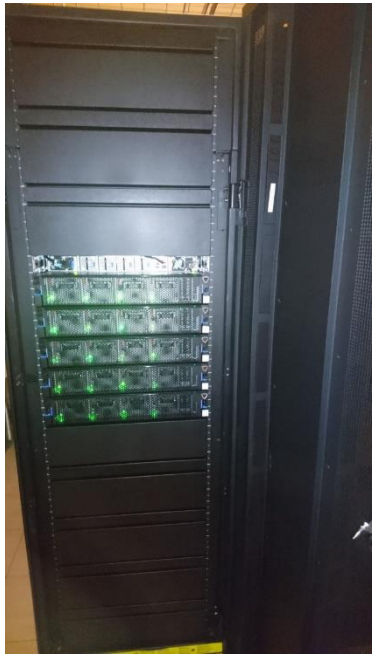
РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК
ДАЛЬНЕВОСТОЧНОЕ ОТДЕЛЕНИЕ

ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЙ ЦЕНТР

Гибридный вычислительный кластер ВЦ ДВО РАН: архитектура, программное обеспечение, особенности использования

Мальковский С.И., н.с., ЛИТС ВЦ ДВО РАН

Гибридный вычислительный кластер



Кластер состоит из 5 вычислительных узлов со следующими характеристиками (каждый узел):

- 2 десятиядерных процессора IBM POWER8 2.86 ГГц (всего 160 потоков);
- память ECC, 256 ГБ;
- 2 x 1 ТБ 2.5” 7K RPM SATA HDD;
- 2 x NVIDIA Tesla P100 GPU, NVLink.

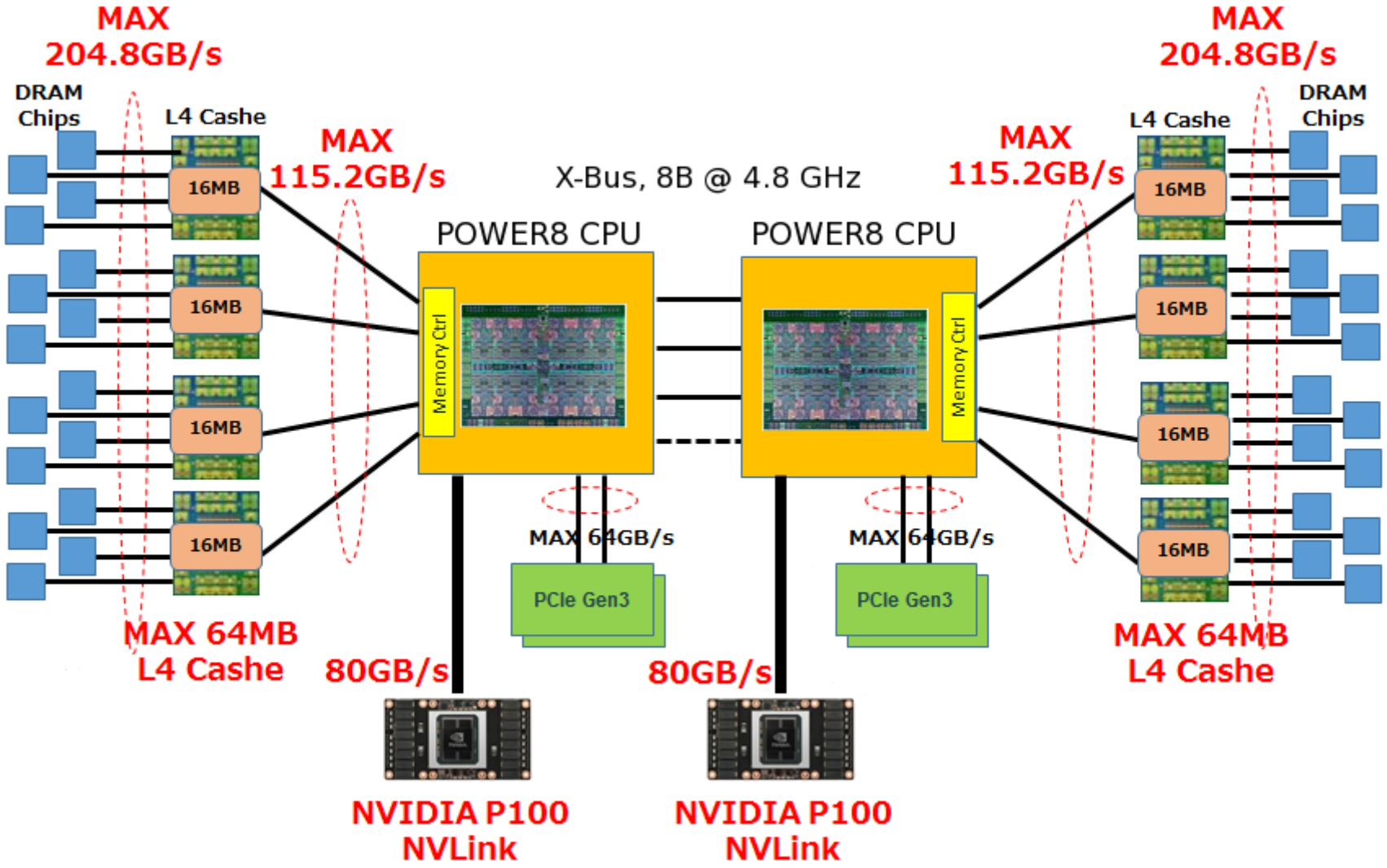
Сеть передачи данных: EDR InfiniBand.

