



# Szegedi mini-HPC csoport - az első három év

*Fekete A. Zoltán*

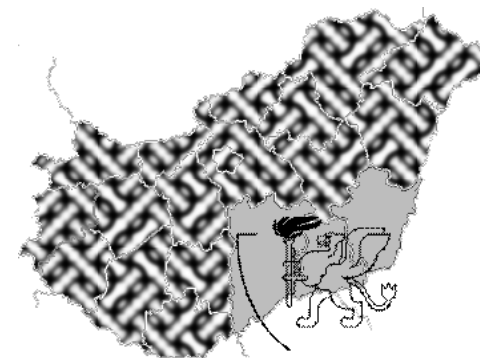
*admin@hpc.u-szeged.hu*

*<http://ZAF.has.it>*

---

Σ HPC  
HΨ Szeged

hpc.inf.hu





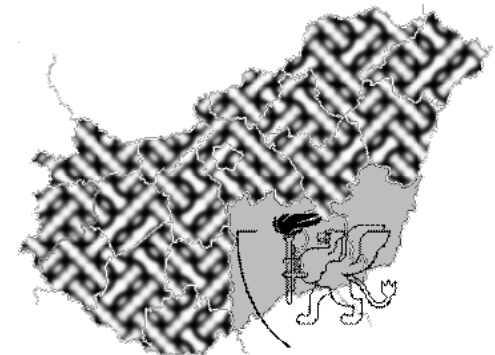
# Előadás menete

- Múlt: hogyan lőn HPC-Szeged csoport
  - (és mi is az)?
- Jelen: hogyan működünk
- Jövendő: hogyan tovább?
  - Milyen tapasztalatokat hasznosítsunk?
  - Milyen gyakorlatot változtassunk?

**Fő profil:  
nagyteljesítményű infrastruktúra  
a tudományos számítások  
szolgálatában**



**Kiemelt terület: számítógépes  
kémiai alapkutató  
(lehetséges alkalmazások:  
gyógyszer-fejlesztés, biotech.,  
anyagtudomány, nanotech.)**



# Az ötlet és megvalósítása



- Hardver-beszerzés forrása: NKTH/KPI KIIF pályázat (2005->2006) infrastruktúra-fejlesztésre!
- Elméleti kémikusok (*doktori program*) „baráti társasága” a projekt mögött: tudományos alapok, alkalmazási tapasztalatok, felhasználási igények
- A finanszírozás elnyerése után: a kívánt architektúra véglegesítésére és a szállító(k) kiválasztására több-fordulós verseny-tárgyalást folytattunk a potenciális felhasználók bevonásával
- Csak a kezdeti költségre volt fedezet, intézményi háttér esetleges, működési költség *ad hoc*...

# Működési alapelvek



- Egyetemi/akadémiai (non-profit) kutatók számára szabad hozzáférés biztosítunk.
- Megközelítésünk a használat támogatásának tudományos oldalára helyezi a hangsúlyt - szemben a gyakran tapasztalható „tiszta” informatikusi megközelítéssel! (A kétfős kiszolgáló állomány alap-végzettsége természet-tudományi és nem számítógépes.)
- A lehetőségek keretein belül a felhasználók maximális szabadságára törekszünk.
- Belső és külső együttműködések kerete: „falak nélküli számítógépes laboratórium”

# Hírünk az országban (MTI 2006. május 04.)



## Szuperszámítógépet helyeztek üzembe Szegeden

- Megötszörözi [...] a Szegedi Tudományegyetemen (SZTE) folyó kutatásokhoz rendelkezésre álló számítási kapacitást ...
- A számítógépen az első időszakban neurológiai, orvos- és gyógyszerkémiiai kutatásokhoz szükséges modellezések számításait fogják elvégezni, mivel ilyen tevékenység kisebb gépeken, illetve személyi számítógépekből összeállított hálózatokon már jelenleg is folyik az egyetemen ...
- A most üzembe helyezett rendszer megteremti az alapját egy regionális szuperszámítógép-központ létrehozásának. A regionális központ kialakításához "csupán" a kapacitásokat kellene mintegy tízszeresre bővíteni, amit a közeljövőben uniós pályázati forrásokból szeretne megtenni az SZTE ...

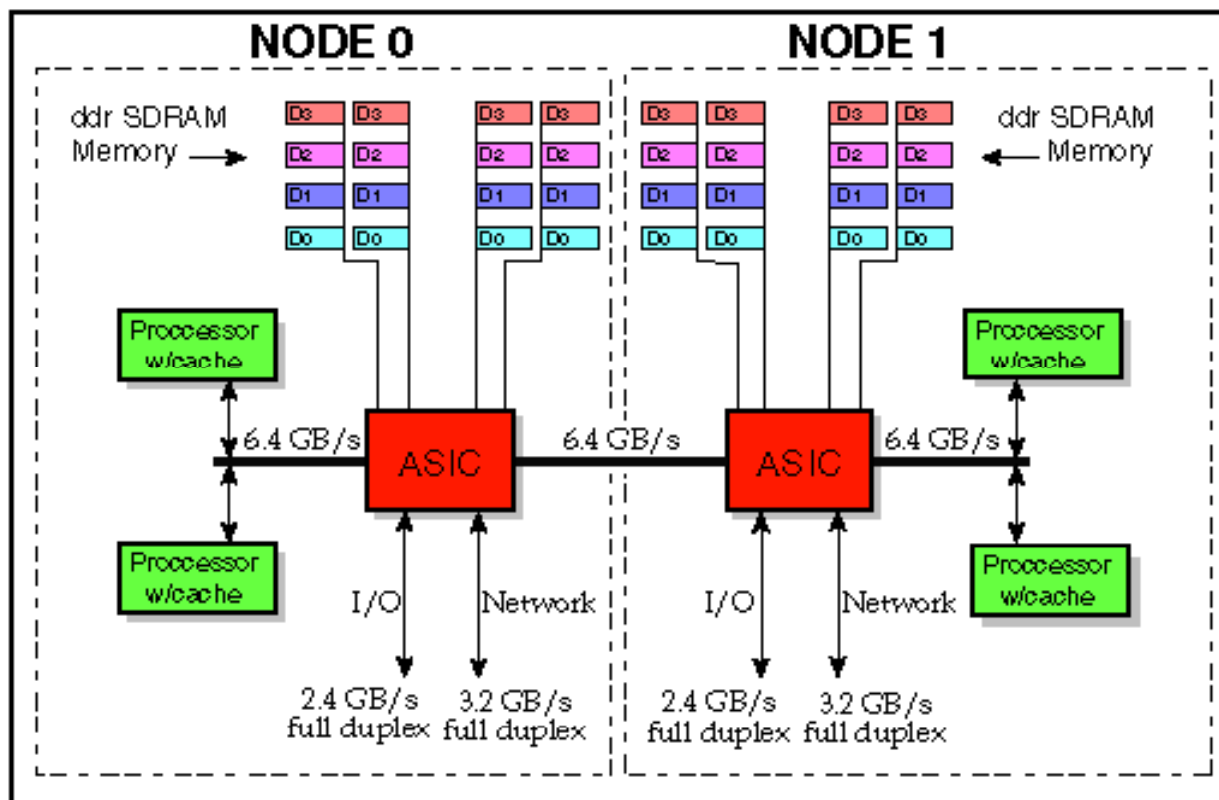
# „HPC csoport” SZTE (Szote Kht., Dél-alföldi Neurobiológia Tudásközpont)



