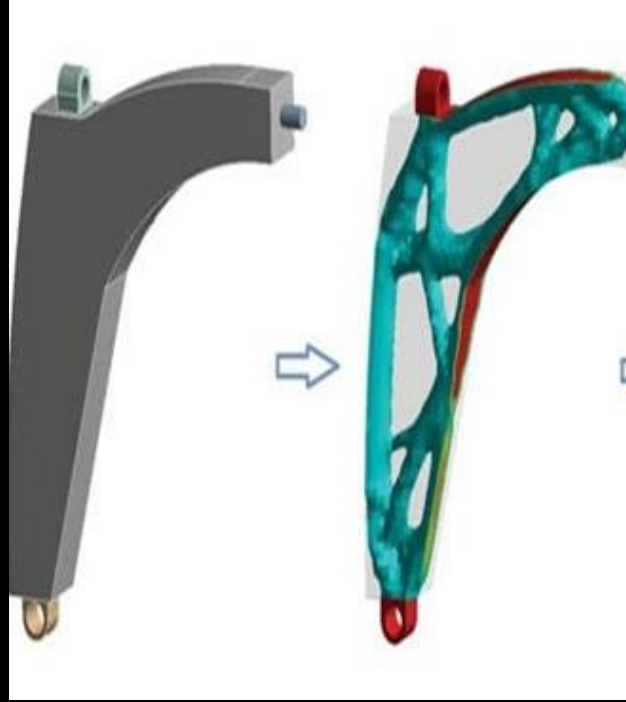


Kas ir HPC jeb superdatori, un kam tos pielieto?

Dr. phys. **Rūdolfs Livanovičs**
LU Skaitliskās modelēšanas institūts
EuroCC Nacionālais HPC kompetences centrs Latvijā

Superdatoru pēcpusdiena
2024. gada 12. jūnijs



Kas ir HPC?

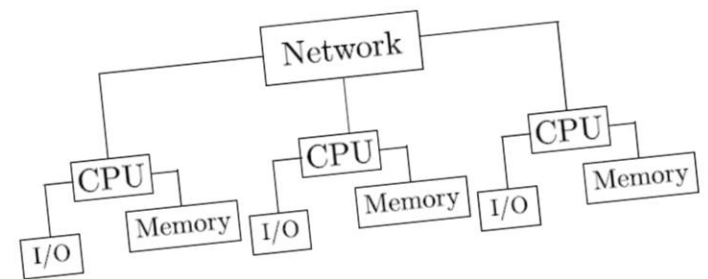
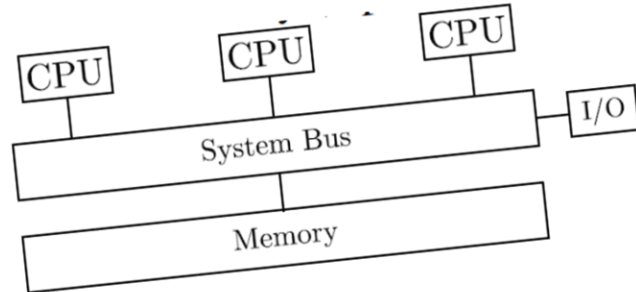
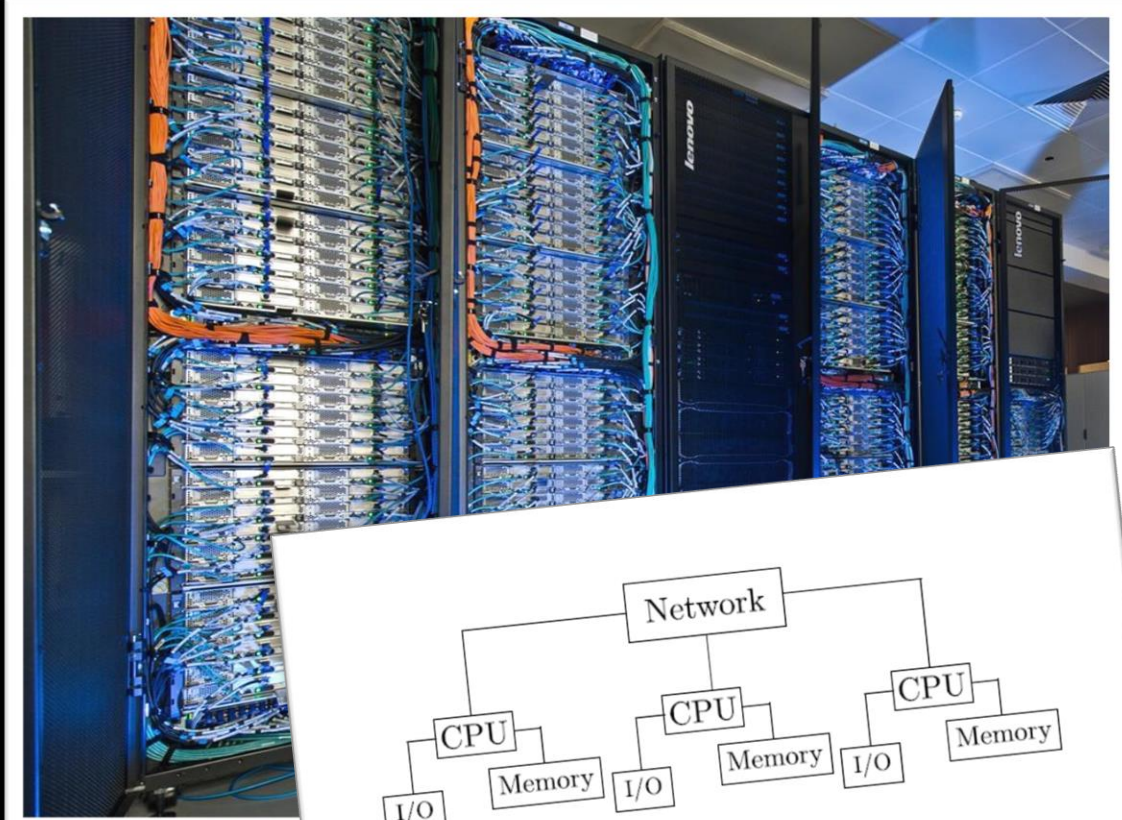
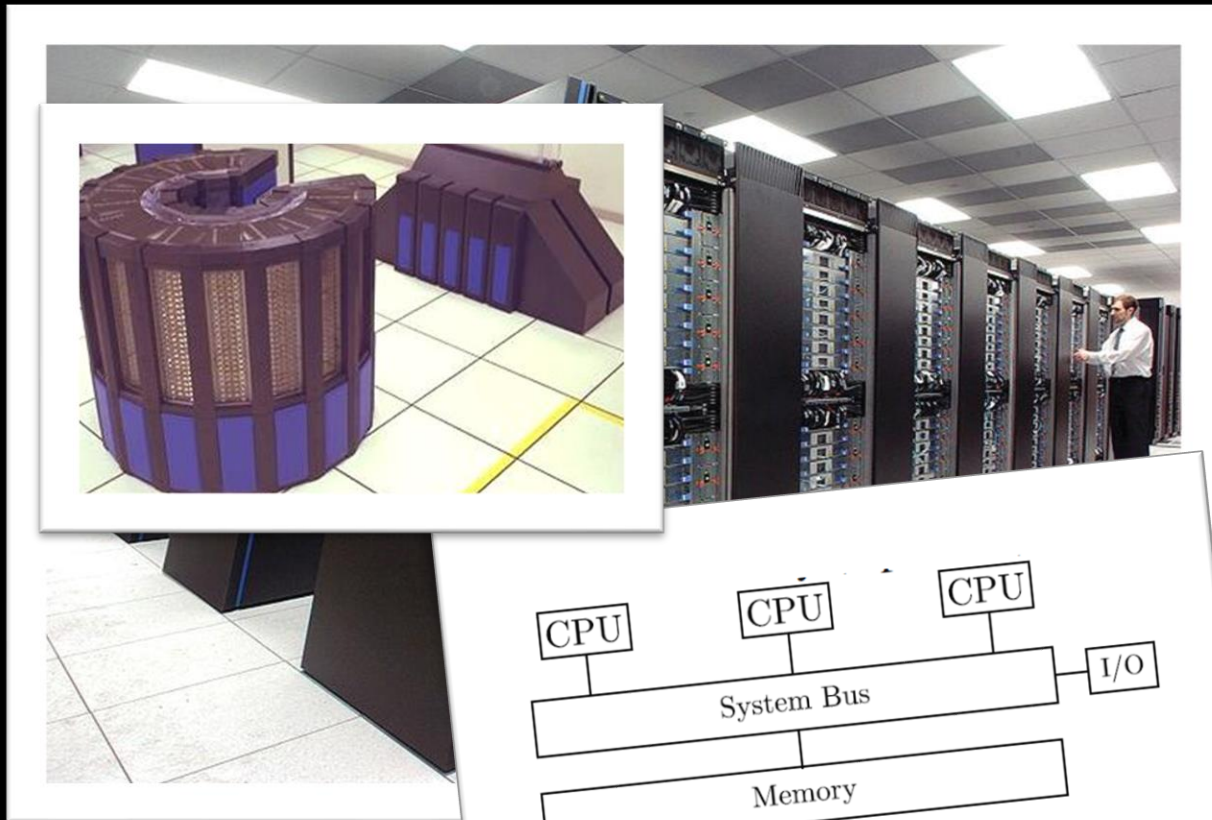
- HPC - *High Performance Computing*, «augstas veiktspējas skaitļošana».
- Augstas veiktspējas datortehnikas izmantošana kopā ar efektīvu, optimizētu un paralēli izpildāmu programmatūru.
- Izmanto zinātniskai un tehniskai skaitļošanai: jaunu produktu izstrādei (CAD/CAE), laikapstākļu paredzēšanai, ķīmisko procesu analīzei utt.
- Izmantojams brīdī, kad skaitļošanas problēmas pārsniedz personālā datora resursus.



