

Гибридный суперкомпьютер на базе сети Ангара для задач вычислительного материаловедения

В.С. Вечер, Н.Д. Кондратюк, Г.С. Смирнов, В.В. Стегайлов
ОИВТ РАН

В данной статье представлен суперкомпьютер, состоящий из 32 узлов с графическими ускорителями, соединенных между собой низколатентным интерконнектом с высокой пропускной способностью. Суперкомпьютер нацелен на проведение расчетов методом классической молекулярной динамики, а также может эффективно ускорять расчеты электронной структуры материалов. В статье представлены результаты тестов производительности конкретных прикладных задач на основе пакетов LAMMPS, GROMACS, VASP и CP2K. Проведено сопоставление результатов с другими высокопроизводительными системами. Данный суперкомпьютер основан на сети Ангара, разработанной АО “НИЦЭВТ” и поддерживающей топологии трехмерного и четырехмерного тора. Параллельная масштабируемость задач на суперкомпьютере Десмос иллюстрирует возможности использования сети Ангара для эффективного ускорения MPI приложений на массово-параллельных архитектурах.