- High Performance Computing =  
Nagy Teljesítményű Számítás  
(irány a TeraFlopok útja)!
- Nyers csúcs-kapacitás: összesen  
közel 500 GFLOPs = 1/2 TFLOPs
- Silicon Graphics Altix 3700: SMP  
(Shared Memory Parallel)  
48 Intel-Itanium CPU 1.3GHz,  
48 GB RAM, kb. 310 eFt/GFLOPs
- Fujitsu-Siemens: '1U(4cm)' klaszter  
19x2x2 AMD-Opteron CPU 1.8GHz,  
19x4 GB RAM, kb. 70 eFt/GFLOPs

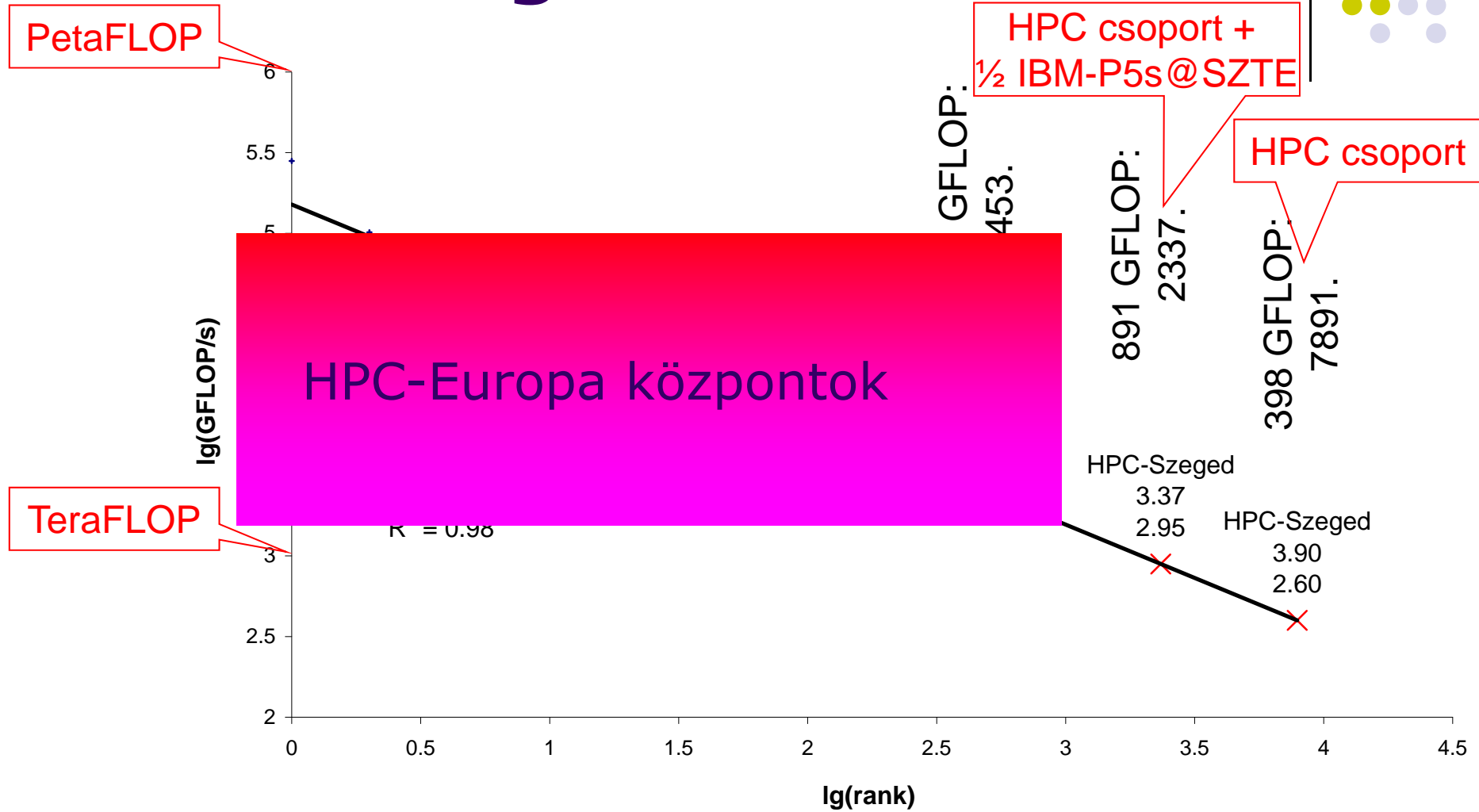
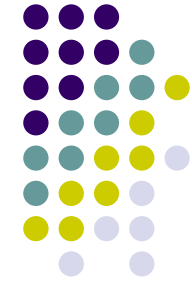


