



НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
УНИВЕРСИТЕТ

ТОНКАЯ НАСТРОЙКА СУПЕРКОМПЬЮТЕРА НИУ ВШЭ ДЛЯ РАБОТЫ ПОД ВЫСОКОЙ НАГРУЗКОЙ

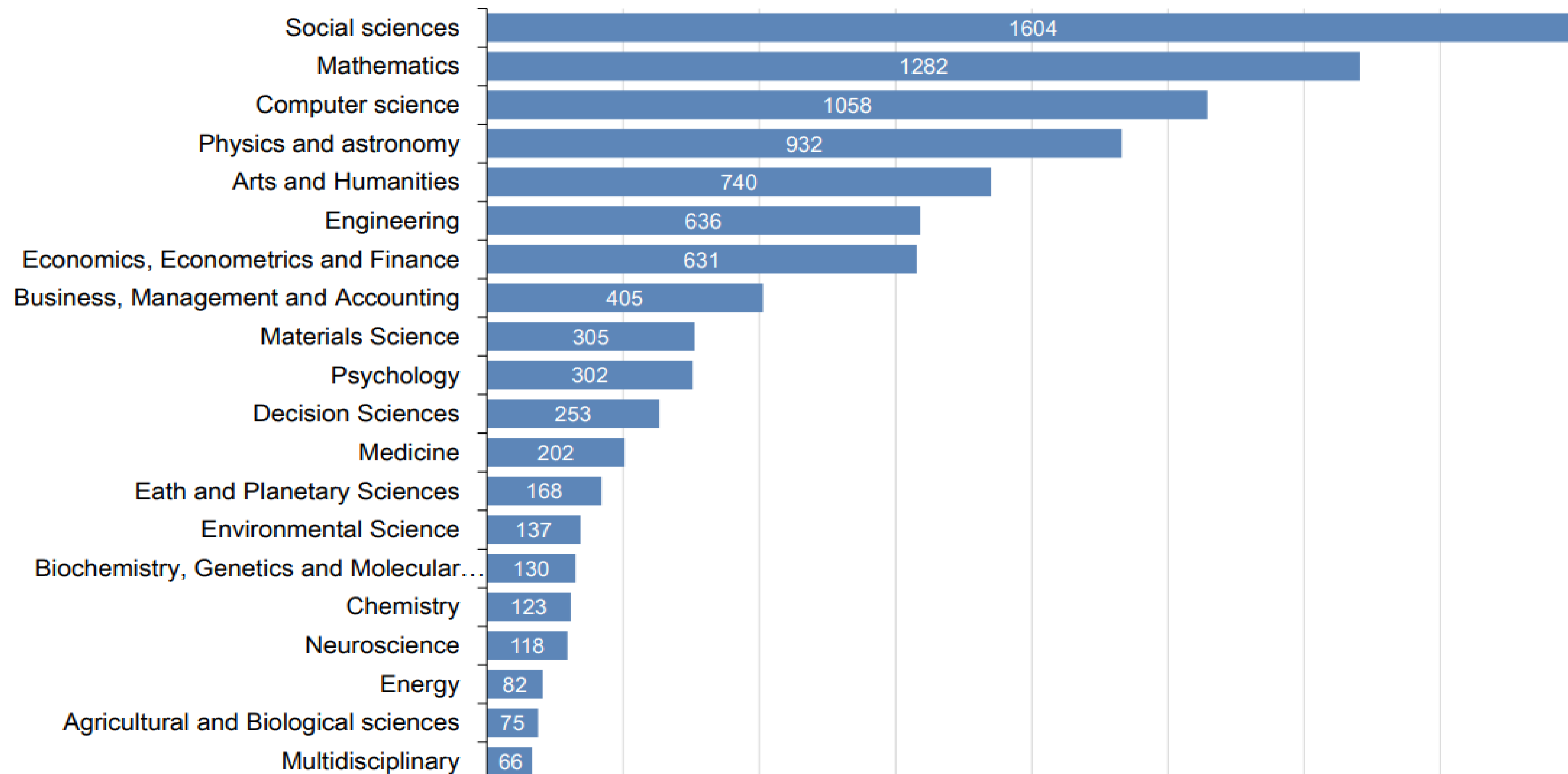
Начальник отдела суперкомпьютерного моделирования:
Костенецкий Павел Сергеевич, к.ф.-м.н., доцент,
ведущие инженеры ОСМ: Чулкевич Роман Андреевич и
Козырев Вячеслав Иванович.

Москва, 21.09.2020

Суперкомпьютерные дни в России 2020: Инструменты и технологии
обеспечения эффективной работы суперкомпьютерных центров



ПУБЛИКАЦИИ НИУ ВШЭ 2018-2019 ПО ОБЛАСТЯМ НАУКИ





ХАРАКТЕРИСТИКИ СУПЕРКОМПЬЮТЕРА НИУ ВШЭ

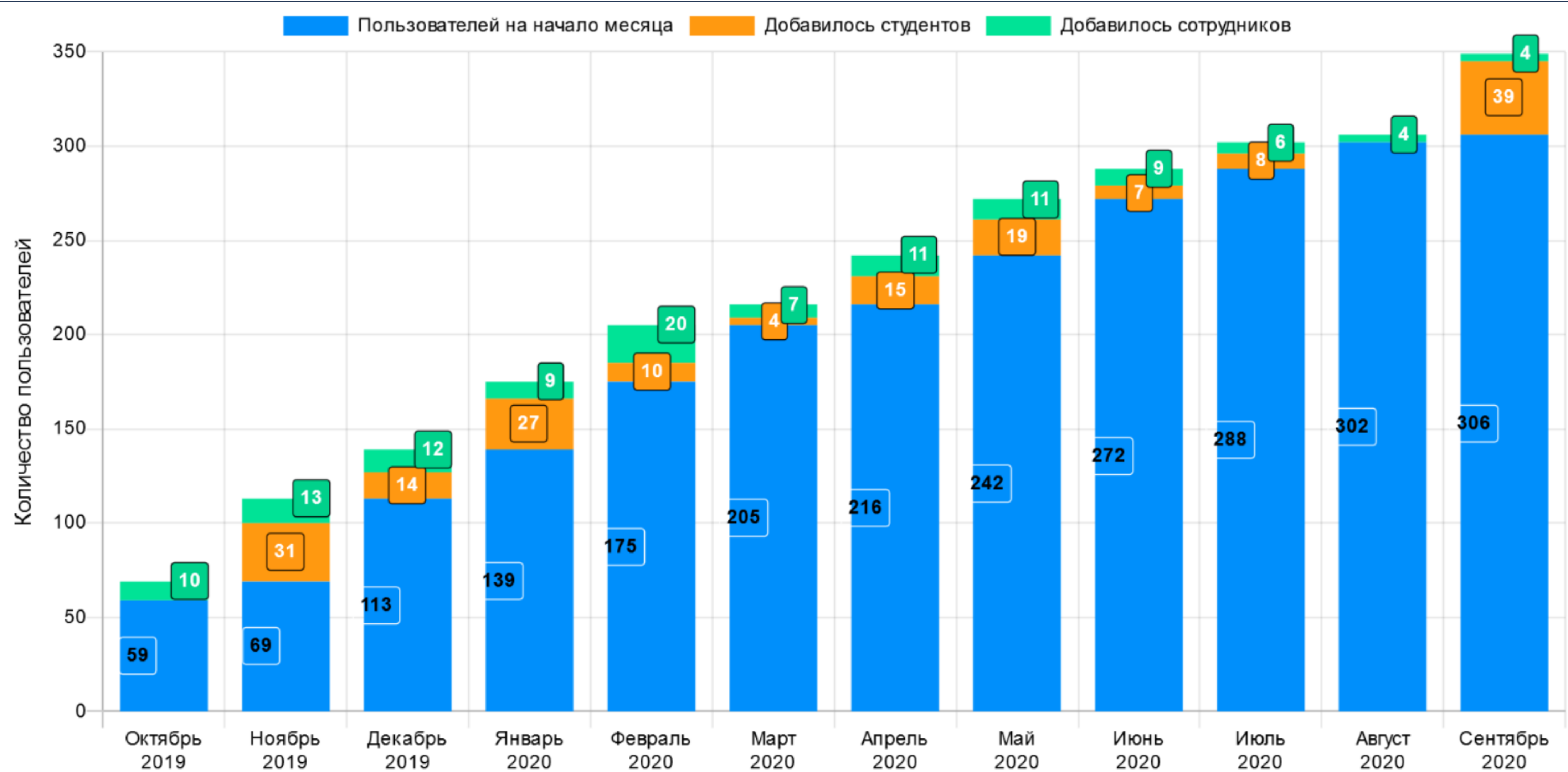
«HARISMA» (HSE ARTIFICIAL INTELLIGENCE AND SUPERCOMPUTER MODELLING)

- **7 место в ТОП 50 СНГ**
- Пиковая производительность: **912.4 Терафлопс**
- LINPACK-производительность: **568.5 Терафлопс**
- **26** вычислительных узлов
 - 10 узлов с **1,5 ТБ ОЗУ**
 - 16 узлов с **768 ГБ ОЗУ**
- **2** управляющих узла
- **104** графических процессора **NVIDIA Tesla V100 32 ГБ**
- **56** центральных процессоров **Intel Xeon Gold 6152**
- Оперативная память: **27.7 ТБ**
- Дисковая память: **885 ТБ**
 - параллельная СХД на базе Lustre: **840 ТБ**
 - SSD в узлах: **2x240 ГБ** в RAID1
 - SSD в управляющих узлах: **20x1,7 ТБ**
- Коммуникационная сеть: **InfiniBand EDR**
(**2x100 Гбит/с**, топология **Fat Tree**)





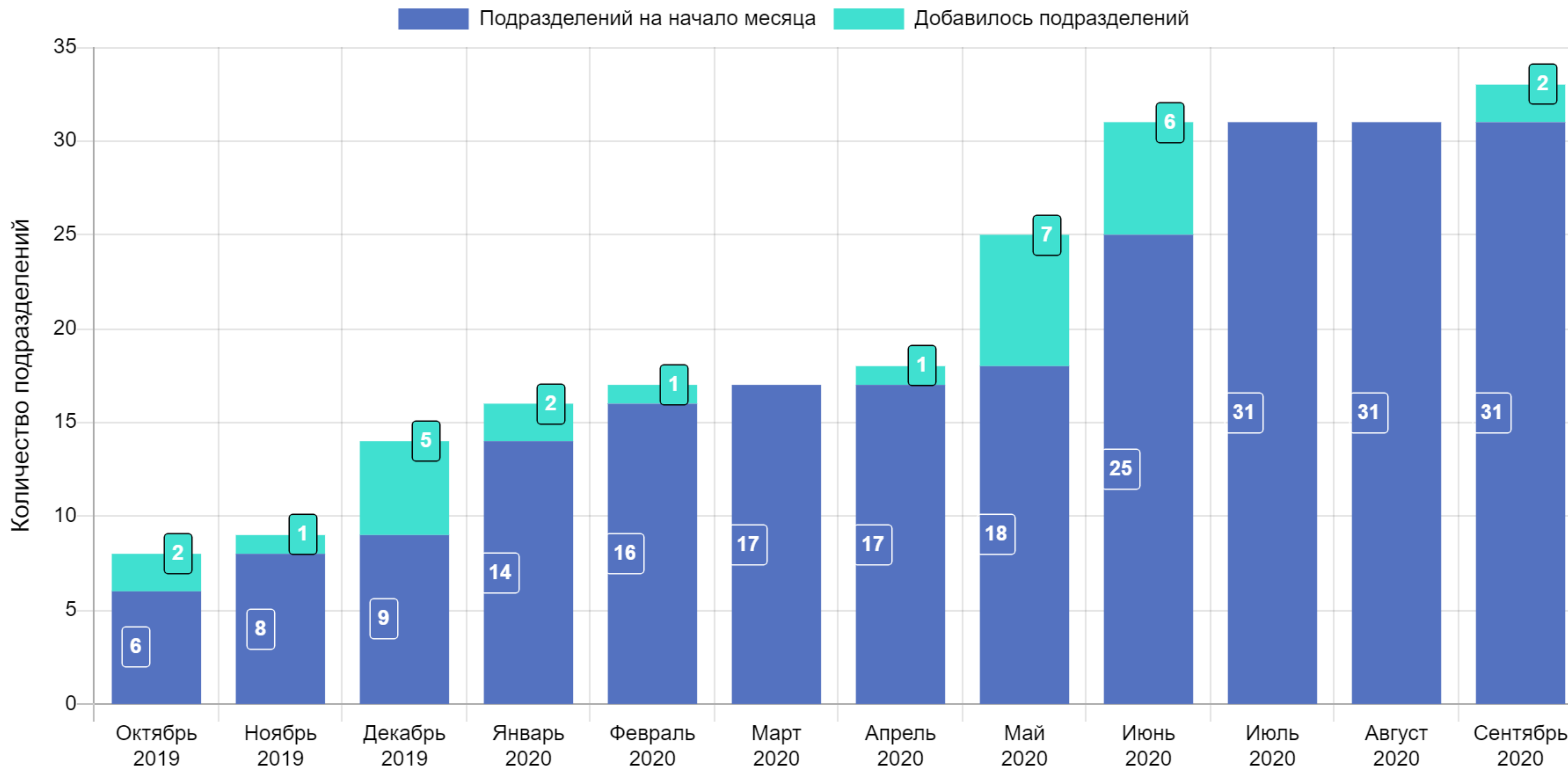
ПРИРОСТ КОЛИЧЕСТВА ПОЛЬЗОВАТЕЛЕЙ



На 15 сентября 2020 г.: **348** пользователей (175 сотрудников, 173 студента)



