

HPC年會

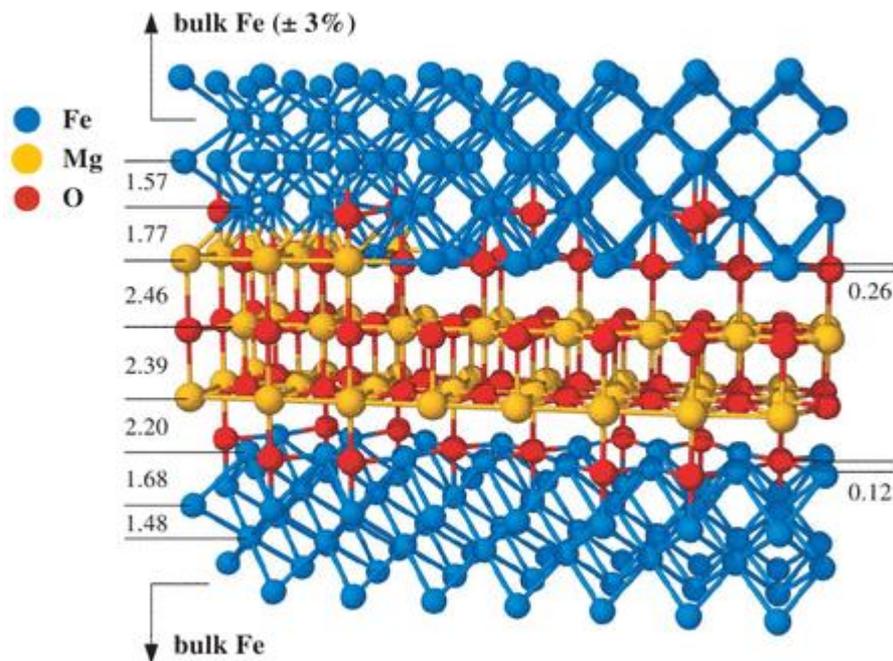
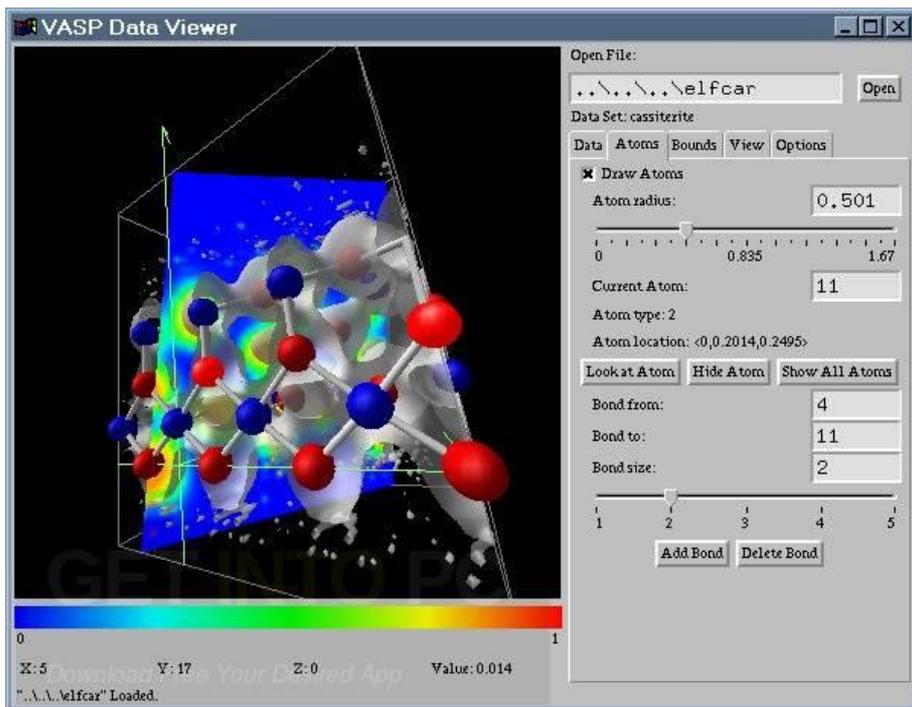
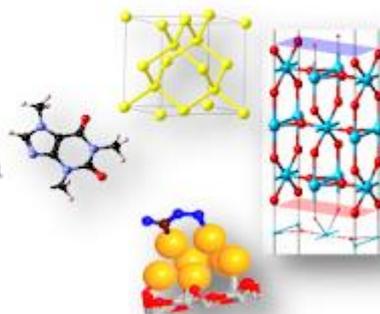
學生比賽訓練內容

