

Использование
вычислительного кластера
НКС-1П для проведения
научных исследований

Кластер НКС-1П

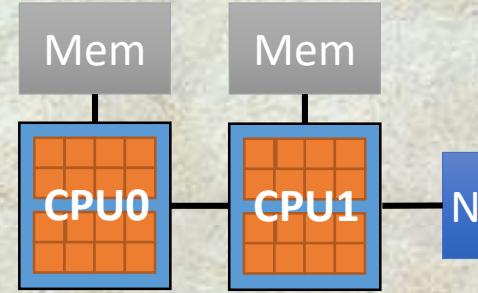
- Узел кластера (раздел Broadwell):

- 2 × Xeon E5-2697A v4, 2.6 (3.6) ГГц (Broadwell), 16 ядер × 2 потока
- 32 аппаратных потока на узел
- 128 ГБ памяти на узел
- **1331.2 GFLOPS** пиковая производительность

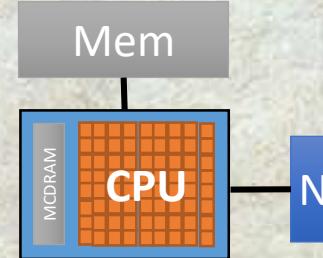
- Узел кластера (раздел KNL):

- 1 × Xeon Phi 7290, 1.5 (1.7) ГГц (KNL), 72 ядра × 4 потока
- 288 аппаратных потока на узел
- 96 ГБ памяти на узел
- 16 GB памяти MCDRAM (кэш)
- **3456 GFLOPS** пиковая производительность

Структура узла



Структура узла



Intel® Xeon® Processor E5 v4 Product Family Overview

New features:

- Broadwell microarchitecture
- Built on 14nm process technology
- Socket compatible[◊] replacement for Intel[®] Xeon[®] processor E5-2600 v3 on Grantley

New processor technologies:

- Posted Interrupts
- Page Modification Logging
- Cache Allocation Technology
- Memory BW Monitoring

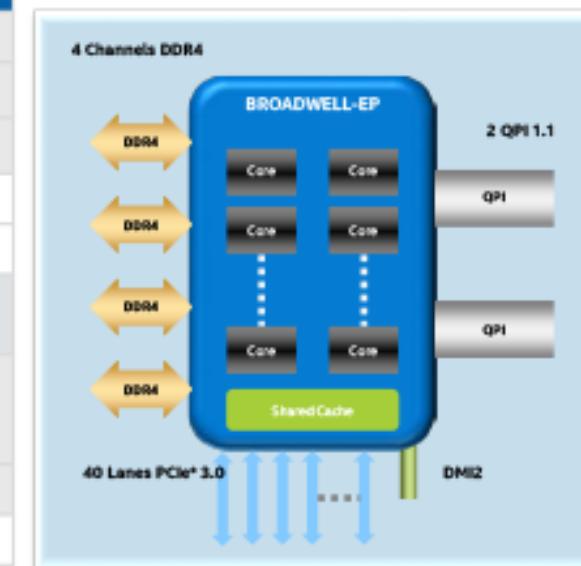
- Crypto Speedup
- Supervisor Mode Access Prevention
- New RDSEED instruction
- Intel[®] Processor Trace
- Hardware Controlled Power Management

Features	Xeon E5-2600 v3 (Haswell-EP)	Xeon E5-2600 v4 (Broadwell-EP)
Cores Per Socket	Up to 18	Up to 22
Threads Per Socket	Up to 36 threads	Up to 44 threads
Last-level Cache (LLC)	Up to 45 MB	Up to 55 MB
QPI Speed (GT/s)	2x QPI 1.1 channels 6.4, 8.0, 9.6 GT/s	
PCIe [*] Lanes / Speed(GT/s)	40 / 10 / PCIe [*] 3.0 (2.5, 5, 8 GT/s)	
Memory Population	4 channels of up to 3 RDIMMs or 3 LRDIMMs	+ 3DS LRDIMM†
Memory RAS	ECC, Patrol Scrubbing, Demand Scrubbing, Sparing, Mirroring, Lockstep Mode, x4/x8 SDDC	+ DDR4 Write CRC
Max Memory Speed	Up to 2133	Up to 2400
TDP (W)	160 (Workstation only), 145, 135, 120, 105, 90, 85, 65, 55	

