2024

高能物理AI平台

张易于，杜然
高能物理研究所
计算中心

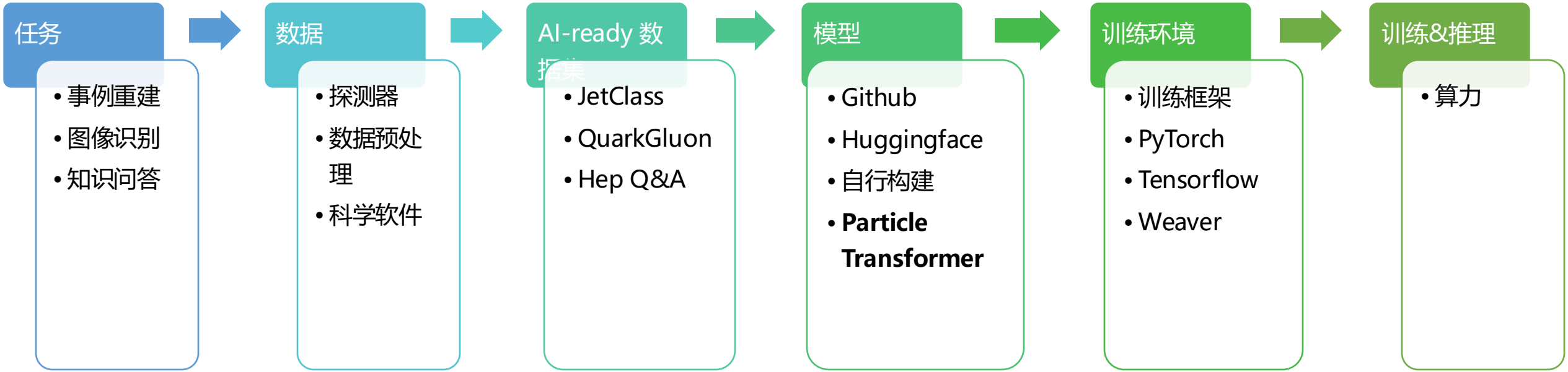
Outline

- 人工智能三要素
- 高能物理AI平台
  - 模型服务、数据、培训
- 高能物理AI算力平台
  - 平台架构
  - 平台建设状态与使用方法
    - 算力层、软件生态层、调度管理层、用户服务层
  - 平台管理规则、算力分配与计费方案
  - 平台上线时间计划

