

**Napredni računalni, spremišni i mrežni resursi za
potrebe projekta Hrvatski znanstveni i obrazovni
oblak (HR-ZOO)**

Grupa I.

**Resursi za računarstvo visokih performansi (HPC) s
pripadajućim spremišnim i mrežnim resursima**

-

MJERENJE PERFORMANSI

Ovaj projekt sufinanciran je sredstvima Europske unije iz Europskog fonda za regionalni razvoj

Zagreb, veljača 2021. godina

Sadržaj

1. OPĆI UVJETI	3
2. RAČUNALNI RESURSI.....	3
3. SPREMIŠTE	3
4. APLIKACIJE	4
4.1 GROMACS	5
4.1.1 Poslužitelji s procesorskim resursima	5
4.1.2 Poslužitelji s grafičkim procesorima.....	5
4.2 OpenFOAM.....	6
4.2.1 Poslužitelji s procesorskim resursima	6
4.3 Quantum ESPRESSO	6
4.3.1 Poslužitelji s procesorskim resursima	6
4.3.2 Poslužitelji s grafičkim procesorima.....	7
4.4 Tensorflow	7
4.4.1 Poslužitelji s grafičkim procesorima.....	7



1. Opći uvjeti

Izvršitelj će u trenutku primopredaje provesti mjerenje performansi računalnih resursa, spremišta i aplikacija.

Prilikom mjerenja moraju biti zadovoljeni sljedeći uvjeti:

- svo sklopovlje i softver moraju imati postavke koje će imati prilikom puštanja u rad
- svako mjerenje mora biti uspješno izvedeno bez prijavljivanja bilo kakvih grešaka
- svi korišteni prevodioci i alati za instalaciju te knjižnice za optimizaciju moraju biti uključene u Programsku podršku opisanu u *Prilog 1. Funkcionalna specifikacija – Grupa I. Resursi za računarstvo visokih performansi (HPC) s pripadajućim spremišnim i mrežnim resursima*, poglavlje 7
- rezultati moraju odgovarati ili biti bolji od onih navedenih u ponudi.

Izvršitelj će za svako mjerenje:

- dokumentirati instalaciju uključujući sve konfiguracijske datoteke, parametre prevodioca, korištene knjižnice i skripte za prevođenje i izvođenje
- instalirati aplikaciju na sve poslužitelje u suradnji s Naručiteljem.

2. Računalni resursi

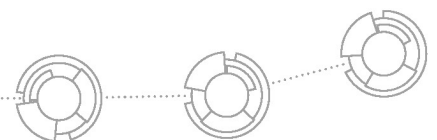
Uvjeti mjerenja:

- mjerenje performansi računalnih resursa provodi se programom High Performance Computing LINPACK (u daljnjem tekstu HPL) dostupnom na adresi: <https://www.netlib.org/benchmark/hpl/>
- koristi se posljednja verzija HPL-a
- moguće je koristiti optimiziranu verziju HPL-a pod uvjetom da je sukladna specifikaciji programa
- moguće je koristiti optimizirane matematičke knjižnice
- mjerenje se provodi istovremeno nad svim računalnim resursima u pojedinoj grupi.

3. Spremište

Uvjeti mjerenja:

- mjerenje performansi spremišta provodi se programom fio
- koristi se verzija fio isporučena s operacijskim sustavom
- mjerenje se pokreće s korisnikom bez administracijskih privilegija
- ukupna veličina korištenih testnih datoteka (broj poslova NUMJOBS x veličina pojedinačne datoteke FILESIZE) na pojedinom poslužitelju je minimalno 20 puta veća od radne memorije poslužitelja
- ukupna veličina svih korištenih testnih datoteka je minimalno 70% ukupnog kapaciteta spremišta



- minimalno vrijeme izvođenja testa je 1 sat.

