

Суперкомпьютерные дни в России

Суперкомпьютерный центр ОИВТ РАН:
внедрение новых типов аппаратного обеспечения и
новых технологий параллельного программирования
для математического моделирования задач энергетики

Тимофеев Алексей Владимирович
заместитель директора ОИВТ РАН,



Соавторы: В.П.Никольский, А.С.Семёнов, В.В.Стегайлов

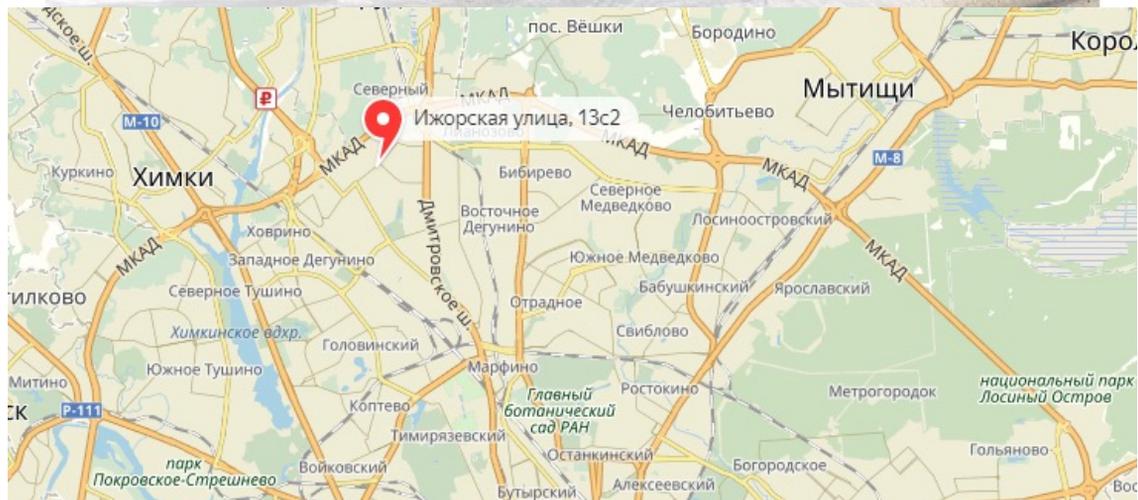


Содержание

- Краткая история развития Суперкомпьютерного центра ОИВТ РАН
- О тестировании новых технологий
 - Интерконнект Ангара, GPUDirect
 - Графические ускорители
- Зачем нам суперкомпьютеры?
 - Заключение

СУПЕРКОМПЬЮТЕРНЫЙ ЦЕНТР

ОИВТ РАН



Вычислительная техника в ИВТАНе



1969 г. - введена
БЭСМ-4 (20Кфлопс),

в использовании
УРАЛ-14
(10-25 Кфлопс).

Вычислительная техника в ИВТАНе

1969 г. - введена БЭСМ-4 (20Кфлопс), в использовании УРАЛ-14.

К 1977 г. - БЭСМ-6 (1Мфлопс), ЕС-1020 (20Кфлопс), НР-2000

В 1978-79 гг. - НР-3000

В 1980-85 гг и позже на БЭСМ-6 работает ИВТАНТЕРМО,
и на НР-3000 работает Банк данных по ТД свойствам.

В 1986 г. – ЕС-1045 (0,8 Мфлопс), М10 (5МФлопс), VAX-6000 (8-63МФлопс)

Академик В.Е.Фортов

23.01.1946 — 29.11.2020



По инициативе академика Фортова в 1999 году был открыт Межведомственный суперкомпьютерный центр РАН, где был установлен первый российский суперкомпьютер. Это одно из немногих научных мероприятий, которое посетил тогдашний премьер-министр В.В. Путин. На тот момент, что подтверждено сертификатами, кластер вошел в сотню самых мощных компьютеров мира.

Развитие суперкомпьютерного центра



Суперкомпьютер MBC-1000 был поставлен в ОИВТ РАН в 2001 году НИИ «Квант».

Суперкомпьютер имел 16 вычислительных узлов и один управляющий, на каждом узле было установлено по 2 процессора с тактовой частотой 1 ГГц и 1 Гб оперативной памяти.

Пиковая производительность кластера составляла 32 Гфлопс.

Развитие суперкомпьютерного центра



Суперкомпьютер NWO5 был поставлен в ОИВТ РАН в 2005 году на средства РФФИ.

На кластере настроено программное обеспечение для проведения расчетов в GRID-системах.

Суперкомпьютер состоит из 13 вычислительных узлов, имеющих следующие характеристики: 2 процессора Intel Xeon 3.0 ГГц, 2 Гб оперативной памяти на узел, жесткий диск на 160 Гб, сетевые интерфейсы Fast Ethernet и Gigabit Ethernet. Производительность кластера на тесте LINPACK составляет 108 Гфлопс.

Развитие суперкомпьютерного центра



Суперкомпьютер Т-Платформы TEdge-48 компании Т-Платформы был поставлен в ОИВТ в 2008 году и состоит из 24 вычислительных модулей.

Каждый модуль содержит 2 четырехядерных процессора Intel Xeon 5445 с тактовой частотой 2.33 ГГц и 8 Гбайт оперативной памяти.

Производительность кластера на тесте Linpack составляет 1.4 Tflops.

Развитие суперкомпьютерного центра



Суперкомпьютер DESMOS введен в эксплуатацию в конце 2016 г.

Кластер состоит из 32 гибридных вычислительных узлов и одного головного.

Для объединения узлов используется сеть Ангара в топологии 4-х мерный тор.

