

VISOKOZMOGLJIVO RAČUNALNIŠTVO (HPC) NA FAKULTETI ZA STROJNIŠTVO UNIVERZE V LJUBLJANI

Pavel Tomšič

Visokozmogljivo računalništvo (angl. high-performance computing – HPC), dandanes pospeševalec sodobne znanosti, jutri orodje za dvigovanje konkurenčnosti gospodarstva, je eno izmed področij, s katerim se ukvarjamo na Fakulteti za strojništvo. V zadnjih letih smo na fakulteti zelo dejavni pri vsem, kar je v Sloveniji ali Evropi, usmerjeno v HPC – sodelujemo v programih skupnega evropskega podjetja EuroHPC, v kompetenčnem centru za HPC EuroCC, v partnerstvu PRACE, vodimo Erasmus+ projekt SCtrain ter v drugih aktivnostih.

Kaj je to HPC

Visokozmogljivo računalništvo, tudi superračunalništvo (v nadaljevanju HPC), predstavlja orodje za reševanje problemov, ki so preveč zapleteni za namizne ali prenosne računalnike. Velikost obravnavane analize je značilno omejena s količino RAMa, ki je na voljo. Zato je mogoče hitro analizirati podatkovne datoteke velikosti do nekaj GB. Z uporabo HPC pa lahko to omejitev povečamo na več PB (1.000.000 GB) s porazdeljenim shranjevanjem podatkov in z vzporedno obdelavo. Superračunalniki omogočajo tudi uporabo večjih (natančnejših) modelov za simulacijo delovanja novih izdelkov, materialov, zdravil itd., preden pričnemo z njihovo proizvodnjo.

HPC kot orodje prihodnosti

HPC predstavlja perspektivno področje za podjetja, ki se ukvarjajo z razvojem novih tehnologij. Hkrati je eden glavnih pospeševalcev sodobne znanosti, ki temelji na računsko intenzivnih metodah. Večina najbolj priljubljenih programskih orodij, ki jih uporabljajo raziskovalci, ni razvita za izkoriščanje ogromnih možnosti HPC. Raziskovalci morajo pogosto začeti z učenjem novih programskih orodij, preden začnejo (učinkovito) uporabljati HPC.

Na Fakulteti za strojništvo stremimo k odpravljanju takih ovir z zbiranjem in deljenjem potrebnega znanja za uporabo HPC. Pri tem sodelujemo tako z domačimi kot tudi s tujimi partnerji pri izmenjavi znanj in dobrih praks. Naš cilj je približati orodja za delo s HPC inženirskemu kadru v Sloveniji.

Dr. Pavel Tomšič, univ. dipl. inž., Univerza v Ljubljani, Fakulteta za strojništvo

PRACE

Partnerstvo PRACE (Partnerstvo za napredno računalništvo v Evropi) promovira in omogoča uporabo HPC ter na ta način spodbuja nova znanstvena odkritja in inženirske raziskave. Partnerstvo PRACE sestavlja 26 držav članic, ki ustvarjajo vseevropsko superračunalniško infrastrukturo za obsežne znanstvene in inženirske aplikacije na najvišji zmogljivostni ravni. Sistemi PRACE so na voljo znanstvenikom in raziskovalcem iz akademskih krogov in industrije z vsega sveta.

Preko partnerstva potekajo tudi obsežna izobraževanja in usposabljanja za uporabo raziskovalne infrastrukture prek sezonskih šol, delavnic ter znanstvenih in industrijskih seminarjev po vsej Evropi. Sezonske šole so namenjene širokemu občinstvu, delavnice pa so osredotočene na določene tehnologije, orodja, discipline ali raziskovalna področja. Sodelovanje na dogodkih je za akademske in industrijske uporabnike brezplačno.

Na Fakulteti za strojništvo smo aktivno vključeni v več aktivnosti partnerstva PRACE. Računski sestav HPCFS je vključen v evropski superračunalniški ekosistem. Sodelujemo pri spodbujanju uporabe HPC za mala in srednje velika podjetja v okviru programa SHAPE, razvili smo tudi več masovnih spletnih tečajev (MOOC). Rezultat naših prizadevanj na izobraževalnem področju je tudi ustanovitev PRACE izobraževalnega centra (PRACE PTC), enega izmed 14 v okviru partnerstva. Organizirali smo že več delavnic s področja HPC in velepodatkov, pripravljamo tudi brezplačno delavnico s tematiko Hadoop in RHadoop ter delavnico s tematiko paralelnega programiranja.

Že vrsto let organiziramo mednarodno poletno šolo superračunalništva (SoHPC), ki ponuja študen-



Slika 1 : Utrinek iz izobraževanja PRACE

tom delo na znanstveno raziskovalnem projektu ter 2-mesečno prakso (julij-avgust) v enem izmed evropskih centrov HPC. V letu 2021 je bilo razpisanih 33 raziskovalnih projektov na 15 ustanovah, sodelovalo je 66 študentov. V laboratoriju LECAD smo v letu 2021 uspešno vodili dva projekta na temo optimizacije geometrije S-zobnika ter upravljanja velikih podatkov za boljšo napoved porabe električne energije. Več informacij je dostopnih na: <https://summerofhpc.prace-ri.eu/>