Tablica 1 Konfiguracijske datoteke za mjerenje performansi spremišta

Test	Primjer konfiguracijske datoteke
Operacija sekvencijalnog čitanja s računalnih resursa i pristupnih poslužitelja; mjerenje se provodi korištenjem veličine bloka 1MiB	[global] rw=read bs=1M time_based runtime=1h numjobs=NUMJOBS [storage] directory=/path_to_storage/fio filesize=FILESIZE
Operacija sekvencijalnog pisanja s računalnih resursa i pristupnih poslužitelja; mjerenje se provodi korištenjem veličine bloka 1MiB	[global] rw=write bs=1M time_based runtime=1h numjobs=NUMJOBS [storage] directory=/path_to_storage/fio filesize=FILESIZE
Operacija nasumičnog čitanja i pisanja s računalnih resursa i pristupnih poslužitelja: mjerenje se provodi korištenjem veličine bloka 4 kiB i omjera čitanja i pisanja 80%:20%	[global] rw=randrw rwmixread=80 bs=4k time_based runtime=1h numjobs=NUMJOBS [storage] directory=/path_to_storage/fio filesize=FILESIZE

Na svim poslužiteljima na kojima se izvodi mjerenje pokreće se program fio u načinu rada server s naredbom:

```
fio --server
```

Na odabranom poslužitelju se pokreće mjerenje s naredbom:

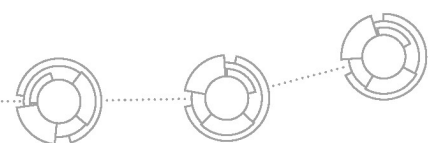
```
fio --client=test-servers config-file
```

Datoteka `test-servers` sadrži popis adresa poslužitelja na kojima se izvodi mjerenje, a datoteka `config-file` konfiguraciju testa prema opisu u tablici 1.

4. Aplikacije

Mjerenje performansi izvođenja aplikacija se izvodi na sljedećim grupama poslužitelja:

- Poslužitelji s procesorskim resursima opisani u Prilogu 1, poglavlje 3.1. Mjerenje se provodi korištenjem četiri poslužitelja.
- Poslužitelji s grafičkim procesorima opisani u Prilogu 1, poglavlju 3.3. Mjerenje se provodi korištenjem četiri grafička procesora.



4.1 GROMACS

GROMACS je paket za izvođenje simulacija dinamike molekula poput simulacije Newtonovih jednažbi gibanja sistema s velikim brojem čestica.

Mjerenje se provodi najnovijom stabilnom verzijom dostupnom na adresi:

<http://manual.gromacs.org/documentation/>.

Za mjerenje se koristi skup podataka pod nazivom 1536 dostupan na adresi:

ftp://ftp.gromacs.org/pub/benchmarks/water_GMX50_bare.tar.gz.

Priprema podataka se izvodi naredbom:

```
cd water-cut1.0_GMX50_bare/1536
gmx_mpi grompp \
  -f rf.mdp \
  -c conf.gro \
  -p topol.top \
  -o topol_rf.tpr
```

4.1.1 Poslužitelji s procesorskim resursima

Mjerenje performansi se izvodi naredbom:

```
gmx_mpi mdrun \
  -nsteps 5000 \
  -reseed \
  -noconfout \
  -s topol_rf.tpr
```

Izvršitelj dostavlja rezultat mjerenja R izražen u ns/day prema formuli $R = R_{test} \times \frac{N_{uk}}{4}$,

gdje je R_{test} rezultat iz datoteke md.log dobiven korištenjem četiri poslužitelja, a N_{uk} ukupan broj poslužitelja s procesorskim resursima.

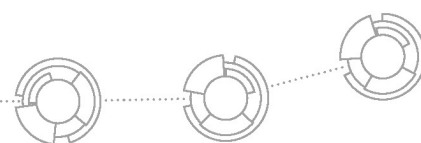
4.1.2 Poslužitelji s grafičkim procesorima

Mjerenje performansi se izvodi naredbom:

```
gmx_mpi mdrun \
  -ntmpi ${GPU_COUNT} \
  -nb gpu \
  -ntomp ${OMP_NUM_THREADS} \
  -pin on \
  -v \
  -noconfout \
  -nsteps 5000 \
  -s topol_rf.tpr
```

Izvršitelj dostavlja rezultat mjerenja R izražen u ns/day prema formuli $R = R_{test} \times \frac{N_{uk}}{4}$,

gdje je R_{test} rezultat iz datoteke md.log dobiven korištenjem četiri grafička procesora, a N_{uk} ukupan broj grafičkih procesora.