# SGI Altix 3700: NUMAflex nagyteljesítményű felépítés





# Helyünk a (TOP500) világban - 2006



Σ HPC  
HΨ Szeged

hpc. i nf. hu



# A rendszer beüzemelve

## 2006.06.07-

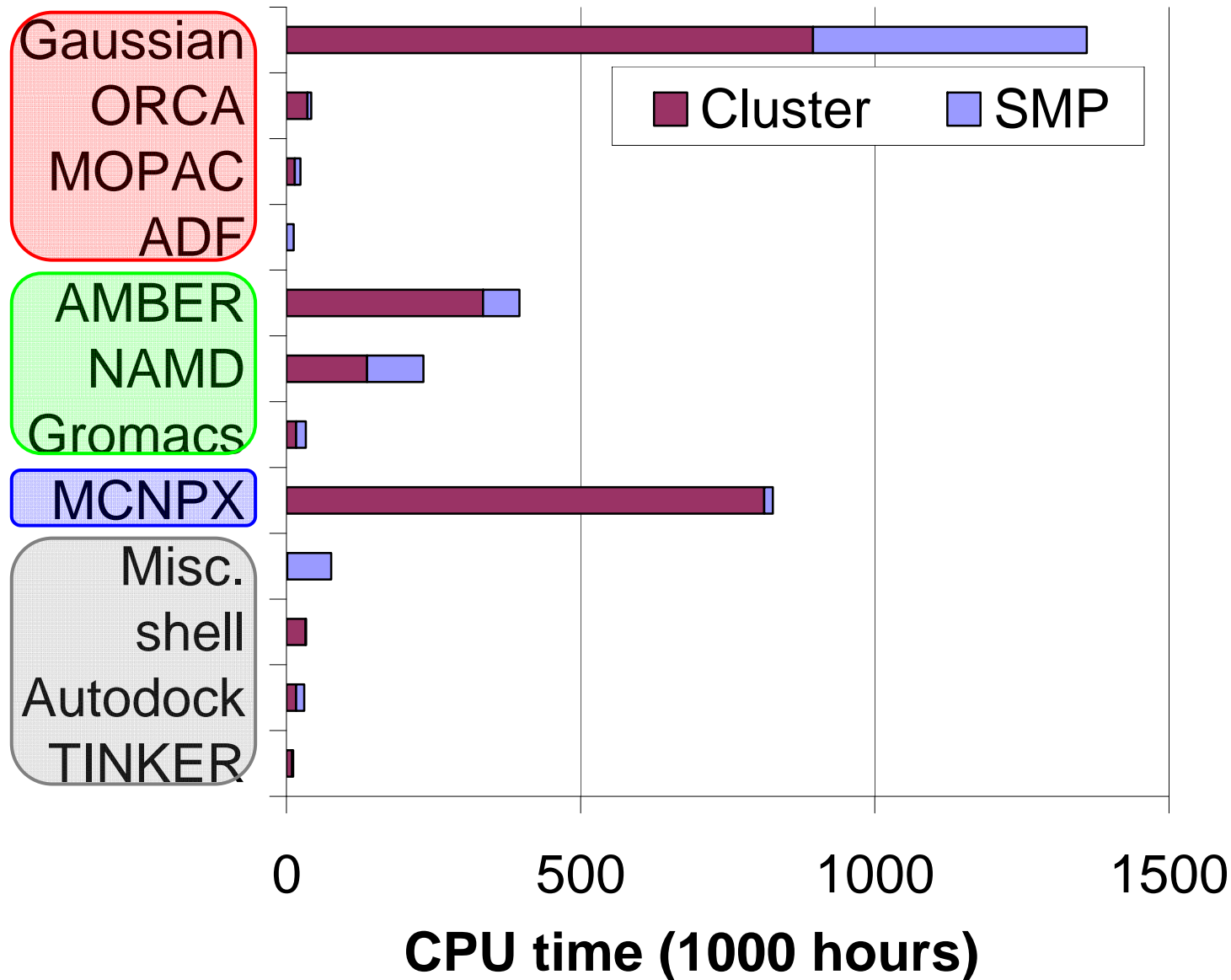
```
*** $Id: motd,v 1.3 2007/10/02 07:13:45 root Exp $ ***
* This is FSC at HPC-Szeged; the cluster has: *
* - 19 compute nodes (n241001 - n241019), each with: *
* - 2x2 Opteron 1.8GHz dual-core dual-processor CPUs, 4GB memory *
* - local /files/scratch directories, with ~130 GB capacity *
* - shared (NFS) /home directory, with ~100 GB capacity ONLY! *
* - shared (NFS) /files/export directory, with ~450 GB capacity *
*****
* Use the Sun Grid Engine (SGE) commands for jobs on cluster nodes: *
* qsub, qdel for submitting/deleting regular jobs *
* qstat, qstat -f to check if your job is running *
* qstat -u USER to check USER's jobs in the queue *
* qhost, qhost -u USER to check the nodes state and USER's job *
* quse & qshare to monitor fair share policy *
*****
```



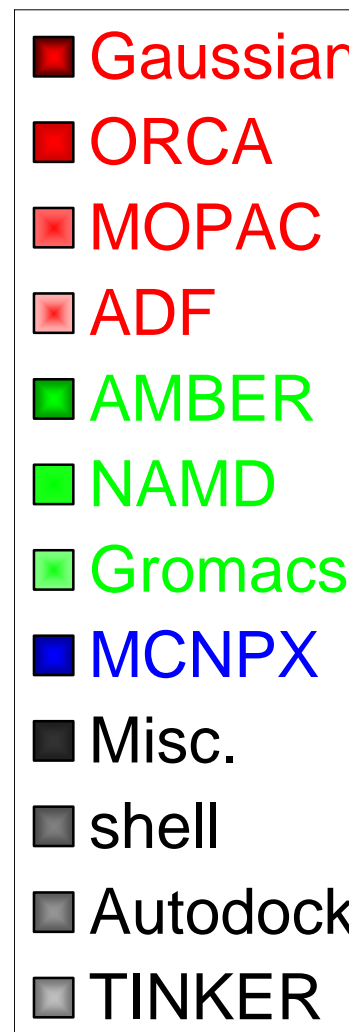
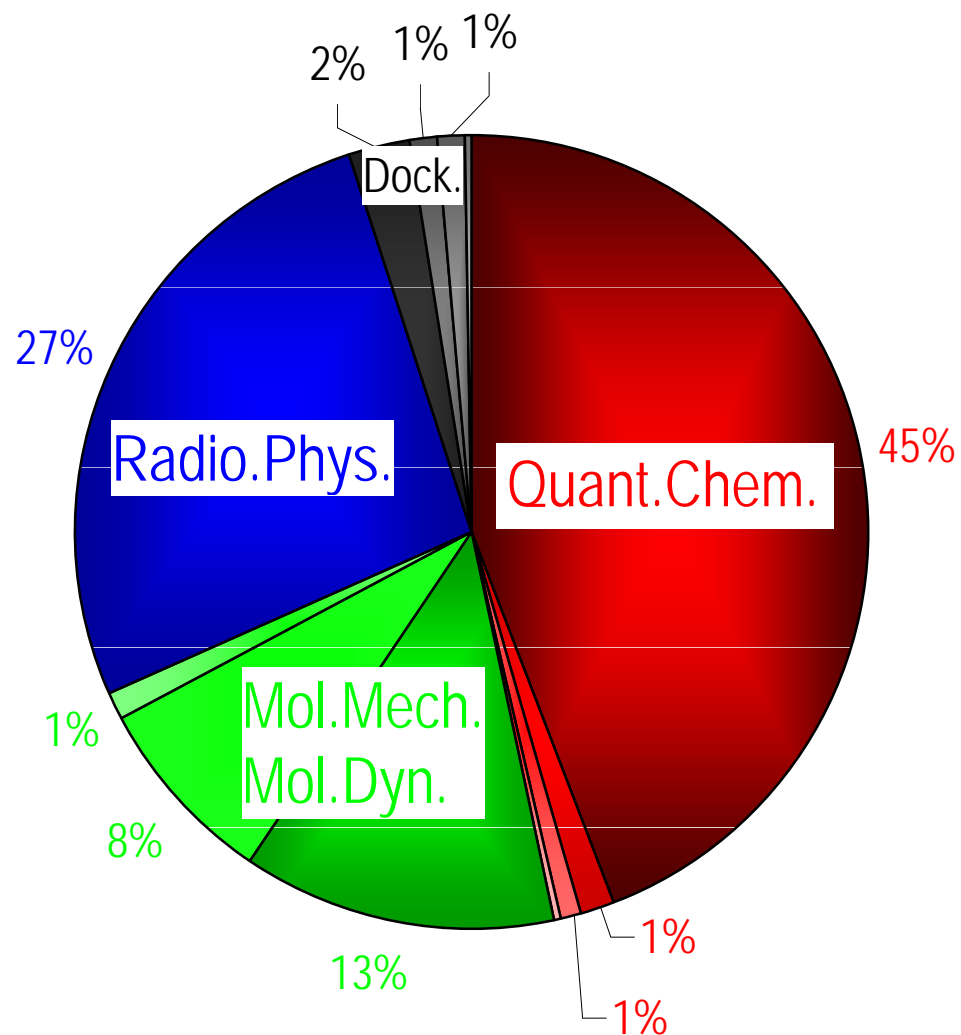
# Szoftver-ellátottság

