2023 AMD Solutions Day

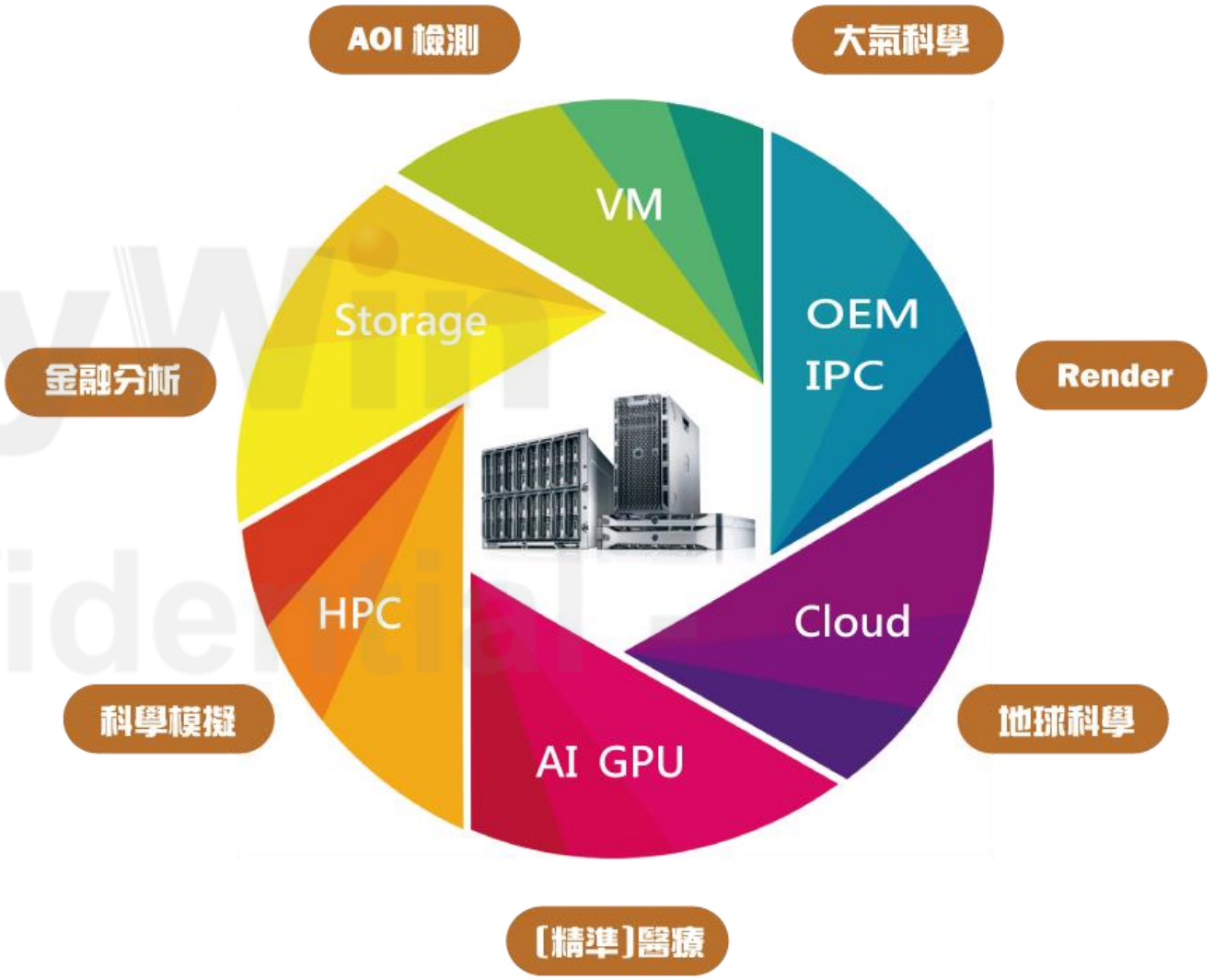
探索HPC高性能叢集計算

凱穩電腦股份有限公司
Key Win Computer Co., LTD.
Adam Chen
2023-06-20

AMD

about KeyWin 凱穩電腦

- 伺服器零件銷售
- 各白牌/品牌伺服器代理銷售
- 建置機房伺服器集群
- 佈建整合HPC / AI 系統



What is HPC? Why need HPC?

• HPC 是 High Performance Computing（高效能運算）的縮寫。HPC 是一種計算科學和工程領域，旨在利用強大的計算能力來處理大量的數據和複雜的計算問題。

• HPC 的目標是提供超高速的計算能力，以解決需要大量計算、記憶和儲存資源的問題。這種計算能力 通常來自於高效能的超級電腦或者由多台計算機組成的集群。

• HPC 可以應用於各種領域，包括科學研究、工程模擬、氣候預測、基因組學、藥物設計、金融模型 等。它能夠加速數據處理和分析的速度，並提供更準確的模擬和預測結果。

• HPC 系統通常具備以下特點：

1.高性能處理器：HPC 系統通常配備高效能的處理器，例如多核心的 CPU、GPU（圖形處理器）或者其他特殊用途的加速器。

2.大容量記憶體：HPC 系統需要具有足夠的記憶體容量，以處理大型數據集和複雜的計算任務。

3.高速互連網絡：HPC 系統中的計算節點之間需要高速的互聯網絡連接，以實現高效的數據通信和協同計算。

4.平行計算：HPC 系統可以同時運行多個計算任務，並使用並行計算的技術來分解和處理大型問題。

• 總之，HPC 是利用高效能計算資源解決大規模和複雜問題的領域，它在科學、工程和其他領域的研究 和應用中扮演著重要角色。

* from ChatGPT

What is HPC/HPCC

- **HPC is 高效能計算**

  透過高效能處理器解決大量、複雜、高速的計算需求，其CPU工作負載幾乎全天100%

- **HPCC is HPC Cluster 高效能計算叢集**

  HPC電腦的叢集，通常User希望每一台主機運算資源100%被利用，且7x24工作負載 100%

- **不同於HPC/HPCC 計算的電腦服務**

  ex: PC, VM, 一般常態服務性主機…，提供非24小時100%負載的服務，包含

  Web service, ERP系統…

Single Computer

15 years ago...

