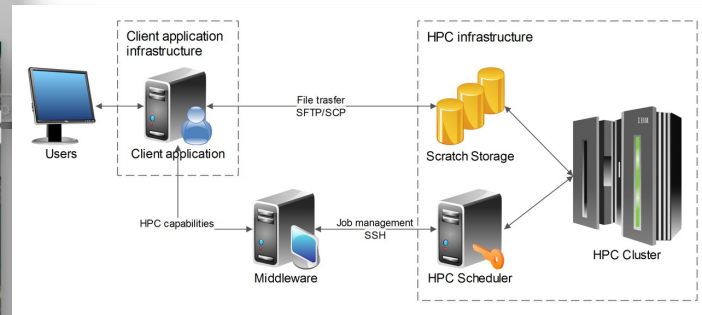
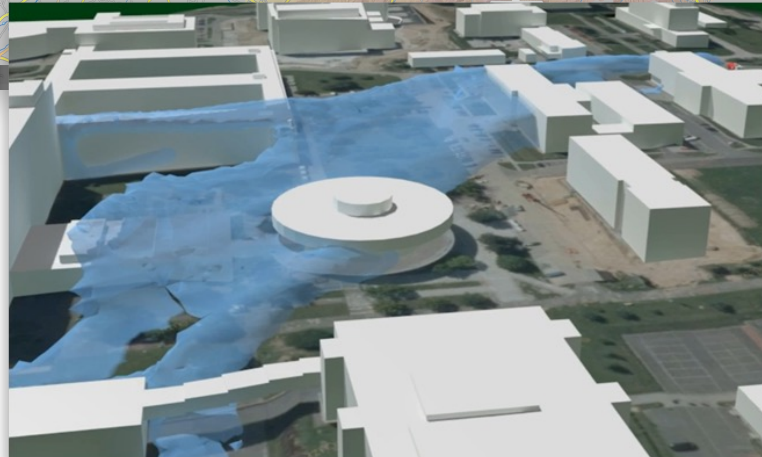
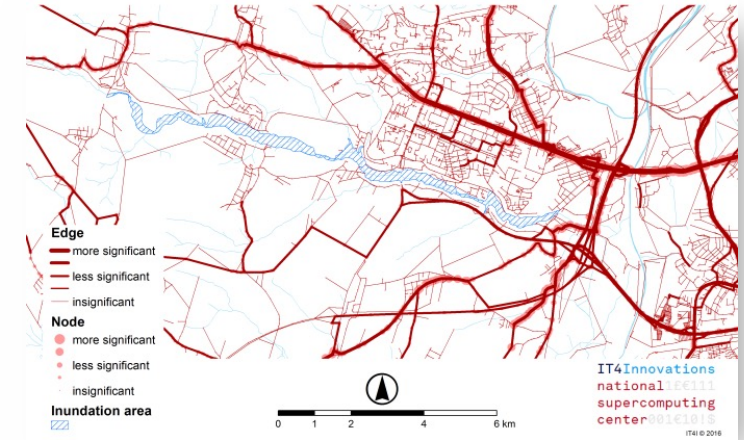
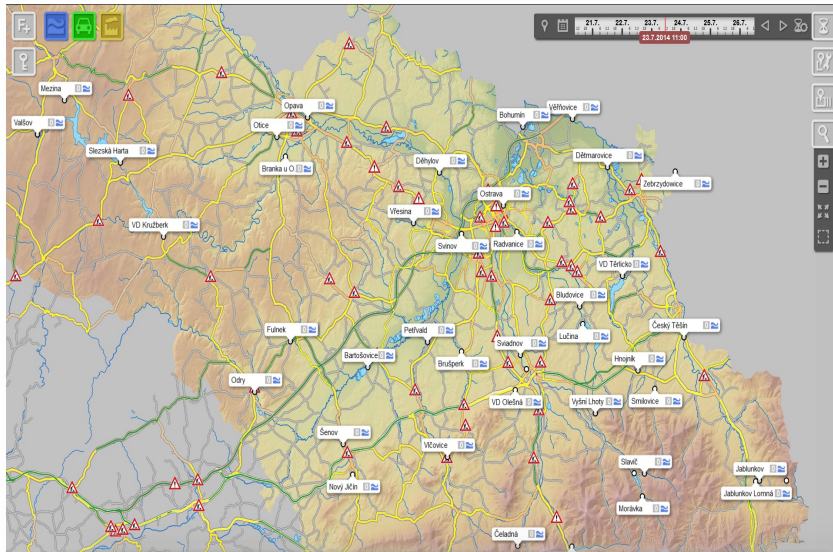


Výkonnostní testy prokázaly, že Hyperloom umožňuje spouštění plánů obsahujících stovky tisíc úloh s dopředu neznámou délkou běhu na desítkách až stovkách výpočetních uzlů. Tento obecný nástroj navíc nachází další uplatnění i v jiných odvětvích průmyslu.

