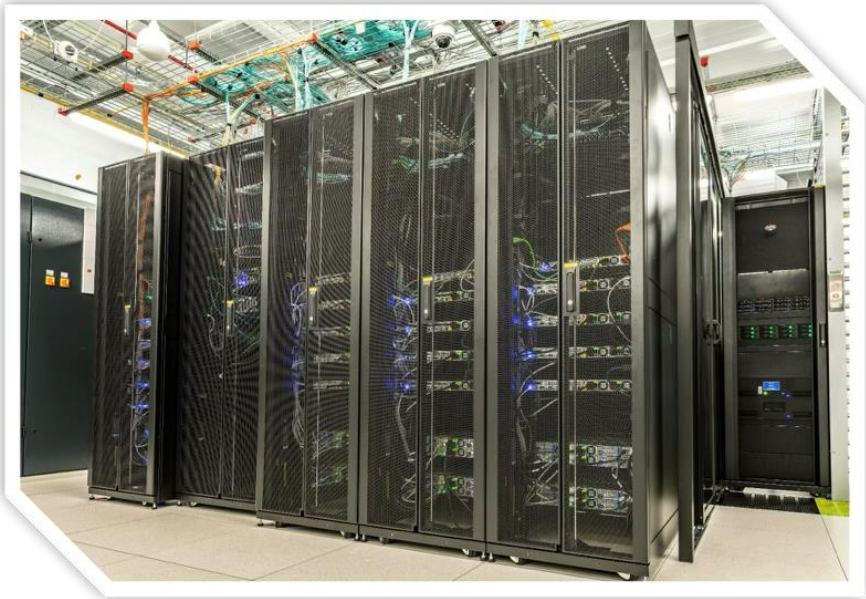
Статус суперкомпьютеров для ИИ “Жорес” и “Жорес-2”

Рыкованов С., Малютин А., Шкандыбин Ю., Сморкалов М., Илларионова С., Вановский В., Иванов В., Гавриков А., Бурнаев Е.

Сколковский институт науки и технологий,
Russian Supercomputing Days 2025

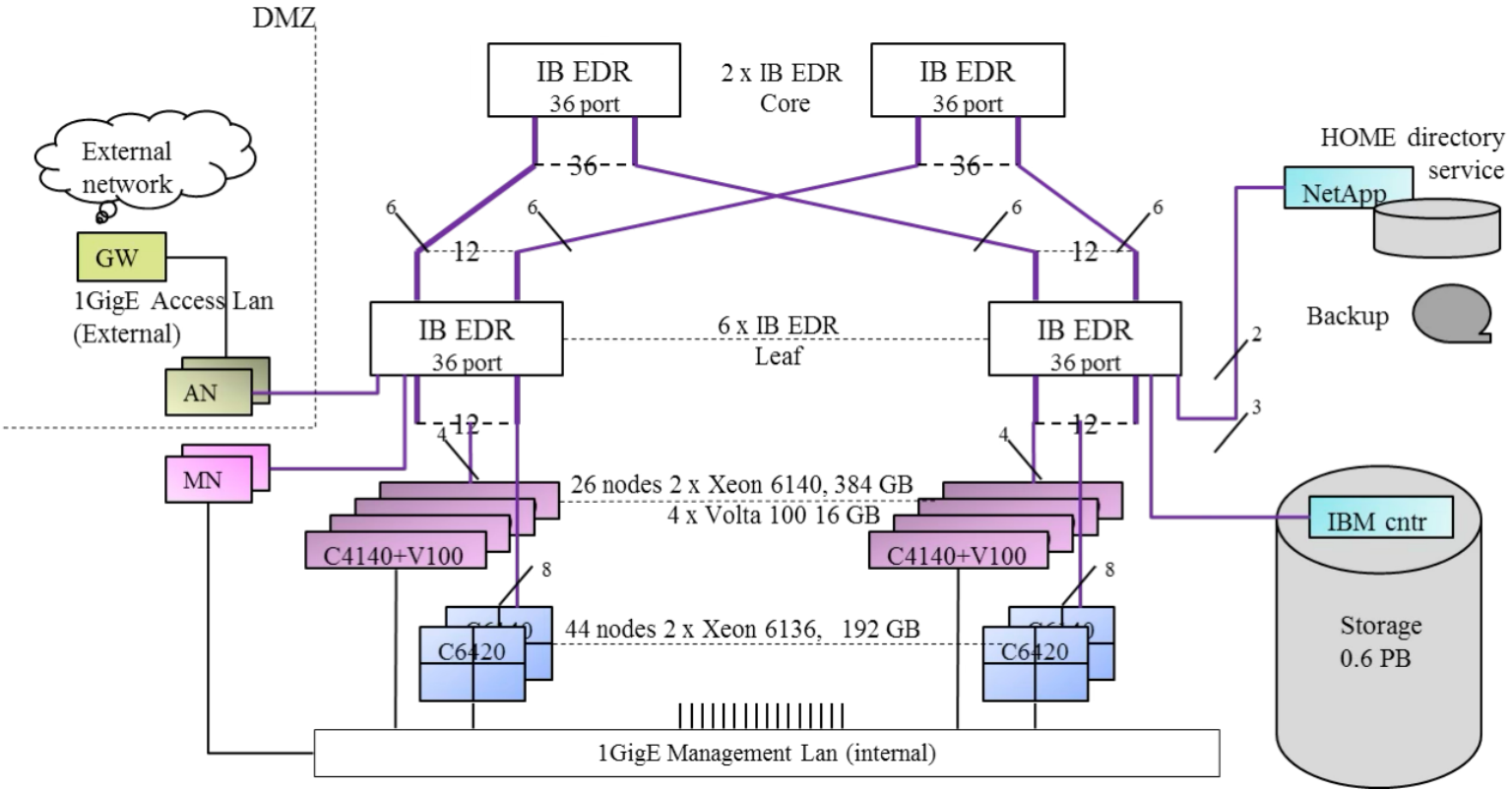
Суперкомпьютер для ИИ “Жорес” (2018 год)

