



# PLGrid Infrastructure

## Current Status and Recent Achievements

J. Kitowski, K. Wiatr, Ł. Dutka,  
T. Szepieniec, R. Pająk, M. Sterzel

ACK Cyfronet AGH

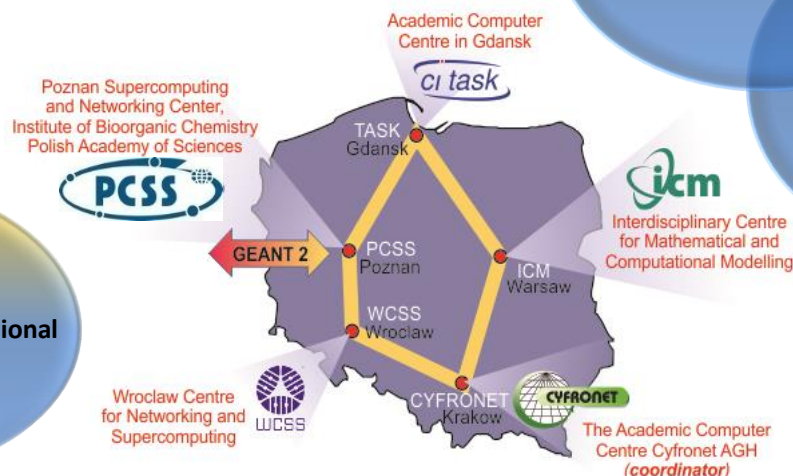
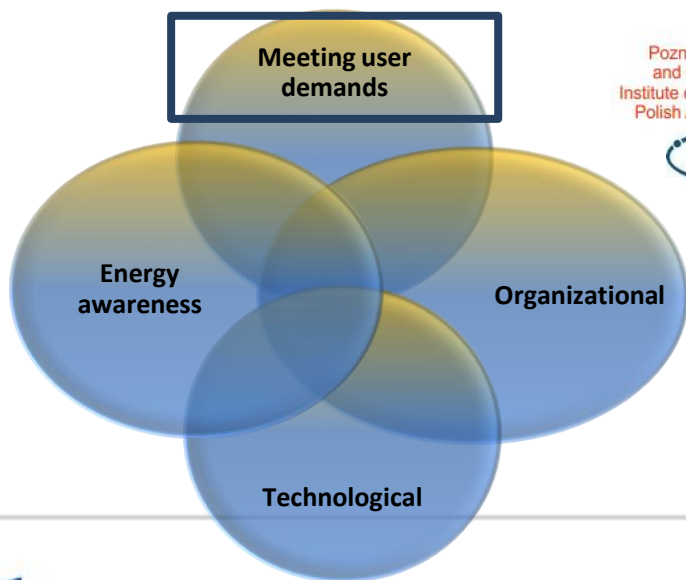
KU KDM 2017 9.03.2017

- PLGrid infrastructure development and status
- Resources
- Enhancement of Achievements
- Follows-on
- Platforms and Environments – Selected Examples
- Conclusions

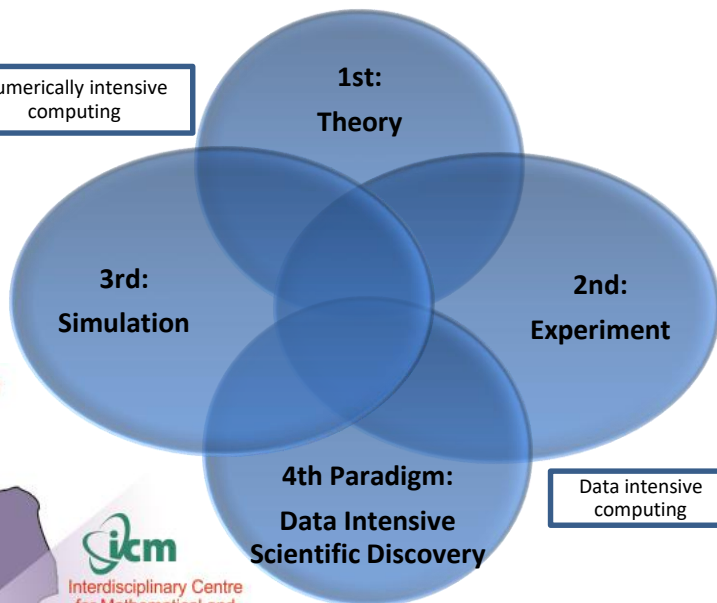
## Motivation and Issues of PLGrid Programme

- Increasing importance of Computational Science and Big Data Analysis
- e-Science and e-Infrastructure interaction
- ....
- ....
- Open Science Commons

Synergistic effort in several dimensions:



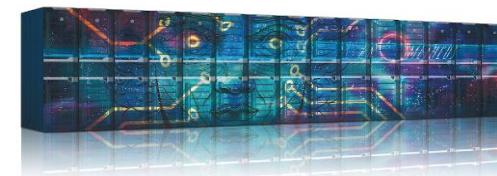
Numerically intensive computing



- Consortium created
- Activity initiated by Cyfronet

- Users' driven
- Versatile, diversified computing problems in different domains
- High-level, every-day quality service in response to users' needs on software and hardware issues
- Experienced support from helpdesk with domain specific experts' assistance experience in every-day service
- Scientific committee for evaluation of proposals applied for resources
- Analytics of complex, extensive multi-level monitoring data of
  - queues,
  - execution time,
  - number of jobs,
  - number of users,
  - scientific domains,
  - publications,
  - information on grants, etc.
- High availability: 365 x 7 x 24
- Collaboration with other HPC centres

# Top500 – Nov. 2016 – Polish Centres



Rank	Site	System	Cores	Rmax (TFlop/s)	R <sub>mean</sub> (TFlop/s)	Power (kW)
59	Cyfronet Poland	<b>Prometheus</b> - HP Apollo 8000, Xeon E5-2680v3 12C 2.5GHz, Infiniband FDR, NVIDIA Tesla K40 HPE	55,728	1,670.1	2,348.6	807.6
110	PCSS Poznan Poland	<b>HETMAN (Eagle)</b> - Huawei E9000 Blade Server, Xeon E5-2697v3 14C 2.6GHz, 56G Infiniband FDR Huawei Technology Company Ltd.	32,984	1,013.7	1,372.1	549.6
114	TASK Gdansk Poland	<b>Tryton</b> - HP ProLiant XL230a Gen9/Huawei RH1288/SOLAR 820 S5, Xeon E5-2670v3 12C 2.3GHz, Infiniband Megatel/Action	38,400	1,010.9	1,413.1	864
131	ICM Warsaw Poland	<b>OKEANOS</b> - Cray XC40, Xeon E5-2690v3 12C 2.6GHz, Aries interconnect Cray Inc.	26,016	909.6	1,082.3	585.4
205	WCSS Wroclaw Poland	<b>BEM</b> - Actina Solar 820 S6, Xeon E5-2670v3/E5-2697v3 14C/12C 2.6/2.3GHz, Infiniband FDR ACTION	22,656	695.6	859.5	353
382	ICM Warsaw Poland	RH1288 V3 Cluster, Xeon E5-2680v3 12C 2.5GHz, Infiniband FDR Huawei Technology Company Ltd.	14,540	439.1	591.2	394.9
400	National Centre for Nuclear Research Świerk Poland	<b>Świerk Computing Centre</b> - Supermicro TwinBlade SBI-7227R/Bull DLC B720, Intel Xeon E5-2680v2/E5-2650 v3 10C 2.8GHz, Infiniband QDR/FDR Bull, Atos Group	17,960	423.2	490.4	334

38 Cyfronet Prometheus Nov. 2015

386 Cyfronet Zeus Nov. 2015



# ...a long way to go ... TOP500, June 2016



Rank	Site	System	Cores	Rmax (TFlop/s)	Rpeak (TFlop/s)	Power (kW)
1	National Supercomputing Center, Wuxi, China	<b>Sunway TaihuLight</b> - Sunway MPP, Sunway SW26010 260C 1.45GHz, Sunway NRCPC	10,649,600	93,014.6	125,435.9	15,371
2	National Super Computer Center Guangzhou, China	<b>Tianhe-2 (MilkyWay-2)</b> - TH-IVB-FEP Cluster, Intel Xeon E5-2692 12C 2.200GHz, TH Express-2, Intel Xeon Phi 31S1P, NUDT	3,120,000	33,862.7	54,902.4	17,808
3	DOE/SC/Oak Ridge National Lab. United States	<b>Titan</b> - Cray XK7 , Opteron 6274 16C 2.200GHz, Cray Gemini interconnect, NVIDIA K20x Cray Inc.	560,640	17,590.0	27,112.5	8,209
4	DOE/NNSA/LLNL United States	<b>Sequoia</b> - BlueGene/Q, Power BQC 16C 1.60 GHz, Custom, IBM	1,572,864	17,173.2	20,132.7	7,890
5	RIKEN Advanced Inst.Computational Science, Japan	K computer, SPARC64 VIIIfx 2.0GHz, Tofu interconnect Fujitsu	705,024	10,510.0	11,280.4	12,660
6	DOE/SC/Argonne National Lab. United States	<b>Mira</b> - BlueGene/Q, Power BQC 16C 1.60GHz, Custom IBM	786,432	8,586.6	10,066.3	3,945
7	DOE/NNSA/LANL/SNL, United States	<b>Trinity</b> - Cray XC40, Xeon E5-2698v3 16C 2.3GHz, Aries interconnect, Cray Inc.	301,056	8,100.9	11,078.9	
8	Swiss National Supercomputing Centre (CSCS) Switzerland	<b>Piz Daint</b> - Cray XC30, Xeon E5-2670 8C 2.600GHz, Aries interconnect , NVIDIA K20x Cray Inc.	115,984	6,271.0	7,788.9	2,325
9	HLRS, Uni.Stuttgart Germany	<b>Hazel Hen</b> - Cray XC40, Xeon E5-2680v3 12C 2.5GHz, Aries interconnect, Cray Inc.	185,088	5,640.2	7,403.5	
10	King Abdullah Univ. of Science and Technology Saudi Arabia	<b>Shaheen II</b> - Cray XC40, Xeon E5-2698v3 16C 2.3GHz, Aries interconnect Cray Inc.	196,608	5,537.0	7,235.2	2,834