ПРИРОСТ КОЛИЧЕСТВА ПОДРАЗДЕЛЕНИЙ



На 15 сентября 2020 г.: **33** подразделения

на 15.09.2020



СПИСОК ПОДРАЗДЕЛЕНИЙ-ПОЛЬЗОВАТЕЛЕЙ

Факультет компьютерных наук

1. Департамент анализа данных и искусственного интеллекта
2. Департамент больших данных и информационного поиска
3. Кафедра Яндекс ФКН
4. Лаборатория моделирования и управления сложными системами
5. Лаборатория Самсунг-ВШЭ
6. Международная лаборатория Стохастических алгоритмов и анализа многомерных данных
7. Международная лаборатория алгебраической топологии и ее приложений
8. Научно-учебная лаборатория методов анализа больших данных
9. Научно-учебная лаборатория моделей и методов вычислительной прагматики
10. Центр глубинного обучения и байесовских методов

Московский институт электроники и математики им. А.Н. Тихонова НИУ ВШЭ

1. Департамент прикладной математики
2. Международная лаборатория статистической и вычислительной геномики
3. Научно-учебная лаборатория телекоммуникационных систем

Филиал в Санкт-Петербурге

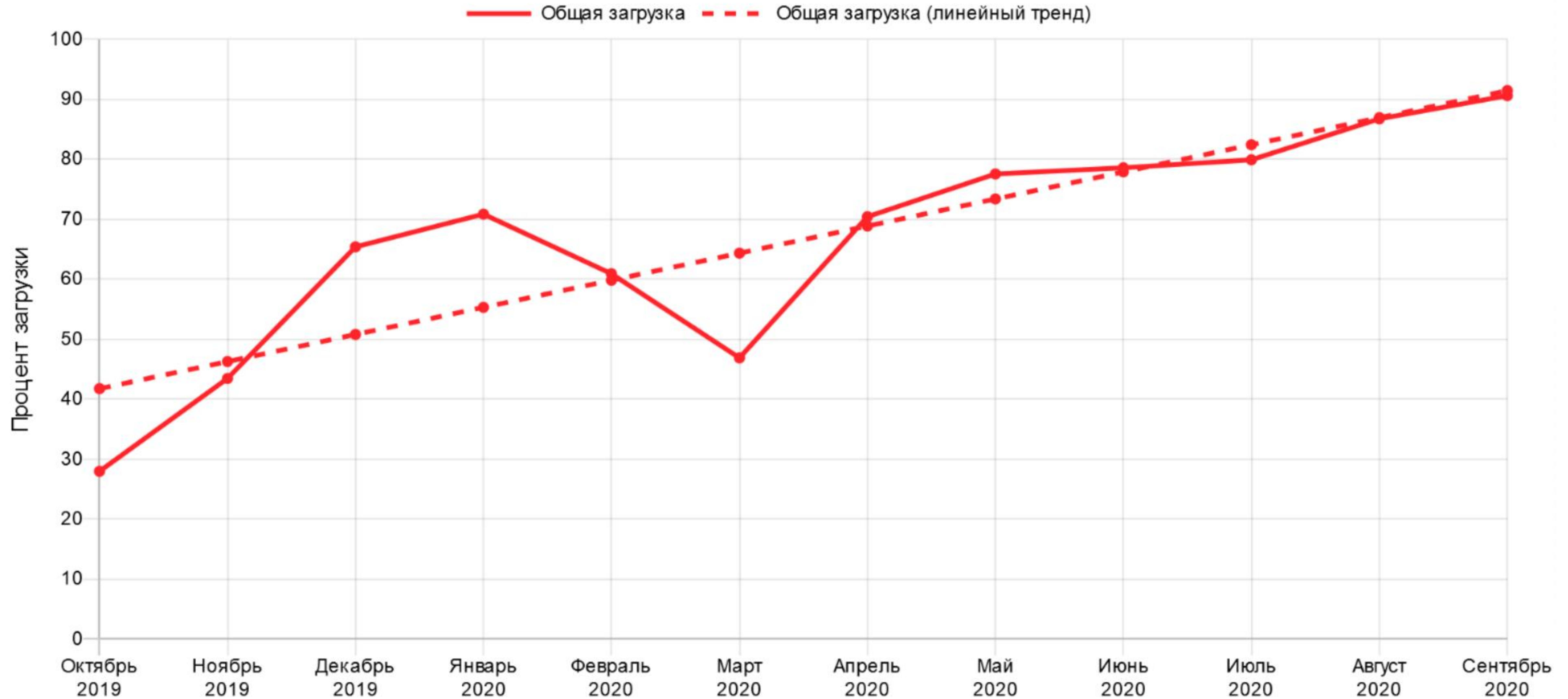
1. Лаборатория социальной и когнитивной информатики
2. Международная лаборатория теории игр и принятия решений
3. Центр анализа данных и машинного обучения

Другие подразделения

1. Базовая кафедра элементоорганической химии ИНЭОС РАН ФХ
2. Высшая школа бизнеса
3. Департамент статистики и анализа данных
4. Институт когнитивных нейронаук
5. Институт статистических исследований и экономики знаний
6. Кафедра инноваций и бизнеса в сфере информационных технологий ШБИ
7. Лаборатория сравнительных исследований массового сознания ЭИ
8. Международная лаборатория социальной нейробиологии
9. Международная лаборатория Суперкомпьютерного атомистического моделирования и многомасштабного анализа
10. Международная лаборатория физики конденсированного состояния
11. Отдел суперкомпьютерного моделирования
12. Факультет гуманитарных наук
13. Факультет информатики, математики и компьютерных наук
Нижний Новгород
14. Факультет физики
15. Центр псиометрики и измерений в образовании
16. Центр Сколтеха по научным и инженерным вычислительным технологиям для задач с большими массивами данных
17. Центр языка и мозга

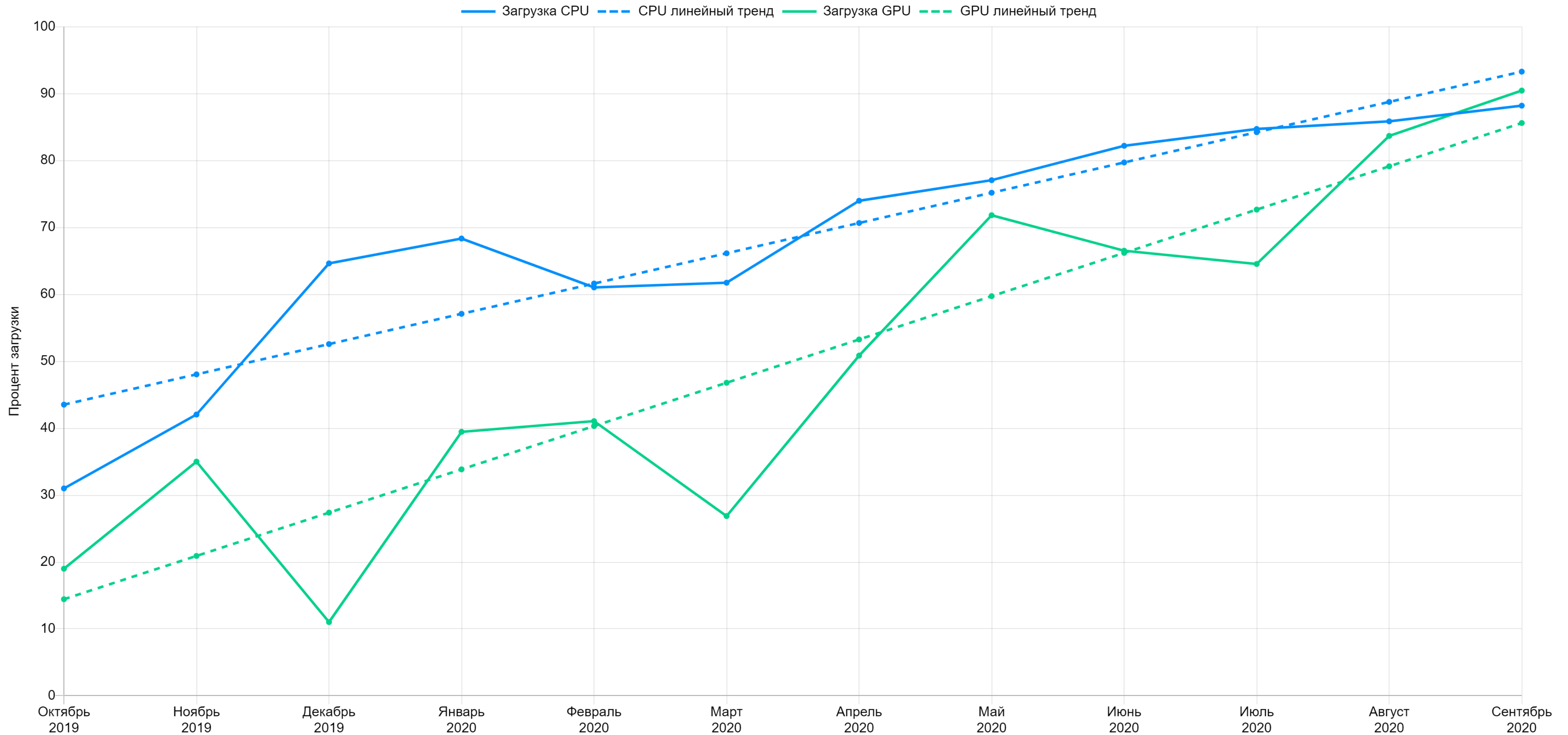


РОСТ ЗАГРУЗКИ СУПЕРКОМПЬЮТЕРА (ОБЩАЯ)





РОСТ ЗАГРУЗКИ СУПЕРКОМПЬЮТЕРА (CPU/GPU)

