



Суперкомпьютерные дни в России

2024

международная научная конференция

23 - 24 сентября

Развитие суперкомпьютерных вычислений в ОИВТ РАН: десять лет пост-Муровской эры

Владимир Стегайлов и Алексей Тимофеев

Объединенный институт высоких температур РАН

Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики»

Московский физико-технический институт

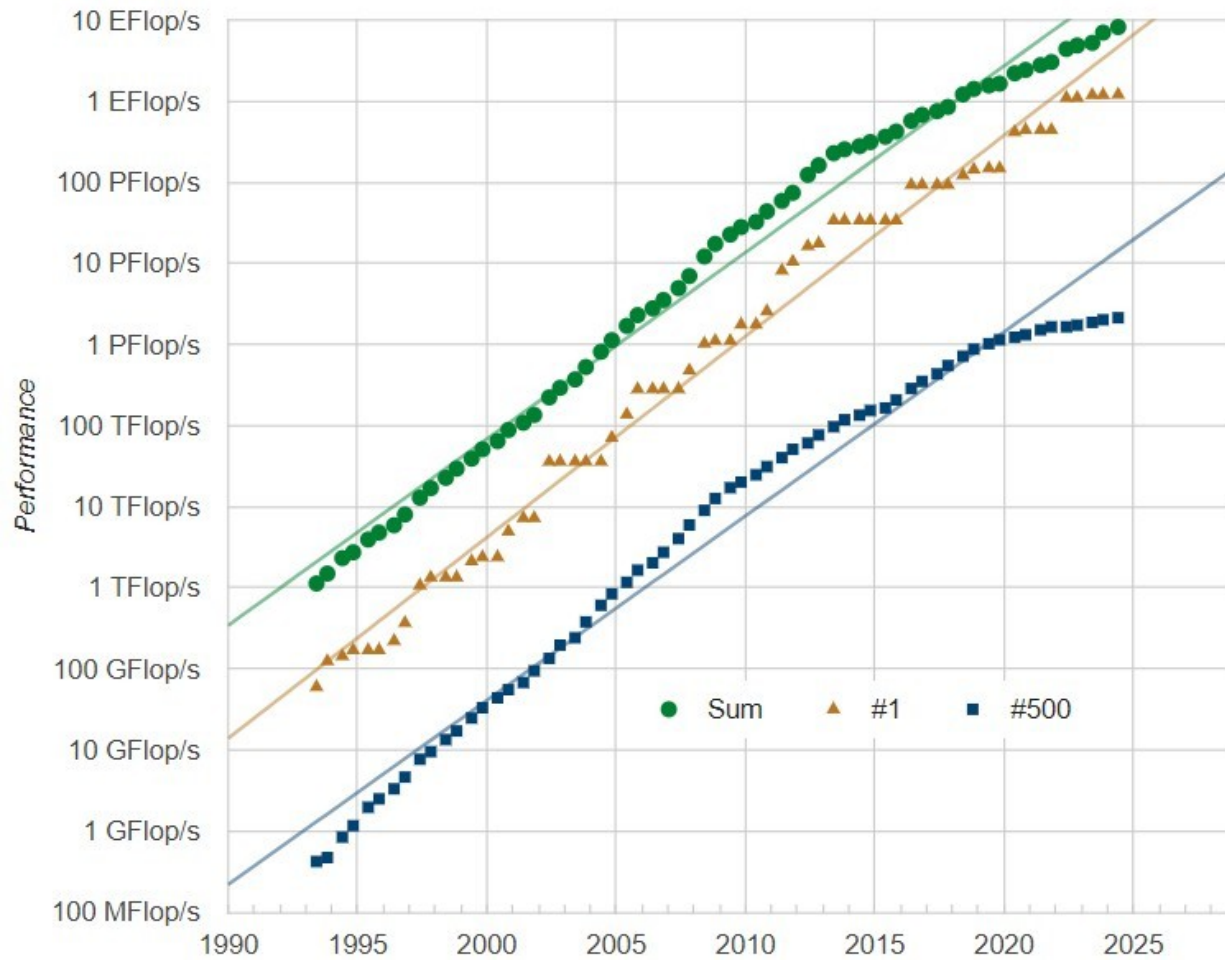
УДК 519.6

В. В. Стегайлов, Г. Э. Норман

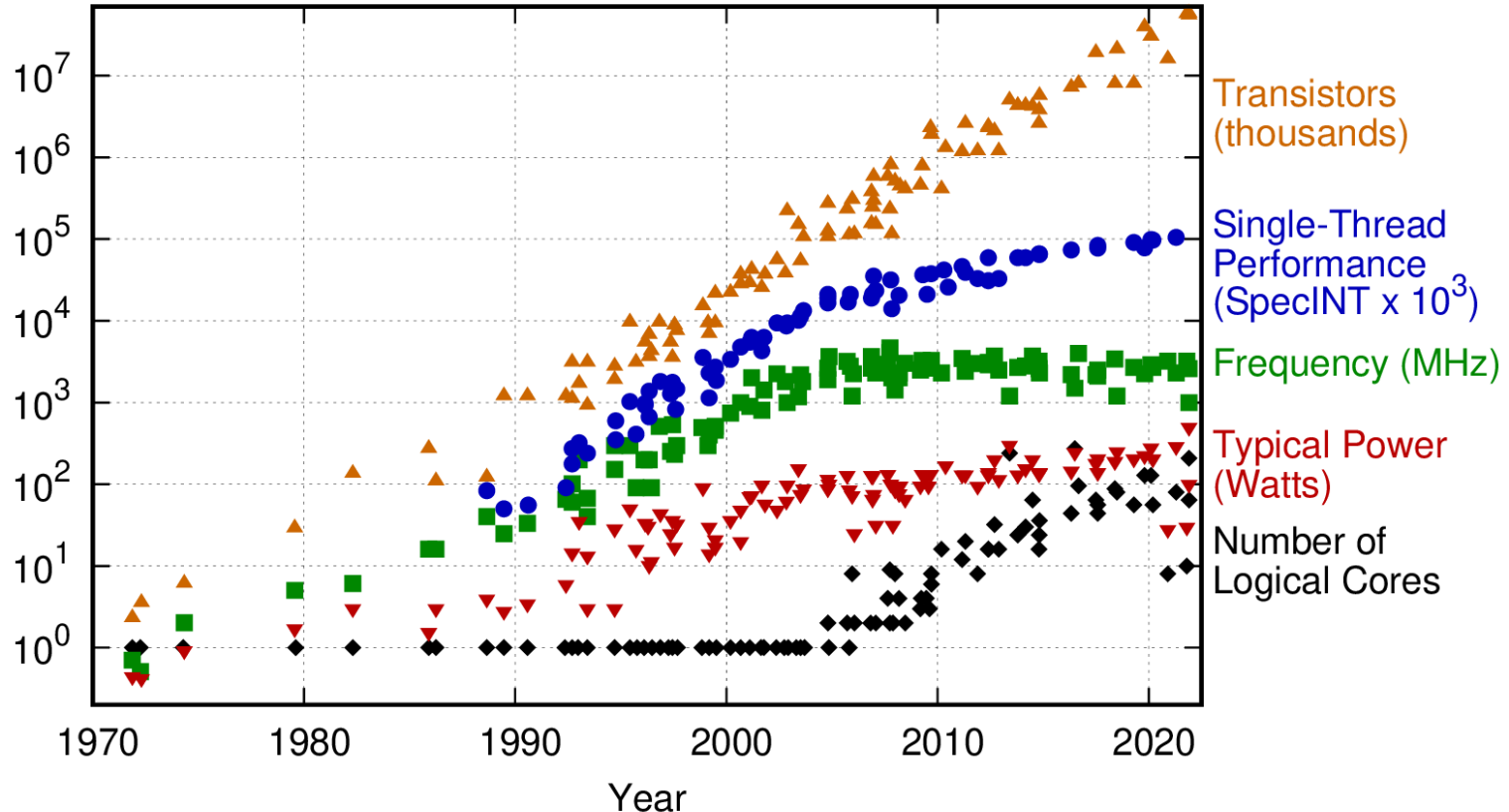
**Проблемы развития
суперкомпьютерной отрасли в России:
взгляд пользователя
высокопроизводительных систем**

АННОТАЦИЯ. За прошедшее десятилетие активная господдержка ускорила развитие суперкомпьютерной отрасли в России. Сегодня в стране работают несколько суперкомпьютеров большой производительности, на которых решается все большее число научно-технических задач. Набирает силу суперкомпьютерное образование в ВУЗах. В то же время можно констатировать «однобокое» развития отрасли в отношении представленных в стране суперкомпьютерных архитектур и недостаточное развитие работ в области развития массового параллелизма при решении прикладных задач.

Развитие рейтинга Top500



50 Years of Microprocessor Trend Data