訓練流程

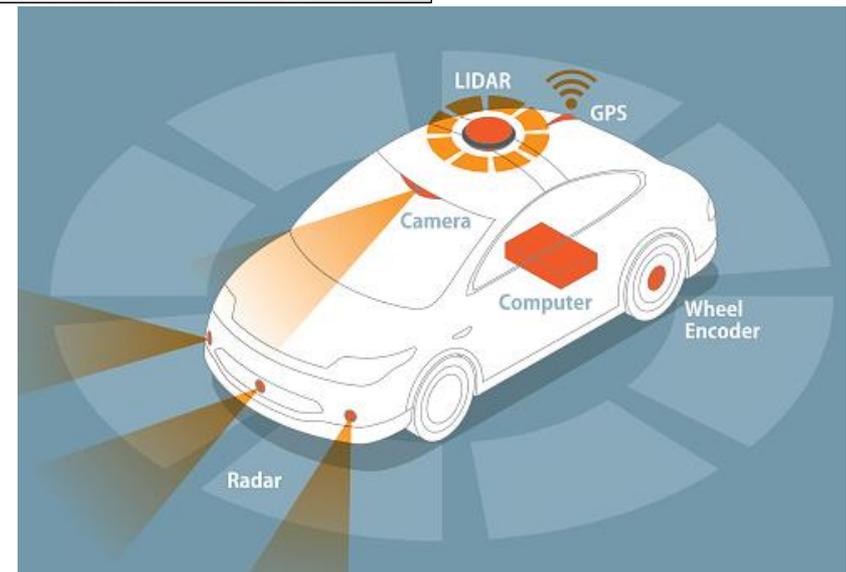
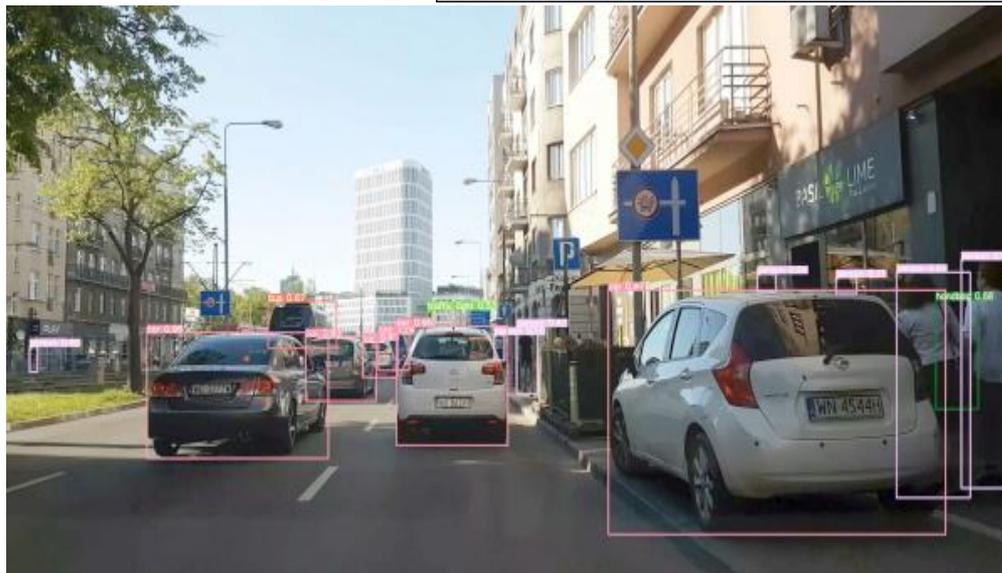
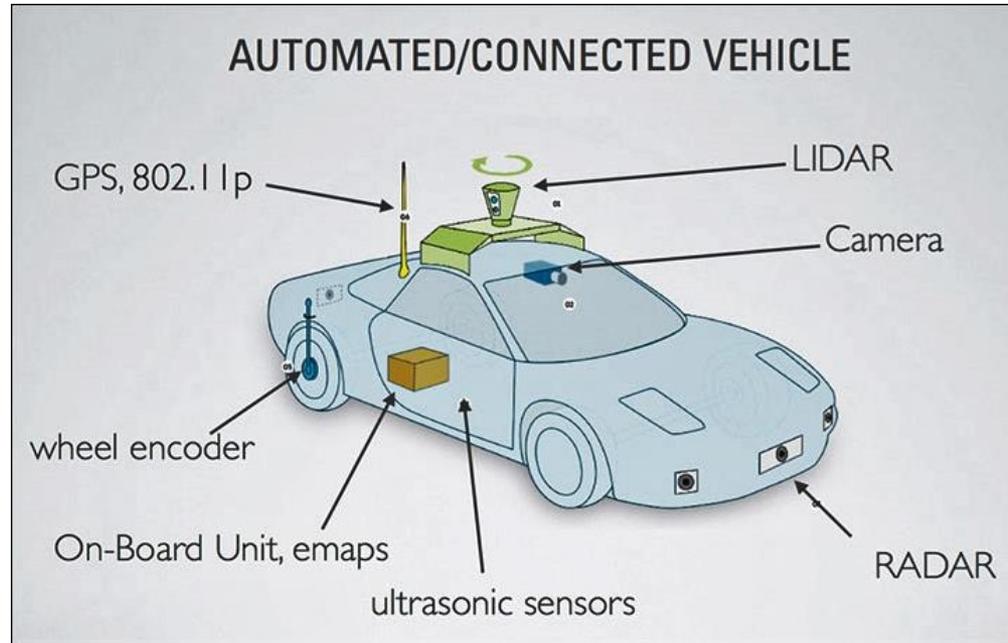
1. HPC軟體訓練-VASP
2. AI軟體訓練-自駕車
3. High Performance LINPACK (HPL)-歷屆試題
4. HPCG-歷屆試題
5. HPC Challenge-歷屆試題
6. GROMACS-歷屆試題
7. NAMD-歷屆試題
8. WRF-歷屆試題
9. 亞太區 2022 HPC-AI 正式題目

PS：項目9於比賽題目公布後調整為最優先訓練

HPC軟體訓練-VASP



AI軟體訓練-自駕車



亞太及全世界比賽(亞太區, 中國, 德國, 美國)

賽事	新加坡賽(APAC HPC-Ai)	中國賽(ASC)	德國賽(ISC)	美國賽(SC)
比賽時間	5月份~11月份	11月份~5月份	2月份~6月份	3月份~11月份
比賽題目	<AI Application> 一個題目 <HPC Application> 一個題目	<Benchmarks> 固定題目-Linpack 固定題目-HPCG <HPC Applications> 三個題目	<Benchmarks> 固定題目-HPC Challenge 固定題目-Linpack 固定題目-HPCG <HPC Applications> 四個題目 <Coding Challenge> 一個題目	<Benchmarks> 固定題目-Linpack 固定題目-HPCG 固定題目-io500 <HPC Applications> 兩個題目 <Mystery Application> 一個題目 <Reproducibility Challenge> 一個題目
比賽獎項	First Place Second Place Third Place Merit Prize HPC Special Prize AI Special Prize	Champion Silver e Prize Highest Linpack Application Innovation Award Group Competition Award Best Popular First Prize	Overall 1 st Place 2 nd Place 3 rd Place Highest Linpack Fan Favorite	Overall Highest Linpack Highest HPCG Highest io500
比賽方式	#線上遠端比賽 1. 參賽隊員數量無上限 2. 大學生或碩士生皆可 3. 冠軍可直接參加德國賽 4. 正式比賽時間為14天	#比賽地點：中國的大學學校(輪替) 1. 參賽隊員為6名 2. 在學的大學生 3. 冠軍可以直接參加美國賽 4. 正式比賽時間為5天	#線上遠端比賽(疫情期間) 1. 參賽隊員為6名 2. 在學的大學生 3. 冠軍可以直接參加美國賽 4. 正式比賽時間為7天	#線上遠端比賽(疫情期間) 1. 參賽隊員為6名 2. 在學的大學生 3. 正式比賽時間為連續48小時