- 74 вычислительных узла;
- 24 узла с мощными графическими ускорителями (4xNVidia Tesla V100, NVLink + RDMA);
- тензорные ядра для **машинного обучения (глубокое обучение)**;
- потребление энергии: 90 кВатт;
- **производительность 1 Пфлоп/с**;
- **система хранения данных 0.5 Пбайт**
- **8-й суперкомпьютер по мощности в России**
- **самостоятельно собрали и ввели в эксплуатацию**



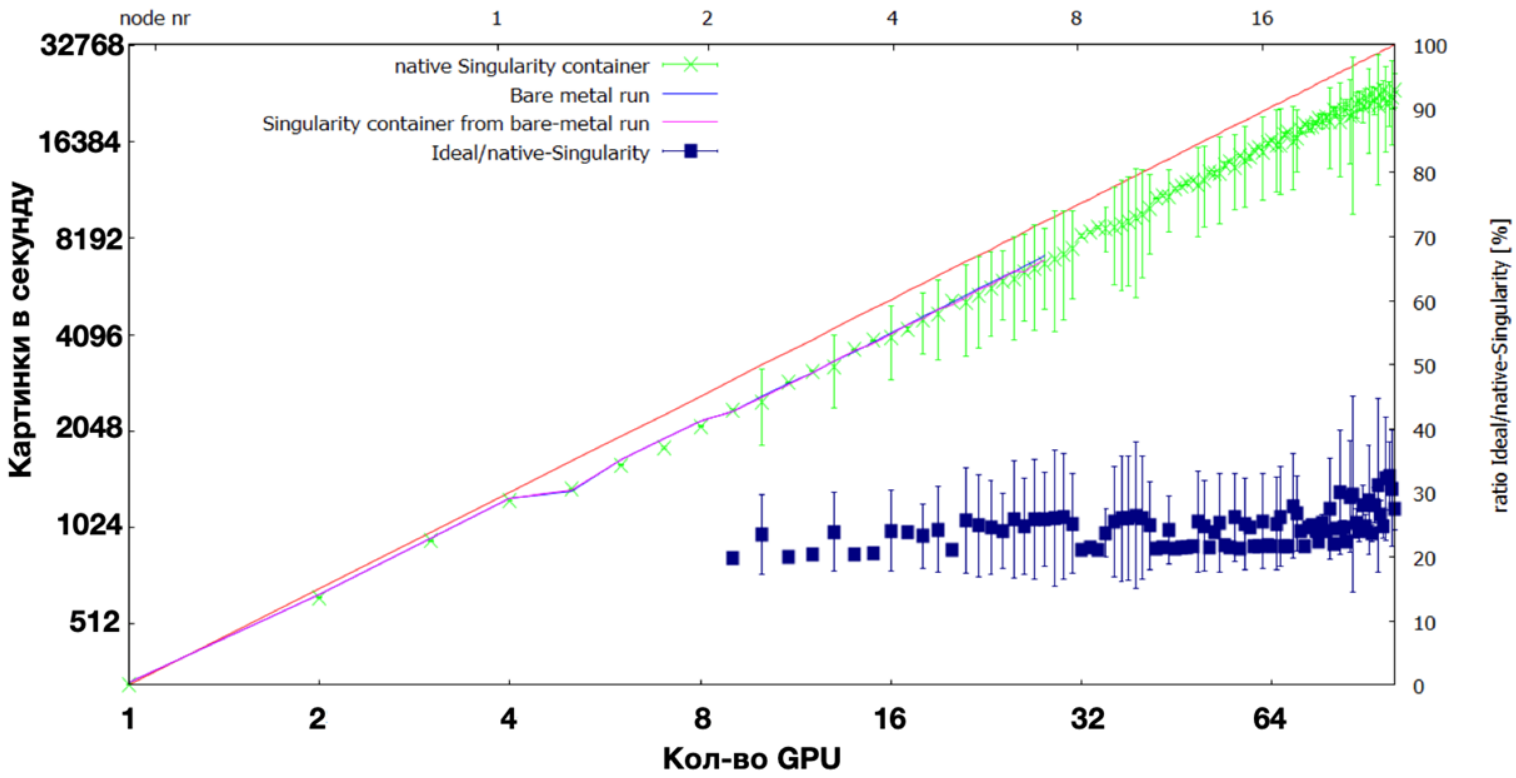
ZHORES
SUPERCOMPUTER
HIGH PERFORMANCE COMPUTING AND BIG DATA
SKOLTECH CDISE

Zhores Cluster Structure



Распределенное глубокое обучение на “Жоресе”

Model: ResNet50 **Batch size: 32**



* Ю. Шкандыбин, А. Малютин, И. Захаров, Skoltech

Что было налажено?

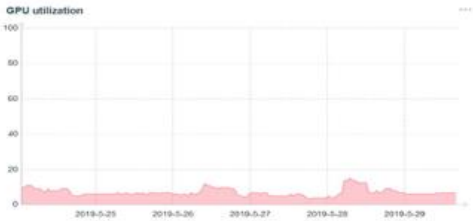
- Стандартный стэк: Linux, SLURM, modules, singularity containers
- Подсистема оркестрации, провижининга и управления: Trinity + Luna + LDAP
- Сбор статистики использования ресурсов
- Сбор статистики проектов (академический)
- Процедура запроса ресурсов
- Постоянная апробация нового оборудования и подготовка к апгрейдам
- Проведение семинаров для пользователей – повышение уровня
- Попытались ввести платное использование для индустриальных проектов (не было статьи расходов за HPC в сметах) – не удалось

Образовательная компонента

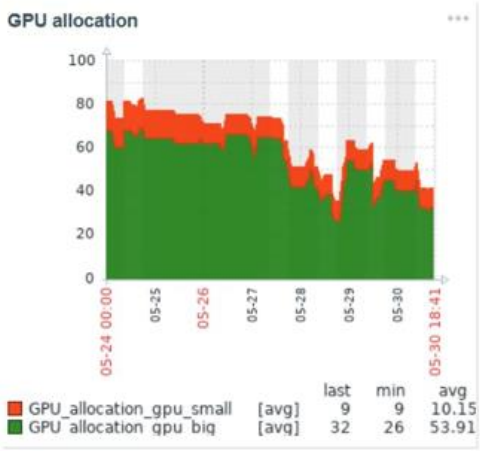
- Трэк High Performance Computing
- Ключевой курс: “Высокопроизводительные вычисления”
  - OpenMP
  - MPI
  - CUDA
  - Интеграция с Python
- Популярный курс: “Высокопроизводительный Python”
  - Применение различных библиотек для значительного ускорения вычислений
    - Numpy
    - Numba
    - Multiprocessing (native + MPI)
    - Cupy и GPUs
    - Distributed Deep Learning, Dask, RAPIDS, Ray
- Курс: “Introduction to Linux and Supercomputers”
- Очень не хватает курсов по системному администрированию, DevOps, MLOps и нет специалистов, которые могут читать