Powerful Computer
(AMD Opteron Server – 2Core x 8CPU)
16Core

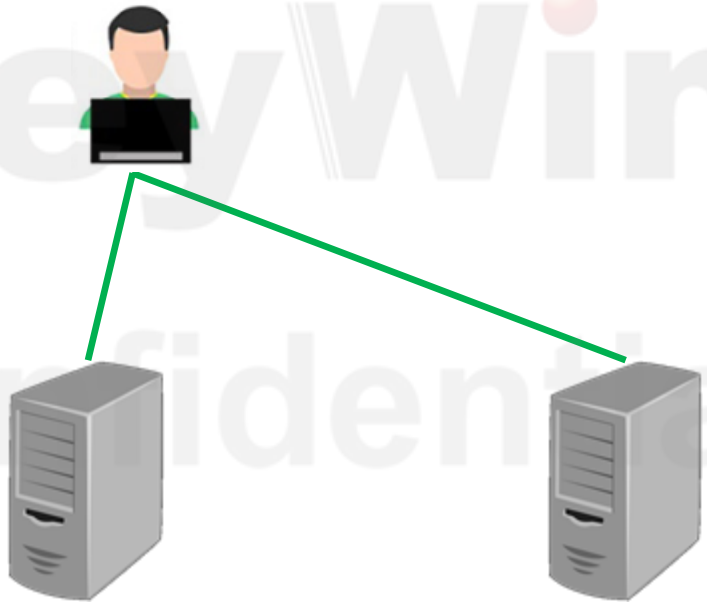
Today 2023

Personal Computer
(AMD Ryzen™ Threadripper™ PRO)
64Core

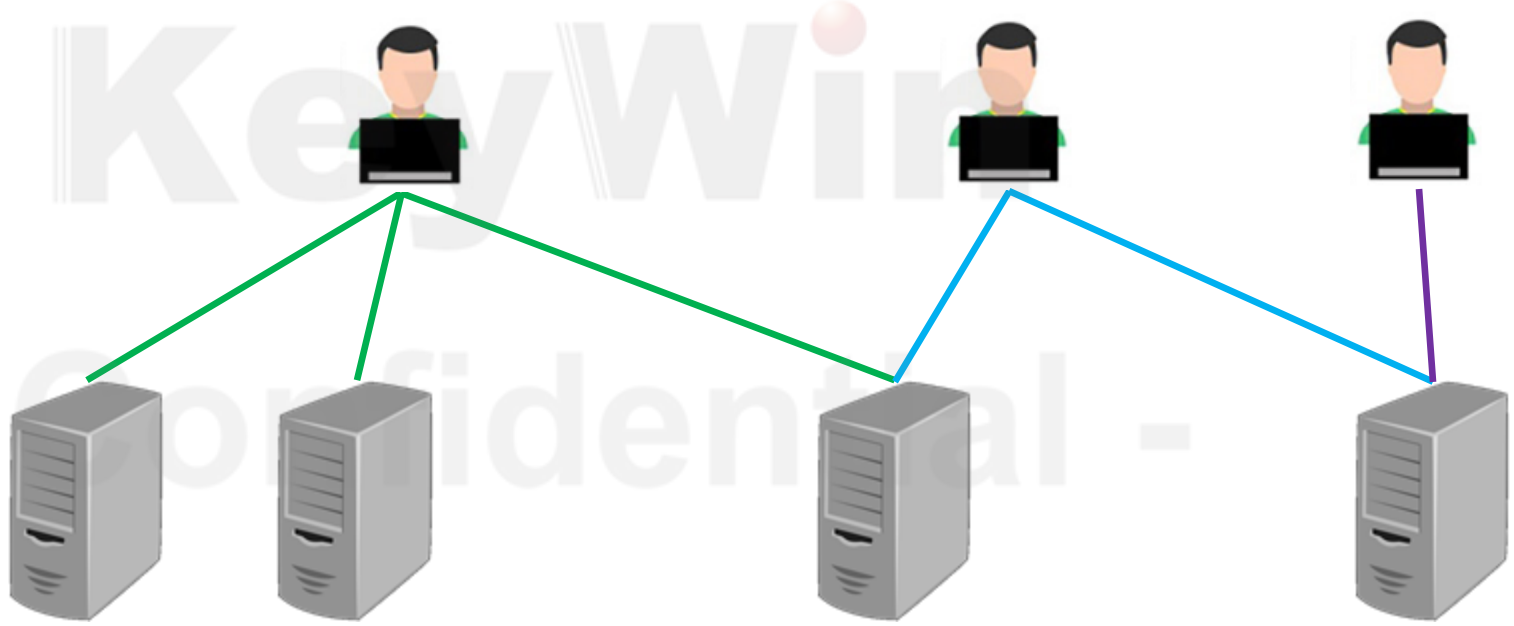
Today 2023

2U Server
(AMD 9654 96Core * 2)
192Core

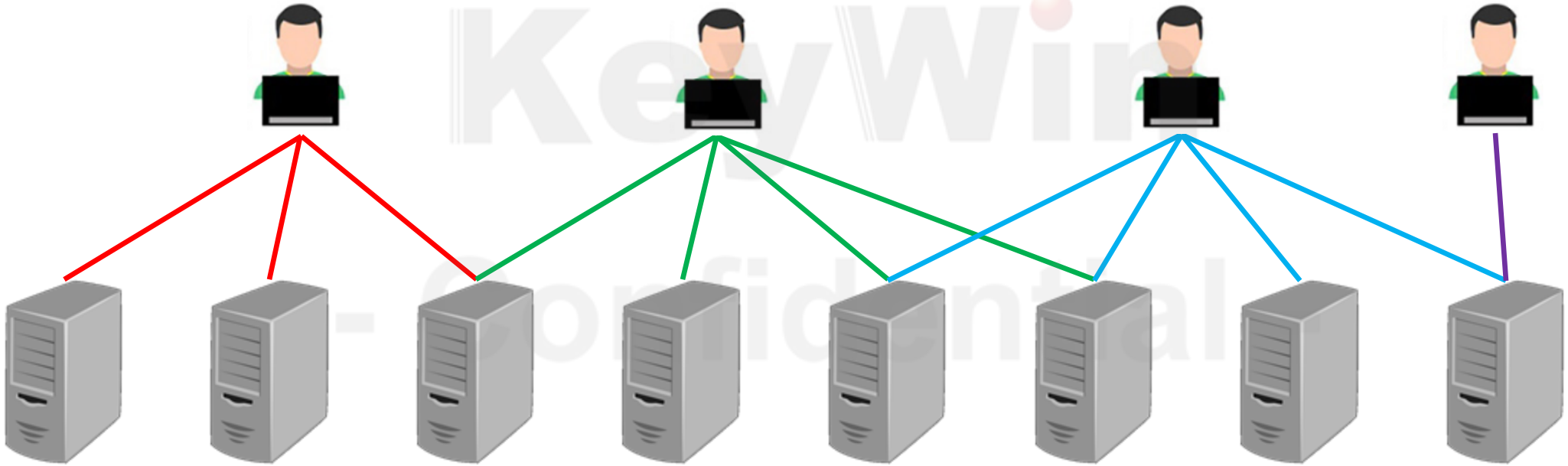