Kā izskatās HPC?

Kopīgās atmiņas lieldatori u.c. ikdienā netipiskas arhitektūras

Klasteri – parasti datori ar ātru tīkla savienojumu



Kā notiek mijiedarbība ar HPC?

```

bergfelds@hpc:~
201342368 regular GoR test frisdeld R 1-01:24:28
201342371 power de
1
201342379 regular down
[bergfelds@hpc ~]$ sinfo -N
NODELIST NODES PARTITION STATE
node1 1 debug idle
node2 1 regular* mix
node3 1 regular* alloc
node4 1 regular* idle
node5 1 regular* idle
node6 1 regular* idle
node7 1 regular* idle
node8 1 regular* mix
node10 1 power mix
node11 1 power alloc
virtnode1 1 power drng
virtnode2 1 power drain*
virtnode3 1 power drain*
[bergfelds@hpc ~]$ ls
containers OpenFOAM tests_blend
[bergfelds@hpc ~]$
[bergfelds@hpc ~]$
[bergfelds@hpc ~]$
[bergfelds@hpc ~]$

```

Komandrinda

Grafiski – tīmekļa lapa

Grafiski – lietojumprogramma vai virtuālā mašīna



Pasaulē ātrākie superdatori



- *Frontier* (ASV), 9M kodolu, veikspēja 1100 Pflop/s, jauda 21 MW.
- *Aurora* (ASV), 9M kodolu, veikspēja 585 Pflop/s, jauda 60 MW
- *Fugaku* (Japāna), 7M kodolu, veikspēja 442 Pflop/s, jauda 30 MW.
- Kontekstam: Personālais dators: maks. 64 kodoli, 3 Tflop/s, jauda 500-1000 W (gandrīz **miljons reižu mazāk kā *Frontier***).



- **Piezīme: HPC ir stratēģiski svarīgi!** Eiropā *EuroHPC* iniciatīva iegulda 9 000 milj. EUR posmā 2018.-2027. g. *EuroHPC* kopuzņēmuma deklarāciju parakstījušas 33 dalībvalstis, tai skaitā Latvija. Veido jaunus HPC centrus Vācijā (pirmais *exascale* klasteris Eiropā), Portugālē, Slovēnijā u.c.

HPC infrastruktūra Latvijā

- RTU HPC Centrs ([URL](#))
 - 1376 kodoli
 - 145 Tflop/s
 - **Sniedz pakalpojumus gan universitātēm, gan uzņēmumiem**
- LU Cietvielu fizikas institūts ([URL](#))
 - Pirmais un šobrīd lielākais klasteris Latvijā
 - 157 Tflop/s (**0.0314 % no Fugaku veikspējas**)
- LU Matemātikas un informātikas institūts
 - OpenStack bāzēts mākonis *e-spiets2* ([URL](#))
 - 1760 kodoli, 50 Tflop/s
- LU Skaitliskās modelēšanas institūts
 - SLURM klasteris, 488 kodoli
- Citi: Latvijas Organiskas sintēzes institūts, Ventspils Starptautiskais radioastronomijas centrs, Elektronikas un datorzinātņu institūts
- Ķīpsalā atrodas LR Izglītības un zinātnes ministrijas **Akadēmiskais datu centrs** (skat. attēlu) ar iespēju dažādām institūcijām izvietot savu servertehniku.





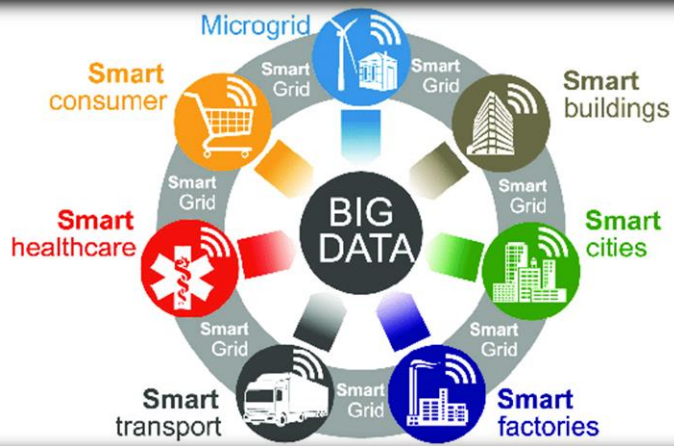
LU SMI klasteris

- Abi resursi iekļauj populāro zinātnisko programmatūru: *Anaconda*, *Jupyter*, *R Studio*, *OpenFOAM*, *Paraview*
- Lietotājiem pieejamas individuālas konsultācijas, palīdzība programmatūras instalēšanā
- Kontakti: Jurijs Ješkins, hpc@lu.lv

Skaitļošanas
centrs

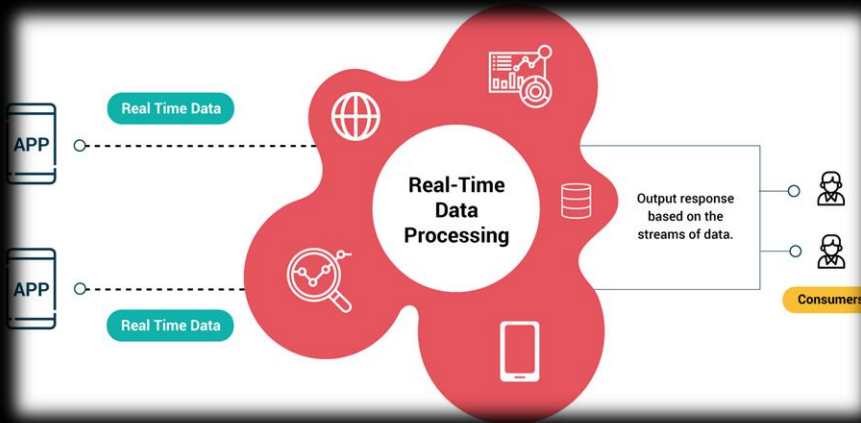
Virtuālas
mašīnas

HPC
klasteris



HPC pielietojanas veidi

- Lielie dati (*big data*): patērētāju ieradumu noteikšana, medicīnisko datu analīze, ceļa novērojumu kameras, satelītfotografijas, citas datubāzes...

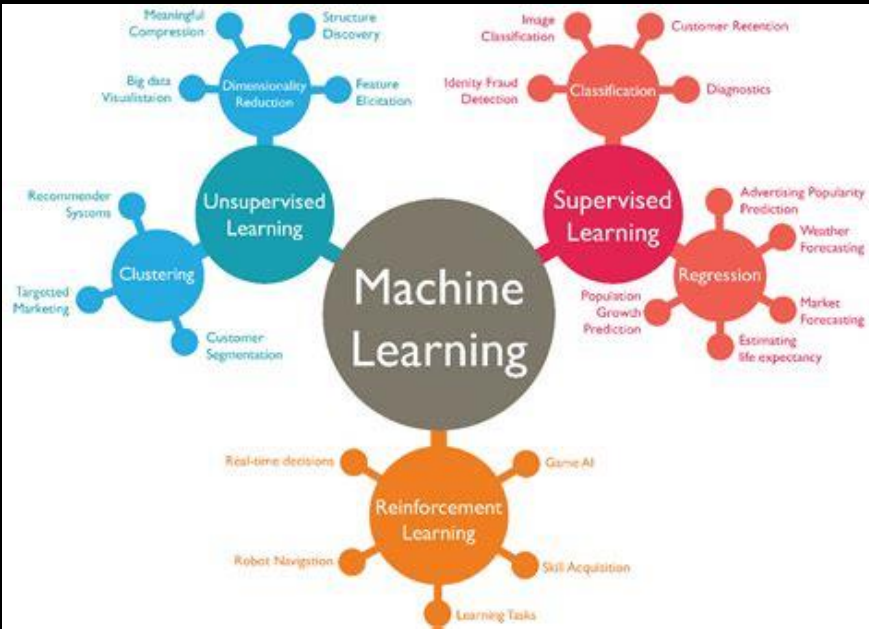


- Reālā laika datu apstrāde: maksājuma īpašību salīdzināšana ar iepriekš saglabātajiem, loģistikas uzlabošana, gaisa kvalitātes monitorings, laikapstākļi...