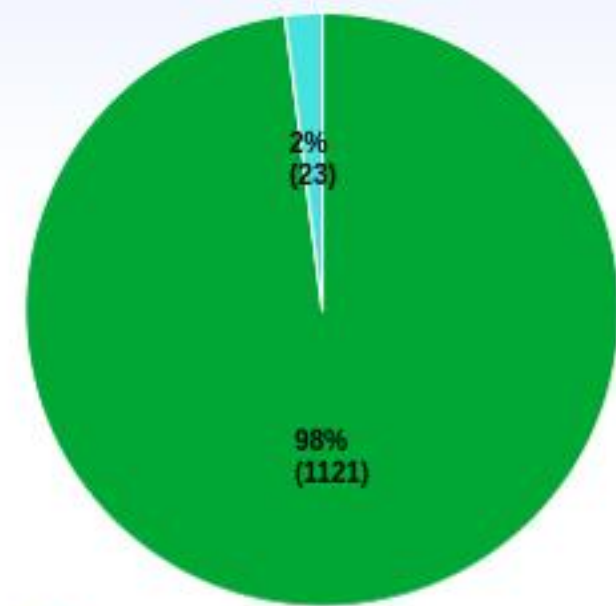




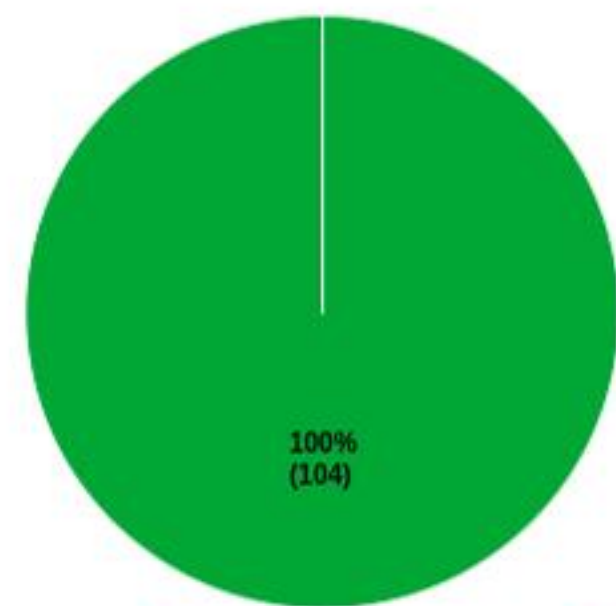
СОБСТВЕННАЯ СИСТЕМА МОНИТОРИНГА

Загрузка суперкомпьютерного комплекса НИУ ВШЭ

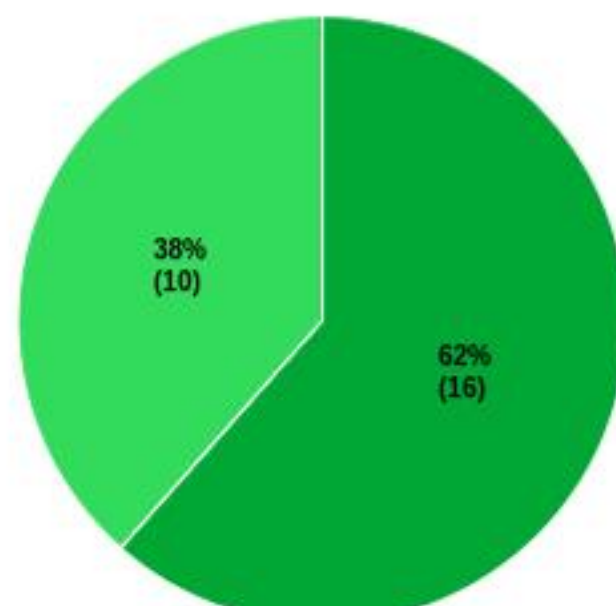
11:07:11



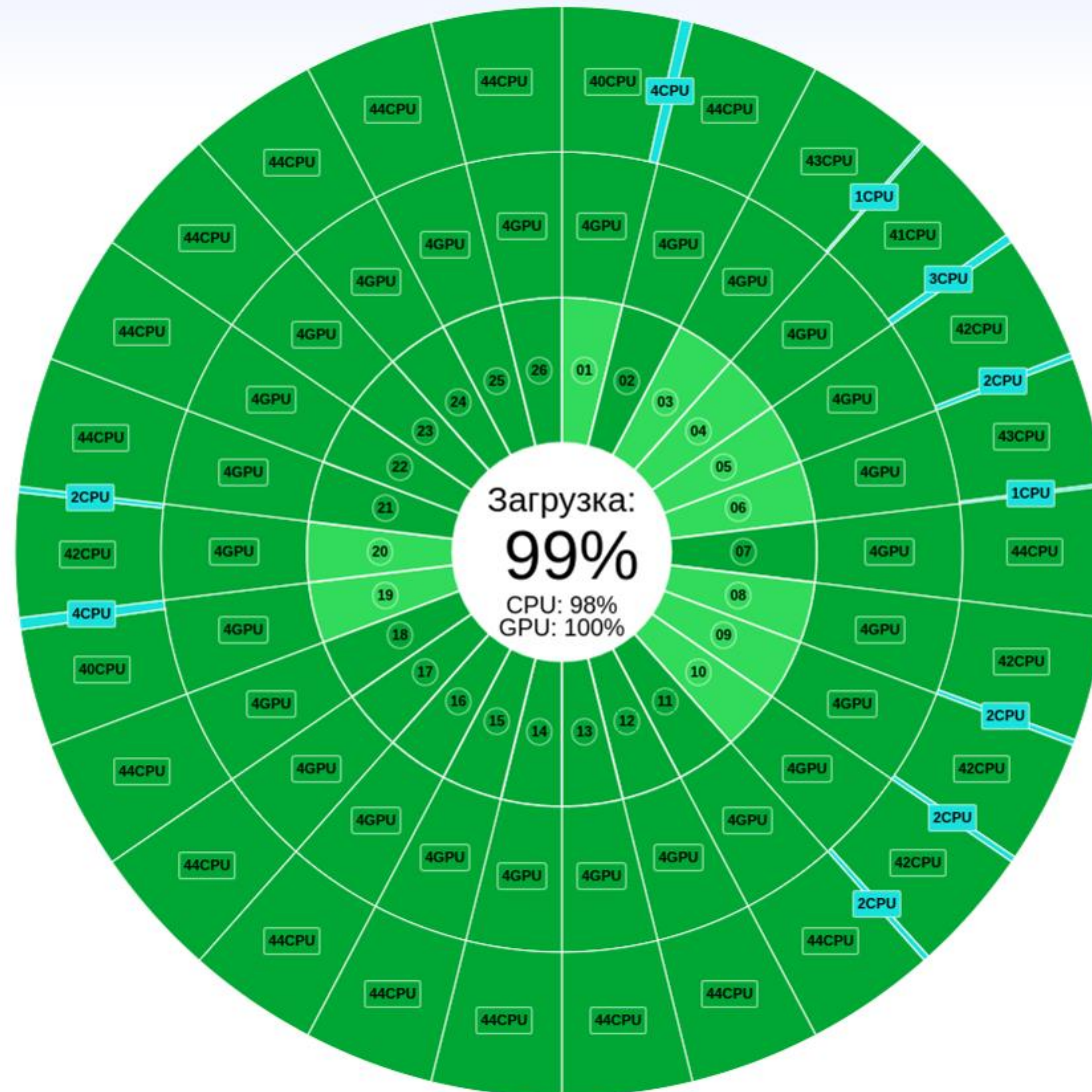
● CPU занято ● CPU свободно



● GPU используется ● GPU заблокировано ● GPU свободно



● Узлов занято ● Узлов частично занято ● Узлов свободно
● Узлов зарезервировано



● Занят ● Частично занят ● Заблокирован ● Свободен ● В резервации ● Отключен

Сейчас считают 22 чел.:



■ Загрузка CPU ■ Загрузка GPU



ОПТИМИЗАЦИЯ СИСТЕМЫ ОХЛАЖДЕНИЯ

Установки	Узел	CPU		GPU				Температура воздуха		FAN	Электропотребление	
		имя	1	2	1	2	3	4	вход	выход	PWN	Вт*ч
Скорость вращения вентиляторов: <input type="text" value="50"/> %												Σ 19 786
Максимальная t на выходе: <input type="text" value="40"/> °	cn-001	51	61	34	34	34	34	16	36	60%	676	
АРС ИБП Заряд батарей: 100% Время на батареях: 134 мин. Напряжение на входе: 393 В Нагрузка: 36620 Вт (22%)	cn-002	59	62	31	31	31	31	16	38	62%	806	
	cn-003	58	60	31	31	31	31	17	38	68%	832	
	cn-004	57	63	25	25	25	25	16	38	64%	806	
	cn-005	54	53	31	31	31	31	18	38	61%	624	
	cn-006	50	62	30	30	30	30	18	37	61%	676	

Проведена оптимизация системы охлаждения вычислительных узлов

- Вычислительные узлы разнесены по разным стойкам и позициям.
- Определены оптимальные параметры скорости вращения вентиляторов
- Задана пониженная целевая температура на выходе из узла и запрещено понижение скорости вращения вентиляторов ниже 50%.

Результат: процессоры и GPU-ускорители работают на максимальной скорости.



НОВАЯ СИСТЕМА ОЧЕРЕДЕЙ ЗАДАЧ

На суперкомпьютере установлена система очередей задач SLURM 19.05.05, с октября планируется переход к версии 20.02

Что позволяет v. 19.05.05:

- 1) Возможность планирования GPU-ресурсов подобно ядрам CPU;
- 2) Возможность учитывать архитектурные особенности вычислительных узлов;
- 3) Возможность движения в сторону выделения процессов на GPU (а не целиком);
- 4) Возможность корректного запуска нескольких задач из разных разделов очереди на 1 узле.

Особенности использования

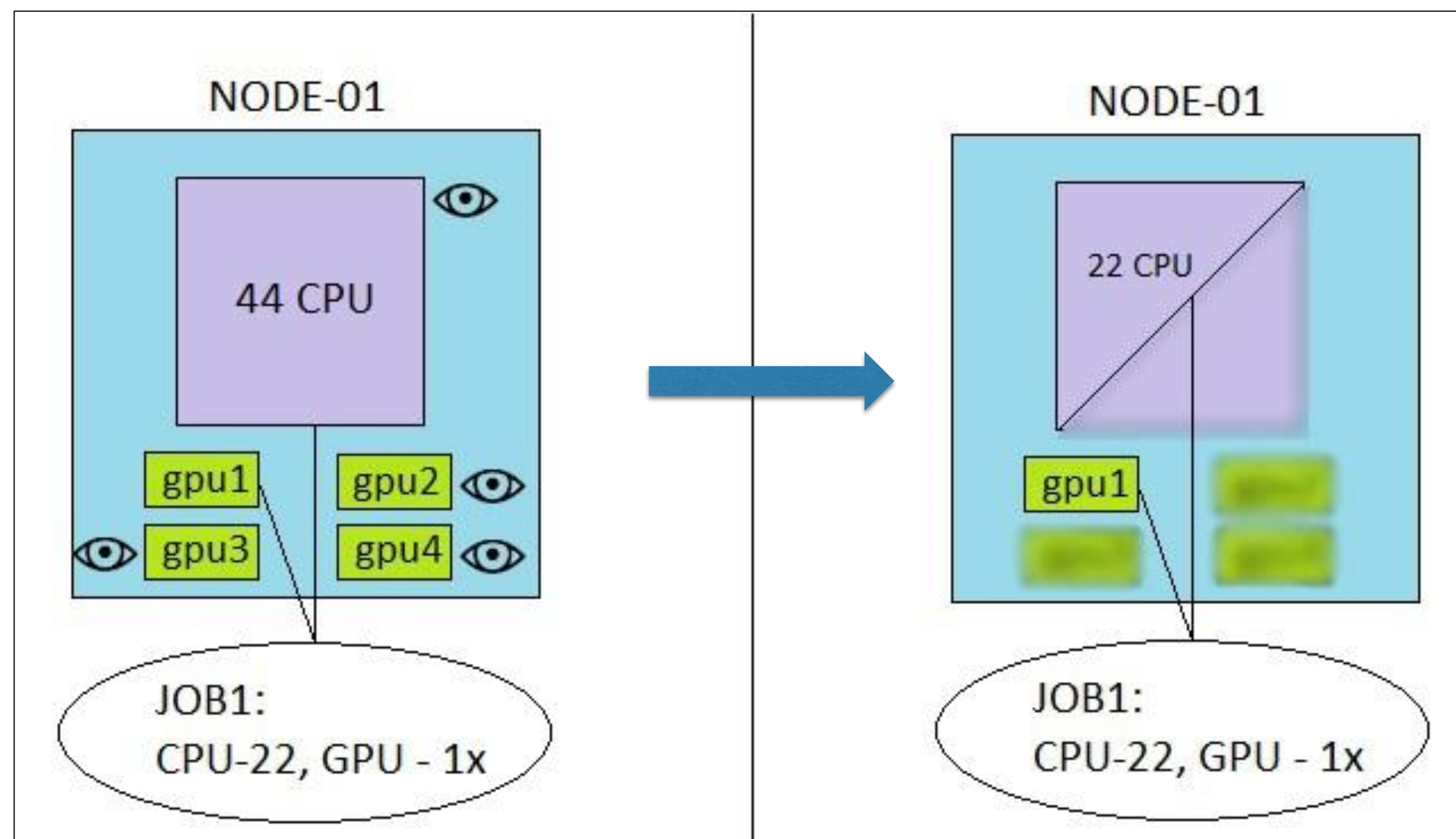
- 1) Больше нет необходимости в обязательном порядке указывать флаг `--gres`;
- 2) Новые флаги для постановки задач:
 - `--gpus` (или `-G`) – количество GPU для задачи;
 - `--gpus-per-node` – количество GPU на каждый выделяемый узел;
 - `--gpus-per-task` – количество GPU на каждый процесс;
 - `--cpus-per-gpu` – количество CPU на каждый выделенный GPU;
- 3) Использованию флага «`-s`» или «`--oversubscribe`» больше не рекомендуется.
- 4) Удалены все очереди кроме *normal*. Запрос GPU производится в обычной очереди.



ОПТИМИЗАЦИЯ СИСТЕМЫ ОЧЕРЕДЕЙ

1. Защита ресурсов от неправомерного/случайного использования: **cgroup**

- *проблема*: по умолчанию, запрошенные ресурсы ограничиваются лишь переменными окружения, которые можно модифицировать и задействовать «чужие» ресурсы;
- Результат: только выделенные ресурсы могут быть задействованы, остальные «физически» не видны.