Original data up to the year 2010 collected and plotted by M. Horowitz, F. Labonte, O. Shacham, K. Olukotun, L. Hammond, and C. Batten
New plot and data collected for 2010-2021 by K. Rupp

Дальнейшее развитие суперкомпьютеров связано увеличением числа независимых вычислительных элементов, связей между ними и развитием соответствующих технологий параллельного программирования

Эффективность МД алгоритма на процессорах Sunway

Chen JS, An H, Han WT *et al.* Towards efficient short-range pair interaction on Sunway many-core architecture. JOURNAL OF COMPUTER SCIENCE AND TECHNOLOGY 36(1): 123–139 Jan. 2021. DOI 10.1007/s11390-020-9826-z

Towards Efficient Short-Range Pair Interaction on Sunway Many-Core Architecture

Jun-Shi Chen¹, *Member, CCF*, Hong An¹, *Member, CCF, ACM, IEEE*
Wen-Ting Han^{1,*}, *Member, CCF, ACM, IEEE*, Zeng Lin¹, and Xin Liu², *Member, CCF*

¹*School of Computer Science and Technology, University of Science and Technology of China, Hefei 230026, China*

²*National Research Center of Parallel Computer Engineering and Technology, Beijing 100080, China*

E-mail: cjuns@mail.ustc.edu.cn; {han, hwt}@ustc.edu.cn; linzeng@mail.ustc.edu.cn; yyylx@263.net

Received July 8, 2019; accepted July 8, 2020.