Управляющая сеть: Gigabit Ethernet.

Хранилище: 15+ ТБ

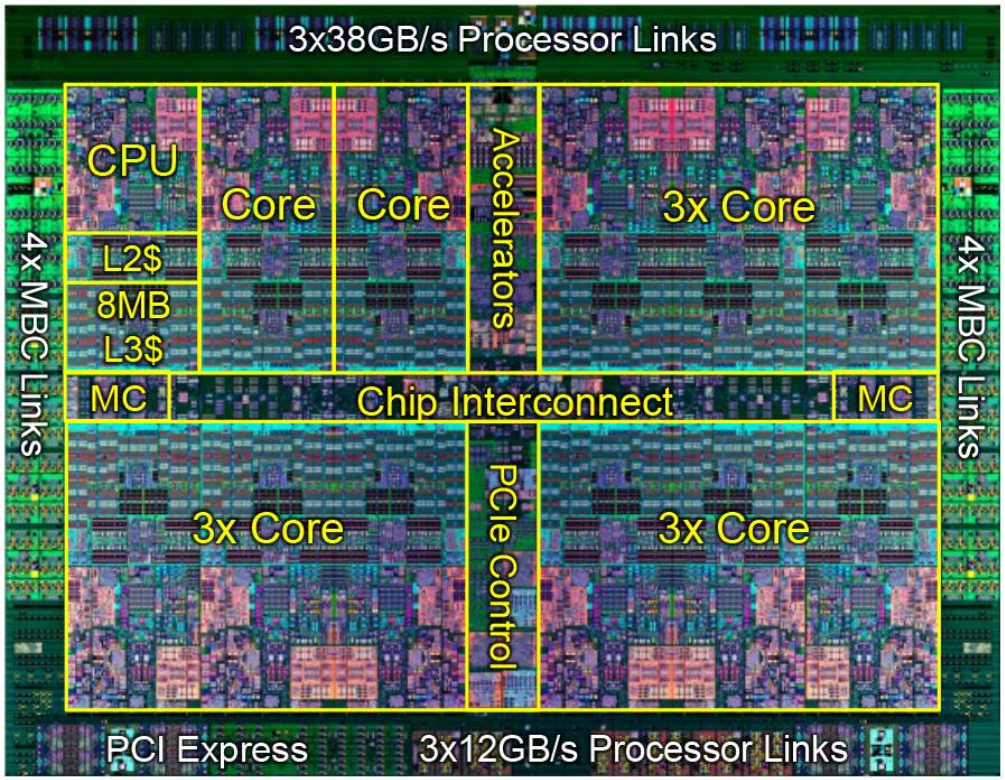
Энергопотребление: 10 кВт

Архитектура вычислительных узлов



Процессор IBM POWER8

- 10 вычислительных ядер с частотой 2,83/4,023 ГГц
- Поддержка SMT – до 8 потоков на ядро
- Кэш: L1 – 64K (данные), 32K (инструкции) на ядро; L2 – 512 КБ на ядро; L3 (96 МБ) и L4 (128 МБ) – разделяются между ядрами
- 16 исполнительных блоков; 4 FPU, 2 VMX (SIMD, 128 бит)
- Пиковая производительность – 0,322 ТФлопс