先爭取亞太盃冠軍，才能取得歐美世界盃比賽資格

訓練常用計算環境

Linux系統：CentOS, Ubuntu

容器：Docker, Singularity

平行化套件：Intelmpi, Openmpi, HPC-X

排程軟體：PBS pro, Slurm

電腦語言：Python, Java, C

人工智慧：Tensorflow, Pytorch

GPU編譯：Cuda

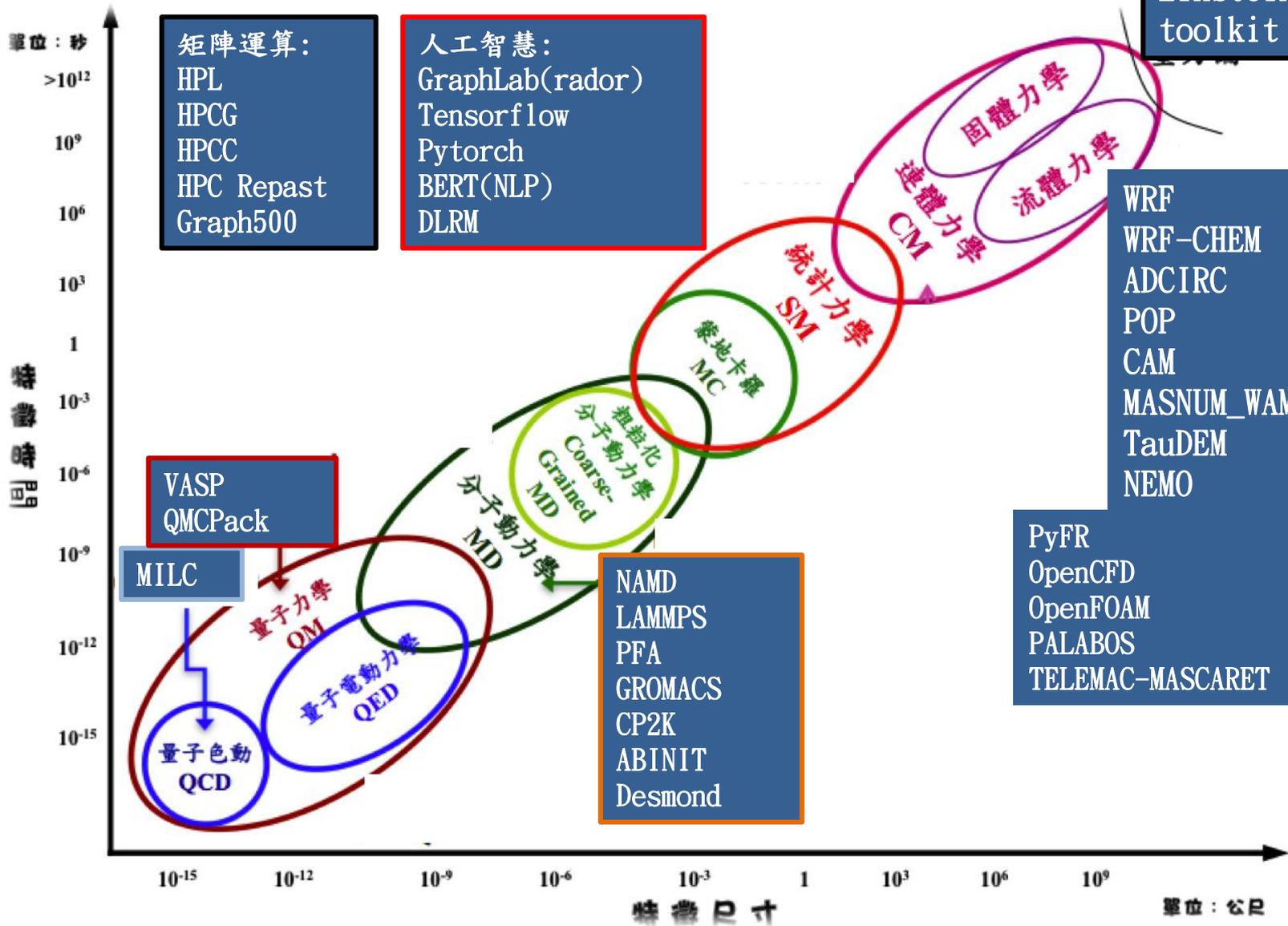
歷年超電年會叢集電腦比賽軟體

訓練

美國、德國、中國

Spotch
GADGET
SWIFT
Einstein
toolkit

基礎理論



軟體架構

應用領域

成大團隊在AI領域之能力

AI 問題類型	準確率	AI 資料庫	AI平台	AI 框架	神經網路模型	參數找解方法	備註
圖片辨識	86.18%	ILSVRC2012	Tensorflow	InceptionV3	CNN	Adam	2018 HPC-AI 亞軍
圖片辨識	85%	ILSVRC2012	Pytorch	InceptionV3	CNN	Adam	2018 HPC-AI 季軍
圖片辨識	92.48%	ILSVRC2012	Tensorflow	Resnet50-V2	CNN	Momentum	2019 HPC-AI 冠軍
圖片辨識	87.6%	ILSVRC2012	Tensorflow	Resnet50-V2	CNN	Momentum	2019 HPC-AI 亞軍
天氣預測	79.0%	NCHW	Tensorflow	tiramisu	CNN	LARC	2019 ISC 最受尊崇獎 2019 ISC AI項目第二名
語意分析	87.7% (87.2%)*	MultiNLI	Tensorflow	BERT	NLP	Adam	2020 HPC-AI 冠軍 比世界紀錄 87.2%高0.5%
深度學習推薦模型	82.19% (80.25)*	1TB Click Log*	Pytorch	DLRM	FCNN	SGD	2021 HPC-AI 亞軍 比世界紀錄高1.94% 1TB資料庫下載是 成大團隊提供給大會的方法
車牌辨識	89.81%	行車影片	Pytorch	Darknet (YOLO)	FCNN	Adam	成大與達運公司合作

AI的訓練以主辦單位公告為主

成大團隊 歷年比賽成績

指導老師：黃吉川講座教授
助教：李朝琴研究員

成大團隊歷年參賽成績

2016年

- 台灣學生叢集電腦競賽-**冠軍**-Tflops

2018年

- 亞太區 HPC-AI 競賽-亞軍-Tensorflow
- 亞太區 HPC-AI 競賽-季軍-Caffe2

2019年

- ISC 德國賽-最受尊崇獎-NCKU
- 亞太區 HPC-AI 競賽-**冠軍**-BowhiVolar
- 亞太區 HPC-AI 競賽-亞軍-AnonymousPanda