- Kulcsfontosságú: GAUSSIAN-03 (D02), népszerű kommerciális kvantumkémiai program; jogtisztta 64-bites forráskód egyetemi site-licence
- Sok egyéb molekula-modellezési alkalmazás: AMBER9, NAMD2, GROMACS, AUTODOCK4 stb.
- Nagyteljesítményű parallel fordítói környezetek: Portland és Intel Fortran, C, C++ egyaránt rendelkezésre áll
- Jobb-ütemezés: **Sun GridEngine 'fair-share'** rendszer, kiegyensúlyozott prioritások kis és nagy felhasználóknak, egyenletes hozzáférés!

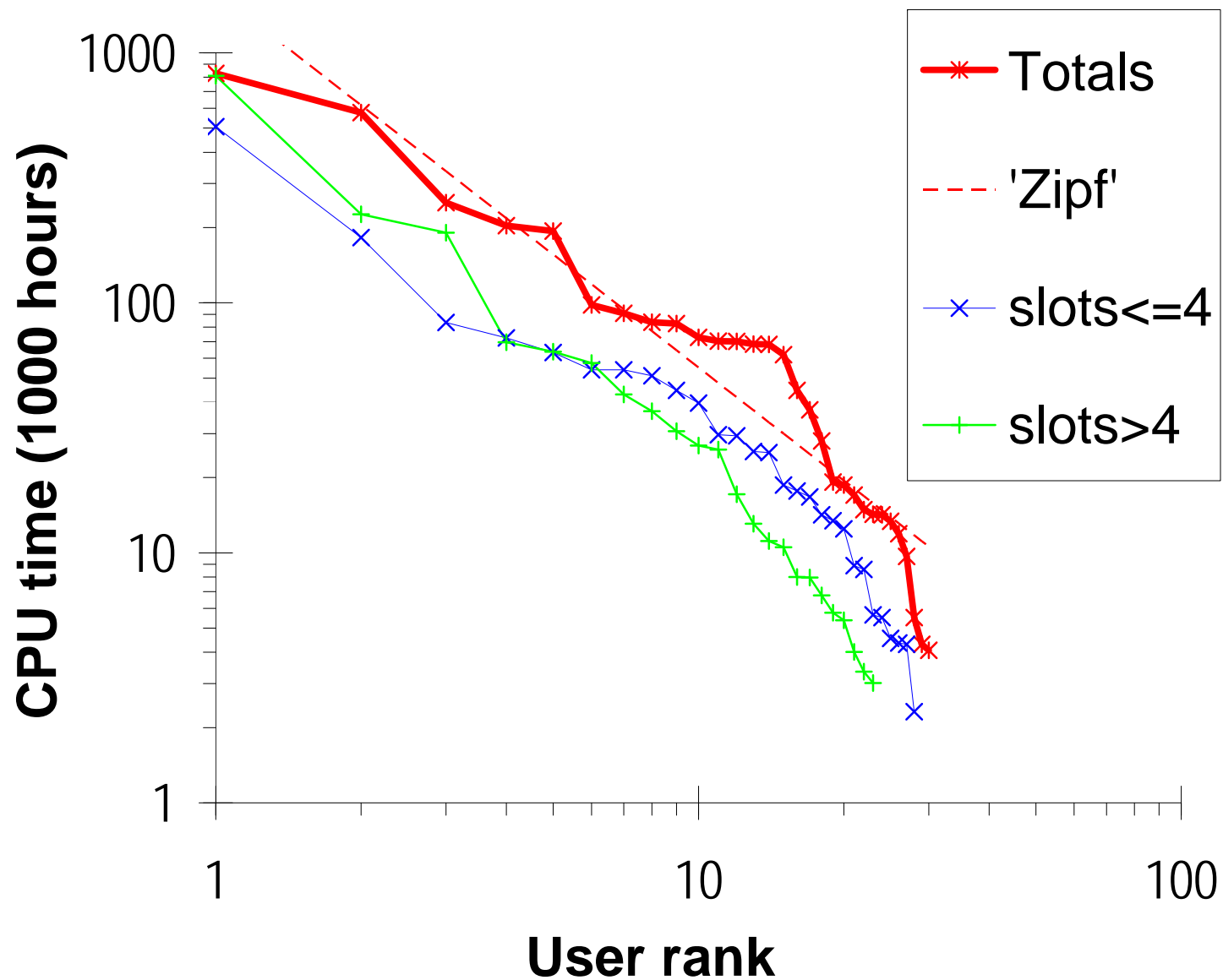
# CPU idő fogyasztás alkalmazások szerint