**Hyperloom**

## Vývoj nových léčiv

# IT4Innovations – Monitoring a modelování dopravy a dalších jevů

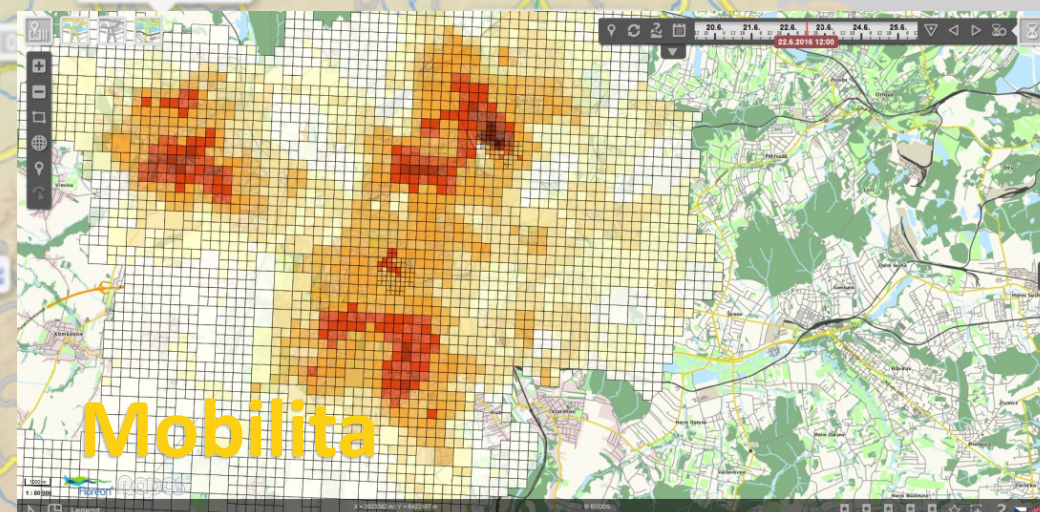
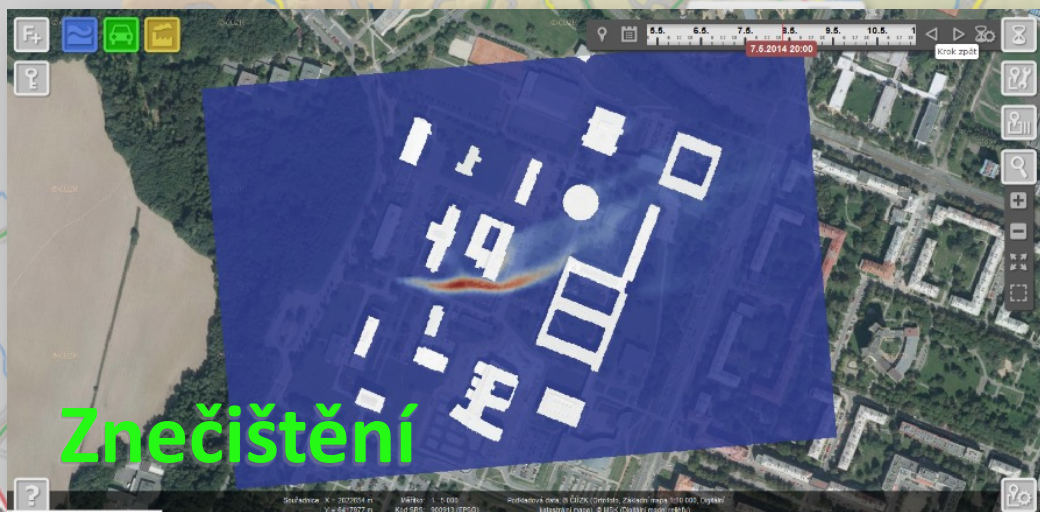
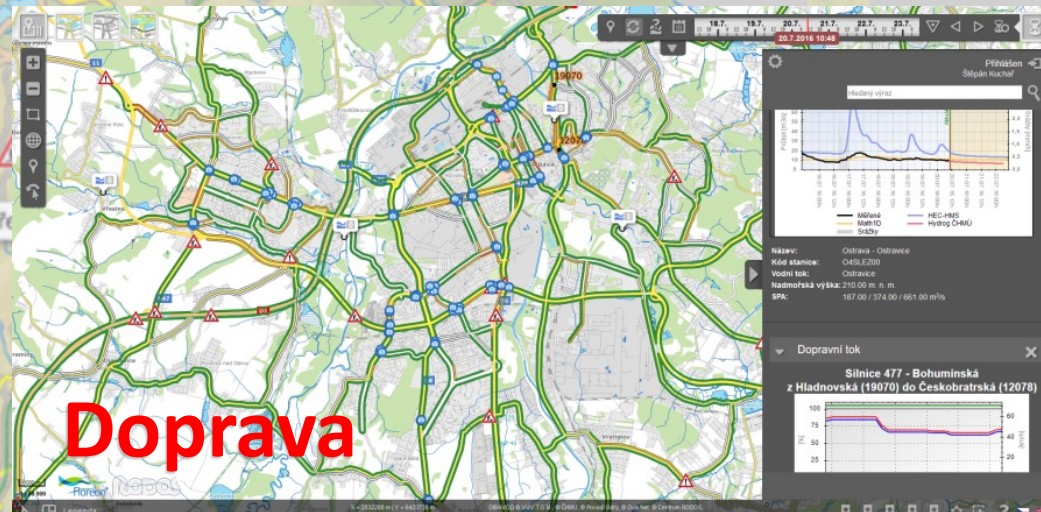