# Sunway TaihuLight computer (a new processor)

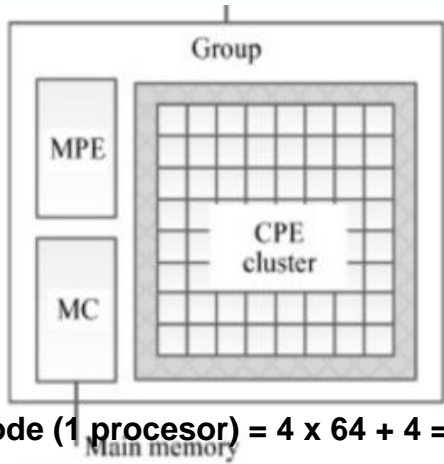
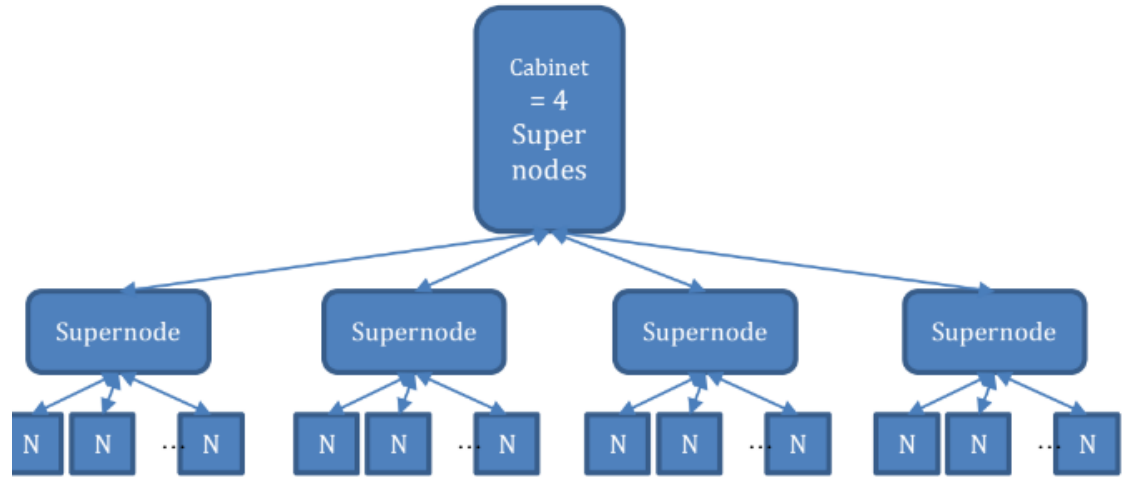


Figure 1: Core Group for Node



1 Node = 2.06 Teraflops → 1 supernode (256 nodes) = 783.97 Teraflops → 1 cabinet = 4 supernodes/3.1359 petaflops à One 40 cabinet system (160 supernodes; 40,960 nodes = 10,649,600 cores.

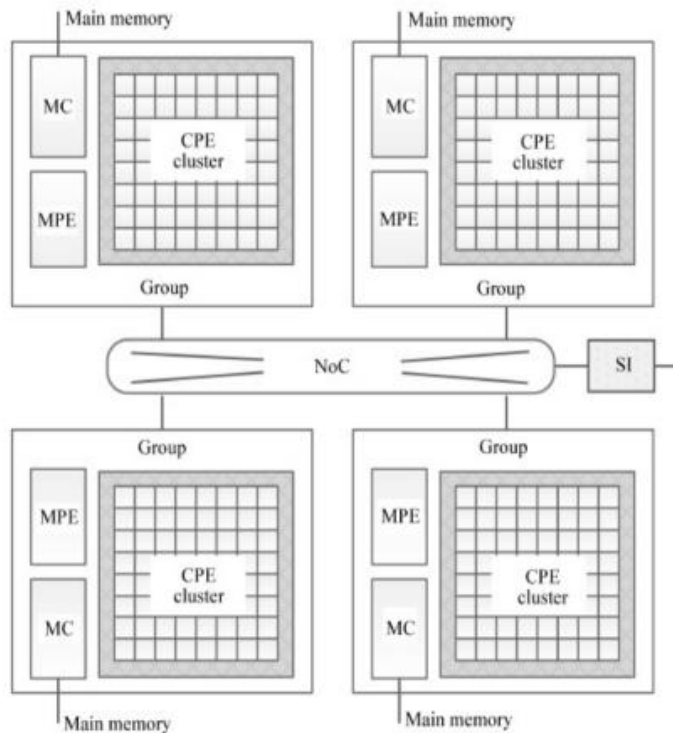


Figure 2: Basic Layout of a Node

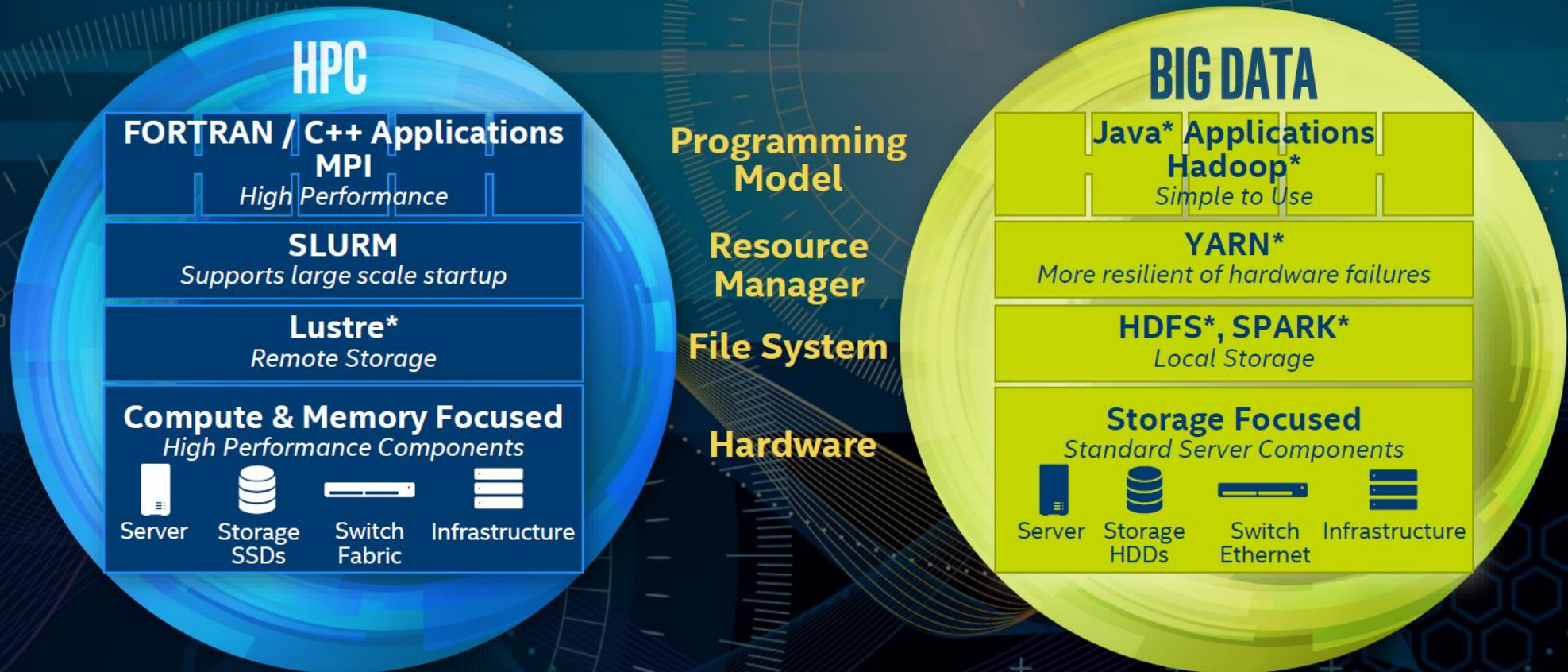
ShenWei 26010 processor



UNIA EUROPEJSKA  
EUROPEJSKI FUNDUSZ  
ROZWOJU REGIONALNEGO



# Different Systems (Today)



Daniel Reed and Jack Dongarra, *Exascale Computing and Big Data* in Communications of the ACM journal, July 2015 (Vol 58, No.7), and Intel analysis  
 Other brands and names are the property of their respective owners.



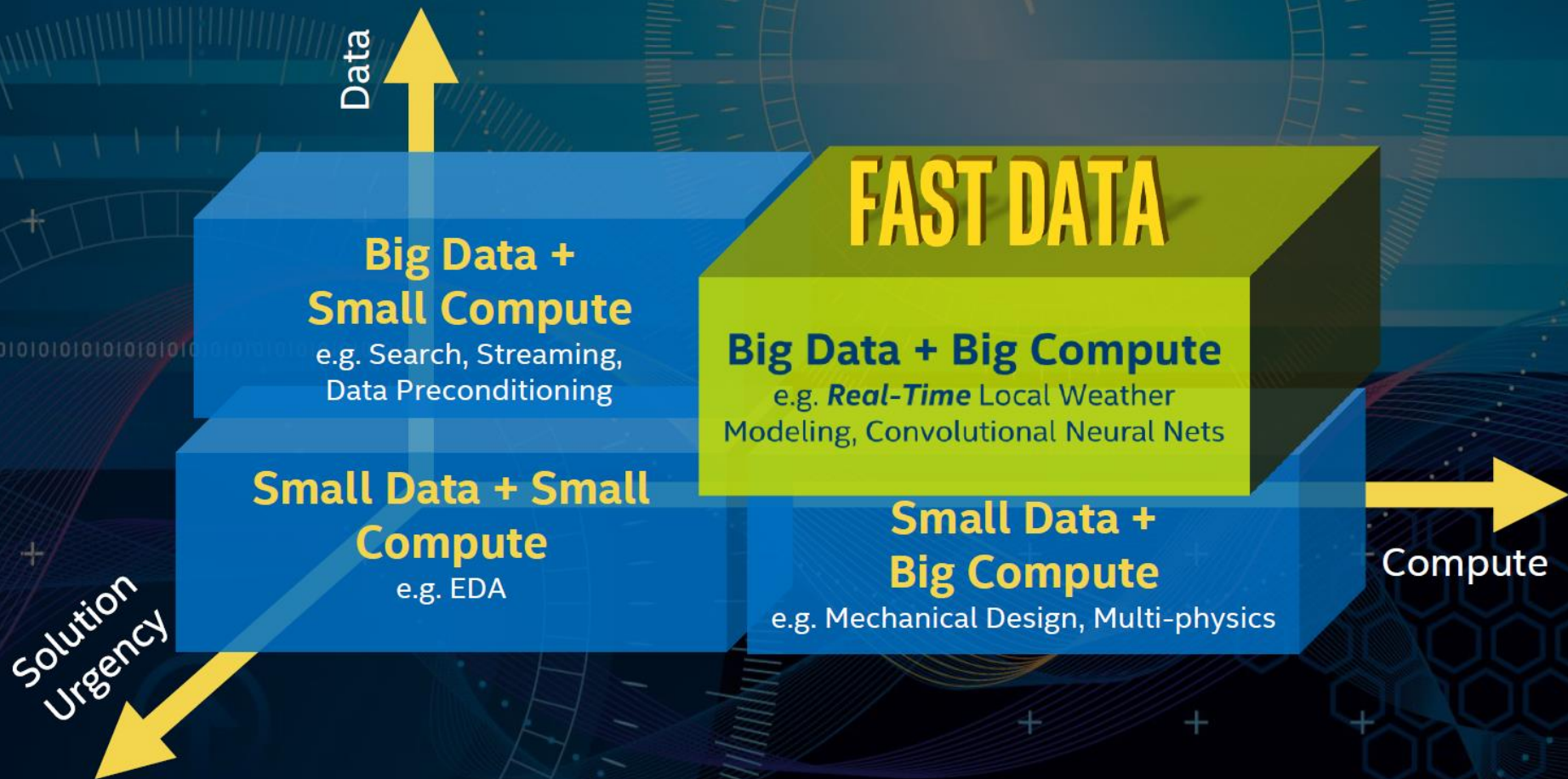
ACK: D. Reed and J. Dongarra, Exascale Computing and Big Data, Comm. ACM, 58, 7, 2015

