

Однодневная школа-семинар  
Поиск эффективных суперкомпьютерных архитектур  
в пост-Муровскую эру

Эффективность суперкомпьютера Десмос на  
задачах ММ: использование GPU-ускорителей  
и параллельный вывод данных

Н.Д. Кондратюк, В.В. Стегайлов



NATIONAL RESEARCH  
UNIVERSITY

National Research University Higher School of Economics Intl Lab



Supercomputer Atomistic Modelling and Multi-scale Analysis



11 декабря 2017 года  
Москва, МИЭМ



# План доклада

1. Исследование эффективности GPU
2. Исследование параллельных систем вывода
3. Физическая задача для решения на суперкомпьютерах

# 1. Исследование эффективности GPU

# Вычислительные ресурсы

## Desmos

CPU  
E5-1650 v3  
without  
GPU

**2600 \$**

CPU  
E5-1650 v3  
+  
GTX 1070

x 32

**3100 \$**



ЦЕНТР КОЛЛЕКТИВНОГО ПОЛЬЗОВАНИЯ  
"ДАЛЬНЕВОСТОЧНЫЙ  
ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЙ РЕСУРС"

2 x CPU  
E5-2699 v4

x 24

**11000 \$**

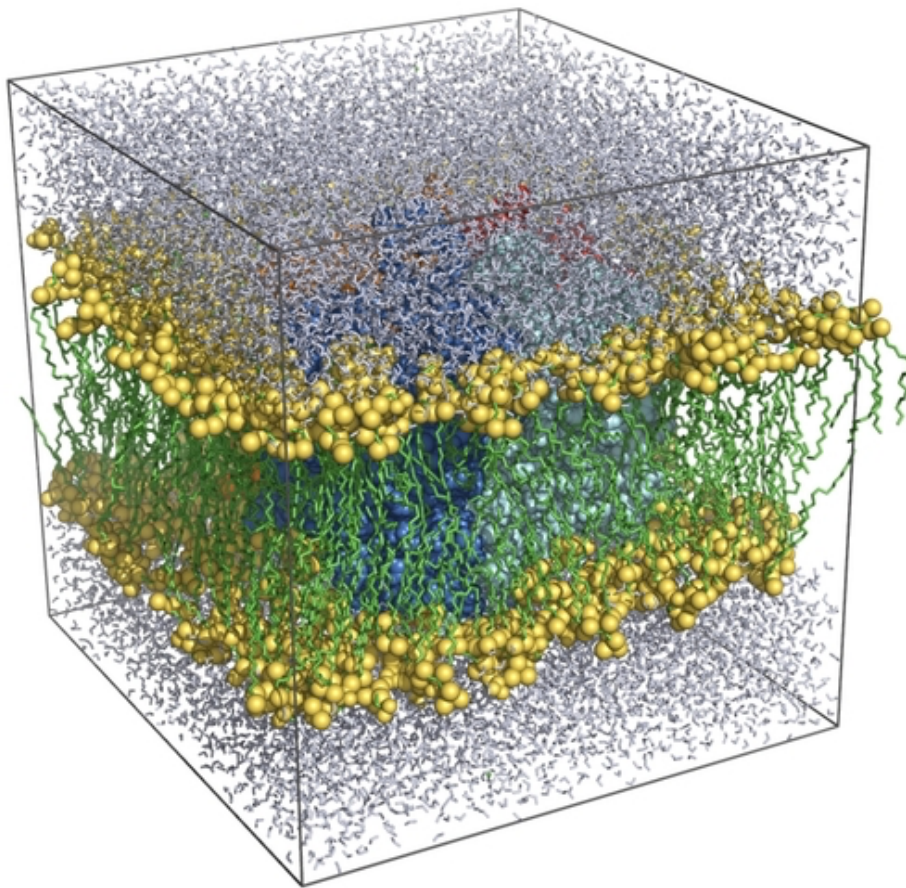
2 x CPU  
E5-2698 v4

x 16

**13000 \$**

# Системы для тестов\*

## MEM



Протеиновый канал в липидном бислое  
**~80к атомов**

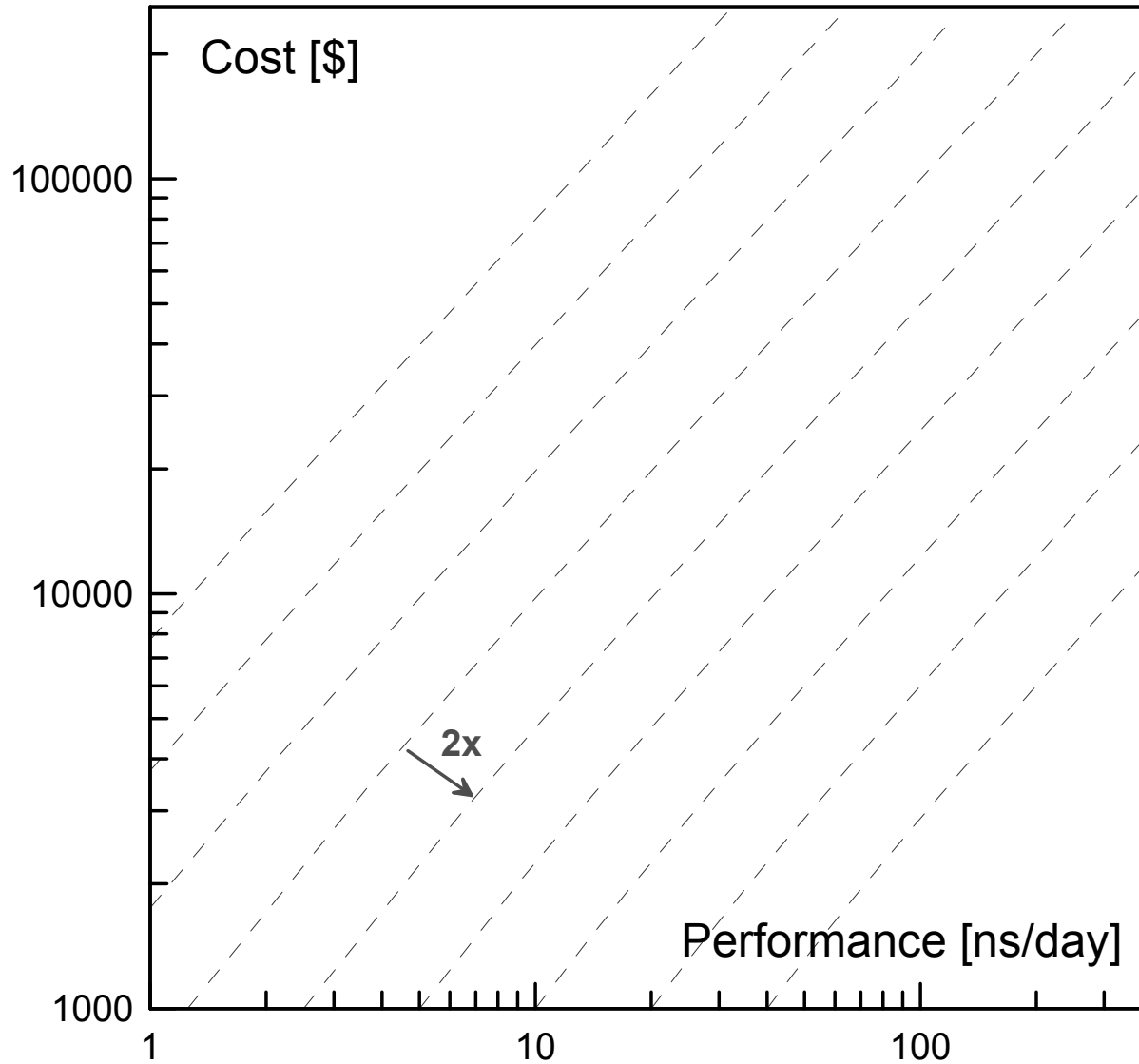
## RIB



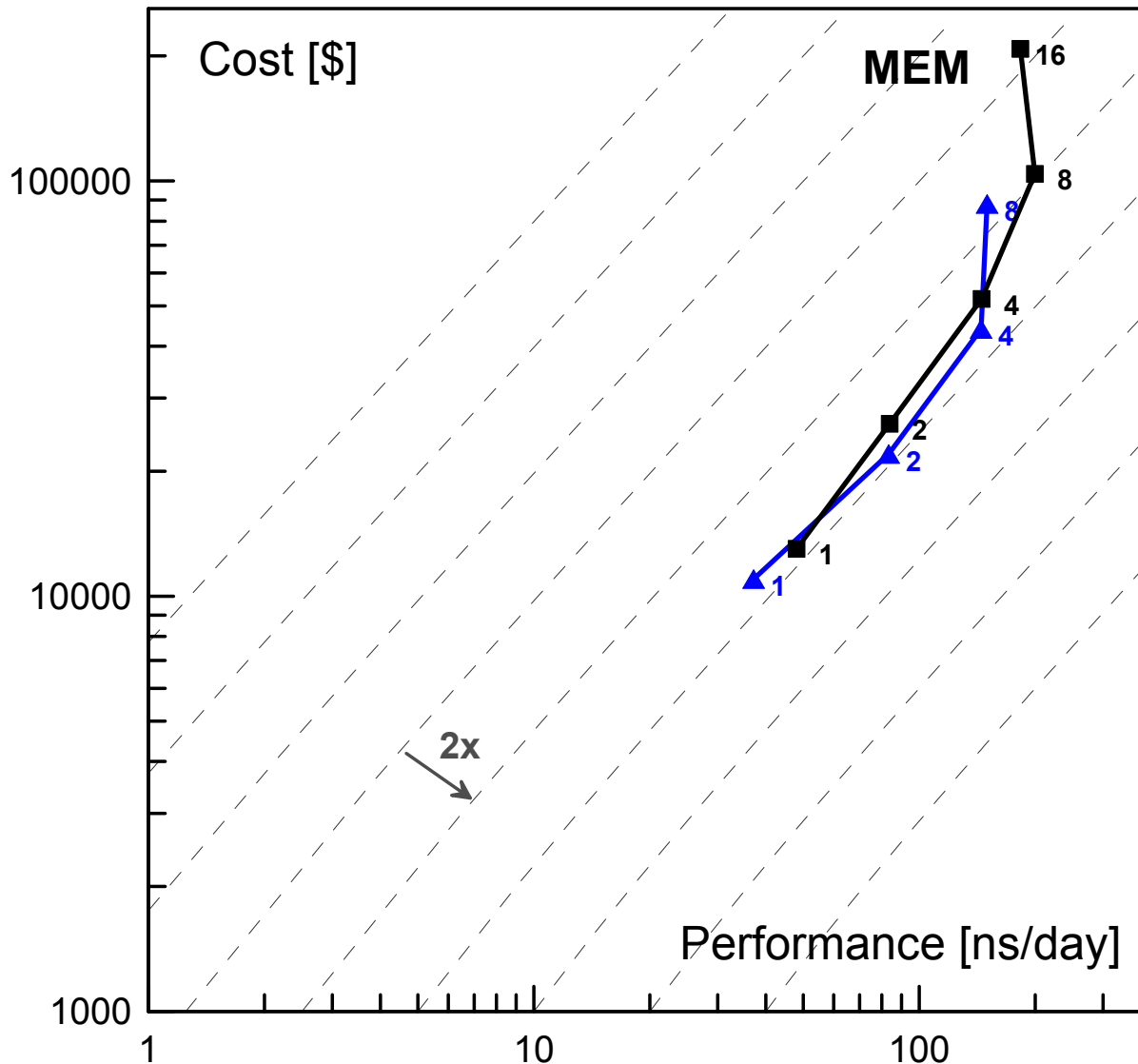
Рибосома бактерии  
**~2М атомов**

\*Kutzner, C., Groot, B. L. De, & Grubm, H. Best Bang for Your Buck : GPU Nodes for GROMACS Biomolecular Simulations. J. Comput. Chem. (2015). V. 36. P. 1990-2008