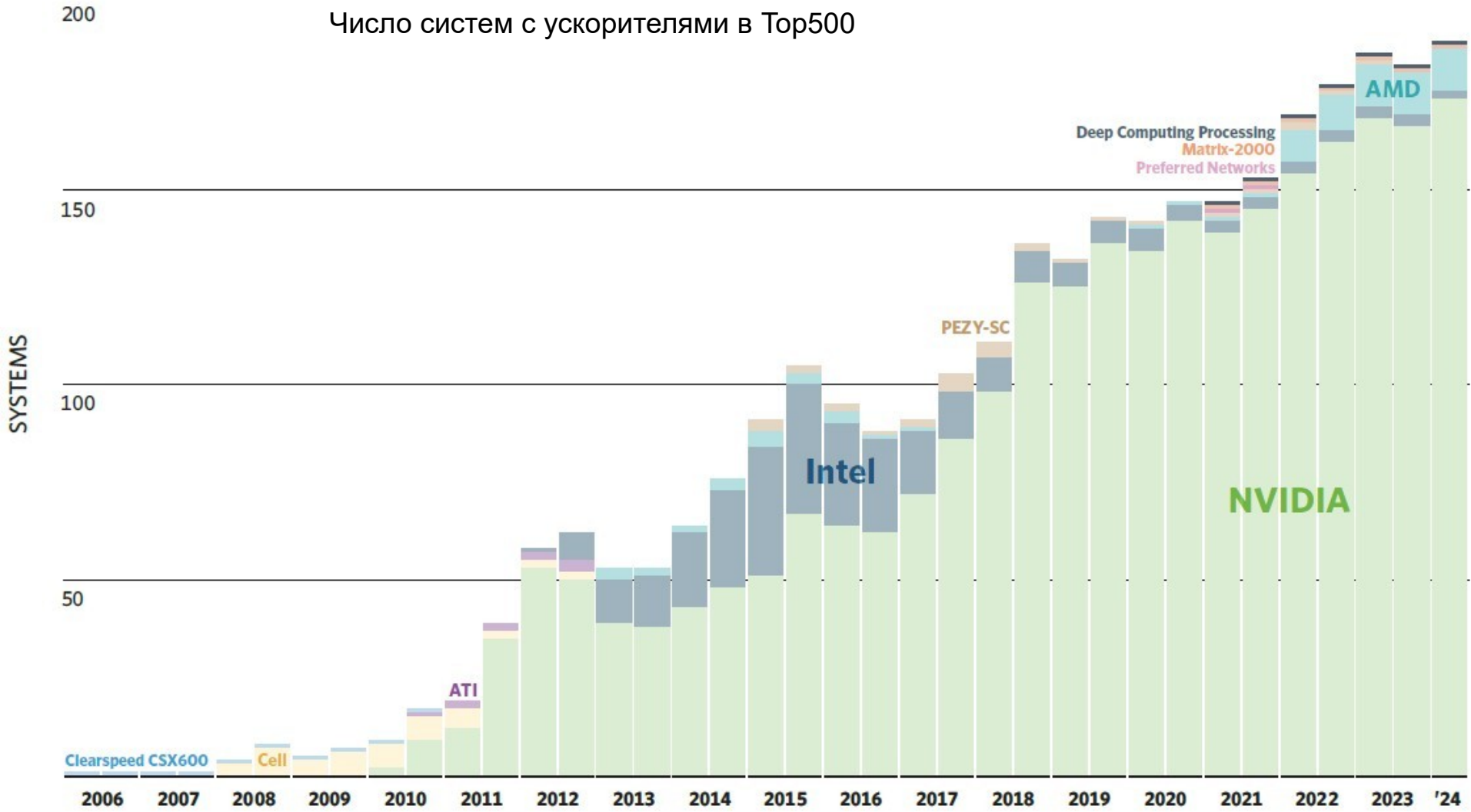
Abstract The short-range pair interaction consumes most of the CPU time in molecular dynamics (MD) simulations.

The inherent computation space locality of the pair interaction on Sunway many-core architecture. In this paper, we propose an efficient pair interaction algorithm with many unique features. The algorithm is designed to overcome the problem caused by the poor data locality and cache miss on Sunway many-core architecture with an appropriate granularity. The algorithm is implemented with a novel mechanism, using data-private access to reduce the overhead of data reduction. The algorithm is implemented on Sunway many-core architecture which utilizes the on-chip data cache. The algorithm is implemented on Sunway many-core architecture we exploit the single instruction multiple data (SIMD) instruction to accelerate the computation on this many-core processor. The algorithm is implemented on Sunway many-core processor 226x compared with the reference implementation and achieves 20% of peak flop rate on the Sunway many-core processor.