Некоторая статистика (2020)

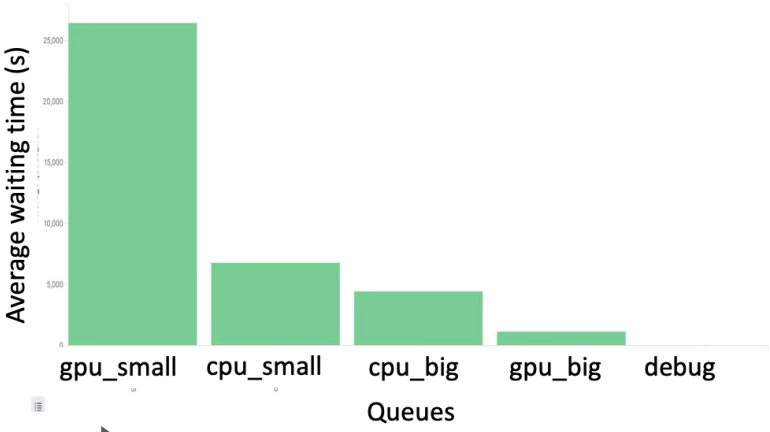
80% of jobs request 1 gpu



Real GPU utilization less than 20%



GPU allocation is above 60%



Большинство пользователей не выходят за 1 узел GPU

Статус перед апгрейдом (конец 2021)

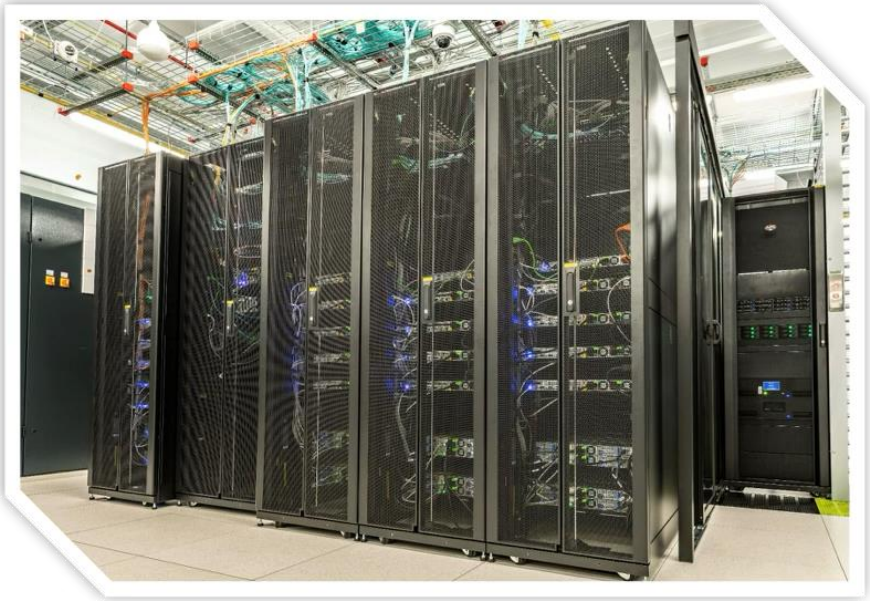
- Боль 1: нет собственного ЦОДа, аренда на севере Москвы (ограничения по электричеству и физическому пространству)
- Боль 2: ограниченное финансирование и ресурсы – пришлось искать разумный баланс

Но:

- Протестированы многие архитектурные решения
- Значительный опыт в использовании непроприетарного СХД (BeeGFS)
- Опыт пуско-наладки суперЭВМ с нуля
- Анализ статистики показал, что полносвязная машина не нужна!
- Необходима отчуждаемая машина (условия гранта)

Суперкомпьютер для ИИ “Жорес-2” (2023 год)

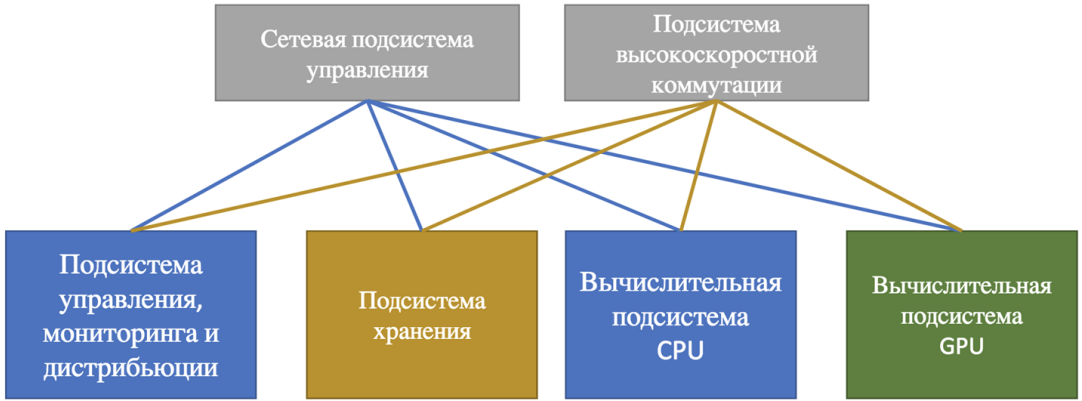
- 20 выч. узлов CPU (2x32 ядра)
- 9 выч .узлов GPU с графическими ускорителями (8xNVidia Tesla A100, NVLink + RDMA);
- тензорные ядра для **машинного обучения (глубокое обучение)**;
- потребление энергии: 55 кВатт;
- **производительность 1 Пфлоп/с**;
- **система хранения данных 0.25 Пбайт NVMe BeeGFS**
- **самостоятельно собрали и ввели в эксплуатацию**