# Результаты тестов



# Результаты тестов

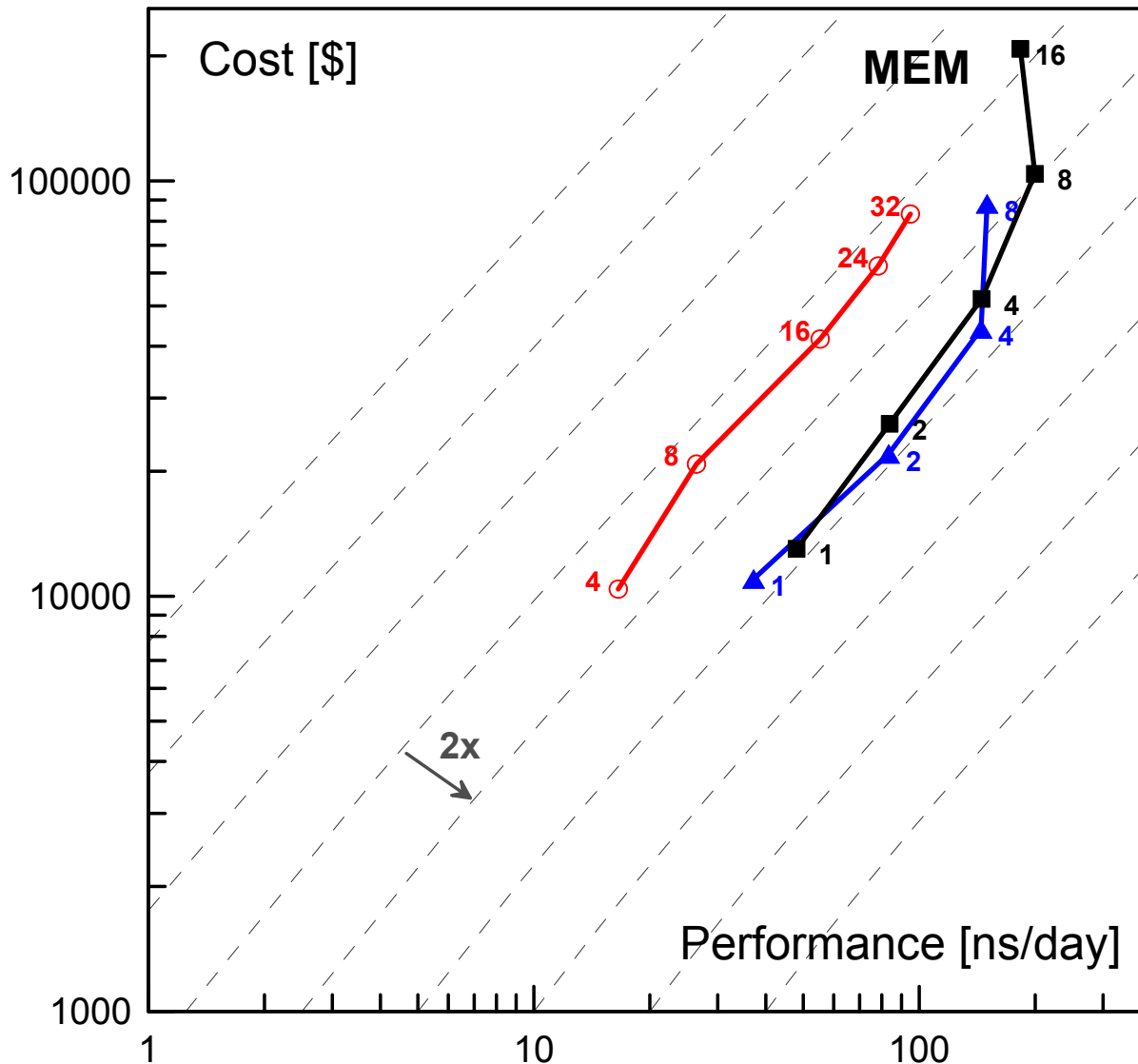


**Irus17**  
**2 x E5-2698**  
**40 cores**

**Irus17**  
**2 x E5-2699**  
**44 cores**

# Результаты тестов

**Desmos**  
**E5-1650 v3**  
**6 cores**



**Irus17**  
**2 x E5-2698**  
**40 cores**

**Irus17**  
**2 x E5-2699**  
**44 cores**



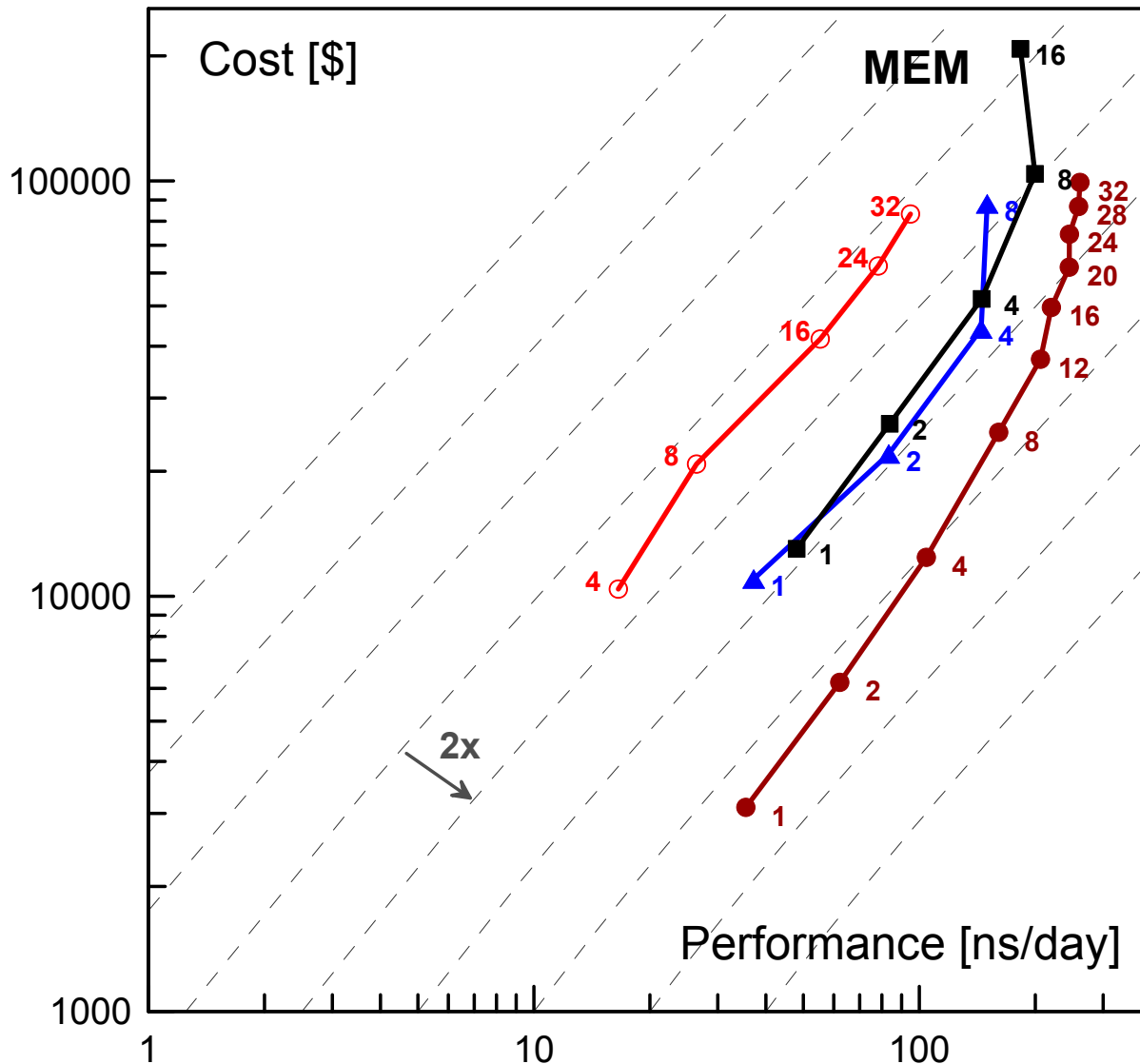