人工智能三要素

- **人工智能三要素：数据、算法、算力**

- **AI研究流程：复杂、零碎，需要共性基础服务简化流程**



面向科学发现的人工智能平台

- 高能物理AI平台：围绕 **数据-算法-算力**
- AI共性基础服务（面向领域科研活动）：算力基础设施、大模型、工具、数据集

算力不足 制约 模型发展

算力孤岛 制约 算力效能

AI高门槛 制约 科研效率

学科领域众多

框架软件众多

软件快速迭代

基础设施昂贵

计算资源多样

国产硬件支持

领域专业用户

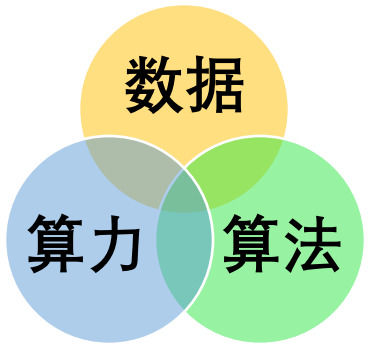
- 缺乏AI和科学领域知识，提供端到端的解决方案

AI交叉领域用户

- 精通学科和业务知识，了解AI应用方向或案例
- 提供AI+专业领域的解决方案
- 提供计算性能、问题规模和模型何优化等服务

AI专业用户

- 提供大规模基础算力资源
- 提供开发、调试和训练一站式环境



AI共性基础服务

- 基础设施（算力）
- 大模型
- 科学软件&工具
- AI-Ready数据集

HepAI平台

- AI for 粒子物理
- AI for 粒子天体物理
- AI for 中子物理
- AI for 同步辐射
- AI for More

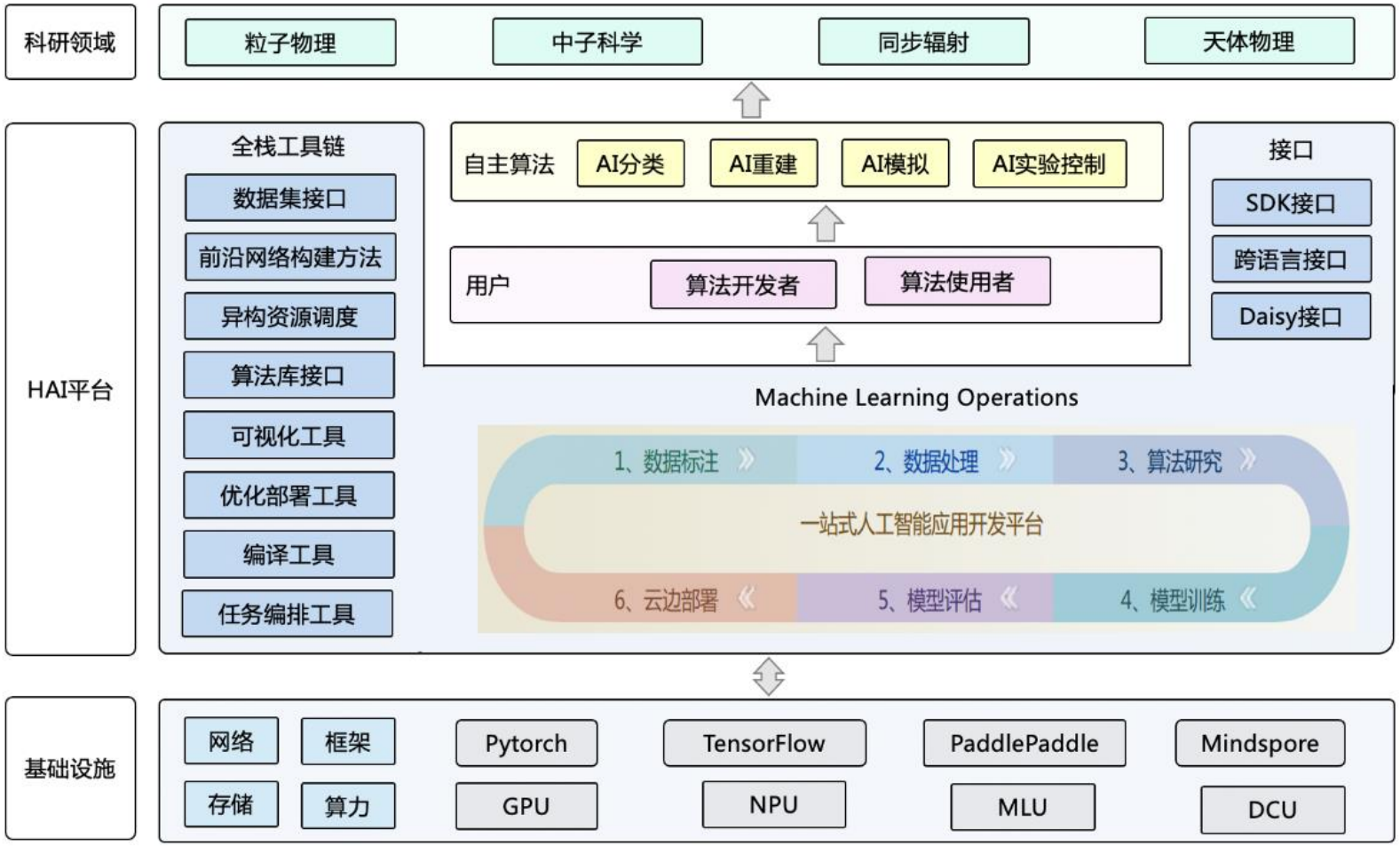
高能物理人工智能平台HepAI

- 人工智能平台能加速多学科场景下的科学研究，简化模型迭代和流动，是发展AI算法和应用的**共性基础设施。**

https://ai.ihep.ac.cn

- 人工智能平台**本身是软件系统，承载AI算法模型，接入AI算力，打通数据通道。**

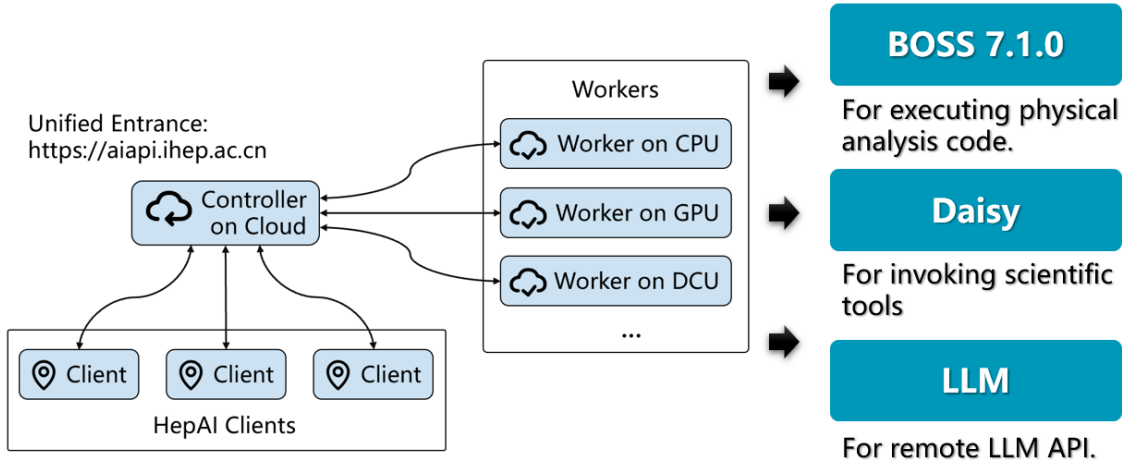
- 人工智能平台不仅仅是一个单纯的算力平台
  - 算法：集成支持、自动化、优化、更新、维护
  - 数据：管理、处理、安全
  - 算力：资源优化
  - 培训、共享与合作



HepAI平台架构

AI算法模型、科学软件&工具

- **通过自研分布式部署框架部署先进AI算法模型和科学软件工具，实现直接调用。**
  - **大语言模型**：ChatGPT, GPT-4, Xiwu, etc
  - **科学软件**：BOSS，Daisy
  - **AI算法模型**：SAM(分割一切)，ParticleNet&ParT(粒子鉴别), PtychoNN(叠层成像重建)
  - **科研工具**：PDF解析，PDF翻译，论文润色，科研绘图，etc



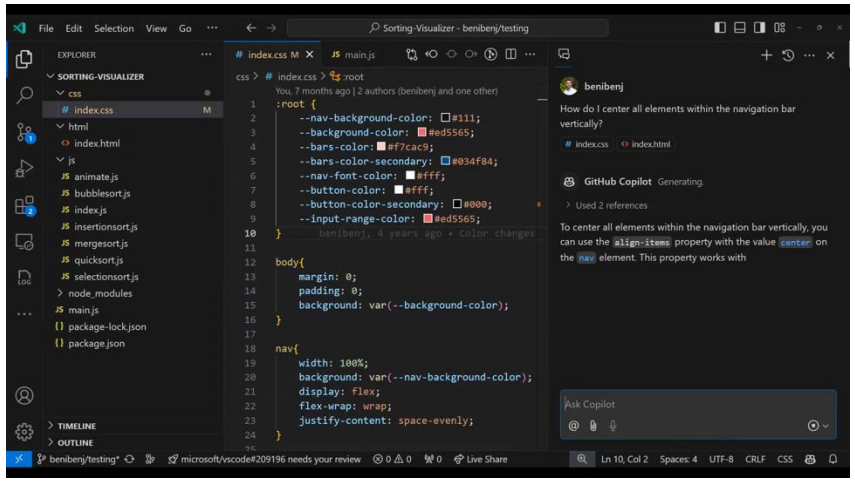
- **通过HepAI-MaaS(Model as a Service)服务加速AI模型的应用创新**
  - **旧模式：基于AI模型进行应用开发时，需要下载代码、模型、考虑算力、解决环境依赖等问题。**
  - **新模式：基于HepAI-MaaS服务，使用API-KEY直接调用AI模型，而无需考虑算法部署、算力资源等问题。**

大模型服务 辅助科研活动

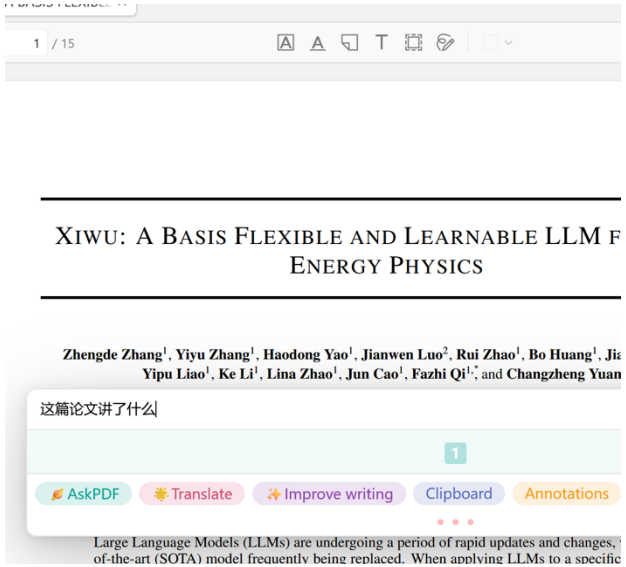
- **基于大语言模型的生成式服务 HaiChat → Dr. Sai**
  - 2023年8月正式上线，高能所注册用户2000+，30天**日均活跃用户突破900人**。
  - 科研模式变革中：工作遇到问题**查资料** → **先问大模型**