4.2 OpenFOAM

OpenFOAM je C++ program za razvoj prilagođenih programa za numeričko rješavanje te izradu alata za procesiranje rješenja problema iz mehanike kontinuuma.

Mjerenje se provodi najnovijom stabilnom verzijom dostupnom na adresi:
<https://openfoam.org>.

Za mjerenje se koristi simulacija motorBike. Po instalaciji programa, simulacija je dostupna u poddirektoriju:

```
tutorials/incompressible/simpleFoam/motorBike.
```

Mjerenje performansi je potrebno izvesti s postavkama:

- dimenzije
 - X: 100
 - Y: 40
 - Z: 40
- broj ćelija (MCells): 20 milijuna
- vrijeme simulacije: 100s.

Mjerenje performansi se izvodi naredbom:

```
./Allrun
```

4.2.1 Poslužitelji s procesorskim resursima

Izvršitelj dostavlja ukupno vrijeme R izraženo u sekundama prema formuli $R = R_{test} \times \frac{4}{N_{uk}}$, gdje je R_{test} rezultat ExecutionTime iz datoteke log.simpleFoam dobiven korištenjem četiri poslužitelja, a N_{uk} ukupan broj poslužitelja s procesorskim resursima.

4.3 Quantum ESPRESSO

Quantum espresso je kolekcija programa za račune iz područja DFT (engl. *density functional theory*).

Mjerenje se provodi najnovijom stabilnom verzijom dostupnom na adresi:
<https://github.com/QEF/q-e/releases>.

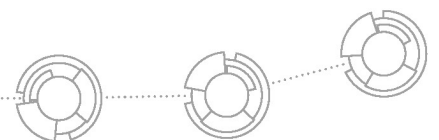
Za mjerenje se koristi skup podataka pod nazivom GRIR443 dostupan na adresi:
<https://github.com/QEF/benchmarks>.

Mjerenje performansi se izvodi naredbom:

```
pw.x -i grir443.in
```

4.3.1 Poslužitelji s procesorskim resursima

Izvršitelj dostavlja ukupno vrijeme R izraženo u sekundama prema formuli $R = R_{test} \times \frac{4}{N_{uk}}$, gdje je R_{test} rezultat PWSCF: WALL dobiven korištenjem četiri poslužitelja, a N_{uk} ukupan broj poslužitelja s procesorskim resursima.



4.3.2 Poslužitelji s grafičkim procesorima

Izvršitelj dostavlja ukupno vrijeme R izraženo u sekundama prema formuli $R = R_{test} \times \frac{4}{N_{uk}}$, gdje je R_{test} rezultat PWSCF: WALL dobiven korištenjem četiri grafička procesora, a N_{uk} ukupan broj grafičkih procesora.

4.4 Tensorflow

TensorFlow sadrži sveobuhvatan i prilagodljiv komplet alata, knjižnica te zajedničkih resursa koji omogućavaju istraživačima/korisnicima postizanje vrhunskih rezultata računalnog učenja.

Mjerenje se provodi najnovijom stabilnom verzijom dostupnom na adresi:

<https://www.tensorflow.org/install>.

Za mjerenje se koristi program dostupan na adresi:

https://github.com/tensorflow/benchmarks/tree/master/scripts/tf_cnn_benchmarks.

Mjerenje performansi se izvodi naredbom:

```
tf_cnn_benchmarks.py \  
  --batch_size=256 \  
  --model=resnet50 \  
  --optimizer=momentum \  
  --variable_update=replicated \  
  --nodistortions \  
  --gradient_repacking=1 \  
  --num_gpus=4 \  
  --num_epochs=20 \  
  --data_dir=${DATA_DIR} \  
  --use_fp16 \  
  --weight_decay=1e-4
```

4.4.1 Poslužitelji s grafičkim procesorima

Izvršitelj dostavlja ukupan broj slika u sekundi R prema formuli $R = R_{test} \times \frac{N_{uk}}{4}$, gdje je R_{test} rezultat *images/s* dobiven korištenjem četiri grafička procesora, a N_{uk} ukupan broj grafičkih procesora.

