



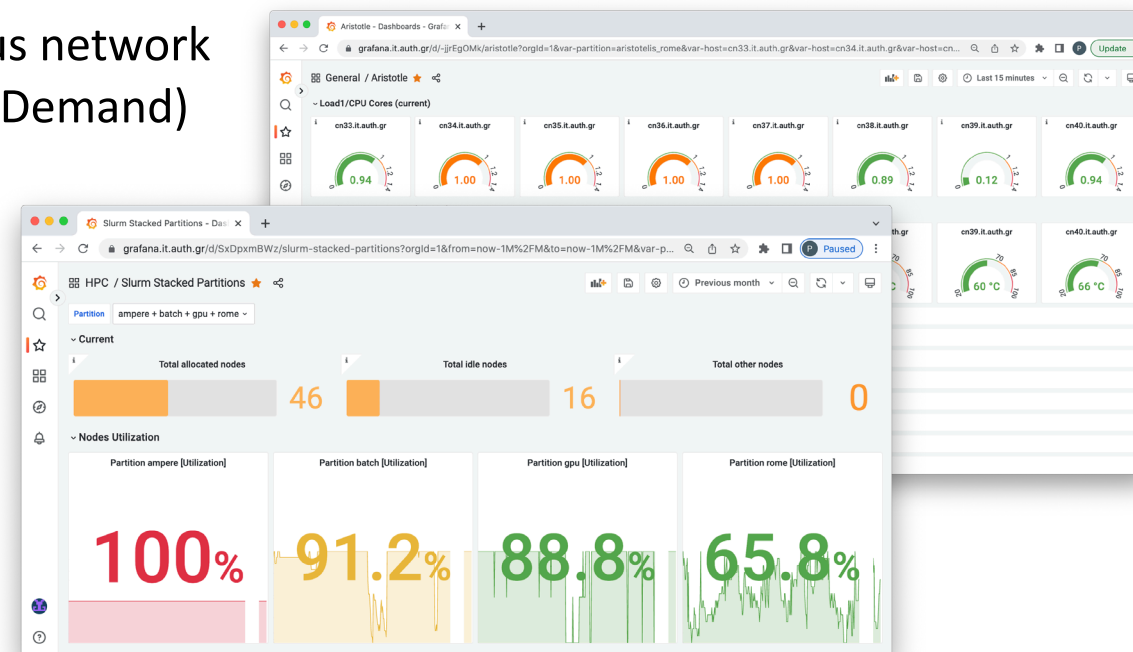
Η υπερυπολογιστική συστοιχία
“Αριστοτέλης” του ΑΠΘ

Ιδρυματική συστοιχία HPC «Αριστοτέλης»



ANSIBLE

- Σε λειτουργία από το 2018
 - Scheduler: Slurm
 - Λειτουργικό σύστημα: CentOS 7/8
 - Package manager: Yum/dnf (για το OS) και spack για HPC εφαρμογές
 - Επιλογή λογισμικού: Hierarchical modulefiles (Lmod)
 - Βάση χρηστών: LDAP (ενεργά μέλη ΑΠΘ)
 - Πρόσβαση ssh/sftp μέσα από το AUTH Campus network
 - Πρόσβαση με https από το Internet (Open OnDemand)
 - Διαχείριση υποδομής: Ansible playbooks
 - 52 physical machines
 - 15 virtual machines
 - Ωφέλιμοι πόροι:
 - +3K CPU Cores
 - +60K CUDA Cores
 - +10TB RAM