HPC使用情境 - A lot of Computers/Servers



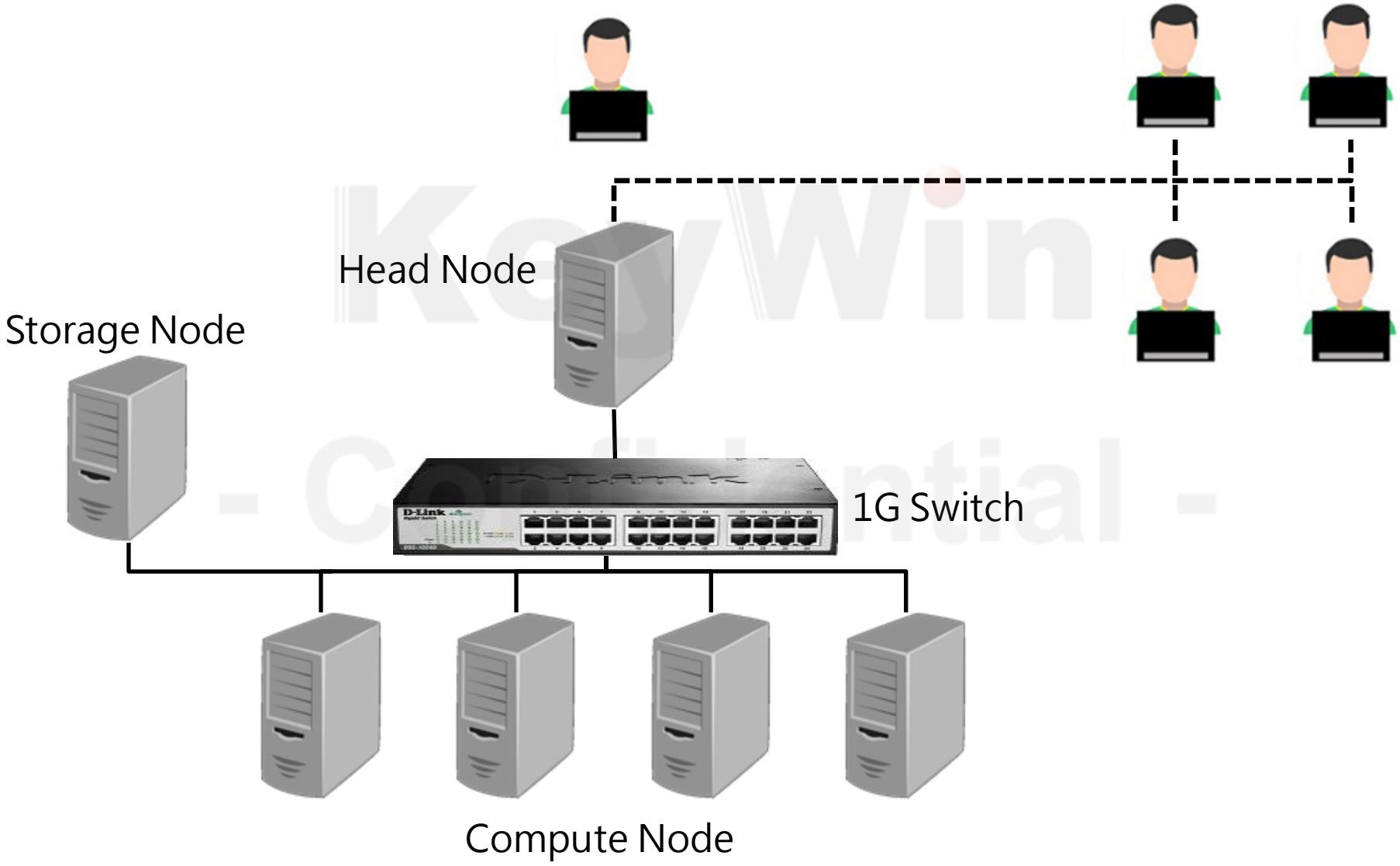
HPC使用情境 - A lot of Computers/Servers



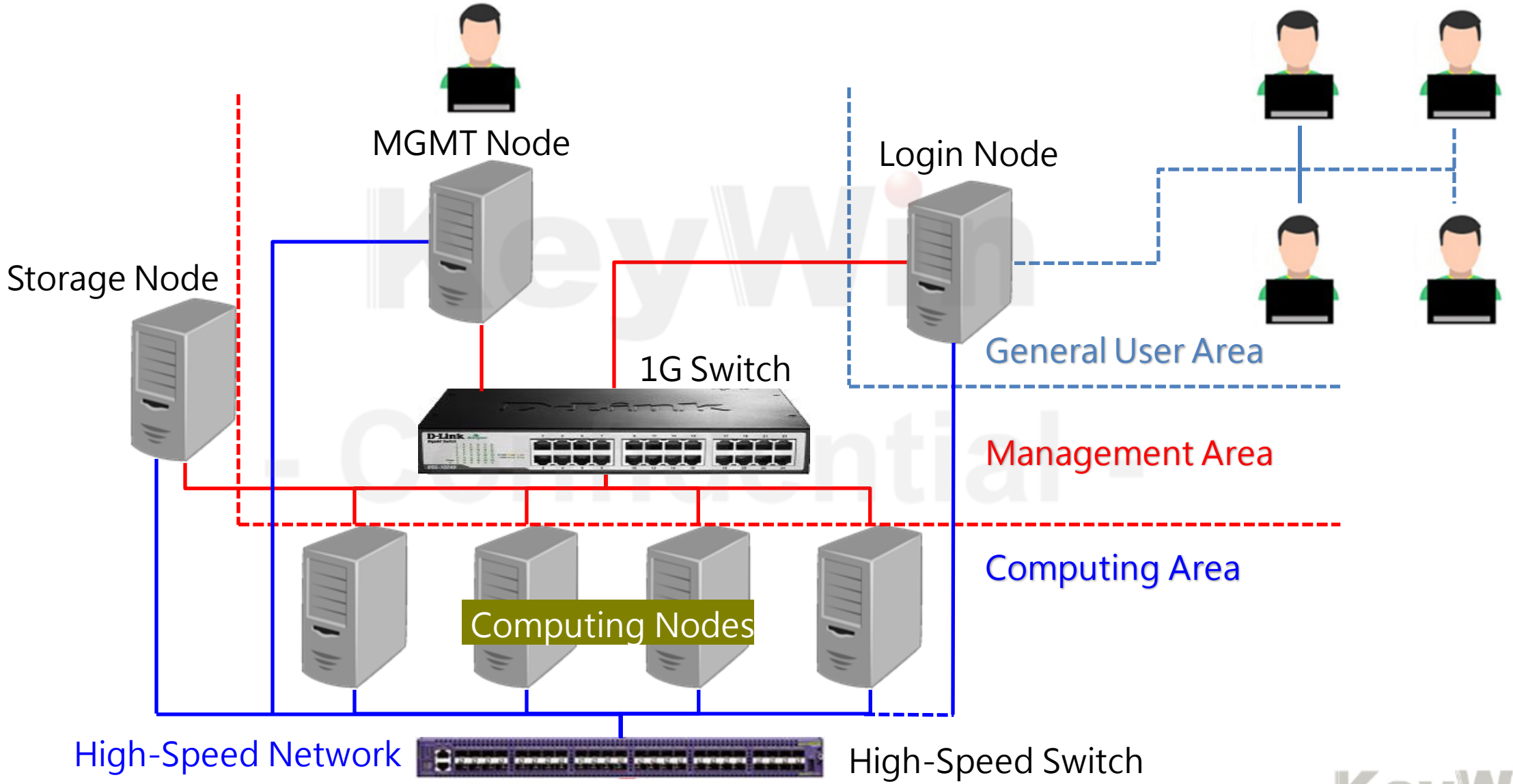
HPC使用情境 - A lot of Computers/Servers



HPC使用情境 - Managed Cluster

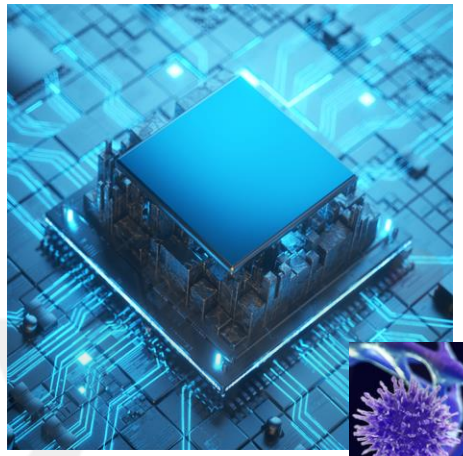


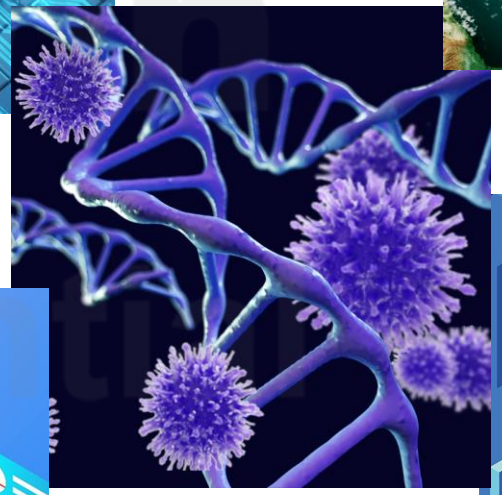