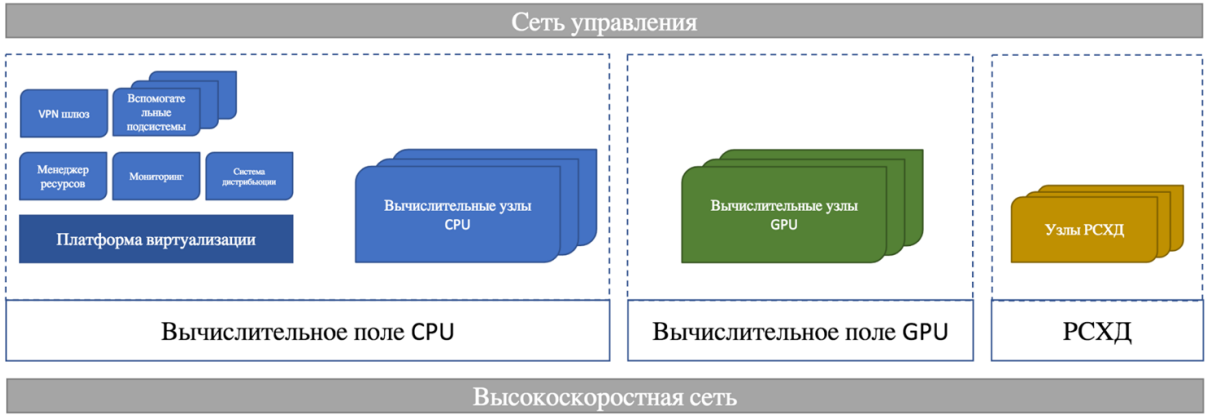
ZHORES II
SUPERCOMPUTER
HIGH PERFORMANCE COMPUTING AND BIG DATA
SKOLTECH CDISE

Задачи для “Жорес-2” и функциональная схема

- CPU часть: сложные вычислительные модели природных процессов, ПО для расчета процессов переноса в атмосфере и ПО для прогнозирования нефтеотдачи пласта.
- GPU часть: Нейросетевые модели (SciML) для оптимизации сопутствующих процессов при заданных ограничениях на экологический ущерб и углеродный след.



Структурная схема “Жорес-2”

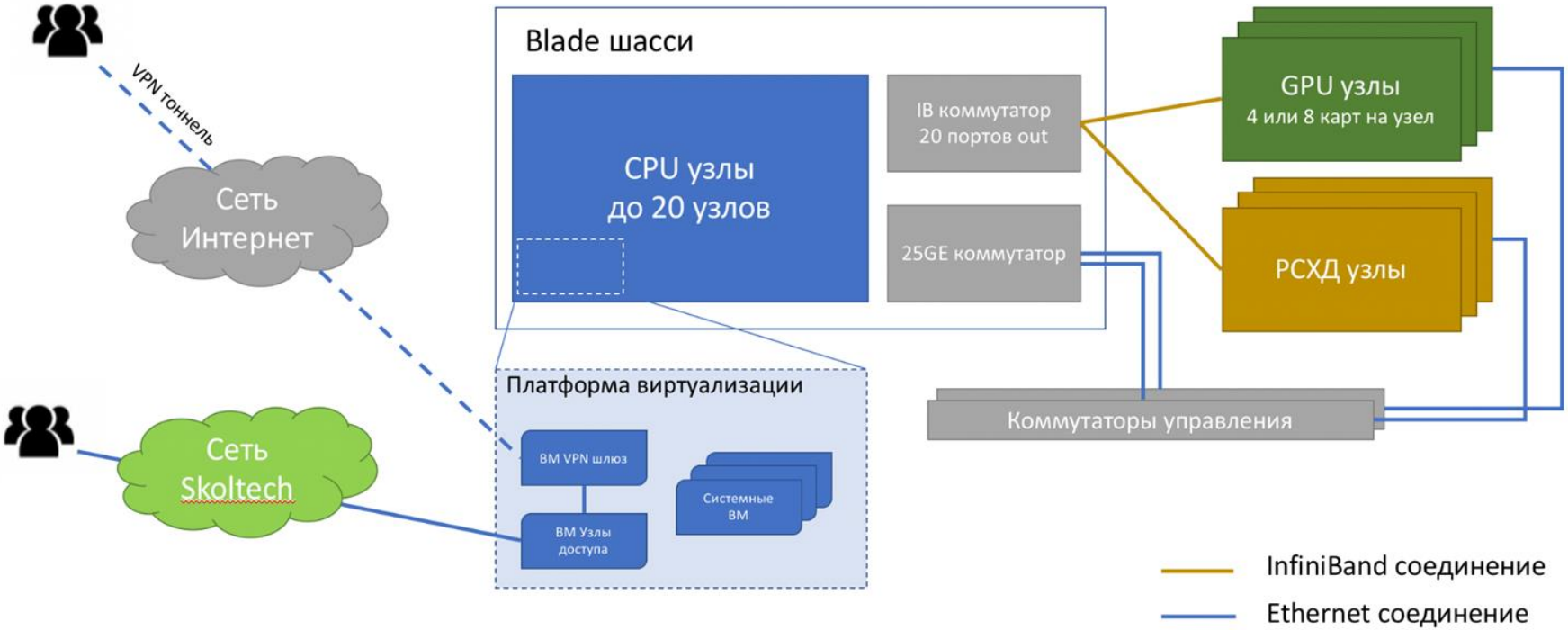


Узлы с 8 GPU со следующими ключевыми характеристиками:

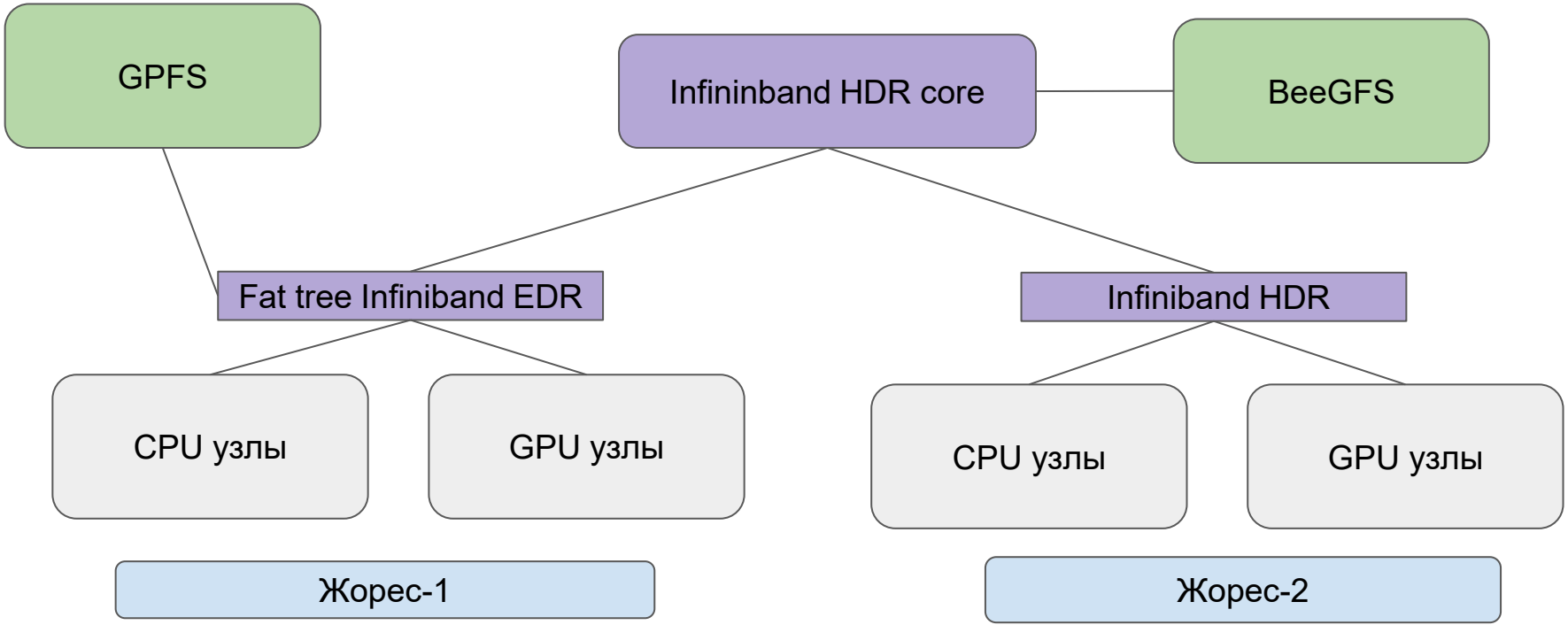
GPU: 8 x NVidia A100 80Gb SXM4 (Delta platform)
CPU: 2 x Intel Xeon Scalable v3 6330 (универсальный процессор с лучшей удельной стоимостью на ядро)
Memory: 16 x 64GB DDR4 RAM (1TB с возможностью дальнейшей модернизации)
Disks: 4 x 3.8TB NVMe диск (для эффективной работы технологии NVidia StorageDirect)
Network: 4 x InfiniBand HDR (1 портовая карта 200Gb/s, обеспечивающая максимальную производительность передачи данных через интерфейс PCIe v4, и для эффективной работы технологии NVidia GPUDirect)

1. Решение (1120 ядер) на основе HPC blade сервера с ключевыми характеристиками:
   1 шасси в форм-факторе 8U на 20 серверных узлов.
   В каждом узле:
   CPU: 2 x Intel Xeon Scalable v3 6330 (универсальный процессор с лучшей удельной стоимостью на ядро)
   Memory: 16 x 64GB DDR4 RAM (1TB с возможностью дальнейшей модернизации)
   Network: 1 x InfiniBand HDR (1 портовая карта 200Gb/s, обеспечивающая максимальную производительность передачи данных через интерфейс PCIe v4)
   Вся коммутация расположена в шасси