Сопроцессор NVIDIA P100

- 1792 вычислительных ядер с частотой 1,48 ГГц (двойная точность)
- 16 ГБ памяти HBM2 с пропускной способностью 732 ГБ/с
- Шина обмена данными с центральным процессором - NVLINK
- Пиковая производительность при вычислениях с двойной точностью – 5,3 ТФлопс
- Поддерживаемые API: CUDA, OpenCL, OpenACC, DirectCompute

Программное обеспечение

1. Операционная система – Linux CentOS 7.3
2. Программные средства параллельных вычислений стандарта MPI – библиотека IBM Spectrum MPI, OpenMPI
3. Компиляторы языков программирования – IBM XL C/C++, IBM XL Fortran, GNU C/C++, GNU Fortran, PGI C/C++, PGI Fortran
4. NVIDIA CUDA Toolkit 8.0
5. Математическая библиотека – IBM ESSL и PESSL
6. Система диспетчеризации заданий – PBS Professional

Производительность вычислительной системы

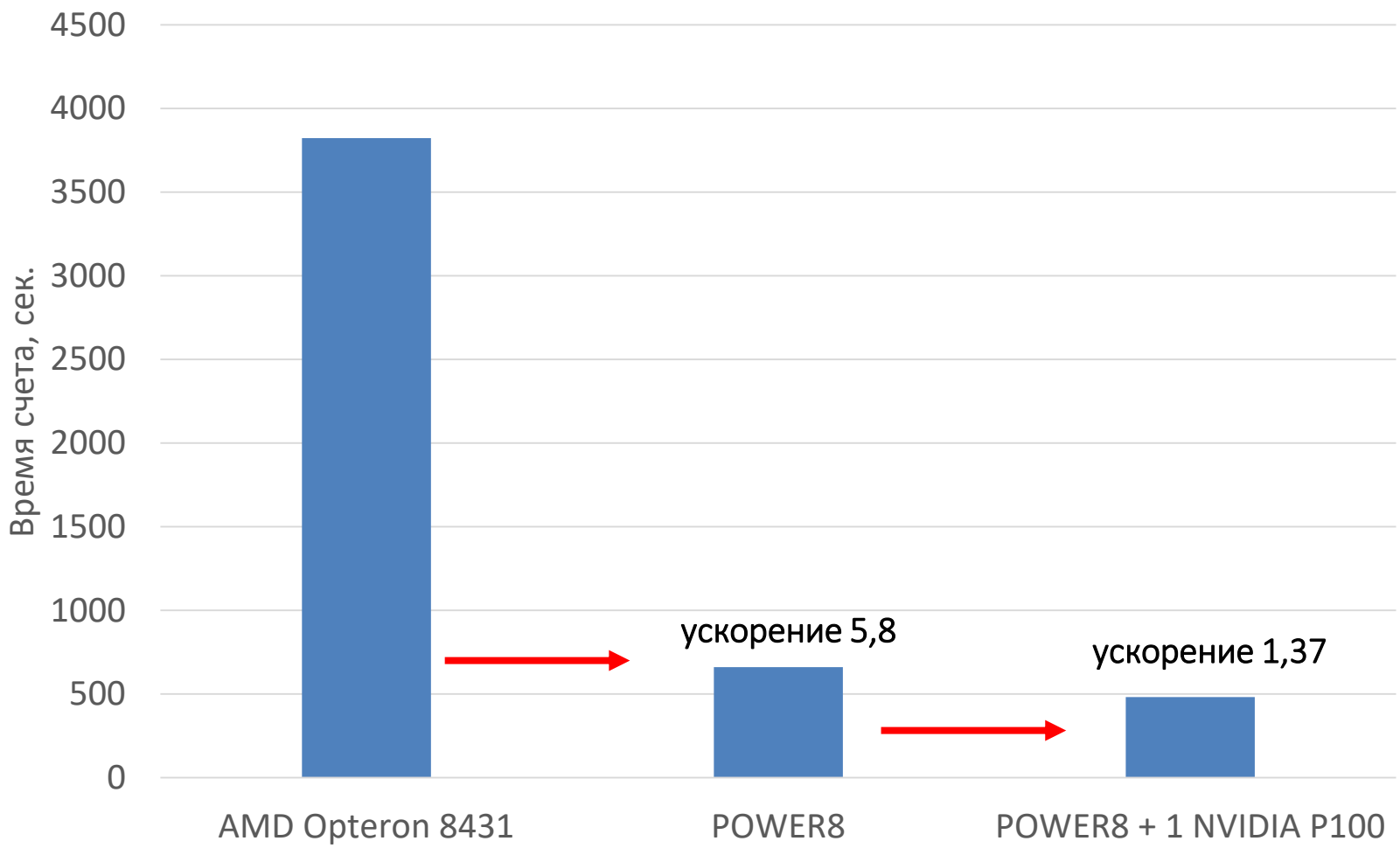
Rpeak = 55,83 ТФлопс

Linpack = 40,39* ТФлопс (~ 72%)

* - “40 место” в 26-й редакции TOP 50 от 04.04.2017г.