Rajeed Hazra, (HPC || Big Data) vs (HPC & Big Data), ISC, 2015, Frakfurt





# Emerging Real-Time Workflows



# One System Architecture?

**FROM HERE ...**

**...TO?**

**HPC**

**BIG DATA**

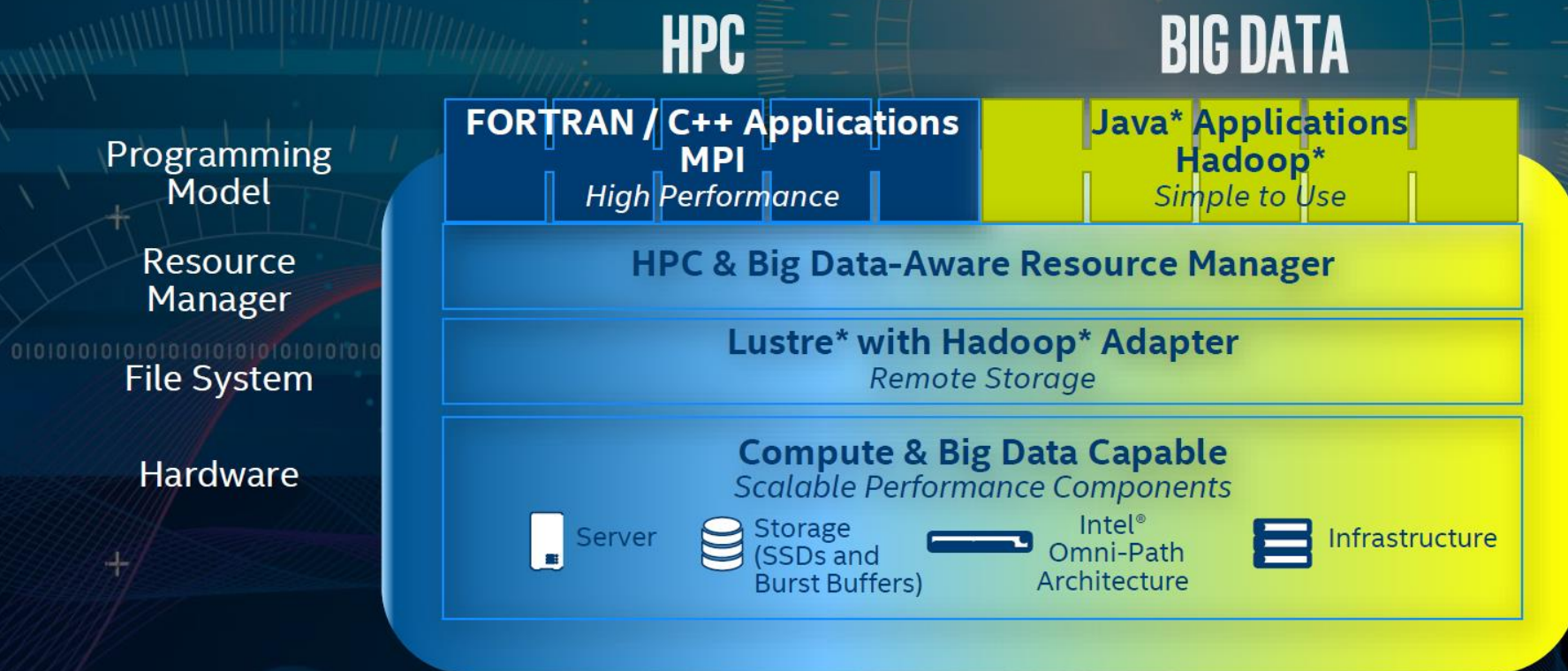
**(HPC II BIG DATA)**  
Separate Systems

**HPC**

**BIG DATA**

**(HPC & BIG DATA)**  
Single System Architecture

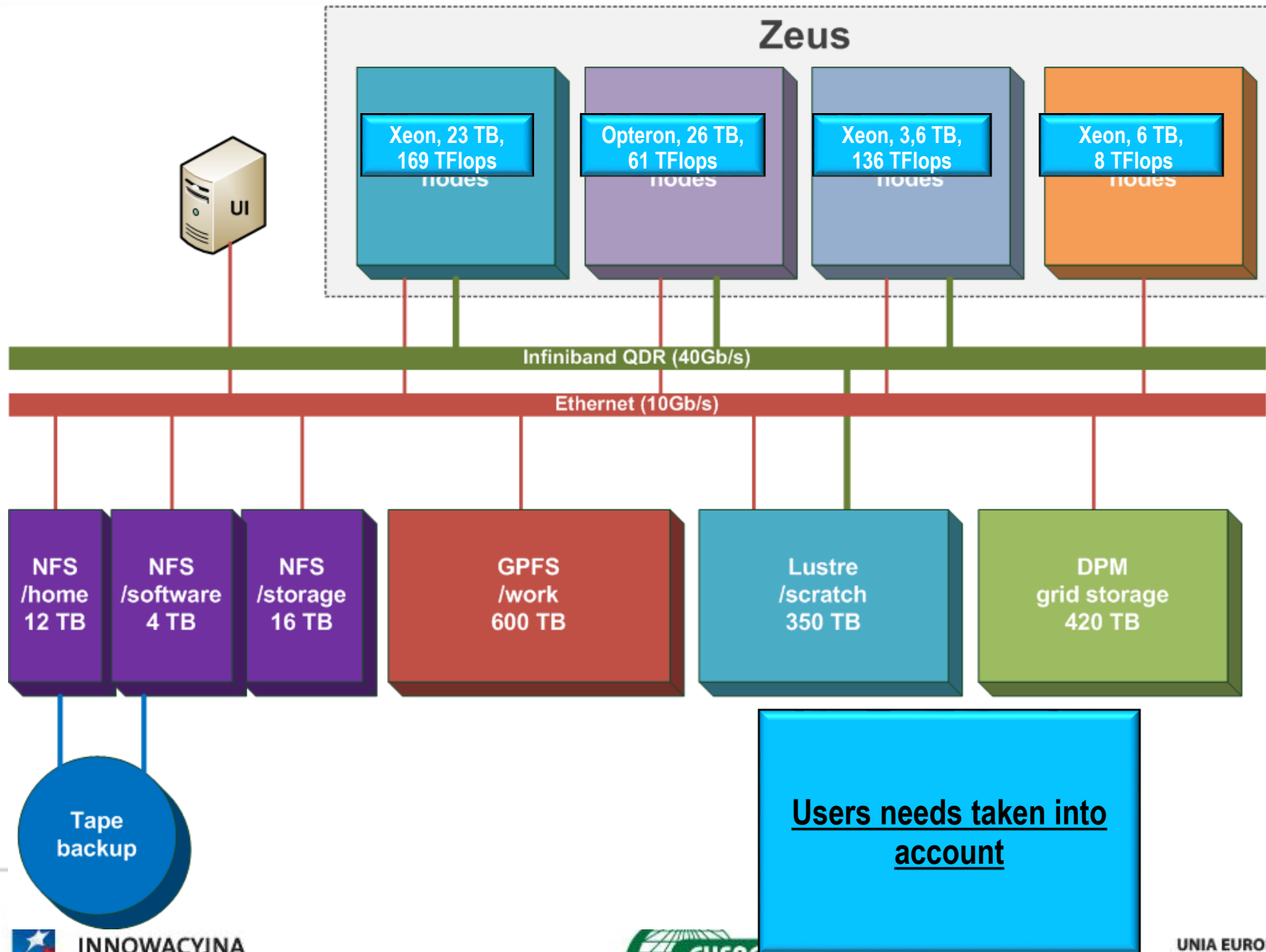
# Converged Architecture for HPC and Big Data