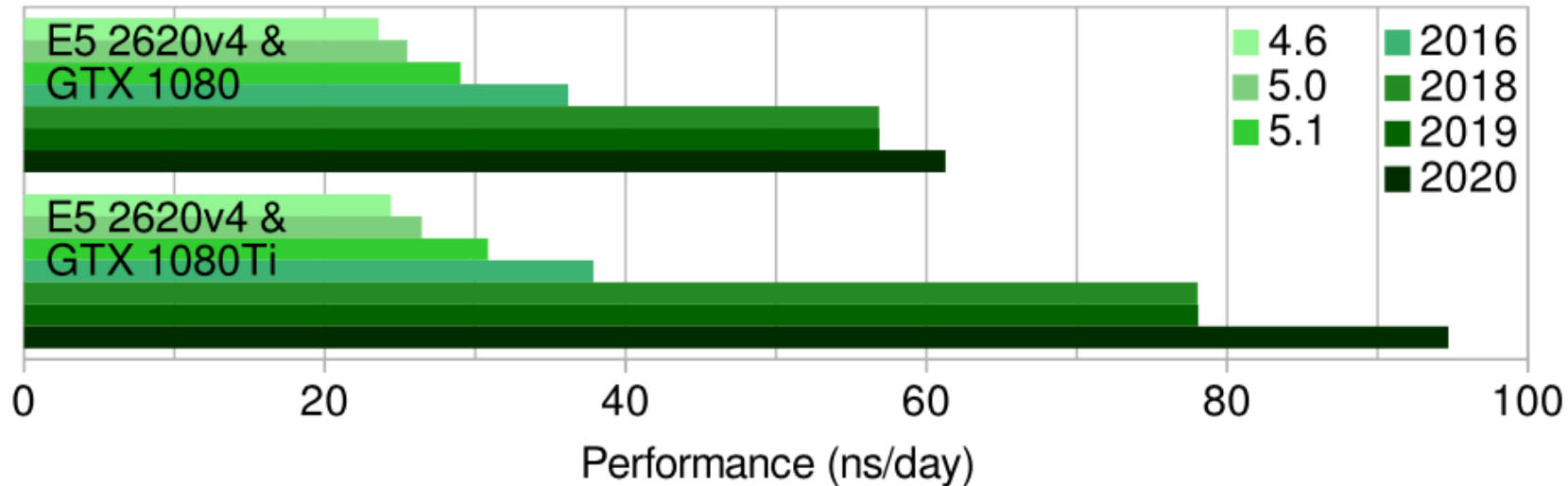
The experimental results show that the optimized force kernel obtains a performance speedup of 226x compared with the reference implementation and achieves 20% of peak flop rate on the Sunway many-core processor.

Keywords molecular dynamics, sunway many-core, pair interaction, parallel algorithm

Число систем с ускорителями в Top500



GROMACS: развитие GPU ускорения



Производительность в нс/день различных версий GROMACS на биологической задаче с 141000 атомов для двух различных архитектур: E5 2620v4 & GTX 1080 и E5 2620v4 & GTX 1080Ti. Различные цвета на картинке соответствуют версиям GROMACS