2020年

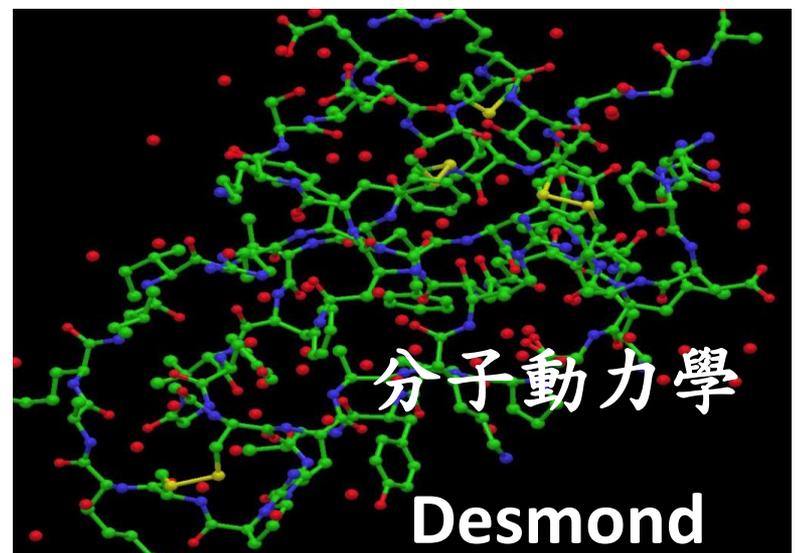
- 亞太區 HPC-AI 競賽-**冠軍**-TinpoC
- 亞太區 HPC-AI 競賽-優秀獎-Valkyrie

2021年

- 亞太區 HPC-AI 競賽-**亞軍**-DAGG
- 亞太區 HPC-AI 競賽-優秀獎-HPCApex

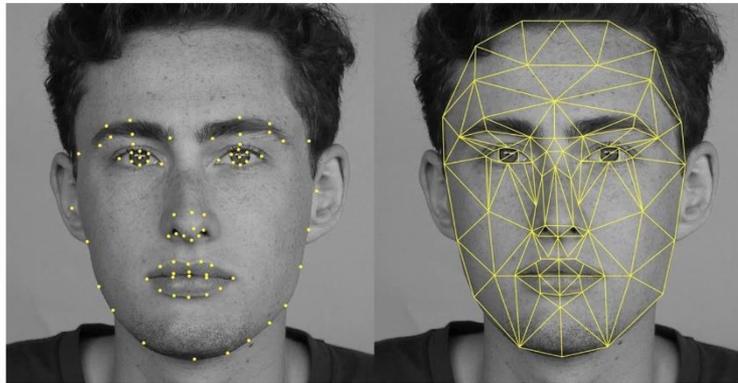
2016 台灣學生叢集電腦競賽

效能調校	HPL (解稠密矩陣)	30%
應用程式 解題	TauDEM (集水區模擬)	50%
	Desmond (分子動力學)	
成果簡報	團隊分工說明、 競賽時程掌控	20%
	專業技術解說、 報告台風展現	
總	計	100%

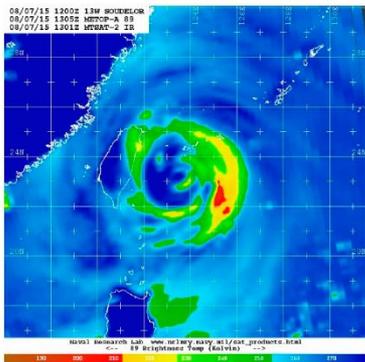


2018 亞太區 HPC-AI 競賽

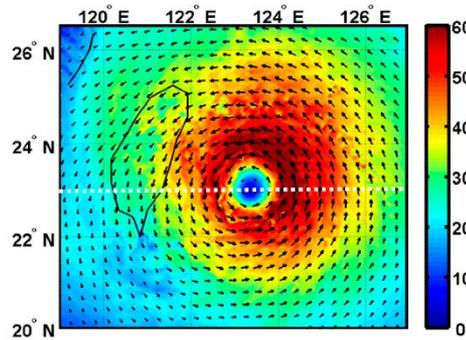
比賽時間 3/23 ~ 8/27 (5個月)



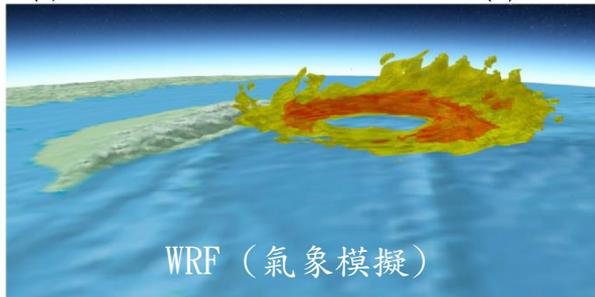
AI 圖片辨識



(a)



(b)



WRF (氣象模擬)

(c)

Part I - Artificial Intelligence : 70%

TensorFlow over RDMA

Caffe2 over RDMA

Model to Use :

Inception v3, ResNet 152, VGG16

Benchmark :

1. TensorFlow with Inception v3
2. TensorFlow with ResNet 152
3. TensorFlow with VGG16

Or

1. Caffe2 with Inception v3
2. Caffe2 with ResNet 152
3. Caffe2 with VGG16

Test Criteria:

1. Inception V3: Convergence time
2. Inception V3, ResNet152, VGG16: images per second

Part II - High Performance Computing : 30%

WRF v3.9.1.1

standard WRF 2.5km CONUS benchmark for WRF

2019 ISC 德國賽

比賽日期
6月17至19日(3天)

