

ОЦЕНКА ПРОИЗВОДИТЕЛЬНОСТИ
СУПЕРКОМПЬЮТЕРА "CHARISMA"
И ЕГО КОМПОНЕНТ
ДЛЯ ТИПОВЫХ ЗАДАЧ
КВАНТОВОЙ ХИМИИ
НА ПРИМЕРЕ ПАКЕТОВ
CP2K И QUANTUM ESPRESSO

*И.Э. Недомолкин, М.П. Конилов, А.В. Тимофеев,
В.В. Стегайлов, И.Д. Федоров*

Сложность выбора бенчмарка

Linpack

- + Универсальный
- + Масштабируемый
- + Удобный

- Узкий
- Не репрезентативный

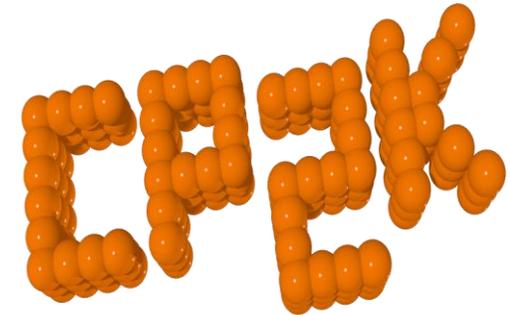


сHARISMA (HSE University) – 10 место

Научные приложения



AUSURF112
 $1,25 \times 10^{19}$ *Flop*
Используется DFT



H2O-128
 $1,29 \times 10^{19}$ *Flop*
Используется DFT

Состав кластера сHARISMa

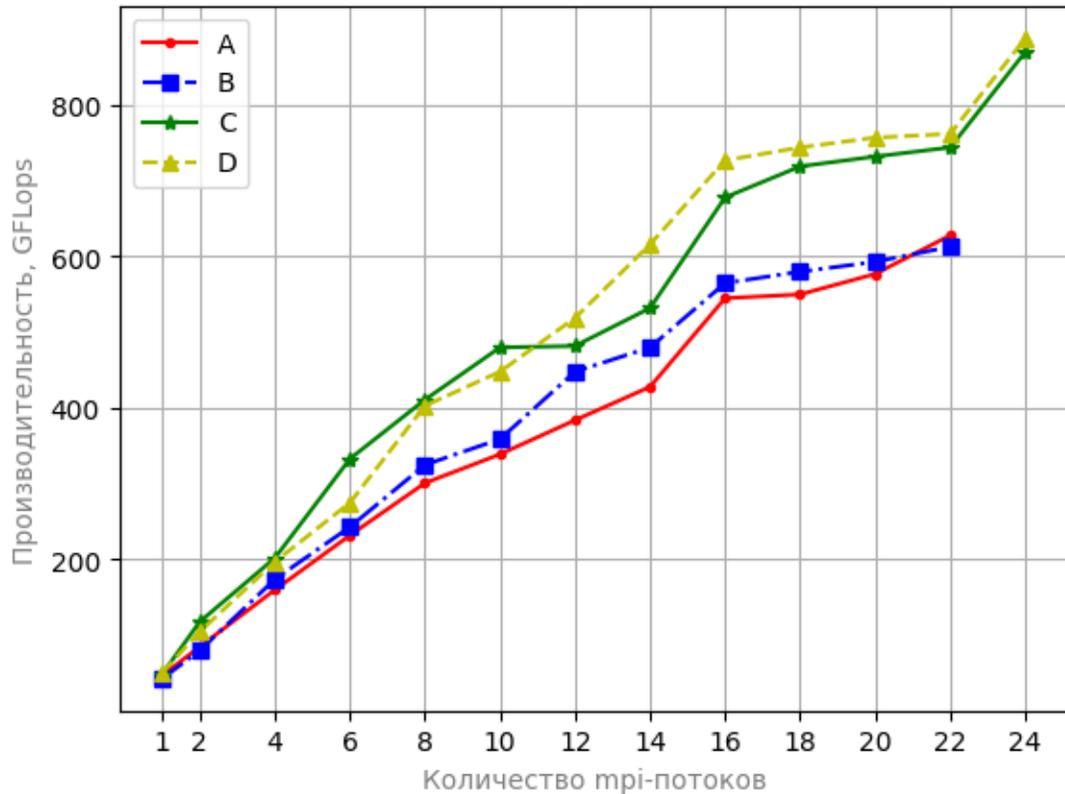
16 вычислительных узлов типа А (С4140К)	
Центральные процессоры	2 x Intel Xeon Gold 6152 2.1-3.7 ГГц (2*22 ядер)
Графические процессоры	4 x NVIDIA Tesla V100 32 ГБ NVLink
Оперативная память	768 ГБ
Энергонезависимая память	2 x SSD 240 ГБ (RAID 1)
Сетевой адаптер InfiniBand	2 x 100 Гбит/с
Сетевой адаптер Ethernet	10 Гбит/с

10 вычислительных узлов типа В (С4140К)	
Центральные процессоры	2 x Intel Xeon Gold 6152 2.1-3.7 ГГц (2*22 ядер)
Графические процессоры	4 x NVIDIA Tesla V100 32 ГБ NVLink
Оперативная память	1536 ГБ
Энергонезависимая память	2 x SSD 240 ГБ (RAID 1)
Сетевой адаптер InfiniBand	2 x 100 Гбит/с
Сетевой адаптер Ethernet	10 Гбит/с