2016: прототип на ускорителях **Nvidia GTX1070**,

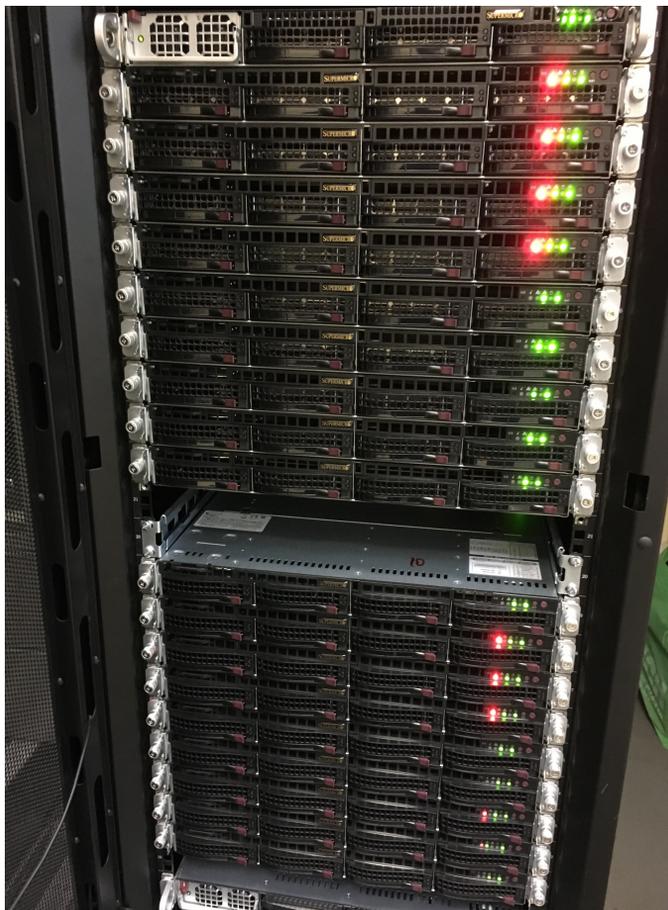
2018: апгрейд на ускорители **AMD FirePro S9150**
#45 в Топ50 сентября 2018 года – 52.24 (90.75) Тфлопс

2020: апгрейд на ускорители **AMD Instinct MI50**
#39 в Топ50 марта 2021 года -
85.26 (221.85) Тфлопс



NIAGARA
Российские Суперкомпьютеры

Развитие суперкомпьютерного центра



Суперкомпьютер ФИШЕР введен в эксплуатацию в 2018 г.

Сегмент с воздушным охлаждением состоит из 18 двухпроцессорных вычислительных узлов на процессорах AMD Epyc и Infiniband FDR.



Развитие суперкомпьютерного центра



Суперкомпьютер с погружным охлаждением и сетью Ангара в конце 2018 г.



В марте 2019 года в ОИВТ РАН был запущен сегмент суперкомпьютера Fisher с жидкостным охлаждением (на базе коммутатора Ангара и однопортовых плат PCIe)