解稠密矩陣

1. Highest LINPACK (獨立計分獎項)

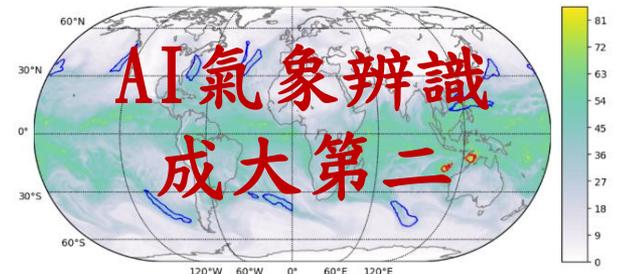
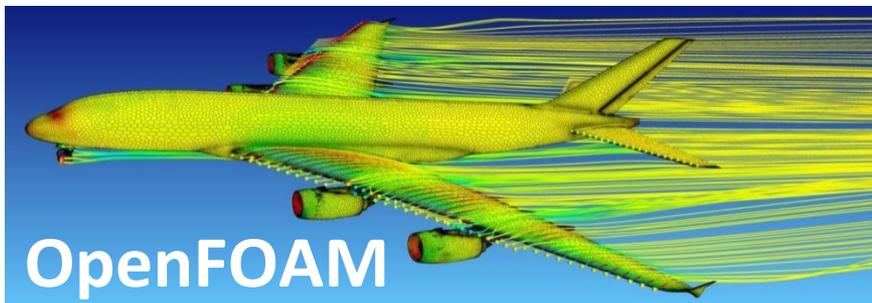
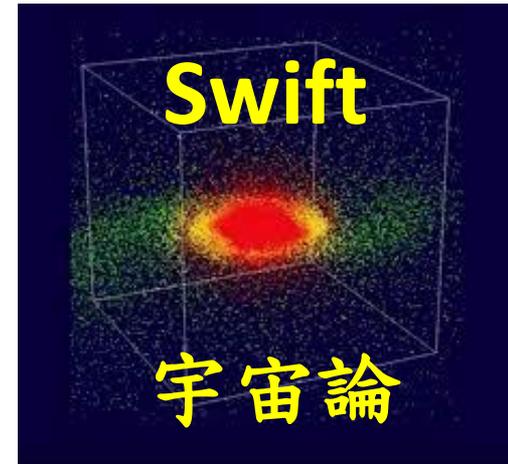
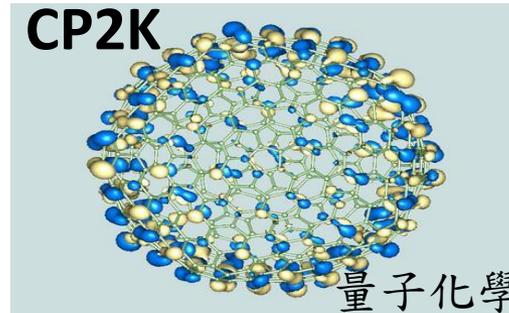
2. Scoring

- 10% HPCC
- 10% HPCG
- 10% CP2K
- 10% OpenFOAM
- 10% Swift
- 15% Secret Application
- 25% AI – Deep Learning for Climate Analytics
- 10% for interview by the representatives of the SCC board

} Benchmarks

} HPC applications

AI application



(a) Segmentation masks overlaid on a globe. Colors (white->yellow) indicate IWV (integrated water vapor, kg/m^2), one of the 16 input channels used by the network.

2019 亞太區 HPC-AI 競賽

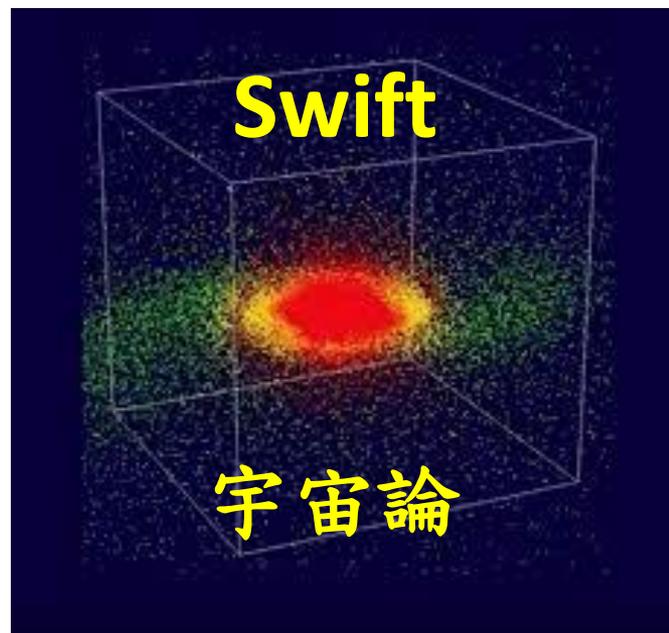
比賽時間 3/8 至 8/26 (5個月)

Score Total: 100%

- Swift HPC competition: 50%

Performance: 35%

Interview: 15%



- Tensorflow AI competition: 50%

Performance: 35%

Interview: 15%

Tensorflow



CAT. DOG. DUCK

CAT. DOG. DUCK

2020 亞太區 HPC-AI 競賽題目

人工智慧(自然語言)



第一題：人工智慧(BERT)

自然語言處理

(MultiNLI)語意資料庫分析

佔分35% (效能：25%，口試10%)