HPC使用情境 – HPC 標準架構



Why HPC? For Who?

- Covid-19
- 氣候變遷
- 物理/化學
- 商業/金融分析
- 晶片戰爭 (EDA)
- 醫療研究

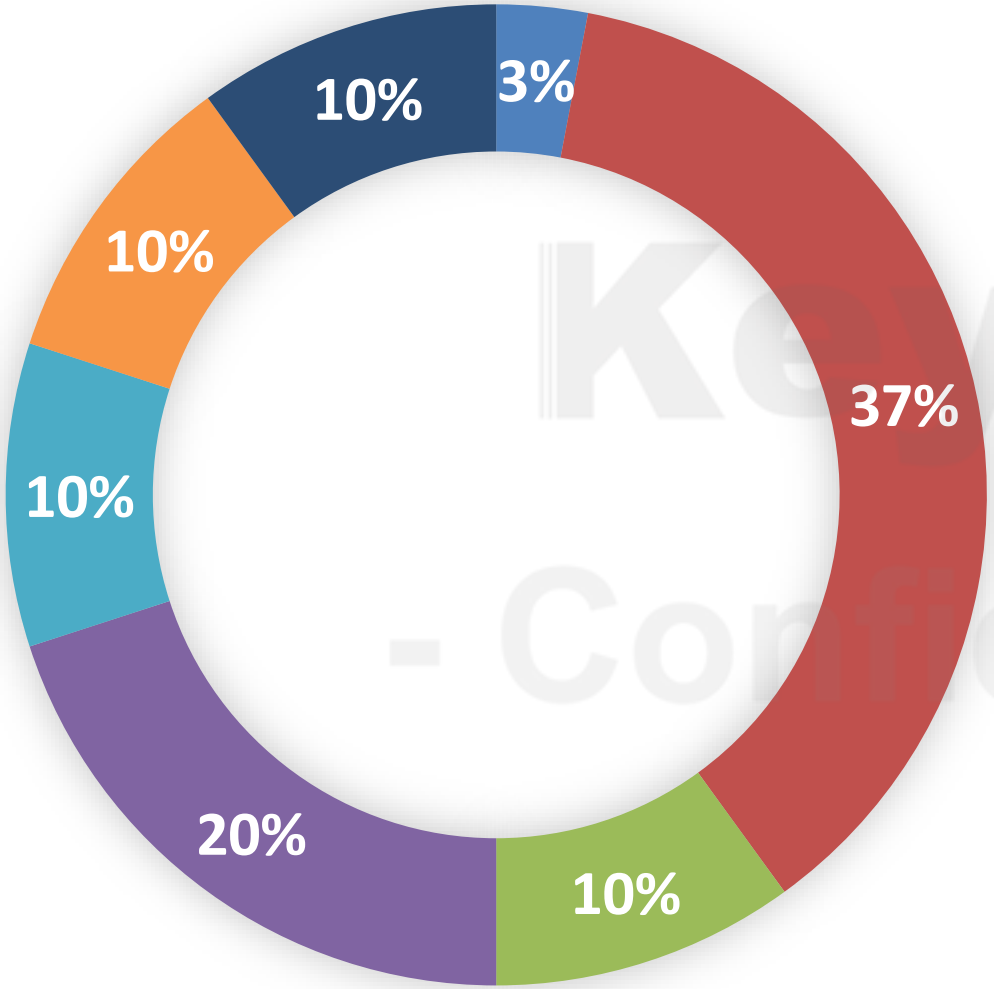




HPC 系統考量

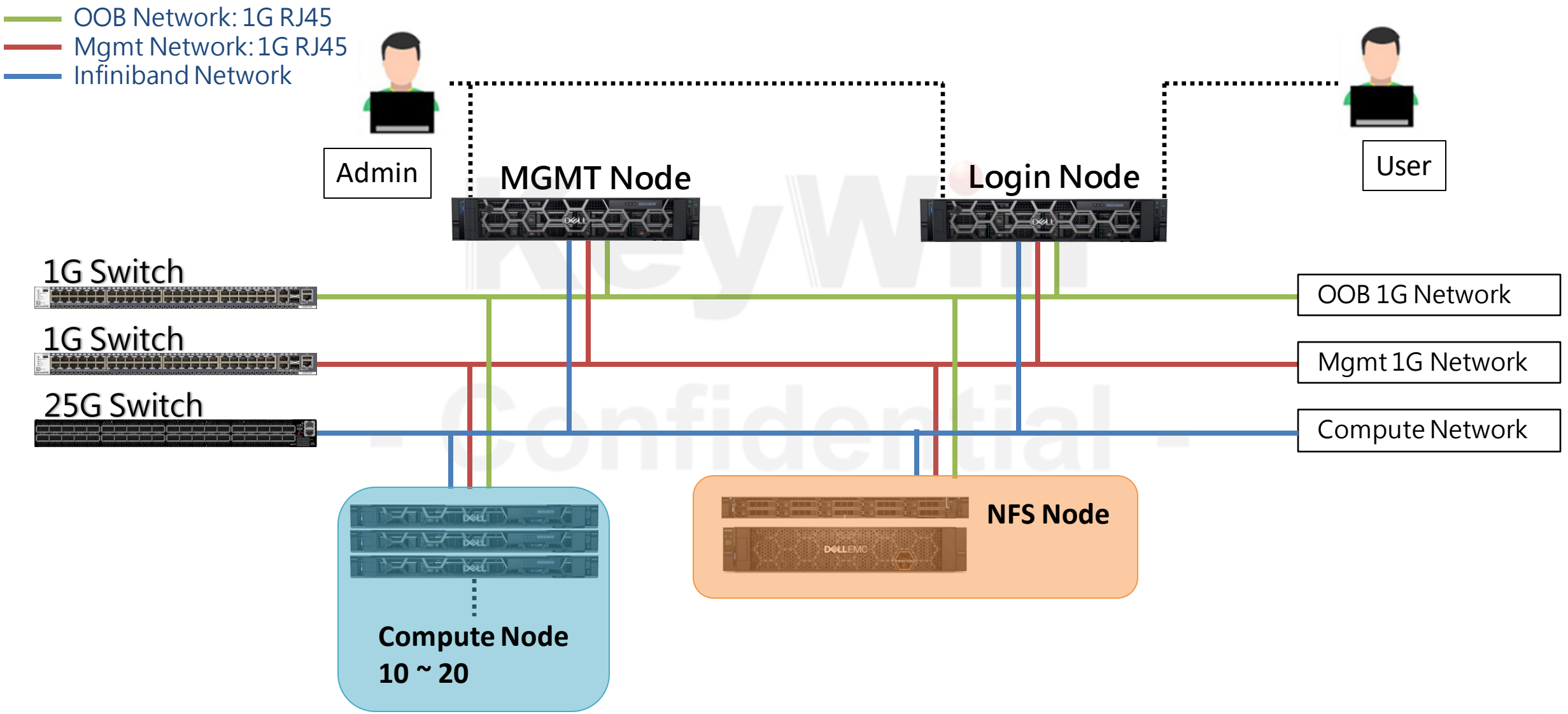
- 應用?
- 有哪些計算軟體?
- 多少人使用?
- 有無管理者?
- CPU? GPU?
- 儲存空間?
- 設備使用環境? 空間/電力/空調散熱
- 使用年限?
- 可接受down time多久? 服務等級 5x8 or 7x24?
- 預算?