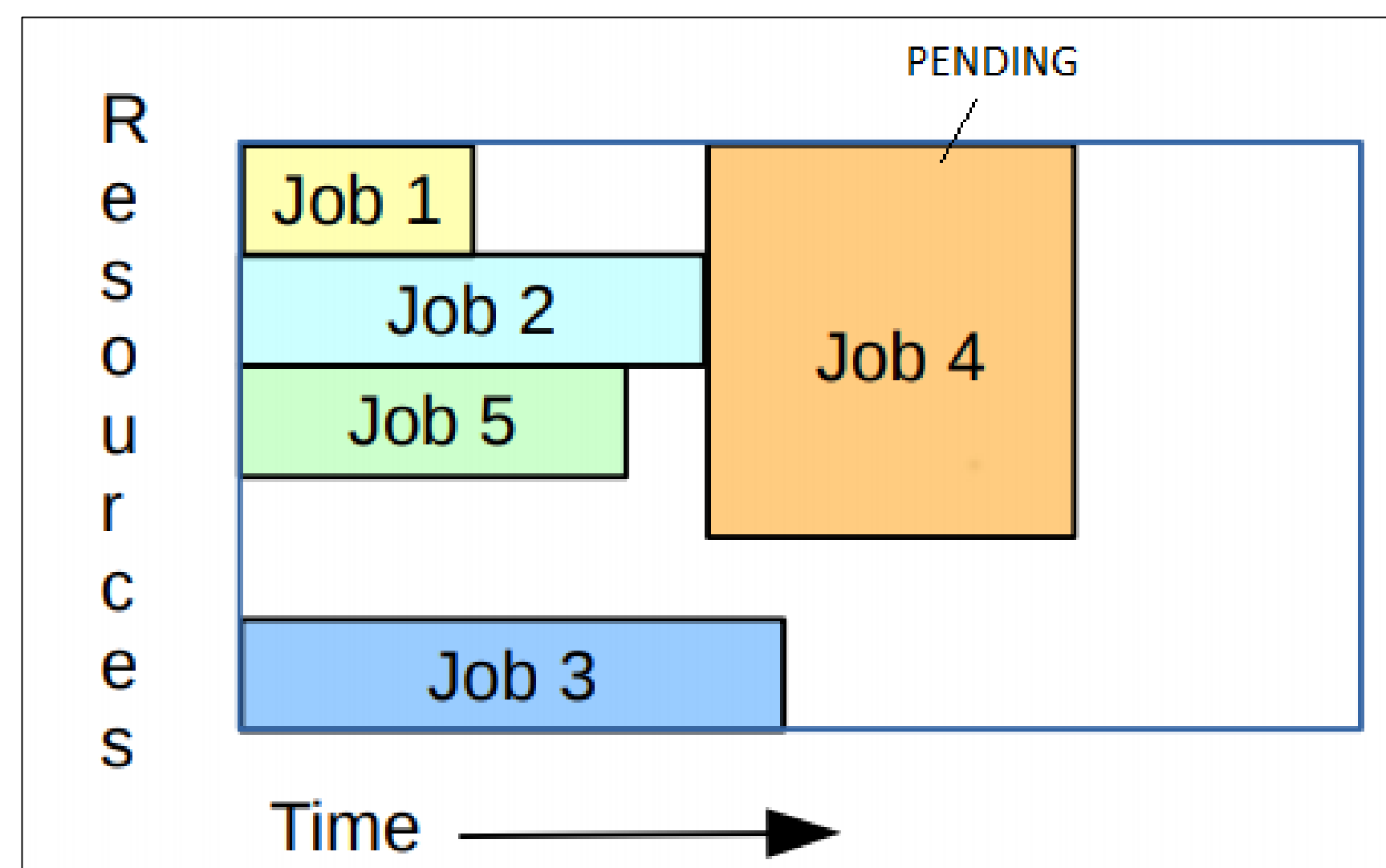
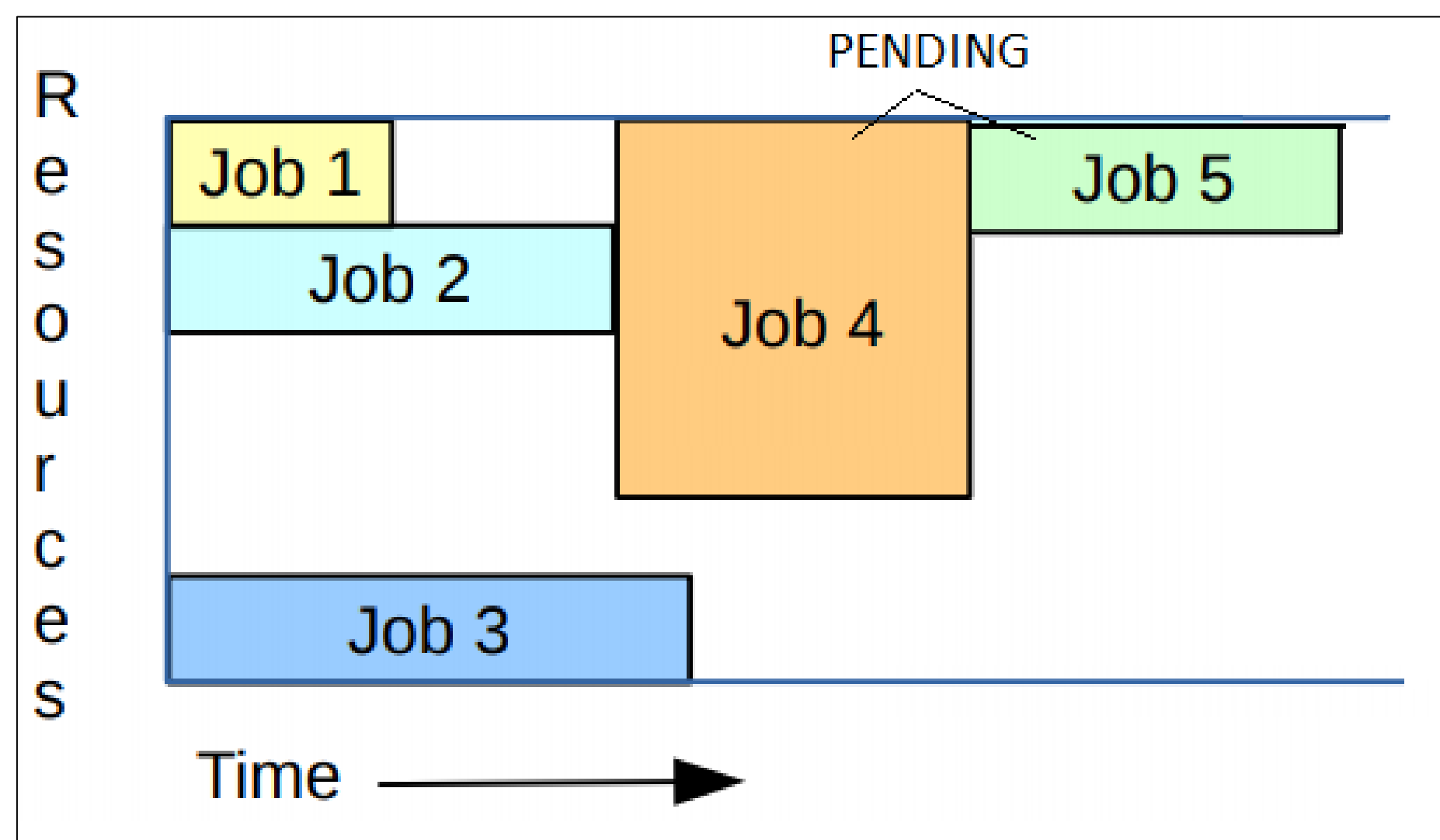




ОПТИМИЗАЦИЯ СИСТЕМЫ ОЧЕРЕДЕЙ

2. Приоритеты задач: **priority/multifactor**

- *проблема*: по умолчанию, приоритеты формируются по типу *FIFO*, что не позволяет честно распределять ресурсы между пользователями, в случае *multifactor* учитывается: размер задачи, требуемое время, время ожидания, QOS, текущее использование и т.п.;
- Результат: большее количество пользователей могут выполнять расчеты одновременно.



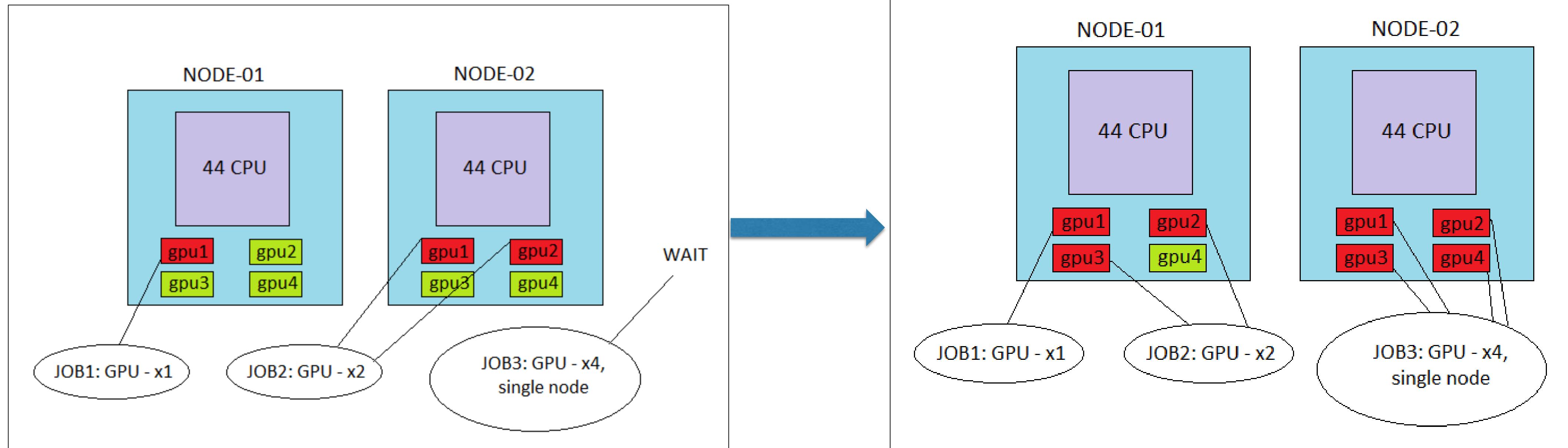
- User1: job1, job2, job3, job4
- User2: job5



ОПТИМИЗАЦИЯ СИСТЕМЫ ОЧЕРЕДЕЙ

3. Группировка задач на ресурсах: `sched/backfill` + `pack_serial_at_end`

- *проблема*: высокая фрагментация задач увеличивает время ожидания больших задач и создает простой ресурсов;
- Результат: улучшенная группировка задач.

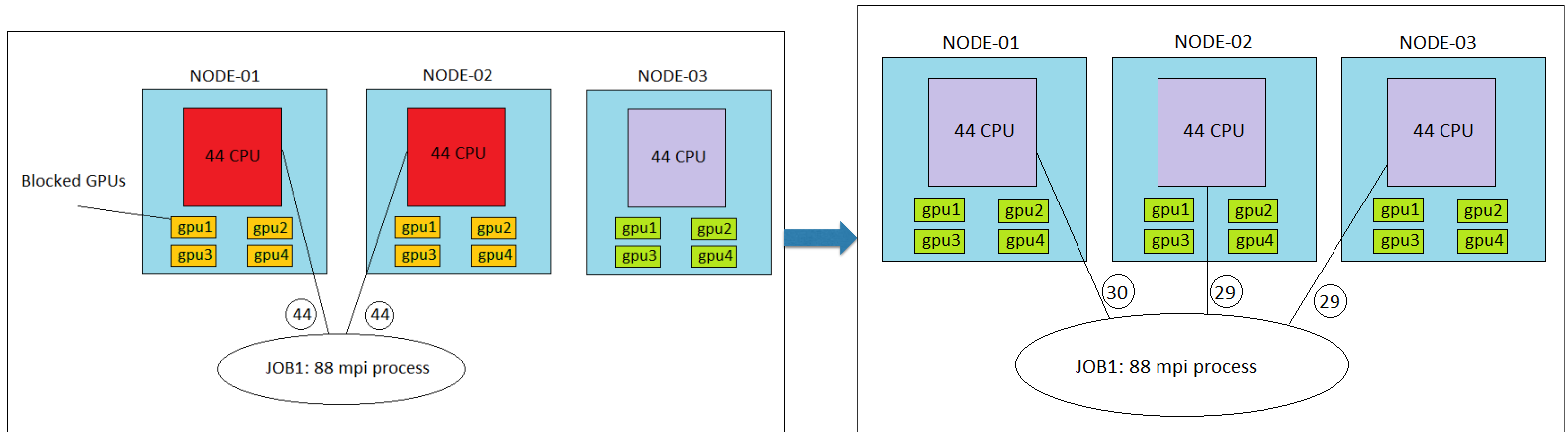




ОПТИМИЗАЦИЯ СИСТЕМЫ ОЧЕРЕДЕЙ

4. Реализация собственного плагина

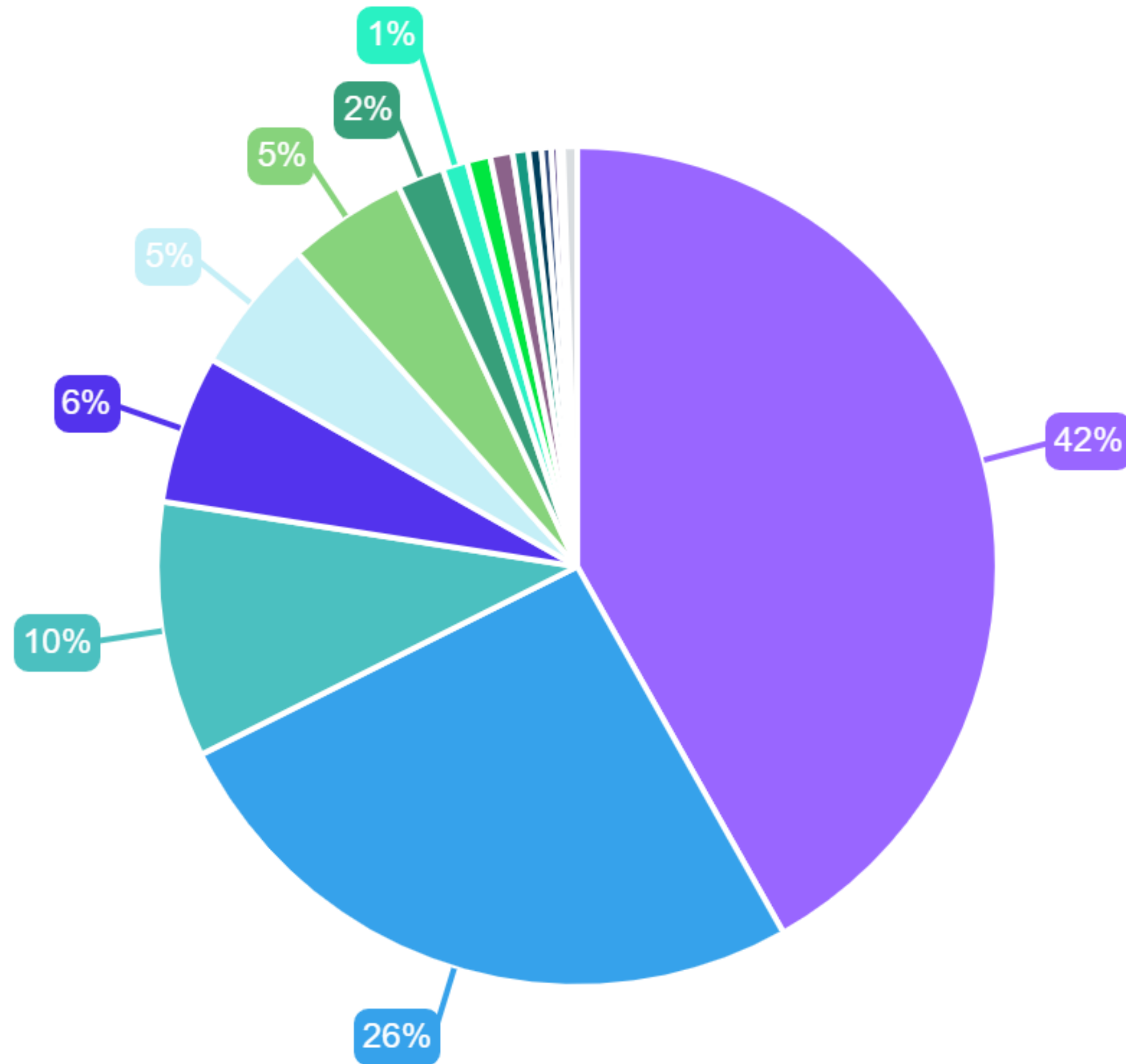
- *проблема*: задачи, занимающие все CPU-узлов, блокируют GPU;
- Результат: уменьшение количества ситуаций блокировки GPU.



