



Суперкомпьютерные дни в России

Нужен ли рейтинг
эффективности суперкомпьютеров и их компонент
для моделирования материалов и веществ?

Алексей Тимофеев
ОИВТ РАН



Содержание

- Рейтинги суперкомпьютеров: синтетические бенчмарки
 - HPL, Green500, Graph500, IO500, HPCG
 - Рейтинги суперкомпьютеров: реальные приложения
 - SPEC, Openbenchmarking, Nvidia, JINT
- Влияние архитектуры суперкомпьютера
 - Заключение

РЕЙТИНГ СУПЕРКОМПЬЮТЕРОВ

Рейтинг суперкомпьютеров - R_{peak}



www.top500.org

Rank	System	Cores	Rpeak (PFlop/s)
1	Frontier - AMD EPYC 64C, AMD MI250X, Slingshot-11 Oak Ridge NL , United States	8,699,904	1,679.82
2	Supercomputer Fugaku, A64FX 48C, Tofu interconnect D RIKEN Center , Japan	7,630,848	537.21
3	LUMI - HPE Cray EX235a, AMD EPYC 64C, AMD MI250X, Slingshot-11 EuroHPC/CSC , Finland	2,220,288	428.70

Рейтинги суперкомпьютеров - R_{\max} (HPL)



top50.supercomputers.ru

Текущий рейтинг (Издание №38 от 28.03.2023)

Ранг	Система	Скорость (Flops)	Скорость (Flops/100 Watts)	Скорость (Flops/100 Watts)	Скорость (Flops/100 Watts)	Скорость (Flops/100 Watts)
1	Frontier	108	108	108	108	108
2	Supercomputer Fujitsu	746	158	158	158	158
3	LUMI	137	107	107	107	107



www.top500.org

Rank	System	Cores	Rmax (PFlop/s)	Speak (PFlop/s)	Power (kW)
1	Frontier - HPE Cray EX255, AMD Optimized 3rd Generation EPYC 4C 20H, AMD Instinct MI250X, Singapore 11, HPE DOE/DOE Ridge National Laboratory United States	8,699,904	1,174.00	1,479.82	22,703
2	Supercomputer Fujitsu - Supercomputer Fujitsu, A64FX 4C 2.20H, Tofu Interconnect 5, Fujitsu RISEN Center for Computational Science Japan	7,620,848	642.01	537.21	29,891
3	LUMI - HPE Cray EX255, AMD Optimized 3rd Generation EPYC 4C 20H, AMD Instinct MI250X, Singapore 11, HPE EuroHPC/CCSC Finland	2,220,384	309.10	428.70	4,514

Бенчмарк

High-Performance Linpack (HPL)

решение системы линейных алгебраических уравнений методом LU-факторизации (Flops – Floating-point Operations Per Seconds)

Рейтинги суперкомпьютеров - R_{\max} (HPL)



www.top500.org

Rank	System	Cores	Rpeak (PFlop/s)	Rmax (PFlop/s)	Rmax/Rpeak
1	Frontier - AMD EPYC 64C, AMD MI250X, Slingshot-11 Oak Ridge NL , United States	8,699,904	1,679.82	1,194.00	71%
2	Supercomputer Fugaku, A64FX 48C, Tofu interconnect D RIKEN Center , Japan	7,630,848	537.21	442.01	82%
3	LUMI - HPE Cray EX235a, AMD EPYC 64C, AMD MI250X, Slingshot-11 EuroHPC/CSC , Finland	2,220,288	428.70	309.10	72%

Энергоэффективность и передача данных имеют значение! 6

Рейтинги суперкомпьютеров - Energy



www.top500.org/lists/green500

Rank	TOP500 Rank	System	Cores	Rmax (PFlop/s)	Power (kW)	Energy Efficiency (GFlops/watts)
1	255	Henri - Intel Xeon Platinum 8362 32C, NVIDIA H100, Infiniband HDR , United States	8,288	2.88	44	65.396
2	34	Frontier TDS - AMD EPYC 64C, AMD MI250X, Slingshot-11, Oak Ridge NL United States	120,832	19.20	309	62.684
3	12	Adastra - AMD EPYC 64C, AMD MI250X, Slingshot-11, (GENCI-CINES) France	319,072	46.10	921	58.021