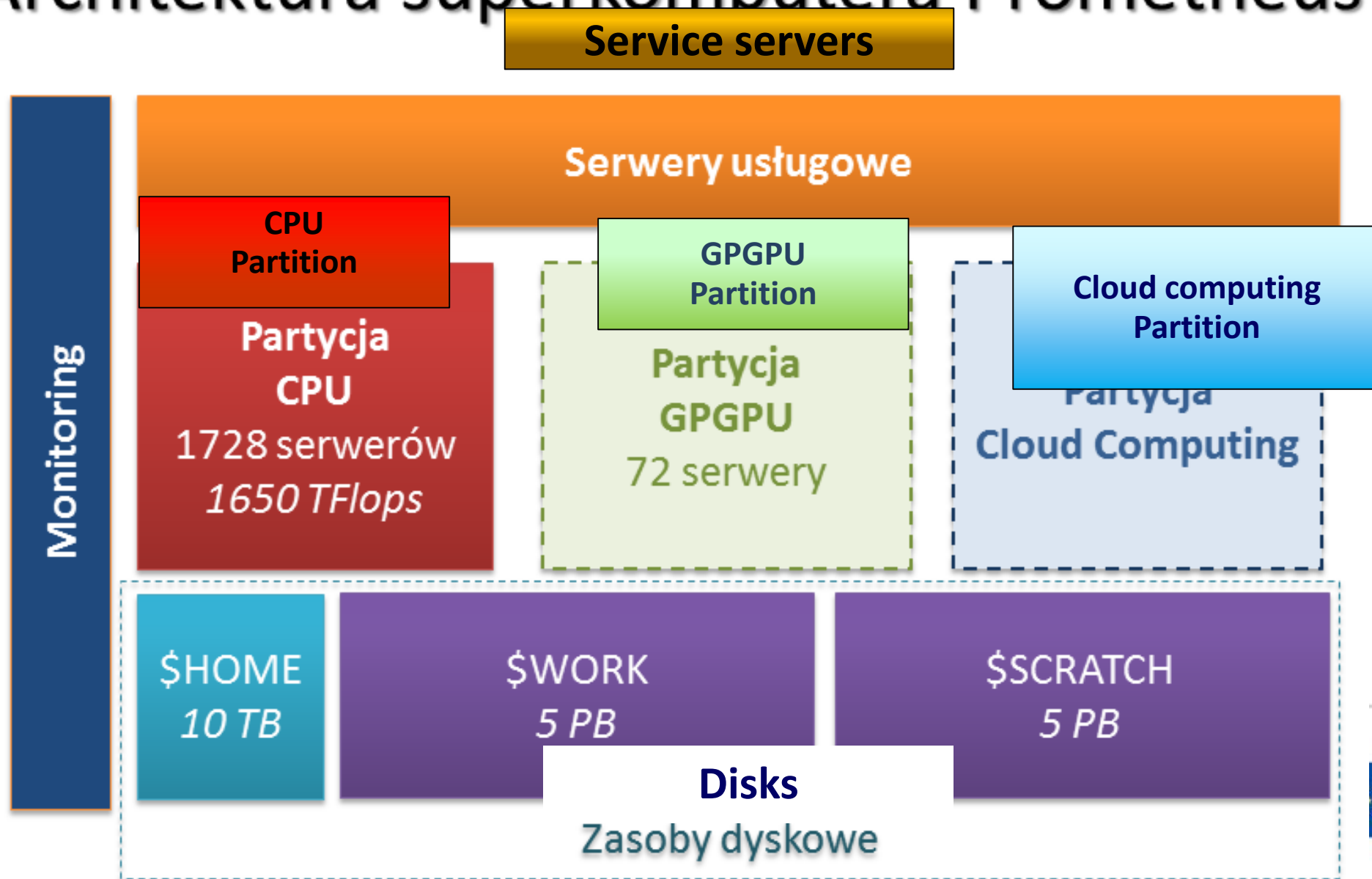
\*Other names and brands may be claimed as the property of others



# Supercomputer Zeus ( $R_{peak}$ 374 TFlops)



## Architektura superkomputera Prometheus



# RI / eInfrastructure Development

Coordinated by Cyfronet



## ■ PL-Grid (2009–2012)

- **Outcome:** Common base infrastructure

## ■ PLGrid PLUS (2011–2015)

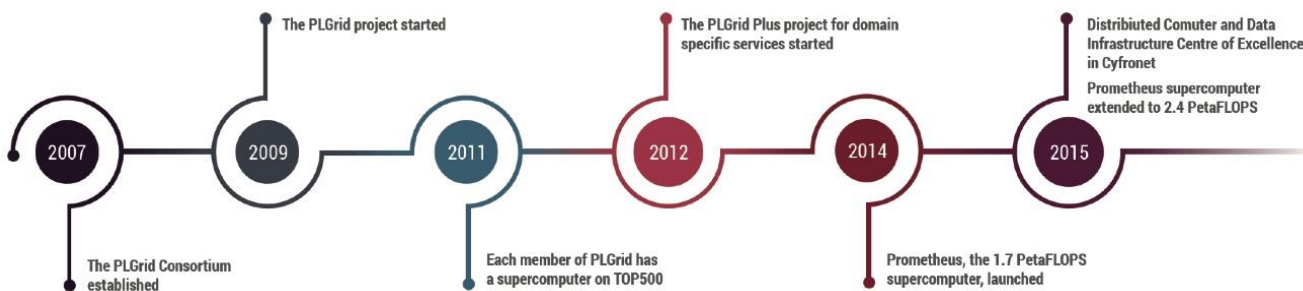
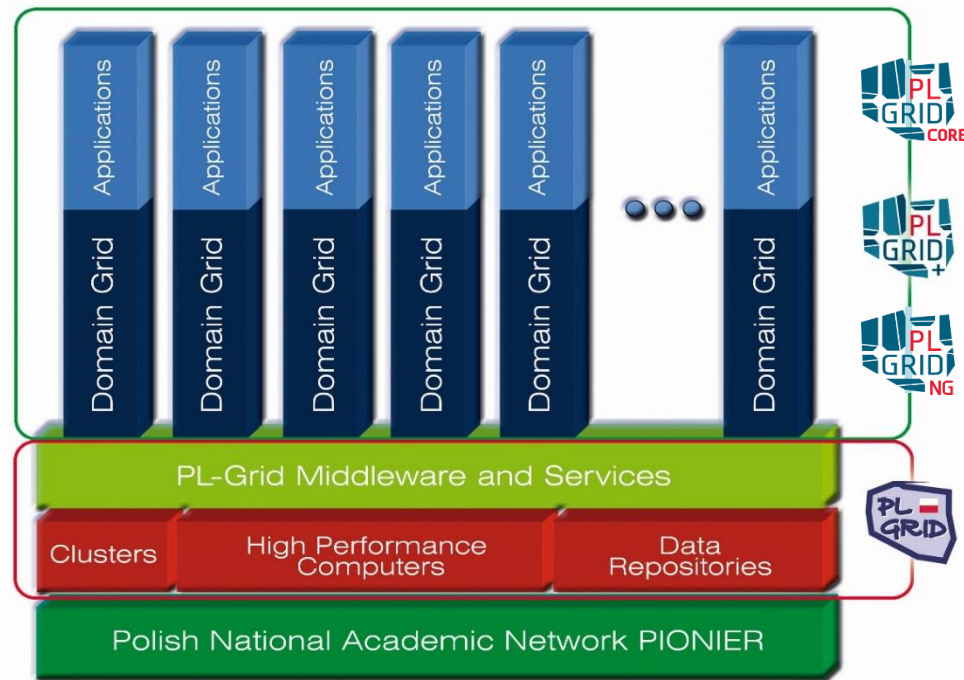
- **Outcome:**
  - **Focus on users** (training, helpdesk...)
  - Domain specific solutions: 13

## ■ PLGrid NG (2014–2015)

- **Outcome:**
  - Optimization of resources usage, training
  - Extension of domain specific by: 14

## ■ PLGrid CORE (2014–2015)

- **Outcome:** Competence Center
  - Open Science paradigm (large workflow app., data farming mass comp., .....)
  - End-user services



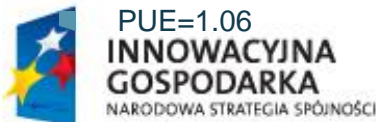
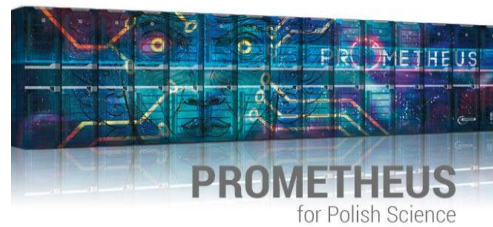
# Summary of Projects Results

## Research Infrastructures vs. e-Infrastructures

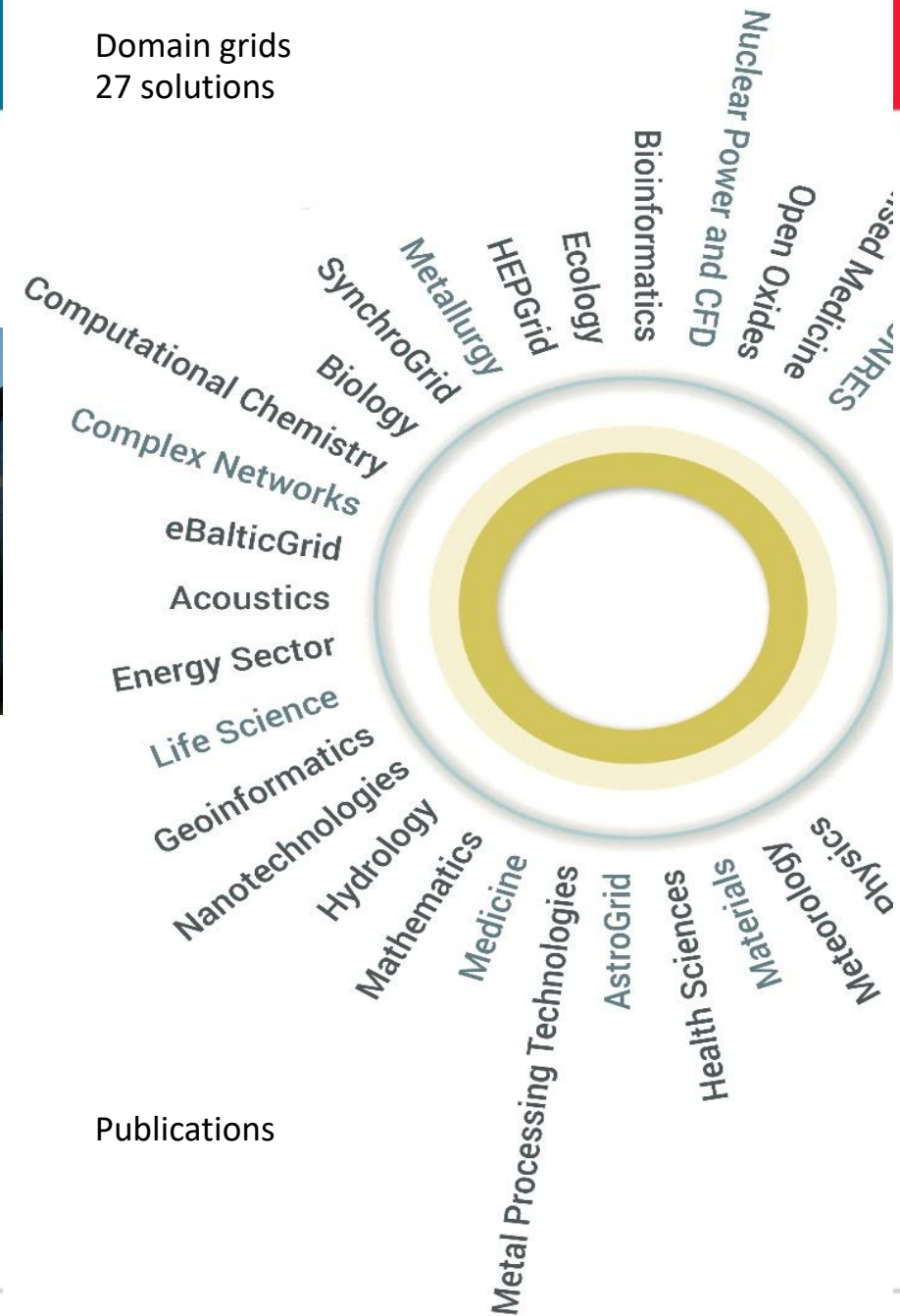
- Synergy between domain specific researchers and IT experts. Close collaboration.
- Ecosystem for making science with pillars
  - software
    - tools, environments, services
  - hardware
    - HPC, HTC, data intensive
  - expertise (from communities)
    - domain specific and IT
  - community involvement in all activities
  - helpdesk (efficiency in operation), training, marketing
  - financial issues