HPC as a Service



High-End Application Execution Middleware





# IT4Innovations – Monitoring dopravy



Map interface showing a network of roads with color-coded traffic status (green, yellow, red) and various icons for navigation and monitoring. The map includes a scale bar (1000m, 80000) and a legend.

24.09. 25.09. 26.09. 27.09. 28.09. 29.09.  
26.9.2017 13:37

Přihlášen(á): Test Test1  
Hledaný výraz

Kamery (ova.net)



Opavská x Martinovská (4)  
Aktuální dopravní situace - směr Centrum (zdroj: OvaNet)

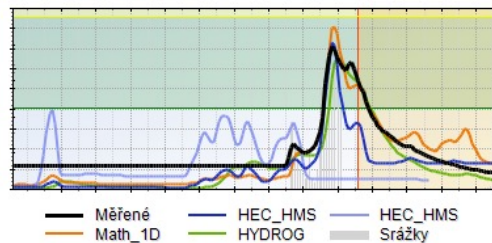


IT4Innovations

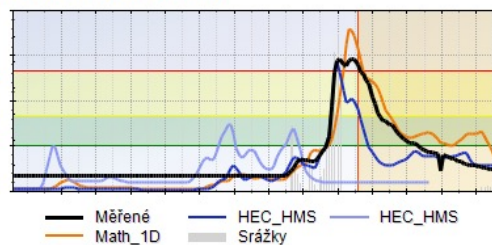
# IT4Innovations – Hydrologické modelování



