Informace o projektech PRACE

Aleš Vítek & René Kalus
CE IT4I & KAM, FEI, VŠB-TU Ostrava

ÚVOD

PRACE

Pa**R**tnership for **A**dvanced **C**omputing in **E**urope

- sdružení superpočítačových center v Evropě

- dvě úrovně

  TIER-0 … špičkový výkon > 1 petaFLOPS

  TIER-1 … špičkový výkon < 1 petaFLOPS (10 – 100 teraFLOPS)

FLOPS = Floating-Point Operations per Second

GRANTY CPG v roce 2012

- MULTIDYN – PRACE Preparatory Access (TIER-0, I - IV 2012)
- MULTIDYN – PRACE Project Access (TIER-0, XI 2012 - X 2013)
- MONTE CARLO – DECI-9 (TIER-1, XI 2012 - X 2013)

Celkem cca 19 000 000 jádro-hodin (cca 17 let na TERI)

DECI = **D**EISA **E**xtreme **C**omputing **I**nitiative
DEISA = **D**istributed **E**uropean **I**nfrastructure for **S**upercomputing **A**pplications

GRANTY CPG v roce 2012

- MULTIDYN – PRACE Preparatory Access (TIER-0, I - IV 2012)
- MULTIDYN – PRACE Project Access (TIER-0, XI 2012 - X 2013)
- MONTE CARLO – DECI-9 (TIER-1, XI 2012 - X 2013)

Celkem cca 19 000 000 jádro-hodin (cca 17 let na TERI)

DECI = **D**EISA **E**xtreme **C**omputing **I**nitiative
DEISA = **D**istributed **E**uropean **I**nfrastructure for **S**upercomputing **A**pplications

PRACE Project Access

MULTIDYN

MULTIDYN

MULTIpurpose molecular **DYN**amics

(**MULTI**dimensional molecular **DYN**amics)

- paralelizovaný MULTIDIS

  + preprocesory (FOTOGEN, IONGEN, SCATTER …)

  + postprocesory (MDISREADER, LUMIN)

MULTIDYN

Projekt

Non-adiabatic molecular dynamics with explicitly treated electronic degrees of freedom.
A case study on rare-gas cluster cations.

PRACE 5th Regular Call (VI 2012 – X 2012)

MULTIDYN

Obsah projektu

- fotodisociace Rg_N^+, $N = 6 - 25$
- post-ionizační fragmentace Rg_N^+, $N = 5 - 13$

- vnitřní konverze elektronové excitace
- metastabilní fragmenty a možnosti jejich detekce (luminiscenční spektra)

MULTIDYN

Přidělené výpočetní prostředky

- HERMIT

  PRACE

  Gauss Center for Supercomputing

  Höchstleistungsrechenzentrum Stuttgart

MULTIDYN

Přidělené výpočetní prostředky

- HERMIT - Cray XE6

Peak performance	1.045 PFlops
Cabinets	38 with 96 nodes each
Number of compute nodes	3552
Number of compute cores	113 664
Number of service nodes	96
Processor compute nodes	Dual Socket AMD Interlagos @ 2.3GHz 32 cores
Memory/node	32 GB and 64 GB
Disk capacity	2.7 PB
Node-node interconnect	CRAY Gemini
Power consumption	2 MW maximal

MULTIDYN

Přidělené výpočetní prostředky

- **požadavek** – 32 000 000 jádro-hodin

MULTIDYN

Přidělené výpočetní prostředky

- **požadavek** – 32 000 000 jádro-hodin

- **přiděleno** – 16 000 000 jádro-hodin
  nutná redukce – fotodisociace pro $N = 6 - 19$