Погружная система на процессорах AMD Ерус и интерконекте Ангара

Суперкомпьютер Фишер
ОИВТ РАН

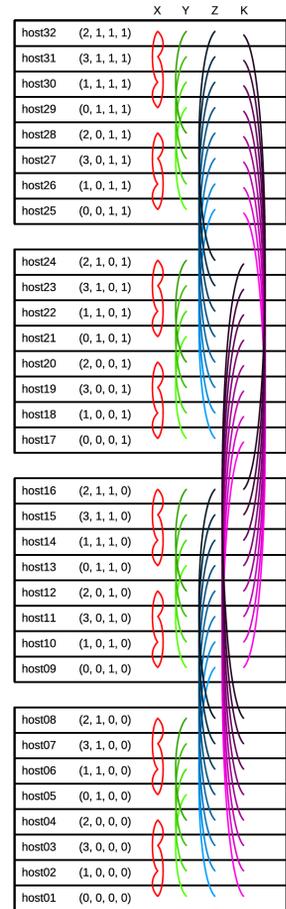


**О ТЕСТИРОВАНИИ
И
СРАВНИТЕЛЬНОМ АНАЛИЗЕ
НОВЫХ ТЕХНОЛОГИЙ**

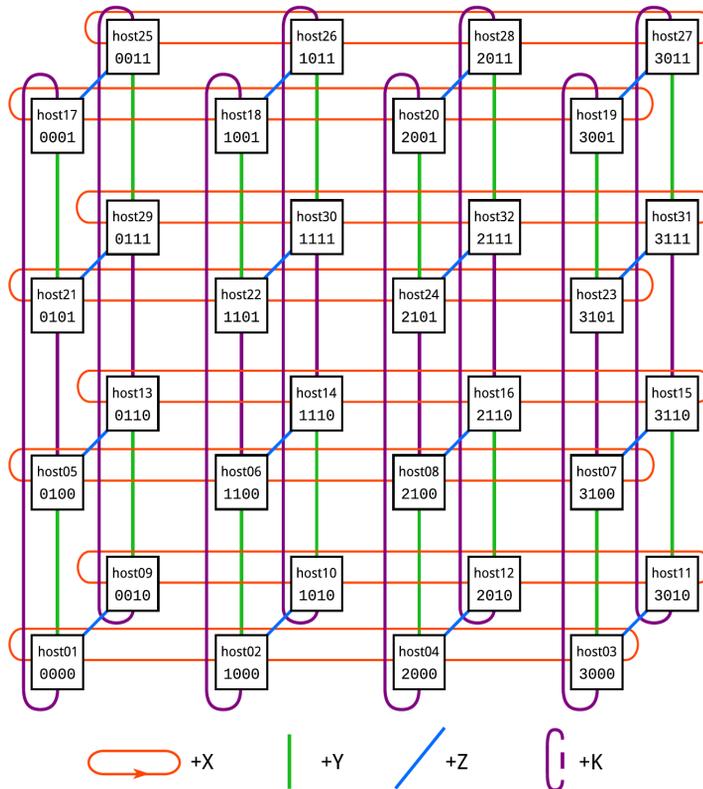
ИНТЕРКОННЕКТ АНГАРА

АО НИЦЭВТ: сеть Ангара



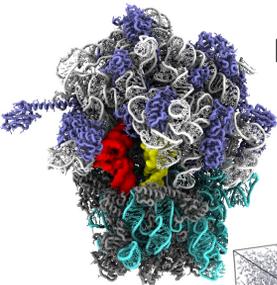


Топология сети Ангара на суперкомпьютере Десмос

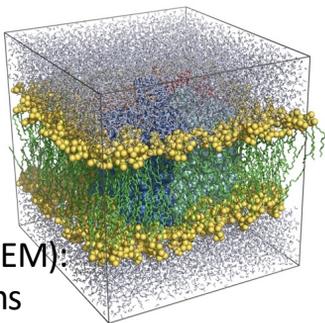


Экономический эффект от использования специализированных гибридных архитектур

Сравнение Десмоса (ОИВТ РАН) и IRUS17 (ИАПУ ДВО РАН)
2 x Intel Xeon E5-2699 v4 per node
with Intel Omni-Path

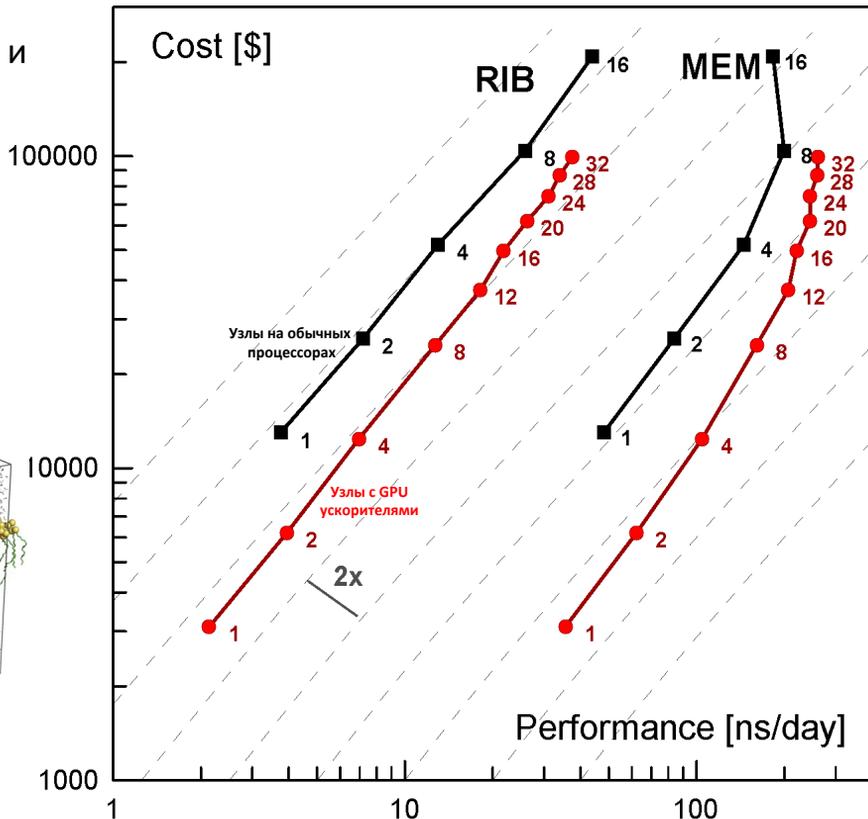


Рибосома (RIB):
2136412 atoms

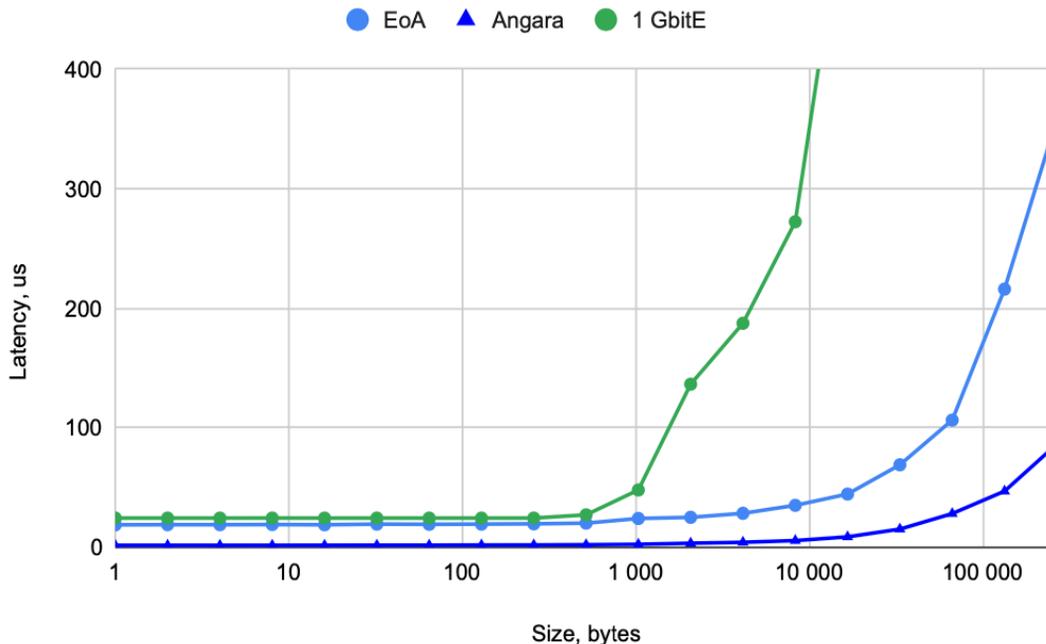


Мембрана (MEM):
81743 atoms

Цены с сайта thinkmate.com
(Ноябрь 2017)