Разнообразие GPU-ускорителей и технологий их параллельного программирования



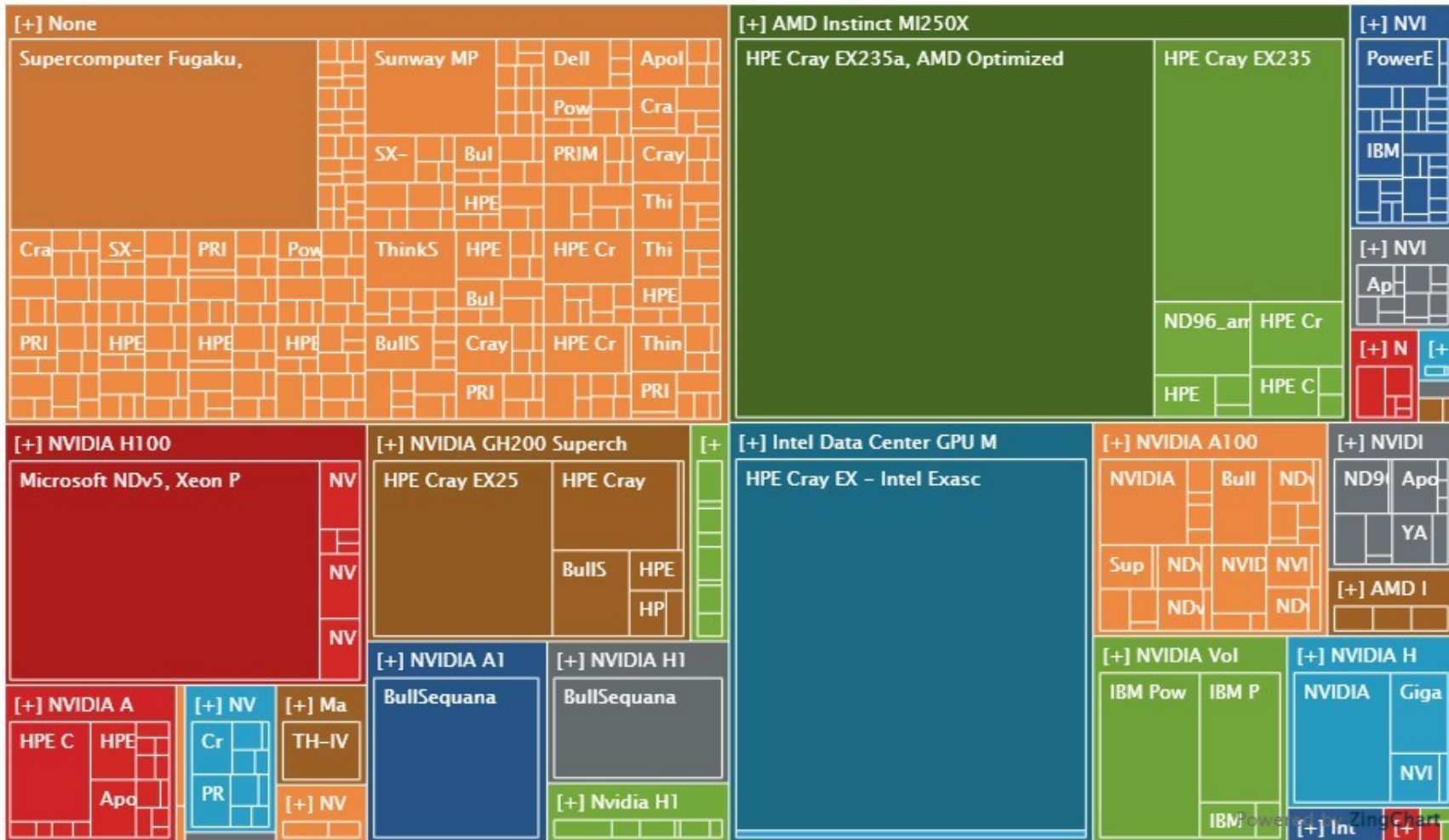
NVIDIA

CUDA

AMD
ROCm



Доли различных типов вычислительных элементов в Top500



Other architectures: ARM, Elbrus, Adapteva



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



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

PAPER • OPEN ACCESS

Floating-point performance of ARM cores and their efficiency in classical molecular dynamics

V Nikolskiy^{1,2} and V Stegailov^{2,1}

Published under licence by IOP Publishing Ltd

[Journal of Physics: Conference Series, Volume 681, International Conference on Computer Simulation in Physics and Beyond 2015 6–10 September 2015, Moscow, Russia](#)