Рейтинги суперкомпьютеров - Data



graph500.org

Бенчмарк

toy: 2^{26} вершин, 17 ГБ ОЗУ
mini: 2^{29} вершин, 137 ГБ
small: 2^{32} вершин, 1.1 ТБ
medium: 2^{36} вершин, 17.6 ТБ
large: 2^{39} вершин, 140 ТБ
huge: 2^{42} вершин, 1.1 ПБ ОЗУ

GTEPS –
 10^9 пройденных дуг
за секунду



io500.org

Бенчмарк

IOEasy: приложения с хорошо
оптимизированными схемами ввода-
вывода
IOHard: случайный доступ
MDEasy: метаданные
MDHard: небольшие файлы в каталоге
Find

Score

Рейтинги суперкомпьютеров - HPCG



www.top500.org

Бенчмарк

High performance conjugate gradient (HPCG)
решение системы линейных алгебраических уравнений методом
сопряженных градиентов (Flops – Floating-point Operations Per Seconds)

Rank	TOP500 Rank	System	Cores	Rmax (PFlop/s)	HPCG (TFlop/s)
1	2	Supercomputer Fugaku - Supercomputer Fugaku, A64FX 48C 2.2GHz, Tofu interconnect D, Fujitsu RIKEN Center for Computational Science Japan	7,630,848	442.01	16004.50

Рейтинги суперкомпьютеров – HPL&HPCG

#	Name	Computer	Total Cores	Rpeak [TFlop/s]	HPL Rmax [TFlop/s]	HPL Rmax/Rpeak, %
1	Frontier, USA	AMD EPYC 64C 2GHz, AMD MI250X, Slingshot-11	8 699 904	1 679 819	1 194 000	71
2	Fugaku, Japan	A64FX 48C, Tofu interconnect D	7 630 848	537 212	442 010	82
3	LUMI, Finland	AMD EPYC 64C, AMD MI250X, Slingshot-11	2 220 288	428 704	309 100	72
4	Leonardo, Italy	Xeon Platinum 8358 32C, NVIDIA A100 SXM4, HDR100 Infiniband	1 824 768	304 466	238 700	78
5	Summit, USA	IBM POWER9 22C, NVIDIA GV100, EDR Infiniband	2 414 592	200 795	148 600	74

Рейтинги суперкомпьютеров – HPL&HPCG

#	Name	Computer	Total Cores	Rpeak [TFlop/s]	HPL Rmax [TFlop/s]	HPL Rmax/Rpeak, %
1	Frontier, USA	AMD EPYC 64C 2GHz, AMD MI250X, Slingshot-11	8 699 904	1 679 819	1 194 000	71
2	Fugaku, Japan	A64FX 48C, Tofu interconnect D	7 630 848	537 212	442 010	82
3	LUMI, Finland	AMD EPYC 64C, AMD MI250X, Slingshot-11	2 220 288	428 704	309 100	72
4	Leonardo, Italy	Xeon Platinum 8358 32C, NVIDIA A100 SXM4, HDR100 Infiniband	1 824 768	304 466	238 700	78
5	Summit, USA	IBM POWER9 22C, NVIDIA GV100, EDR Infiniband	2 414 592	200 795	148 600	74
Среднее по топ500				15652	10478	61
Диапазон по топ500				2 193 ÷ 1 679 819	1 872 ÷ 1 194 000	4 ÷ 98

Рейтинги суперкомпьютеров – HPL&HPCG

#	Name	Computer	Total Cores	Rpeak [TFlop/s]	HPL Rmax [TFlop/s]	HPL Rmax/Rpeak, %	HPCG Rmax [TFlop/s]	HPCG Rmax/Rpeak, %
1	Frontier, USA	AMD EPYC 64C 2GHz, AMD MI250X, Slingshot-11	8 699 904	1 679 819	1 194 000	71	14 054	0,84
2	Fugaku, Japan	A64FX 48C, Tofu interconnect D	7 630 848	537 212	442 010	82	16 005	2,98
3	LUMI, Finland	AMD EPYC 64C, AMD MI250X, Slingshot-11	2 220 288	428 704	309 100	72	3 408	0,80
4	Leonardo, Italy	Xeon Platinum 8358 32C, NVIDIA A100 SXM4, HDR100 Infiniband	1 824 768	304 466	238 700	78	3 114	1,02
5	Summit, USA	IBM POWER9 22C, NVIDIA GV100, EDR Infiniband	2 414 592	200 795	148 600	74	2 926	1,46
Среднее по топ500				15652	10478	61		
Диапазон по топ500				2 193 ÷ 1 679 819	1 872 ÷ 1 194 000	4 ÷ 98		!