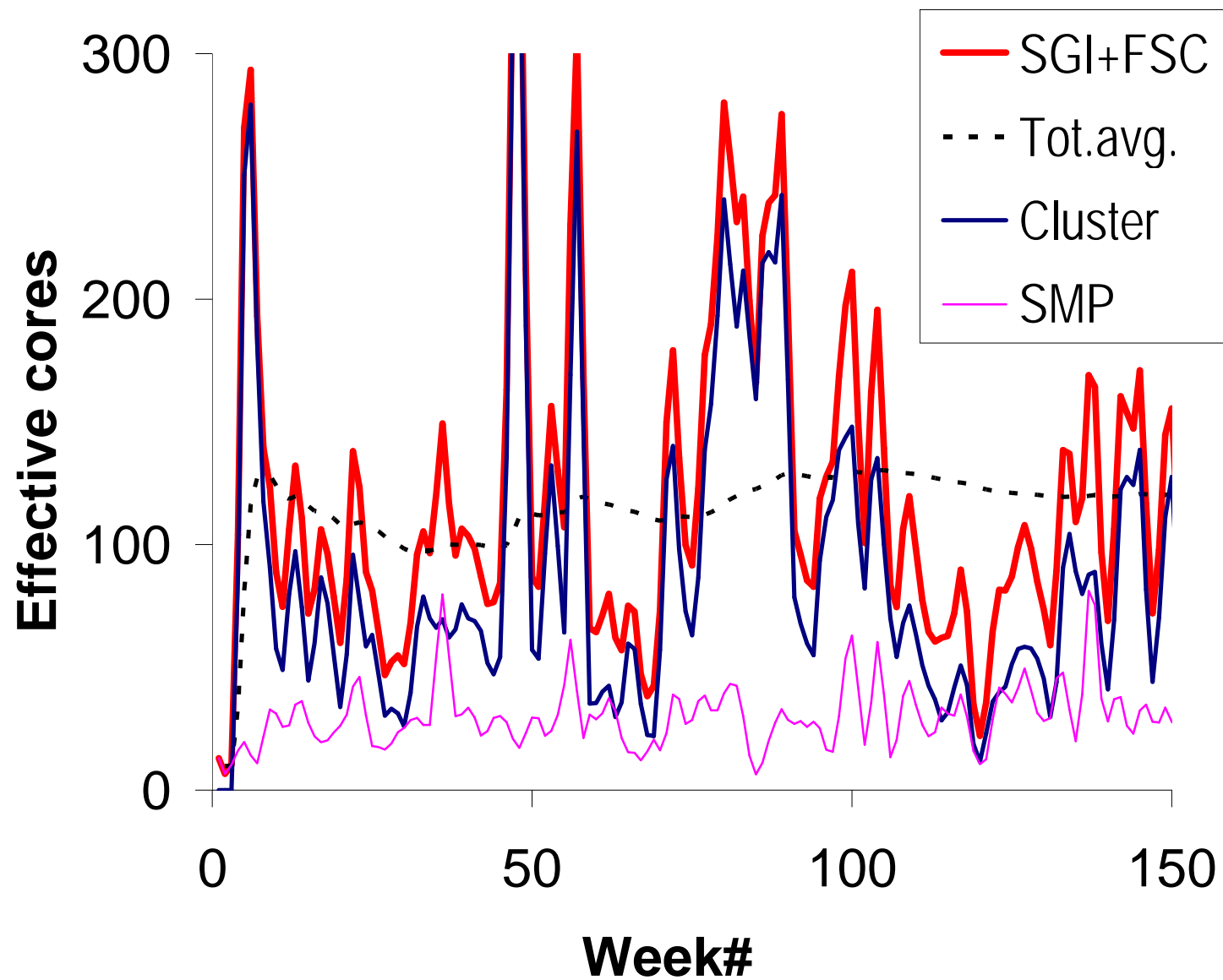
# CPU idő megoszlás



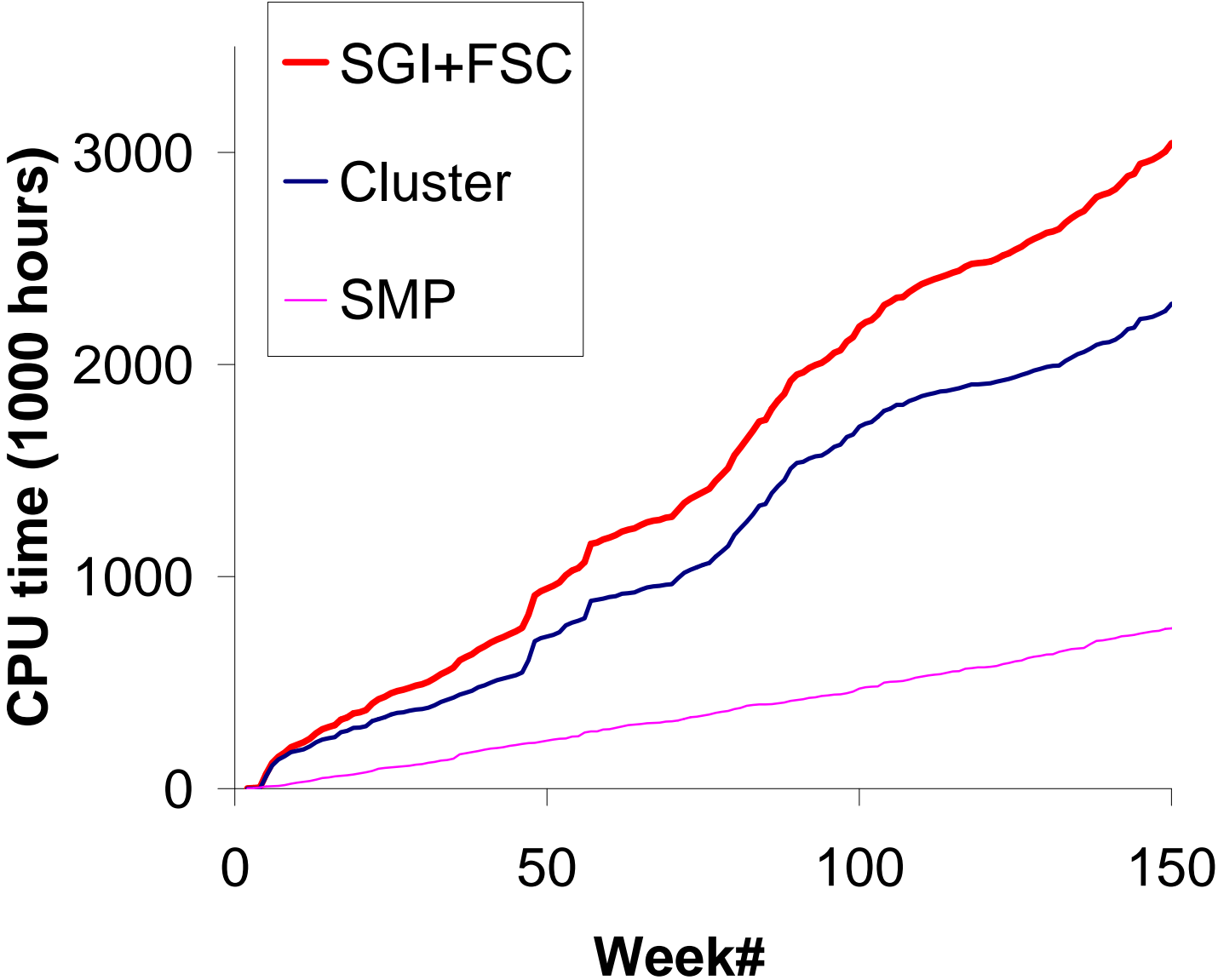
# CPU idő fogyasztás felhasználók szerint