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

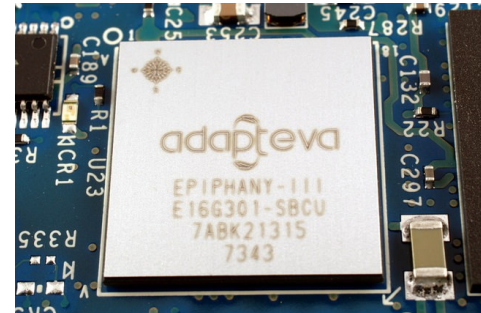
DOI 10.1088/1742-6596/681/1/012049

Article PDF

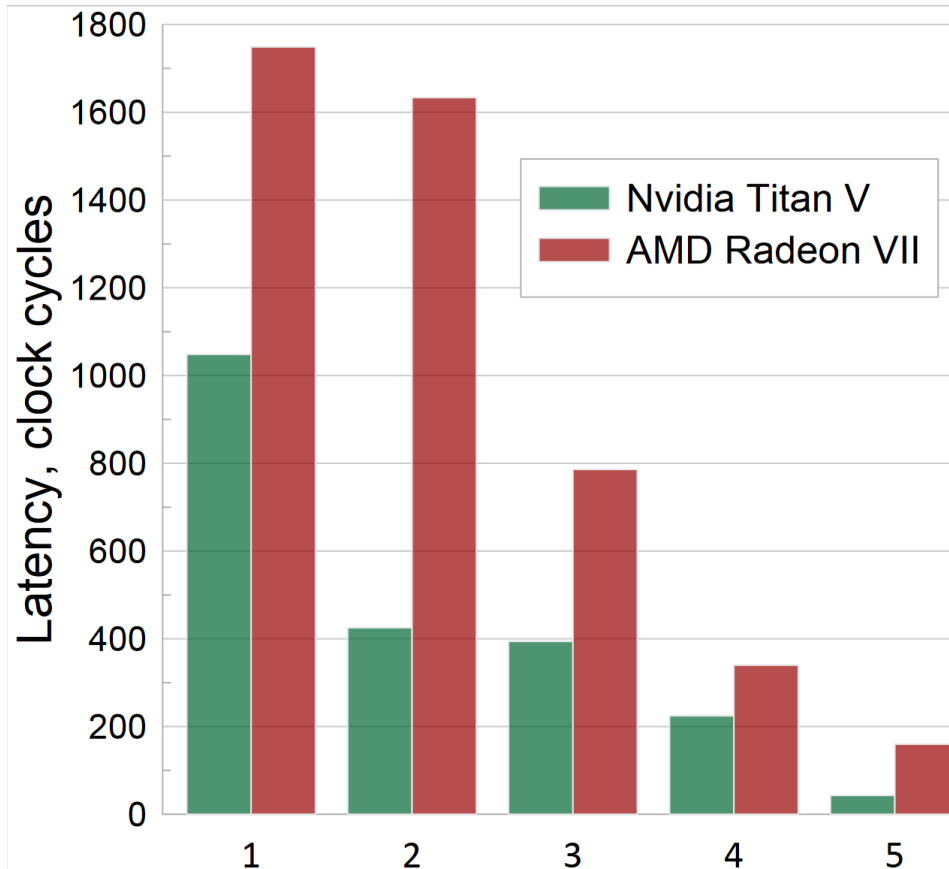
Article metrics

12745 Total downloads

Share this article



ЗАДЕРЖКИ ИЕРАРХИИ ПАМЯТИ ГРУ-УСКОРИТЕЛЕЙ



Mei, X., and Chu, X. Dissecting GPU memory hierarchy through microbenchmarking. IEEE Transactions on Parallel and Distributed Systems Preprint, 99 (2016), 1

```
1  __global__ void KernelFunction (...) {
2  //declare shared memory space
3  __shared__ unsigned int s_tvalue[];
4  __shared__ unsigned int s_index[];
5  preheat the data;
6  for(it=0;it<iterations;it++) {
7  start_time=clock();
8  j=my_array[j];
9  //store the array index
10 s_index[it]=j;
11 end_time=clock();
12 //store the access latency
13 s_tvalue[it]=end_time-start_time;
14 }
15 }
```

Listing 3. Fine-grained P-chase kernel (single thread, single CTA)

Special Issue: PPAM 2022

GPU-based molecular dynamics of fluid flows: Reaching for turbulence

Daniil Pavlov^{1,2} , **Vladislav Galigerov^{1,3}**, **Daniil Kolotinskii^{1,2}**,
Vsevolod Nikol'skiy^{1,3} and **Vladimir Stegailov^{1,2,3}** 

The International Journal of High
Performance Computing Applications
2023, Vol. 0(0) 1–16

© The Author(s) 2023

Article reuse guidelines:

sagepub.com/journals-permissions

DOI: 10.1177/10943420231213013

journals.sagepub.com/home/hpc

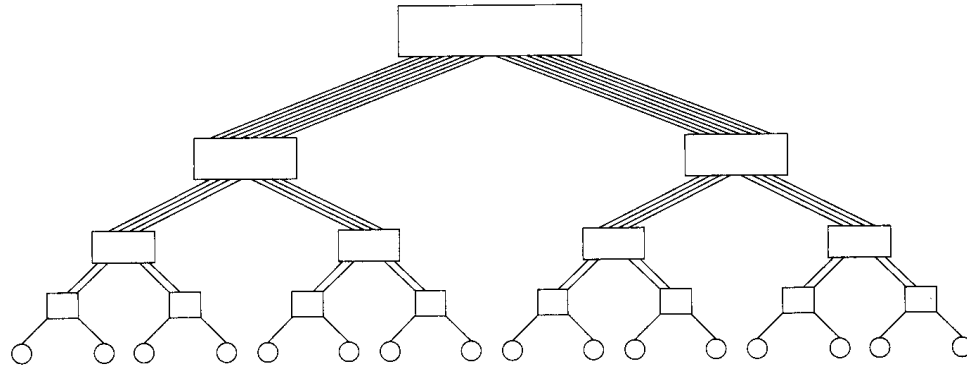


Abstract

Fluid dynamics is a ubiquitous problem that arises in different branches of science and industry. It is usually tackled by numerically solving continuum Navier-Stokes type equations. Molecular dynamics has been not a feasible tool to approach fluid dynamics until very recently due to its disproportional computational complexity for relevant system sizes. In this paper, we propose a new type of boundary conditions for molecular dynamics simulations of stationary fluid flows and present its possible GPU-based implementations in OpenMM and LAMMPS. We examine the performance and scalability of the proposed implementations. The benchmarking results show promising performance that makes it possible to reach turbulence in atomistic models of stationary fluid flows using modern supercomputers.