成大比賽團隊以正確率87.7%的
MultiNLI 語意資料庫判讀結果領
先 其他 MultiNLI 國際研究團隊

BERT(NCKU)：成大

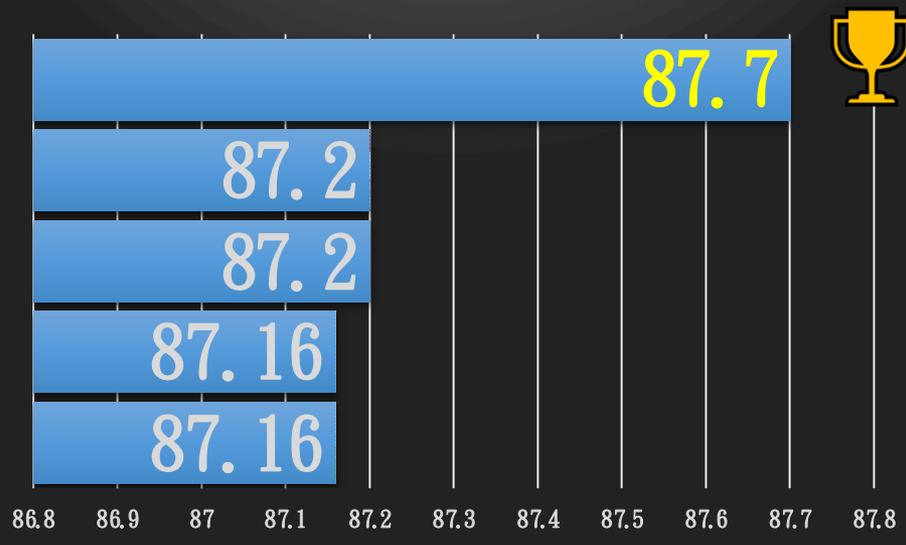
AMBERT-BASE：中國北京ByteDance AI

CERT：聖地牙哥加利福尼亞大學AI4Health

Snokel MetaL：史丹佛大學Hazy Research

SemBERT：上海交通大學Zhuosheng Zhang

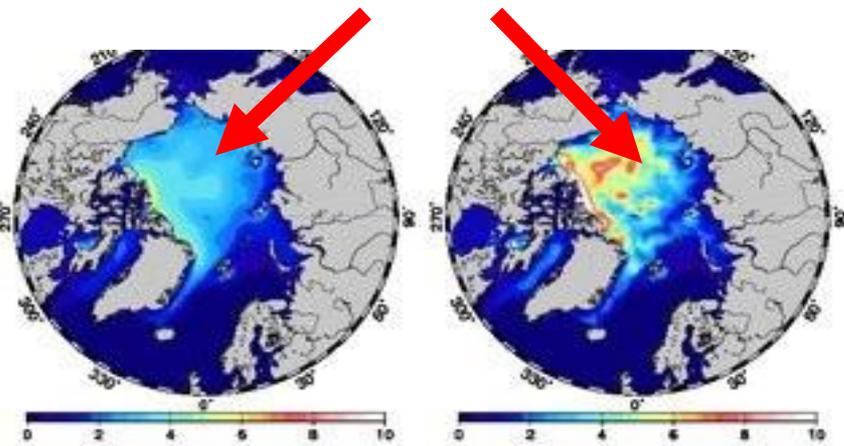
MultiNLI排名



2020 亞太區HPC-AI 競賽題目

氣候模擬

北極圈洋流



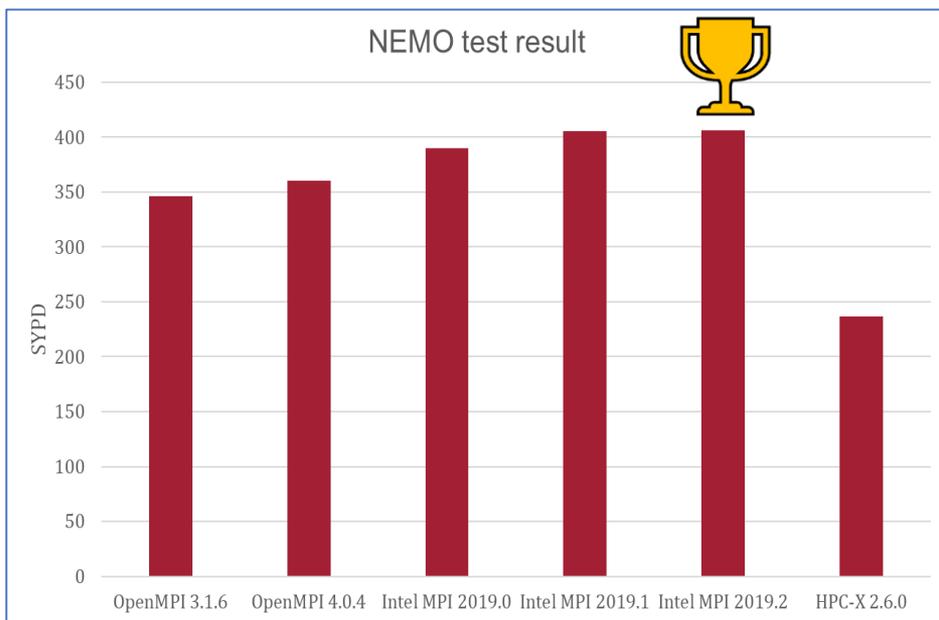
第二題：氣候模擬(NEMO)

北極圈範圍內計算風力、冰水分佈
對熱洋流循環的影響

佔分25% (效能：20%，口試5%)

最佳成績：406.09 SYPD

(模擬一天可預測406年的北極圈洋流變化)

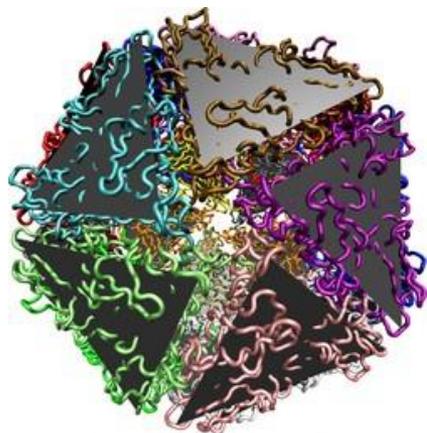


在全球暖化導致冰川加速萎縮的背景，
國際上冰川的研究產業已受到前所未有的重視，
並成為氣候系統研究中最活躍的領域之一，
當下也是全球變化和可持續發展研究領域關注的重點。

使用各種不同平行化(MPI)參數優化後的成果

2020亞太區 HPC-AI 競賽題目

軟體：NAMD 分子動力學模擬



第三題：分子動力學(NAMD)

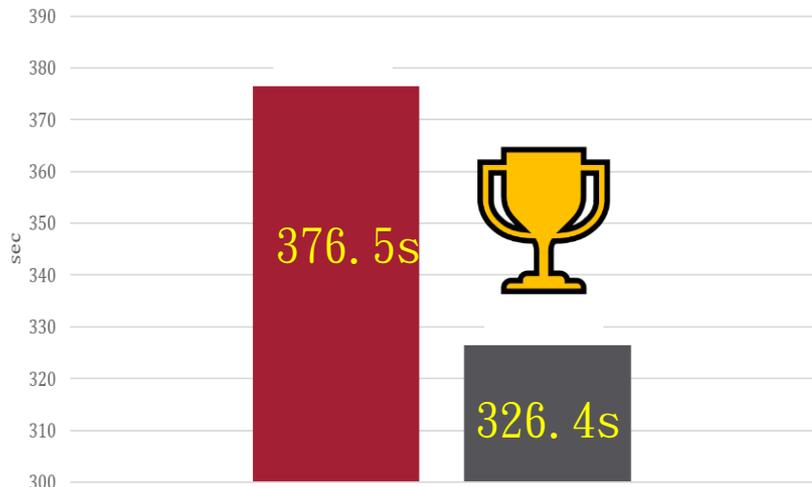
衛星菸草花葉病毒

(Satellite Tobacco Mosaic Virus)

