KiSTi www.kisti.re.kr 한국과학기술정보연구원 Korea Institute of Science and Technology Information

# OpenFOAM의 슈퍼컴퓨팅 활용 동향 및 활성화 지원

2019년 9월 27일

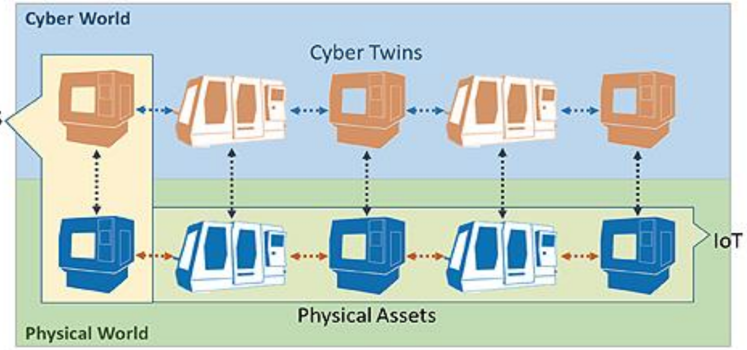
윤태호

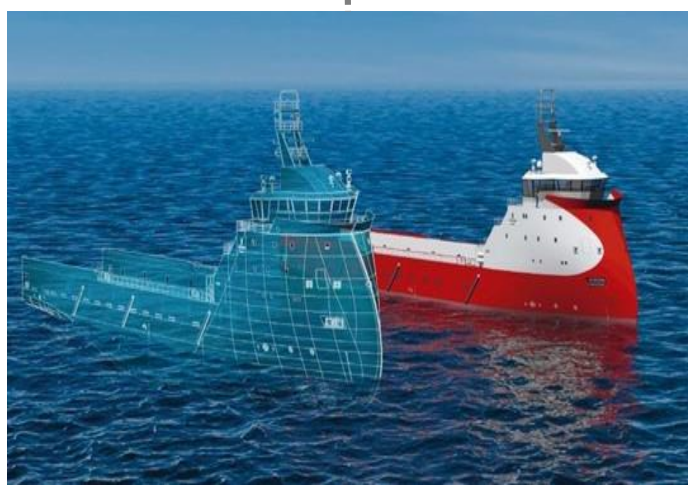
슈퍼컴퓨팅응용센터
한국과학기술정보연구원

# CONTENTS

# 소프트웨어 명칭 선정의 중요성

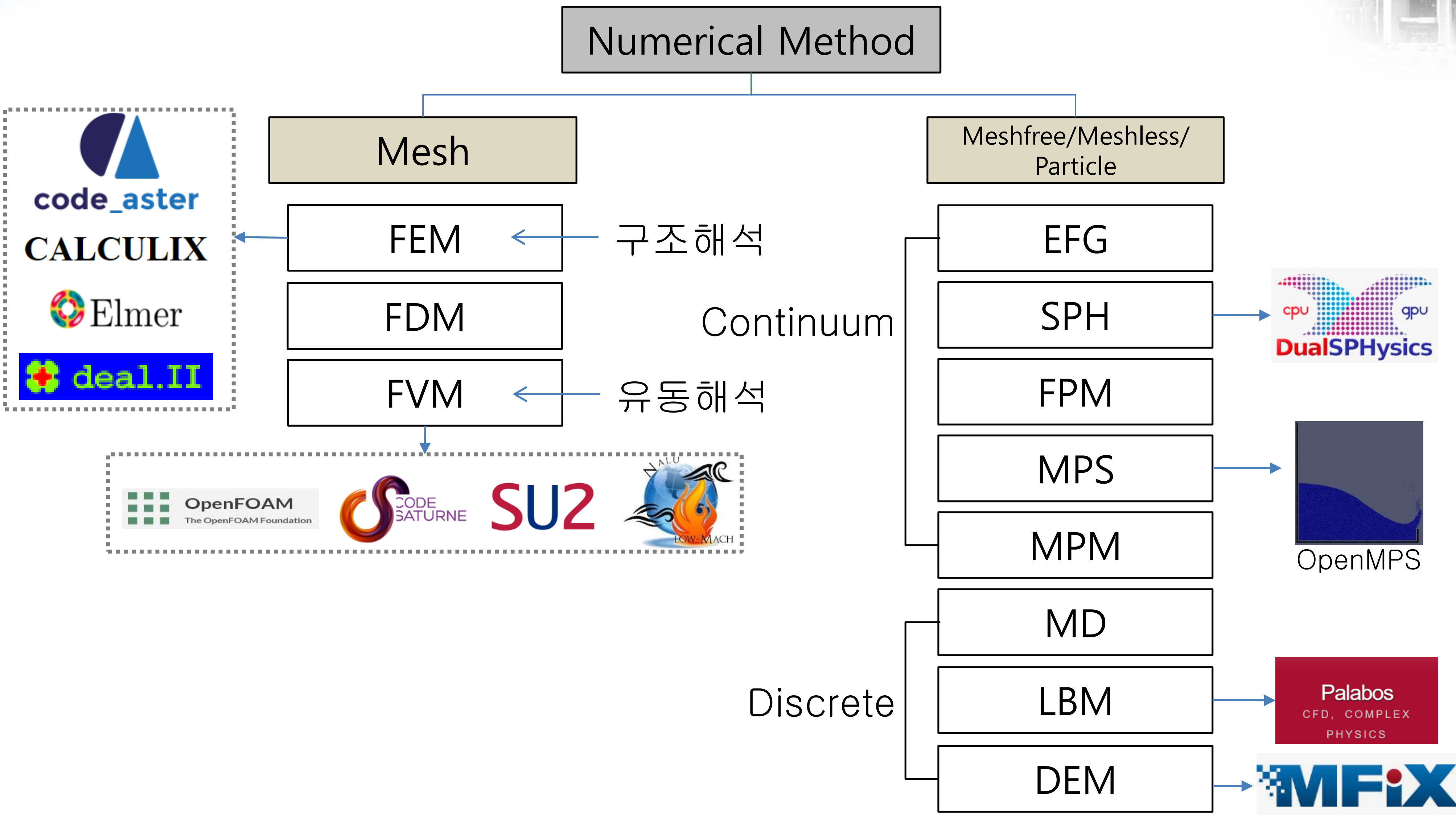