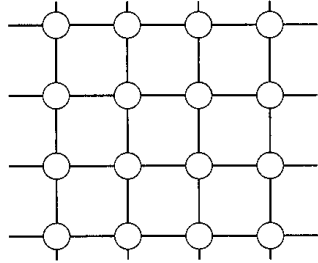
Транспорт пассивного скаляра (Л-Дж флюид, 1 млрд атомов, $Re \sim 1000$)

Топология интерконнекта - архитектура суперкомпьютеров

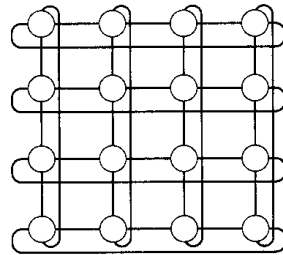


Вычислительный узел

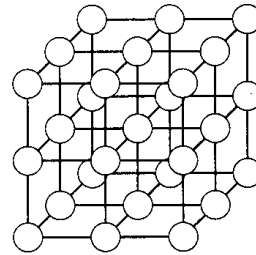
Технология MPI



(a)



(b)

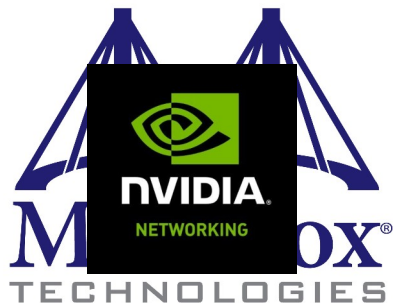


(c)

ЦПУ
ГПУ
ПЛИС

...

Суперкомпьютерный интерконнект: международный контекст



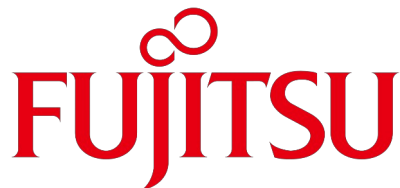
Intel® Omni-Path Architecture



Slingshot Interconnect



Bull eXascale Interconnect
(BXI)



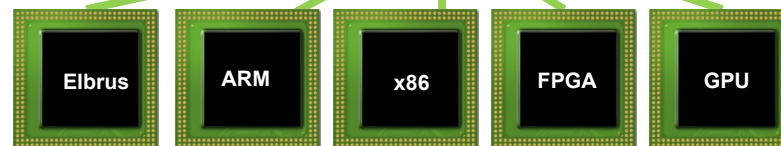
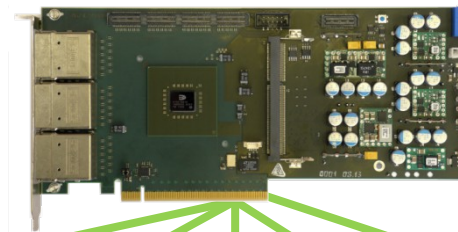
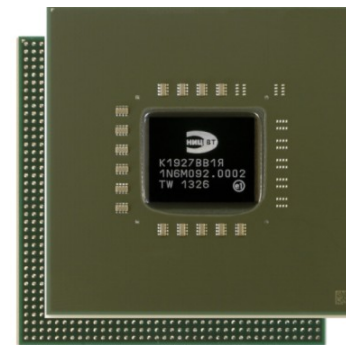
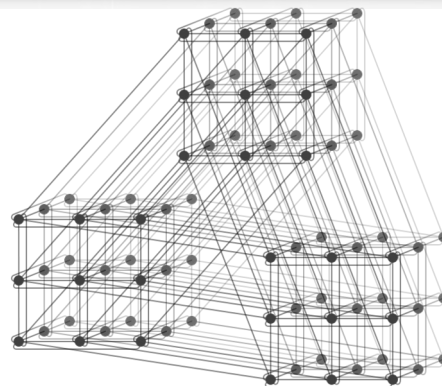
Tofu D Interconnect