Ομαδοποίηση πόρων ανά slurm partition

Partition	Περιγραφή
testing	2 “αρχαίοι” κόμβοι (Intel Xeon E5405) για μικρές/δοκιμαστικές εργασίες
htc	4 Multicore κόμβοι (AMD Opteron – 4 sockets, 16 Cores/socket) κατάλληλοι για σειριακές & παραμετρικές εργασίες. Το όνομα προκύπτει από τον όρο “High Throughput Computing”.
batch	18 κόμβοι Intel Xeon γενιάς Broadwell (2 sockets, 10 Cores/socket) κατάλληλοι για παράλληλα (mpi) workloads. Οι κόμβοι διασυνδέονται με InfiniBand δίκτυο FDR (εύρους 14Gbps).
gpu	2 κόμβοι Intel Xeon γενιάς Broadwell εφοδιασμένοι με μία GPU κάρτα NVIDIA Tesla P100 (γενιά Pascal) έκαστος. Οι κόμβοι διασυνδέονται με InfiniBand δίκτυο FDR (εύρους 14Gbps)
rome	17 (15+2) κόμβοι AMD EPYC γενιάς Rome (2 sockets, 64 Cores/socket) κατάλληλοι για παράλληλα (mpi) workloads. Οι κόμβοι διασυνδέονται με InfiniBand δίκτυο HDR (εύρους 200Gbps).
ampere	1 κόμβος NVIDIA DGX A100 εφοδιασμένος με οχτώ κάρτες A100 (γενιά Ampere) κατάλληλος για την υποστήριξη AI workloads.
ondemand	12 VMs εφοδιασμένοι με κάρτες γραφικών RTX6000 (vGPU) κατάλληλοι για παραγωγή γραφικών και γενικά για γραφικές επιστημονικές εφαρμογές.