## Prometheus Cluster (2014/2015)

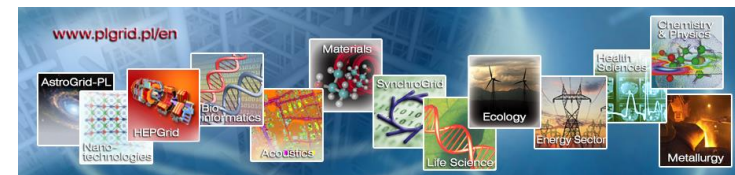
- $R_{peak} = 2349$  TFlops
- 52 728 Haswell cores
- 144 Nvidia K40 XL
- HP Apollo 8000
- #38 @ TOP500 (XI 2015)



Domain grids  
27 solutions



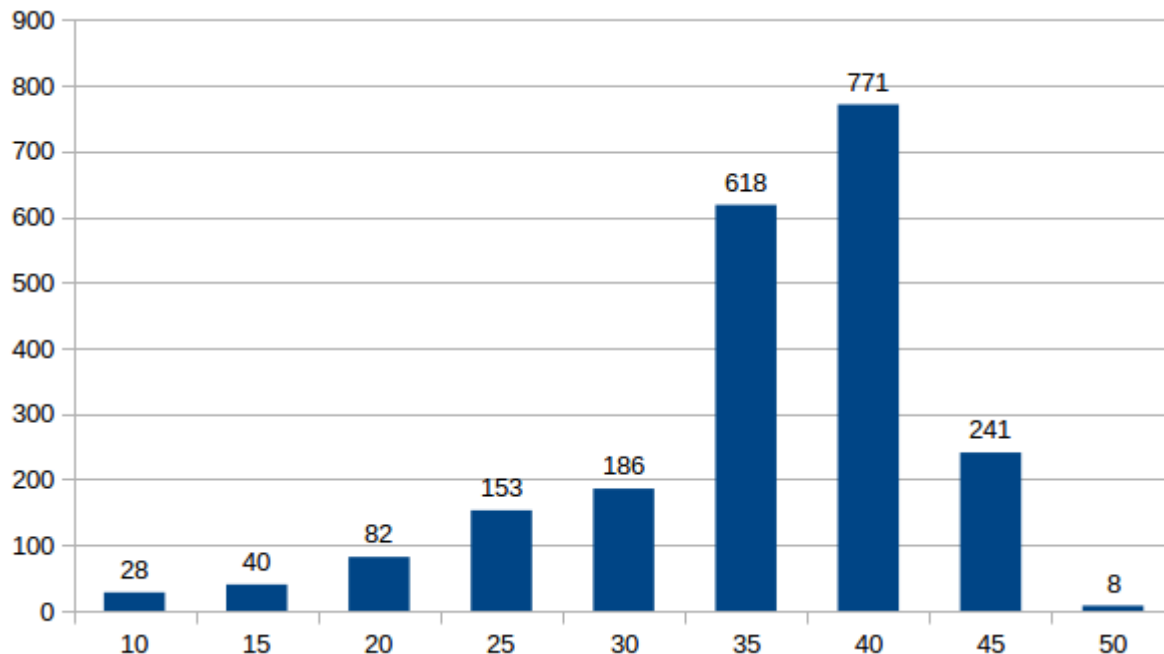
Publications



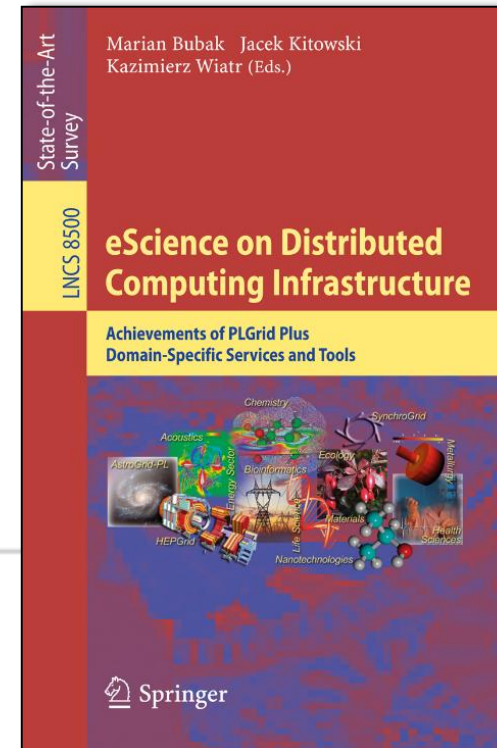
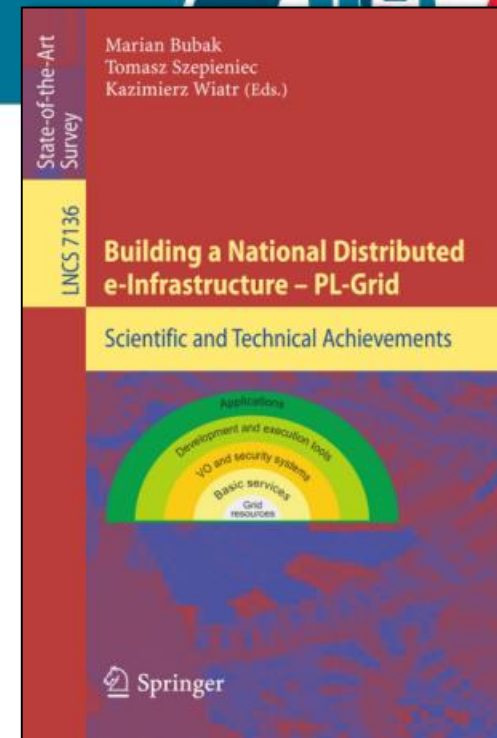
# Summary of Projects Results (up-to-date-2017)

- Facilitation of community participation in international collaboration
- Beyond PLGrid Programme (some examples)
  - EGI Council, EGI Executive Board
  - FP7 (VPH-Share, VirtROLL, PaaSage....)
  - EGI-InSPIRE, FedSM, WLCG, OpenAIRE, EMI....
  - EGI-Engage, Indico DataCloud, EPOS IP, CTA, PRACE, EUDAT, Everest, ISMOP, EurValve, POLFAR, H2020....
- No. of Publications vs. Ministry categories (good record !)

26 papers  
on PL-Grid  
Project results



36 papers  
on PLGrid Plus  
Project results  
147 authors,  
76 reviewers





# Journal Publications (subjective selection)



Journal	IF (WoS)
J.Chem.Theor.Phys.Appl.	5.31
Phys.Lett. B	6,019
J.High Energy Phys.	6,22
Astronomy & Astrophys.	4,479
Inorganic Chem.	4,794
J.Org.Chem.	4,638
Optic Lett.	3,179
Appl.Phys.Lett.	3.515
J.Comput.Chem.	3,601
J.Phys.Chem. B	3,377
Soft Matter	4,151
Int.J.Hydrogen Energy	2,93
Physica B	1,133

Journal	IF (WoS)
J.Chem.Phys.	3,122
J.Phys.Chem.Lett.	6,687
Phys.Chem.Chem.Phys.	4,638
Fuel Processing Techn.	3,019
J.Magn. & Magn. Mat.	2,002
Eur.J.Inorg.Chem.	2,965
Chem.Phys.Lett.	1,991
Phys.Rev.B	3,664
Eur.Phys.J.	2,421
Future Gen.Comp.Syst.	2,639
J.Phys.Chem. C	4,835
Crystal Growth & Desing	4,558

Journal	IF (WoS)
Macromolecules	5,927
Astrophys.J.Lett.	5,602
Phys.Rev.Letters	7,728
J.Chem.Theor.Appl.	5,31
Astrophys.J	6,28
Chem.Physics	2,028
Molec.Pharmaceutics	4,787
Eur.J.Pharmacology	2,684
Energy	4,159
Carbon	6,16
J.Biogeography	4,969
Electrochem.Comm.	4,287
J.Magn.&Magn.Mat.	1,892

## Conferences:

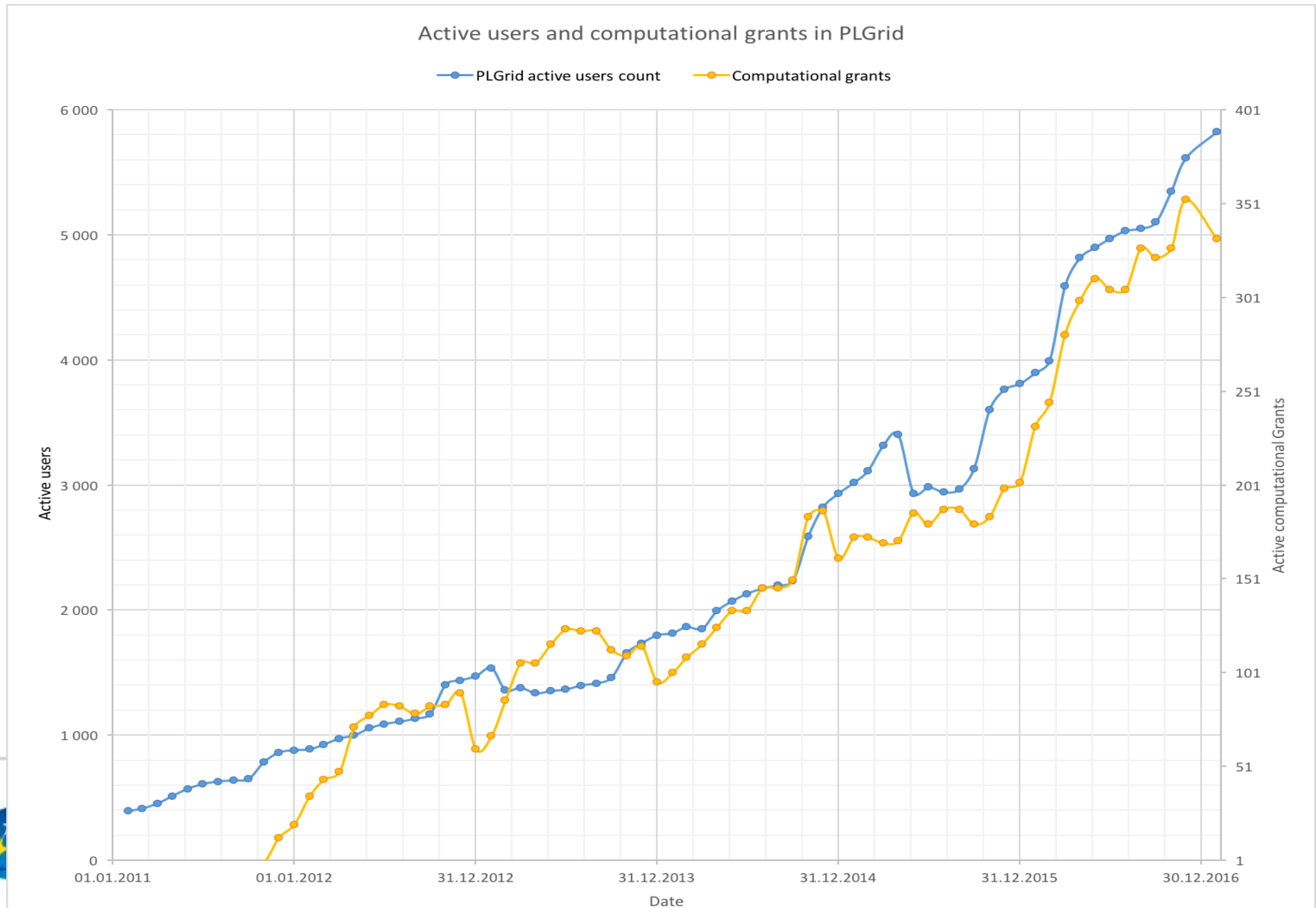
- Cracow Grid Workshop (since 2001)
- KU KDM (since 2008)
- Dzień Otwarty (since 2004)