Рейтинги суперкомпьютеров – HPL&HPCG

#	Name	Computer	Total Cores	Rpeak [TFlop/s]	HPL Rmax [TFlop/s]	HPL Rmax/Rpeak, %	HPCG Rmax [TFlop/s]	HPCG Rmax/Rpeak, %
1	Frontier, USA	AMD EPYC 64C 2GHz, AMD MI250X, Slingshot-11	8 699 904	1 679 819	1 194 000	71	14 054	0,84
2	Fugaku, Japan	A64FX 48C, Tofu interconnect D	7 630 848	537 212	442 010	82	16 005	2,98
3	LUMI, Finland	AMD EPYC 64C, AMD MI250X, Slingshot-11	2 220 288	428 704	309 100	72	3 408	0,80
4	Leonardo, Italy	Xeon Platinum 8358 32C, NVIDIA A100 SXM4,HDR100 Infiniband	1 824 768	304 466	238 700	78	3 114	1,02
5	Summit, USA	IBM POWER9 22C, NVIDIA GV100, EDR Infiniband	2 414 592	200 795	148 600	74	2 926	1,46
Среднее по топ500				15652	10478	61	630	1,61
Диапазон по топ500				2 193 ÷ 1 679 819	1 872 ÷ 1 194 000	4 ÷ 98	30 ÷ 16 005	0,38 ÷ 5,56

Рейтинги суперкомпьютеров – HPL&HPCG

#	Name	Computer	Total Cores	Rpeak [TFlop/s]	HPL Rmax [TFlop/s]	HPL Rmax/Rpeak, %	HPCG Rmax [TFlop/s]	HPCG Rmax/Rpeak, %	Real application Rmax/Rpeak
1	Frontier, USA	AMD EPYC 64C 2GHz, AMD MI250X, Slingshot-11	8 699 904	1 679 819	1 194 000	71	14 054	0,84	?
2	Fugaku, Japan	A64FX 48C, Tofu interconnect D	7 630 848	537 212	442 010	82	16 005	2,98	?
3	LUMI, Finland	AMD EPYC 64C, AMD MI250X, Slingshot-11	2 220 288	428 704	309 100	72	3 408	0,80	?
4	Leonardo, Italy	Xeon Platinum 8358 32C, NVIDIA A100 SXM4, HDR100 Infiniband	1 824 768	304 466	238 700	78	3 114	1,02	?
5	Summit, USA	IBM POWER9 22C, NVIDIA GV100, EDR Infiniband	2 414 592	200 795	148 600	74	2 926	1,46	?
Среднее по топ500				15652	10478	61	630	1,61	?
Диапазон по топ500				2 193 ÷ 1 679 819	1 872 ÷ 1 194 000	4 ÷ 98	30 ÷ 16 005	0,38 ÷ 5,56	?

Рейтинги суперкомпьютеров – HPL&HPCG

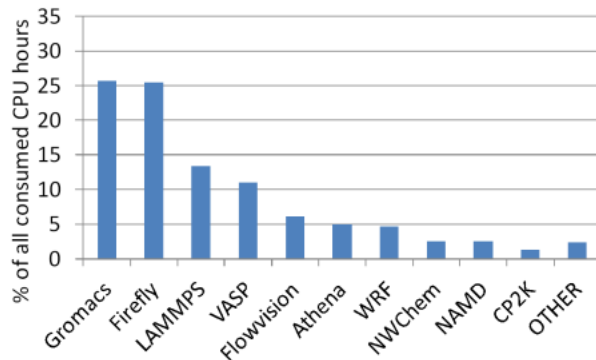
#	Name	Computer	Total Cores	Rpeak [TFlop/s]	HPL Rmax [TFlop/s]	HPL Rmax/Rpeak, %	HPCG Rmax [TFlop/s]	HPCG Rmax/Rpeak, %	Real application Rmax/Rpeak
1	Frontier, USA	AMD EPYC 64C 2GHz, AMD MI250X, Slingshot-11	8 699 904	1 679 819	1 194 000	71	14 054	0,84	0,8÷71
2	Fugaku, Japan	A64FX 48C, Tofu interconnect D	7 630 848	537 212	442 010	82	16 005	2,98	3÷82
3	LUMI, Finland	AMD EPYC 64C, AMD MI250X, Slingshot-11	2 220 288	428 704	309 100	72	3 408	0,80	0,8÷72
4	Leonardo, Italy	Xeon Platinum 8358 32C, NVIDIA A100 SXM4, HDR100 Infiniband	1 824 768	304 466	238 700	78	3 114	1,02	1÷78
5	Summit, USA	IBM POWER9 22C, NVIDIA GV100, EDR Infiniband	2 414 592	200 795	148 600	74	2 926	1,46	1,5÷74
Среднее по топ500				15652	10478	61	630	1,61	1,6÷61
Диапазон по топ500				2 193 ÷ 1 679 819	1 872 ÷ 1 194 000	4 ÷ 98	30 ÷ 16 005	0,38 ÷ 5,56	0,38÷98