Коммутация и архитектурная схема

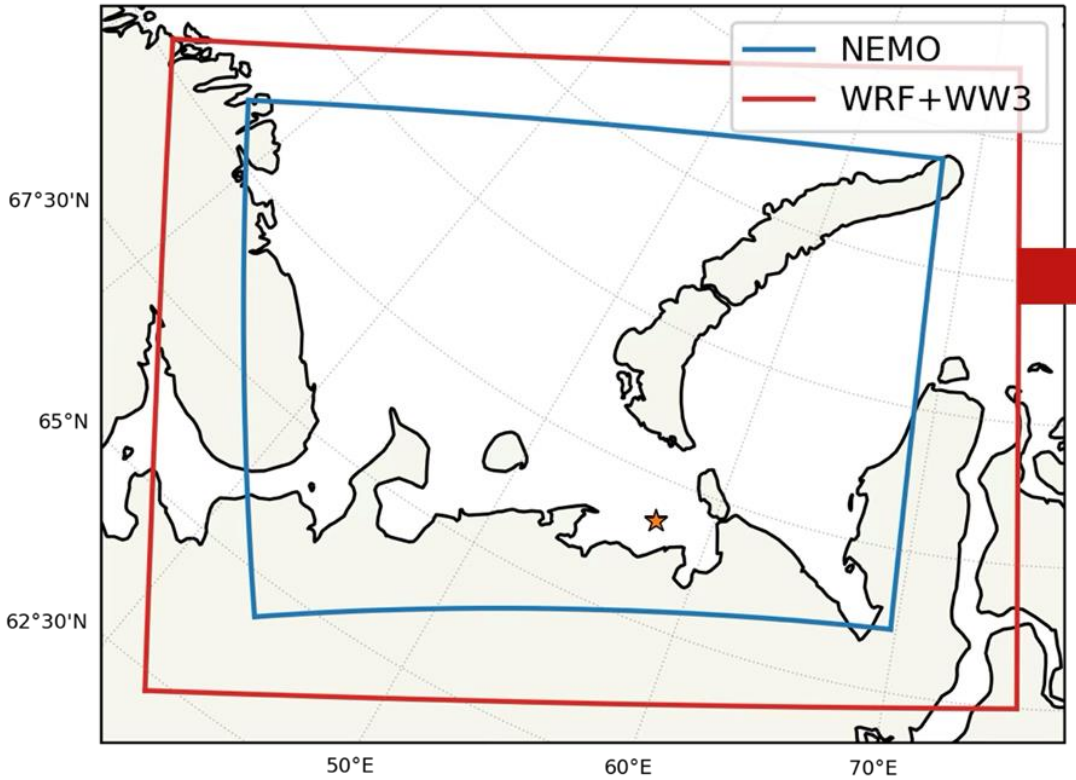


Верхнеуровневая архитектура



Тест 1. моделирование погоды WRF на домене Баренцева и Карского морей

Как для климатического эксперимента, так и для системы оперативного прогноза



Актуальная схема вычислительных доменов WRF и NEMO+WW3

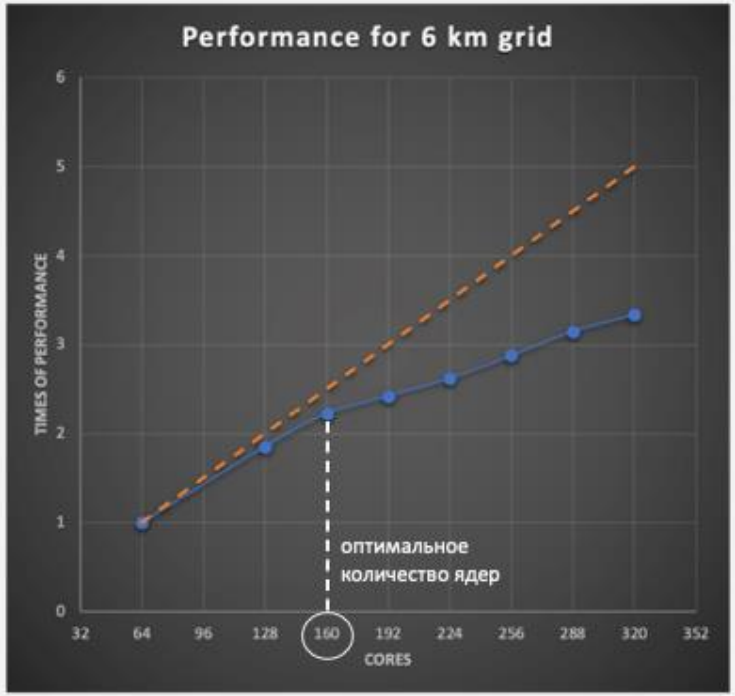
Модель погоды WRF занимает львиную долю времени расчета

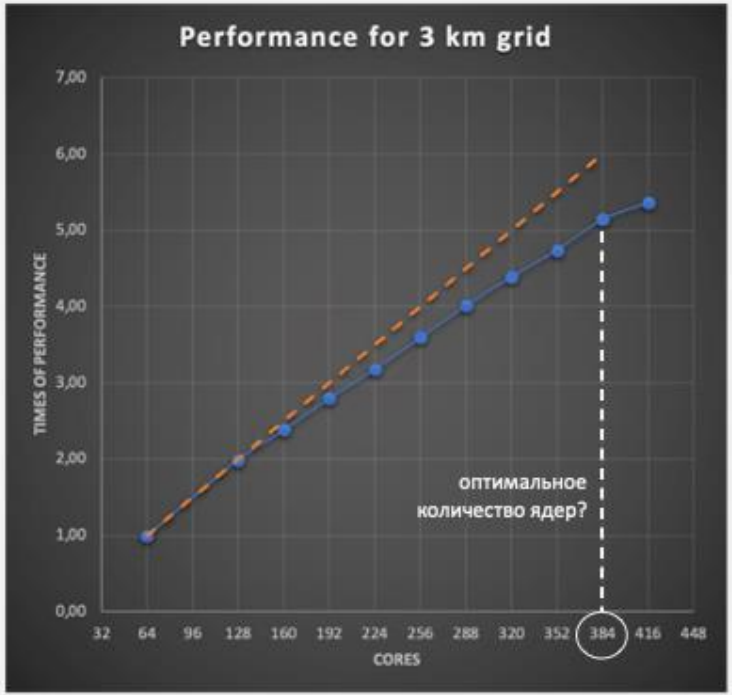
Расчет WRF – в двух пространственных разрешениях (3 и 6 км)

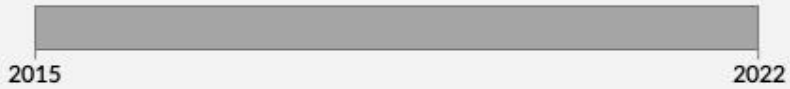
- Для решения множественных задач оптимизации модели в системе оперативного прогноза ледовой обстановки
- Для выяснения влияния решения на качество прогноза льда

Оценка производительности численных экспериментов

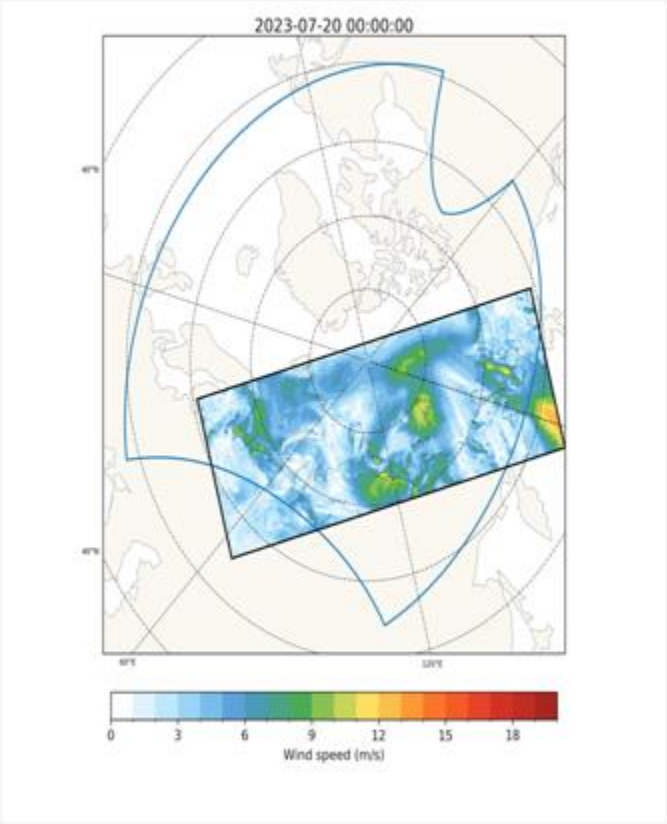
в двух пространственных разрешениях (6 и 3 км)