При появлении задачи, которая может заблокировать GPU на узле, плагин меняет параметры запрошенных ресурсов, чтобы избежать блокировки.



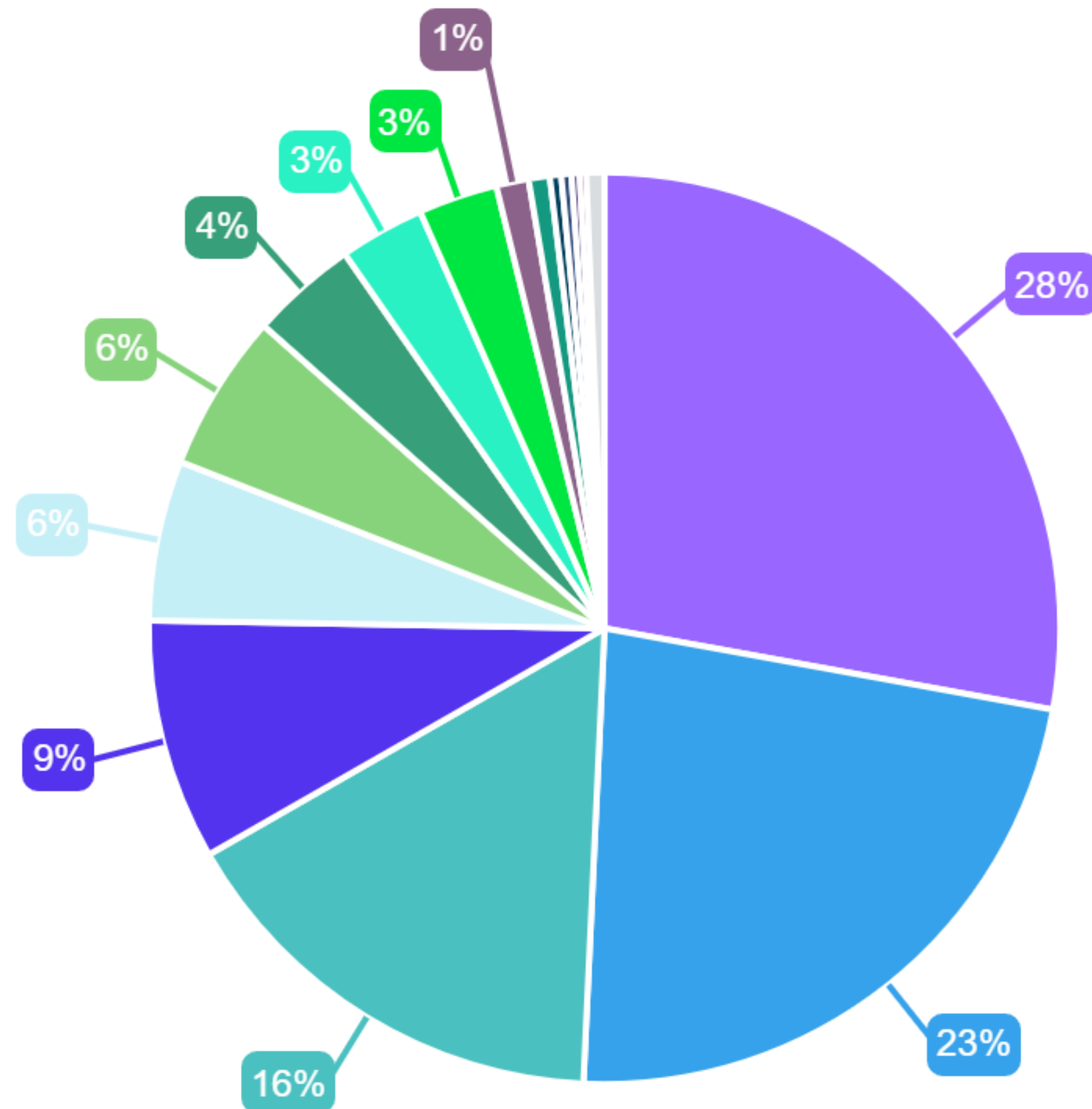
ЗАГРУЗКА ЦЕНТРАЛЬНЫХ ПРОЦЕССОРОВ ПОДРАЗДЕЛЕНИЯМИ TOP-15



- Международная лаборатория Суперкомпьютерного атомистического моделирования и многомасштабного анализа (41.84%)
- Департамент прикладной математики МИЭМ (25.78%)
- Центр глубокого обучения и байесовских методов ФКН (9.86%)
- Международная лаборатория теории игр и принятия решений СПб школа экономики и менеджмента (5.73%)
- Департамент больших данных и информационного поиска ФКН (5.20%)
- Центр анализа данных и машинного обучения СПб школа физико-математических и компьютерных наук (4.60%)
- Департамент анализа данных и искусственного интеллекта ФКН (1.80%)
- Научно-учебная лаборатория моделей и методов вычислительной прагматики ФКН (0.96%)
- Международная лаборатория Стохастических алгоритмов и анализа многомерных данных ФКН (0.90%)
- Лаборатория Самсунг-ВШЭ ФКН (0.86%)
- Научно-учебная лаборатория методов анализа больших данных ФКН (0.61%)
- Лаборатория социальной и когнитивной информатики СПб школа социальных наук и востоковедения (0.50%)
- Международная лаборатория физики конденсированного состояния (0.37%)
- Факультет информатики, математики и компьютерных наук Нижний Новгород (0.28%)
- Институт когнитивных нейронаук (0.17%)
- Остальные (0.54%)



ЗАГРУЗКА ГРАФИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОРОВ ПОДРАЗДЕЛЕНИЯМИ TOP-15



- Центр глубинного обучения и байесовских методов ФКН (27.85%)
- Международная лаборатория Суперкомпьютерного атомистического моделирования и многомасштабного анализа (22.88%)
- Департамент больших данных и информационного поиска ФКН (15.99%)
- Центр анализа данных и машинного обучения СПб школа физико-математических и компьютерных наук (8.54%)
- Международная лаборатория теории игр и принятия решений СПб школа экономики и менеджмента (5.68%)
- Научно-учебная лаборатория моделей и методов вычислительной прагматики ФКН (5.60%)
- Лаборатория Самсунг-ВШЭ ФКН (3.79%)
- Департамент прикладной математики МИЭМ (3.02%)
- Научно-учебная лаборатория методов анализа больших данных ФКН (2.81%)
- Институт статистических исследований и экономики знаний (1.15%)
- Факультет информатики, математики и компьютерных наук Нижний Новгород (0.75%)
- Факультет компьютерных наук (0.40%)
- Лаборатория социальной и когнитивной информатики СПб школа социальных наук и востоковедения (0.36%)
- Институт когнитивных нейронаук (0.29%)
- Лаборатория сравнительных исследований массового сознания ЭИ (0.23%)
- Остальные (0.64%)

Атомистическое и континуальное моделирование в задачах физики

Заказчики:

Программа фундаментальных исследований НИУ ВШЭ

Исполнитель:

Международная лаборатория суперкомпьютерного атомистического моделирования и многомасштабного анализа, НИУ ВШЭ

руководитель проекта: В.В. Писарев

Цель исследования:

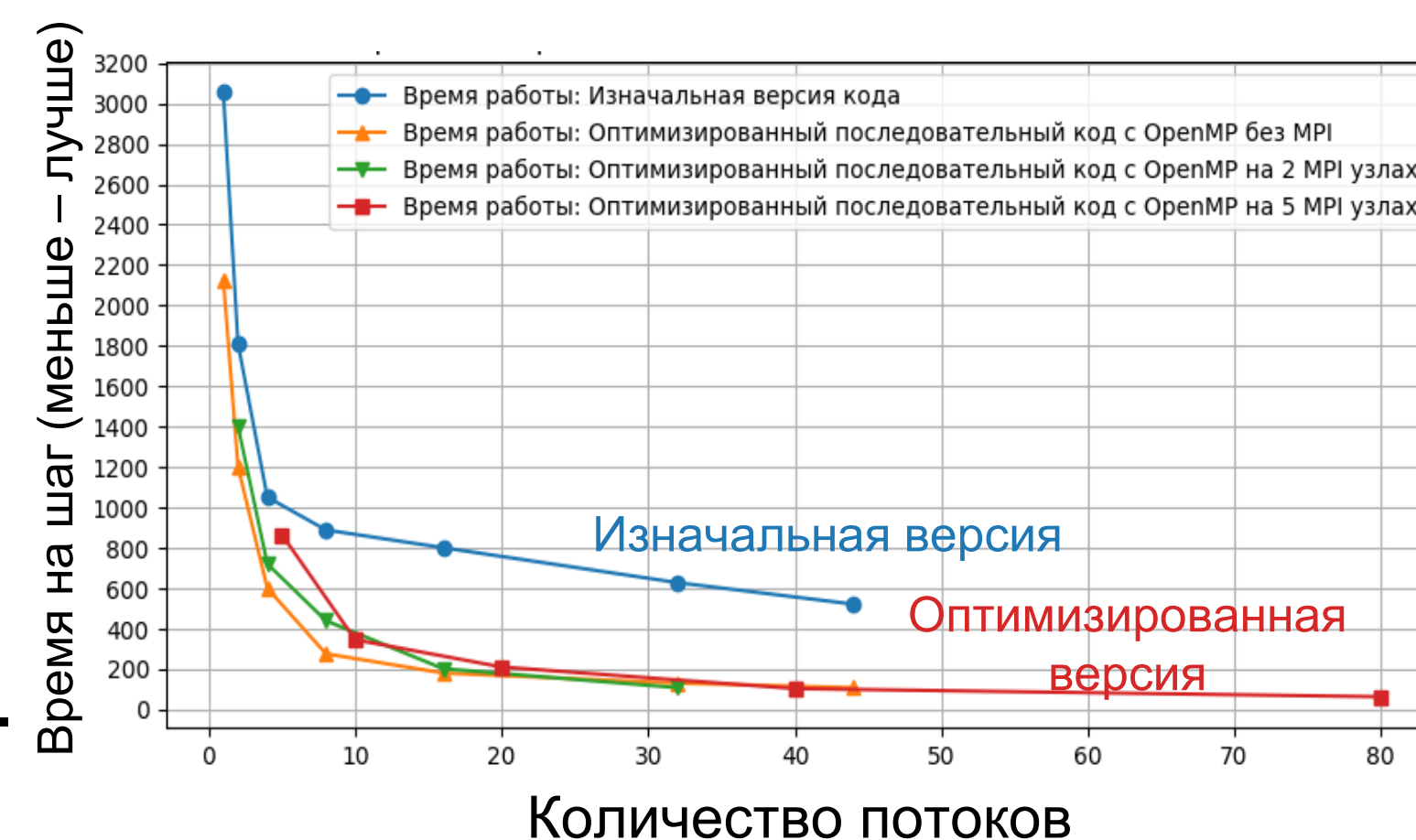
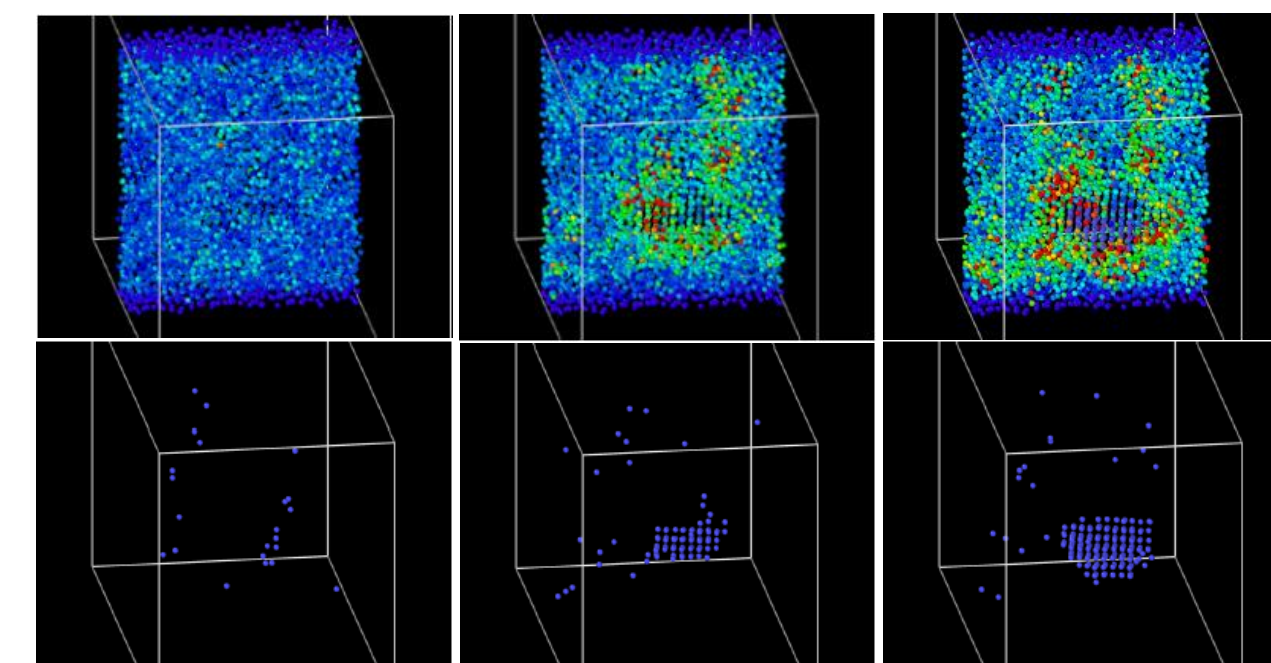
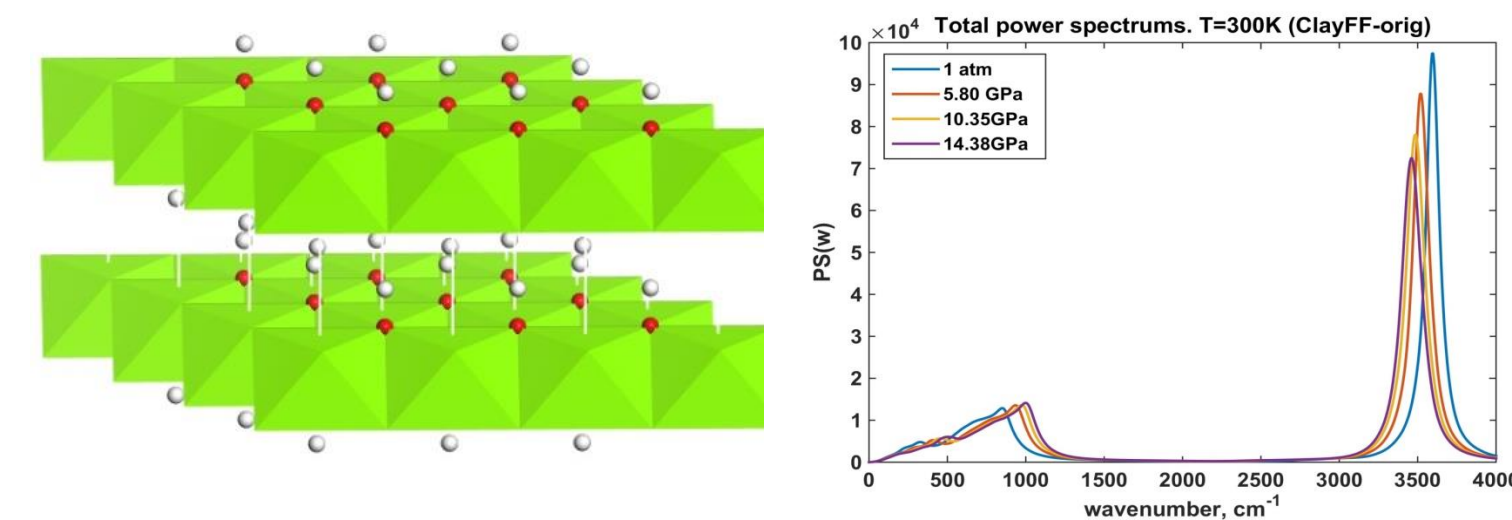
Исследование свойств материалов методами суперкомпьютерного моделирования, разработка вычислительных методов и их оптимизация под архитектуру СК ВШЭ