# Summary of Projects Results



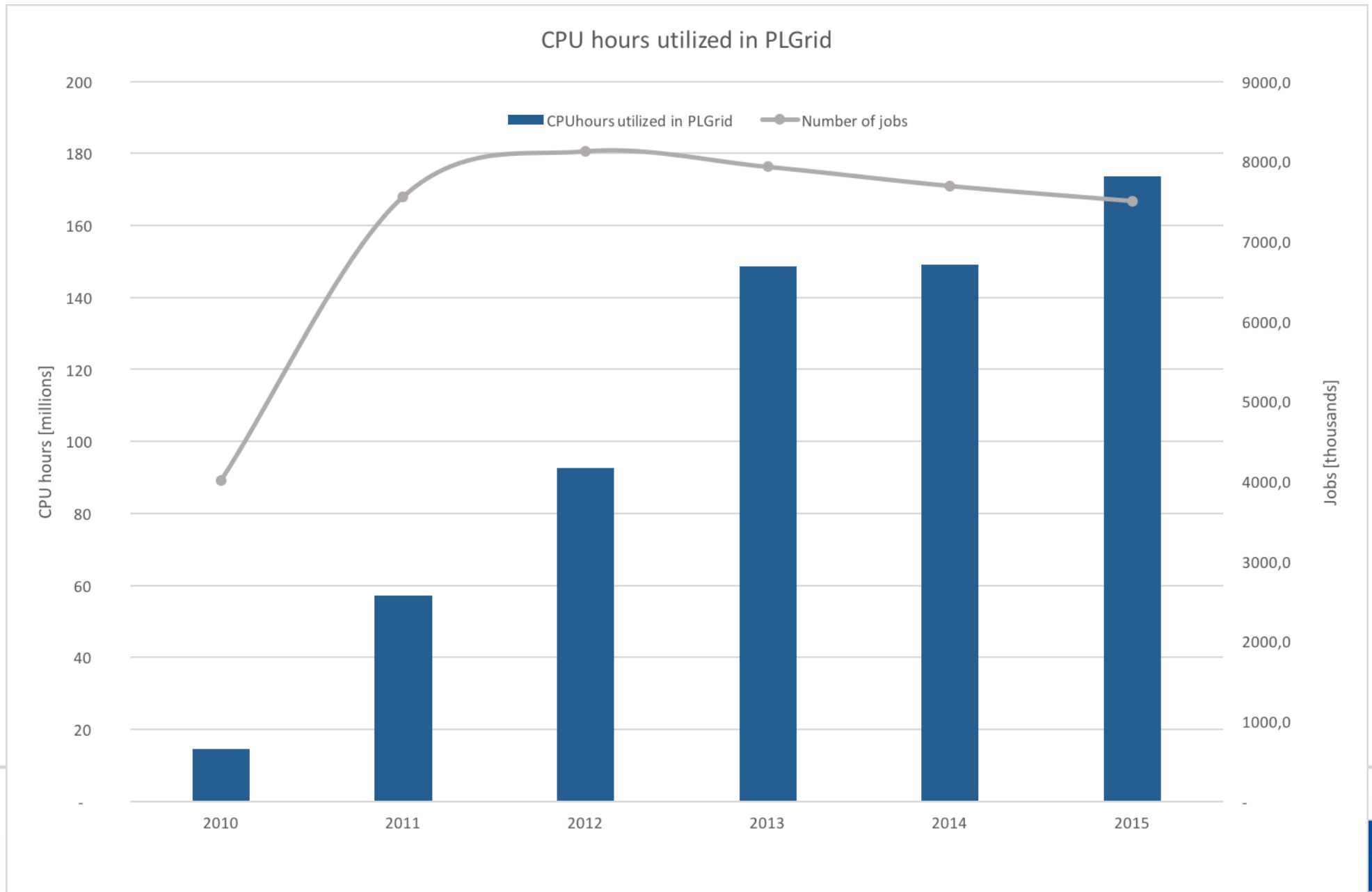
Active users and grants (up-to-date-XII-2017)



# Summary of Projects Results



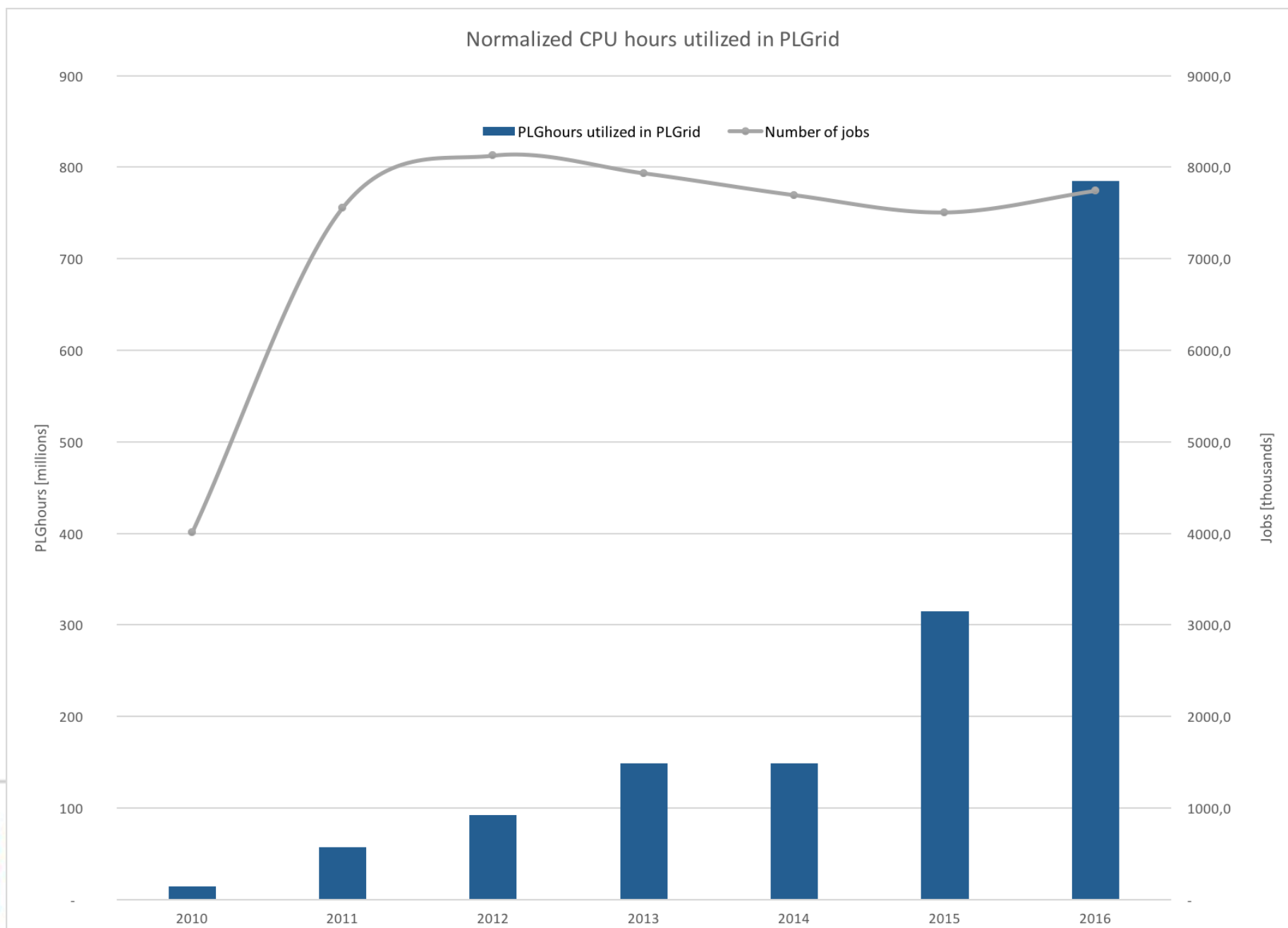
PLGrid CPU hours and number of jobs (up-to-date)