https://chat.ihep.ac.cn/v3

- **代码生成**



- **HaiAcademic**

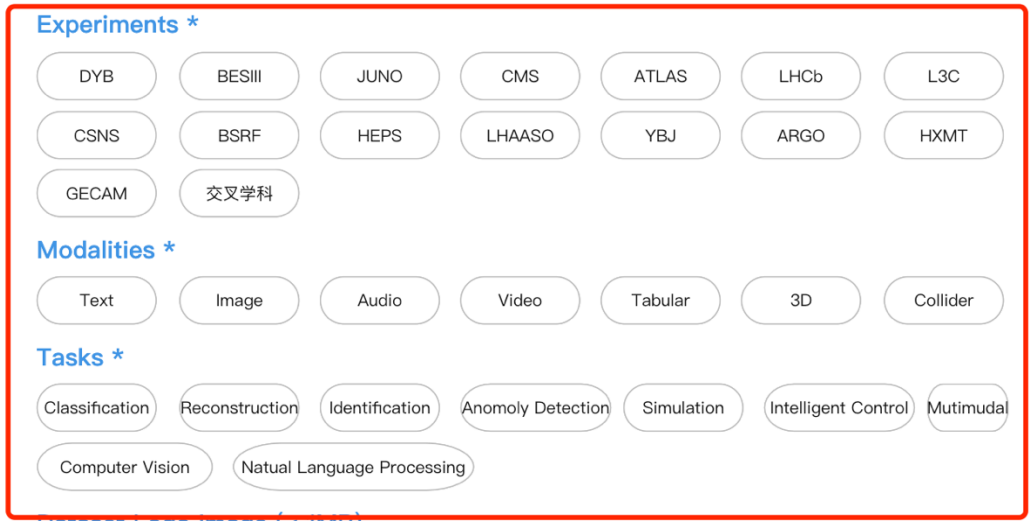


辅助文献阅读

- **数据收集，改进模型，建立生态，保持优势**

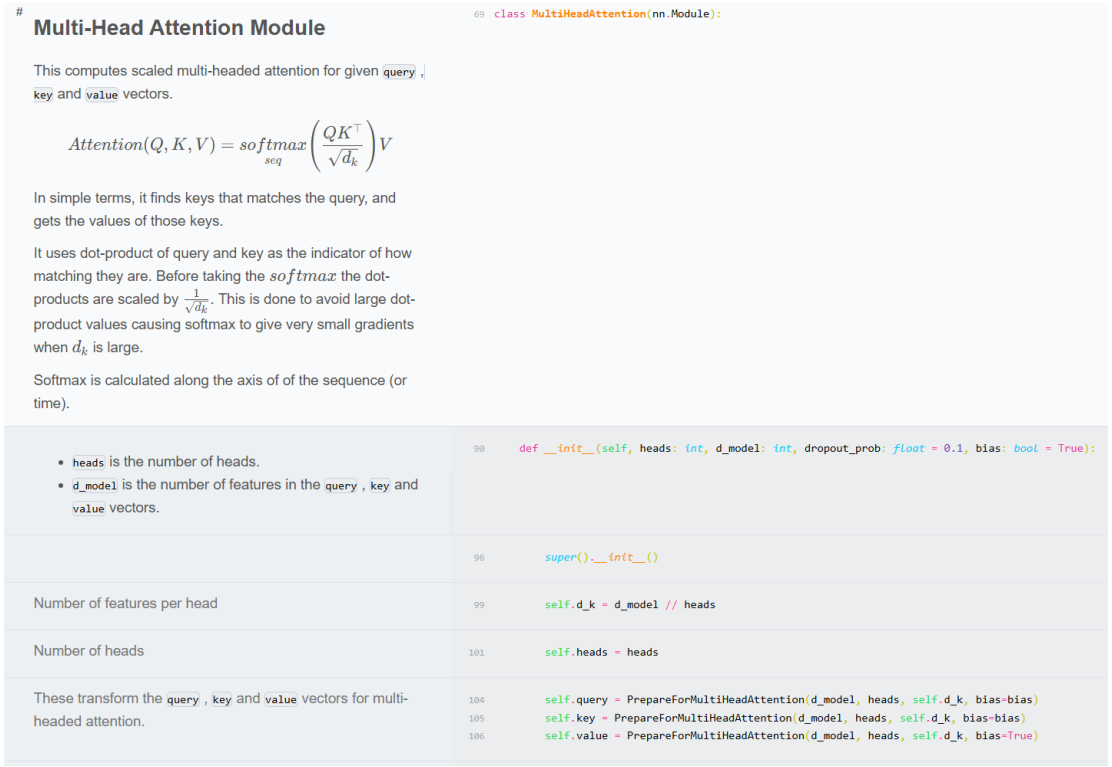
AI-Ready科学数据集

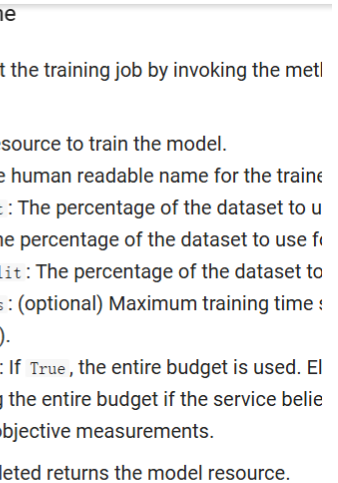
- AI-Ready的数据集
  - 直接用于ML/DL的训练和测试，可加快科学研究进程；确保数据被广泛使用，避免数据孤岛现象；统一数据格式，有助于促进跨学科协作。
- 现状
  - 大部分：统一的格式，统一的存储，但不是AI-Ready的
  - 少量：增材制造缺陷数据集，BESIII Tracking数据集，etc
- 数据来源
  - 公开数据集
  - 领域共享数据集
- 共享服务
  - 依托AI平台提供数据集共享、发现服务
  - 标记数据集知识产权与成果影响力