全分子模擬

佔分25% (效能：20%，口試5%)

成大團隊於最短時間(326秒)
設定完成病毒(含水溶液)
共2.24億顆原子的動態模擬



調整不同硬體負載平衡參數的成果

為了降低和減少病毒的危害，建立高效的計算分析，將有助於預測病毒的傳播途徑及規律以利及早制定防疫。

2020 亞太區 HPC-AI 競賽題目

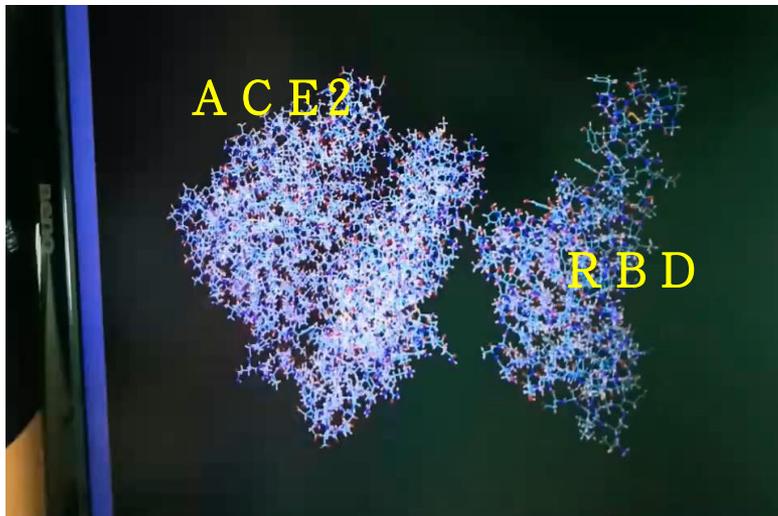
新冠狀病毒抗疫研究(冠軍隊)

第四題：開放創新題 - COVID-19 (佔分15%)

案例一：

SARS-CoV-2 棘蛋白 RBD 與 ACE2 細胞受體的結合

軟體：GROMACS



在水溶液中的行為



在真空中的結合

2020亞太區HPC-AI競賽題目

新冠狀病毒抗疫研究(優等獎隊)

第四題：開放創新題 - COVID-19(佔分15%)

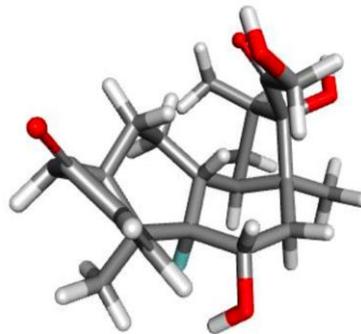
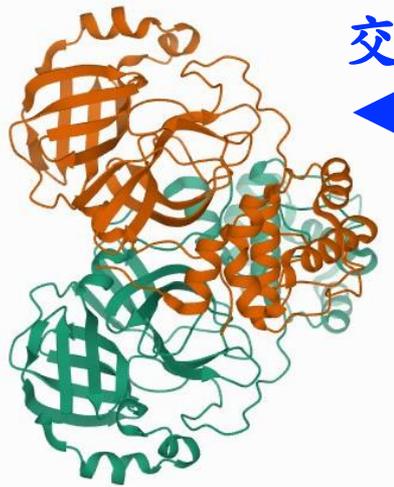
案例二：主蛋白酶與藥物分子的交互作用

軟體：GROMACS

Main Protease

DRUG

交互作用

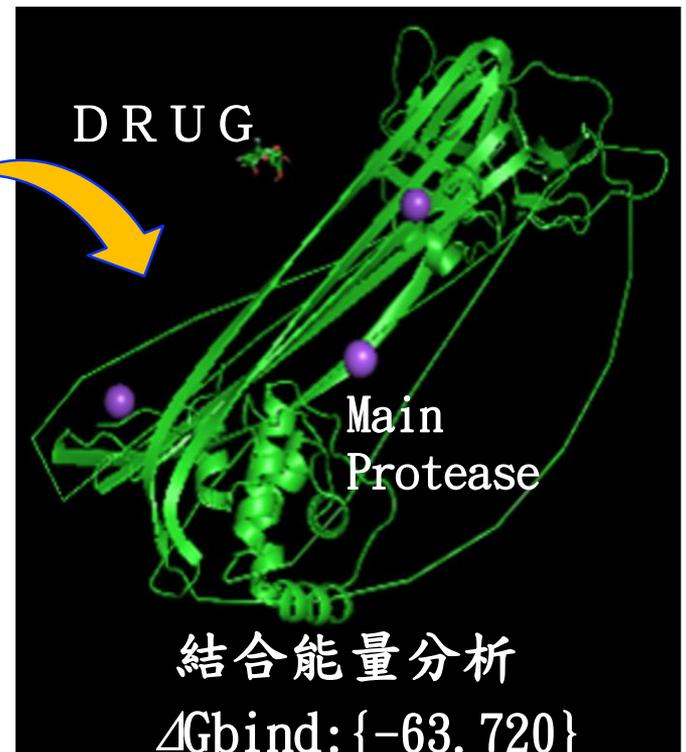


Dexamethasone drug [C₂₂H₂₉FO₅]