Результат:

- 1) Методом МД рассчитаны свойства материалов – уравнение состояния и свойства брусита $Mg(OH)_2$ при высоких давлениях, коэффициенты переноса углеводородных флюидов, механизмы кристаллизации жидкометаллических пленок.
- 2) Программа для моделирования плазменного потока оптимизирована и распараллелена с использованием технологий OpenMP и MPI, что привело к ускорению расчёта в 48 раз. Исходные коды выложены в открытый доступ: <https://github.com/kolotinsky1998/Ionwake/tree/develop>

Статьи:

1. Kondratyuk N.D., Lenev D. Yu., Pisarev V.V. Transport coefficients of model lubricants up to 400 MPa from molecular dynamics // J. Chem. Phys. 2020, V. 152, P. 191104 (Q1).
2. Kirova E.M., Pisarev V.V. The morphological aspect of crystal nucleation in wall-confined supercooled metallic melt // (подана в J.Phys.: Condensed Matter, Q1).





Моделирование течения жидкости в сложной геометрии

Заказчики:

Институт теоретической физики им. Л.Д. Ландау РАН,
Российский научный фонд

Исполнитель:

Кафедра ПИКСиС, МИЭМ, НИУ ВШЭ
руководитель проекта: Л.Н. Щур

Цель исследования:

Разработка методов моделирования сложных течений

Мотивация: течение частиц в крови человека:

1. Распространение кластеров раковых клеток.
2. Адресная доставка лекарств в nano-капсулах.

Результат:

Отработана методика моделирования наведенных колебаний капель в жидкости.

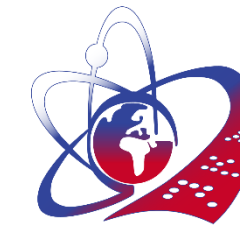
Метод реализован на платформе Palabos C++

50 шагов про времени с операциями I/O

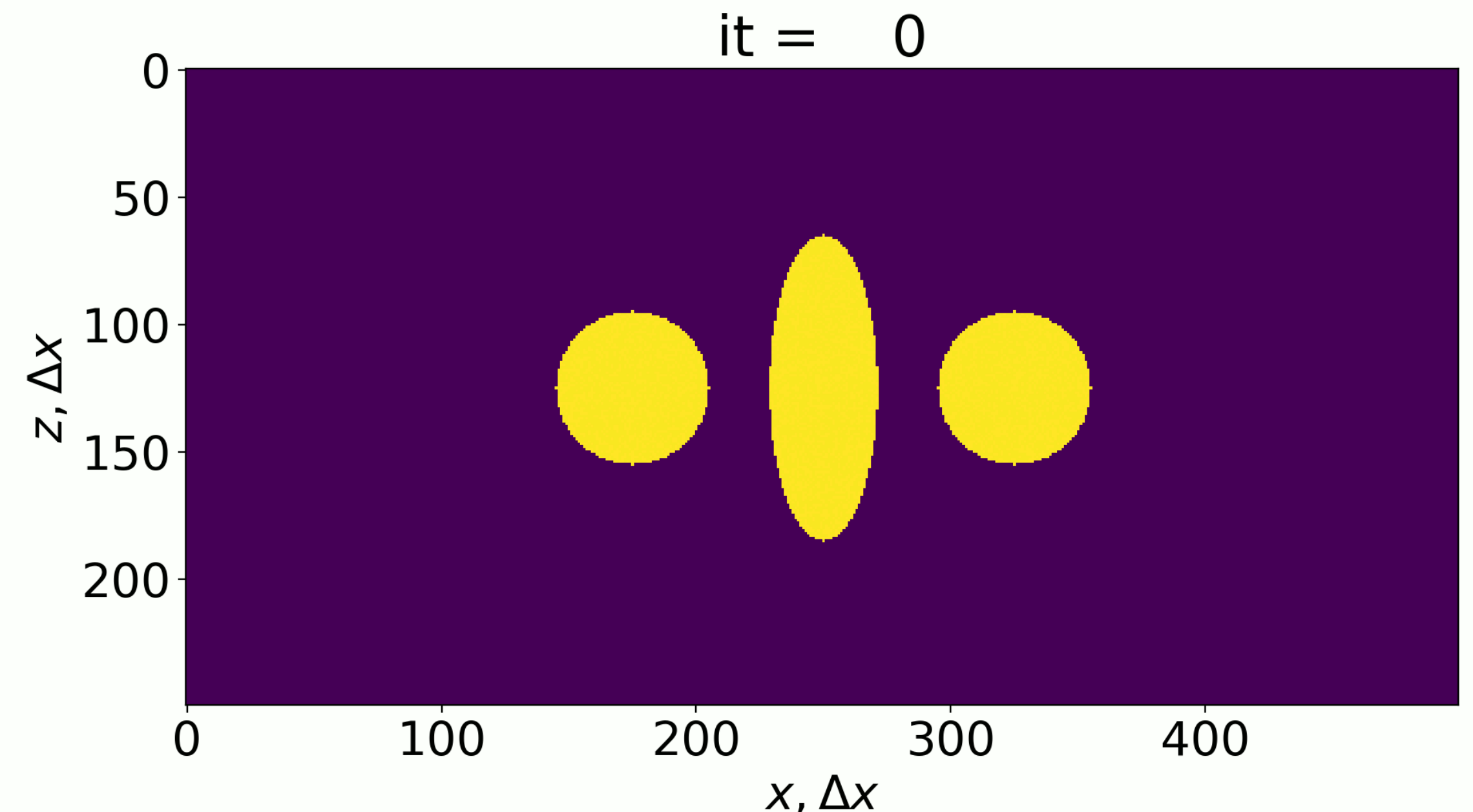
занимают 125 сек с 22 процессорных ядер.

Статьи:

1. Guskova M., Shchur V., Shchur L. *Simulation of drop oscillation using the lattice Boltzmann method*, Lobachevskii Journal of Mathematics. 2020. Vol. 41. No. 6. P. 992-995 (Q2).
2. Guskova M., Shchur L. *Drop oscillation modeling*, Proceedings Russian Supercomputer Days 2020 (Q3).



РНФ 19-11-00286





Распределенное по данным машинное обучение на современных суперкомпьютерах

Заказчики:

Институт теоретической физики им. Л.Д. Ландау
Научный центр РАН в Черноголовке

Исполнитель:

Кафедра ПИКСиС, МИЭМ НИУ ВШЭ
руководитель проекта: Л.Н. Щур

Цель исследования:

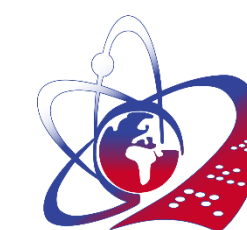
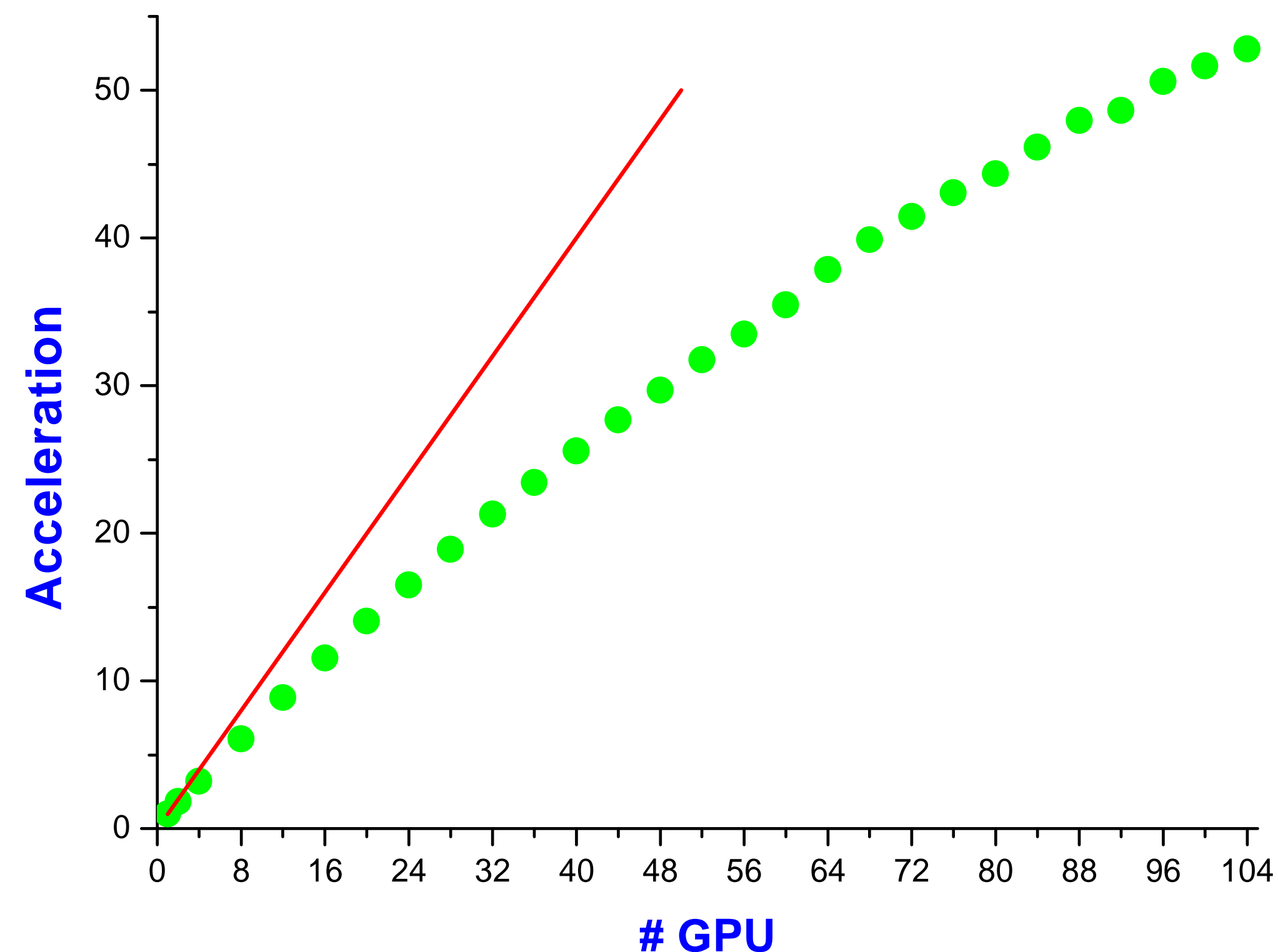
Разработка масштабируемого алгоритма
параллельного отжига

Результат:

Разработан алгоритм перераспределения реплик.
Проведена проверка
масштабируемости на 104 графических
картах 26 узлов СКК НИУ ВШЭ.