# CPU kihasználás (heti átlag)



# Kumulatív CPU használat



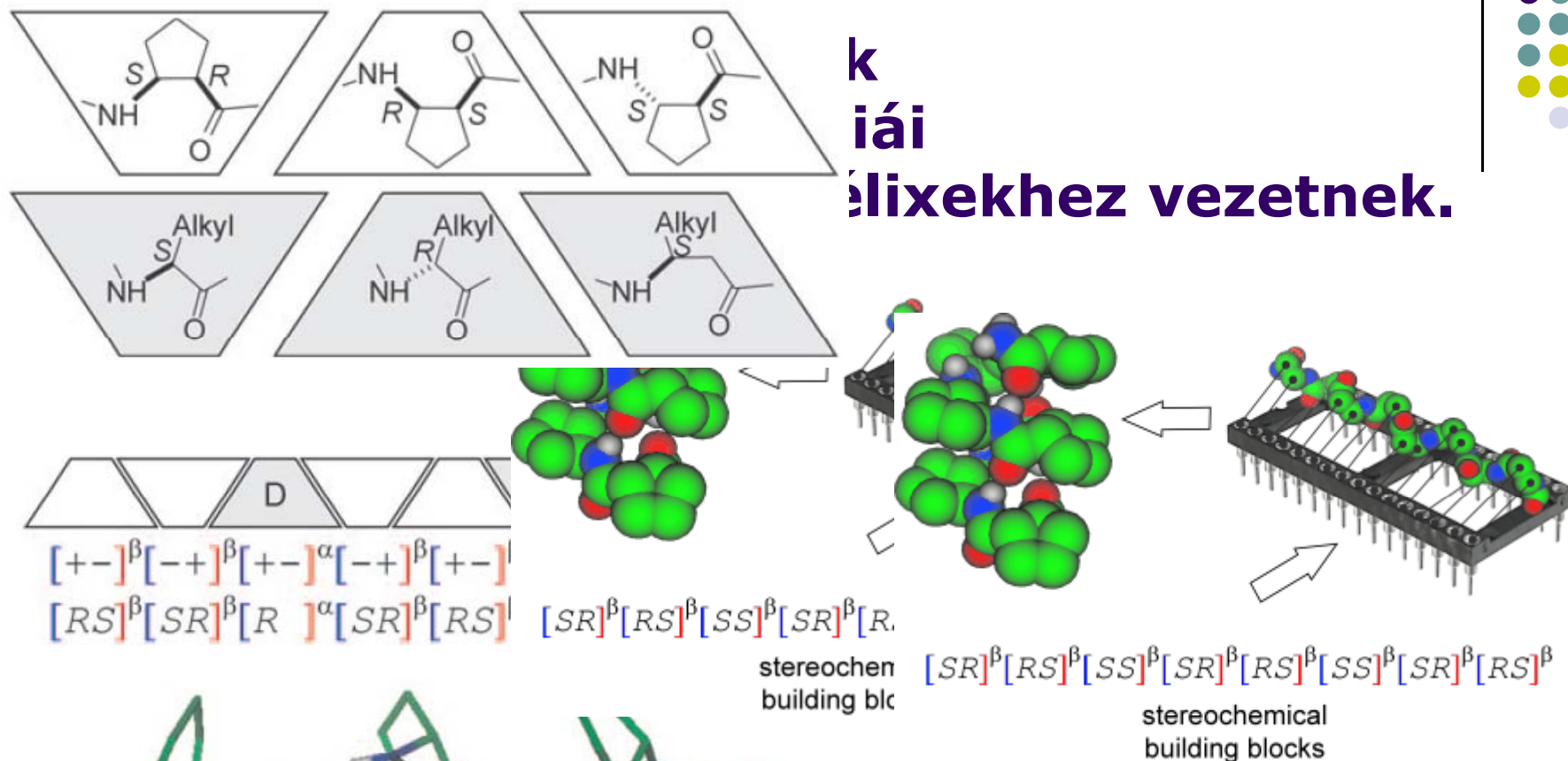


# Publikációk a HPC erőforrás felhasználásával (2007)

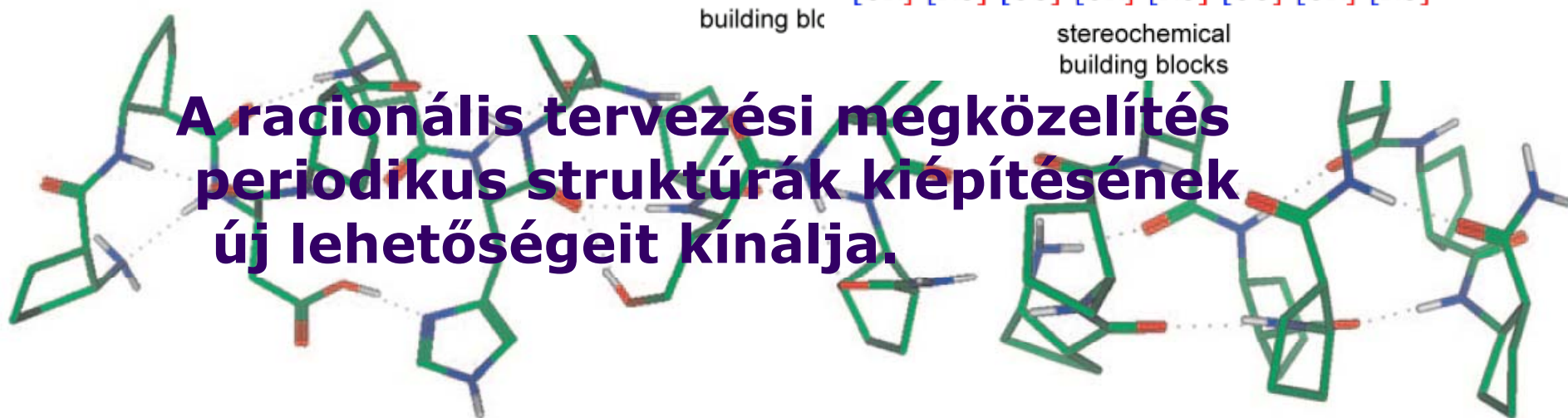


1. T.A. Martinek, I.M. Mandity, L. Fulop, G.K. Toth, E. Vass, M. Hollosi, E. Forro and F. Fulop (2006) Effects of the Alternating Backbone Configuration on the Secondary Structure and Self-Assembly of *beta*-Peptides *J. Am. Chem. Soc.* **128**, 13539.
2. B. Leitgeb, F. Bogar, G. Paragi, A. Kerenyi, B. Penke and G. Rakhely (2006) Investigation of secondary structural elements and intramolecular H-bonding patterns of poly-(Ala) and poly-(Gln) peptides by molecular modelling methods *J. Peptide Sci.* **12**, 187 Suppl. S.
3. A. Bende, F. Bogar and J. Ladik (2007) Charge transfer between the PO<sub>4</sub><sup>-</sup> groups of DNA and the arginine<sup>+</sup> and lysine<sup>+</sup> side chains of proteins *Chem. Phys. Lett.* **437**, 117.
4. T.A. Martinek, T. Varga, Ferenc Fulop and M. Bartok (2007) NMR spectroscopic and theoretical evidence of cinchona alkaloid-ketopantolactone complex formation in aprotic solvents: Implications for the mechanism of Pt-catalyzed enantioselective hydrogenation of activated ketones *J. Catal.* **246**, 266.