More info: <https://hpc.it.auth.gr/nodes-summary/>

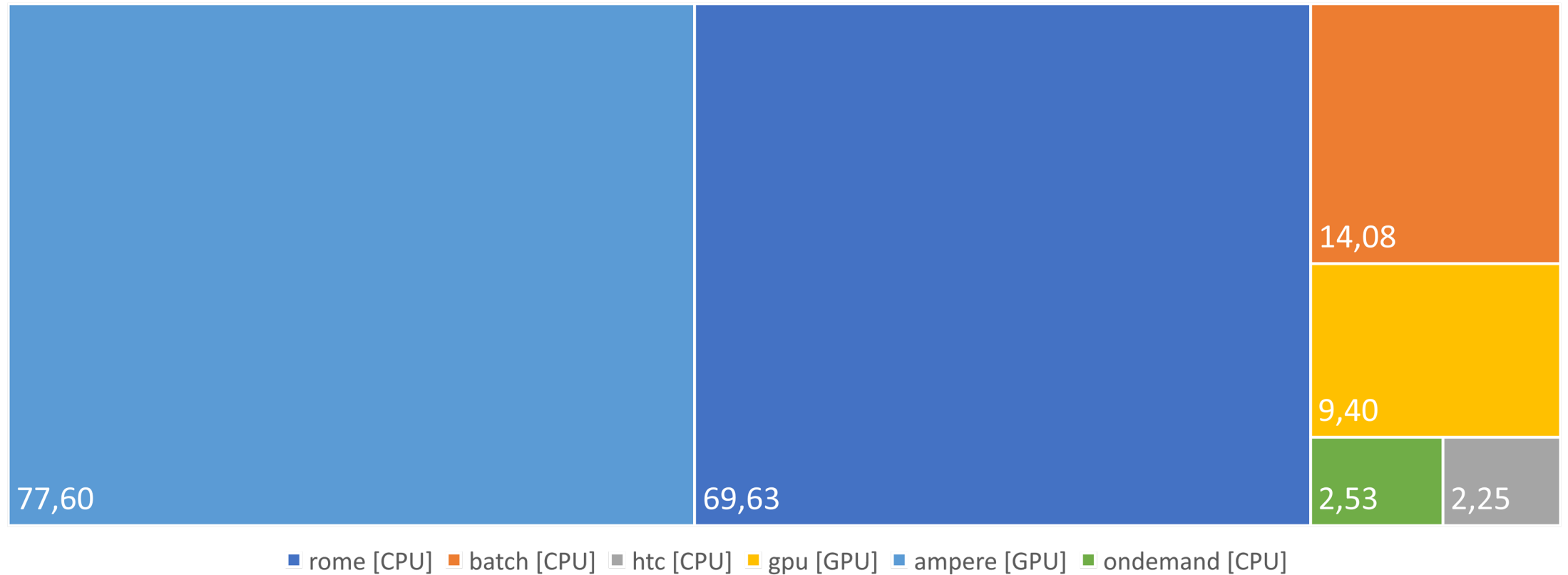
Ομαδοποίηση πόρων ανά slurm partition

Partition	# of nodes	# CPU Cores (per node)	# CPU Cores (total)	# CUDA Cores (per node)	# CUDA Cores (total)	RAM [GB] (per node)	RAM [GB] (total)	Interconnect (bandwidth)
testing	2	8	16	-	-	16	32	1Gbps
htc	4	64	256	-	-	128 or 256	768	1Gbps
batch	18	20	360	-	-	128	2304	14Gbps
gpu	2	20	40	3584	7168	128	256	14Gbps
rome	17	128	2176	-	-	256 or 1024	5888	200Gbps
ampere	1	128	128	6912	55296	1024	1024	200Gbps
ondemand	12	12	144	1152	13824	48	576	10Gbps

More info: <https://hpc.it.auth.gr/nodes-summary/>

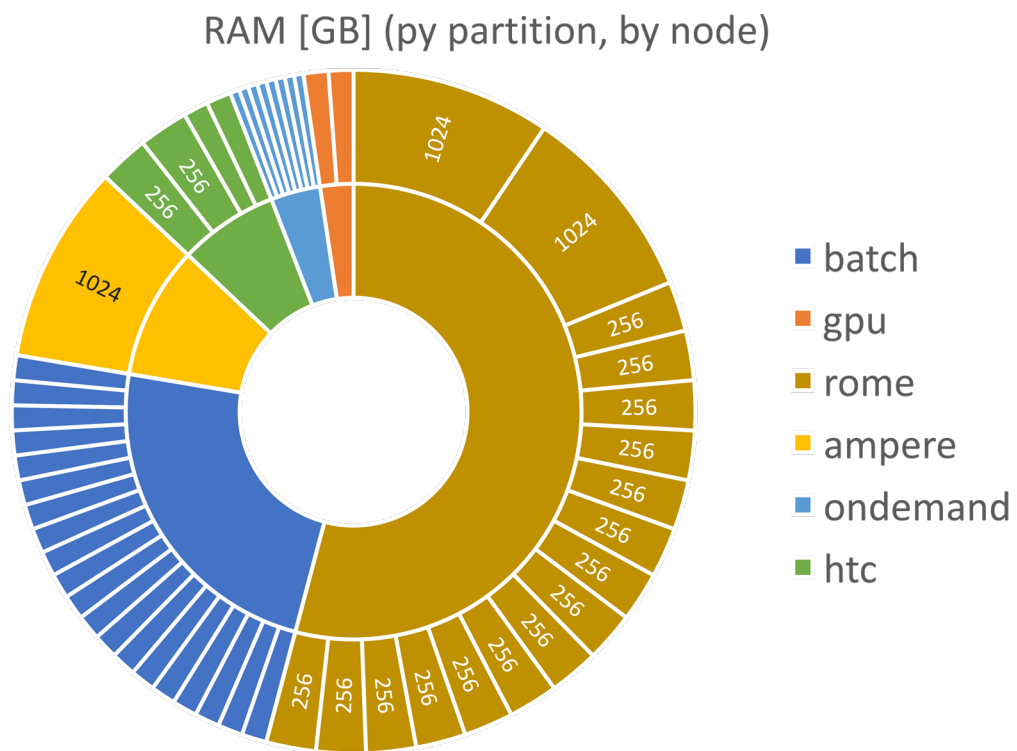
Θεωρητικό μέγιστο performance (ανά ουρά)