培训、共享与合作

- 代码逐行解读
- 代码快速复现
- 代码托管
  - Gitlab
- 讲座、报告
  - ML研讨会
- 公开课程

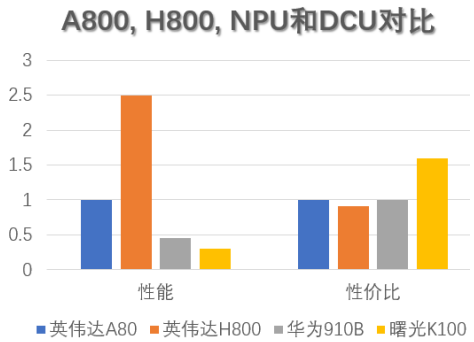




异构算力基础设施

- **目前高能所算力硬件共250+英伟达GPU，以V100为主，少量A100（非AI研究独占）。**
- **AI研究趋势**
  - **研究项目增加、模型大小变大**
  - **算力需求、时长增加**
  - **算力价格昂贵**
  - **国产化替代必要性增强**
- **算力类型**

NVIDIA HUAWEI 中科曙光 Sugon



	任务	算法	参数量	训练时间	算力	数据	科学软件
硬件设计与优化	FPGA AI算法加速 AI 芯片设计 设备设计参数优化	DNN	100	sec-min	CPU、单卡		Gen4 Root Python c++ Matlab BOSS …
在线处理	事例触发 在线重建 数据压缩	DNN，CNN GNN，VAE ParticleNet	10k	Min-hour	中端单卡	100-10k	
数据分析	事例重建，鉴别，预测	ResNet Transformer Diffusion	10M	Hour-day	高端GPU 多GPU	10k-10M	
	理论、方程求解						
	科学大模型 中子实验数据重整 同步辐射结构化大模型 射线成像图像通用大模型	Transformer SAM Clip-parT	1B	Day-week	多GPU集群	10M-10B	
	溪悟大模型	Llama2 Qwen Baichuan	13B	3800 tokens/s	NV A800 1*8卡	1B tokens	
			13B	1400 tokens/s	DCU K100 1*8卡	1B tokens	
			70B	2400 tokens/s，14 days	DCU K100 8*8卡	1B tokens	
			70B	7700 tokens/s，4.5 days	DCU E100 8*8卡	1B tokens	
运维与服务	卫星星座智能化控制 智能调光、方案实时优化 物理实验智能系统运维	DNN，CNN DQN	10k-1B		单卡 多GPU	5000-1M	实验控制 接入
	智能值班员	agent	-	-	推理算力	-	
系统集成与应用	科研智能体 科研助手 智能实验						

- **模型、数据、培训需要算力的支撑**

Outline

- 人工智能三要素
- 高能物理AI平台
  - 模型服务、数据、培训
- 高能物理AI算力平台
  - 平台架构
  - 平台建设状态与使用方法
    - 算力层、软件生态层、调度管理层、用户服务层
  - 平台管理规则、算力分配与计费方案
  - 平台上线时间计划

平台架构 – 院网络中心合作，分四层建设

用户服务层

多种作业提交接口

数据集服务

用户认证及权限服务

Terminal

Web portal

模型服务

文件上传/下载服务

软件服务

记账服务

调度管理层

slurm workload manager

软件生态层

常用编程框架

PyTorch TensorFlow

软件环境管理工具

ANACONDA. Lmod

算力层

高速网络互联

高速网络互联

异构加速卡
计算节点

存储系统

管理 & 应用节点

监控与报警服务

算力层 – 设备

用途	设备名称	数量（台/套）	配置
计算	A800 GPU服务器	1台	• 8 * **A800 80GB PCI-e NVIDIA GPU卡** • 2 * Intel(R) Xeon(R) Gold 6430(32 core) • **1TB 内存**，7.68 TB NVME 本地硬盘 • 2 * **200Gbps IB网卡**，1 * 25Gbps 以太网卡
	L40 GPU服务器	1台	• 8 * **L40 48GB PCI-e NVIDIA GPU卡** • 2 * Intel(R) Xeon(R) Gold 6430(32 core) • **1TB 内存**，7.68 TB NVME 本地硬盘 • 2 * **200Gbps IB网卡**，1 * 25Gbps 以太网卡
	DCU服务器	4台， 待增加2台	• 8 * **K100AI 64GB PCI-e 国产海光DCU卡** • 2 * Intel(R) Xeon(R) Gold 6430(32 core) • **1TB 内存**，7.68 TB NVME 本地硬盘 • 2 * **200Gbps IB网卡**，1 * 25Gbps 以太网卡
存储	存储服务器及阵列	1套	• **全闪，可用容量～200TB**，挂载点/aifs
网络	IB交换机	1台	• **200Gbps 带宽**，连接计算节点与存储系统
	以太网交换机	1台	• 25Gbps 带宽，连接计算节点与存储系统
管理和应用	CPU服务器	4台	• 2 * Intel(R) Xeon(R) Gold 6430(32 core), 256GB 内存 • 1 * 25Gbps以太网卡，480GB SATA SSD + 1TB NVME 本地硬盘

算力层 – 存储系统，可用容量200TB，全闪

- 个人目录

事项	说明
路径	/aifs/user/home/<username>
用途	存放个人datasets/models等文件
权限	用户个人可读/写
限额(quota)	默认值500GB、30万个文件，可按需修改

- 公共目录

事项	说明
路径	/aifs/public/data
用途	存放公开datasets/models等文件
权限	普通用户可读、不可写，公共数据管理员可读/写
限额(quota)	按需定制