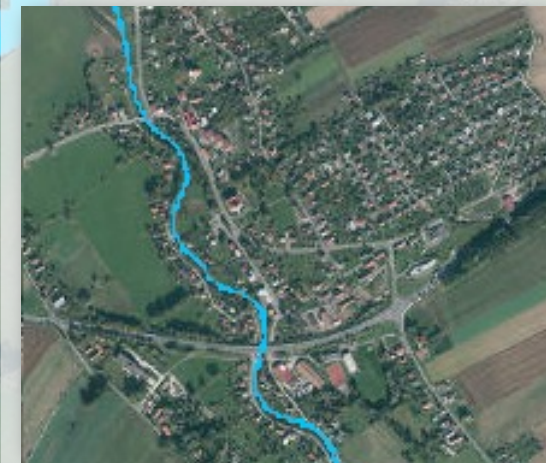
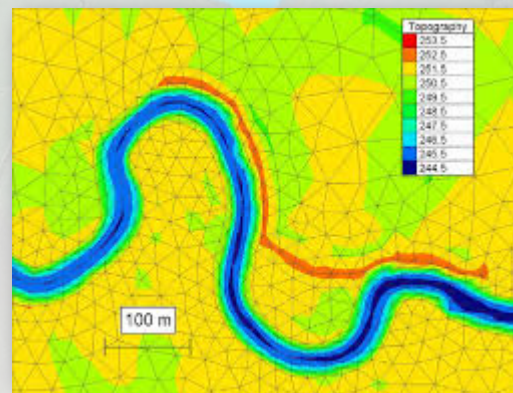
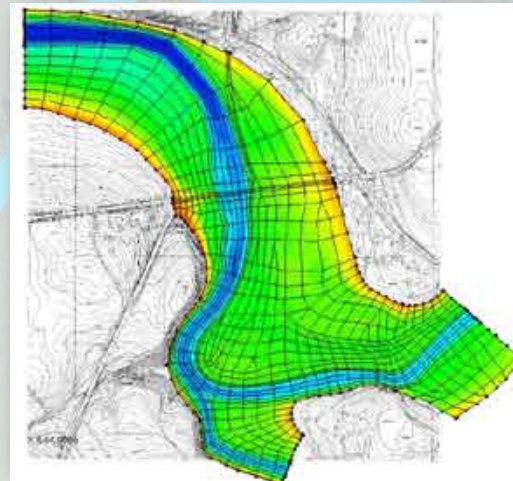
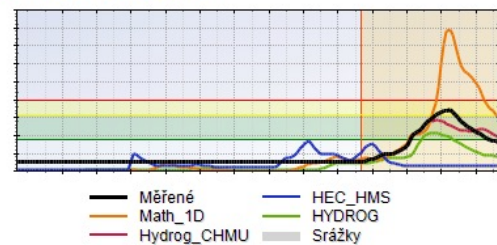
Jablunkov (O4296000)