Theoretical Peak TFLOPS [Double Precision Arithmetic]



Κατανομή μνήμης RAM (ανά partition)

- MotherBoard

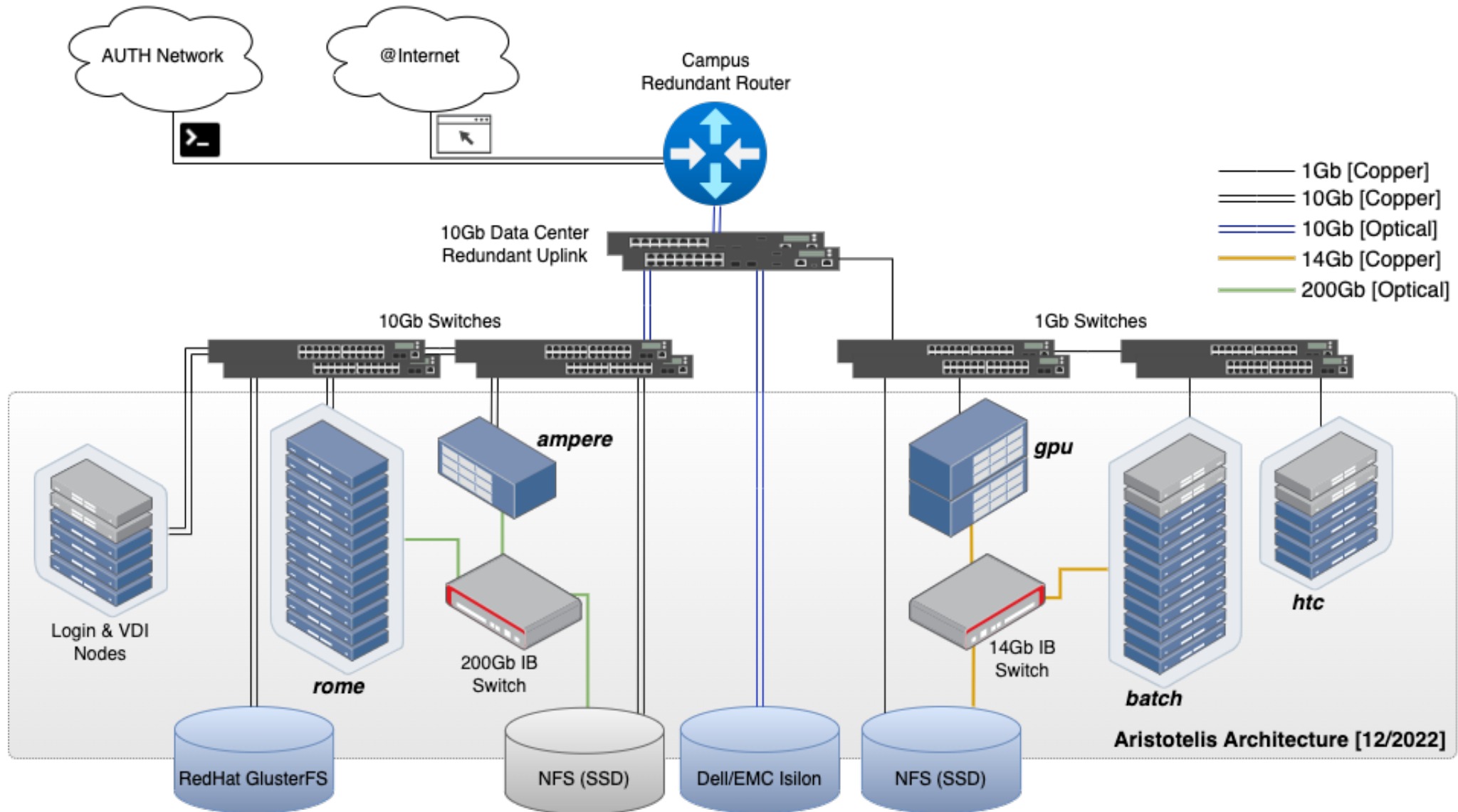


- GPU

GPU RAM [GB] (by partition, by GPU)