Пакеты прикладных программ

Quantum ESPRESSO 5.4, бенчмарк AUSURF112, 10 MPI процессов (меньше лучше)



Программирование на GPU

Гибридная модель вычислений:

- Последовательная часть кода выполняется на CPU;
- Массивно-параллельные вычисления выгружаются на GPU (функции-ядра).

Основные техники:

- Использование оптимизированных библиотек (ESSL)
- Использование библиотек из состава CUDA Toolkit
- Директивы (OpenACC)
- CUDA/OpenCL расширения C/C++/FORTRAN

СЛОЖНОСТЬ

СКОРОСТЬ

Компиляторы C/C++ и Fortran

	IBM XL C/C++ 13.1.5, IBM Fortran 15.1.5	GNU C/C++, Fortran 4.8.5	PGI C/C++, Fortran 16.10
Стандарты	C11, C++11, C++14, Fortran 2008	C90, C99, C11, C++98, C++11, Fortran 2003, Fortran 2008	C89, C99, C11, C++11, Fortran 2003
OpenMP	3.1 (частично 4.5)	3.1	3.1
MPI	+	+	+
OpenACC	-	-	+
CUDA	+	+	+
OpenCL	+	+	+

Математическая библиотека ESSL 5.5

Состав:

- библиотека линейной алгебры (BLAS);
- решение СЛАУ (LAPACK);
- быстрое преобразование Фурье (FFTW3);
- сортировки и поиск;
- интерполяция;
- генераторы псевдослучайных чисел и т.д.

Режимы работы:

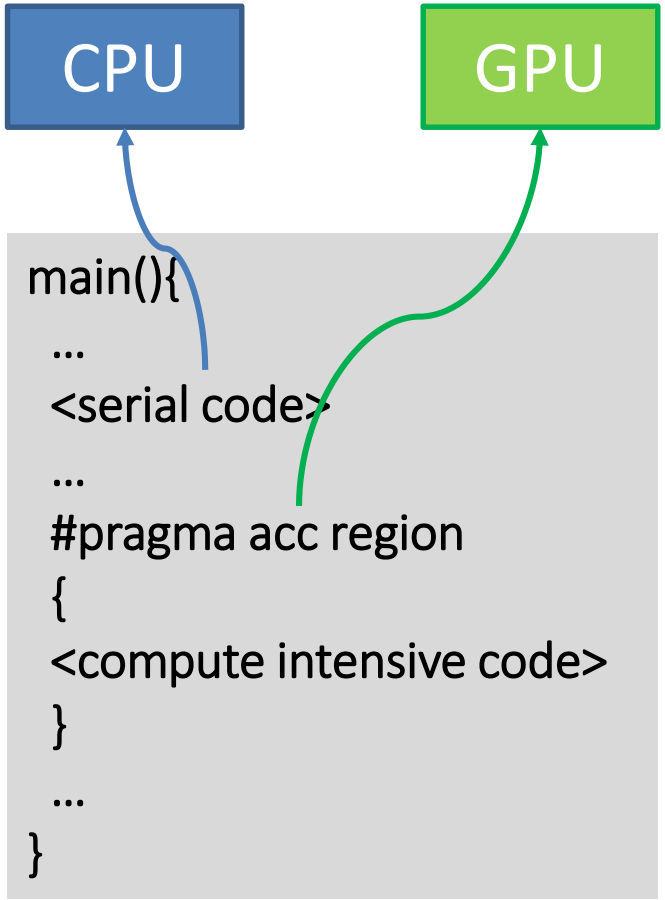
- однопоточный;
- многопоточный;
- многопоточный с выгрузкой вычислений на GPU (GPU или GPU+CPU)

Математическая библиотека CUDA

- cuFFT – быстрое преобразование Фурье;
- cuBLAS – библиотека линейной алгебры;
- cuRAND – генераторы псевдослучайных чисел;
- cuSPARSE – работа с разряженными матрицами;
- cuSOLVER – решение СЛАУ;