HPC Budget?

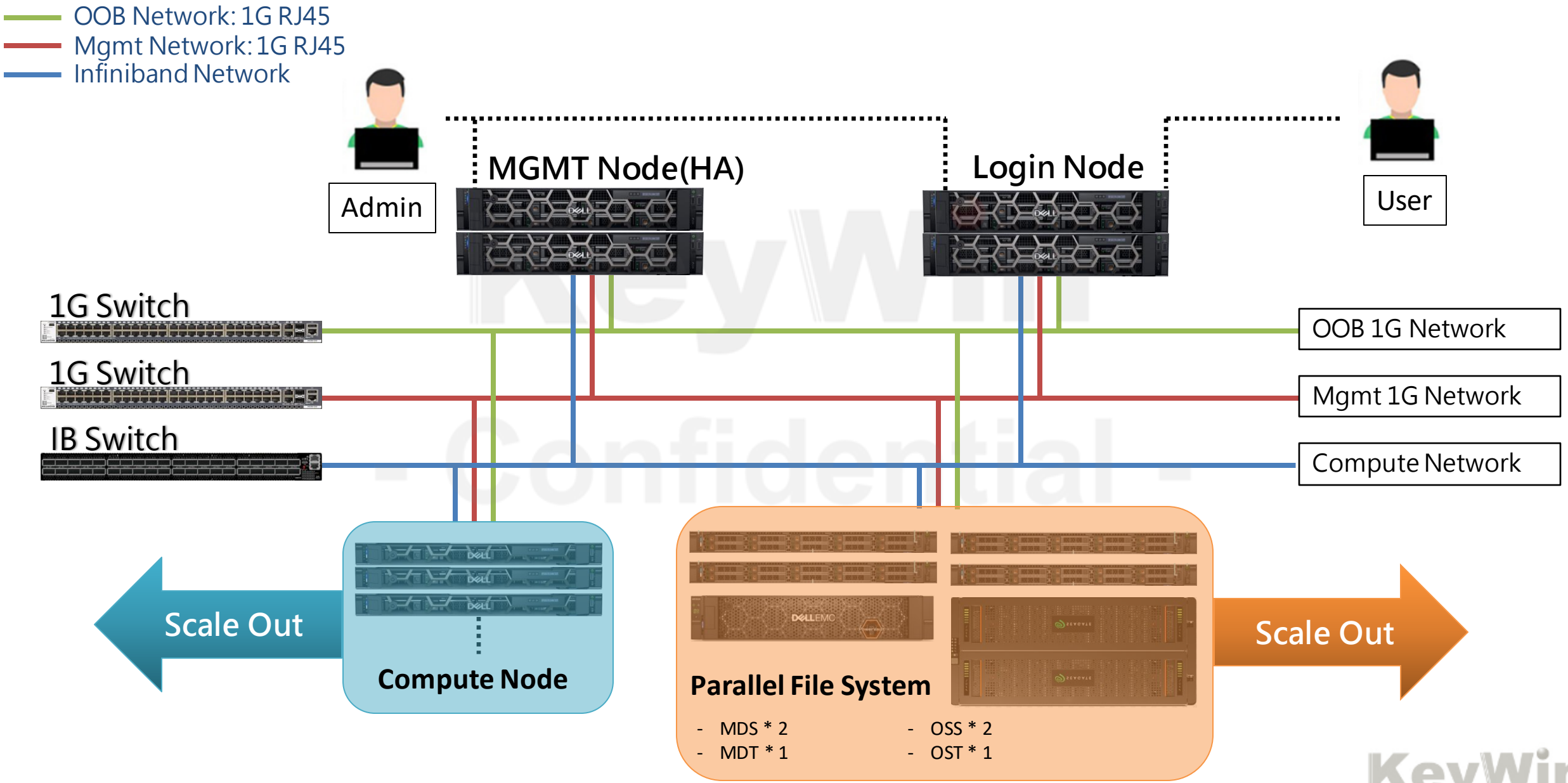


- 管理主機
- 運算主機 30-50%
- 網路系統 5-15%
- 儲存系統 5-25%
- 管理監控軟體 0-10%
- 機電整合 5-15%
- 建置服務 0-15%
- 維運成本(電力,人力,保固)- 不計入
- 計算軟體 - 不計入

小型HPCC基本架構圖



中大型HPCC網路架構圖



HPC節點角色

- **MGMT Node 管理節點**

  通常指的是管理節點（Management Node）。這是一個專門用於執行一些關於叢集管理的任務的節點，包括但不限於系統配置、性能監控、故障診斷和恢復、軟體部署和更新，以及安全管理等等。管理節點通常運行工作排程器，如 Slurm 或 PBS，這些排程器負責在叢集中分配計算資源，排列並管理使用者的計算任務。

- **Login Node 登入節點**

  也被稱為"Access Node"或者"Front-end Node"，是使用者進行遠程登錄，提交計算任務，編譯程式碼，以及管理資料等工作的節點。

- **Compute Node 計算節點**

  是叢集中的一個或多個節點，專門用於執行使用者提交的計算任務或者程式。在一些需要大量計算資源的情況下，多個 Compute Node 可能需要通過網路協同工作，一起完成一個計算任務。

- **Parallel File System 平行檔案系統**

  高效能計算（HPC）中的平行檔案系統， **ex: Lustre、BeeGFS、WekaFS、GPFS...**是一種能在多節點同時讀寫數據的檔案系統，主要用於提高資料存取效率和速度。它將檔案切分為多個部分，分佈在多個硬碟或儲存節點上，實現大量同時讀寫操作。此外，平行檔案系統也提供數據冗餘和錯誤檢測功能，以增強數據的可靠性和容錯性，並允許多個節點共享同一份數據資料。

- **OOB 1G Switch 硬體網路**

  Out-Of-Band（OOB）1G Switch主要負責管理和監控系統硬體的健康狀態和性能。它提供一條獨立的通道來監控硬體狀態、警報、以及其他硬體相關的資訊，如溫度、風扇轉速、電源狀態等，並用於執行硬體配置和管理，如韌體更新、遠端開機等。此外，這個通道也可以提供遠端診斷和故障修復的能力，以提高系統的可用性和穩定性。