软件生态层

- AI所需基础库文件、包管理软件、框架软件，基于AlmaLinux 9.4
- 可使用module工具加载软件环境
- 后续可按需增加

```
---------------------------------------------------------------------------------- /cvmfs/slurm.ihep.ac.cn/alma9/modulefiles ----------------------------------------------------------------------------------
anaconda/24.3.0          epics/7.0.7                                intel_oneapi/compiler-rt32/2024.1.0  intel_oneapi/ifort32/2024.1.0            intel_oneapi/tbb32/2021.12  python/3.12.2
cmake/3.18.4             fftw/3.3.10-gcc11                          intel_oneapi/compiler-rt32/latest    intel_oneapi/ifort32/latest              intel_oneapi/tbb32/latest   pytorch/2.0.1-cu117-py310
cmake/3.26.4             gcc/7.5.0                                  intel_oneapi/compiler/2024.1.0       intel_oneapi/intel_ipp_ia32/2021.11      intel_oneapi/vtune/2024.1   pytorch/2.2.0-cu121-py310
cmake/3.29.1             gcc/9.5.0                                  intel_oneapi/compiler/latest         intel_oneapi/intel_ipp_ia32/latest       intel_oneapi/vtune/latest   quickpic/develop
cp2k/2023.1-gcc11        gcc/10.4.0                                 intel_oneapi/compiler32/2024.1.0     intel_oneapi/intel_ipp_intel64/2021.11   lammps/2024.02.07           scalapack/2.2.1
cp2k/2024.1-gcc11        gcc/11.4.0                                 intel_oneapi/compiler32/latest       intel_oneapi/intel_ipp_intel64/latest    lapack/3.11.0-gcc11         scow/1.0
cuda/11.0-cvmfs          gcc/12.3.0                                 intel_oneapi/dal/2024.0.0            intel_oneapi/intel_ippcp_ia32/2021.11    lume-astra/0.6.1            tensorflow/2.4.0-cu110-py38
cuda/11.1-cvmfs          gimic/2.0                                  intel_oneapi/dal/latest              intel_oneapi/intel_ippcp_ia32/latest     molpro/2015-gcc11           tensorflow/2.11.0-cu112-py310
cuda/11.2-cvmfs          gromacs/2023.4-gcc11                       intel_oneapi/debugger/2024.1.0       intel_oneapi/intel_ippcp_intel64/2021.11 mpi/mpich/4.1.3             tensorflow/2.15.0-cu122-py310
cuda/11.7-cvmfs          hdf5/1.10.11                               intel_oneapi/debugger/latest         intel_oneapi/intel_ippcp_intel64/latest  mpi/mpich/4.2.1             tensorflow/2.16.1-cu123-py310
cuda/12.2-cvmfs          intel_oneapi/advisor/2024.1                intel_oneapi/dev-utilities/2024.0.0  intel_oneapi/mkl/2024.1                  mpi/mvapich/2.3.7           TensorRT/7.2.3.4-cuda11.0-cudnn8.1
cuda/12.4                intel_oneapi/advisor/latest                intel_oneapi/dev-utilities/latest    intel_oneapi/mkl/latest                  mpi/mvapich/3.4.3           TensorRT/7.2.3.4-cuda11.1-cudnn8.1
cuda/12.4-cvmfs          intel_oneapi/ccl/2021.12.0                 intel_oneapi/dnnl/3.4.0              intel_oneapi/mkl32/2024.1                openmpi/4.1.4-gcc11         TensorRT/8.6.1.6-cuda11.8
cuDNN/8.0.5-cuda11.0     intel_oneapi/ccl/latest                    intel_oneapi/dnnl/latest             intel_oneapi/mkl32/latest                orca/5.0.4-gcc11            TensorRT/8.6.1.6-cuda12.0
cuDNN/8.1.1-cuda11       intel_oneapi/compiler-intel-llvm/2024.1.0  intel_oneapi/dpct/2024.1.0           intel_oneapi/mpi/2021.12                 python/2.7.18               TensorRT/10.0.1.6-cuda11.8
cuDNN/8.9.7-cuda11       intel_oneapi/compiler-intel-llvm/latest    intel_oneapi/dpct/latest             intel_oneapi/mpi/latest                  python/3.7.16               TensorRT/10.0.1.6-cuda12.4
cuDNN/8.9.7-cuda12       intel_oneapi/compiler-intel-llvm32/2024.1.0 intel_oneapi/dpl/2022.5             intel_oneapi/oclfpga/2024.1.0            python/3.8.19               tfpwa/tf2.4.0
cuDNN/9.0.0-cuda11       intel_oneapi/compiler-intel-llvm32/latest  intel_oneapi/dpl/latest              intel_oneapi/oclfpga/latest              python/3.9.18               vmd/1.9.4
cuDNN/9.0.0-cuda12       intel_oneapi/compiler-rt/2024.1.0          intel_oneapi/ifort/2024.1.0          intel_oneapi/tbb/2021.12                 python/3.10.14              warpx/24.02
elegant/1.0              intel_oneapi/compiler-rt/latest            intel_oneapi/ifort/latest            intel_oneapi/tbb/latest                  python/3.11.8
```

调度管理层

- 基于Slurm 23.11.06，AlmaLinux 9.4
- 资源管理：按功能分区

```
PARTITION AVAIL  TIMELIMIT  NODES  STATE NODELIST
control      up   infinite      1  drain aislurm01
login        up   infinite      1  drain ailogin001
gpu          up   infinite      2   idle aigpu[001-002]
dcu          up   infinite      4   idle aidcu[001-004]
```