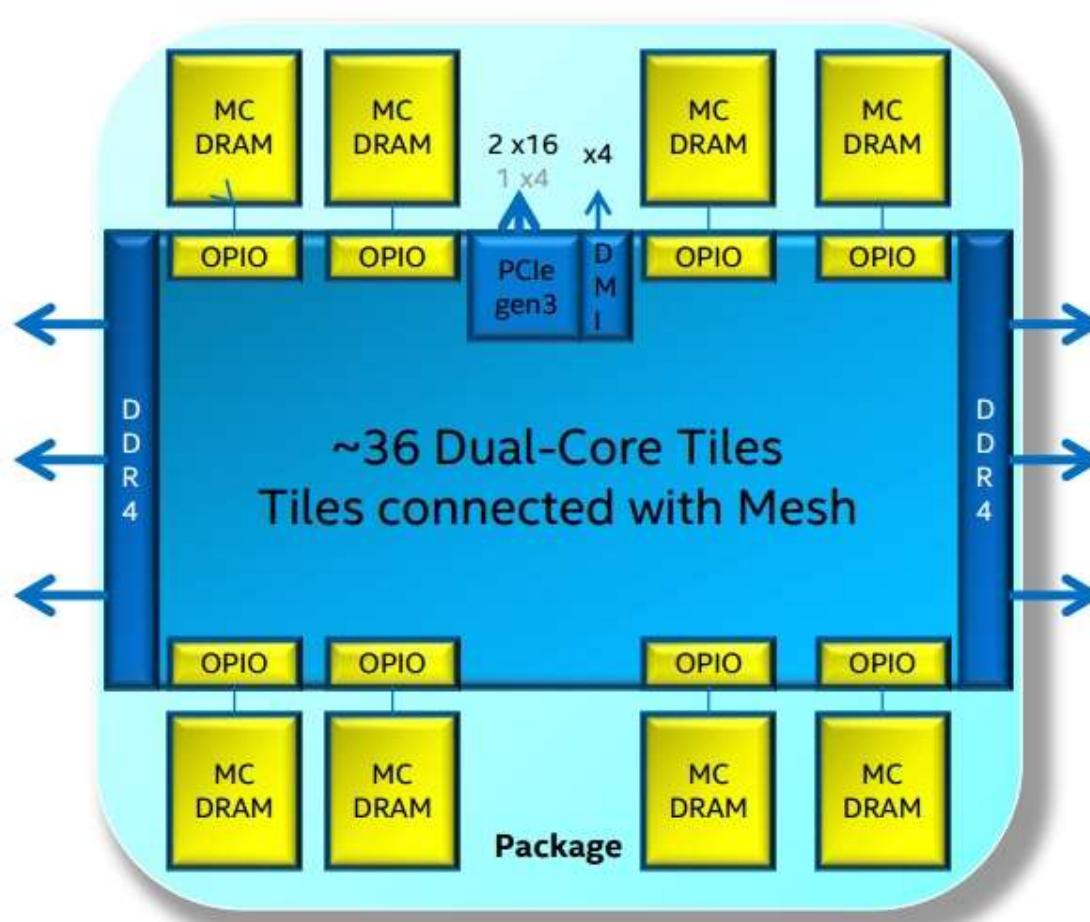
[◊] Requires BIOS and firmware update

[†] Depends on market availability

All products, computer systems, dates and figures specified are preliminary based on current expectations, and are subject to change without notice. Intel may make changes to specifications and product descriptions at any time, without notice.



More VPU on next gen Intel® Xeon Phi™ Processor



- Up to 72 new Intel® Architecture cores
- 36MB shared L2 cache
- Full Intel® Xeon™ processor ISA compatibility through Intel® Advanced Vector Extensions 2
- Extending Intel® Advanced Vector Extensions architecture to 512b (AVX-512)
- Based on Silvermont microarchitecture:
 - 4 threads/core
 - Dual 512b Vector units/core
- 6 channels of DDR4 2400 up to 384GB
- 36 lanes PCI Express* (PCIe*) Gen 3
- 8GB/16GB of extremely high bandwidth on package memory
- Up to 3x single thread performance improvement over prior gen^{1,2}
- Up to 3x more power efficient than prior gen^{1,2}

1. As projected based on early product definition and as compared to prior generation Intel® Xeon Phi™ Coprocessors.

2. Results have been estimated based on internal Intel analysis and are provided for informational purposes only. Any difference in system hardware or software design or configuration may affect actual performance.