# Summary of Projects Results



## PLGrid CPU hours and number of jobs (up-to-date-2017)



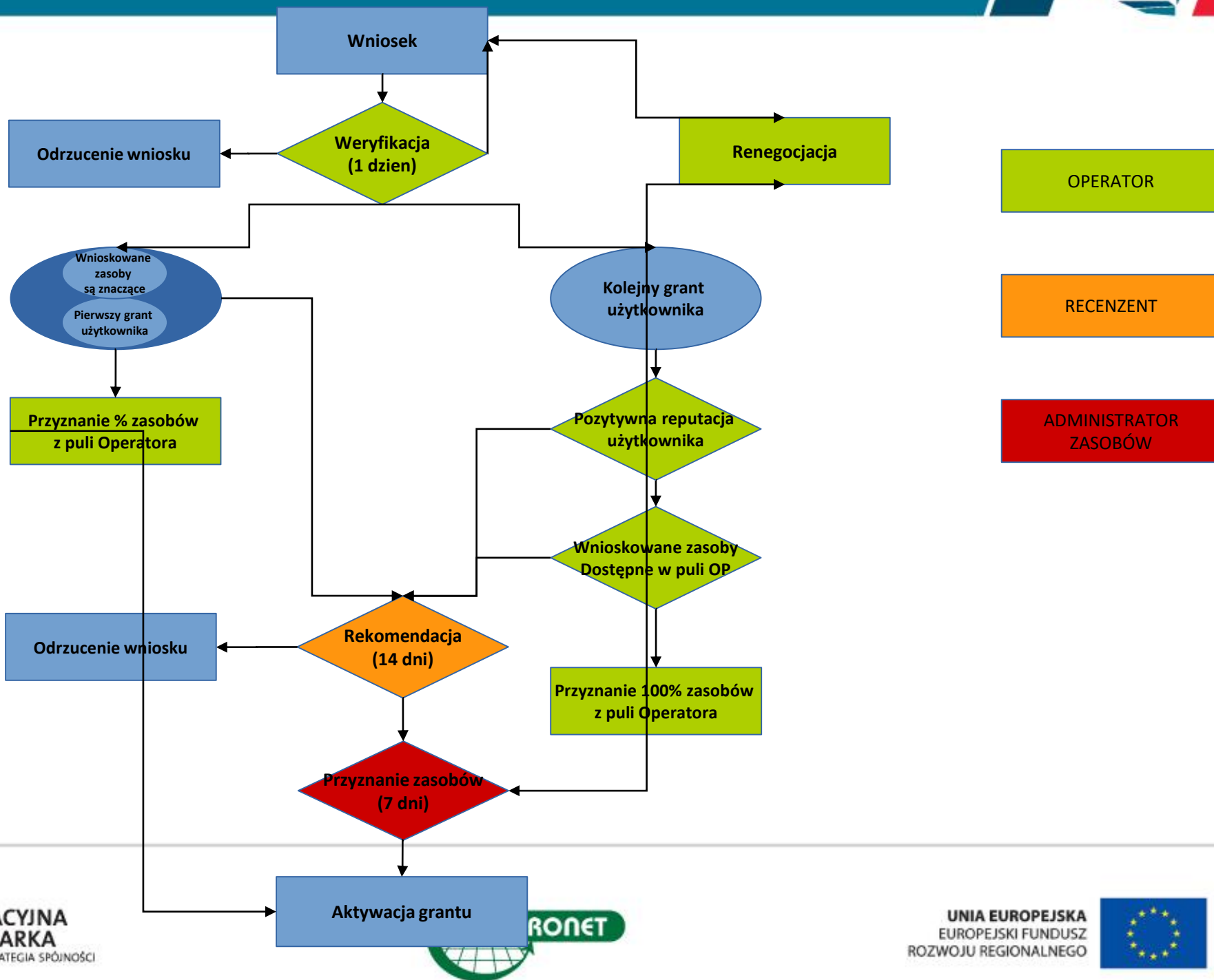
## ■ Examples of grants on Prometheus

- astropic15  
CPU hours limit – 80 mln
- plgbiomd  
CPU hours limit – 70 mln
- osmolity2  
CPU hours limit – 40 mln

## ■ Examples of grants – others

- PROTMD  
Cyfronet  
Research on proteins using MD  
limit 80 mln hours (2,800 cores)
- PCJ2015GA  
ICM  
Research on connectome of nematodes using GA  
limit 15 mln hours (6,000 cores)
- PSB  
TASK, Cyfronet, ICMM, WCSS  
New characteristics of DNA in the context of tumor therapy  
limit 11 mln hours (1,200 cores)

# Computational Grants New procedure



## Deployed PLGrid Tools, Platforms, Environments – selected examples

**Adobe Connect** - to cenione na rynku rozwiązanie do prowadzenia telekonferencji do 50 uczestników jednocześnie.

telekonferencje

**Confluence** - to przestrzeń typu "wiki" do agregowania wiedzy.

Atlassian  
**Confluence**

dokumentacja

**Jira** - to narzędzie do planowania pracy i śledzenia jej efektów.

ADOBE®  
CONNECT™

Atlassian  
**Stash**

**Stash** - oprogramowanie do śledzenia zmian w kodzie źródłowym

Atlassian  
**JIRA**

śledzenie ewolucji oprogramowania

zarządzanie zadaniami





## Katalog Aplikacji i Usług

Szukaj ADF...


- ADF Aplikacja
- ADF 2014.05 Wersja aplikacji
- ADF 2014.07 Wersja aplikacji
- ADF 2014.10 Wersja aplikacji
- ADF 2010.02 Wersja aplikacji












### Statystyki

Aplikacje	591
Wersje	1379
Instancje	2037
Usługi	102

<https://data.plgrid.pl/>

- Dostęp do danych przez przeglądarkę internetową

ZAWARTOŚĆ FOLDERU: PEOPLE /  / BADANIA / LUTY 2014 / [Dodaj pliki](#) [Nowy folder](#)

Prawa	Rozmiar	Data modyfikacji	Nazwa	Typ
-rw-r--r-- 	11.6 MB	Jan 27 22:24	 GSM1019938_NBM6-P.CEL	Plik <span>Na pewno? <a href="#">Tak</a> <a href="#">Nie</a></span>
<input type="text" value="rw-r-----"/>  	3.5 MB	Jan 27 22:31	 GSM933008_US91903683 Dec08_1_1.txt	Plik <a href="#">Usun</a>
-rw-r--r-- 	5.11 MB	Feb 5 16:25	<input type="text" value="GSM980568_MB2009031253.CEL"/>  	Plik <a href="#">Usun</a>
drwxr-xr-x 	2 KB	Feb 8 14:47	 aktualne_pliki	Folder <a href="#">Usun</a>
-r--r-- 	128 KB	25 21:07	 all-new-3class-tr	Plik <a href="#">Usun</a>

<https://submit.plgrid.pl/>



- Rimrock – Robust Remote Process and Job Controller
- Ułatwia pracę z zadaniami obliczeniowymi na zdalnych zasobach
- Umożliwia pracę z zadaniami wsadowymi oraz uruchomienie interaktywnej aplikacji
  - dostarcza prostego interfejsu RESTowego do wysyłania i odbioru danych oraz kontroli zadań

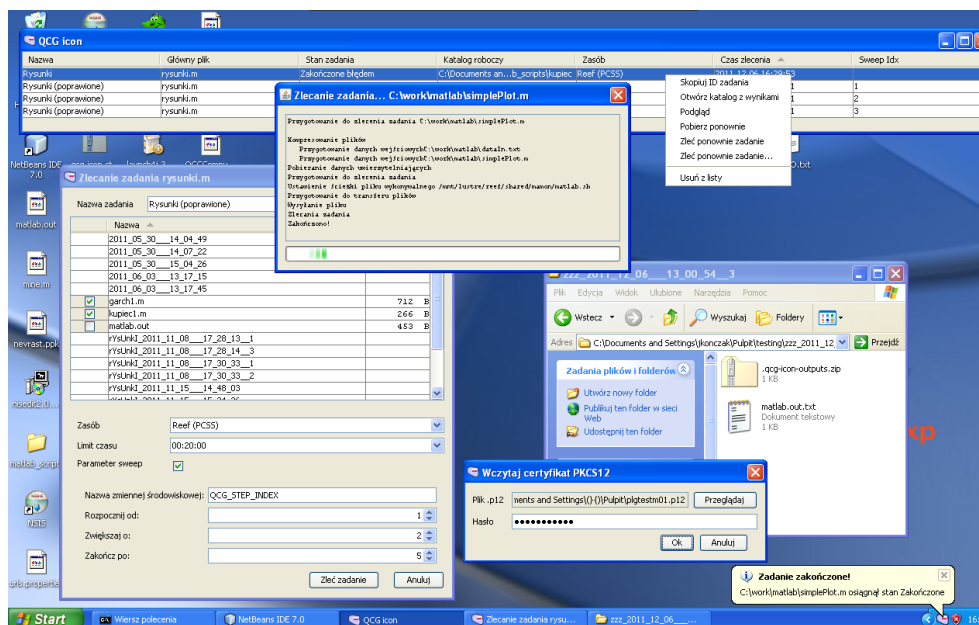


<http://www.qoscosgrid.org/trac/qcg-icon>

- Lekka aplikacja graficzna do zarządzania zadaniami gridowymi
- Szerokie portfolio wspieranych aplikacji z chemii obliczeniowej

- Gaussian
- GAMESS
- Molpro
- Dalton
- Turbomole
- ADF
- CRYSTAL09

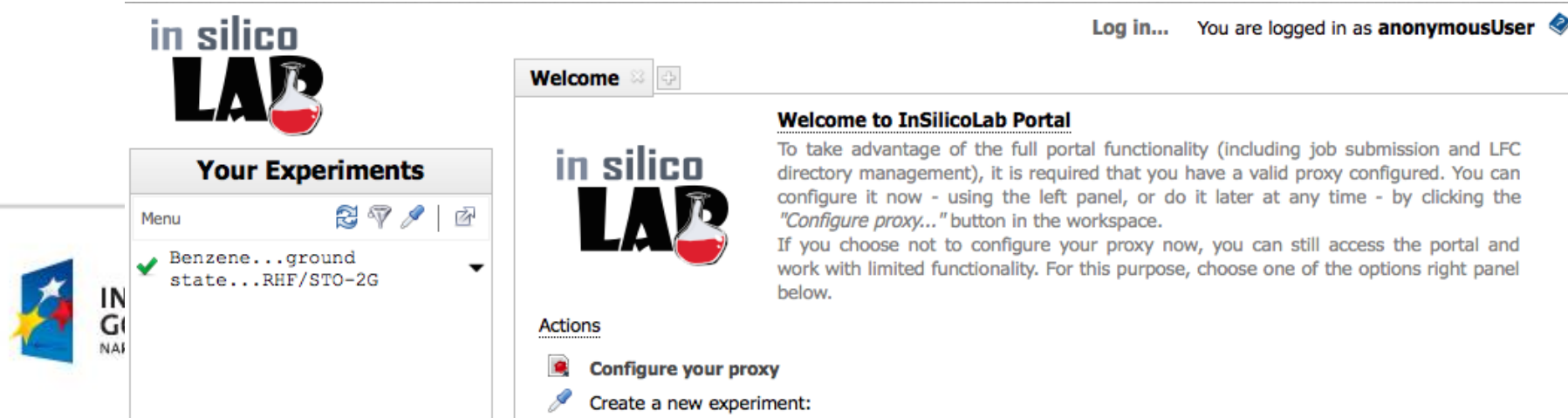
- integracja z GaussView





<http://insilicolab.grid.cyfronet.pl/>

- Środowisko pracy z systemem zintegrowanych narzędzi, które:
  - wspomagają zarządzanie złożonymi obliczeniami
  - automatyzują powtarzalne cykle obliczeń
  - umożliwiają w wygodny sposób zarządzanie procesem obliczeń
  - ułatwiają zarządzanie rozproszonymi danymi eksperymentu
  - umożliwiają wspólną analizę rezultatów wielu równoległych obliczeń
  - ułatwiają współpracę pomiędzy badaczami pracującymi nad wspólnymi projektami
  - nie rozpraszają użytkowników wykorzystywaną technologią - bez forsowania zmiany sposobu myślenia naukowców



The screenshot shows the InSilicoLab Portal interface. At the top right, it says "Log in... You are logged in as anonymousUser". The main content area is titled "Welcome" and contains the "in silico LAB" logo and a message: "Welcome to InSilicoLab Portal. To take advantage of the full portal functionality (including job submission and LFC directory management), it is required that you have a valid proxy configured. You can configure it now - using the left panel, or do it later at any time - by clicking the 'Configure proxy...' button in the workspace. If you choose not to configure your proxy now, you can still access the portal and work with limited functionality. For this purpose, choose one of the options right panel below." Below the message are two actions: "Configure your proxy" and "Create a new experiment:". On the left side, there is a "Your Experiments" panel with a menu and a list of experiments, including "Benzene...ground" and "state...RHF/STO-2G".