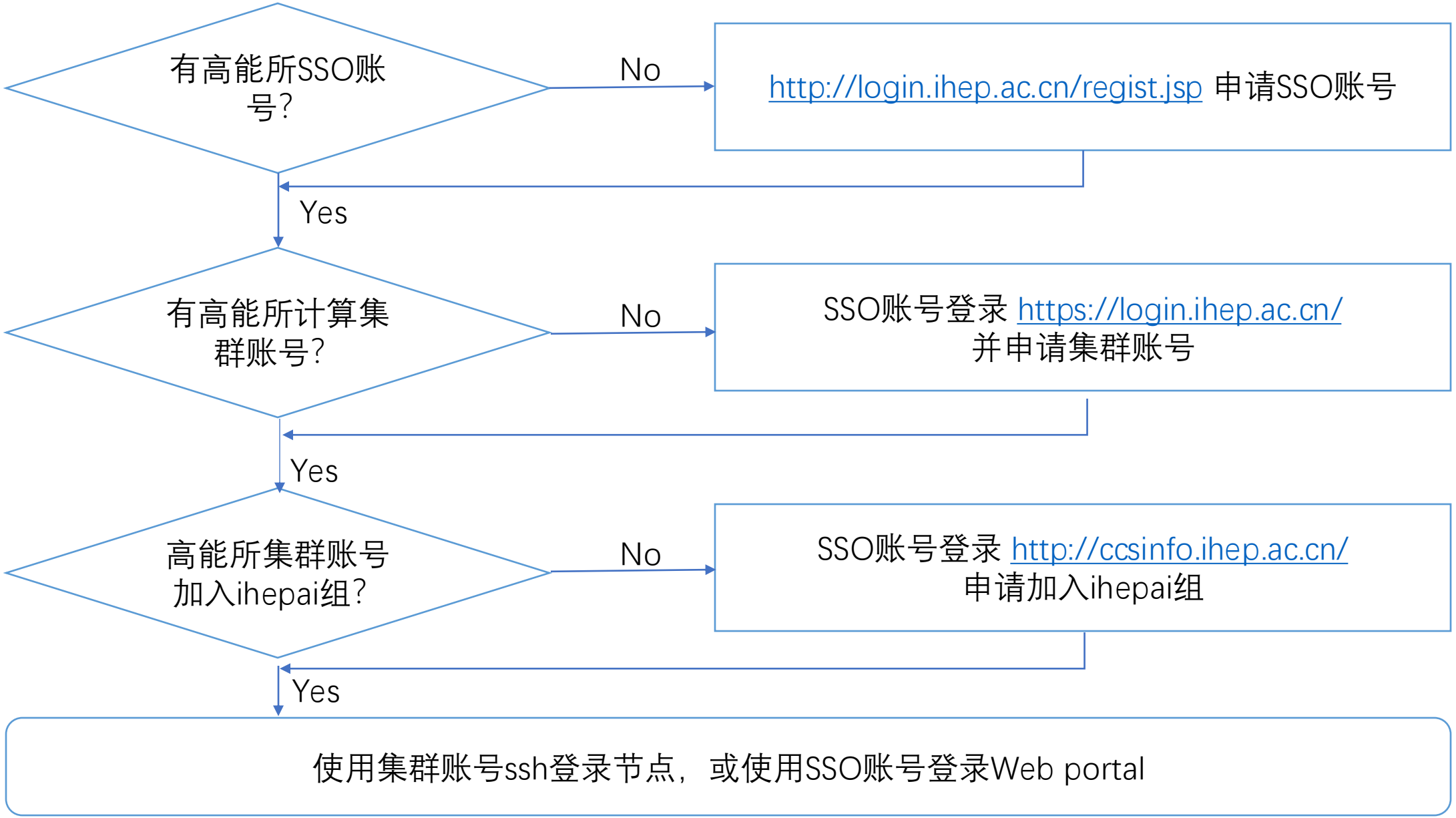
- 算力分区
- 根据加速卡类型划分
- dcu算力分区和gpu算力分区

- 作业调度：基于QOS的优先级调度，作业中指定QOS即可获得对应的调度服务

QOS名称　作业优先级　作业可使用的最大资源限制　作业最大运行时间　可提交的最大作业数量

```
      Name   Priority                                                    MaxTRESPU     MaxWall MaxSubmitPU
---------- ---------- ------------------------------------------------------------ ----------- -----------
gpunormal          0    cpu=32,gres/gpu:a800=8,gres/gpu:l40=8,gres/gpu=8,mem=640G  2-00:00:00           8
 gpudebug         20    cpu=32,gres/gpu:a800=8,gres/gpu:l40=8,gres/gpu=8,mem=640G    00:15:00          16
dcunormal          0                          cpu=48,gres/dcu:k100ai=12,mem=960G  2-00:00:00          16
 dcudebug         20                         cpu=64,gres/dcu:k100ai=16,mem=1280G    00:15:00          24
```

用户服务层 – 平台申请与用户认证

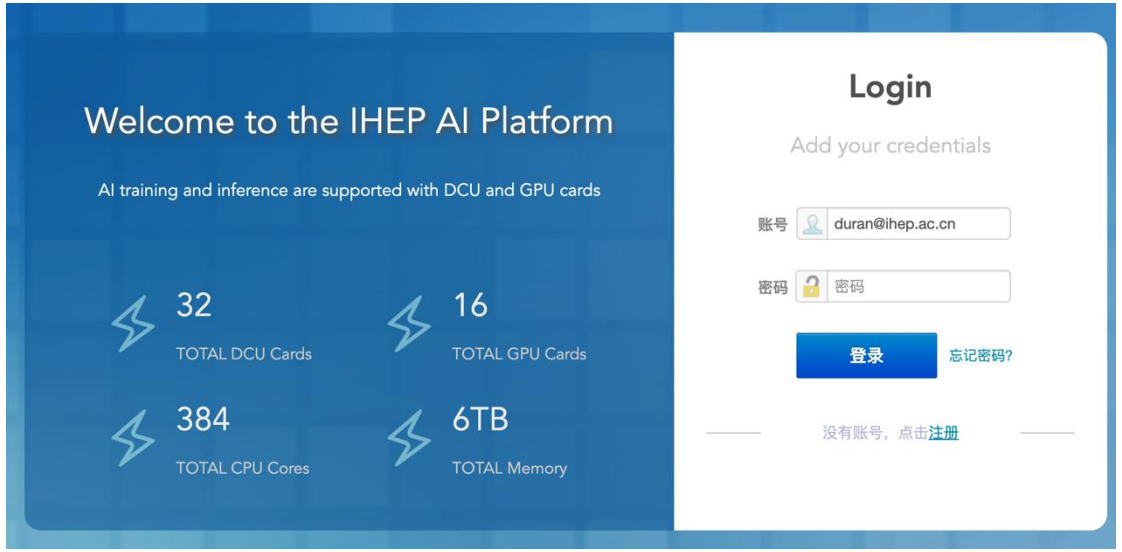


用户服务层 – 两种使用方式

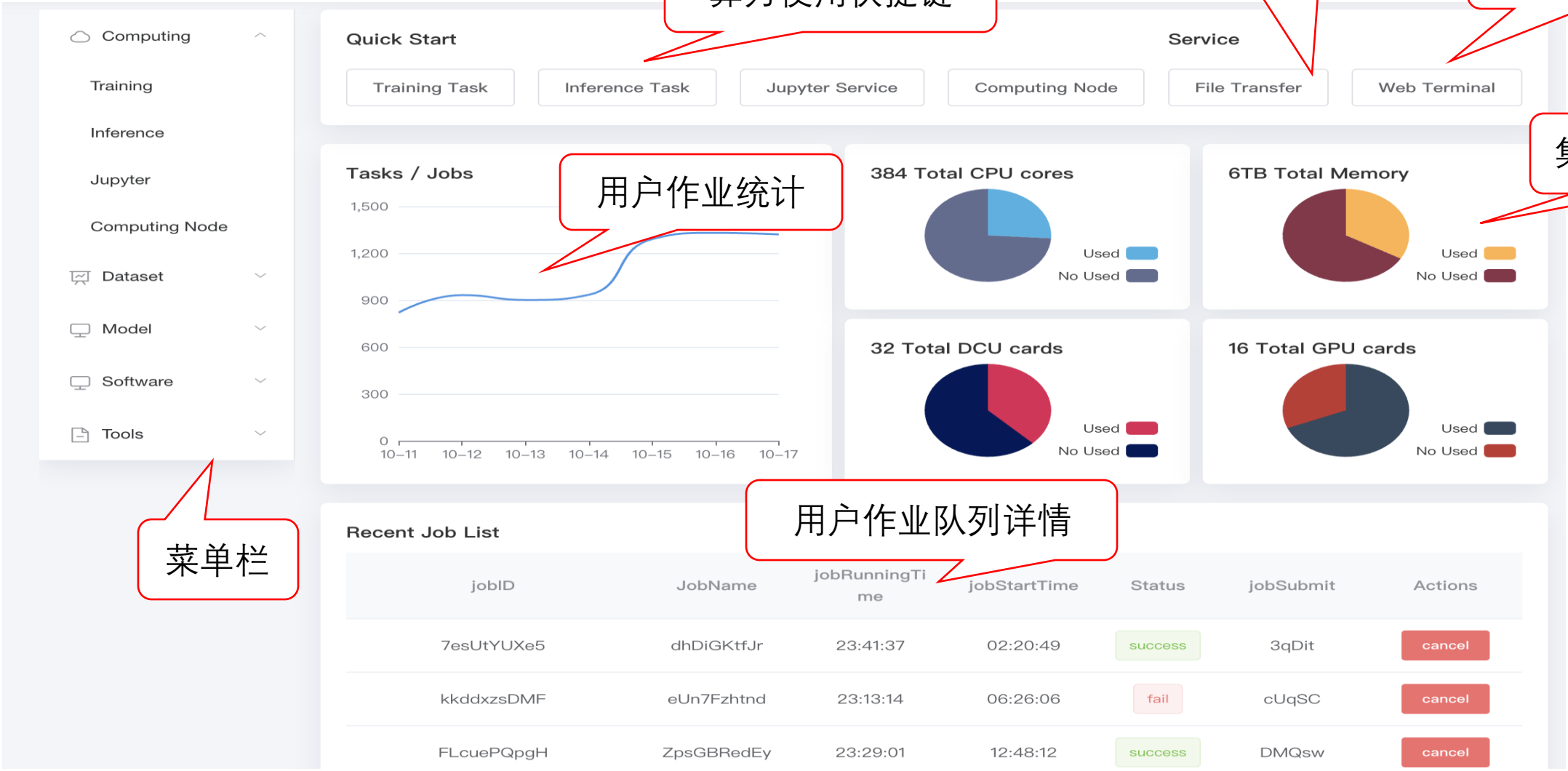
- 终端登录：使用集群账号

```
└─$ ssh duran@ailogin001.ihep.ac.cn
duran@ailogin001.ihep.ac.cn's password:
##############################################################
#                 Welcome to IHEP AI Platform                #
#   Any Question, Please contact http://helpdesk.ihep.ac.cn/  #
##############################################################
Last login: Thu Oct 17 22:15:55 2024 from 10.100.0.157
[duran@ailogin001 ~]$
```