- **Mgmt 1G Switch 系統網路**

  在高效能計算（HPC）環境中，MGMT（Management）1G Switch 主要用於支援網路管理活動。它連接所有節點（MGMT Node），並提供網路通道來執行各種管理任務，如配置管理、工作排程、性能監控、安全管理、以及軟體和系統更新等。這個管理網路通常與用於高性能計算和資料傳輸的主要網路分開，以防止管理流量影響計算和資料傳輸的性能。

- **Compute Network(IB Switch) 高速網路**

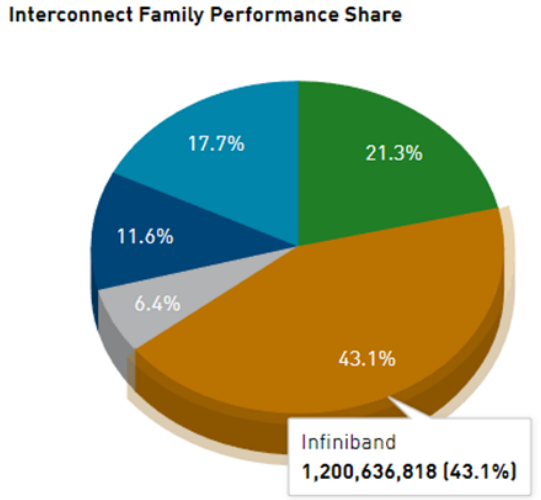
  在高效能計算（HPC）環境中，InfiniBand（IB）Switch是核心網路組件，主要負責在各個節點（如管理節點、登錄節點、計算節點）之間進行高速、低延遲的資料傳輸。透過優化的路由和交換能力，IB Switch能有效地將大量並行的資訊流導向正確的目的地，進而支援HPC的大規模並行運算和高效的資料共享。

HOW to choose HPC Server?

節　　點	型號/規格	說　　明
Compute Node	- CPU: AMD/Intel x 2 - Memory: 384GB (16GB x 24) - OS Drive: SSD x 2 (RAID 1) - NIC: HDR Infiniband Single Port NIC x 1 - LAN: 1G Dual Port - PSU x 2	1. 設備以2 CPU Socket為主，其他4/8 CPU Socket設備通常是有特殊用途。CPU 盡量選擇2.4GHz 以上高時脈為主 2. 一般計算節點記憶體大小之選取，以節點總記憶體與CPU核心數之比值考量(Total Memory Size/Total CPU Cores)，一般比值介於2~4GB/Core。 3. 記憶體通道插滿，ex: AMD EPYC 9004 support 12 Channel 4. 少數計算節點可以用大記憶體空間，例如1TB以上總記憶體空間，作為特殊需要大記憶空間之計算使用，但前提是有足夠經費的話。 5. 少數計算節點可以安裝GPU，作為特殊需要GPU之計算使用，但前提是有足夠經費的話。 6. OS：CentOS/Red Hat/Rocky Linux/Almalinux皆可，以作業系統穩定考量。 7. 使用高密度伺服器或高瓦度CPU應注意環境散熱規劃。
MGMT/Login Node	- CPU: AMD/Intel x 2 - Memory: 256GB (16GB x 16) 3200MT/s - OS Drive: SSD x 2(RAID 1)或 x3 x4 x5..(RAID 6) - NIC: HDR Single Port NIC x 1 - LAN: 1G Dual Port - PSU x 2	1. CPU應與Compute Node同一世代。 2. MGMT Node的OS Disk可以考慮組成Raid 6，因為此節重要性較高。 3. OS：CentOS/Red Hat/Rocky Linux/Almalinux皆可，以作業系統穩定考量。

HOW to choose HPC Network?

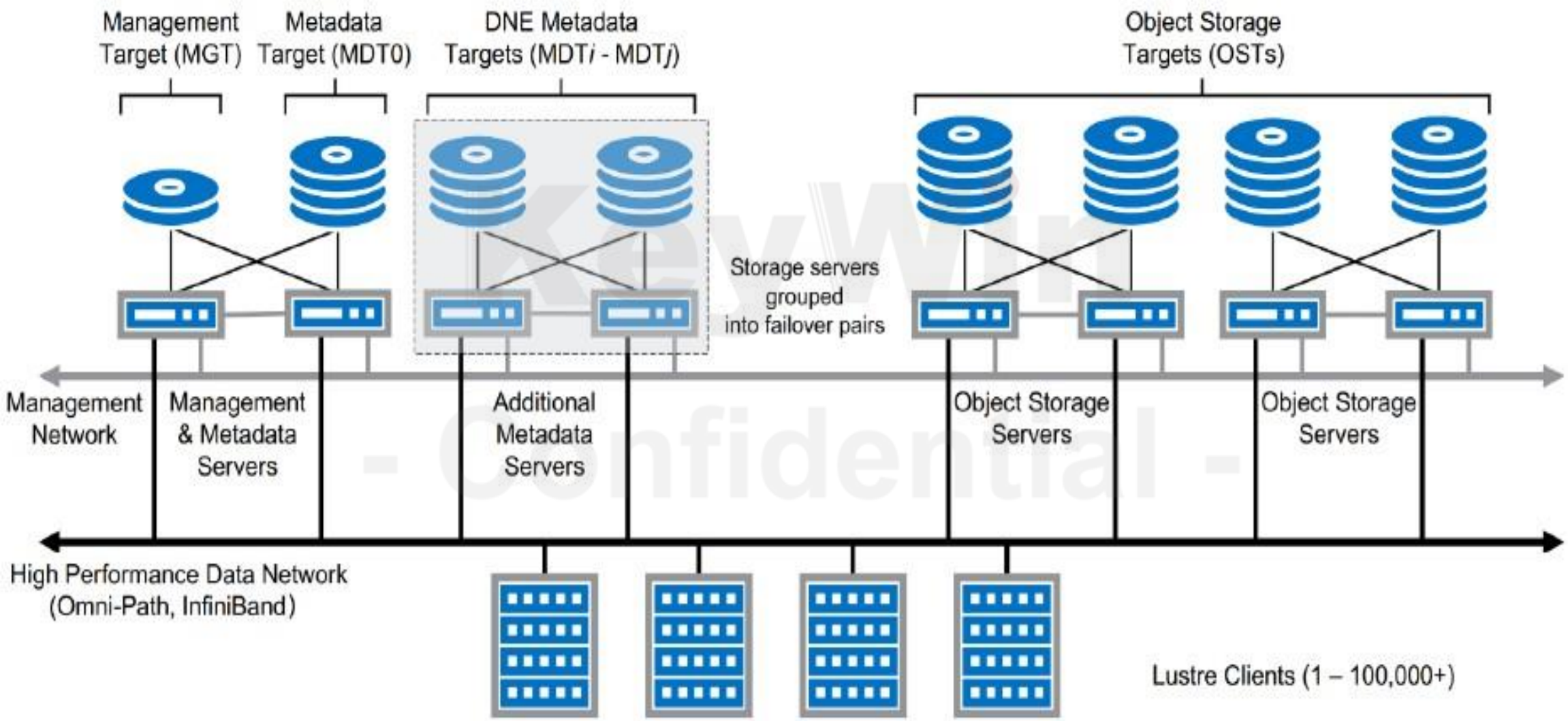
產品	型號/規格	說明
高速網路系統 IB Switch	Infiniband HDR Switch QM8700 - HDR 200G x 40Port - PSU * 2	- 中小型規模之HPC可採用具備IB網路管理功能之機種
管理網路系統 1G Switch	節點管理網路, 硬體管理網路 - 1G x 48Port - PSU * 2	



QM8700系列比較表

	連結速度	連接埠	高度	交換器容量	冷卻系統	骨幹模組	分葉模組	介面	PSU 數量	管理	子網路管理軟體
QM8700	每秒200Gb	40	1U	每秒 16Tb	氣冷	20	20	QSFP56	2	頻內/頻外	+
QM8790	每秒200Gb	40	1U	每秒 16Tb	氣冷	20	20	QSFP56	2	頻內	-

How to Choose HPC Storage? (HDD?)