Полный список: https://developer.nvidia.com/gpu-accelerated-libraries

OpenACC



Метки для компилятора

Компилятор параллелизует код

Работает на многоядерных CPU и массивно-параллельных GPU

Поддержка стандарта реализована в компиляторе PGI (C/C++ и Fortran)

Подробнее:
https://developer.nvidia.com/pgi-accelerator-fortran-and-c-compilers

Программирование на CUDA

Свой код для CPU и GPU (вычислительные функции-ядра)

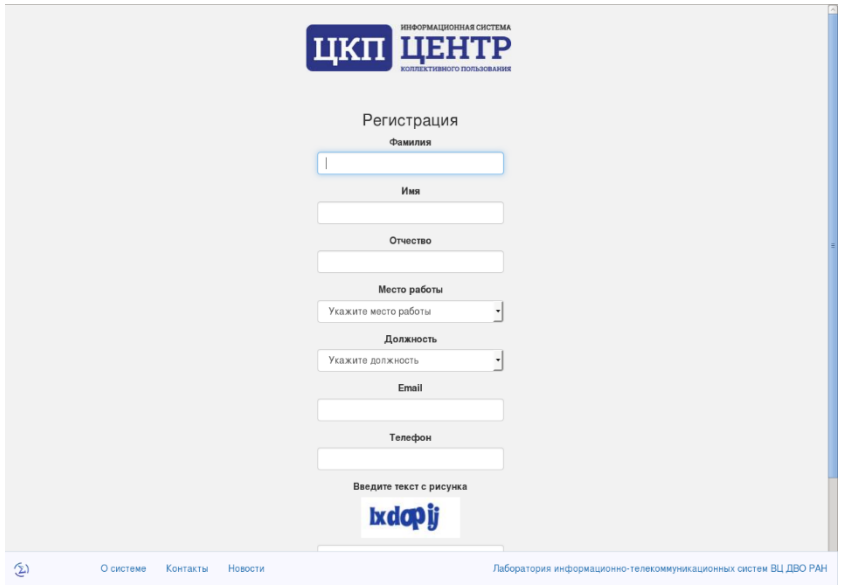
Полный контроль над потоками данных и вычислений

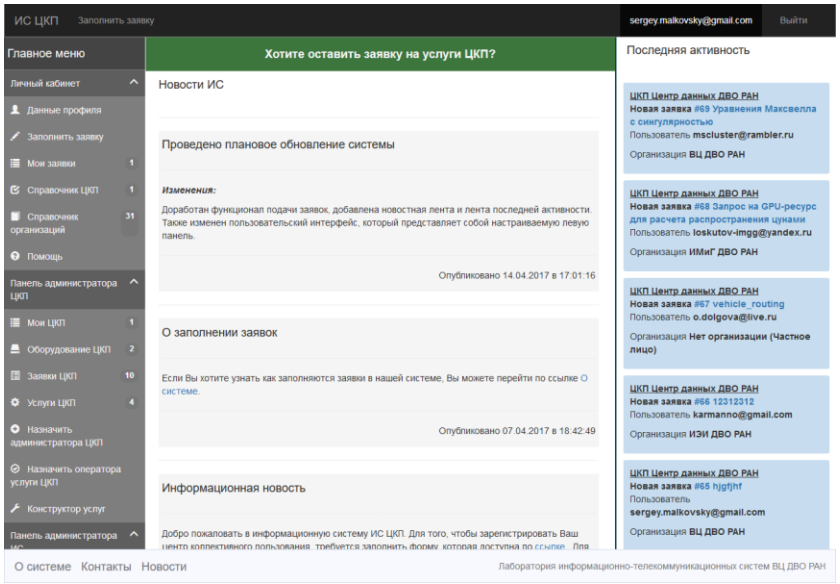
Функции-ядра выполняются на GPU (только NVIDIA), остальной код – на CPU