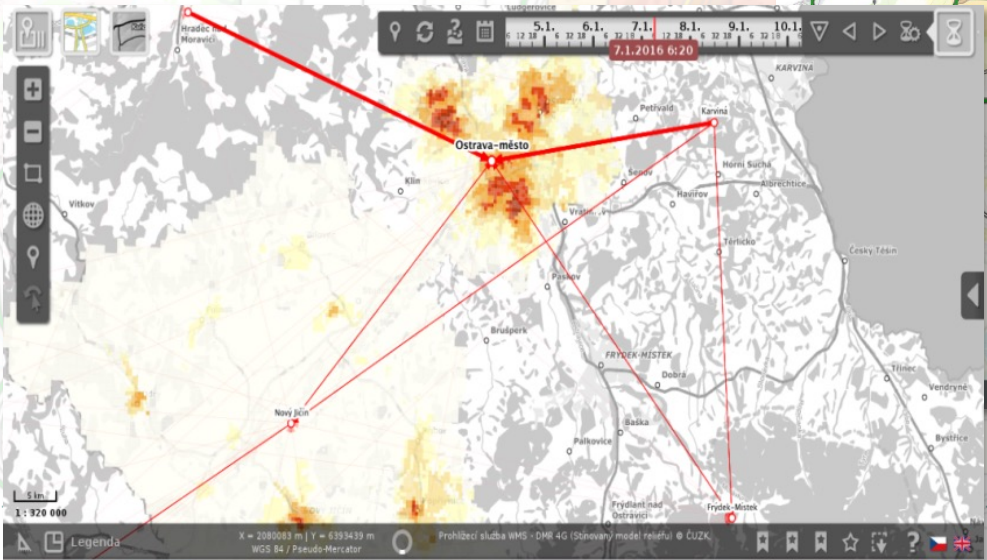
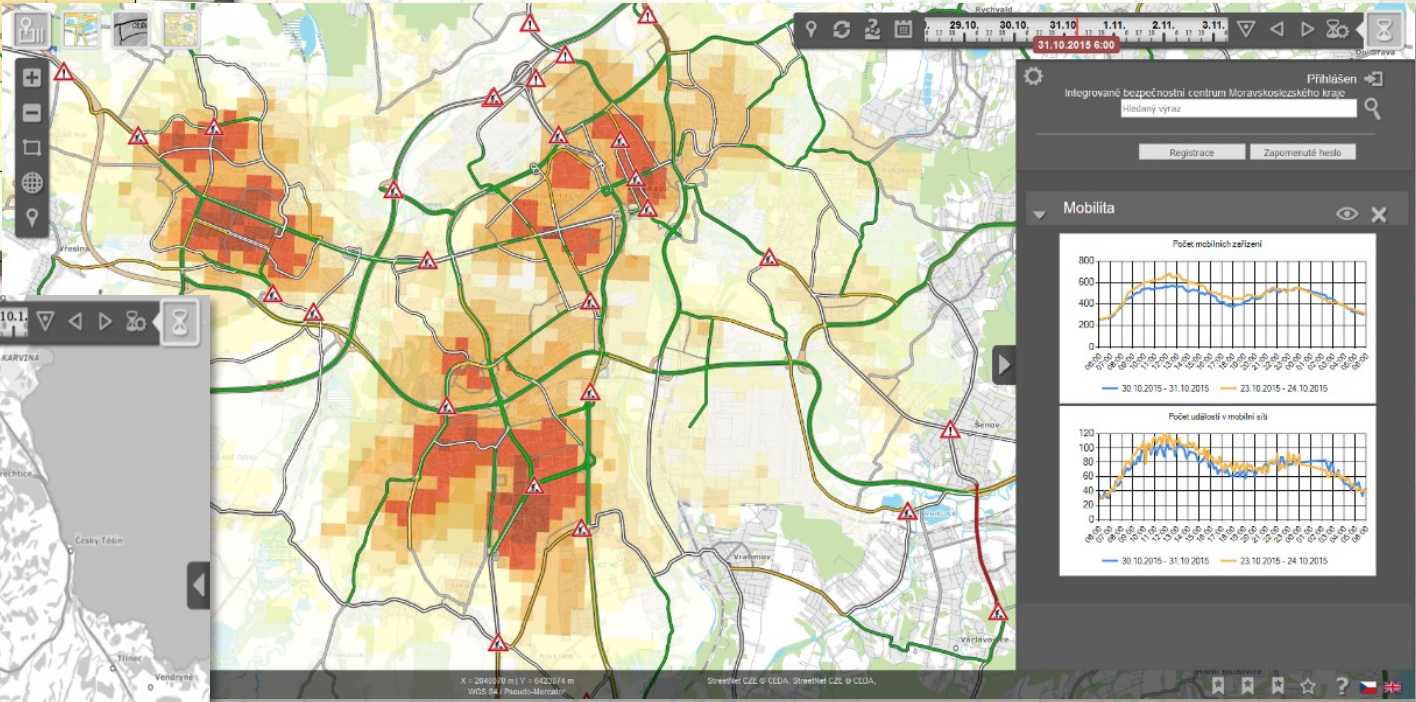
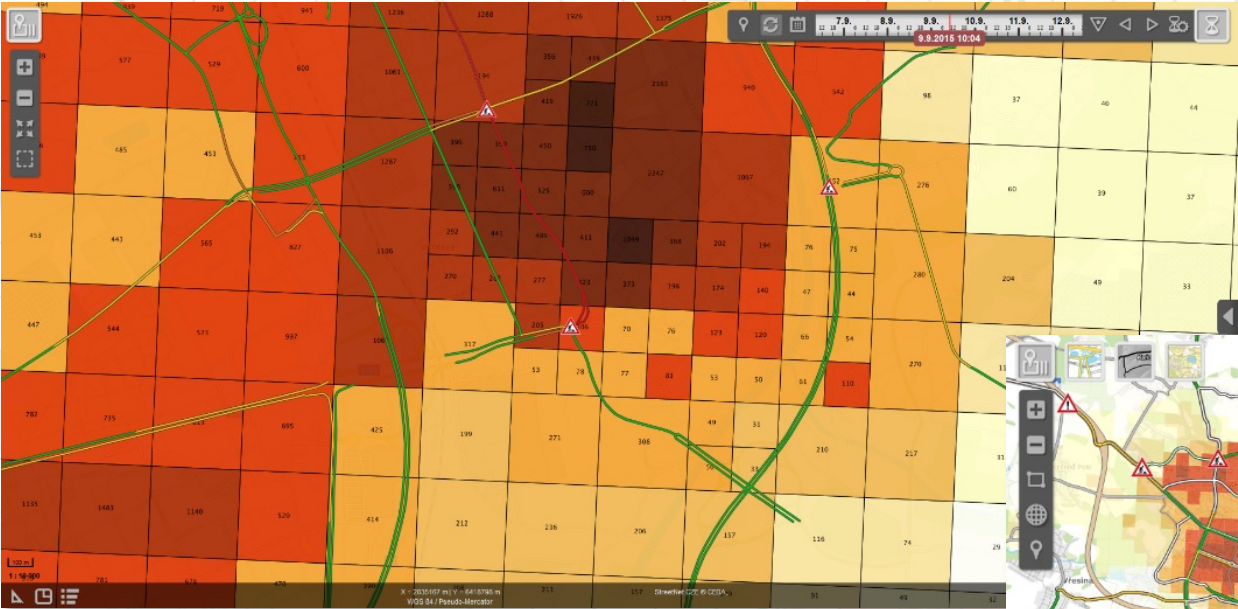
Český Těšín (O4299000)