- Web portal登录： 使用SSO账号



用户服务层 - Dashboard

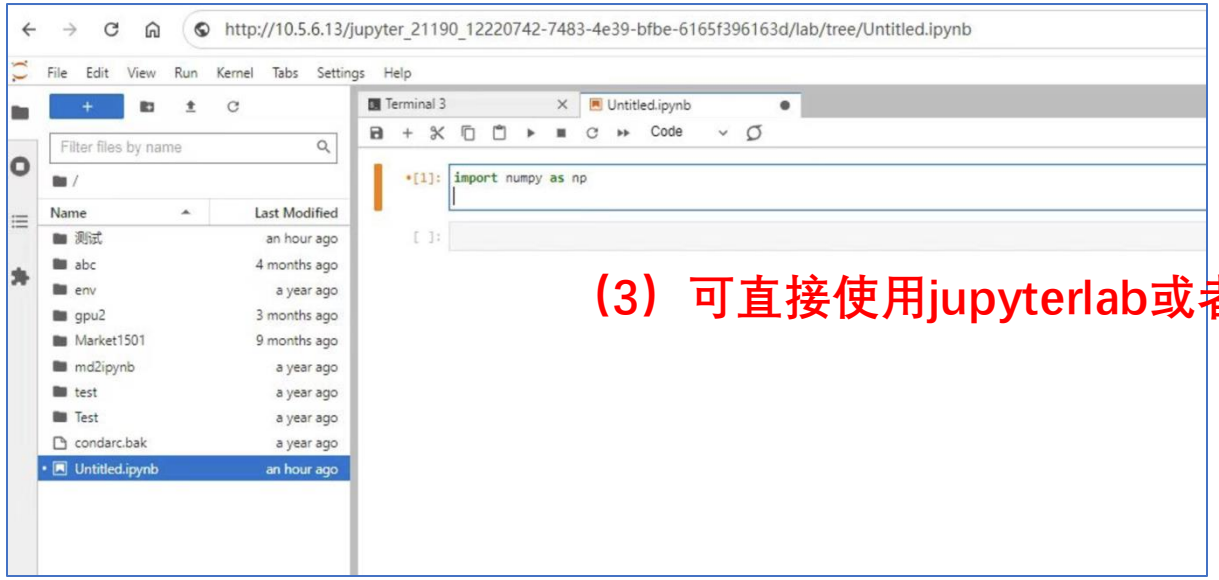


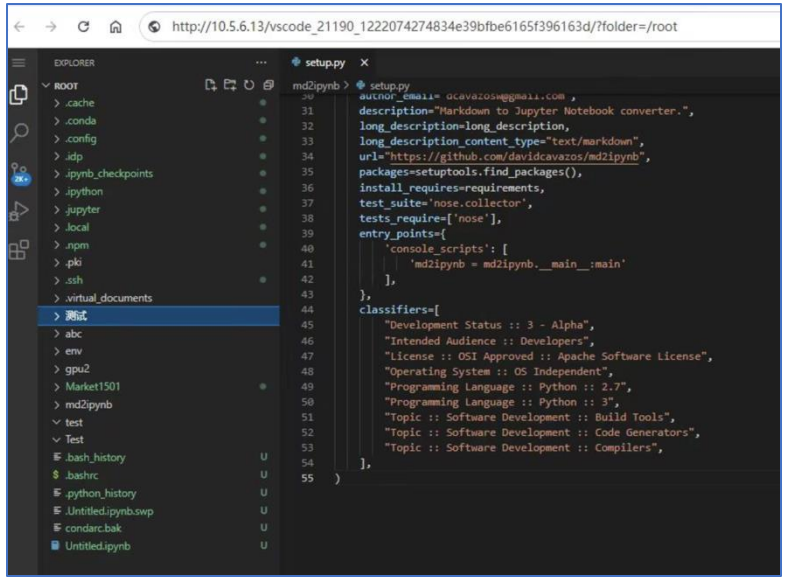
用户服务层 – 算力使用

（1）填写算力使用相关信息

（2）等待资源分配和服务启动

（3）可直接使用jupyterlab或者vscode





用户服务层 – 数据集/模型/软件服务 1/2

- 查看公开 & 私有的数据集/模型/软件
  - 公开数据集：/aifs/public/data/datasets

hep_text_v1.0	Oct 11, 2024, 8:16:01 PM	drwxr-xr-x
JetClass	Oct 11, 2024, 8:14:26 PM	drwxr-xr-x
OmniFold	Oct 11, 2024, 2:36:20 PM	drwxr-xr-x
QuarkGloun	Oct 11, 2024, 7:26:12 PM	drwxr-xr-x
TopLandscape	Oct 11, 2024, 7:26:45 PM	drwxr-xr-x