Программный стек TCP/IP для интерконекта Ангара

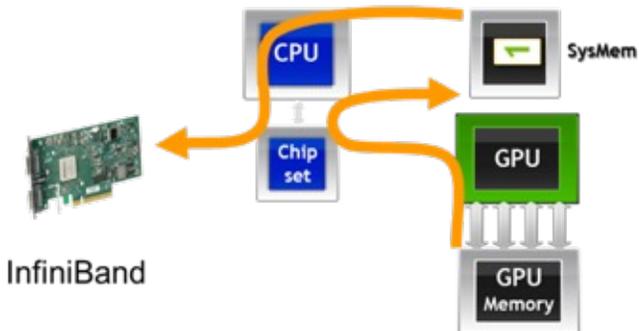


Подробнее в докладе Александра Семёнова 27 сентября 9:00-11:00
«Evaluation of the Angara Interconnect Prototype TCP/IP Software Stack: Implementation, Basic Tests and BeeGFS Benchmarks» на секции «Перспективные суперкомпьютерные технологии 1»

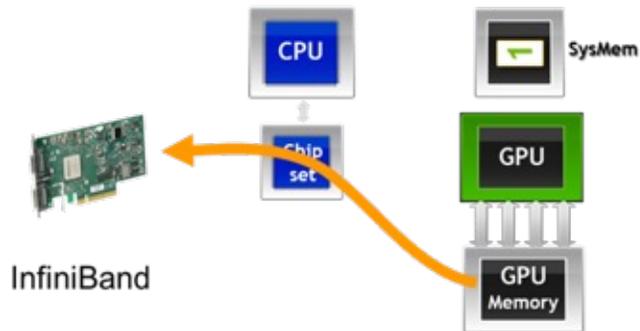
ТЕХНОЛОГИЯ GRUDIRECT RDMA

Технология GPUDirect RDMA

No GPUDirect RDMA



GPUDirect RDMA

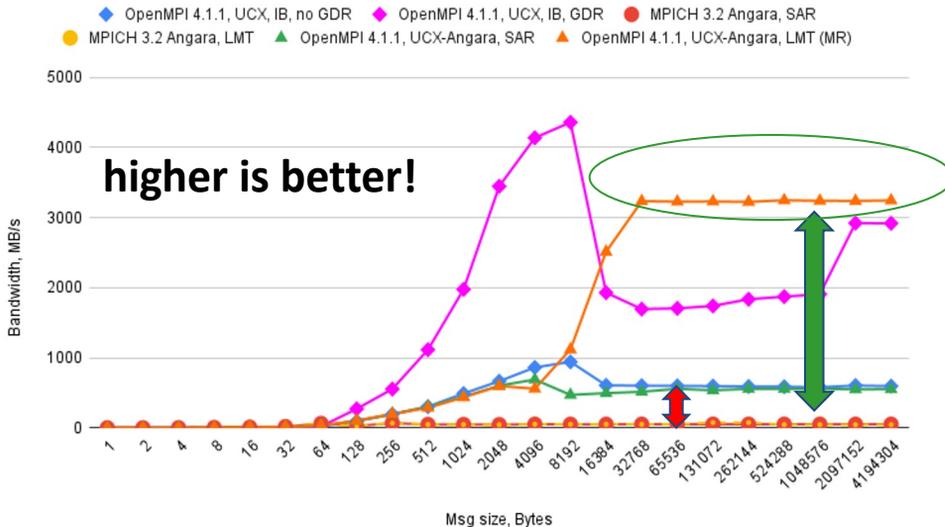


Реализация поддержки семейства технологий GPUDirect для сети Ангара и графических ускорителей AMD



Результаты разработки поддержки GPUDirect RDMA для сети Ангара

osu_mbw_mr, device-to-device



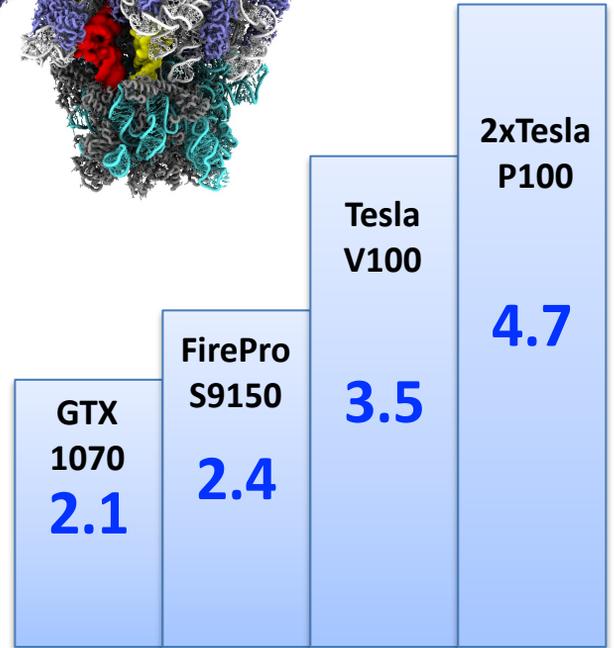
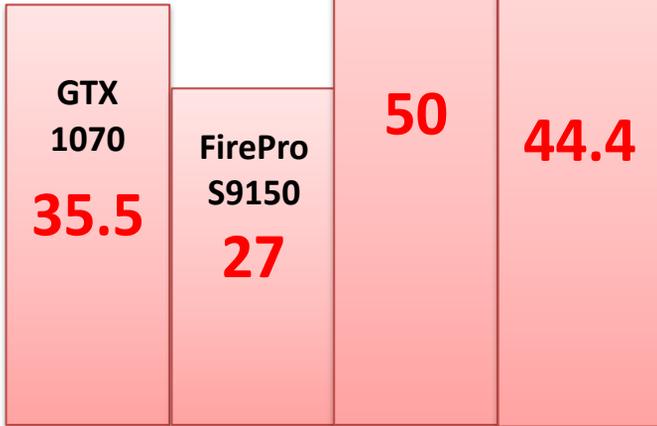
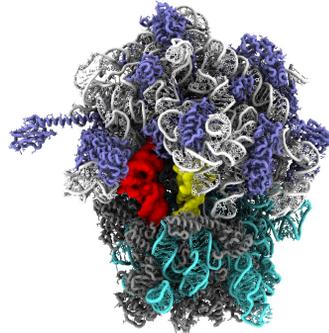
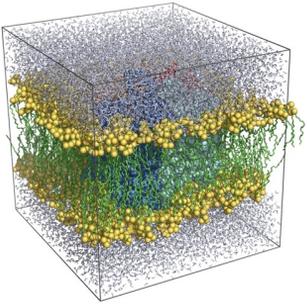
- Использование `rost_copy` (GPUDirect) позволяет добиться **ускорения в ~10 раз** при P2P-пересылках между памятью GPU
- Ускорение с использованием протокола `Rendezvous` в связке с API `pkba_reg_mr` (GPUDirect RDMA) достигает **~68 раз**
- **Подробнее в докладе Михаила Халилова «Towards OpenUCX and GPUDirect technology support for the Angara interconnect»**