Věřňovice (O4303000)



# IT4Innovations - Mistrovství světa v ledním hokeji 2015



# IT4Innovations – Mezinárodní projekty

## ICT & HPC

**LEXIS**

**READEX**

Runtime Exploitation of Application Dynamism  
for Energy-efficient eXascale computing

**ANTAR**  <sup>10<sup>18</sup></sup>

**ExaQUte**

Exascale Quantification of Uncertainties for  
Technology and Science Simulation

**HARPA**

Harnessing Performance Variability



## Industry support

Cloudi   
Facturing



sesame  net

SUPERCOMPUTING EXPERTISE FOR  
SMALL & MEDIUM ENTERPRISE NETWORK

## Education



**IPROCOM**

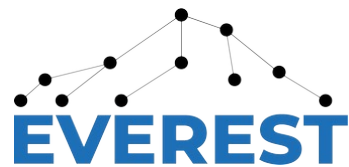
## Infrastructure





# IT4Innovations – Mezinárodní projekty

ICT & HPC



Industry support



Education

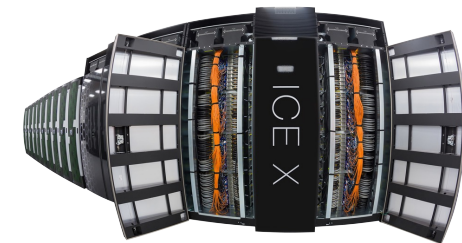


Infrastructure



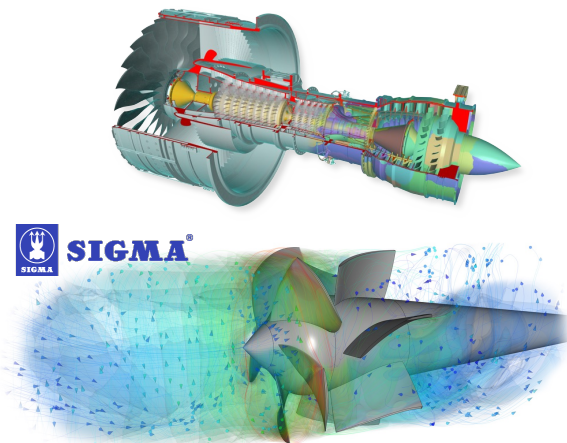


**HPC & HPDA infrastruktura & služby**  
Nejvýkonnější veřejná superpočítačová infrastruktura v České republice  
**Digitální Inovační Hub Ostrava – IT4I & MSIC**



Poskytovatel infrastruktury ★ HPC program ★ Výzkumná spolupráce ★ Kurzy & vzdělávání

Pokročilé výpočty  
a simulace



Virtuální prototypy  
Digitální dvojčata



Big data  
Strojové učení



Vizualizace  
Virtuální realita



# IT4Innovations – Spolupráce s průmyslem



<https://www.it4i.cz/spoluprace-s-prumyslem/priklady-spoluprace>

---

# Děkuji za pozornost

Ing. Kateřina Slaninová, Ph.D.



Assistant Professor  
Department of Informatics and Mathematics  
School of Business Administration in Karviná  
Silesian University in Opava  
slaninova@opf.slu.cz  
www.opf.slu.cz



Deputy head of Advanced Data Analysis and Simulations lab  
IT4Innovations National Supercomputing Center  
VSB – Technical University of Ostrava  
katerina.slaninova@vsb.cz  
www.it4i.cz

---