Laboratorij LECAD vsako leto organizira tudi daljšo, enotedensko sezonsko šolo. V septembru 2021 smo organizirali spletno delavnico s tematiko obravnave velepodatkov z uporabo Hadoop-a in Keras-a za upravljanje in analizo. V štiridnevni delavnici so poleg oseba s Fakultete za strojništvo sodelovali tudi pre-

datelji s Fakultete za računalništvo in informatiko, Inštituta Jožef Stefan, Tehnične univerze na Dunaju (TUW) ter tehnološkega inštituta Karlsruhe (KIT). V okviru delavnice je bil predstavljen okvir Apache Hadoop, programski jezik za statistično obdelavo podatkov R, obravnava velepodatkov s knjižnicami RHadoop, odprtokodna knjižnica za strojno učenje in umetno inteligenco TensorFlow in odprtokodni analitični mehanizem za obsežno obdelavo velepodatkov Apache Spark. Več informacij o izobraževanjih PRACE je dostopnih na: <https://training.prace-ri.eu/>

Nacionalni kompetenčni center HPC

Na Fakulteti za strojništvo smo vključeni tudi v projekt nacionalnega kompetenčnega centra za HPC, ki poteka v okviru mednarodnega projekta EuroCC. Vključuje 34 držav iz EU in bližnje okolice. Cilj je približati uporabo zmogljivostnega računalništva različnim skupinam uporabnikov s področja znanosti, industrije, za sedanje in prihodnje -strokovnjake za HPC in širšo javnost.

V okviru Nacionalnega kompetenčnega centra HPC so na voljo brezplačna izobraževanja z namenom zapolniti vrzeli v znanju na različnih ravneh, vse od osnovnega HPC-opismenjevanja do tematik na strokovno zahtevnejših področjih. Izobraževanja so namenjena ustanovam na različnih stopnjah šolskega sistema, podjetjem in posameznikom. Aktivnosti so razdeljene na krajša eno- ali večdnevna izobraževanja, namenjena prenosu znanj, ter na seminarje, namenjene deljenju aktualnih informacij s področja računalništva, strojništva, matematike, fizike in HPC-opismenjevanja.



Slika 2 : HPC Vega

Na Fakulteti za strojništvo se trudimo približati uporabo zmogljivih računalniških orodij tudi na področju inženirstva. Tako bomo v bližnji prihodnosti ponudili kratki izobraževanji s področja uporabe HPC za numerične analize (HPC in FEM). V novembru 2021 bo potekala delavnica s poudarkom na odprtokodni programski opremi za HPC, v februarju 2022 pa delavnica s tematiko uporabe komercialne programske opreme. V prihodnosti načrtujemo razširitev ponujenih tematik s področjem HPC in CFD ter upravljanja velepodatkov. Več informacij je dostopnih na: <https://www.sling.si/sling/category/treningi/>

Erasmus + projekt Sctrain

Cilj projekta je metodološki pristop k zapolnitvi vrzeli glede prenosa znanja o visoko zmogljivih računalnikih (HPC) za prihodnje strokovnjake na področju znanosti, tehnologije, inženiringa in matematike (STEM). Preko mnogih projektov potekajo osnovni izobraževalni programi opismenjevanja HPC za raziskovalce, vendar je za učinkovit dvig ravni znanja potreben nadaljnji sistematičen pristop (od spodaj navzgor).

Trenutno uveljavljeni programi v univerzitetnem izobraževanju ne ponujajo celovite podpore za prenos potrebnega znanja o HPC v gospodarstvo. Projekt zato povezuje partnerje iz širše okolice in rešuje ta problem z razvojem delavnic in zbiranjem gradiva, potrebnega za učinkovit prenos znanja ter pripravo za njegovo implementacijo v univerzitetne programe prihodnosti. Pri projektu sodelujejo partnerji iz štirih držav:

- ▶ Univerza v Ljubljani, Fakulteta za strojništvo, Slovenija (projektni vodja),
- ▶ IT4I, češki nacionalni center HPC v okviru Univerze VŠB v Ostravi,
- ▶ Raziskovalno središče VSC (Dunajski znanstveni grozd) TU Wien, Avstrija,
- ▶ CINECA, konzorcij italijanskih univerz, ki skrbi za HPC in IT infrastrukturo v Italiji.



Slika 3 : Erasmus + Sctrain partnerji

Tematike, ki jih obravnavamo v okviru projekta na področju HPC v inženiringu in podatkovni znanosti, so razdeljene v štiri skupine:

- ▶ HPC v inženiringu – poudarek na FEM (metoda končnih elementov),
- ▶ HPC v podatkovni znanosti – poudarek na paralelnem programiranju,
- ▶ HPC v inženiringu – poudarek na CFD (Computational Fluid Dynamics),
- ▶ HPC v podatkovni znanosti – poudarek na IOT in velepodatkih.

V okviru vsake obravnavane tematike bomo ustvarili bazo znanja in material za predavanja ter praktične primere, ki bodo na voljo preko spletnega portala. Trenutne aktivnosti v zvezi s projektom so osredotočene na vzporedno programiranje z vmesnikom za prenos sporočil (MPI), OpenMP in CUDA. Pri analizi izdelkov predstavlja paralelizacija problema učinkovito razdelitev velikega problema na več manjših in analizo vsakega posebej, s čimer se dvigne raven podrobnosti in pospešijo potrebni časi izračuna. V začetku februarja 2022 bomo izvedli enotedensko brezplačno izobraževanje, v katerem bomo razložili različne paradigme vzporednega programiranja za pisanje programov, ki lahko dobro izkoristijo strojno opremo HPC. Delavnica bo potekala med 31. januarjem in 4. februarjem 2022 in bo za vse brezplačna. Več informacij je dostopnih na: <https://sctrain.eu/>

Načrtovane aktivnosti:

4.–5.11.2021

HPC in FEM: Odprtokodna programska oprema

<https://indico.ijs.si/e/FEM-opensource>

31.1.–4.2.2022

HPC in Data Science: Introduction to Parallel Programming

<https://sctrain.eu/course/hpc-parallel/>

9.–11. 2. 2022

HPC in FEM: Komercialna programska oprema

<https://indico.ijs.si/e/FEM-commercial>