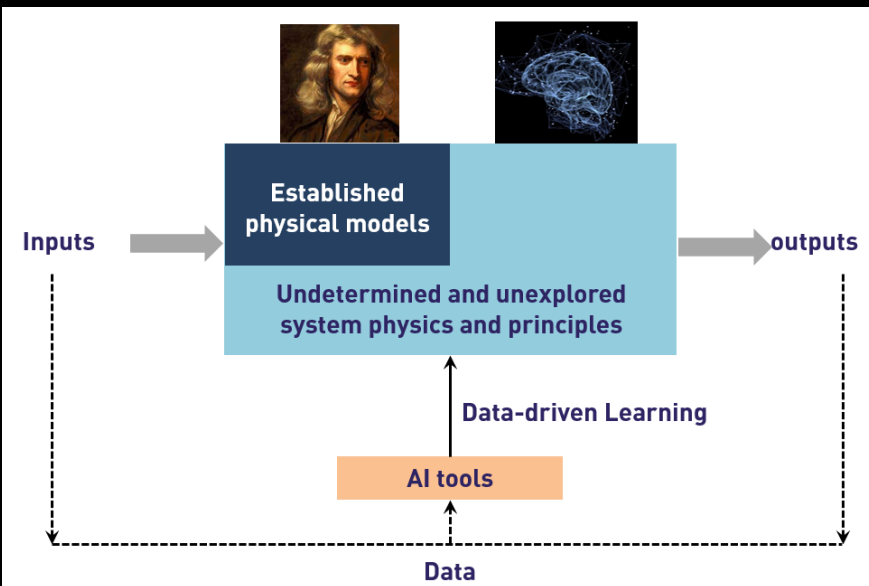


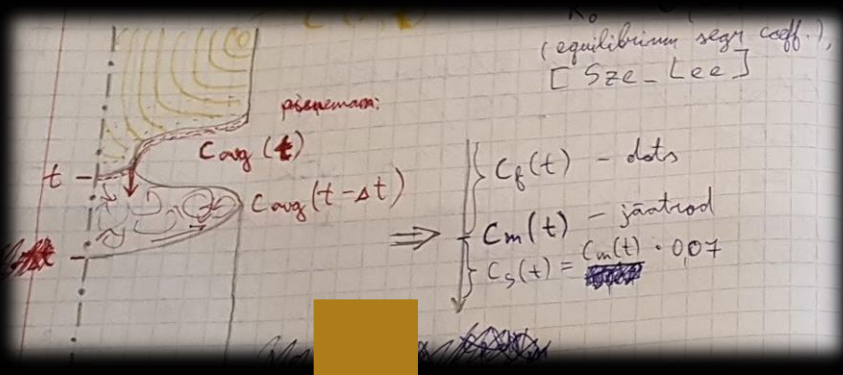
- Matemātiskā modelēšana: dažādu inženiertehnisko un dabas procesu matemātiskais apraksts – šķidrumu un gāzu plūsma, molekulu kustība, materiālu īpašības, mehāniskie spriegumi...

Mašīnmācīšanās (ML/AI) ar HPC

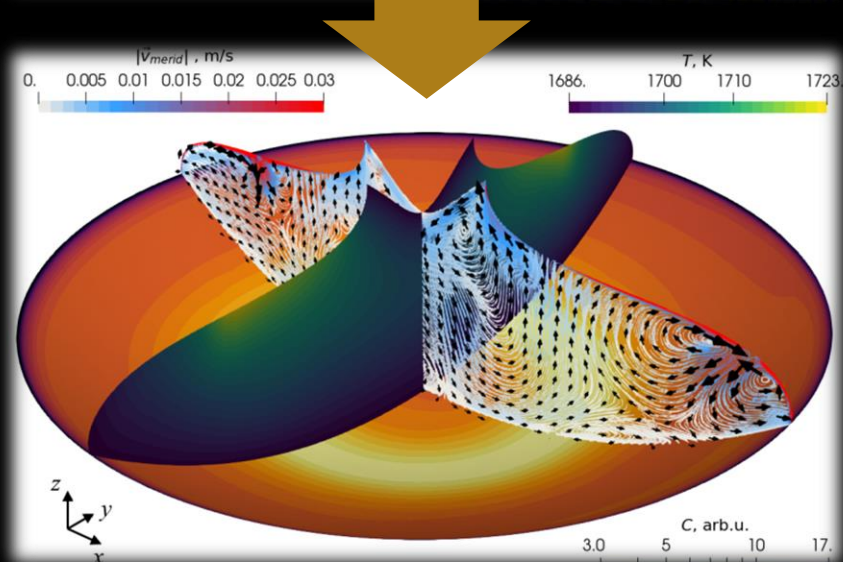
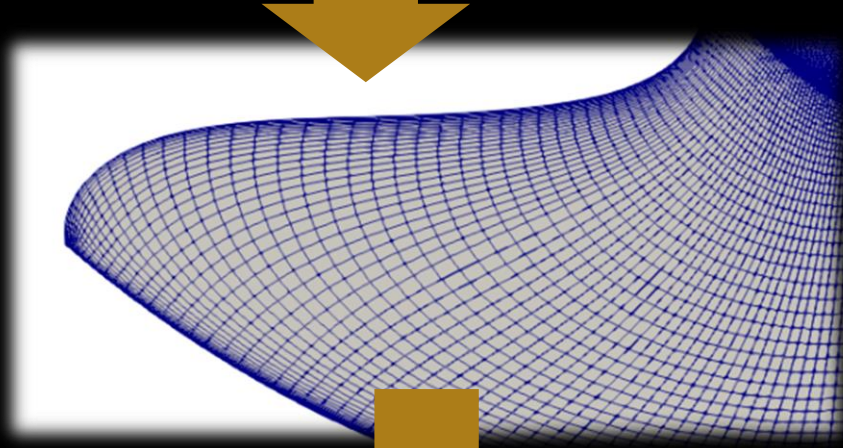


- Bāzes modeļu izpēte, arhitektūras un hiperparametru optimizācija, pamatapmācība, verifikācija, u.c.
- Modeļu pilnveidošana – fine tuning (LoRa / QLoRa), atjauninātu datu kopu integrācija, u.c.
- Gatavu modeļu izmantošana – inference, integrācija citu sistēmu (piem. matemātisko modeļu) darbībā, liela apjoma datu analīze, u.c.





Matemātiskā modelēšana (MM)



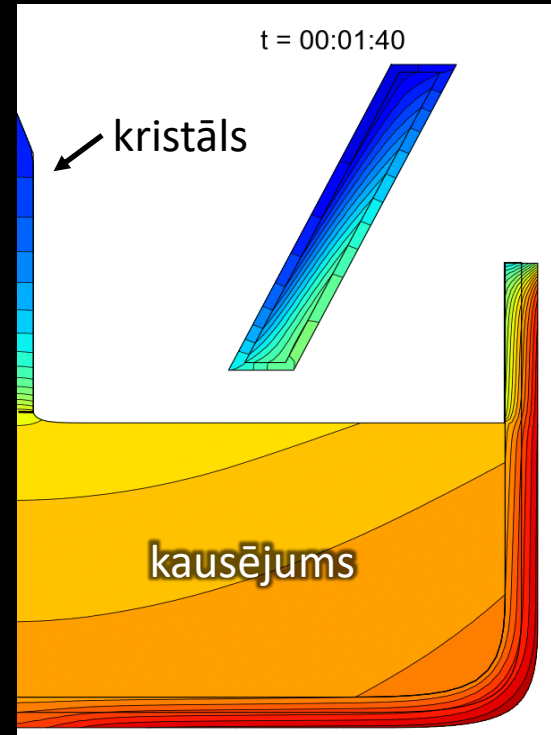
- Modelēšana ir modeļa izveide reāla fenomena aprakstam
 - Modelēšana aizvieto reālu mērījumu vai eksperimentu
 - Vienkāršs modelis bieži vien palīdz labāk saprast sarežģīto realitāti
 - Parasti modelēšana ir izdevīgāka nekā eksperimentālas studijas

- Modelēšanu izmanto dažādās jomās
 - Dabaszinātnēs (fizika, bioloģija, ķīmija, ...)
 - Sociālās zinātnēs (ekonomika, psiholoģija, politika, ...)
 - Starpdisciplināras, piem. transporta plūsma (fizika + psiholoģija)

- *Pablo Picasso: ~~art~~ model is a lie that helps us understand the truth*

- Metodes
 - Analītiskas – precīzas, sarežģīti vienādojumi
 - **Skaitliskas** – aptuvenas, vienkāršāki vienādojumi un operācijas, piemērotas datoriem: $S = v \cdot t$, $F = m \cdot a$