Рейтинги суперкомпьютеров – реальные приложения

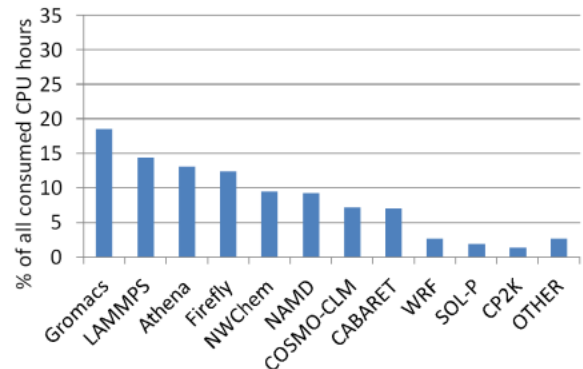
Для чего используются суперкомпьютеры?

- Моделирование (CFD, MD, Quantum simulation, ...)
- ИИ
- Большие данные
- Цифровые двойники
- ...

Ломоносов



Ломоносов - 2



Рейтинги суперкомпьютеров: реальные приложения



<http://www.spec.org/>

Application Name	Application Area
LBM D2Q37	Computational Fluid Dynamics
SOMA Offers Monte-Carlo Acceleration	Physics / Polymeric Systems
Tealeaf	Physics / High Energy Physics
Cloverleaf	Physics / High Energy Physics
Minisweep	Nuclear Engineering - Radiation Transport
POT3D	Solar Physics
SPH-EXA	Astrophysics and Cosmology
HPGMG-FV	Cosmology, Astrophysics, Combustion
miniWeather	Weather

Рейтинги суперкомпьютеров (графических ускорителей): реальные приложения



NVIDIA HPC Application Performance

developer.nvidia.com/hpc-application-performance

Engineering FUN3D

Geoscience ICON, RTM, SPECFEM3D

Molecular Dynamics AMBER, GROMACS, LAMMPS, NAMD, Relion

Physics Chroma, GTC, MILC

Quantum Mechanics Quantum Espresso

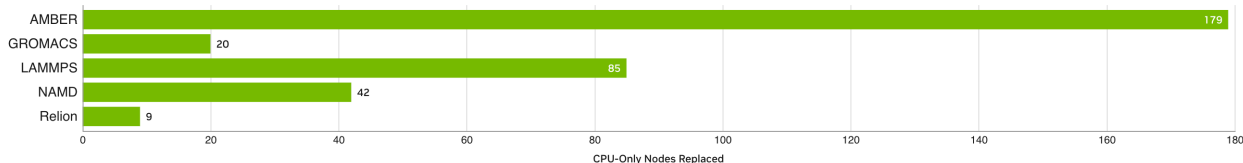
Рейтинги суперкомпьютеров (графических ускорителей Nvidia): реальные приложения