Статья:

Rusakov A., Chulkevich R., Shchur L. Algorithm for the replica redistribution in the implementation of parallel annealing method on the hybrid supercomputer architecture, preprint arXiv:20006.00561, submitted to Computer Physics Communications (Q1).





Расчет свободной энергии сольватации лекарственных соединений в scCO_2

Заказчики:

РФФИ, Научная лаборатория интернета вещей и киберфизических систем НИУ ВШЭ

Исполнитель: МИЭМ НИУ ВШЭ

руководитель проекта: Ю.А. Будков

Цель исследования:

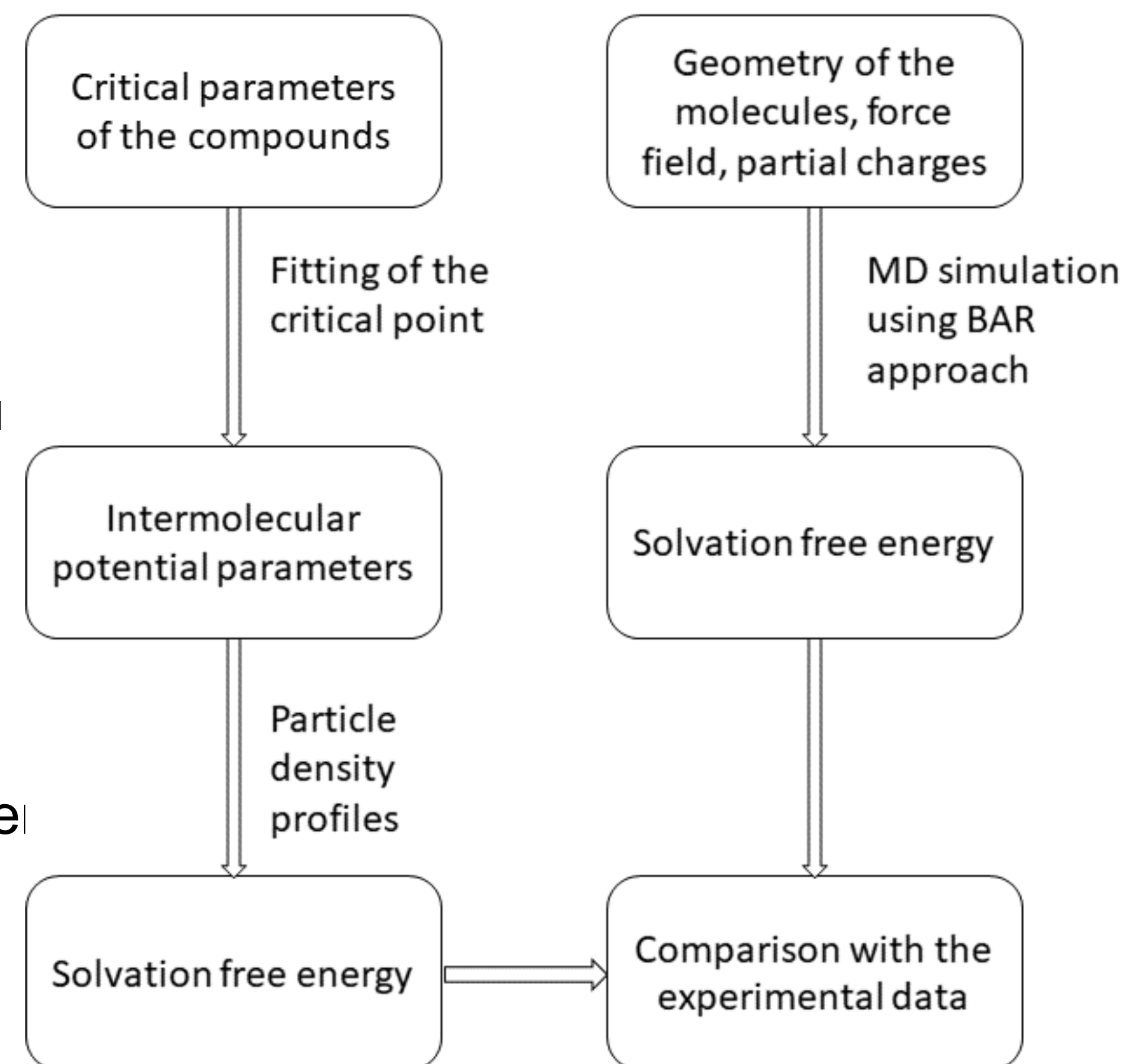
Оценка значений энергии сольватации лекарственных соединений в scCO_2 методами классического функционала плотности и молекулярной динамики.

Результат:

Для реализации цели был разработан программный код для получения профилей плотности и написаны скрипты для упрощения процедуры запуска задач в пакете Gromacs. Подход применялся к следующим соединениям: ибупрофен, карбамазепин, аспирин, напроксен, кетопрофен и продемонстрировал разумное согласие с экспериментальными данными.

Статьи:

N.N.Kalikin, M.V.Kurskaya, D.V.Ivlev, M.A.Krestyaninov, R.D.Oparin, A.L.Kolesnikov, Y.A.Budkov, A.Idrissi, M.G.Kiselev. Carbamazepine solubility in supercritical CO_2 : a comprehensive study // Journal of Molecular Liquids, 2020, 311, 113104 (Q1).





Интеграция высокопроизводительных вычислительных ресурсов для решения трудоемких задач оптимизации

Заказчики:

Samsung Research, Samsung Electronics

Исполнитель:

Центр глубинного обучения и байесовских методов, лаборатория компании Самсунг, ФКН, НИУ ВШЭ
руководитель проекта А. П. Ашуха

Цель исследования:

Изучение и усовершенствование современных методов ансамблирования нейронных сетей.

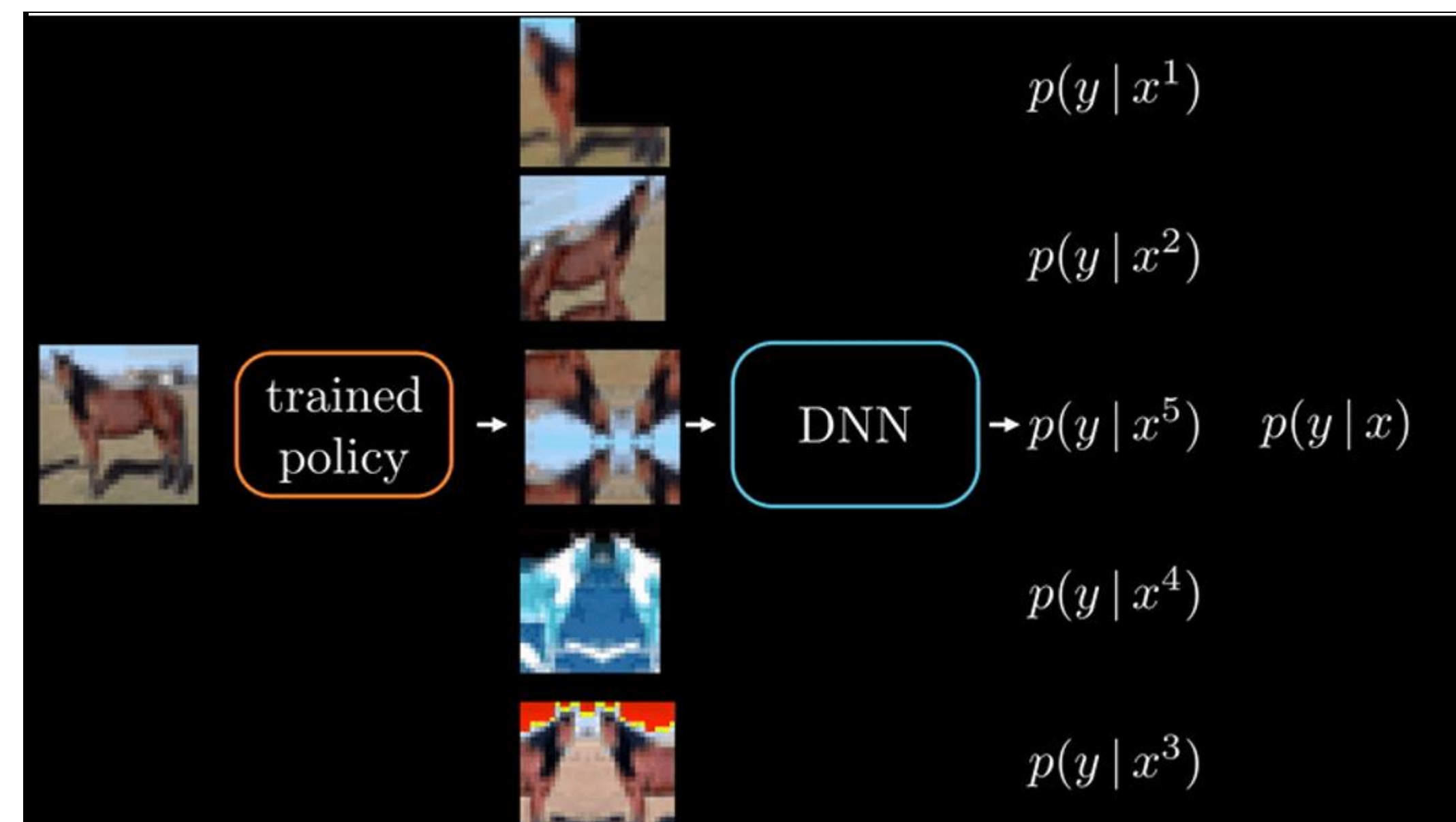
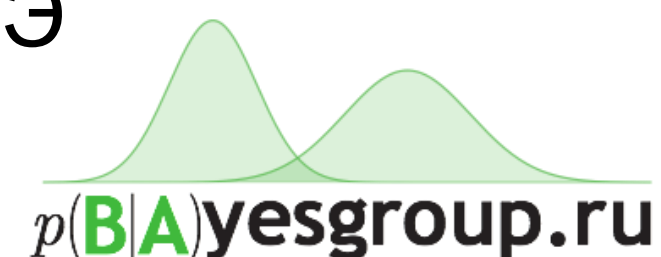
Результат:

- Проведено сравнение методов ансамблирования на реалистичных изображениях (CIFAR-10, CIFAR-100, ImageNet)
- Показана несостоятельность широко используемых метрик качества ансамблей, предложены метрики лишенные ряда недостатков;
- Предложены новые методы ансамблирования, которые могут быть скомбинированы с другими подходами

Статьи:

1. *Molchanov D., Lyzhov A., Molchanova Y., Ashukha A., Vetrov D.* Greedy Policy Search: A Simple Baseline for Learnable Test-Time Augmentation, Conference on Uncertainty in Artificial Intelligence 2020 (**A***)
2. *Ashukha A., Lyzhov A., Molchanov D., Vetrov D.* Pitfalls of In-Domain Uncertainty Estimation and Ensembling in Deep Learning, International Conference on Learning Representations 2020.

**SAMSUNG
Research**





Анализ пандемии COVID-19 в России

Исполнитель:

Международная лаборатория статистической и вычислительной геномики

Партнёры:

Работа ведётся совместно со Сколтехом (Москва) и НИИ гриппа (Санкт-Петербург).

Цель исследования:

Анализ эпидемии коронавируса SARS-CoV-2 в России.