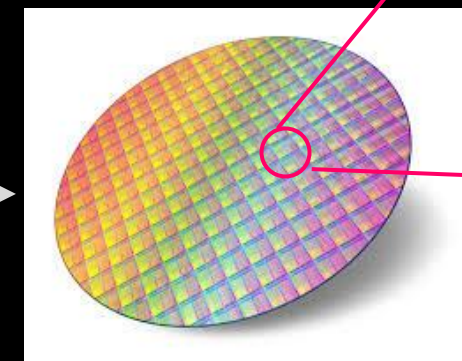
MM piemēri: Si kristālu audzēšana



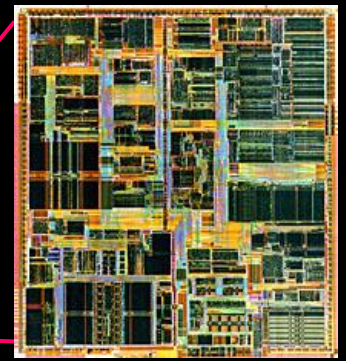
Si monokristālu audzēšana



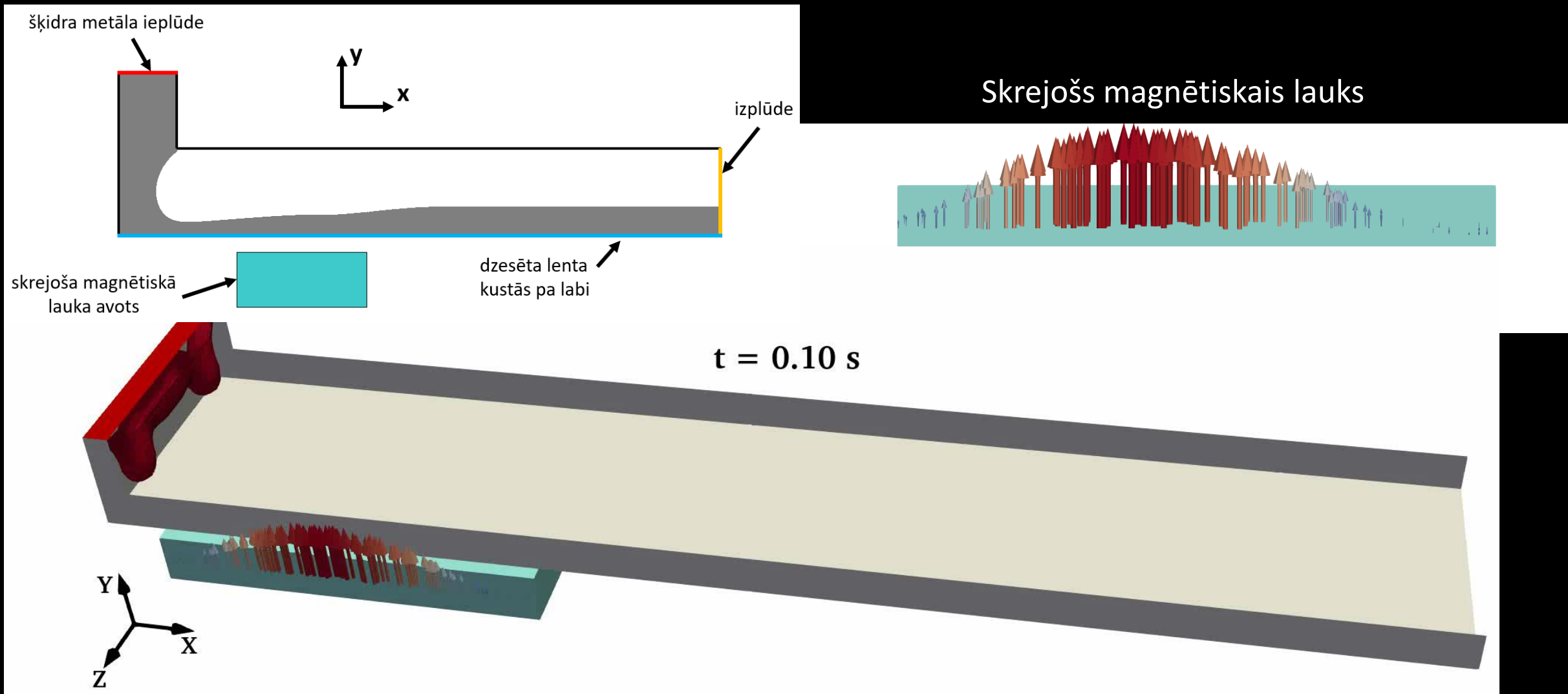
Plākšņu (wafer) sagatavošana



Mikroshēmu ražošana

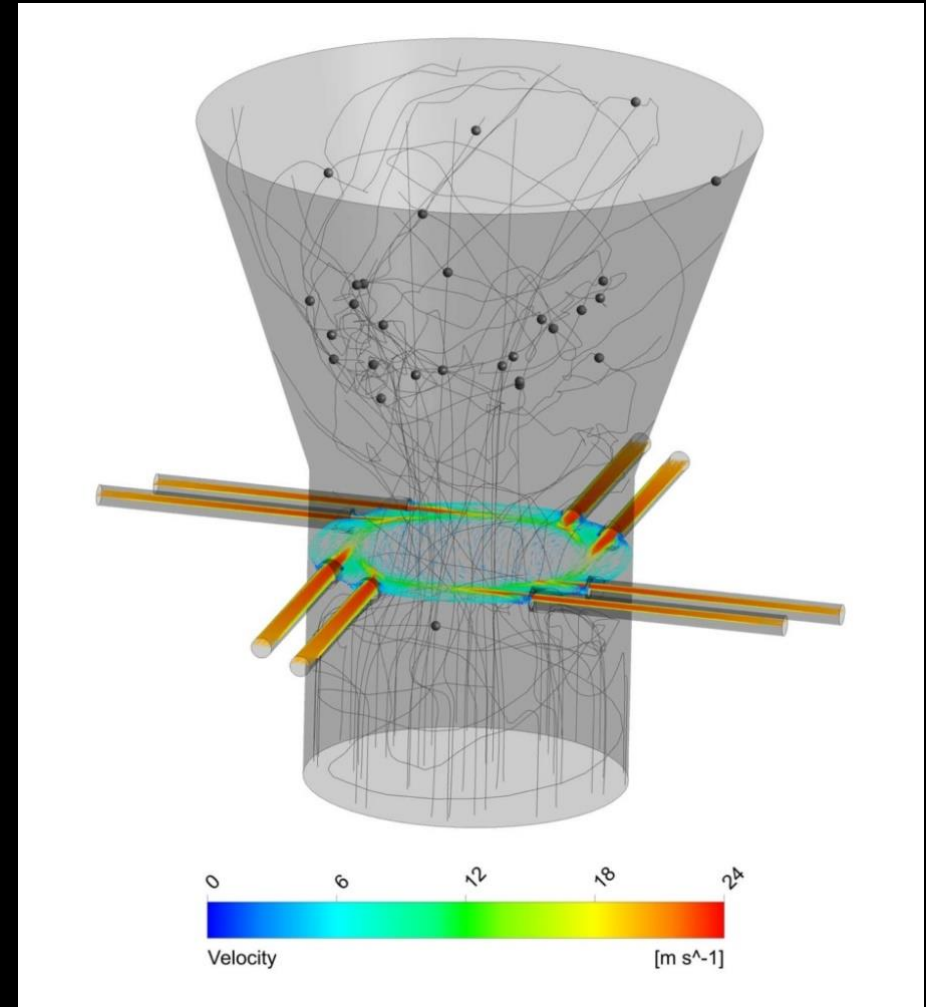
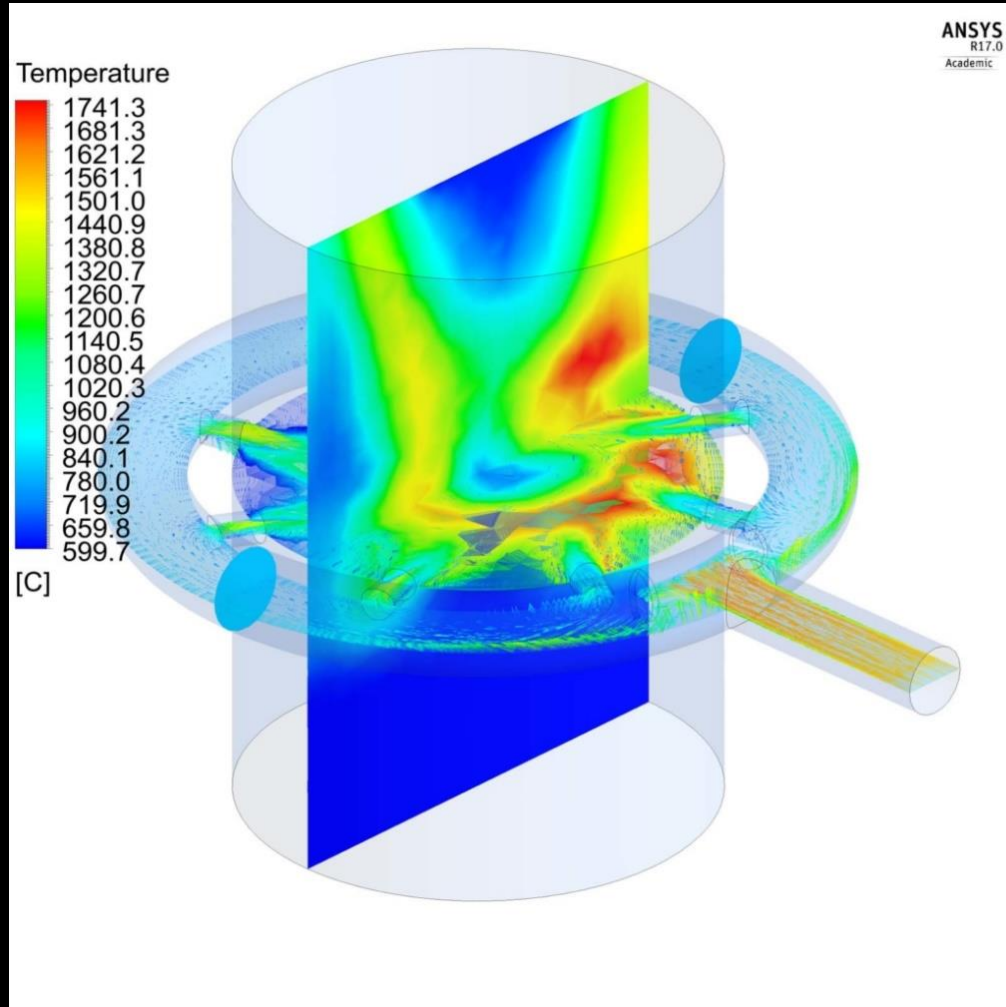