5. B. Viskolcz, M. Szori, R. Izsak, Sz.N. Fejer and I.G. Csizmadia (2007) Thermodynamic functions of conformational changes, part IV: Functional analysis of conformational entropy of substituted ethane and methanol *Int. J. Quant. Chem.* **107**, 1826.
6. R. Berkecz, I. Ilisz, A. Ivanov-Sztojkov, I. Szatmari, F. Fulop, D.W. Armstrong and A. Peter (2007) HPLC Enantioseparation of 1-( $\alpha$ -Aminobenzyl)-2-naphthol and 2-( $\alpha$ -Aminobenzyl)-1-naphthol Analogs on a  $\beta$ -Cyclodextrin-Based Chiral Stationary Phase *Chromatographia* **65**, 337.
7. M. Szori, T. Abou-Abdo, C.Fittschen, I.G. Csizmadia and B. Viskolcz (2007) Allylic hydrogen abstraction II. H-abstraction from 1,4 type polyalkenes as a model for free radical trapping by polyunsaturated fatty acids (PUFAs) *Phys. Chem. Chem. Phys.* **9**, 1931.
8. J. Ladik, A. Bende and F. Bogar (2007) Calculation of the band structure of polyguanilic acid in the presence of water and Na<sup>+</sup> ions *J. Chem. Phys.* **127**, 055102.
9. Z.A. Fekete, E.A. Hoffmann, T. Kortvelyesi and B. Penke (2007) Harmonic vibrational frequency scaling factors for the new NDDO Hamiltonians: RM1 and PM6 *Mol. Phys.* **in press**.

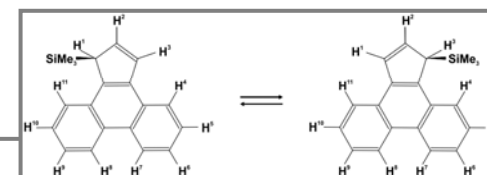
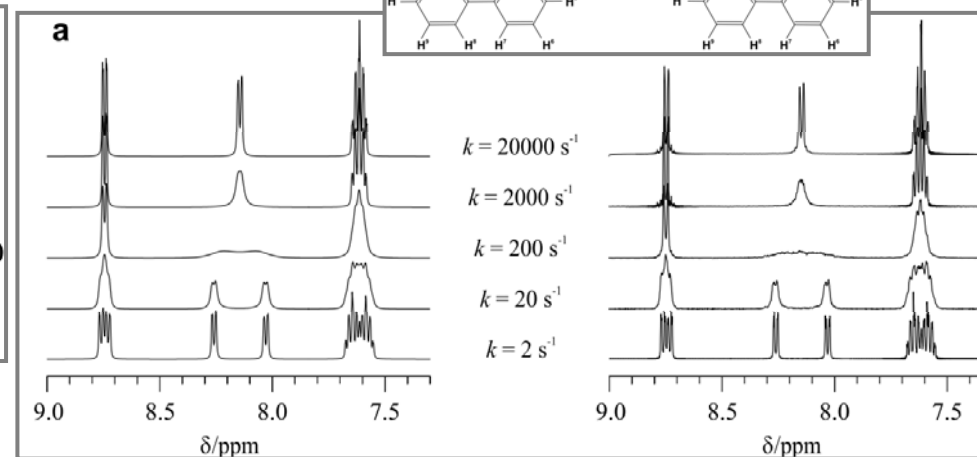
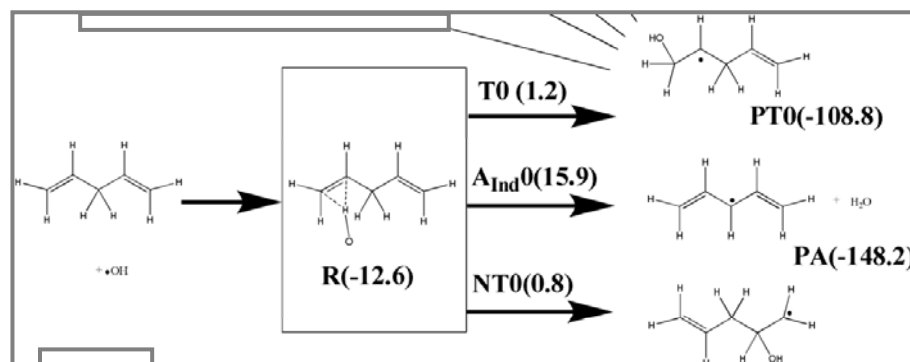
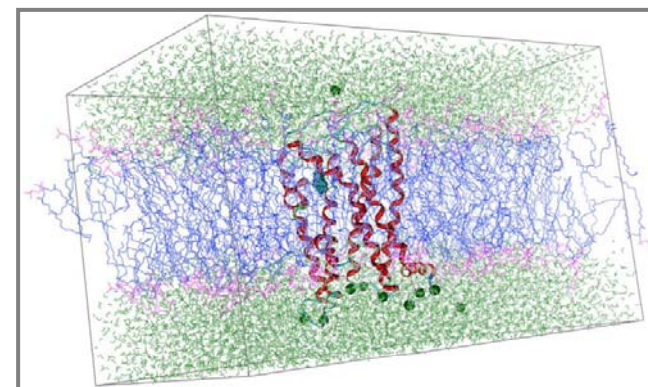
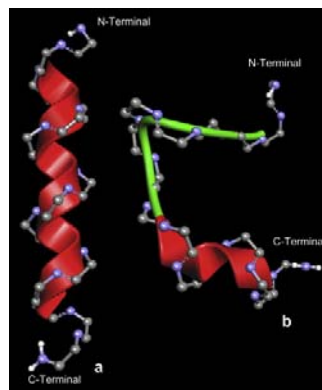
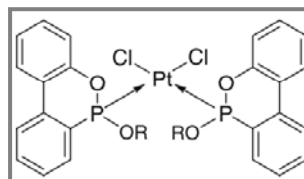
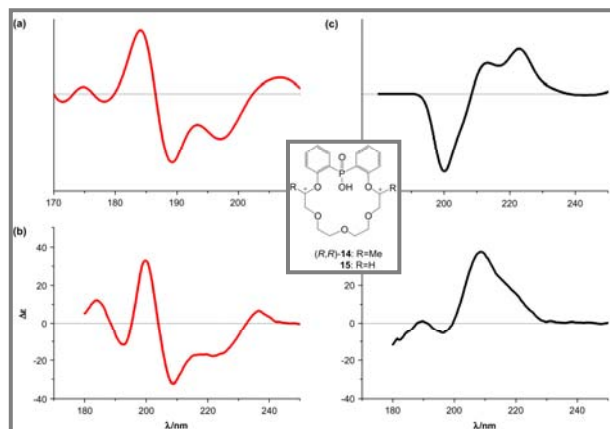
# Kutatási példa (2009)