27 сентября 11:30-13:30 на секции «Перспективные суперкомпьютерные технологии»

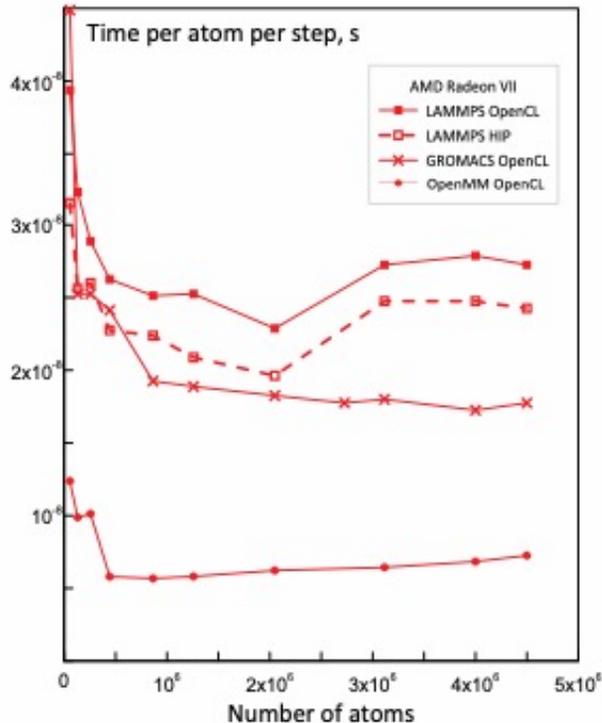
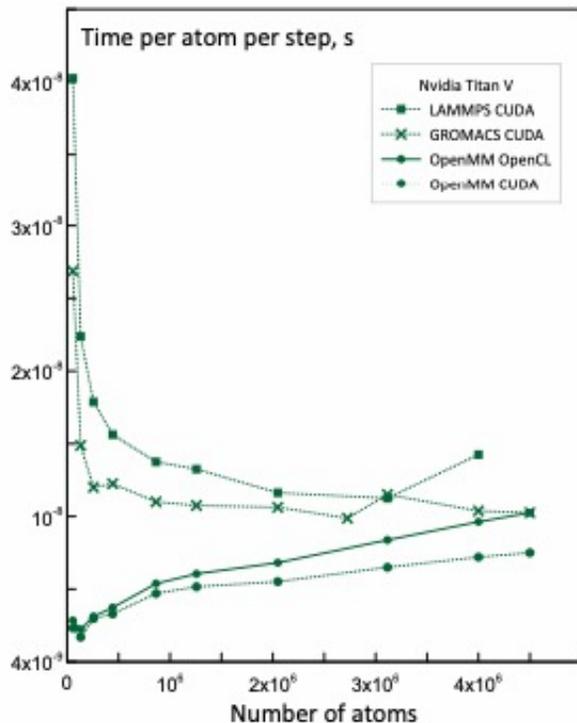
ГРАФИЧЕСКИЕ УСКОРИТЕЛИ

MEM

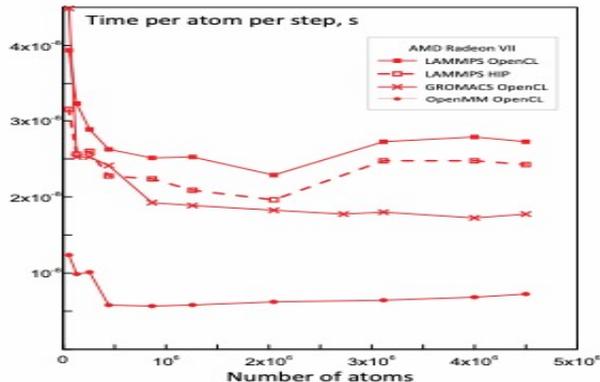
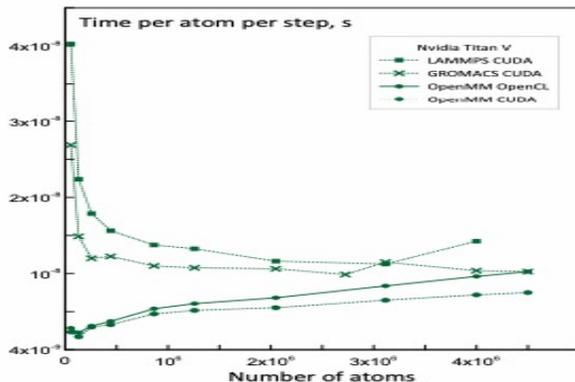
RIB



Портирование молекулярно-динамического кода LAMMPS на HIP



Портирование молекулярно-динамического кода LAMMPS на HIP



Kuznetsov, E., V. Stegailov. *Communications in Computer and Information Science* 1129 (2019): 121-130.