<http://insilicolab.grid.cyfronet.pl/>



## ■ Chemia kwantowa oraz biochemia

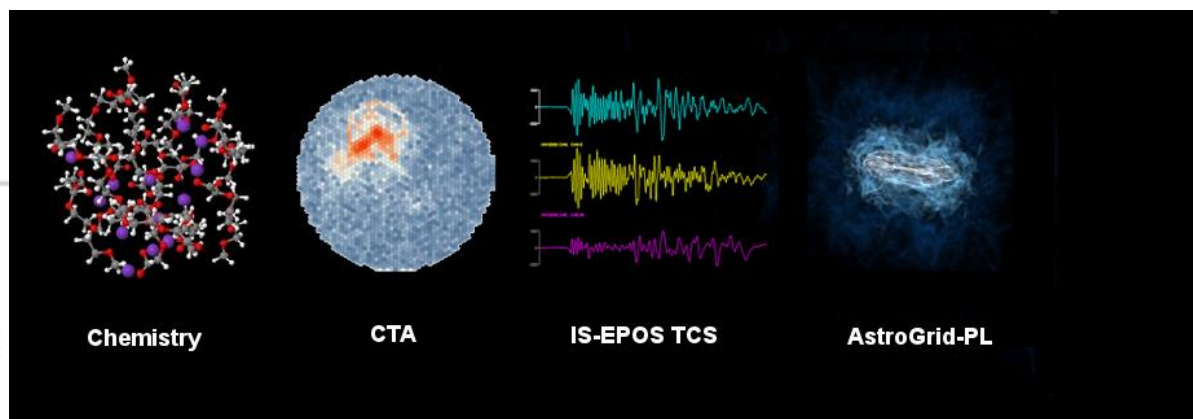
- obliczenia pakietami Gaussian, GAMESS, Turbomole
- Trajectory Sculptor - półautomatyczne przycinanie dużych układów molekularnych (np. wyników symulacji MD)
- możliwość łączenia obu typów eksperymentów

## ■ Astrofizyka

- obliczenia hydrodynamiczne metodami objętości skończonej
- obliczenia dla konsorcjum Cherenkov Telescope Array (CTA)

## ■ Geofizyka

- badania sejsmiczności indukowanej (IS-EPOS, EPOS-IP, EPOS-PL)



<https://statystyka.plgrid.pl/>

- Zintegrowana platforma usług dedykowanych statystycznej analizie danych w wielodziedzinowych zagadnieniach naukowych
  - ułatwia wybór testu statystycznego dla analizy badanego zagadnienia
  - udostępnia otwarte repozytorium kilkudziesięciu popularnych testów statystycznych
  - oraz zestaw aplikacji do analizy szeregów czasowych.

Statystyczna Analiza Danych ▾ Kategorie ▾ Dodaj test Dashboard Tomasz Piontek ▾

Lista testów / Jednoczynnikowa analiza wariancji (ANOVA) / domyślna / U uruchomienie testu

### Jednoczynnikowa analiza wariancji (ANOVA)

Wyniki **Dane** Raport

wpisz lub wklej z Excela dane, oddzielając liczby spacjami.

wpisz lub wklej z Excela podział na grupy

załaduj plik Excela

No file selected.

Opis osi y

Zmienna 1: kolor:

Group	Min	Q1	Median	Q3	Max	Outliers
A	37.5	38.5	39.5	41.0	42.0	None
B	30.5	36.0	37.0	39.5	41.0	46.0
C	29.5	31.0	34.0	40.5	43.0	None
D	32.0	32.5	38.0	41.5	44.0	None

#### Wyjaśnienia

Program do porównywania grup przy pomocy analizy wariancji (ANOVA). Należy podać kolumnę danych z wartościami numerycznymi, oraz, w drugim polu, kolumnę z podziałem na grupy (do której grupy dana wartość należy).

Dane można wprowadzać na trzy sposoby:

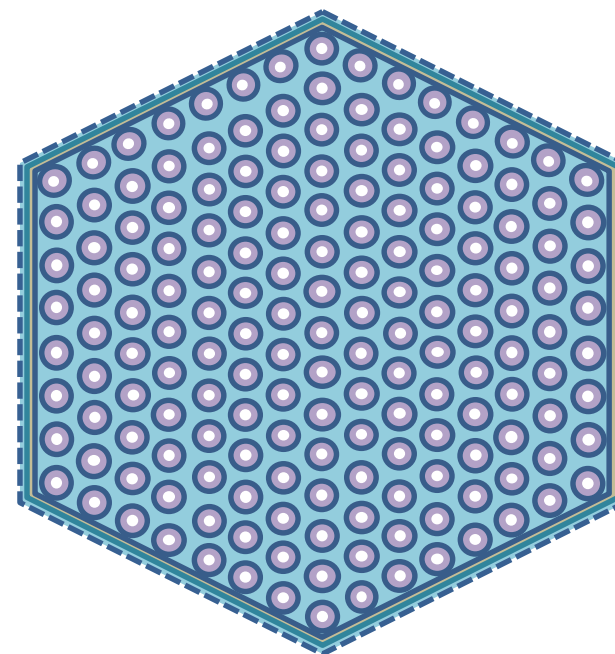
- wpisując dane bezpośrednio do okienek po lewej stronie aplikacji
- w Excelu lub OpenOffice podświetlamy kolumnę (kolumny nie powinny mieć nazw), Ctrl+c i po kliknięciu okienka po lewej stronie, Ctrl+v
- wybierając przy pomocy przycisku po lewej stronie plik Excela, który w pierwszym arkuszu, pierwszej kolumnie ma wartości liczbowe a w drugiej podział na grupy. Kolumny nie powinny mieć nazw.

Porównanie grup przy pomocy jednoczynnikowej analizy wariancji:  $p=0.831$  wartość statystyki  $F=0.291$  na 3 i 36 stopniach swobody



## The Monte Carlo Continuous Energy Burn-up Code

- Symulacje wywołanych promieniowaniem jądrowym zmian w materii
- Przykłady użycia
  - Analiza bezpieczeństwa reaktorów jądrowych
  - Reaktory jądrowe IV Generacji
  - Detektory promieniowania
  - Osłony radiacyjnych
  - Systemy podkrytyczne
  - Jądrowy cykl paliwowy
  - Elementy systemów składowania oraz przetwarzania zużytego paliwa jądrowego
  - Eksperymenty reaktorowe
  - Dozymetria

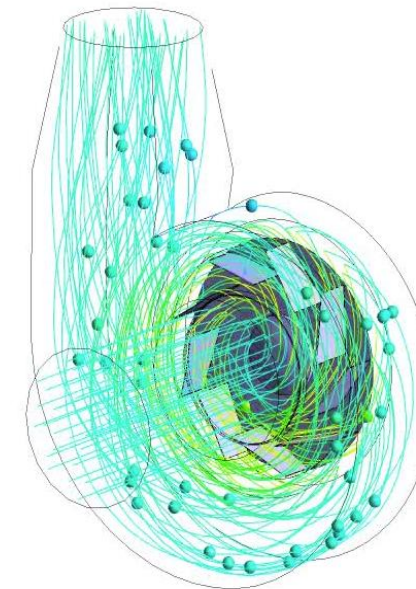
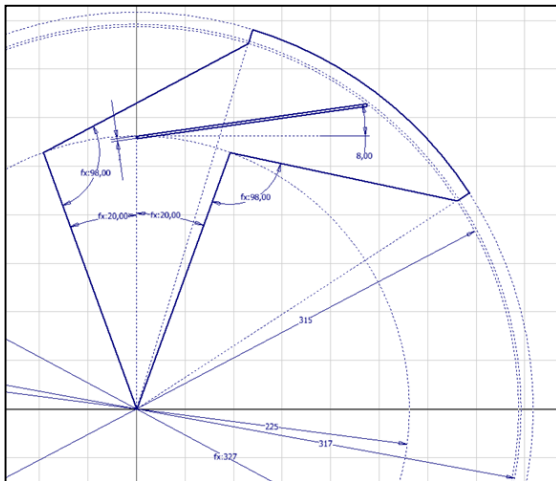




- Zintegrowany system do projektowania i optymalizacji maszyn rotodynamicznych

Od koncepcji

do maszyny



## ■ ACC Cyfronet AGH

- Kazimierz Wiatr
- Michał Turała
- Marian Bubak
- Krzysztof Zieliński
- Łukasz Dutka
- Tomasz Szepieniec
- Marcin Radecki
- Mariusz Sterzel
- Karol Krawentek
- Agnieszka Szymańska
- Maciej Twardy
- Angelika Zaleska-Walterbach
- Andrzej Oziębło
- Renata Słota
- Tomasz Gubała
- Darin Nikolow
- Aleksandra Pałuk
- Patryk Lasoń
- Marek Magryś
- Łukasz Flis
- Robert Pająk
- Klemens Noga

Special thanks to  
many  
domain experts !

... and many others.....

## ■ ICM

- Marek Niezgódka
- Piotr Bała
- Maciej Filocha

## ■ PCSS

- Maciej Stroiński
- Norbert Meyer
- Krzysztof Kurowski
- Tomasz Piontek
- Paweł Wolniewicz

## ■ WCSS

- Jacek Oko
- Józef Janyszek
- Mateusz Tykierko
- Paweł Dziekoński
- Bartłomiej Balcerek

## ■ TASK

- Rafał Tylman
- Mścisław Nakonieczny
- Jarosław Rybicki



Rejestracja: <https://portal.plgrid.pl>

[helpdesk@plgrid.pl](mailto:helpdesk@plgrid.pl)

+48 12 632 3355 wew. 304 lub bezpośrednio +48 12 632 5163