  - 公开模型：/aifs/public/data/models

Xiwu	Oct 11, 2024, 7:51:00 PM	drwxr-xr-x

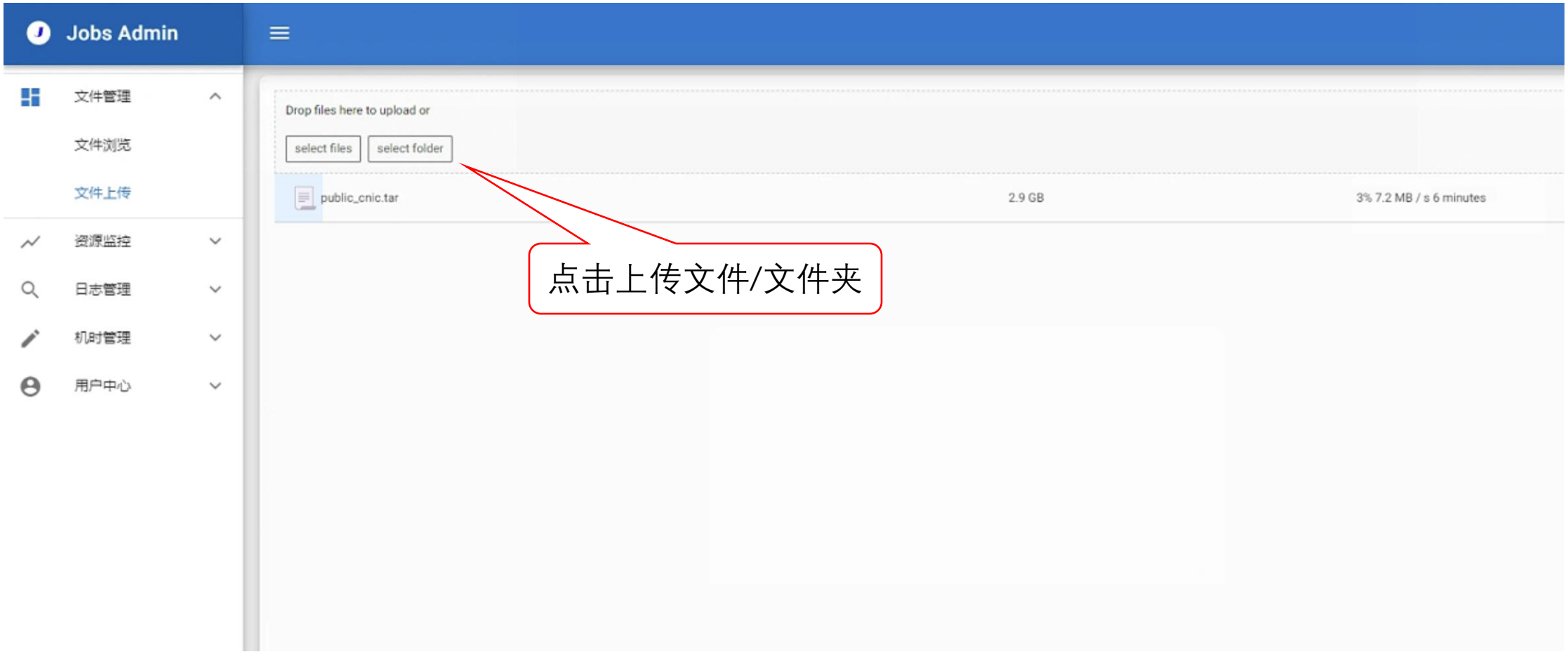
用户服务层 – 数据集/模型/软件服务 2/2

- 上传数据集/模型/软件

（1）填写数据集信息

（2）上传数据集

用户服务层 – 文件上传/下载



用户服务层 – web terminal

- web terminal可直接ssh到登录节点，提交作业

```
Connecting...

[duran@ailogin001 ~]$
[duran@ailogin001 ~]$ pwd
/aifs/user/home/duran
[duran@ailogin001 ~]$ squeue
             JOBID PARTITION     NAME     USER ST       TIME  NODES NODELIST(REASON)
               383       dcu  dcutest    duran  R       0:09      1 aidcu002
               384       dcu  dcutest    duran  R       0:09      1 aidcu002
               381       dcu  dcutest    duran  R       0:12      1 aidcu002
               382       dcu  dcutest    duran  R       0:12      1 aidcu002
               380       gpu  gputest    duran  R       0:32      1 aigpu001
[duran@ailogin001 ~]$
```

平台管理规则

- **面向全所**有AI计算需求的用户、课题组提供计算服务
- **有偿运行**
  - 偿还所里投资
  - 支付水电费
  - 保证平台可持续发展
- 所里资源可以满足需求的前提下，**不再支持**购买**外部算力**使用
- **鼓励**课题组/应用使用平台算力，支持购买硬件资源、贡献到平台中**共享使用**
  - 购买计算资源的**技术参数可咨询**计算中心
  - 可根据贡献度大小提高资源使用上限 & 作业优先级大小

算力分配方案 & 收费方案

- 算力分配方案
  - 普通用户：提供初始作业优先级和资源使用限制，后续**可按需调整**
  - 有硬件资源贡献的用户：
    - 节点数量**满足一定规模**的用户/组可以**按需保留**部分节点专用，其他节点需**共享使用**
    - 专用节点可**按需配置**作业优先级及资源使用限制
    - 有节点贡献到共享资源分区的用户/组，可根据贡献度大小**提高**作业优先级和资源使用限制
- 收费方案
  - 平台**统一记账**，费用收取与科研计划处配合进行
  - 计算资源（cpu/gpu/dcu）单价**不高于**商算平台
  - 有共享硬件资源贡献的用户，根据贡献机时数量和实际消耗机时数量**核减**
  - 水电费理论上由收取的计算费**覆盖**，保证平台的**可持续运行**

平台上线时间计划

时间节点	开放使用目标群体
当前	人工智能工作组测试调优
2024.10月底	面向全所使用
2024.11月底	面向高能物理领域使用

Thanks

Backup

小结

- 人工智能平台**本身是软件系统，承载AI算法模型，接入AI算力，打通数据通道。**
- 承载AI算法模型
  - **生成式AI系统HaiChat**，2023.08已上线，高能所用户1500+，日活700，提升日常工作效率。
  - **赛博士科研智能体**，提升物理分析效率，计划24年上线。
  - 下一步：支持开源的Particle Transformer、Segment Anythong Model等SOTA模型，直接体验前沿技术；**部署所内自主开发的AI模型**，可直接调用展示成果。
- 提供AI算力
  - 下一步：提供部署AI模型的算力，用于开发和模型共享。
- 打通数据通道
  - 当前：AI开放数据平台（4个AI-Ready数据集）
  - 下一步：接入更多AI-Ready科学数据集共享、发现门户；与DOMAS等对接，接入光源/高能物理数据；