Kondratyuk, N., Nikolskiy, V., Pavlov, D., Stegailov, V. *The International Journal of High Performance Computing Applications*, 35(4) (2021): 312-324.

Новый ускоренный потенциал ADP/КК для Lammops-Kokkos

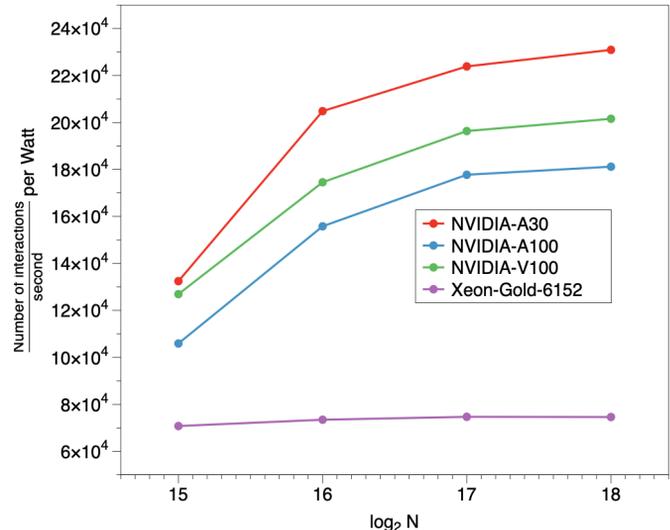
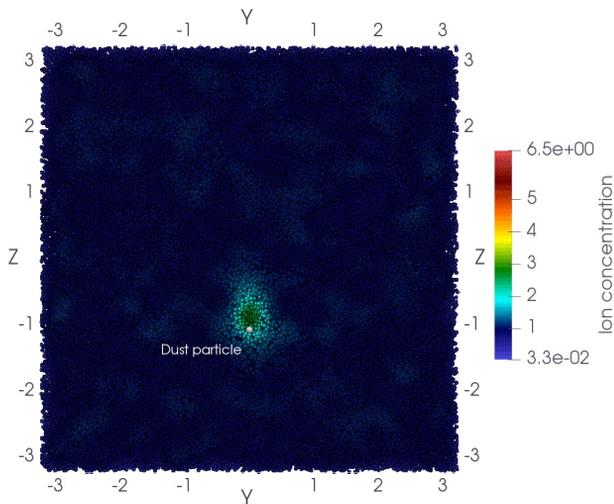
Постерный доклад:

Владислав Галигеров, Всеволод Никольский, Владимир Стегайлов
Разработка модели ADP на основе библиотеки Kokkos
C++ для пакета молекулярной динамики LAMMPS

Исследование применимости языка Rust для вычислений на GPU

Исследование производительности и особенности работы с GPU при использовании языка Rust в докладе
Андрея Бычкова и Всеволода Никольского²⁹

Создание и оценка производительности кода для решения многомасштабных плазменных задач на GPU на базе пакета OpenMM

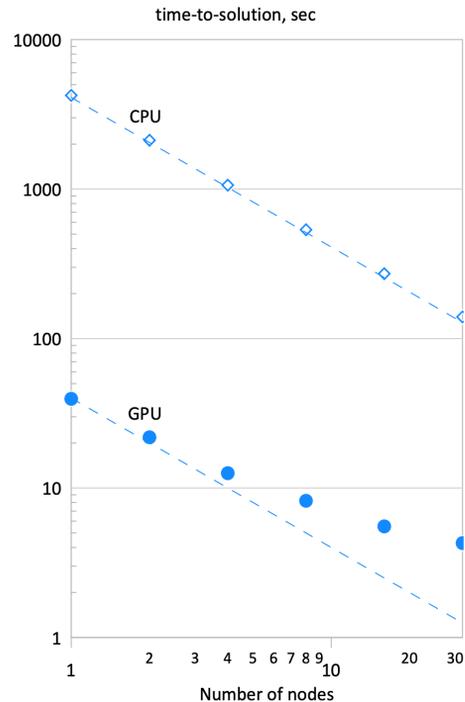
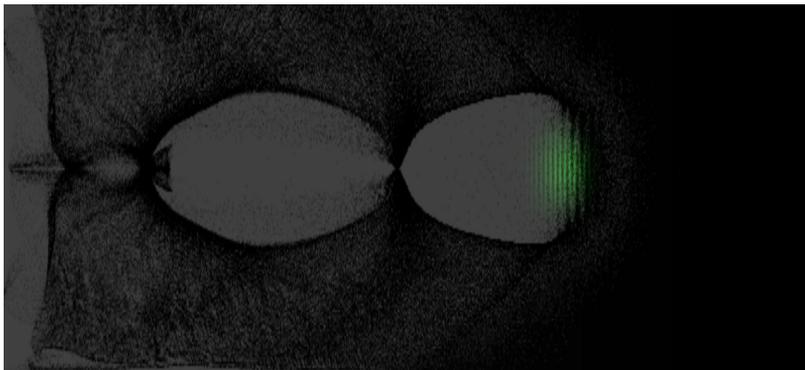
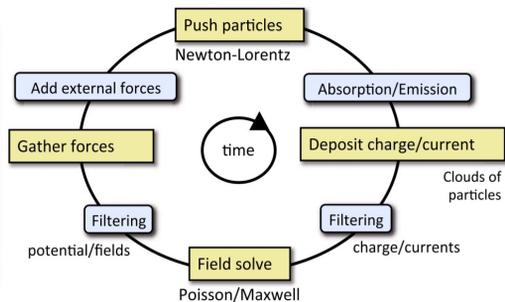
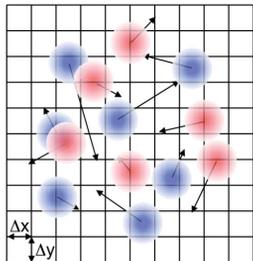