MM piemērs: metāla lentes liešana



Gāzu plūsmas, temperatūras,
koncentrācijas kā arī cieto daļiņu
kustības skaitliskā modelēšana

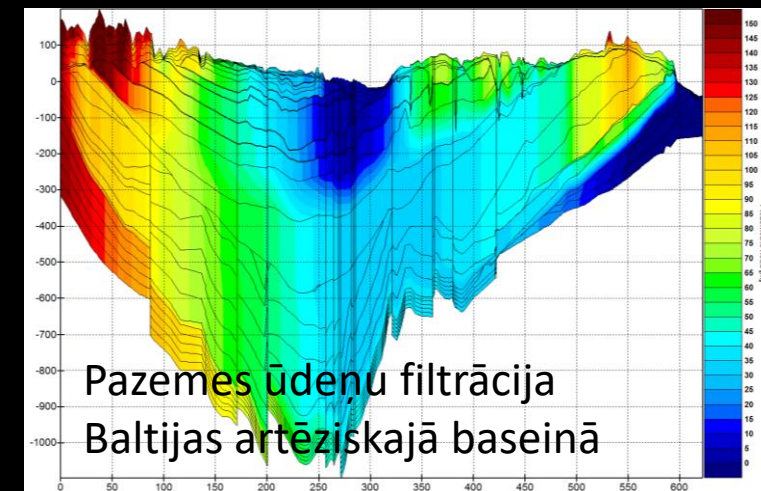
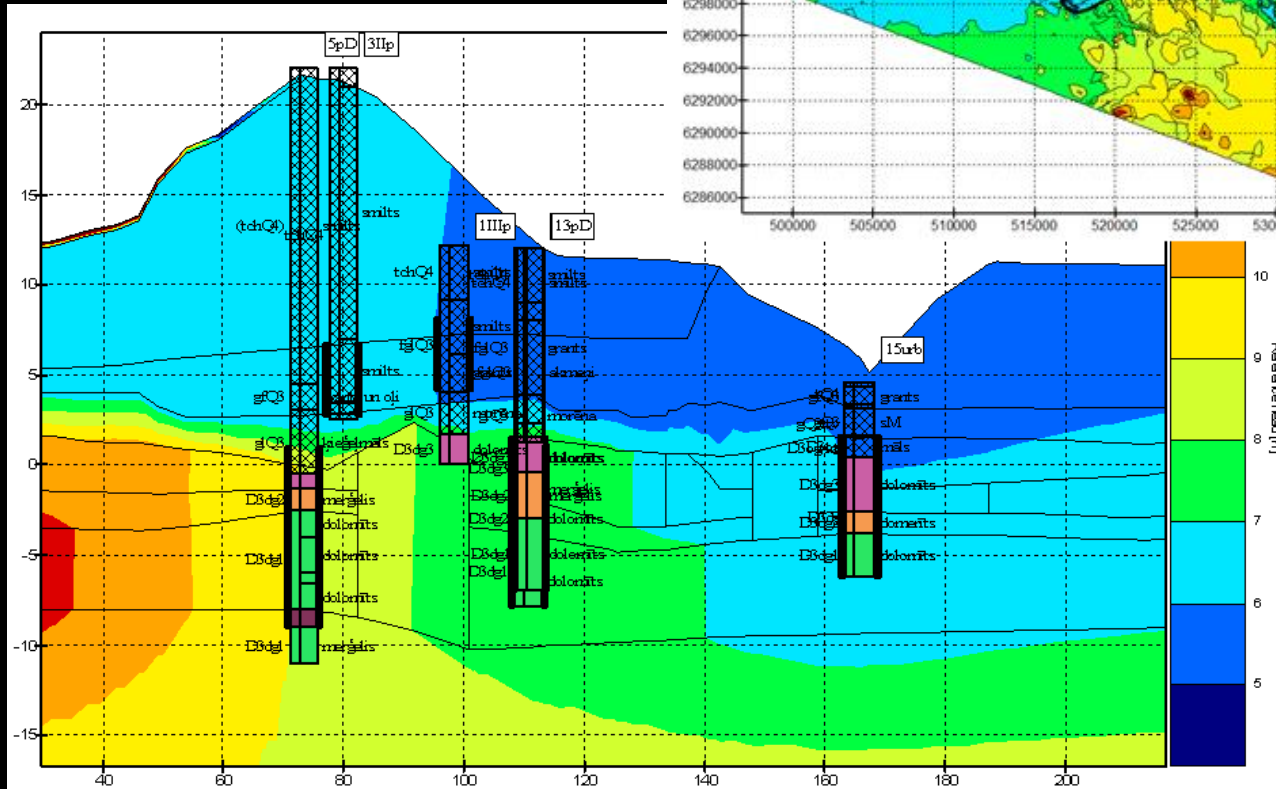
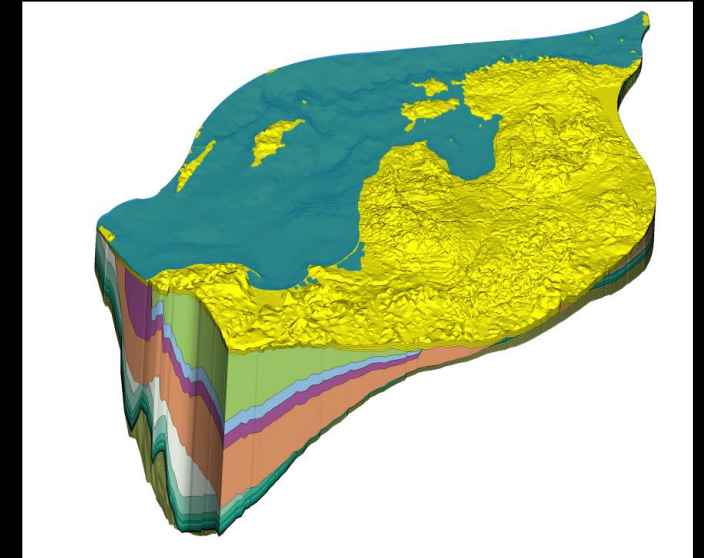
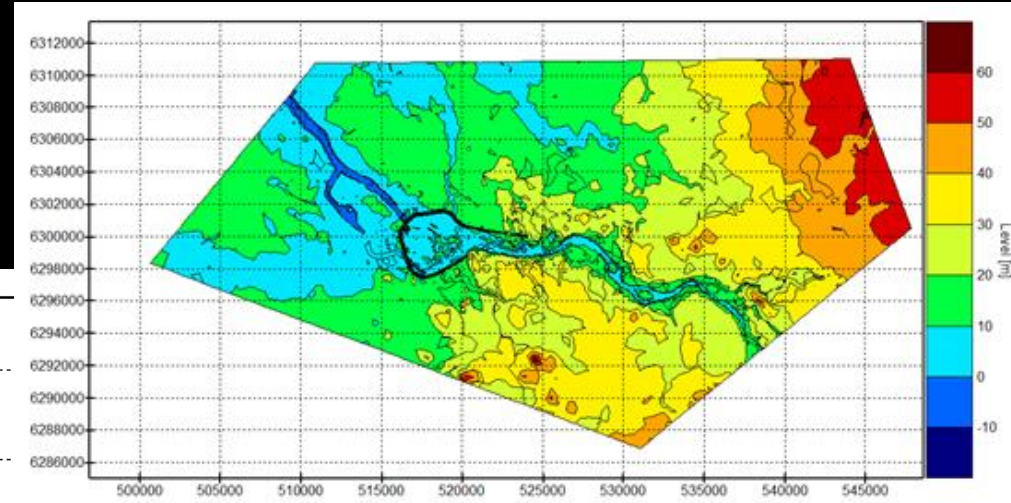
MM piemērs: gazifikators, SIA EnertecGreen