Сравнение процессоров

- Подсистема памяти

	Кэш L1	Кэш L2	Кэш L3	Локальная память
МВС-10П	Кэш L1	Кэш L2	Кэш L3	Локальная память
	Sandy Bridge	8 × 32 KB	8 × 256 KB	20 MB
НКС-1П	KNC	61 × 32 KB	61 × 512 KB	- 8 GB GDDR5 352 GB/s
	Broadwell	16 × 32 KB	16 × 256 KB	2 × 20 MB
	KNL	72 × 32 KB	36 × 1 MB	- 16 GB MCDRAM 400+ GB/s

Как получить логин на кластер?

- <http://www.sscc.icmmg.nsc.ru/howto.html>

The screenshot shows the homepage of the Siberian Supercomputer Center (SSCC) website. The header features the logo of the Siberian Supercomputer Center (SSCC) and the Institute of Computational Mathematics and Mathematical Geophysics (ICMMG) of the Russian Academy of Sciences (RAS). The header also includes links for the RAS logo, the Siberian Branch of the RAS, and the Siberian Federal University.

The main navigation menu includes: О ССЦ, Документы, Загрузка оборудования, Наука, Образование, Пользование, and СМИИ.

The page title is "Как стать пользователем" (How to become a user). Below it, there are two buttons: "Регистрация пользователя" (User registration) and "Логин в системе" (Login in the system).

The main content area contains several sections:

- "Для получения доступа необходимо выполнить следующие шаги" (To obtain access, you need to perform the following steps):
 - ✓ Заполнить анкетационную форму
 - ✓ Получить по электронной почте позитивный ответ и инструкции по дальнейшим действиям и оформление гарантинного письма от руководителя организации, в которой работает пользователь (образец гарантинного письма здесь). При оформлении гарантинного письма на другую пользователя не забывайте, что все пользователи группы должны быть зарегистрированы в ОД. При отсутствии регистрации Login не выдаётся.
 - ✓ Подтверждение руководителем заявления о завершении письма пользователем либо застывает в ССЦ (透过互联网), либо отправляет обычной почтой. Некоторые пользователи предварительно гарантинное письмо сначала (для удобства получения адреса) могут отправлять либо факсом, либо отсканированную копию письма по e-mail, в этом обмане письма. После получения гарантинного письма пользователю будет выдана информация о логине по e-mail, указанному в заявлении.
- "Правила работы пользователей на серверах ССЦ":
 - Никакой пользователь обязан строго соблюдать правила один пользователя – один логин. Это означает, что пользователь не имеет права передавать выданную ему информацию ("логин" и "пароль") для доступа на сервера ССЦ третьим лицам. Нарушители изгнаны из системы и лишены возможности пользоваться логином и паролем.
 - Запрещается установка и выполнение каких-либо программ или аудио-файлов параллельно работе сетевого сервера ССЦ.
 - Запрещается попытка несанкционированного доступа в чужие каталоги на серверах ССЦ.
 - Запрещается попытка несанкционированного доступа в чужие каталоги на серверах ССЦ.
 - Запрещается попытка взлома, изъятия и внесения вредных изменений в базы данных серверов ССЦ.
 - Запрещается использование ресурсов ССЦ в коммерческих целях и для разработки любых видов аудиовизуальных.
 - Запрещается использование ресурсов ССЦ для осуществления любов незаконной и нелицензионной деятельности (засыпка и публикация порнографии, какой-либо рекламы, готовы несанкционированного доступа к ресурсам сети).
 - Никакой пользователь обязан своевременно (в年之 год) подавать отчет о проделанной работе либо в индивидуальной, либо групповой форме, если же есть группы, расположившие по своей специфике. Форма отчета будет предложена Администрацией ССЦ в виде распечатки пользователем или на сайте ССЦ в разделе "Новости".
- "При нарушении любого из этих правил, доступ пользователя на сервера ССЦ будет блокирован без предупреждения".
- "Правила работы оборудования и персонала":
 - Режим работы на вычислительных системах ССЦ – круглогодичный.
 - На круглогодичный режим работы обслуживающего персонала в настоящий момент не предусмотрен. Возможны различные сложные ситуации (включая консультационную поддержку пользователей) анализируются и устраняются только в рабочее время.
 - Время для выполнения профилактических работ: 14:00 по 15:00 каждый день. При отсутствии необходимости, профилактические работы могут не проводиться, и это время используется для эксплуатации.