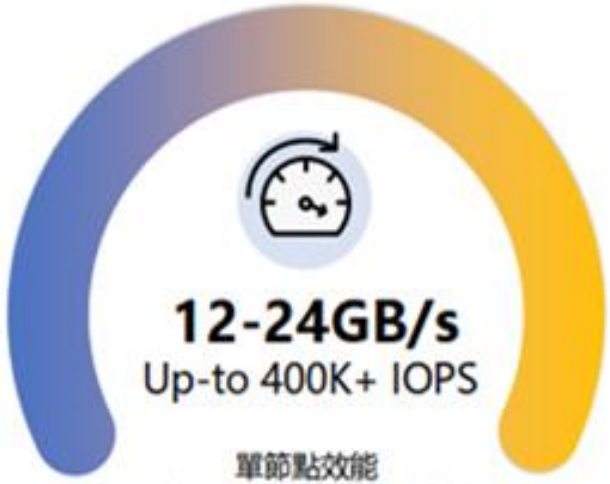
* From https://www.lustre.org

HPC 平行檔案系統 HA 連接架構

How to Choose HPC Storage? (NVMe SSD?)

現代平行檔案管理系統

專為 NVMe 存儲與高速網路打造

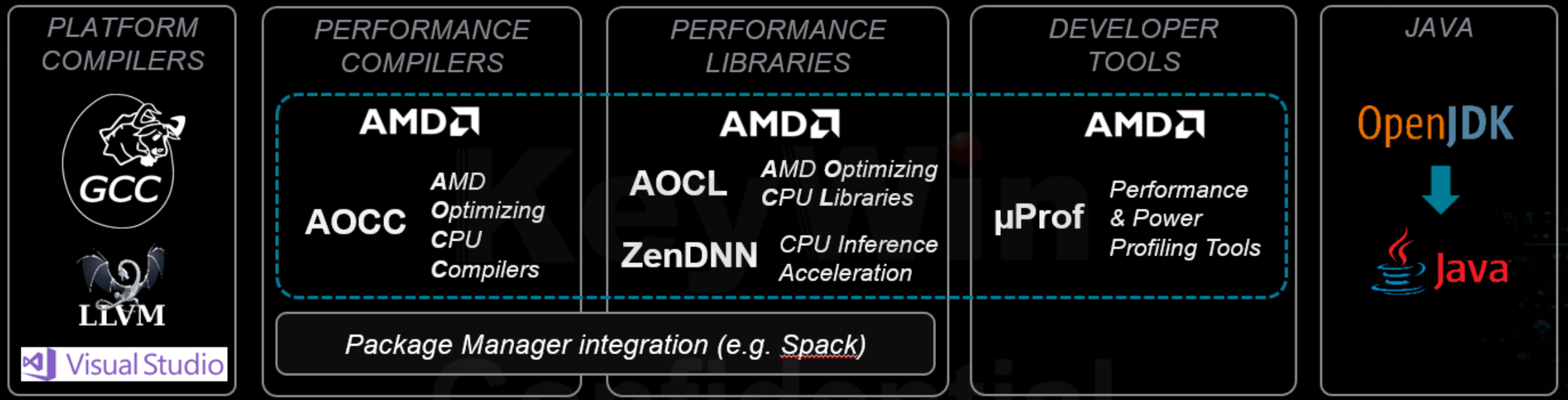


How to manage HPC

排程軟體	PBS pro/OpenPBS/Torque、SLURM、LFS
編譯器	GNU Compiler、Intel Compiler(Intel OneAPI)、AMD AOCC Compiler、PGI Compiler(NVIDIA HPC SDK) Support C, C++, Fortran
Library	MPI：Intel MPI(Intel OneAPI)、OpenMPI、MPICH… Math：Intel MKL(Intel OneAPI)、Lapack、ScaLapack、FFTW… IO：HDF5、netCDF4、PnetCDF、PIO…
環境變數管理模組	Environment Module、Lmod
硬體/系統監控	Dell Openmanage Enterprise、HPE OneView、ASUS Control Center、LibreNMS、Ganglia、BCM