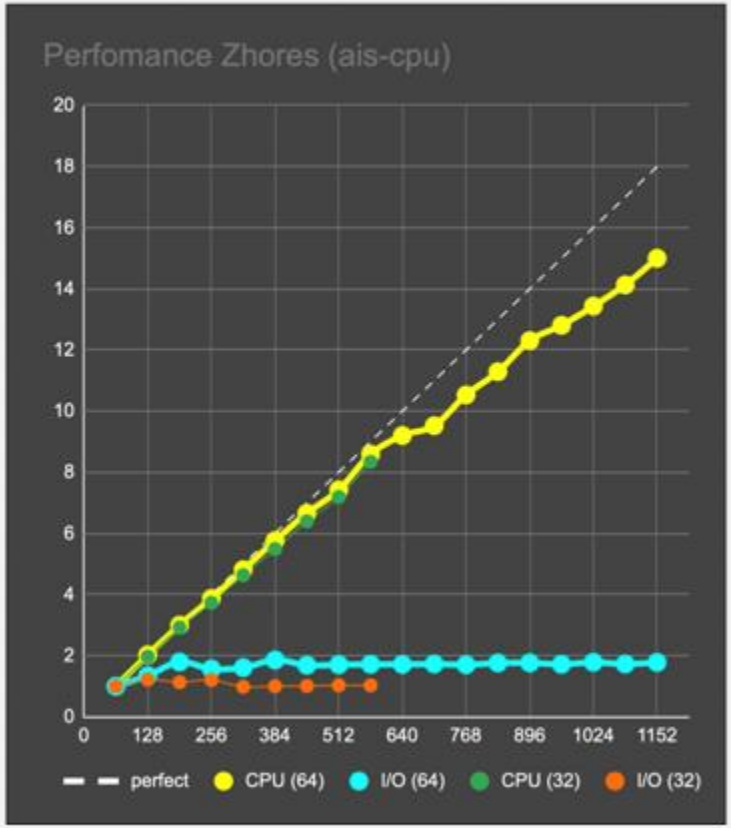




Тест 2. WRF в разрешении 6 км на расширенном регионе (СевМорПуть)



Изображение домена WRF (6 км, СевМорПуть)



Ускорение модели, как функция числа ядер

Сценарий: Прогнозирование чрезвычайных ситуаций — природные пожары

Цель

Прогнозирование вероятности возникновения пожаров для предупреждения ЧС и минимизации ущерба

Потенциальные пользователи

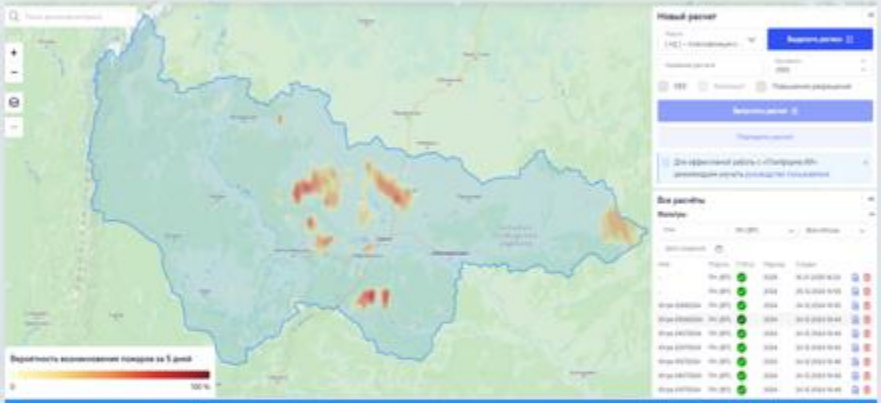
Федеральные и региональные органы по ЧС, агентства по охране окружающей среды

Сценарии использования

- Региональные органы по ЧС *могут использовать* сервис для прогноза возникновения пожаров, оперативного реагирования и эффективного распределения ресурсов.
- Агентства по охране окружающей среды *могут применять* прогнозы для разработки мер по предотвращению экологических катастроф.

~80-85% точность прогноза

Высокая детальность прогноза, разрешение клетки ~20x20км, прогнозы для любых регионов на территории РФ



Карты с прогнозом вероятности пожаров на 5 дней вперед с разрешением 20x20 км

Технические детали

- Использованные данные: топографические, погодные данные, мультиспектральные снимки, данные о плотности населения.

  Архитектуры: resnetx, ConvLSTM, 3DViT

- Ресурсы для одного эксперимента (суперкомпьютер zhores): 1 видеокарты NVidia A100, 32 ядра cpu на видеокарту. Суммарное время потраченных gpu-часов: ~100

Сценарий: Оценка последствий наводнений

Сколтех

Цель

Оперативная оценка зон затопления и ущерба инфраструктуре после наводнений

Потенциальные пользователи

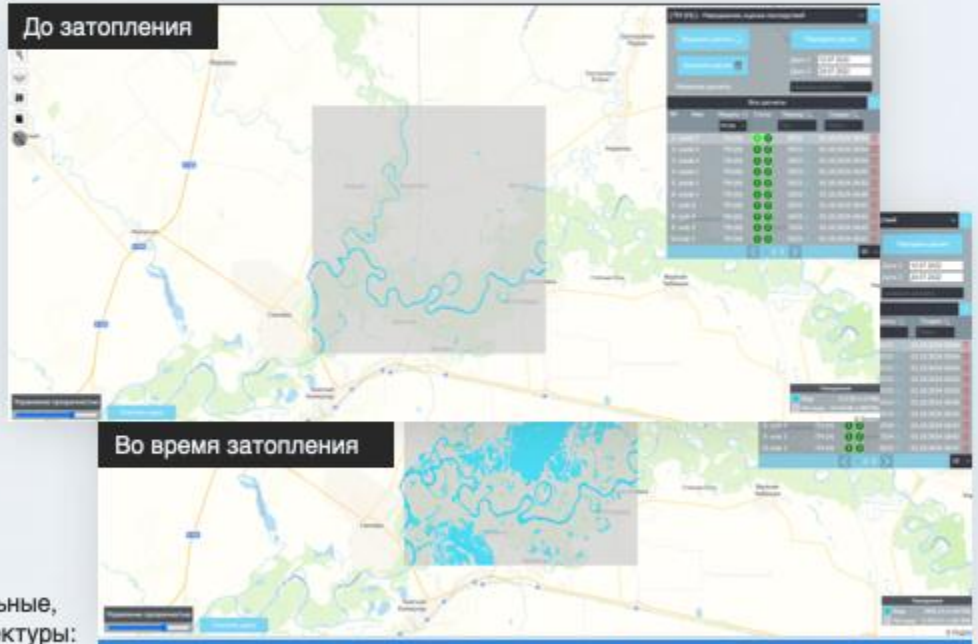
Федеральные и региональные органы по ЧС, муниципальные службы