Подробнее в докладе Даниила Колотинского 26 сентября 14:30-16:30

«Performance analysis of GPU-based code for complex plasma simulation»

на секции молодых учёных

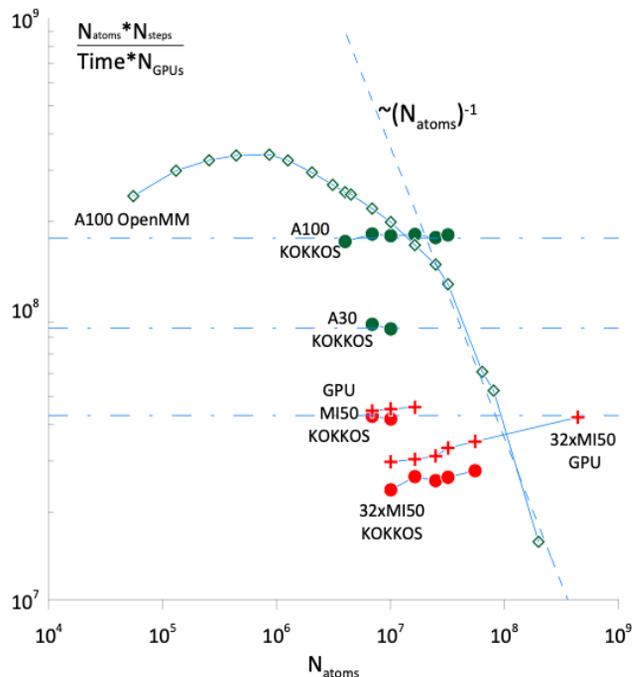
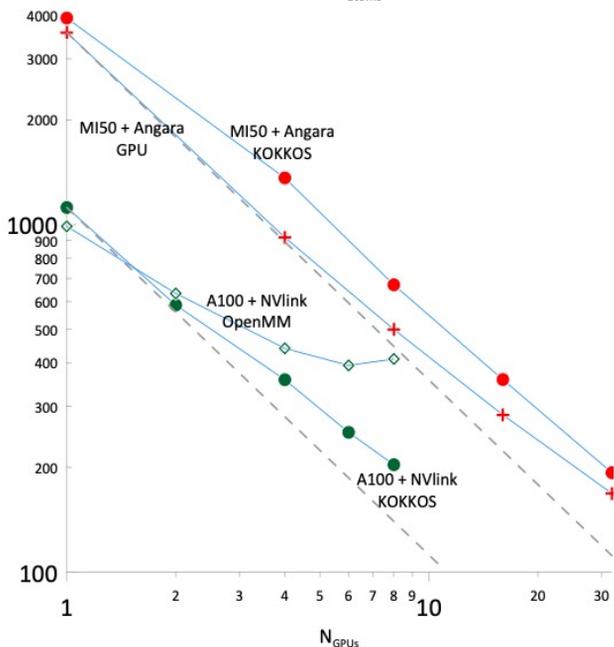
Оценка производительности кода PIConGPU на GPU для решения плазменных задач



Подробнее в докладе Искандера Умарова 27 сентября 14:30-16:30
«PIConGPU on Desmos Supercomputer: GPU Acceleration, Scalability and Storage Bottleneck»
на секции «Методы исследования и повышения эффективности приложений»

Современные пакеты молекулярной динамики для вычислений на GPU: производительность, масштабируемость и ограничения

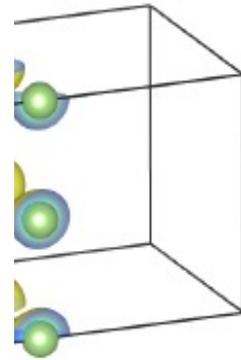
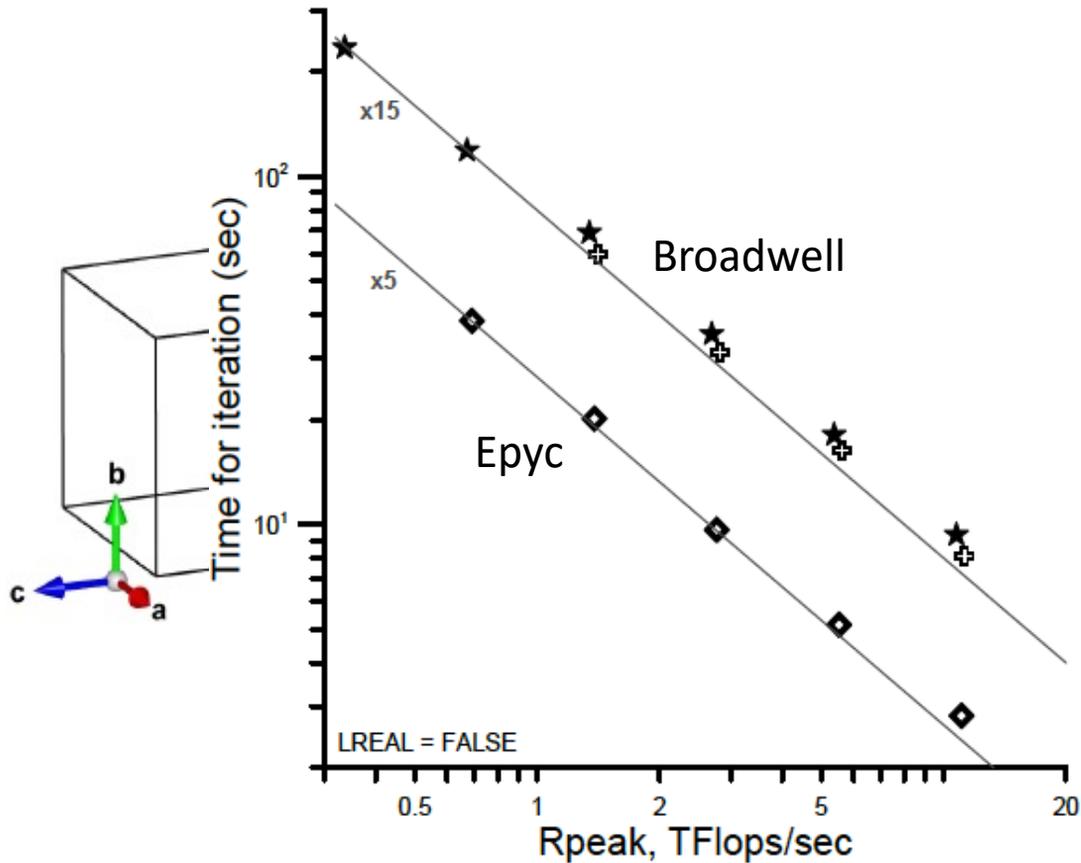
Time for 10000 steps ($N_{\text{atoms}}=16384000$)