TOOLCHAIN ECOSYSTEM

AMD EPYC™ Software Development Environment



Use AMD tools for best performance and code efficiency on EPYC CPUs

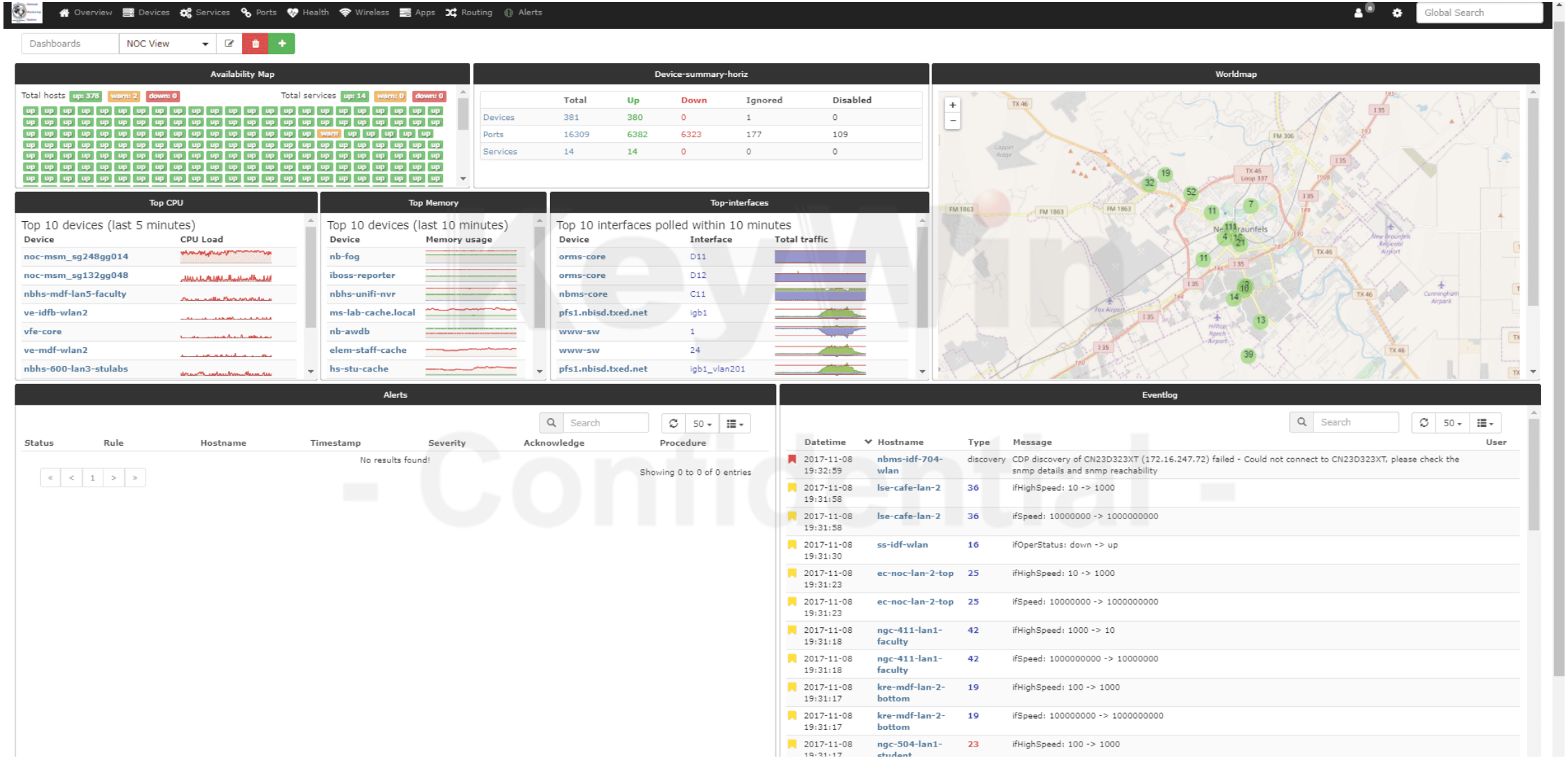
Compilers → Focus on delivering the best out-of-the-box code generation for C, C++, Fortran, Java.

Libraries → Support common kernels for core math, solvers and FFT.

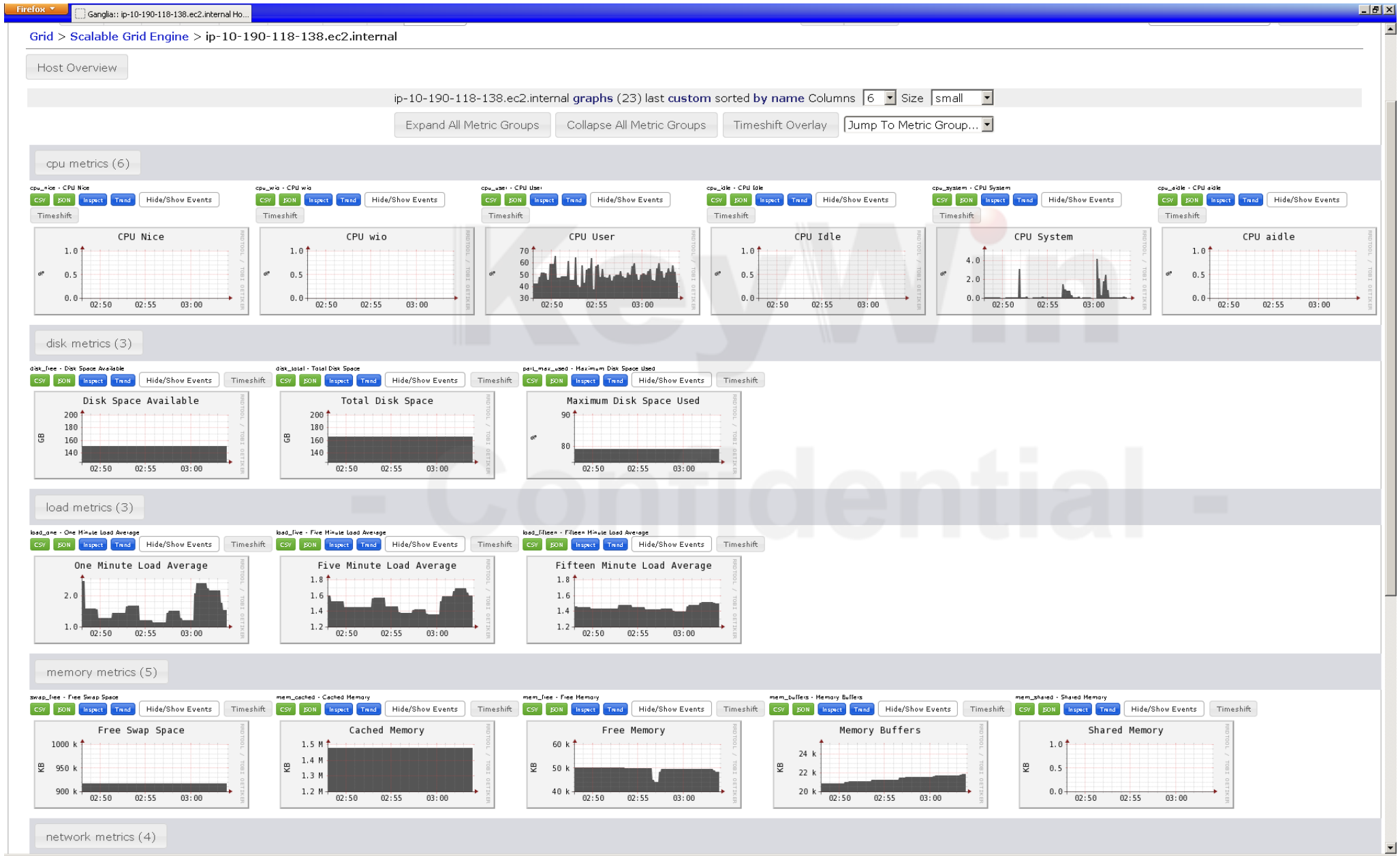
Profiling tools → Enable developers to access the full capabilities of EPYC CPUs.

All tools available at https://www.amd.com/en/developer/zen-software-studio.html

LibreNMS Dashboard



Ganglia



How to Benchmark/Test HPC

HPL	HPL（High Performance Linpack）是衡量高效能計算系統性能的標準工具，用於解決密集型線性代數問題。通過測試系統在執行浮點運算（特別是矩陣運算）時的性能，HPL提供了一種衡量和比較HPC系統性能的方法。
HPCG	HPCG（High Performance Conjugate Gradients）是一種測試高效能計算系統性能的基準測試工具，用於模擬現實世界中的計算負載。與傳統的Linpack基準測試相比，HPCG更加能反映當前實際應用程序中的計算和數據訪問模式。
Memtest86	Memtest86是一款檢測電腦記憶體錯誤的自由及開源的軟體。它會對系統的隨機存取記憶體（RAM）進行嚴格的測試，檢查並識別可能的故障或不良部分，以確保記憶體的穩定性和正確性。
IOR	IOR（Interleaved or Random）是一種常用於測試HPC系統中並行文件系統性能的工具。它可進行連續或隨機的讀寫測試，以衡量儲存系統在不同工作負載下的性能，從而幫助用戶評估和優化他們的儲存基礎設施。

Thank You