<https://www.drugbank.ca/drugs/DBCAT000963>

PDB code:
6M03

完成病毒與藥物分子
交互作用的計算模型



2020 亞太區 HPC-AI 競賽隊伍

Team	Name	Location
University of New South Wales, Australia	BiteCode	Australia
Khulna University of Engineering & Technology (KUET)	Khulna University of Engineering & Technology	Bangladesh
College of Science and Technology (CST)	College of Science and Technology (CST)	Bhutan
Fudan University	Starry	China
Nanjing University (NJU)	Nanjing University (NJU)	China
Shanghai Jiao Tong University (SJTU)	Shanghai Jiao Tong University (SJTU)	China
Southern University of Science and Technology (SUSTech)	SUSTech student supercomputing team (SST)	China
中國清華大學(THU)-2隊：〈亞太區2018冠軍〉,〈美國賽2015總冠軍、2018總冠軍〉, 〈德國賽2012冠軍、2014季軍、2015冠軍、2016亞軍、2017冠軍、2018冠軍、2019亞軍、2020季軍〉		中國8隊
中國科學技術大學(USTC)：〈美國賽2016總冠軍、2016-HPL冠軍〉〈德國賽2014亞軍、2015季軍、2020冠軍〉		China
Dalian University of Technology	DUT	China
Hong Kong Institute of Vocational Education (IVE)	Hong Kong Institute of Vocational Education (IVE)	Hong Kong
Indian Institute of Technology Gandhinagar (IITGN)	Indian Institute of Technology Gandhinagar	India
Curtin University Malaysia	Curtin University Malaysia	Malaysia
Universiti Putra Malaysia (UPM)	Universiti Putra Malaysia (UPM)	Malaysia
A*STAR Graduate Academy Scholars	A*STAR	Singapore
新加坡南洋理工(NTU)-4隊： 〈亞太區2018優秀獎、2019 HPC榮譽獎、2020優秀獎〉, 〈美國賽2017總冠軍、2017-HPL冠軍、2018-HPL冠軍〉, 〈德國賽2018亞軍〉		新加坡5隊
Nanyang Technological University (NTU)-1	Nanyang Technological University (NTU)-1	Singapore
Nanyang Technological University (NTU)-2	Nanyang Technological University (NTU)-2	Singapore
Nanyang Technological University (NTU)-3	Nanyang Technological University (NTU)-3	Singapore
Saragati	Saragati	Singapore
University of Moratuwa	MoraAgents	Sri Lanka
University of Moratuwa (UOM)	University of Moratuwa (UOM)-1	Sri Lanka
University of Moratuwa (UOM)	University of Moratuwa (UOM)-2	Sri Lanka
University of Moratuwa	Fractals	Sri Lanka
University of Peradeniya , Sri Lanka (UOP)	BiteCode	Sri Lanka
台灣成功大學(NCKU)-2隊：〈德國賽2019最受尊崇獎〉 〈亞太區2018亞軍、季軍、2019冠軍、亞軍、2020冠軍、優秀獎〉		台灣4隊
TinpoC	TinpoC	Taiwan
Valkyrie	Valkyrie	Taiwan
台灣暨南大學(NCNU)		Taiwan
台灣清華大學(NTHU)：〈亞太區2019季軍、2020亞軍〉,〈美國賽2007-HPL冠軍、2008-HPL冠軍、2010總冠軍、2011總冠軍、2014-HPL冠軍〉		Taiwan
Thammasat University (TU)	Thammasat University (TU)	Thailand

〈亞太區11個國家30個隊伍參與競賽〉

2020 亞太區HPC-AI競賽名次

〈亞太區共有11個國家30個隊伍參與競賽〉

- 第一名：台灣成功大學 TinpoC 
- 第二名：台灣清華大學 NCHU
- 第三名：中國南方科技大學 SST
- 優秀獎：台灣成功大學 Valkyrie 
- 優秀獎：新加坡南洋理工大學 NTU-2
- 優秀獎：新加坡南洋理工大學 NTU-3

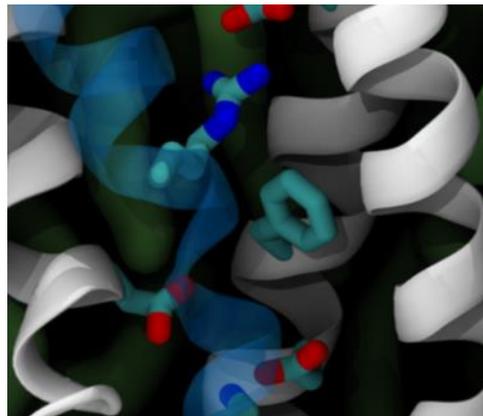
資料來源：<https://www.hpcadvisorycouncil.com/events/2020/APAC-AI-HPC/>

2021 亞太區 HPC-AI 競賽

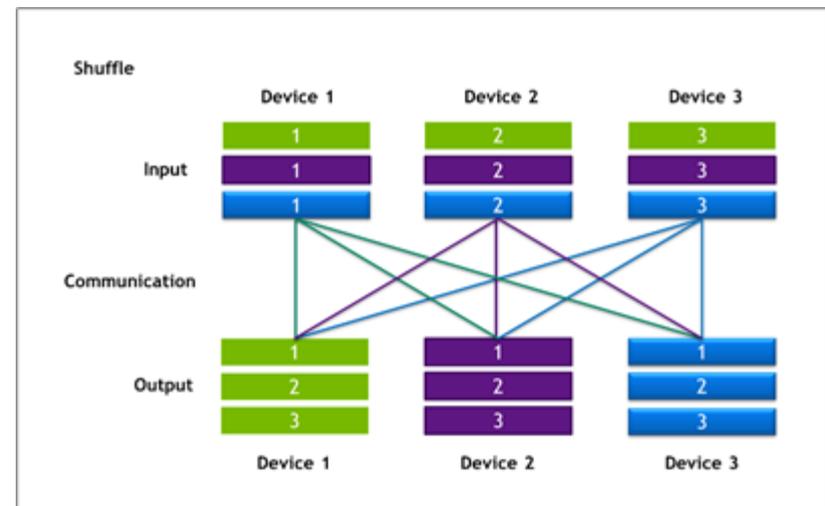
比賽時間 3/2 至 11/6 (8個月)

Score Total: 100%

- 25% AI DLRM Application Performance
- 25% HPC GROMACS Application Performance
- 10% Accomplish Interview Presentation
- 5% Accomplish AI coding
- 5% Accomplish HPC coding
- 30% Interview



GROMACS



DLRM

2021 亞太區HPC-AI競賽名次

〈亞太區共有13個國家36個隊伍參與競賽〉

第一名：中國南方科技大學

第二名：台灣成功大學 DAGG 

台灣清華大學 KW

第三名：台灣清華大學 EM

泰國德政大學

優秀獎：台灣成功大學 HPCApex 

HPC特別獎：台灣清華大學 KW

AI特別獎：中國南方科技大學

資料來源：

<https://www.hpcwire.com/off-the-wire/hpc-ai-advisory-council-announces-the-winners-of-the-4th-apac-hpc-ai-competition/>