# Результаты тестов

**Desmos**  
**E5-1650 v3**  
**6 cores**

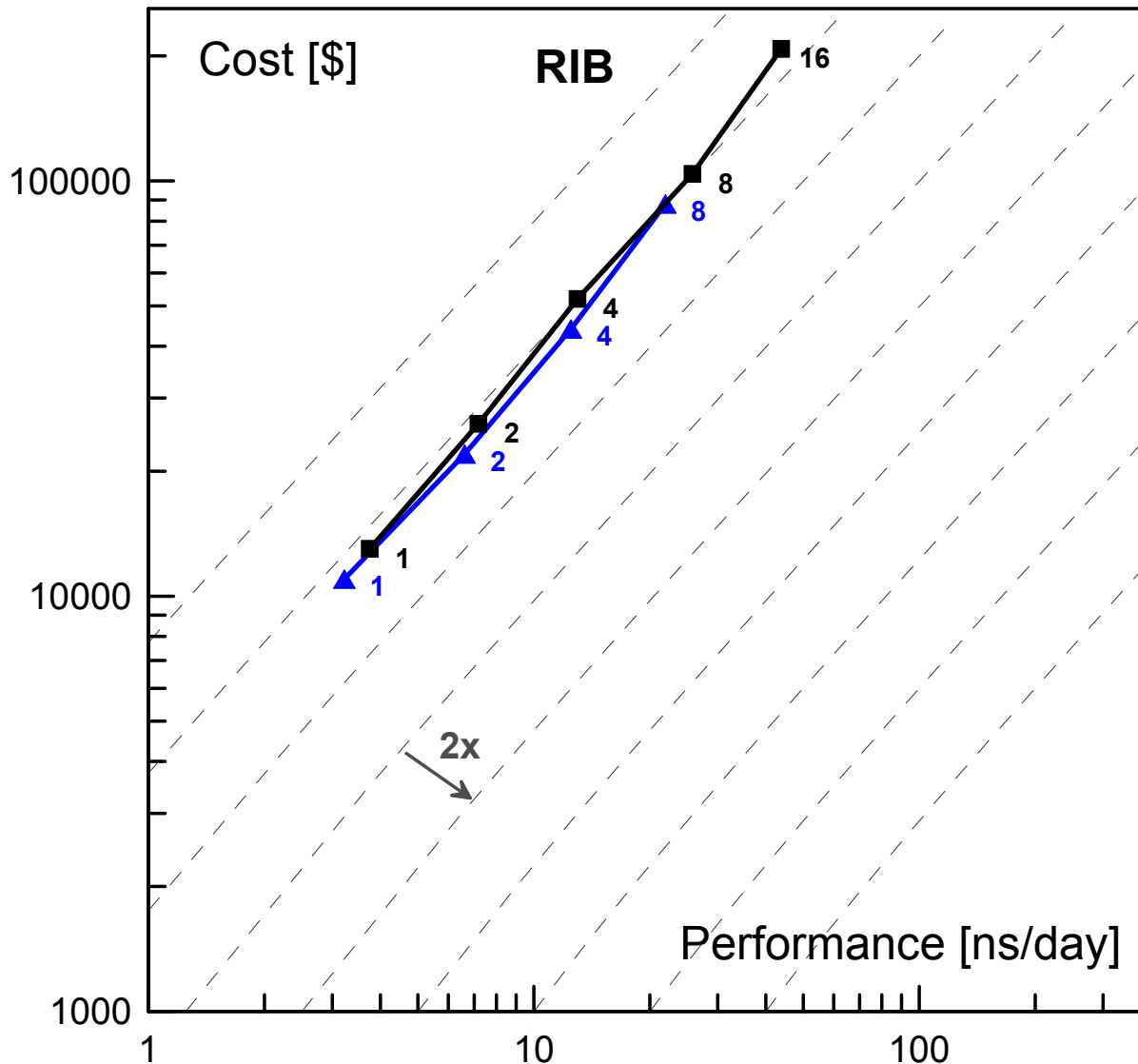
**Desmos**  
**E5-1650 v3**  
**6 cores**  
**+ GTX 1070**

**Irus17**  
**2 x E5-2698**  
**40 cores**

**Irus17**  
**2 x E5-2699**  
**44 cores**



# Результаты тестов



**Irus17**  
**2 x E5-2698**  
**40 cores**

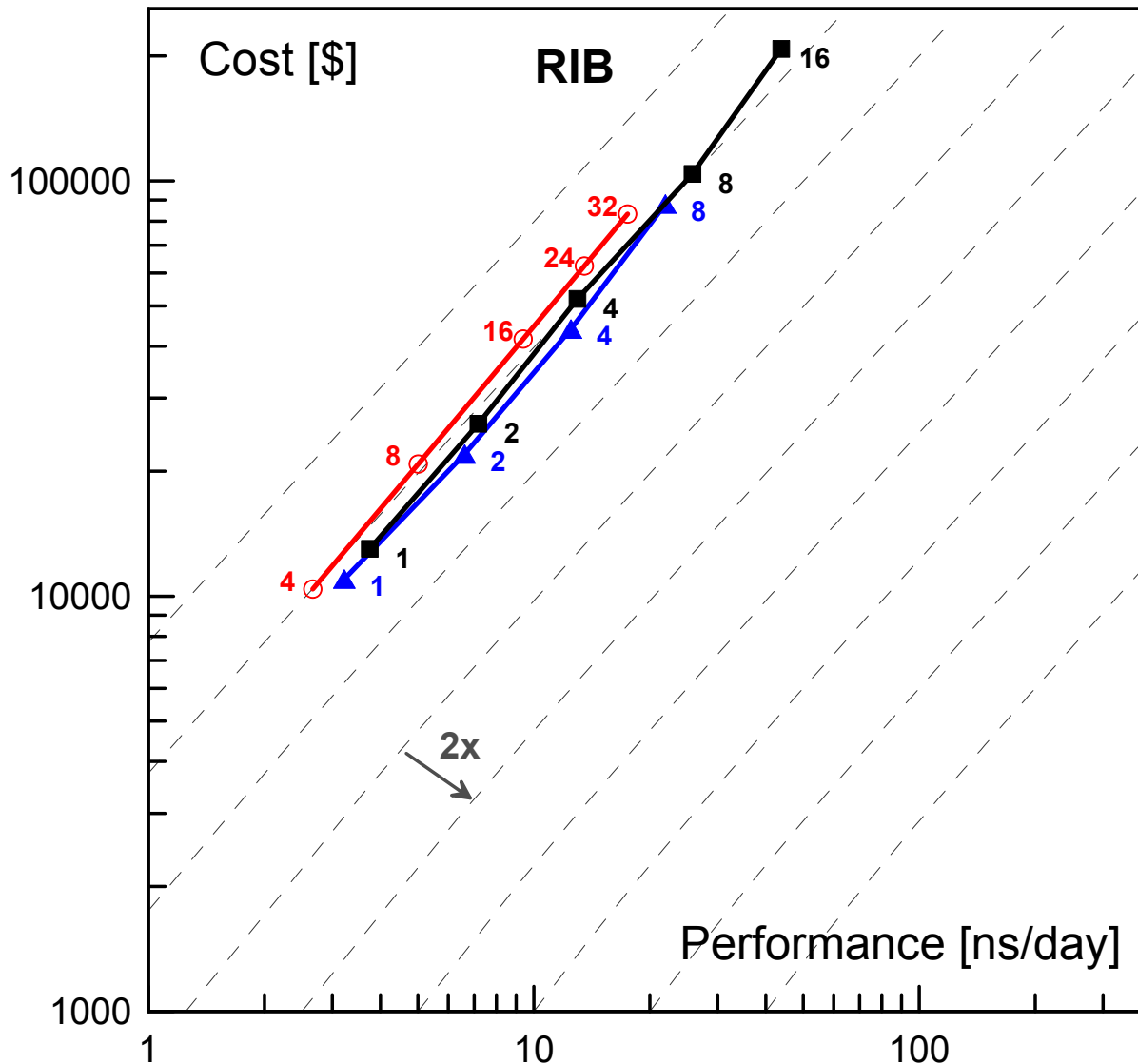
**Irus17**  
**2 x E5-2699**  
**44 cores**