MM piemērs: AS Latvenergo

Rīgas HES apkārtnes hidroģeoloģiskā modeļa izveide

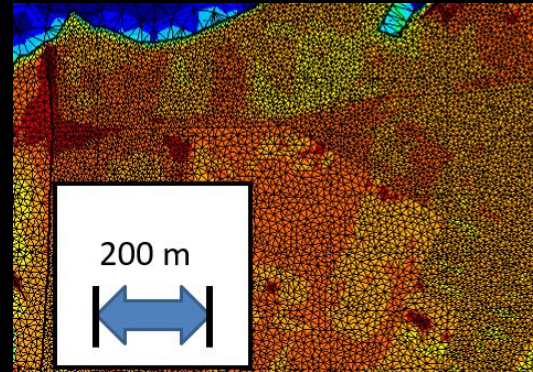
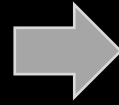
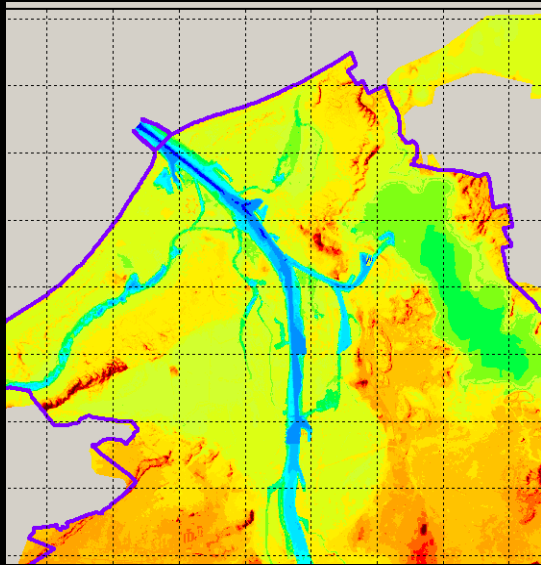
Spiediens augsnē



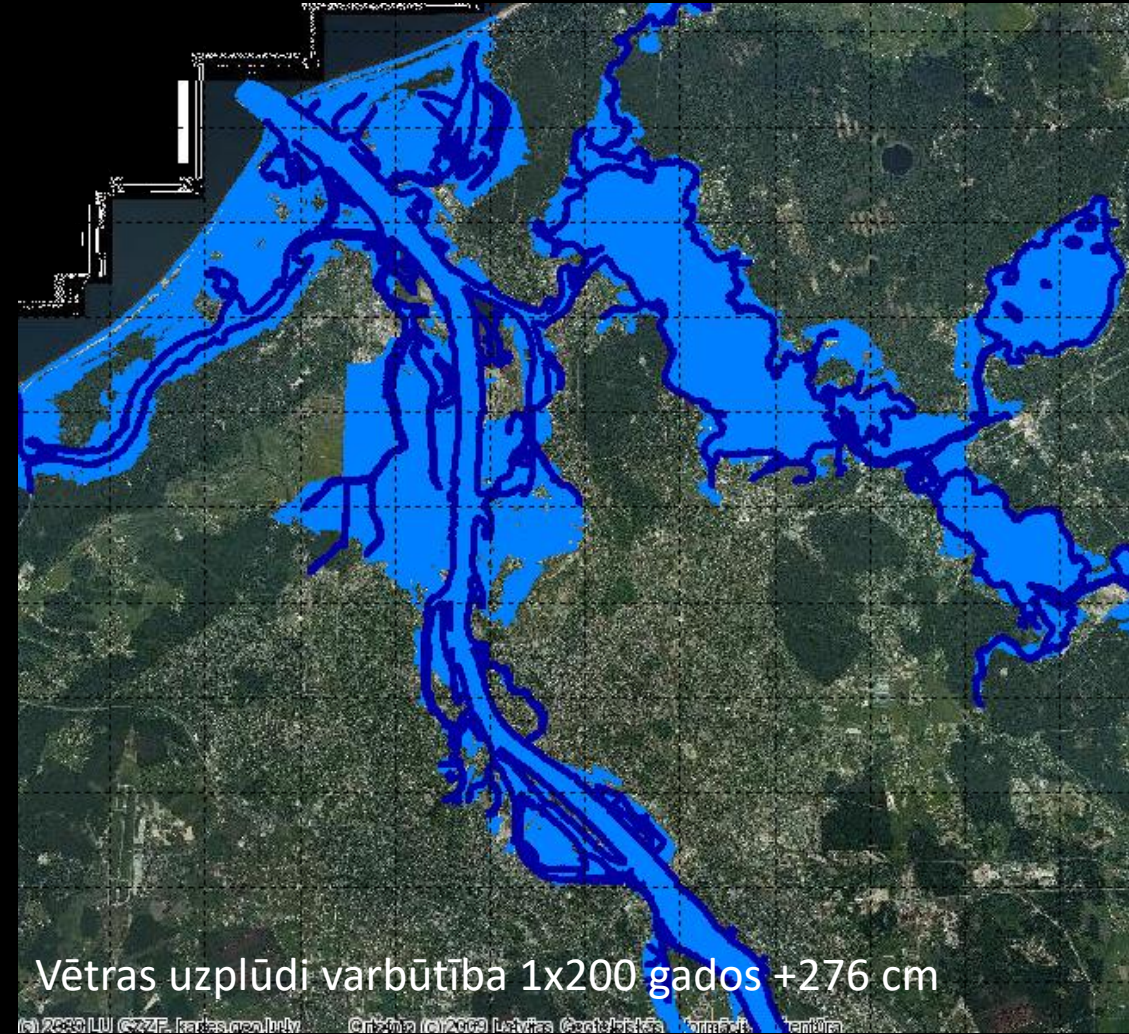
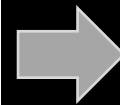
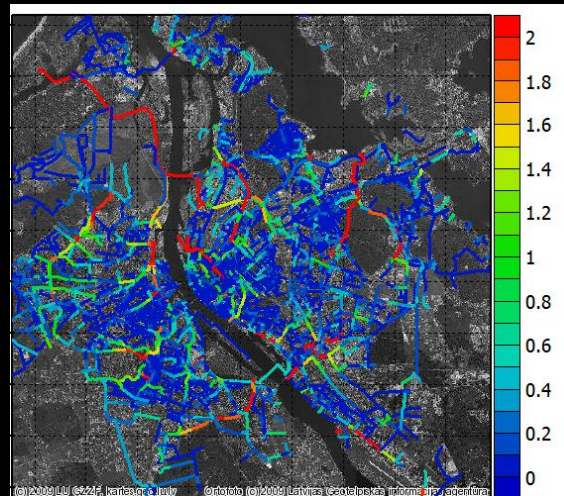
Pazemes ūdeņu filtrācija Baltijas artēziskajā baseinā