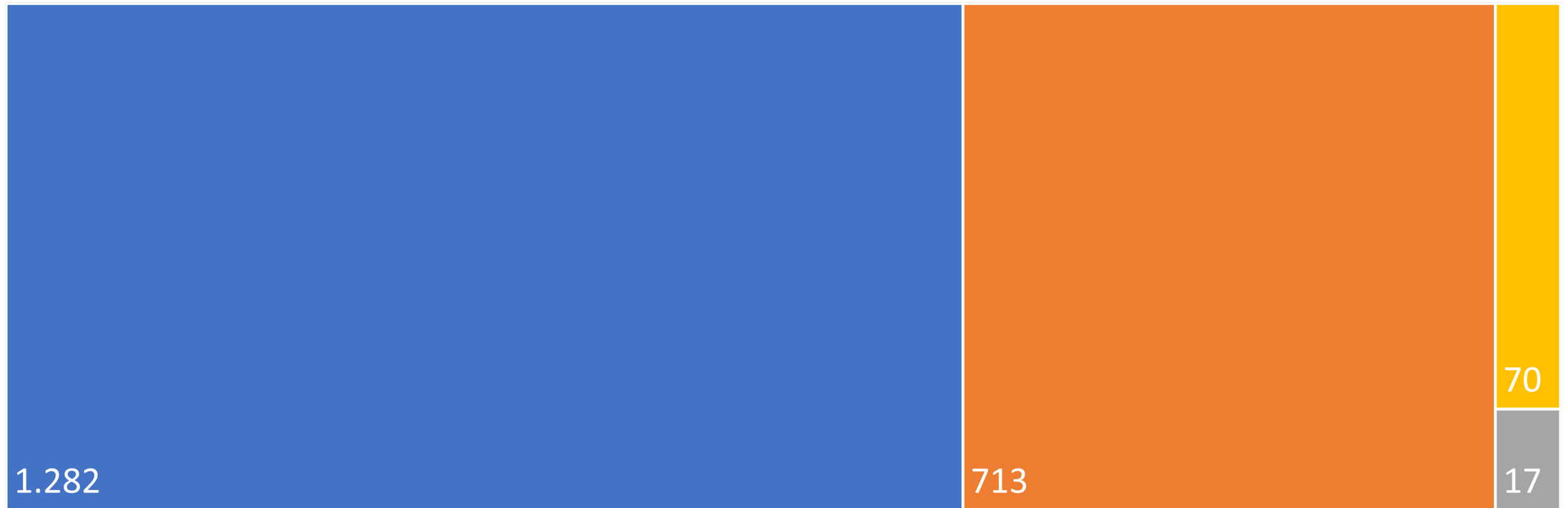


Αρχιτεκτονική υποδομής «Αριστοτέλης»



Storage usable sizes

Usable Storage Sizes [TB]



■ Dell/EMC Isilon ■ RedHat GlusterFS ■ NFS (SSD/FDR) ■ NFS (SSD/HDR)

Αποθηκευτικοί χώροι ανά χρήστη και ομάδα

- “By default” 5GB storage quota ανά λογαριασμό
 - επεκτάσιμο μέχρι και σε 200GB κατόπιν αιτήματος με email
- Για περισσότερο χώρο δίνεται δυνατότητα για παροχή group storage
 - Αίτηση από ερευνητικώς υπεύθυνο ομάδας
 - Επιλογή ανάμεσα σε 1TB SSD ή 2B HDD
- Επιπλέον πρόσθετος χώρος με προσκόμιση δίσκων κατάλληλων προδιαγραφών
 - Επιστροφή του 70% του ωφέλιμου χώρου (RAID, hot spare, κτλ)