# Результаты тестов

**Desmos**  
**E5-1650 v3**  
**6 cores**

**Irus17**  
**2 x E5-2698**  
**40 cores**

**Irus17**  
**2 x E5-2699**  
**44 cores**



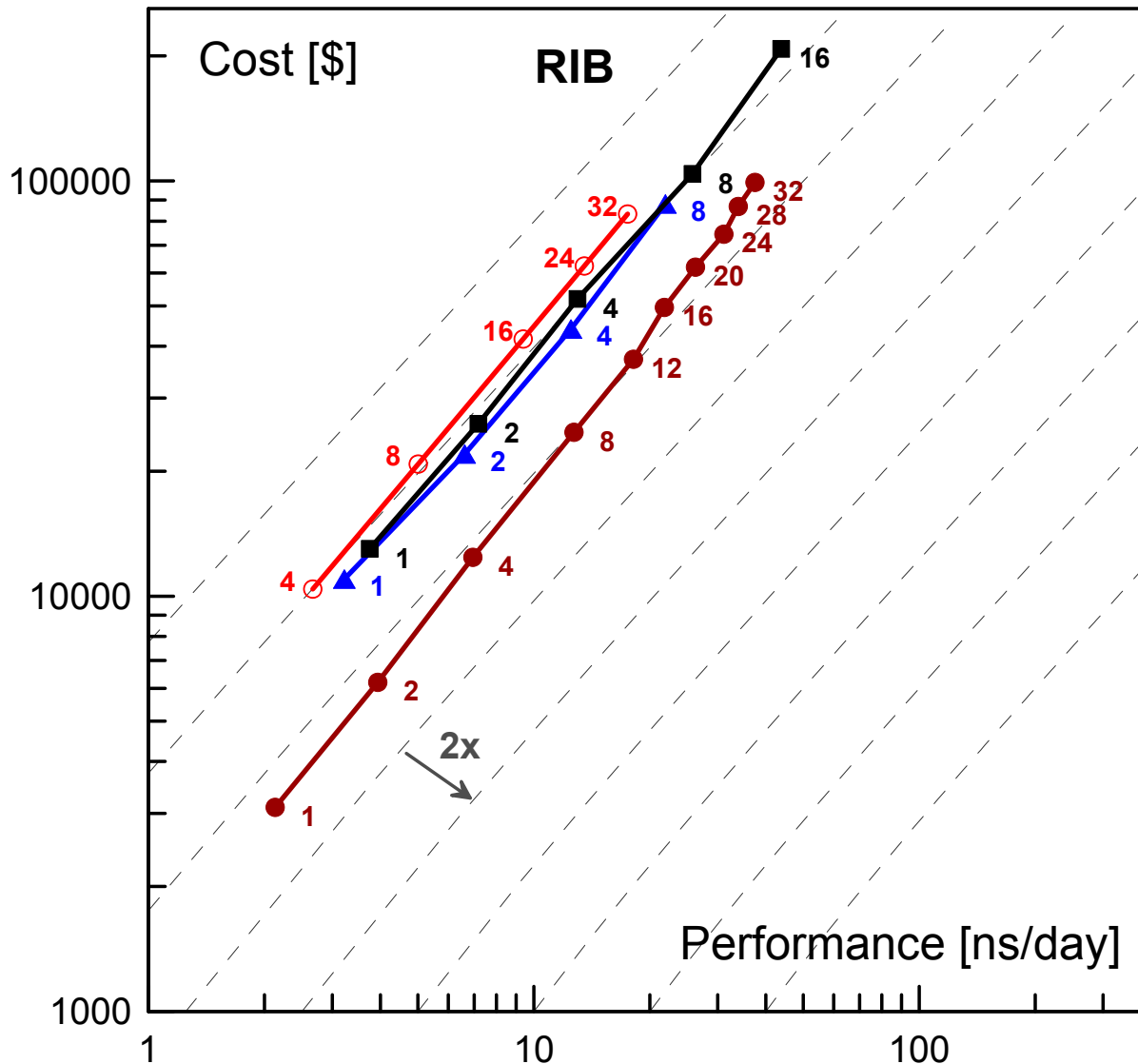
# Результаты тестов

**Desmos**  
**E5-1650 v3**  
**6 cores**

**Desmos**  
**E5-1650 v3**  
**6 cores**  
**+ GTX 1070**

**Irus17**  
**2 x E5-2698**  
**40 cores**

**Irus17**  
**2 x E5-2699**  
**44 cores**



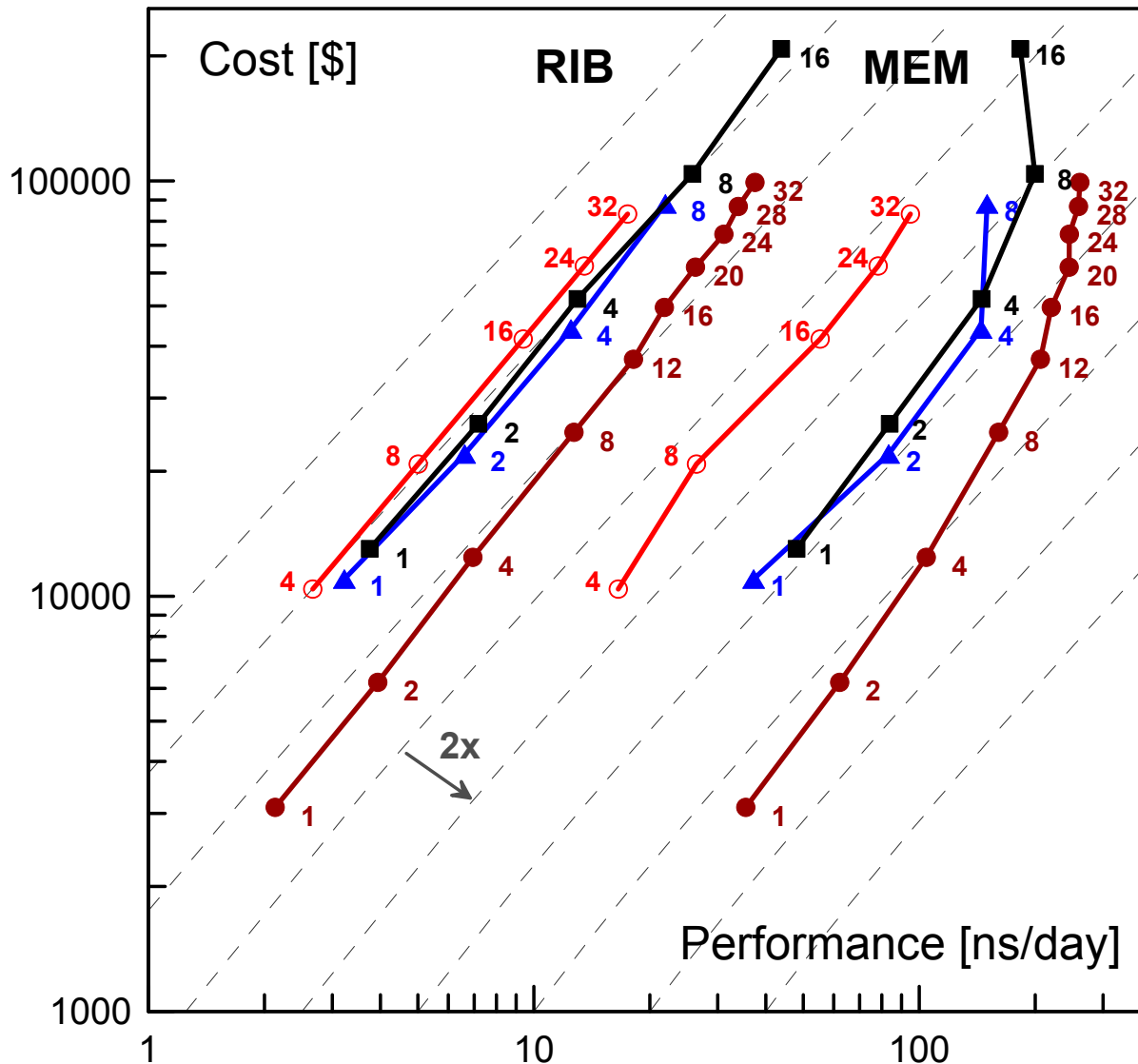
# Результаты тестов

Desmos  
E5-1650 v3  