Сценарии использования

- Федеральные и региональные органы по ЧС *могут использовать* сервис для быстрого определения зон затопления и оценки типов затопленных территорий после наводнений.
- Муниципальные службы *могут применять* полученные данные для организации эффективных работ по ликвидации последствий и восстановлению затопленных территорий.
- Органы местного самоуправления *могут использовать* информацию для своевременного оповещения жителей о затопленных районах и рекомендаций по безопасности.

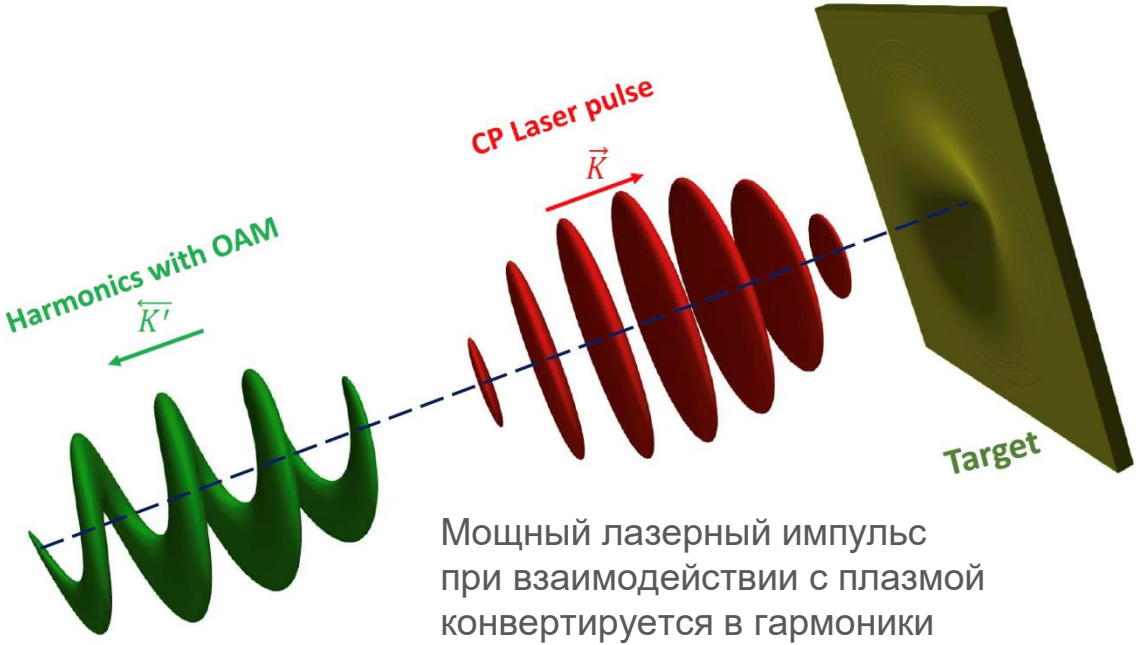
Технические детали

- Использованные данные: цифровая модель рельефа, мультиспектральные, радарные снимки, покрывающие территорию более 25000 км2. Архитектуры: MAnet, Unet++.
- Ресурсы для одного эксперимента (суперкомпьютер zhores): 2 видеокарты NVidia A100, ~100GB RAM. Общее время потраченных gpu-часов: ~200

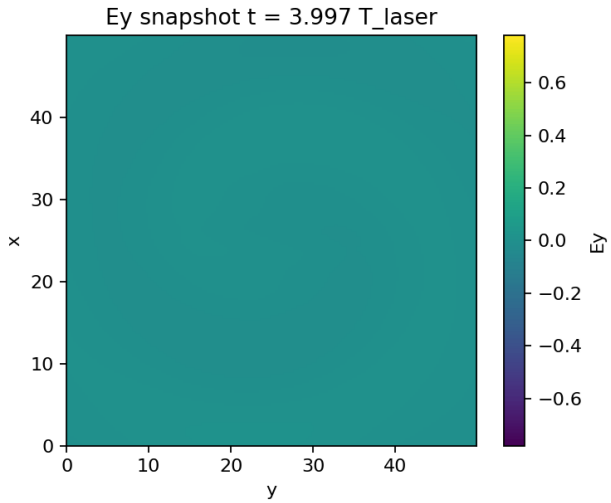


Карты затоплений, количественные оценки площадей затопленных поверхностей, типов затопленных поверхностей

Attosecond XUV pulses with Orbital Angular Momentum



Мощный лазерный импульс при взаимодействии с плазмой конвертируется в гармоники



Е. Липкова, К. Колупаев, 3Д моделирование методом частиц в ячейке Particle-in-Cell (PIC)

J.W. Wang, M. Zepf, S.G. Rykovanov, Nature Communications (2021)

Заключение

- Представлен статус, успехи и проблемы суперкомпьютеров для ИИ “Жорес” и “Жорес-2”
- Высокопроизводительные вычисления в Сколтехе развиваются
- Есть дефицит ресурсов, требуется как больше ресурсов, так и более эффективные методы их оркестрации
- Переход на запуск задач в контейнерах помогает пользователям использовать персонализированные окружения без внесения изменения в системную часть кластера

Планы

- Консолидация ресурсов для повышения эффективности использования
- Переход на LUNA2 в качестве оркестратора и системы управления