**A racionális tervezési megközelítés  
 periodikus struktúrák kiépítésének  
 új lehetőségeit kínálja.**



# Kurrens kutatások - montázs





# Alkalmazási tanulság: ismerd meg önmagad adatait!

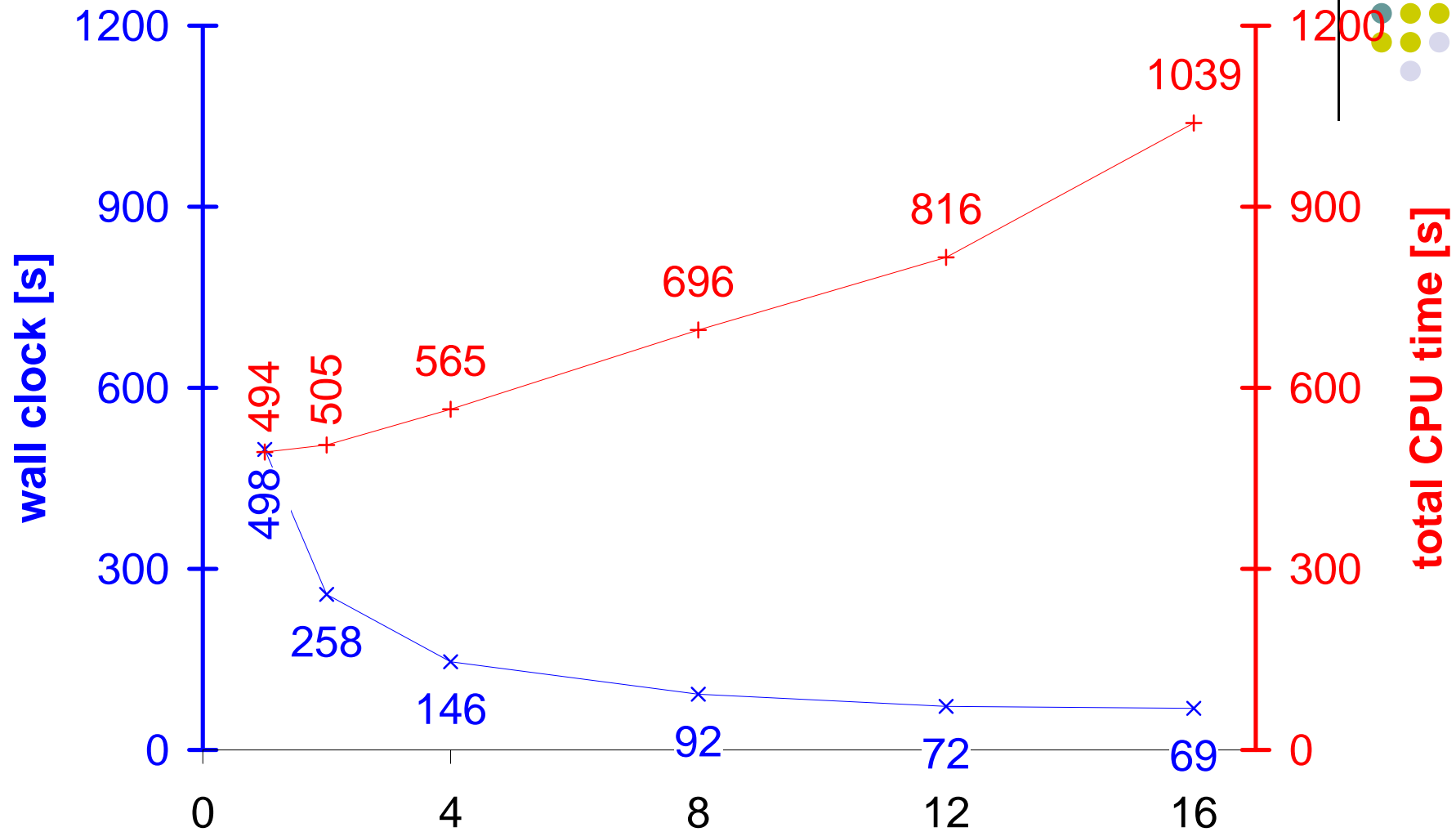
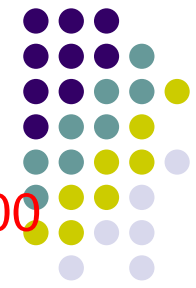
- A parallel futtatások kihasználásának algoritmusai:

1. Ismerd meg (még jobban) a módszered viselkedését a saját adataiddal
2. Gyűjts releváns benchmark adatokat
3. Elemezz: jó/rossz/negatív parallelizálás?

→ **iterálj az 1. ponttól...**

- Érdeemes átgondolni, nagy teljesítményű (HPC) avagy nagy áteresztőképességű (HTC) számítás célszerűbb-e; hosszabb távon az utóbbi előnyösebb, de rövid távon ezt **túl gyakran** szem elől veszítjük...

# A kevesebb néha több...





# Hol tartunk?

- Megteremtődött annak a lehetősége, hogy erre a bázisra alapozva jelentős központ fejlődjön ki a számítógépes kémiában (és társ-tudományokban)
- Az eddigi időszak a felhasználók számára jellemzően a régi típusú projektjeikhez újabb processzorok hozzáadását nyújtotta
- Célszerű lenne az egyetemen ill. régiójában meglevő, igen számottevő de szétszórt, szürkeállomány **összefogása**, és **koncentrált** projektek kialakítása (PÉNZ, PÁLYÁZATOK, PÉNZ)...



# Általános tapasztalatok

- Egy óra gondolkodás megtakaríthat ezer óra számítást!
- Még a tipikusnak gondolt feladatok esetén is érdemes elemezni a tervezett számítás erőforrás-igényét, és különösen a skálázási sajátságait.
- Jobb-ütemezés és elosztás:  
*türelem rózsát terem(ne)*
- SGE **fair-share** ütemezés technikailag jó (felhasználók érzelmi hozzáállása még csiszolandó)
- Architektúra választás: *sok lúd disznót győz* elv érvényesül a klaszter – SMP összehasonlításban





# Követendő irányok

- Szemlélet-változásokra van szükség
- A pillanatnyi teljesítmény maximalizálása helyett az teljesített munka optimalizálása lenne kívánatos – Performance vs. Throughput
- Érzelmi helyett értelmi viszonyulás a számítások tervezésénél, ütemezésénél
- Gazdálkodási jellegű gondolkodás tudatosítása az erőforrások elosztásánál
- Intézményes egyetemi támogatás, és/vagy szorosabb alegység-szintű összefogás kell a továbblépéshez (regionális föderáció?)





# Köszönet-nyilvánítás

- Bartha Ferenc
- Bogár Ferenc
- Dombi György, HPC projekt-vezető
- Labádi Máté
- Martinek Tamás
- Penke Botond (Neurobiológiai Tudásközpont)
- Viskolcz Béla
- **NKTH/KPI KIIF pályázat:  
ALAP4-00092/2005.**
- Kapcsolat: [admin@hpc.u-szeged.hu](mailto:admin@hpc.u-szeged.hu)