Υπολογιστικοί πόροι ανά χρήστη και ομάδα

- “By default” ~10.000 Corehours quota ανά μήνα ανά λογαριασμό
 - επεκτάσιμο μέχρι και σε ~100.000 κατόπιν αιτήματος με email
- Για περισσότερο CPU Time δίνεται δυνατότητα για παροχή project
 - Αίτηση από ερευνητικώς υπεύθυνο ομάδας
- Επιπλέον CPU Time με προσκόμιση servers κατάλληλων προδιαγραφών
 - Απαιτείται να έχει προηγηθεί επικοινωνία με HPC helpdesk για συγγραφή προδιαγραφών
 - Ακολουθεί ένταξη του εξοπλισμού σε νέα partitions
 - Πρόσβαση κατά προτεραιότητα ή κατά αποκλειστικότητα για συμφωνημένο χρονικό διάστημα
 - Δυνατότητα ένταξης ομάδας ως tenant στο δημόσιο Cloud του ΑΠΘ

Διαθέσιμα λογισμικά

- Software packages built with Spack
 - Compiler versions supported (10 gcc, 3 intel, 2 pgi and 1 nvhpc version)
 - MPI versions (27 openmpi, 2 mpich, 6 mvapich, 2 intel-mpi)
 - Linear algebra libraries (14 openblas, 7 intel-mkl, 8 netlib-scalapack and more)
 - +4000 software packages built (WRF, WPS, NAMMD, CP2K, Quantum Espresso, GROMACS, VASP, OpenFOAM and many many more)
- Prebuilt packages (Matlab, Mathematica, ANSYS, Abaqus, Gaussian, GAMS, STAR-CCM, CONVERGE and more)
- Additional custom builds (lammps, STEMsalabim, CASTEP etc)

Πρόγραμμα συντηρήσεων 2023 (tentative...)

Ημερομηνία	Διάρκεια	Εργασίες
21 Φεβρουαρίου 2023	8h	Ενημερώσεις λογισμικού (OS + kernel), Ενημερώσεις firmware κόμβων ουρών rome, ampere και batch, ενημερώσεις λογισμικού σε storage servers (GlusterFS και NFS)
18 25 Απριλίου 2023	4h	
20 Ιουνίου 2023	8h	
15 22 Αυγούστου 2023	4h	
17 Οκτωβρίου 2023	8h	
19 Δεκεμβρίου 2023	4h	

More info: <https://hpc.it.auth.gr/maintenance/>

Πρόγραμμα συναντήσεων (tentative...)

Ημερομηνία	Τίτλος	Περιγραφή	Διάρκεια
Πέμπτη, 4 Μαΐου 2023 Τετάρτη, 5 Απριλίου 2023	Εισαγωγικό σεμινάριο χρήσης υποδομής HPC «Αριστοτέλης»	Εισαγωγική παρουσίαση υποδομής και υπηρεσιών, παραδείγματα χρήσης και hands-on session. (Συμμετοχές κατόπιν registration page. Αναμετάδοση από zoom)	4h
Πέμπτη, 13 Ιουλίου 2023	Συνάντηση χρηστών HPC	Νεότερα υποδομών, μετρικές χρήσης, σχεδιασμός, Q&A. (Αναμετάδοση από zoom)	2h
Πέμπτη, 2 Νοεμβρίου 2023	Εισαγωγικό σεμινάριο χρήσης υποδομής HPC «Αριστοτέλης»	Εισαγωγική παρουσίαση υποδομής και υπηρεσιών, παραδείγματα χρήσης και hands-on session. (Συμμετοχές κατόπιν registration page. Αναμετάδοση από zoom)	4h
Πέμπτη, 21 Δεκεμβρίου 2023	Συνάντηση χρηστών HPC	Νεότερα υποδομών, μετρικές χρήσης, σχεδιασμός, Q&A. (Αναμετάδοση από zoom)	2h