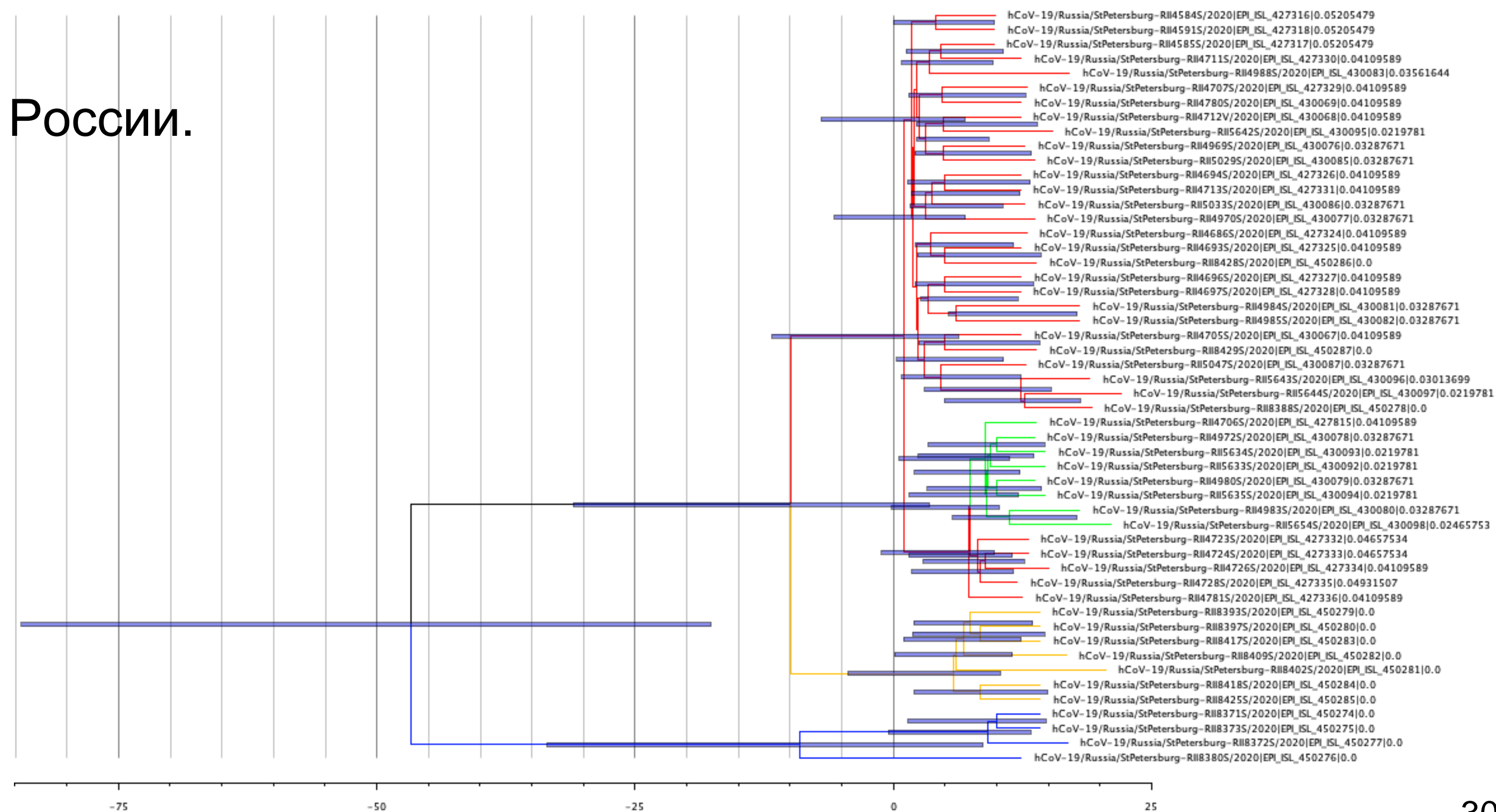
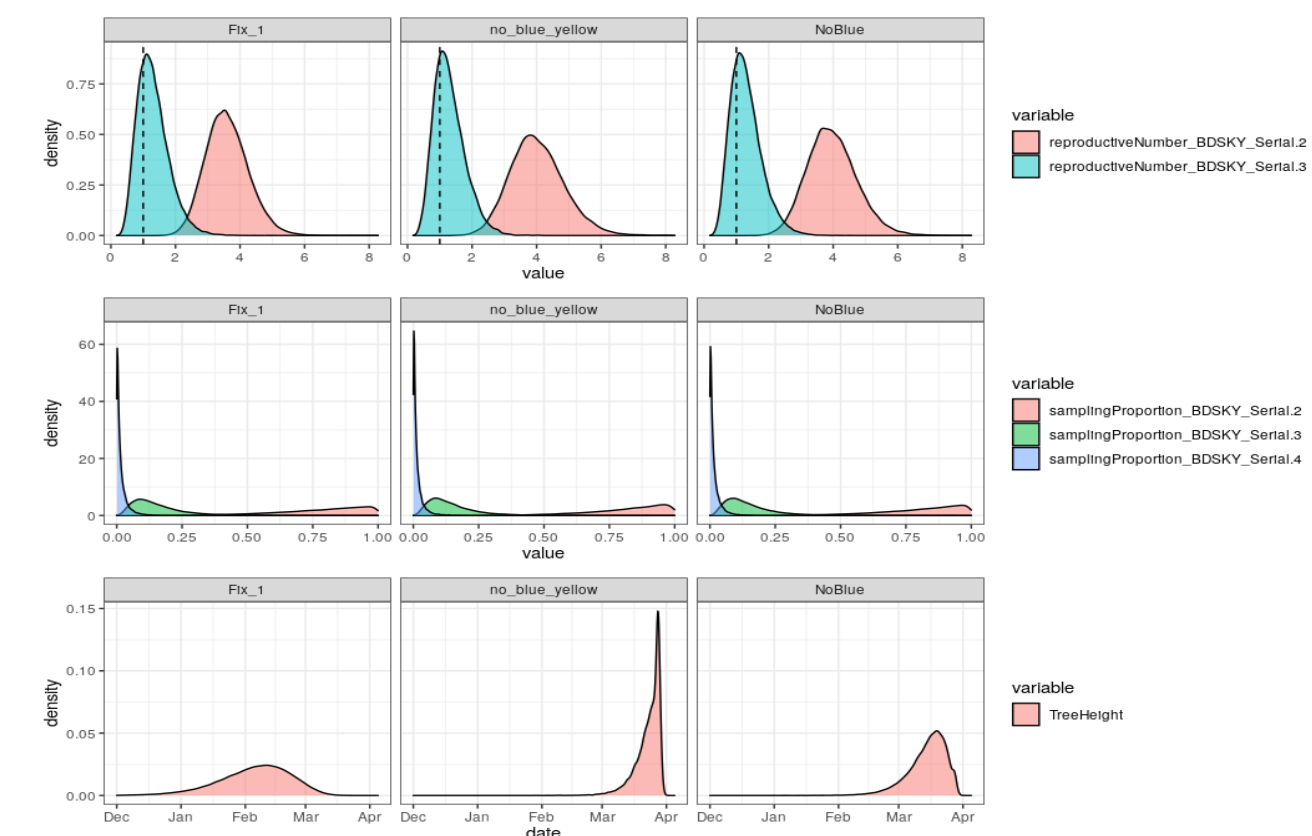
Результат:

Исследована эпидемия в НИИ травматологии им. Вредена (Санкт-Петербург)

- Изучены и датированы источники эпидемии.
- Оценена скорость распространения вируса.
- Изучена эффективность карантинных мер.

Статьи:

<https://iq.hse.ru/news/381056189.html>



Learn to Move

Заказчик:

НИУ ВШЭ СПб

Исполнитель:

Центр анализа данных и машинного обучения,
НИУ ВШЭ СПб,

Руководитель проекта: А.А. Шпильман

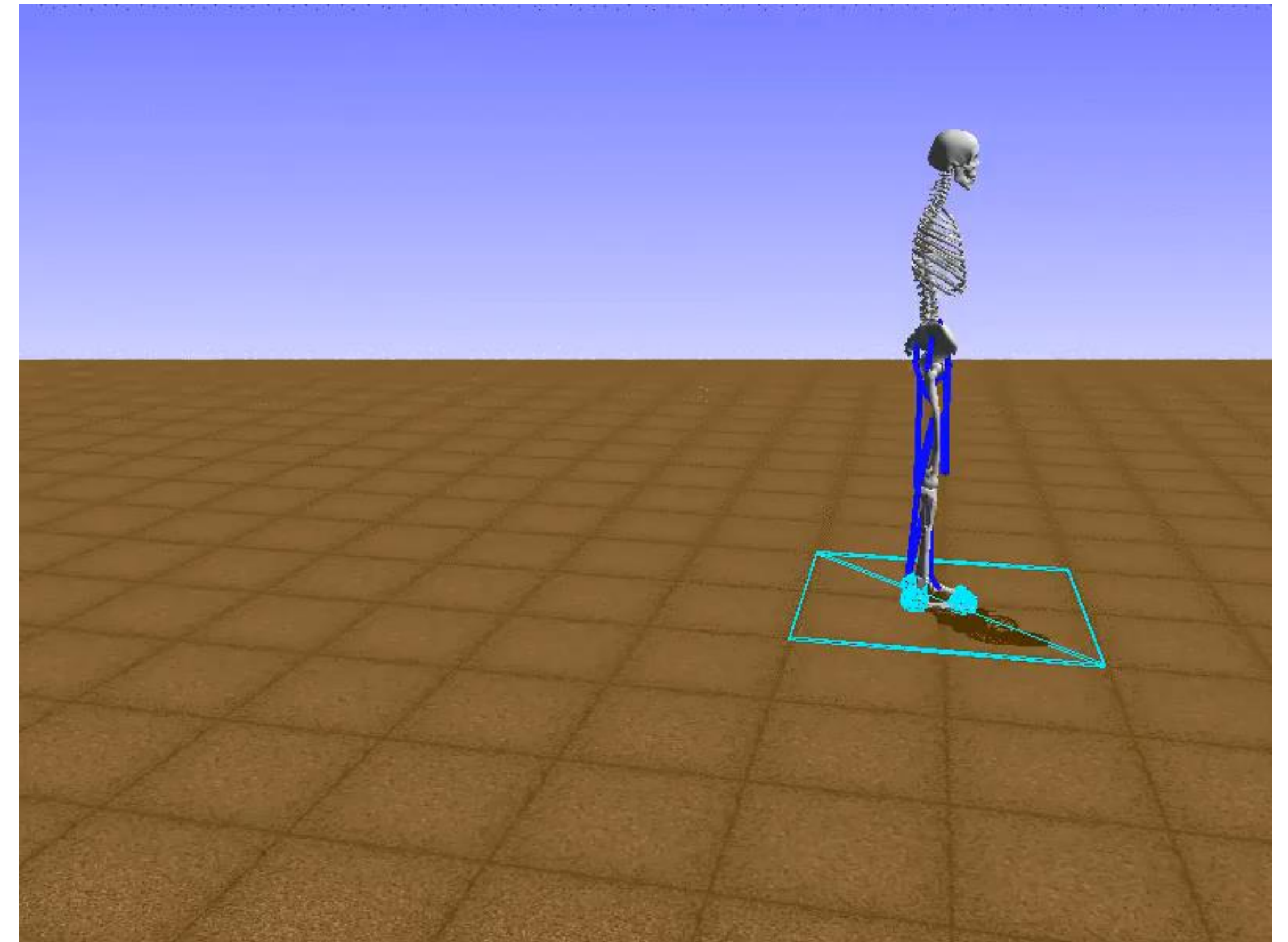
Цель исследования:

Разработка метода контроля модели двигательного аппарата человека.

Результат:

Разработана библиотека асинхронного симулирования/обучения для глубокого обучения с подкреплением. Полученная библиотека позволяет эффективно обучать глубокую нейронную сеть, которая получает на вход координаты, скорости и ускорения ключевых точек и выдает вектор мышечных напряжений.

Полученная сеть позволила занять **7-е место** в международном соревновании Learn to Move: Walk Around на конференции NeurIPS2019.





☰

SUPERCOMPUTER SIMULATION UNIT

- About us
- HSE University HPC Cluster
- Software
- Support

Unit Head – Pavel Kostenetskiy

Contacts

11 Pokrovsky Boulevard,
room S244, S243

Unit Head:
+7 (495) 5310000, 28030

System Administrators:
+7 (495) 5310000, 27968

[Support](#)

[HSE University](#) → Supercomputer Modeling Unit

RU EN

Supercomputer Modeling Unit

The HSE University Supercomputer Simulation Unit was created on October 14, 2019.

The main tasks of the unit:

- Methodological support for the use of supercomputer computing by the HSE University departments.
- Managing user roles and access to computing resources.
- Administration of the information systems and resources for high-performance computing.
- Managing documentation regarding the functioning of systems and resources of high-performance computing; compiling user and administrator manuals

Support

- [User Registration](#)
- [Basic User's Guide](#)
- [Running Jobs Guide](#)
- [Application Software](#)
- [ServiceDesk](#)

About us

- [About our unit](#)
- [HPC Cluster](#)
- [Cluster Software](#)



Sep 21 – Sep 22
International Supercomputing Conference: Russian Supercomputing Days

Oct 12 – Oct 16
International Conference on Computer Simulation in Physics and beyond



News

Name the HSE Supercomputer: the Final Stage of Voting Kicks Off

✓
Have you spotted a typo?
Highlight it, click Ctrl+Enter and send us a message. Thank you for your help!



НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
УНИВЕРСИТЕТ

<https://hpc.hse.ru>
pkostenetskiy@hse.ru

Телефон: +7(495)7729590 (28030)

Адрес: АУК «Покровский бульвар», S244