Digitālais reljefa modelis

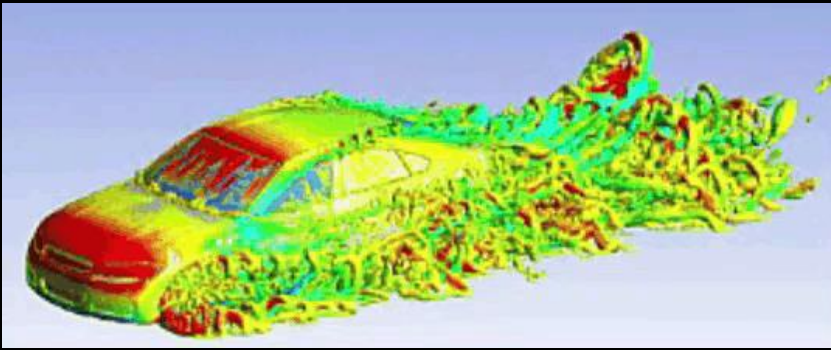
MM piemērs: Plūdu modelēšana, RD



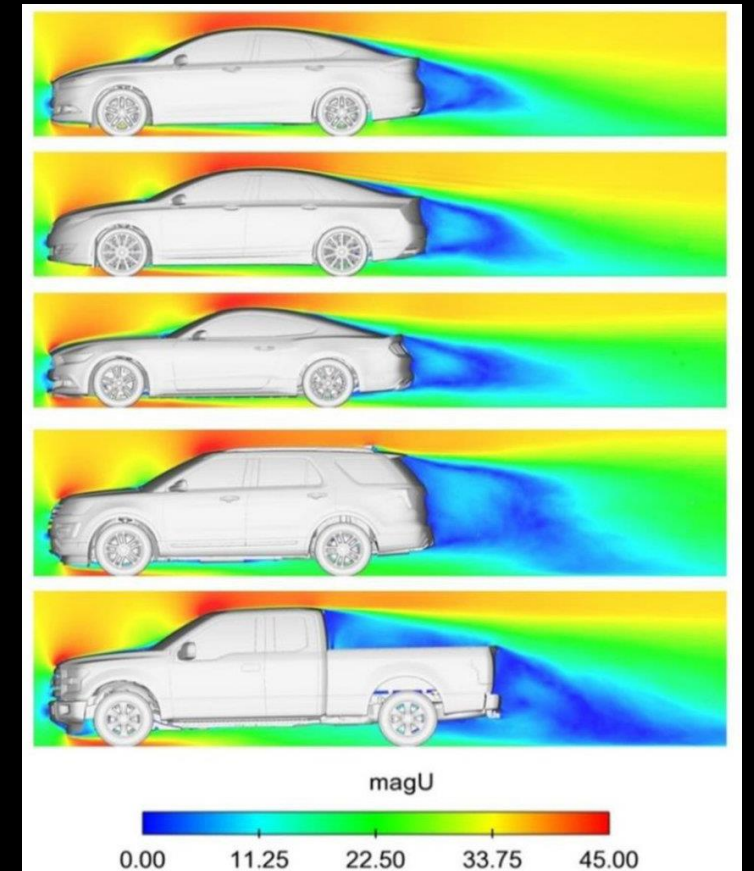
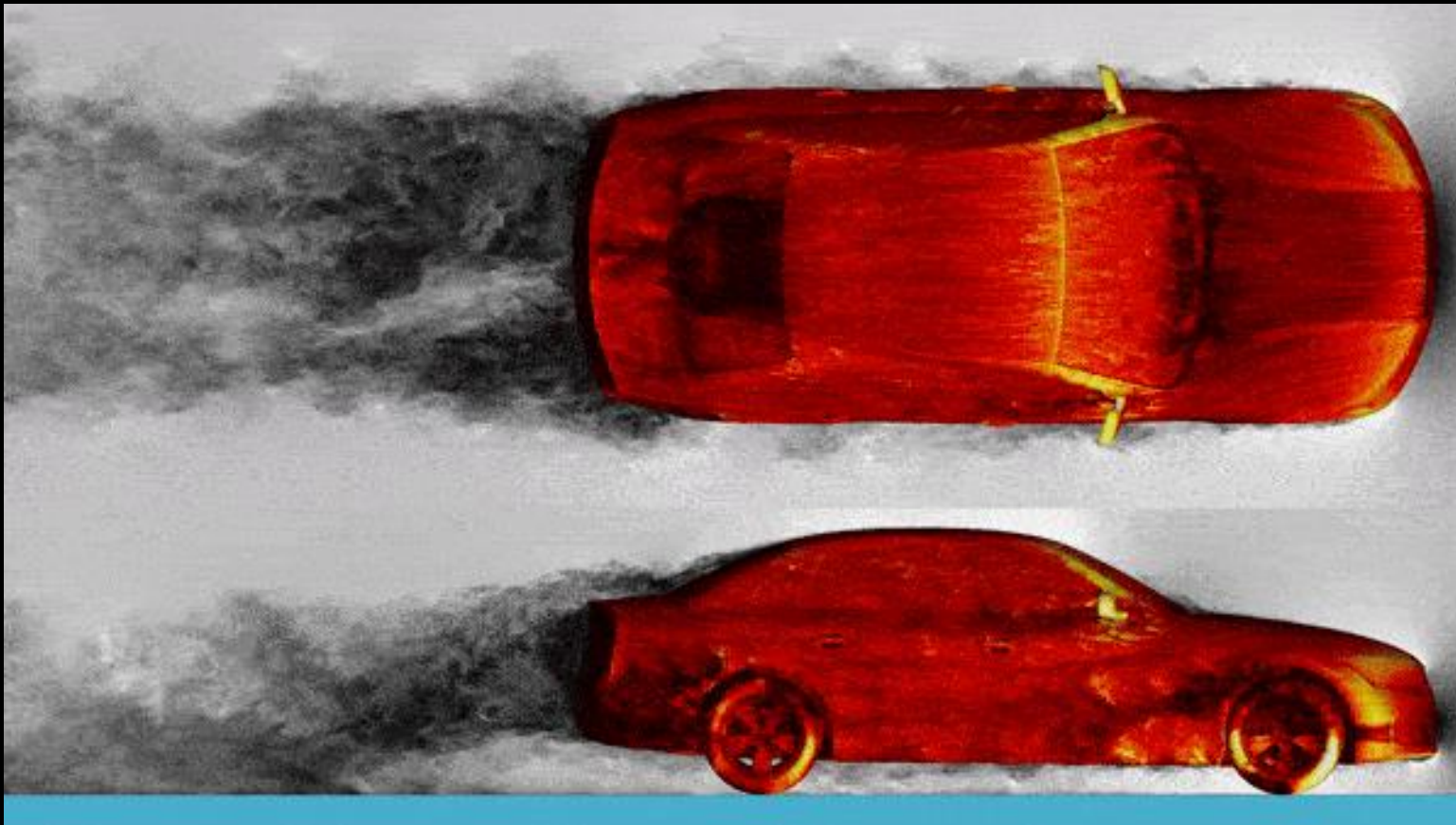
Rīgas lietus
kanalizācijas plūsmas
 $m^3/s \times 5$ gados



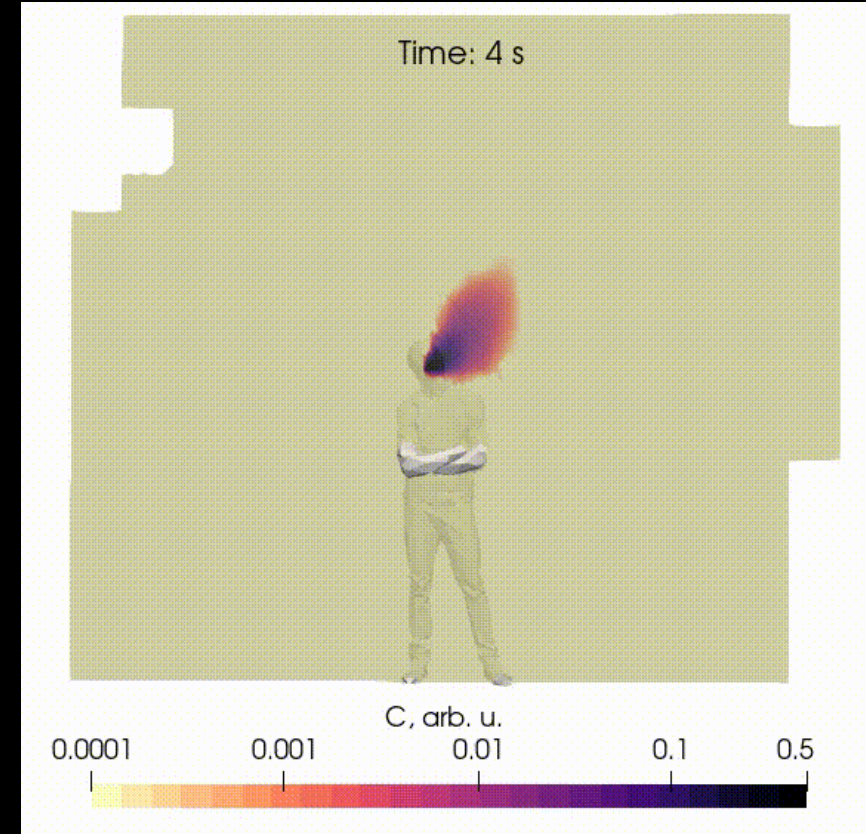
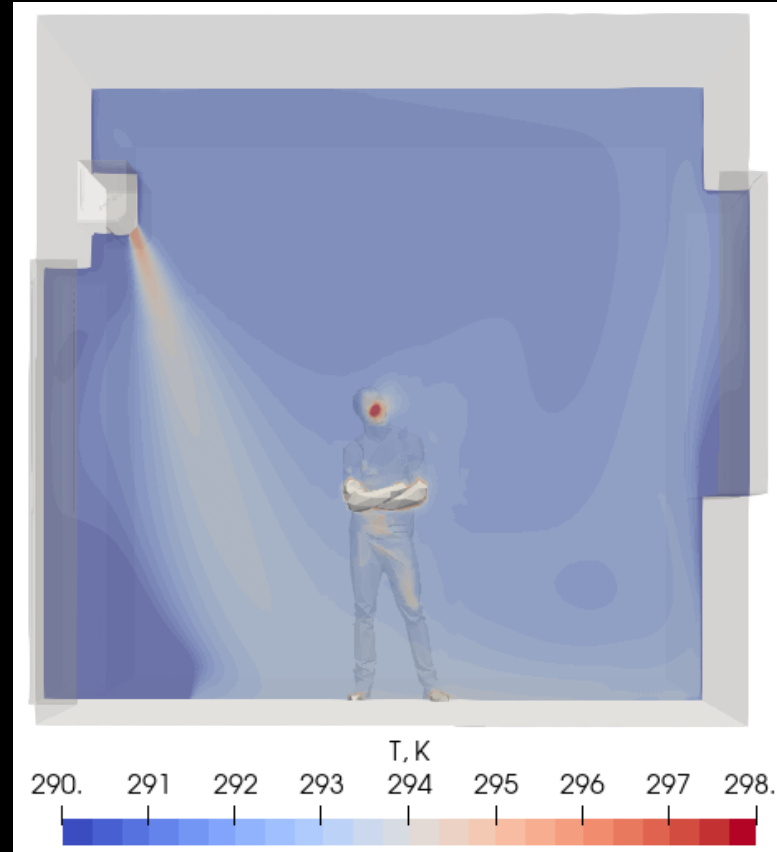
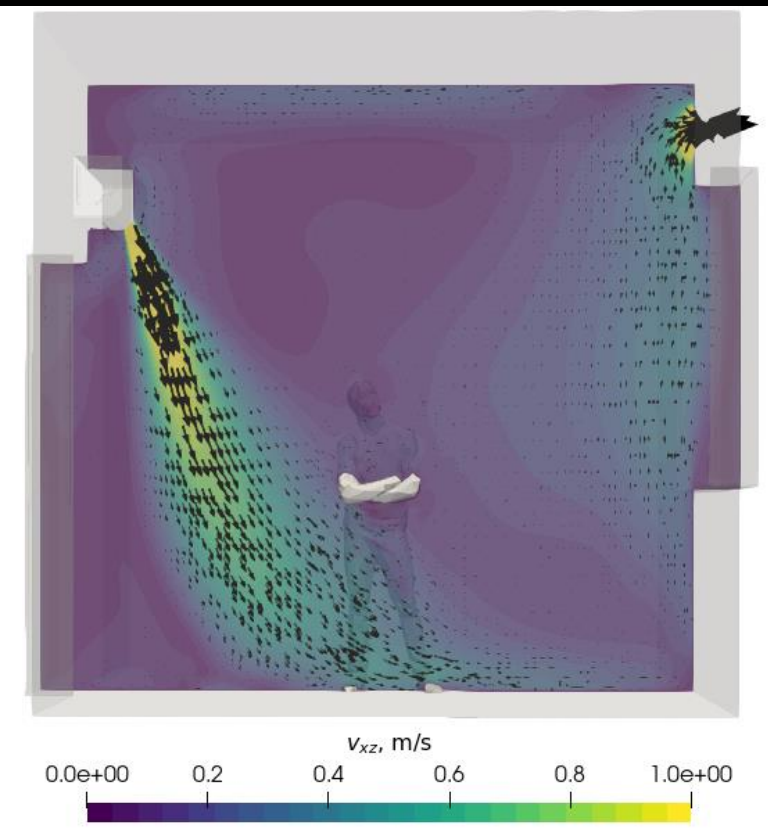
Vētras uzplūdi varbūtība 1x200 gados +276 cm