Подробнее в докладе Всеволода Никольского 27 сентября 11:30-13:30
«State-of-the-Art Molecular Dynamics Packages for GPU Computations: Performance, Scalability and Limitations» на секции «Приложения, алгоритмы и гибридные системы»

ПРОЦЕССОРЫ

VASP на процессорах AMD Epyc



Другие новые архитектуры



V Nikolskiy and V Stegailov 2016 J.
Phys.: Conf. Ser. 681 012049

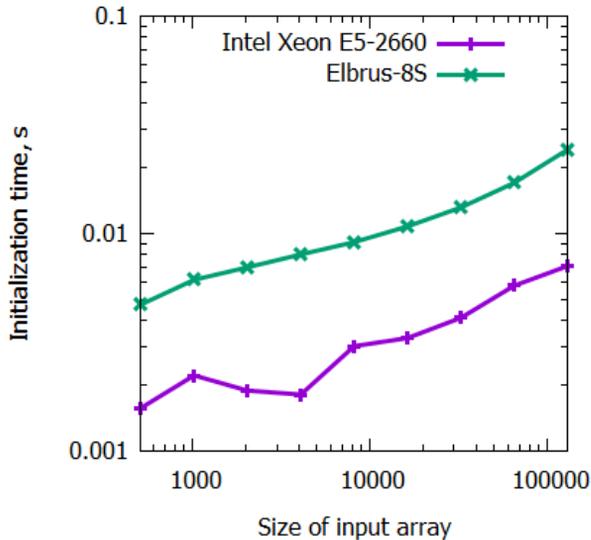


Stegailov V., Timofeev A.,
Dergunov D. //International
Conference on Parallel
Computational Technologies. –
Springer, Cham, 2018. – С. 92-
103



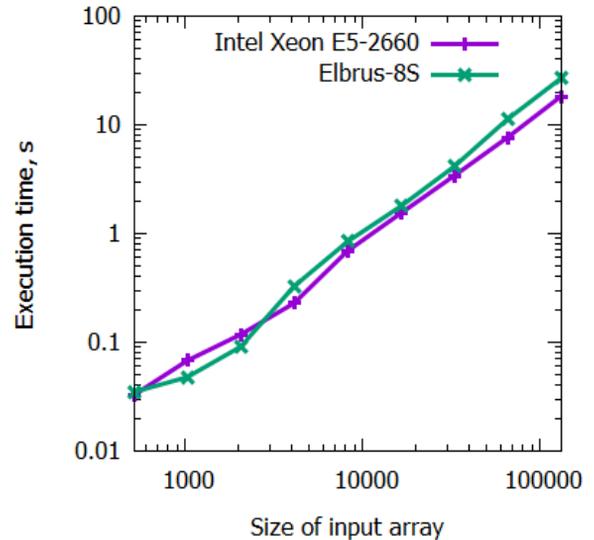
Intel Xeon E5-2660 (2.0 GHz) vs Elbrus-8S (1.3 GHz) for FFTW

Initialization



Intel is three times faster

Execution



Processors are nearly equal

**А ЗАЧЕМ НАМ
СУПЕРКОМПЬЮТЕРЫ?**

Для каких задач нужны суперкомпьютеры в ОИВТ РАН?

Популярные прикладные пакеты для HPC (с открытым программным кодом):

- Молекулярная динамика (GROMACS, LAMMPS, OpenMM)
- Ab-Initio расчёты (VASP, CP2K, CPMD)
- Газо- и Гидродинамика (FlowVision, OpenFOAM)
- Плазма (PIConGPU, VLPL)

Эффект – высокий уровень результатов и признание работ

В России

- Премия Президента РФ для молодых учёных
- Стегайлов В.В., зав.отд. ОИВТ



- 1е место на международном конкурсе молодых ученых «Нефтегазовые проекты: взгляд в будущее-2021» Газпрома.



Коллектив:

Писарев В.В., зав. лаб. ОИВТ,
Кондратюк Н.Д., с.н.с. ОИВТ,
и др.

В мире

- 1е место на международном индустриальном конкурсе по моделированию свойств жидкостей

AIChE®

NIST



Коллектив:

Писарев В.В., зав. лаб. ОИВТ,
в.н.с.ВШЭ
Кондратюк Н.Д., с.н.с. ОИВТ,
зав.лаб. МФТИ

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Заключение

- ОИВТ РАН активно ведёт исследования
 - по оптимизации производительности научных кодов на современных компонентах, включая перенос на AMD HIP,
 - по подбору оптимальной конфигурации процессоров (включая EPYC 2), ускорителей и других компонент для научных задач,
 - по разработке поддержки GPUDirect RDMA для сети Ангара,
 - энергоэффективности вычислительных систем с воздушным и иммерсионным охлаждением.
- СКЦ ОИВТ РАН функционирует в форме ЦКП и исследует перспективные направления (AMD EPYC2, MI50, Ангара, ARM, Эльбрус и др). Мы готовы делиться опытом и предоставлять тестовый доступ.