MULTIDYN

Přidělené výpočetní prostředky

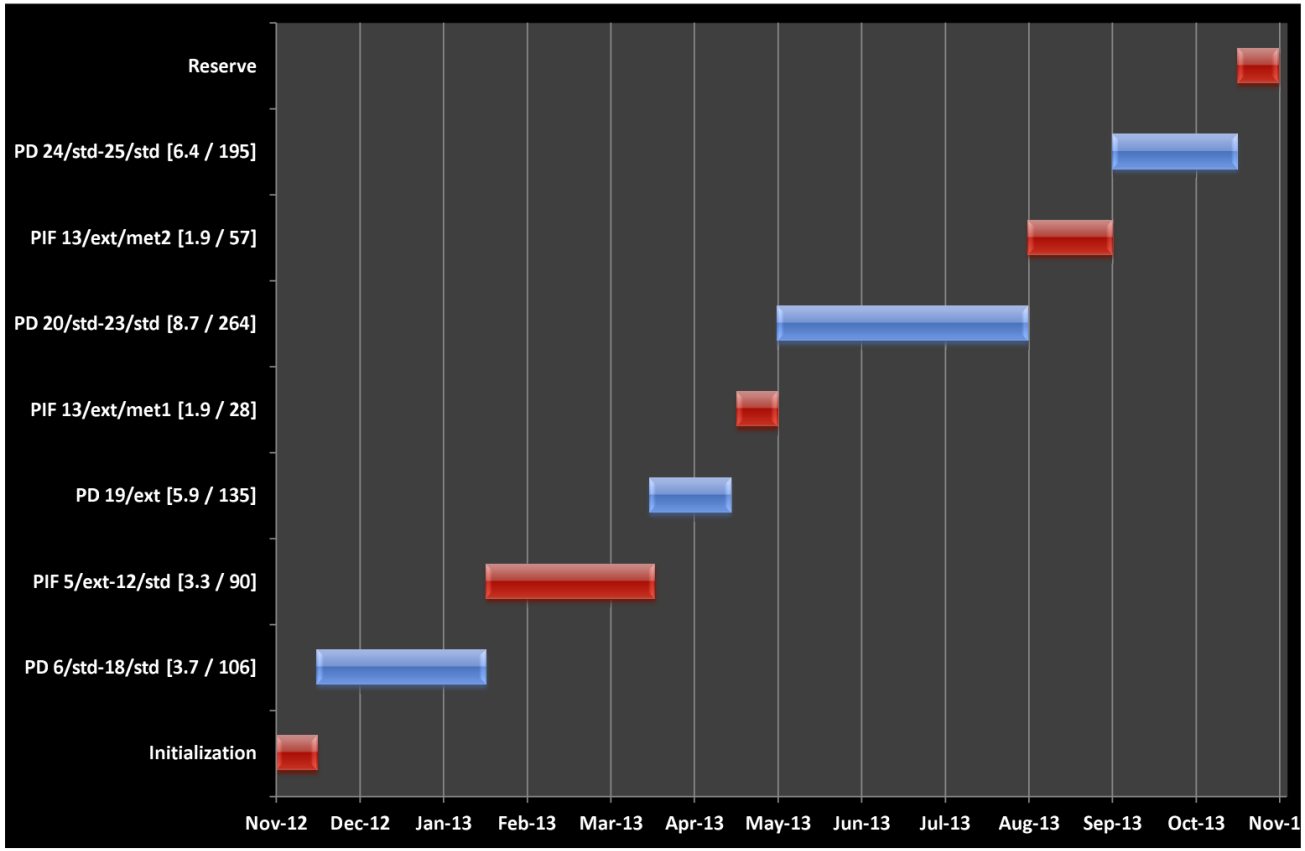
- **požadavek** – 32 000 000 jádro-hodin

- **přiděleno** – 16 000 000 jádro-hodin
  nutná redukce – fotodisociace pro $N = 6 - 19$

- **efektivně přiděleno** – 32 000 000 jádro-hodin (optimalizace MATH)
  bez redukce (?)

MULTIDYN

Plán



MULTIDYN

Aktuální stav

- přenos kódu na HERMITa a úvodní testy
- příprava počátečních podmínek pro fotodisociaci $Rg_{6\text{-}18}^{+}$, Rg = Ar (Kr, Xe?)
- rozběhnutí výpočtů (tento týden)

...