MM piemērs: automašīnu aerodinamika



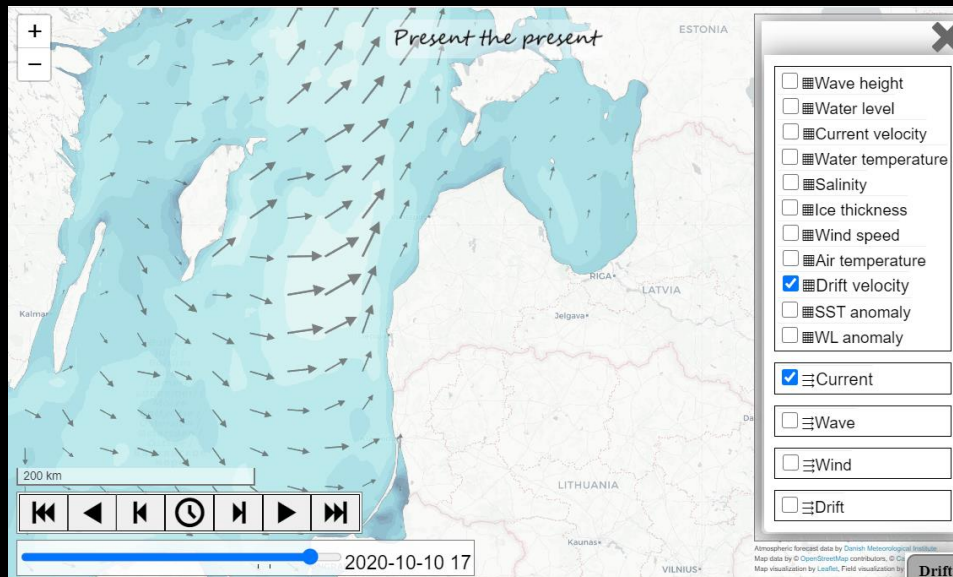
MM piemērs: gaisa plūsma telpās



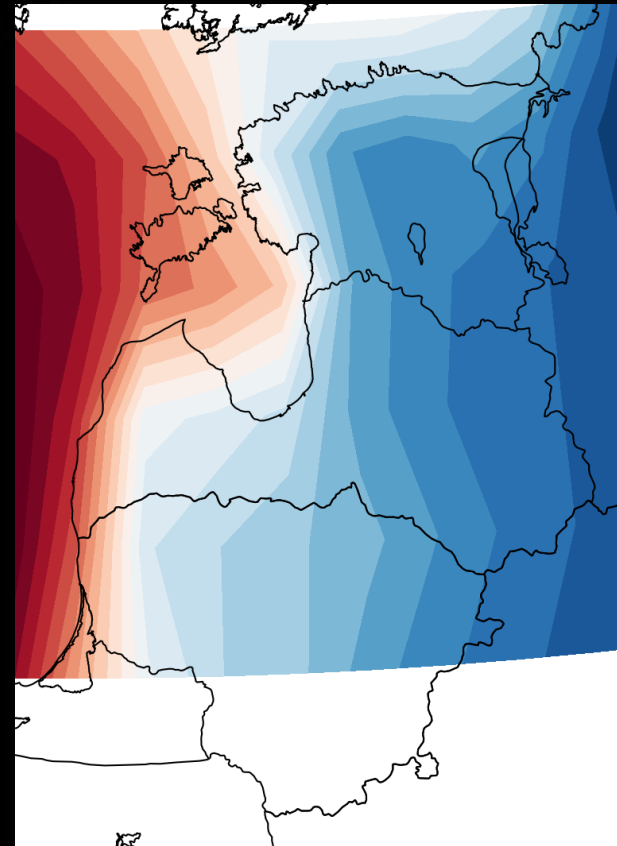
Datu apstrādes piemērs: laika prognozes

Sesonālo laika prognožu sagatavošana ar HPC: var uzlabot ilgtermiņa (vairāki mēneši) laika prognožu precizitāte, izmantojot vēsturisko klimatisko datu reanalīzi ar HPC.

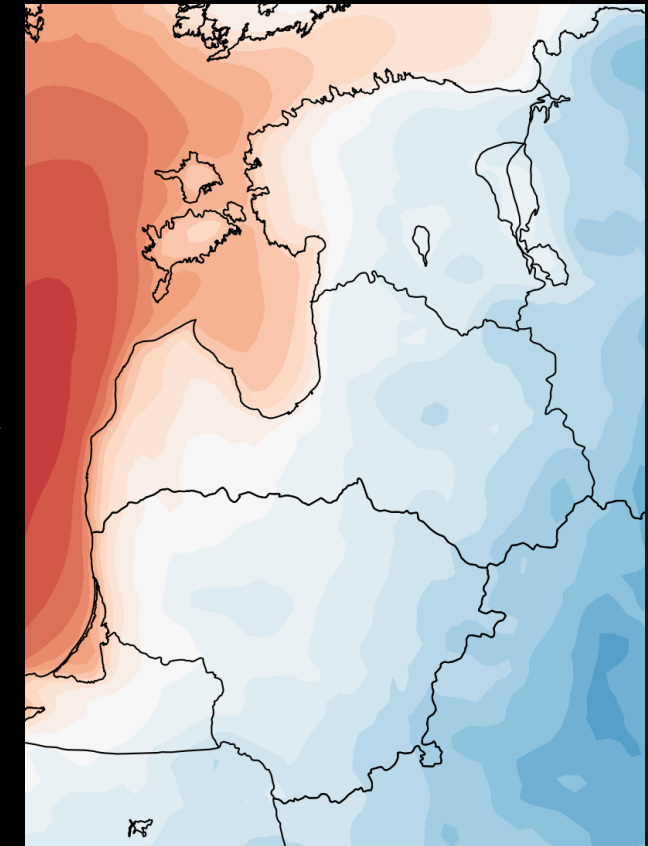
Fimar for Web – Baltijas jūrai



Orginālā prognoze



Uzlabetā prognoze



Paldies par uzmanību!