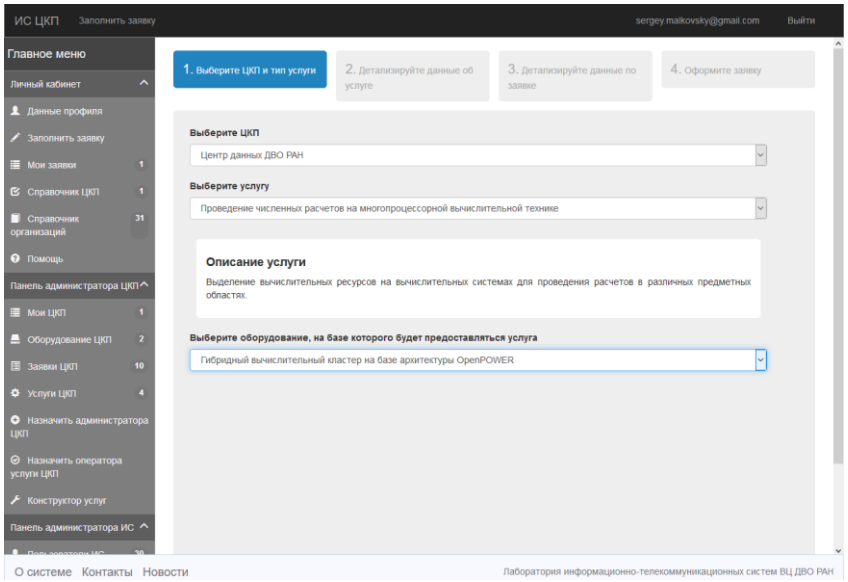
Для компиляции кода используется компилятор nvcc из состава CUDA Toolkit

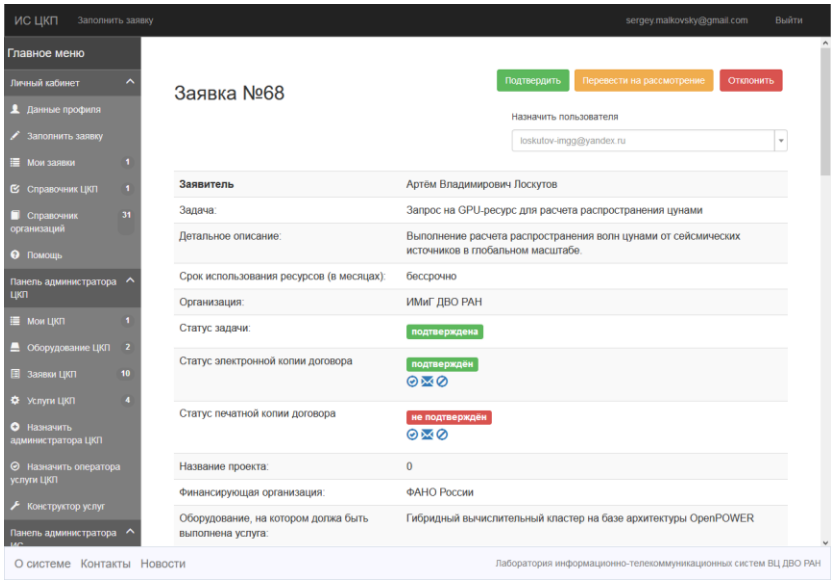
Подробнее: C/C++ - https://developer.nvidia.com/how-to-cuda-c-cpp
Fortran - https://developer.nvidia.com/cuda-fortran

Информационная система “Центр коллективного пользования”









Запуск заданий на исполнение

Контроль за исполнением заданий на кластере осуществляется при помощи менеджера заданий **PBS Professional**. Для запуска заданий используется команда qsub.

Пример скрипта описания задания:

```
#!/bin/sh
#PBS -N job_name
#PBS -q workq
#PBS -j oe
#PBS -m abe
#PBS -M user@mail.com
#PBS -l select=2:ncpus=160:mpiprocs=20

module add spectrum_mpi

cd /home/user/app_dir

mpirun -np 40 -npernode 20 –hostfile $PBS_NODEFILE app_name

exit 0
```

Environment Modules

Предназначены для управления переменными среды. Используются для выбора требуемого программного обеспечения.

```
[user@jupiter ~]$ module avail
------------------------------------- /etc/modulefiles -------------------------------------

cuda                                openmpi/gcc/2.0.2a1/4.8.5      openmpi/xl/1.10.6
pgi/16.10(default)                  spectrum_mpi                   cudnn/5.1
openmpi/xl/2.0.2a1                  pgi/17.4                       essl
openmpi/pgi/1.10.2/2016             openmpi/xl/2.1.0               pgi/2016
openmpi/gcc/1.10.6/4.8.5            openmpi/pgi/1.10.2/2017        pbs
openmpi/gcc/2.1.0/4.8.5             pgi/2017
[cepra@jupiter ~]$ module list
Currently Loaded Modulefiles:
1)  pbs          2) cuda          3) essl          4) spectrum_mpi
[cepra@jupiter ~]$ module add pgi/16.10
```

СПАСИБО ЗА ВНИМАНИЕ!