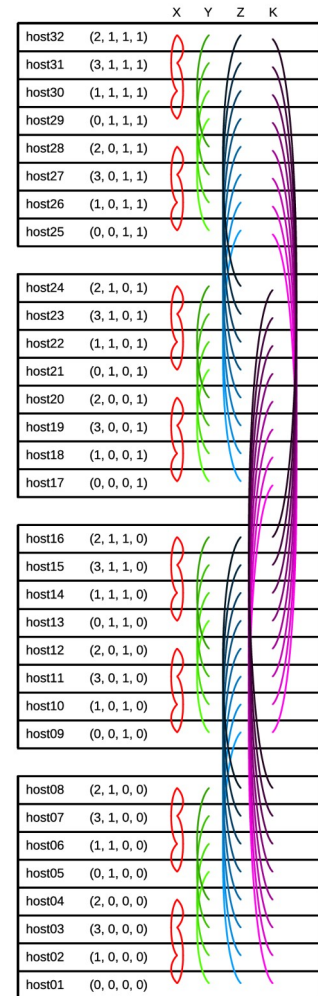


Sunway Interconnect

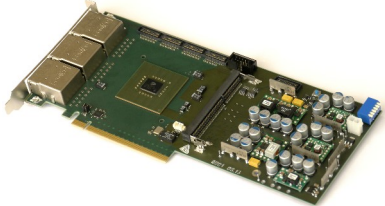
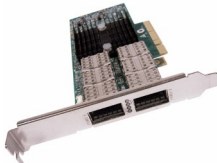
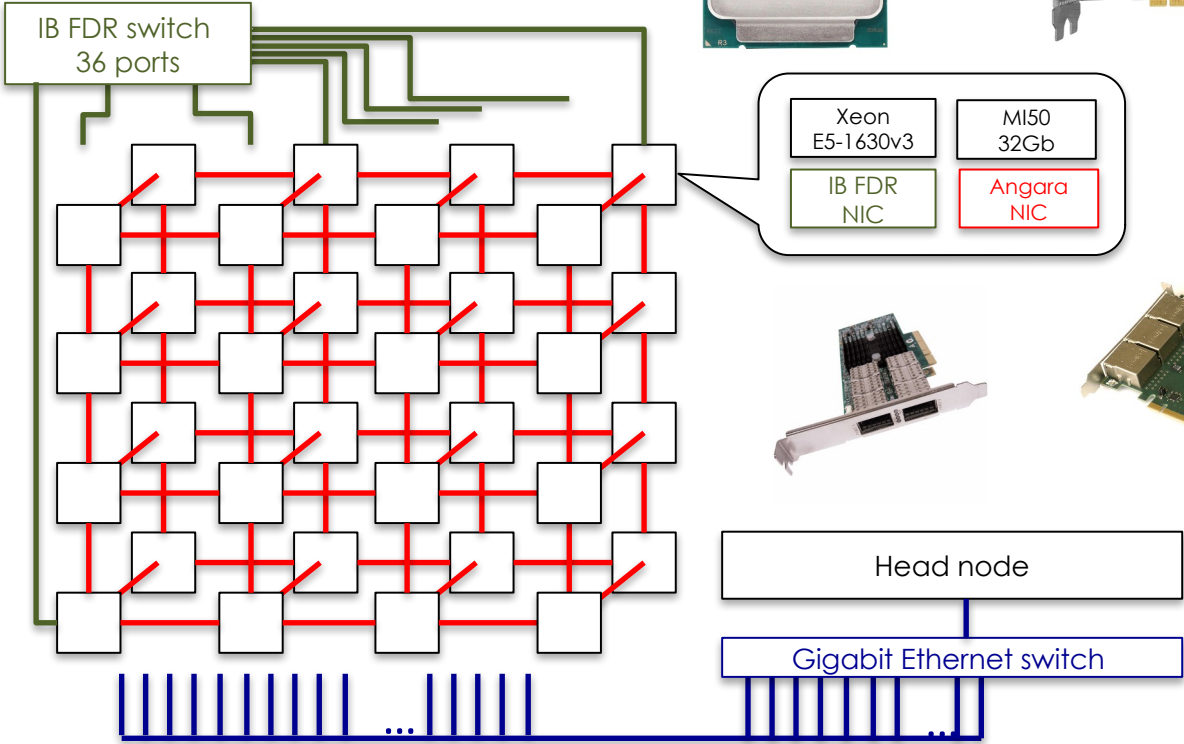
Key features

- Network topology: 1D..4D-torus
- ASIC-based network card
- Up to 8 communication channels
- Remote direct memory access (RDMA)
- Multi-core CPU support
- Adaptive packet transfer
- MPI ping-pong latency: 0,85 μ s
- Single hop latency: 130 ns
- Scaling: up to 32K nodes
- Power consumption: up to 20 W
- Data transmission bandwidth: 5-75 Gbit/s
- Various physical transmission media





Desmos supercomputer



цию. Считаю возможным сформулировать следующие предложе-

Предложения научно-технического характера.

(4) Необ
обла
систе
вую
им. М
торо
им. А
ны р
некта
(РФ)

***Благодарности.** Авторы признательны С. М. Абрамову, Е. Р. Куштанову, А. О. Лацису, А. С. Семенову, А. И. Слуцкину и С. А. Степаненко за полезные советы и обсуждения на НСКФ-2013. Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект 13-08-12070-офи_м).*

Список литературы

- [1] Волков Д., Кузьминский М. Современные суперкомпьютеры: состояние и перспективы // Открытые системы. 1995. № 06. URL: <http://www.osp.ru/os/1995/06/178750/>
- [2] Бахтияров С. Д., Дудников Е. Е., Евсеев М. Ю. Транспьютерные технологии. М. Радиосвязь. 1992. 250 с.

пьютерно
нобокое»
пьютерны
массового

ва...необходимо ввести конкурсные процедуры, аналогичные IN-SITE и PRACE, для решения задач на вычислительных полях особенно большого размера. Попытки организации такого рода