6 cores

Desmos  
E5-1650 v3  
6 cores  
+ GTX 1070

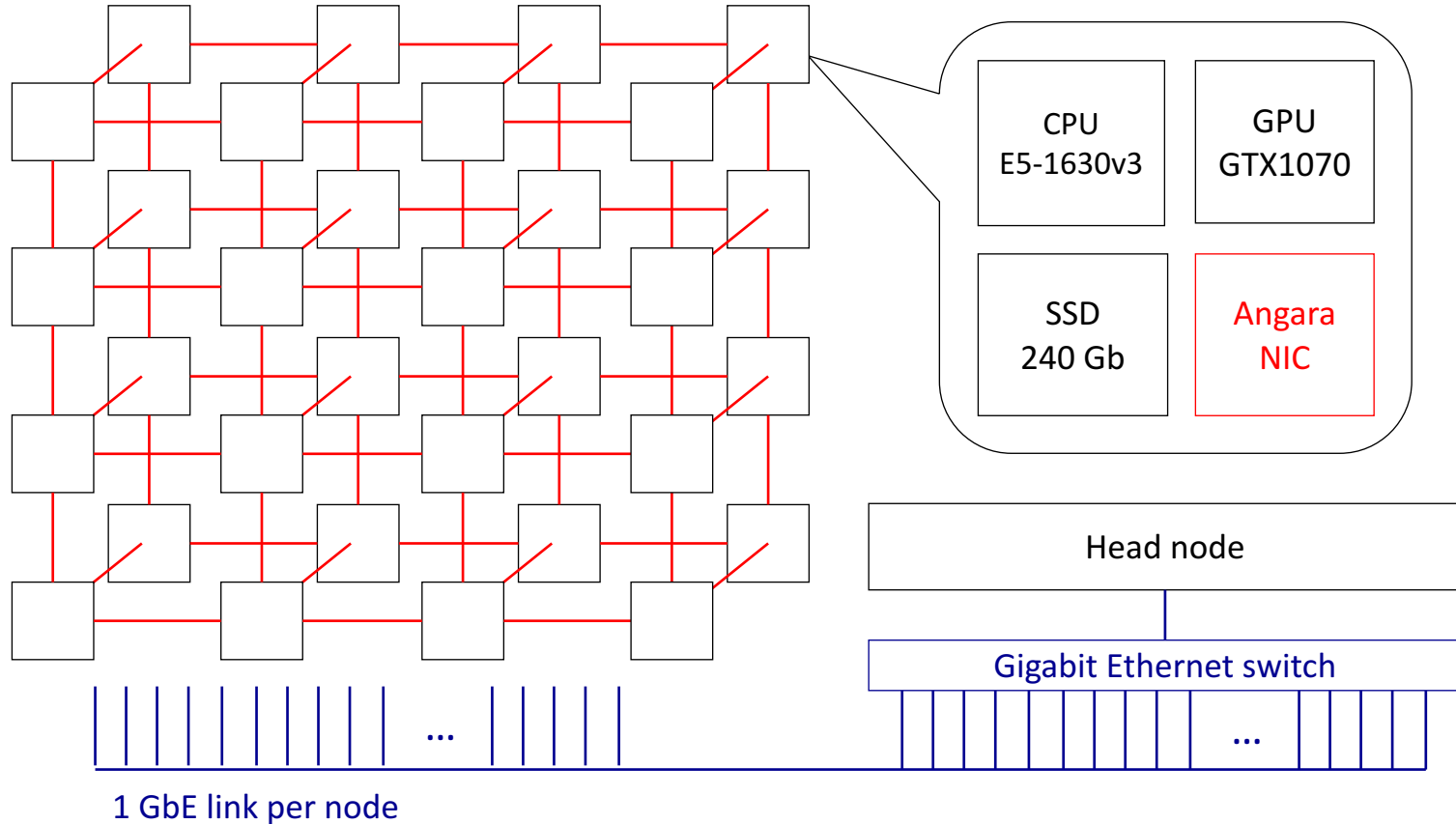
Irus17  
2 x E5-2698  
40 cores

Irus17  
2 x E5-2699  
44 cores



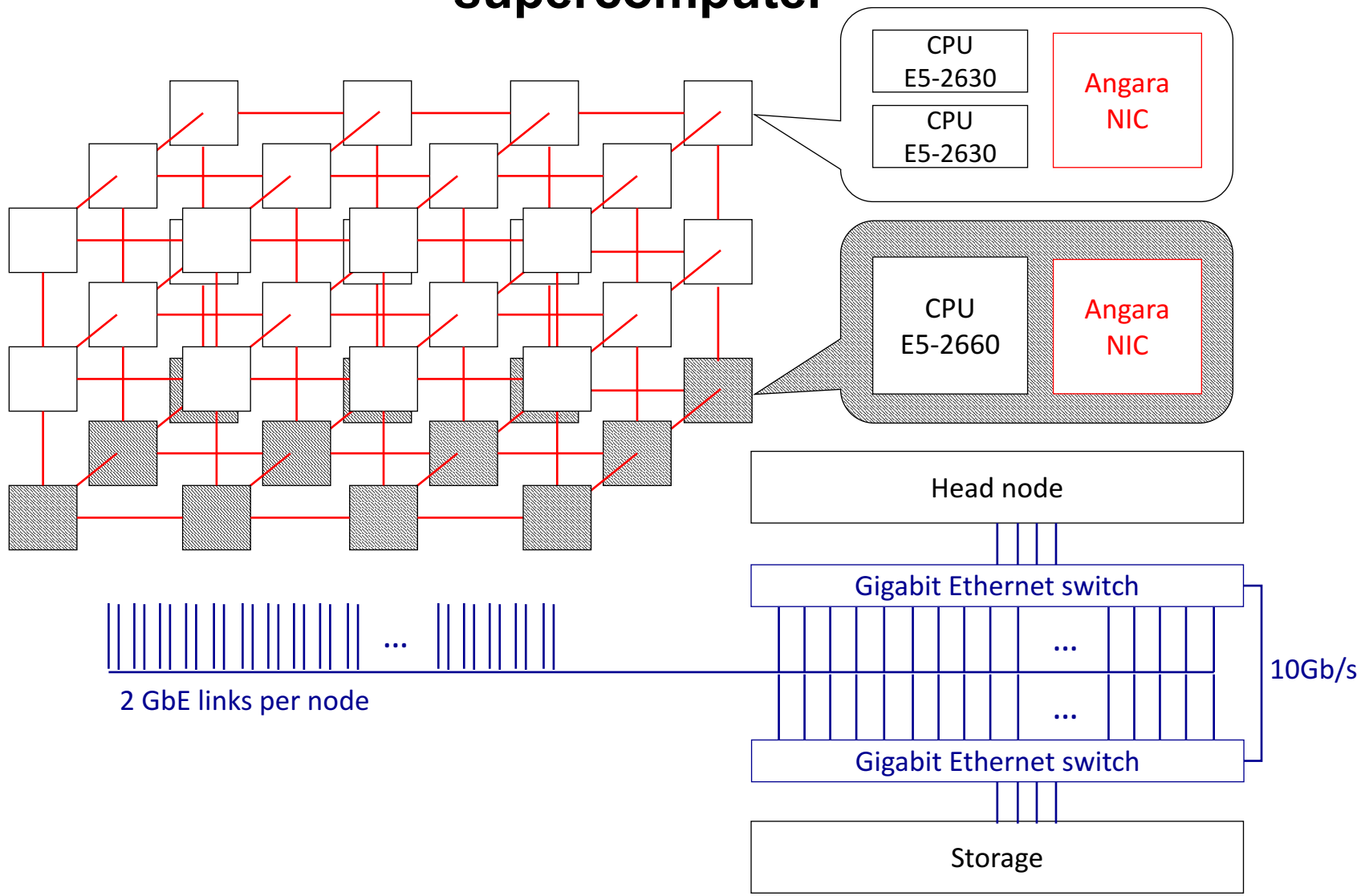
## 2. Исследование параллельных систем вывода

# Desmos supercomputer



+ **BeeGFS** Parallel Cluster File System

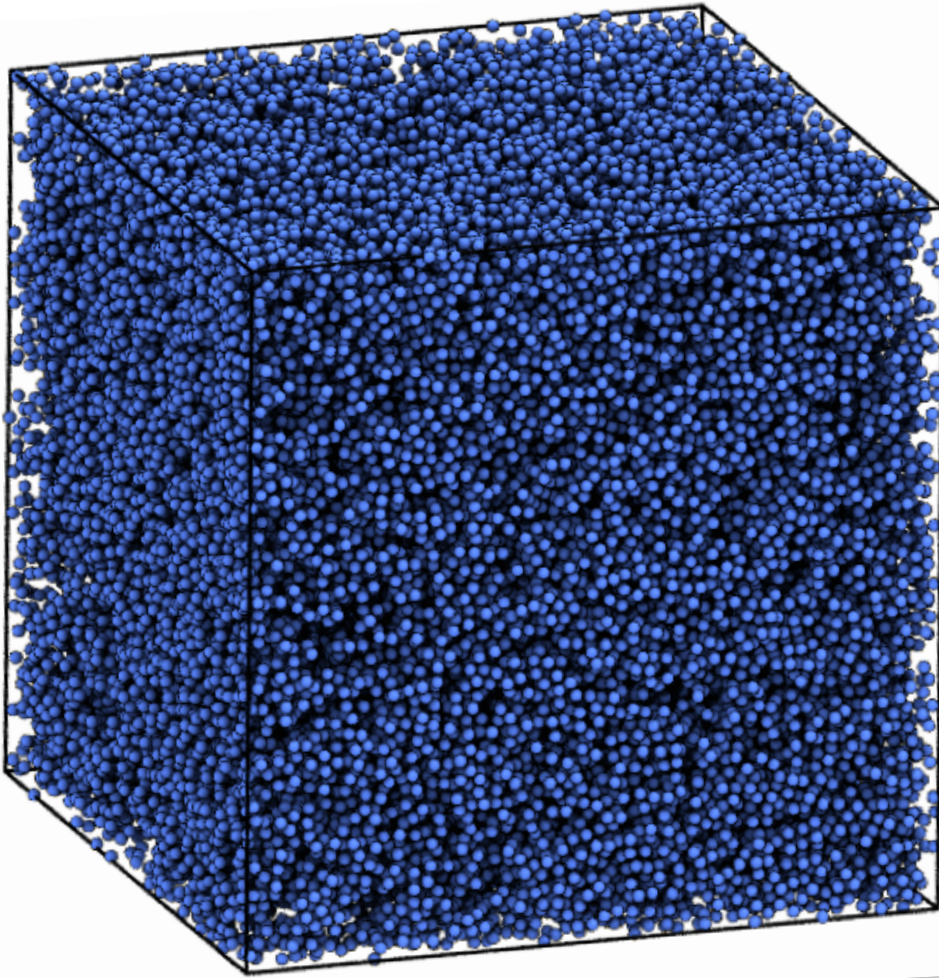
# Angara-K1 supercomputer



+ **Lustre** Parallel Cluster File System



# Система для тестов



LJ жидкость. Количество частиц:

**30M – 100M**

## LAMMPS

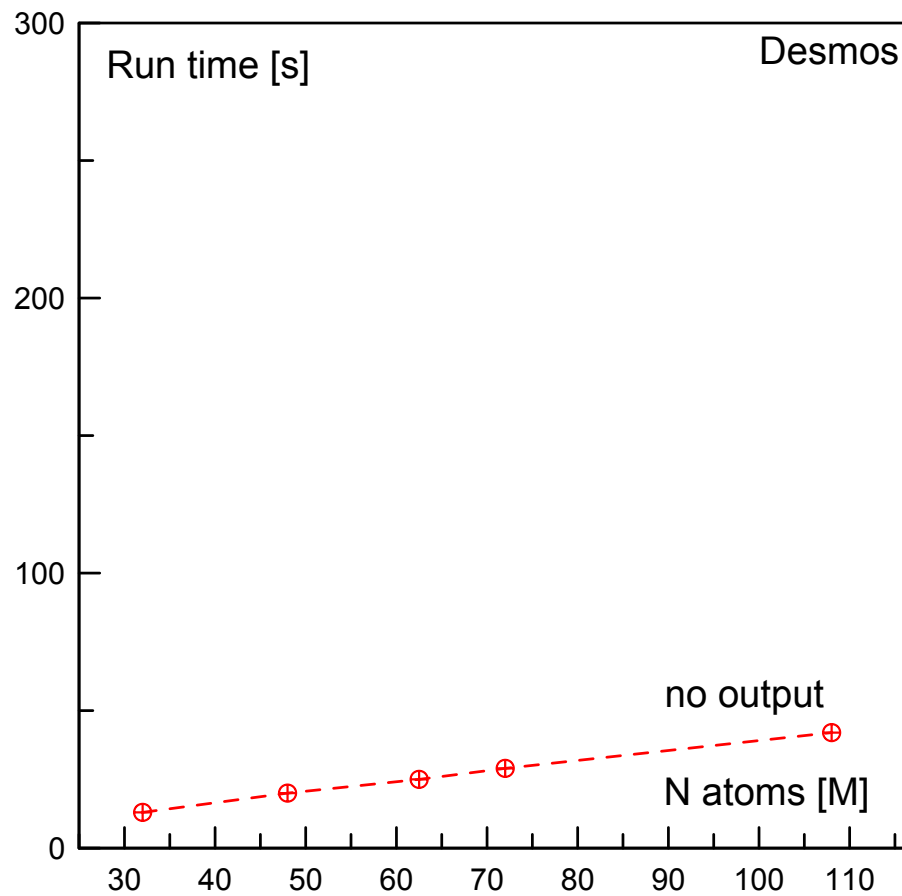
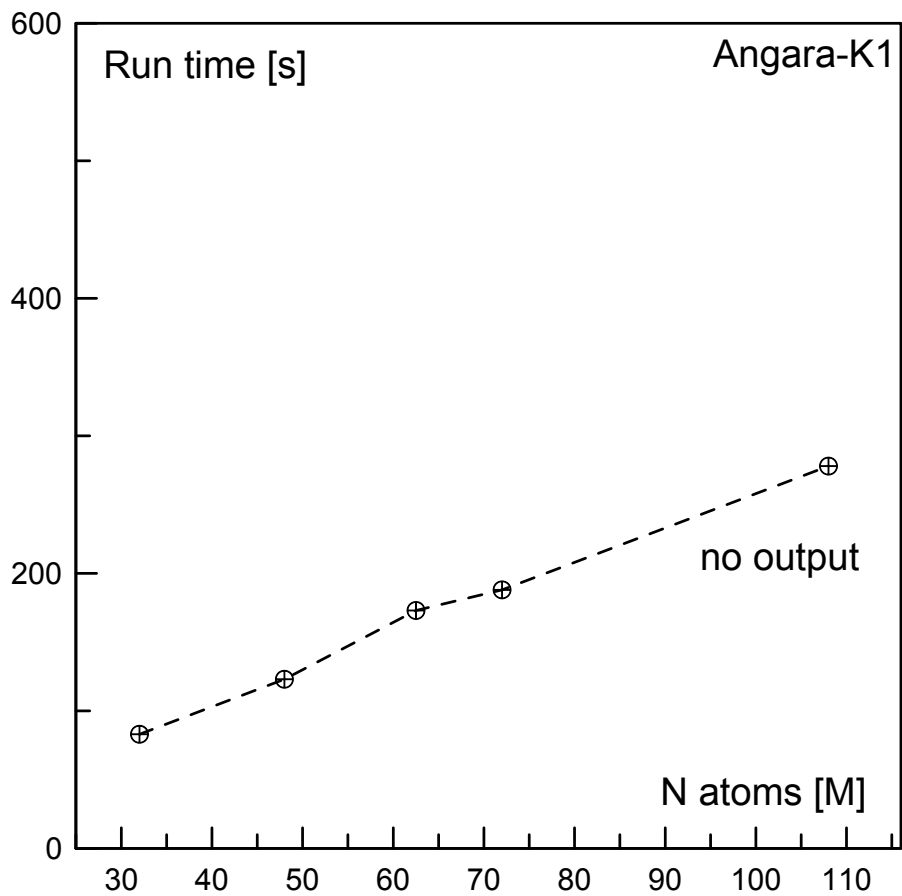
examples/in.melt

t\_dump = 10 steps

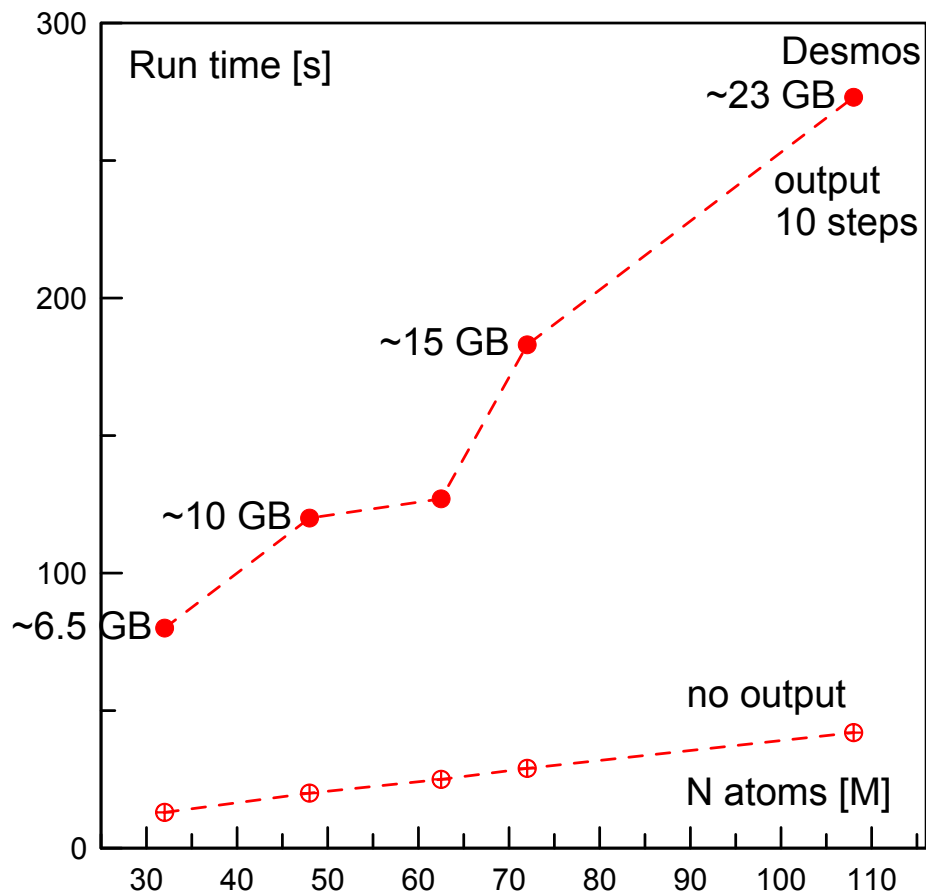
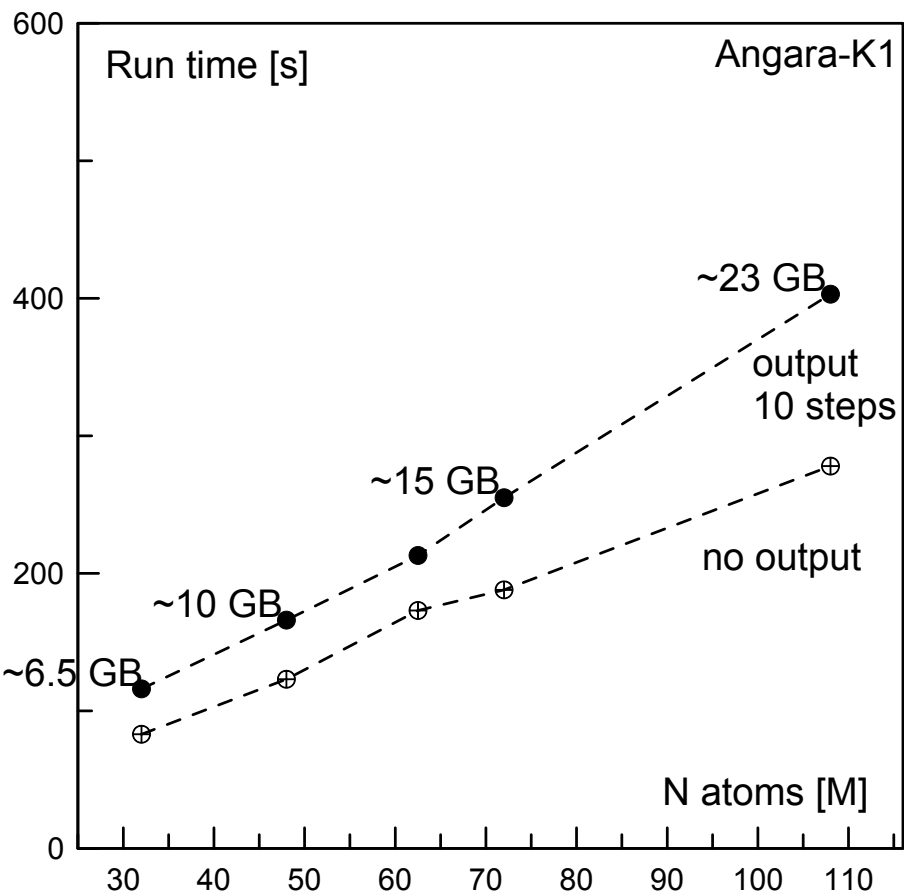
Варианты запусков:

1. Без вывода
2. Вывод без mpi-io
3. Вывод с mpi-io

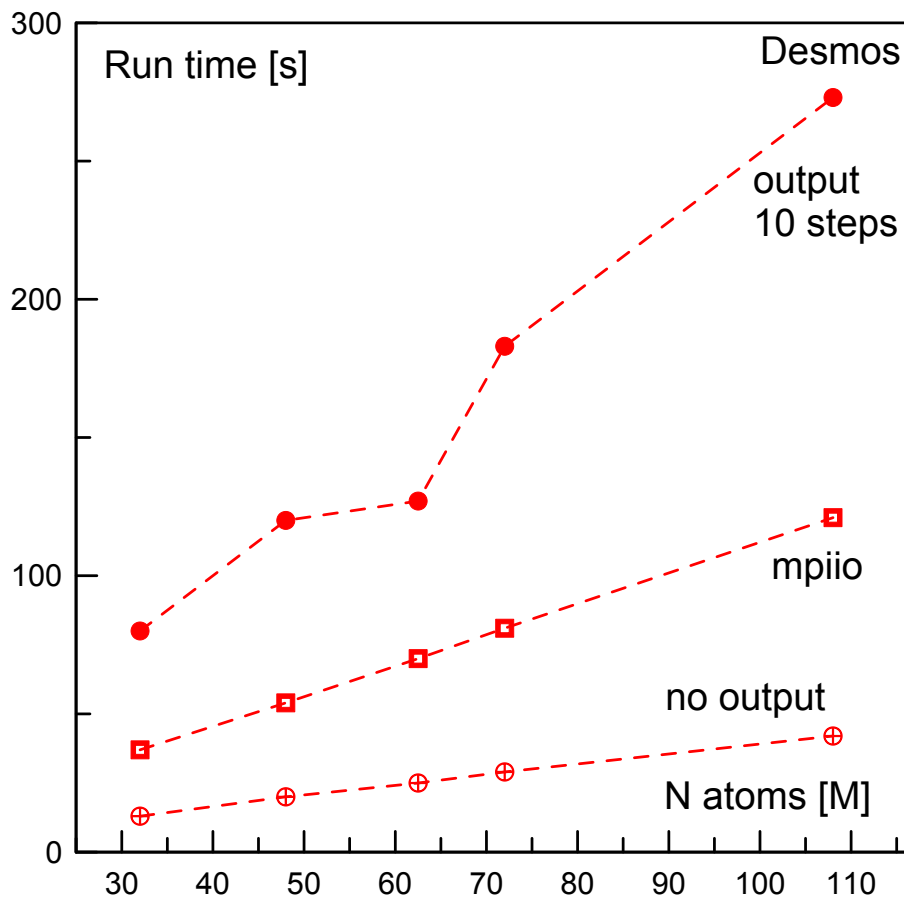
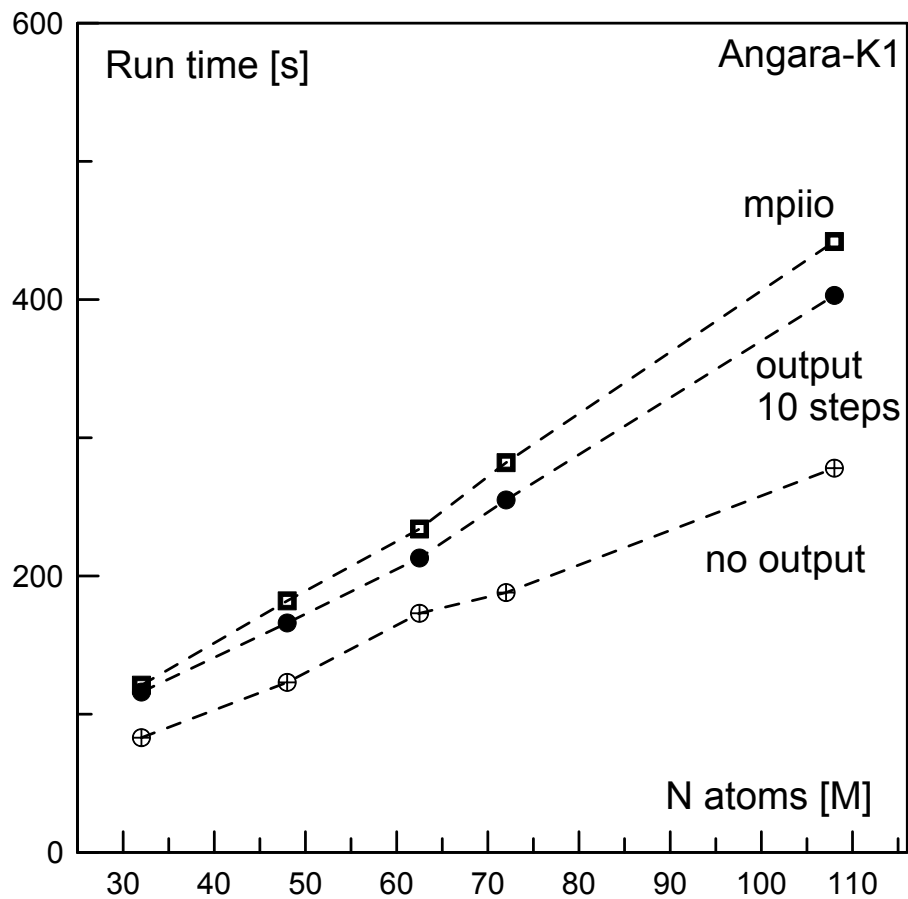
# Результаты тестов



# Результаты тестов



# Результаты тестов



### 3. Физическая задача для решения на суперкомпьютерах

# Актуальность

Интерес промышленности к свойствам углеводородов:

Изоляционные жидкости

Топливные смеси

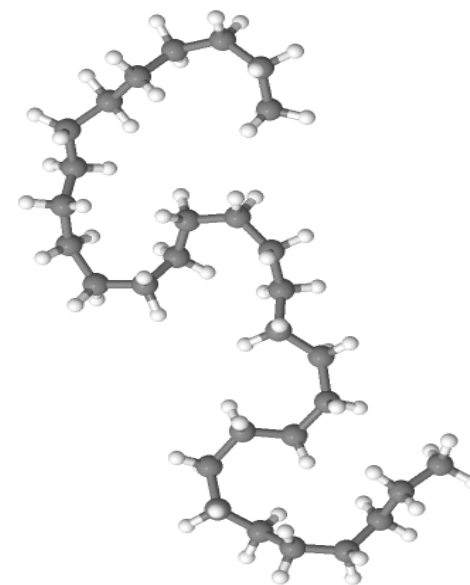
Смазочные материалы



Из микроструктуры - **макроскопические свойства**

## На что новое претендуем?

- Механизмы аномальной диффузии
- Эйнштейн-Смолуховский vs. Грин-Кубо
- Предсказательная способность моделей
- Учет квантовых эффектов в жидкости