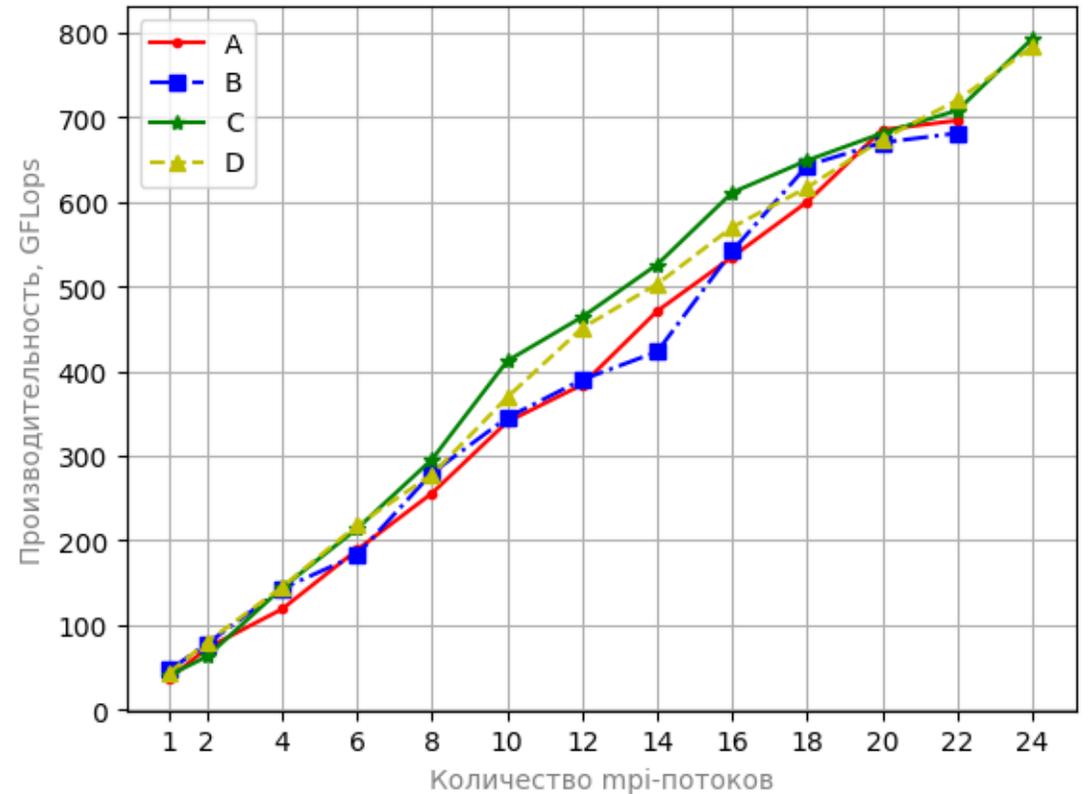
3 вычислительных узла типа С (С4140М)	
Центральные процессоры	2 x Intel Xeon Gold 6240R 2.4-4 ГГц (2*24 ядер)
Графические процессоры	4 x NVIDIA Tesla V100 32 ГБ NVLink
Оперативная память	768 ГБ
Энергонезависимая память	2 x SSD 240 ГБ (RAID 1)
Сетевой адаптер InfiniBand	2 x 100 Гбит/с
Сетевой адаптер Ethernet	10 Гбит/с

11 вычислительных узлов типа D (R640)	
Центральные процессоры	2 x Intel Xeon Gold 6248R 3-4 ГГц (2*24 ядер)
Графические процессоры	Отсутствуют
Оперативная память	768 ГБ
Энергонезависимая память	2 x SSD 240 ГБ (RAID 1)
Сетевой адаптер InfiniBand	100 Гбит/с
Сетевой адаптер Ethernet	1 Гбит/с

Масштабируемость квантовых пакетов



Расчет CP2K



Расчет QuantumEspresso

CP2K

CPU	Type A	Type B	Type C	Type D
1	628	613	870	888
2	948	937	1264	1303

Производительность одного процессора и целого узла, GFlops

N_{cores}	Нормировка на цену в (GFlops/\$)				Нормировка на энергопотребление (GFlops/W)			
	A	B	C	D	A	B	C	D
1	0,0129	0,0118	0,019	0,016	0,336	0,309	0,299	0,251
full	0,172	0,167	0,335	0,279	4,448	4,382	5,276	4,334

Нормировка на цену и энергопотребление

QuantumEspresso

CPU	Type A	Type B	Type C	Type D
1	696	681	793	783
2	979	979	1109	1319

Производительность одного процессора и целого узла, GFlops

N_{cores}	Нормировка на цену в (GFlops/\$)				Нормировка на энергопотребление (GFlops/W)			
	A	B	C	D	A	B	C	D
1	0,010	0,009	0,011	0,012	0,263	0,223	0,291	0,317
full	0,190	0,186	0,217	0,214	4,972	4,864	5,665	5,594

Нормировка на цену и энергопотребление

Заключение

Показано, что в данном классе задач:

- Суперкомпьютер “сHARISMA” является эффективной системой
- Наиболее производителен узел типа D (2 x Intel Xeon Gold 6248R)
- Наиболее экономически эффективен узел типа C (2 x Intel Xeon Gold 6240R)

Дальнейшее направление исследования

- Анализ узких мест в пакетах CP2K и QuantumEspresso
- Добавление графических ускорителей (GPU)
- Сравнение с другими HPC системами