At the bottom of the page, there are links to the "Main site", the "Siberian Federal University", the "RAS Siberian Branch", and the "ICMMG RAS". A footer note states: "Создано с использованием CMS Umbraco" and "All rights reserved".

Работа с очередью задач Slurm

sinfo – просмотр ресурсов кластера

```
sscc@login knl]$ sinfo
PARTITION AVAIL TIMELIMIT NODES STATE NODELIST
login    down infinite   1  down* head-sscc
login    down infinite   1  drain login
n1*      up 14-00:00:0   11 alloc# n0lp{003-011,014-015}
n1*      up 14-00:00:0   1  down* n0lp001
n1*      up 14-00:00:0   1  drng n0lp012
n1*      up 14-00:00:0   1  drain n0lp016
n1*      up 14-00:00:0   2  alloc n0lp{002,013}
broadwell up 14-00:00:0   1  down* n02p009
broadwell up 14-00:00:0   1  drain n02p015
broadwell up 14-00:00:0   10 alloc n02p{001-005,010,012-014,016}
broadwell up 14-00:00:0   8   idle n02p{006-008,011,017-020}
(sscc@login knl)$
```

Работа с очередью задач Slurm

squeue – просмотр своей очереди задач кластера

```
mc [swt@kn1:~] school/ktr
[ssec@login kn1]$ squeue
JOBID PARTITION     NAME    USER ST      TIME NODES NODELIST(REASON)
3963  knl test_cai  ssec CF  22:31:   1 n0lp003
3966  knl test_cai  ssec CF  17:11:   1 n0lp004
3968  knl test_cai  ssec CF  13:21:  11 n0lp[005-015]
[ssec@login kn1]$
```

Работа с очередью задач Slurm

Scancel номер задачи – удаление задачи из очереди задач кластера

<https://slurm.schedmd.com/pdfs/summary.pdf>

Особенности компиляции программ (broadwell)

module purge

module load intel/2017.4.196 parallel/mpi.intel.broadwell/2017.4.196
compilers/intel/2017.4.196

mpiicc -qopenmp -O3 -o a.out AstroPhi.cpp -lm

Особенности компиляции программ (knl)

```
module purge
```

```
module load intel/2017.4.196 parallel/mpi.intel.knl/2017.4.196  
compilers/intel/2017.4.196
```

```
mpiicc -xMIC-AVX512-qopenmp -O3 -o a.out AstroPhi.cpp -lm
```

Запуск программ (knl)

<calc_knl_start.sh>

module purge

module load intel/2017.4.196 parallel/mpi.intel.knl/2017.4.196

sbatch ./calc_knl.sh

Запуск программ (knl)

[`<calc_knl.sh>`](#)

```
#!/bin/bash

# set the number of nodes
#SBATCH --nodes=1

# set max wallclock time
#SBATCH --time=6-0

# set name of job
#SBATCH --job-name=test_calculation

#SBATCH -p knl

#SBATCH --constraint=hemi,cache,knl

#SBATCH --ntasks-per-node=1

# run the application
mpiexec.hydra -bootstrap slurm ./a.out
```

Запуск программ (broadwell)

[`<calc_broadwell_start.sh>`](#)

`module purge`

`module load intel/2017.4.196 parallel/mpi.intel.broadwell/2017.4.196`

`sbatch ./calc_broadwell.sh`

Запуск программ (broadwell)

```
<calc_broadwell.sh>

#!/bin/bash

# set the number of nodes
#SBATCH --nodes=2

# hyperthreading off
#SBATCH --threads-per-core=1

# set max wallclock time
#SBATCH --time=6-0

# set name of job
#SBATCH --job-name=test_calculation

# set queue name
#SBATCH -p broadwell

#SBATCH --ntasks-per-node=1

# run the application
mpirun -n=4 ./a.out
```