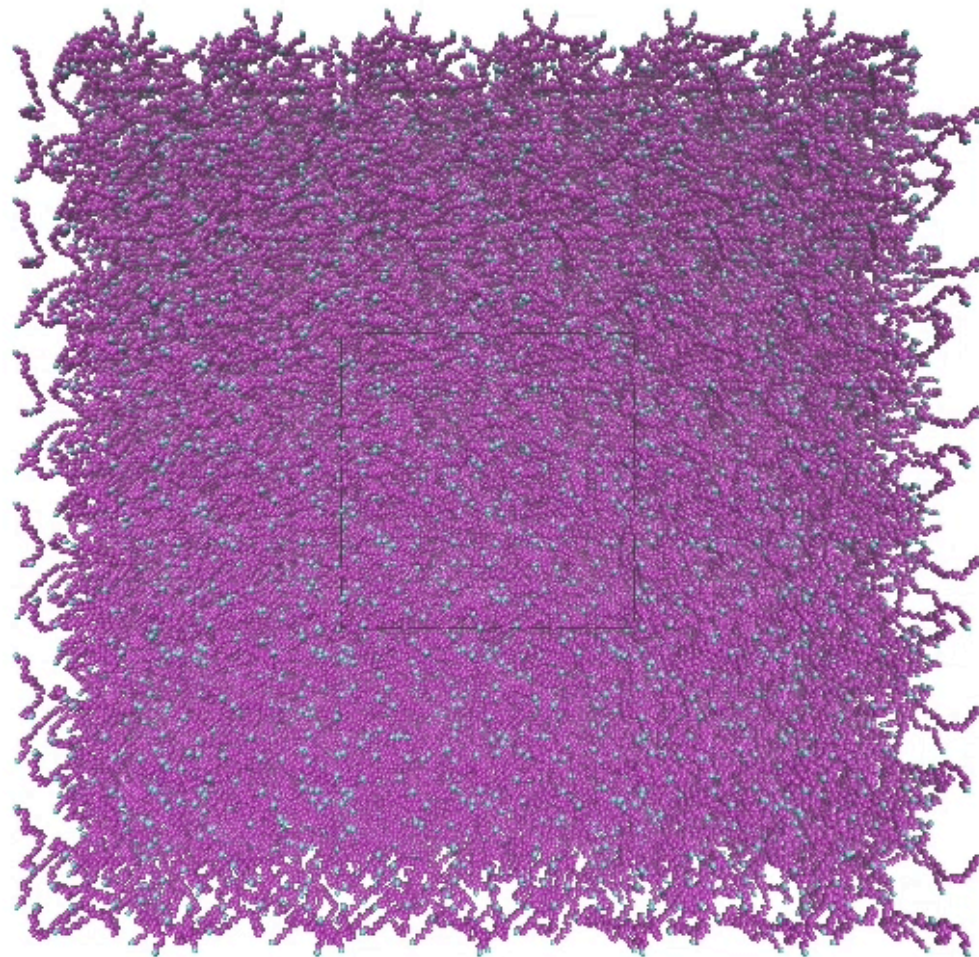


молекула *n*-триаконтана

# Система

Потенциал объединенного атома

- $\text{CH}_3$
- $\text{CH}_2$
- Центры масс

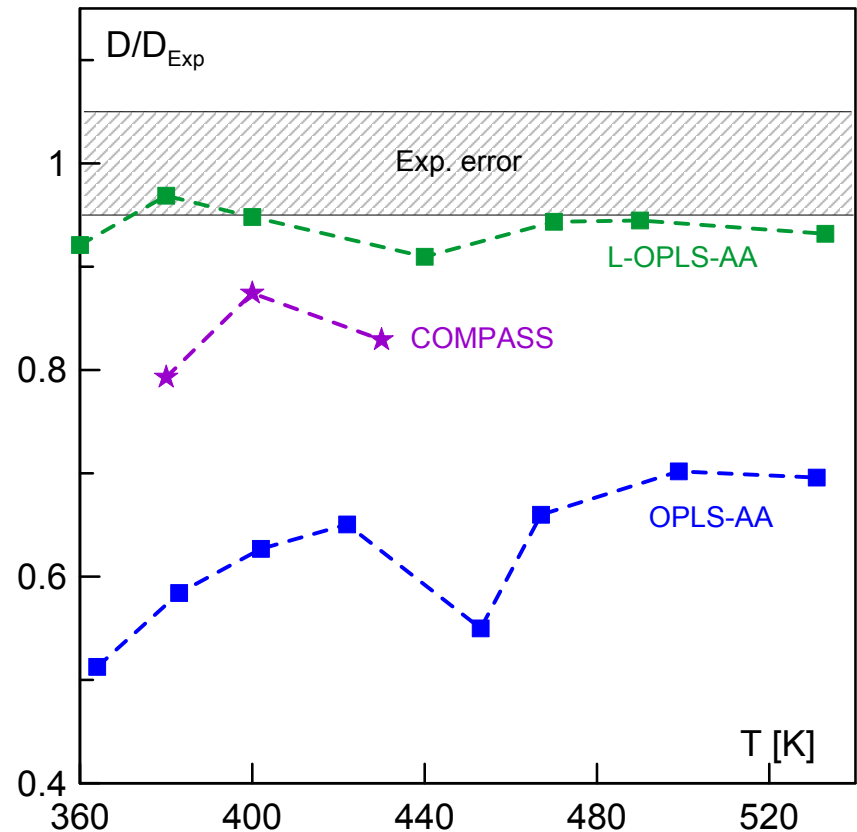
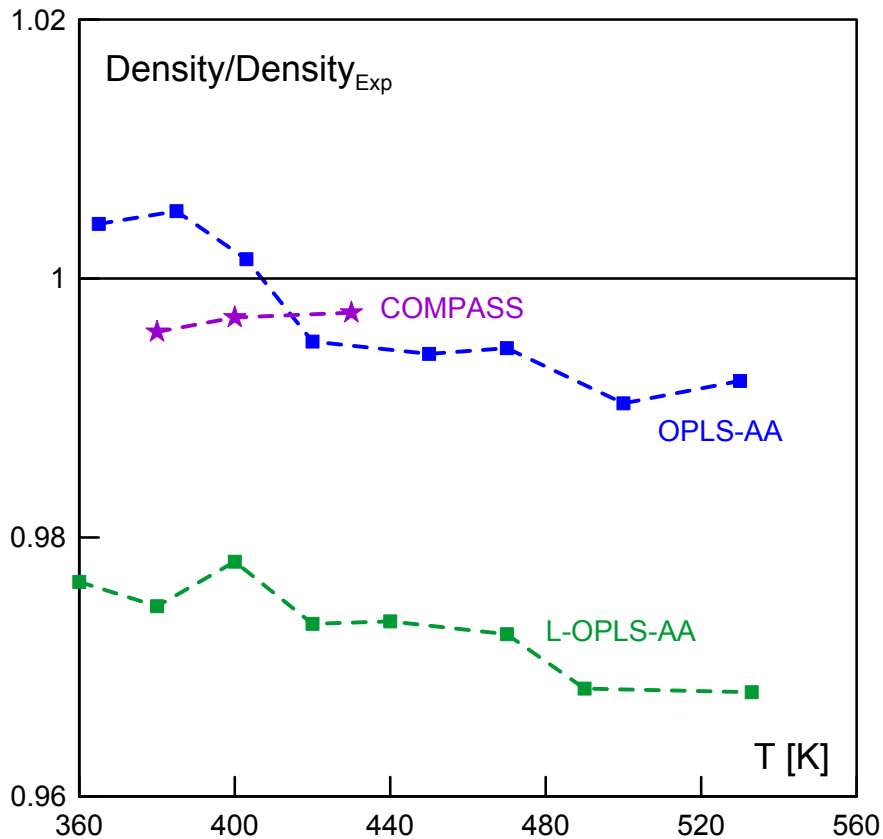


$P \sim 1 \text{ atm}$      $T = 360 \div 500 \text{ K}$

$L = 19.2 \text{ nm}$      $N = 800\text{k}$

\*LAMMPS

# Предсказательная способность



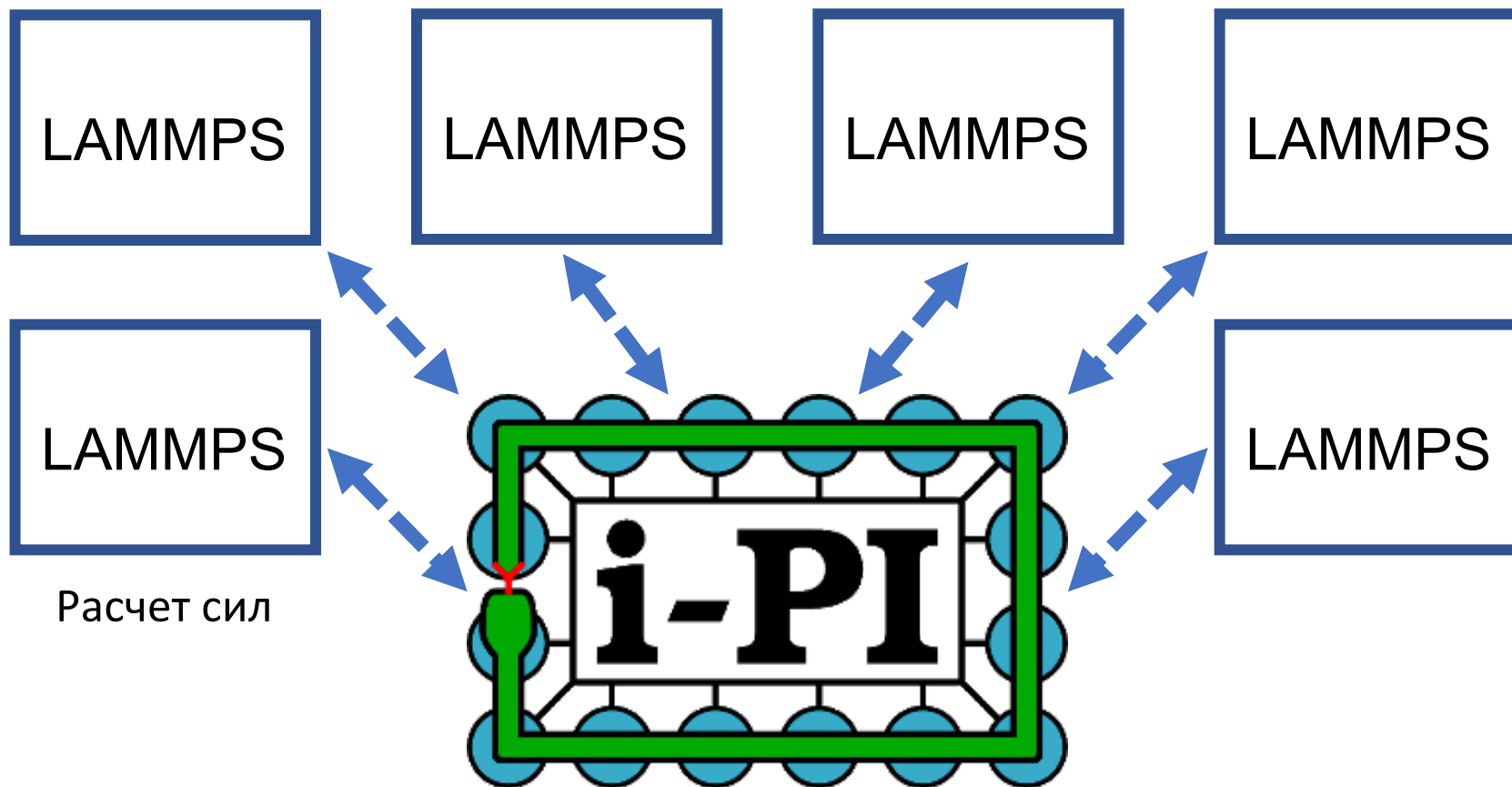
**COMPASS (модель класса 2): корректные** плотность и диффузия

\* В.М. Татаевский. Физико-химические свойства индивидуальных углеводородов. Москва: ГОСТОПТЕХИЗДАТ, 1960. 413 с.

\*\*T. Vardag, N. Karger, H.D. Lüdemann // Ber. Bunsenges. Phys. Chem. 1991. V. 95. N. 8. P. 859.



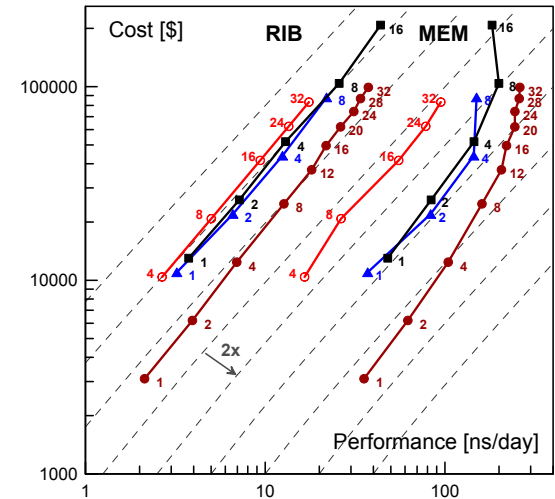
# Метод квантовой МД



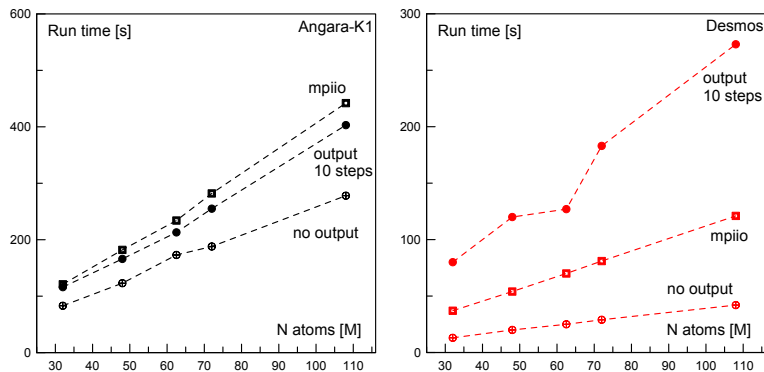
Квантовая молекулярная динамика  
Расчет свойств (энергия, давление, ...)

# Выводы

Классическая молекулярная динамика в GROMACS **считается эффективней** на суперкомпьютерах с GPU (**Desmos**), чем на распространенных суперкомпьютерах с Intel Xeon



БeeGFS **эффективно объединяет** диски на узлах **Desmos**. MPI-IO дает прирост скорости записи в LAMMPS на Desmos. На **Ангара-К1** прироста не наблюдается



МД расчет свойств углеводородов требует больших вычислительных ресурсов.  
**Квантовая МД** – в N раз больше