NVIDIA HPC Application Performance

developer.nvidia.com/hpc-application-performance

Molecular Dynamics



GPU Server: Dual EPYC 7742@2.25GHz with 4x NVIDIA A100 SXM 80GB |

AMBER Benchmark: DC-Cellulose_NVE, CUDA Version: 11.8 |

GROMACS Benchmark: STMV, CUDA Version: 11.8 |

LAMMPS Benchmark: SNAP, CUDA Version: 11.8 |

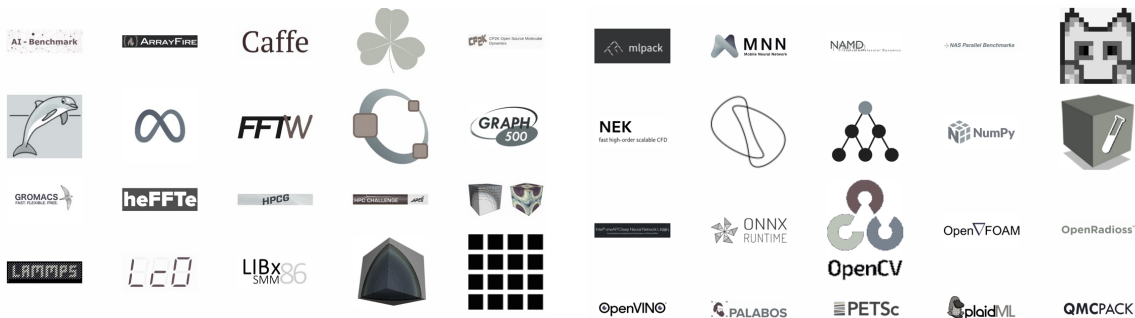
NAMD Benchmark: apoa1_nve_cuda, CUDA Version: 11.8 |

Relion Benchmark: Plasmodium Ribosome (2D), CUDA Version: 11.4.2

Рейтинги суперкомпьютеров (CPU,GPU): реальные приложения

Openbenchmarking: HPC - High Performance Computing
<https://openbenchmarking.org/suite/pts/hpc>

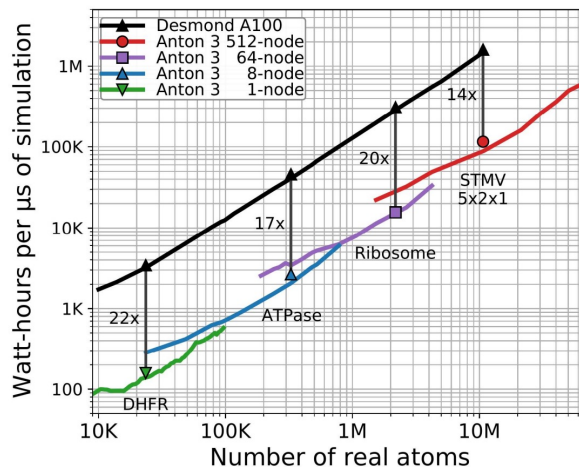
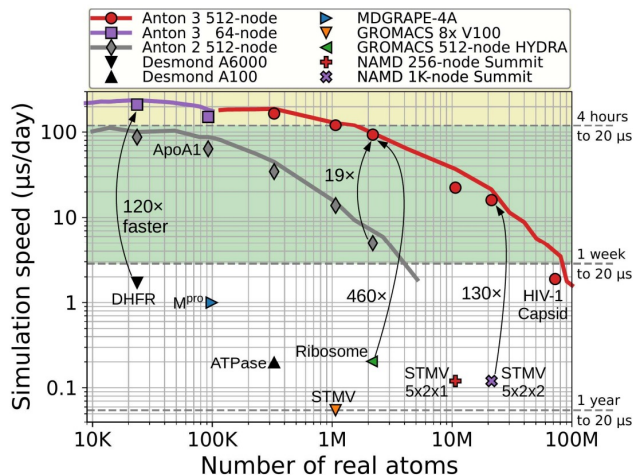
Phoronix Test Suite:
<https://github.com/phoronix-test-suite/phoronix-test-suite>



Рейтинги суперкомпьютеров: влияние архитектуры

D. E. Shaw Research
Anton3

deshawresearch.com/technology.html



Рейтинги суперкомпьютеров: реальные приложения

Начало нашего пути по созданию рейтинга (tophpc.jiht.ru):

- Создание бенчмарков по ключевым направлениям
- Тестирование суперкомпьютеров и компонент
- Рейтинг эффективности архитектур и компонент по направлениям

Научные направления:

- Классическая МД (Lammps, Gromacs, Amber, OpenMM)
- Квантовое моделирование (VASP, Quantum Espresso, CPMD, CP2K)
- PIC-моделирование (VLPL, PicOnGpu)
- CFD моделирование (FlowVision, OpenFOAM, NRG)
- ИИ (TensorFlow, PyTorch)
- Классические бенчмарки (HPL, HPCG)

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Заключение

- ОИВТ РАН активно ведёт исследования
 - по оптимизации производительности научных кодов на современных компонентах,
 - по анализу эффективности выполнения кодов на современных вычислительных архитектурах и компонентах,
 - по созданию рейтинга эффективности суперкомпьютеров и компонент для научных приложений по ключевым направлениям
- Приглашаем присоединяться к этому и другим проектам в СКЦ ОИВТ РАН. Мы готовы делиться опытом и предоставлять тестовый доступ.