Red Sox



**FOAM**
(Field Operation And Manipulation)

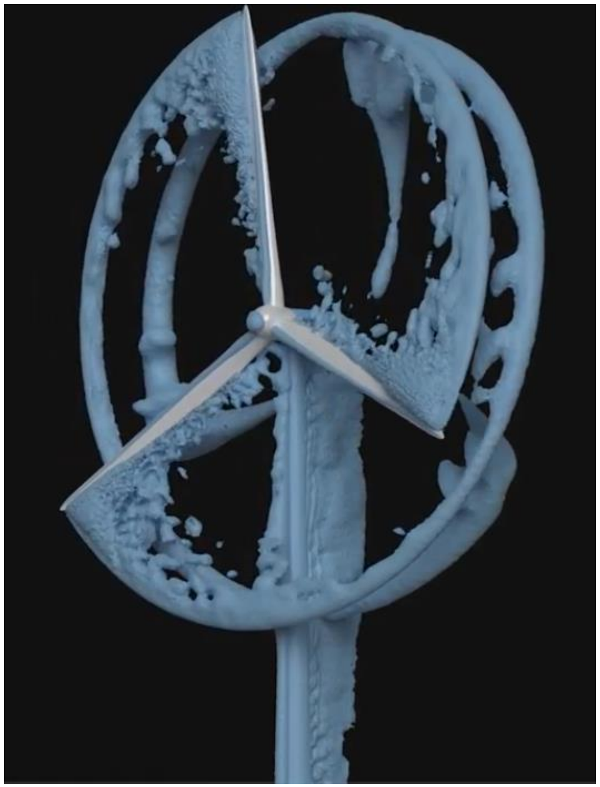
# 오픈 소스 소프트웨어 공학해석 소프트웨어 분류



# 슈퍼컴퓨팅 동향 – 엑사스케일급 시뮬레이션

large wind plants as part
DOE's Exascale Computing Project (ECP)

Nalu
open source code for CFD by SNL

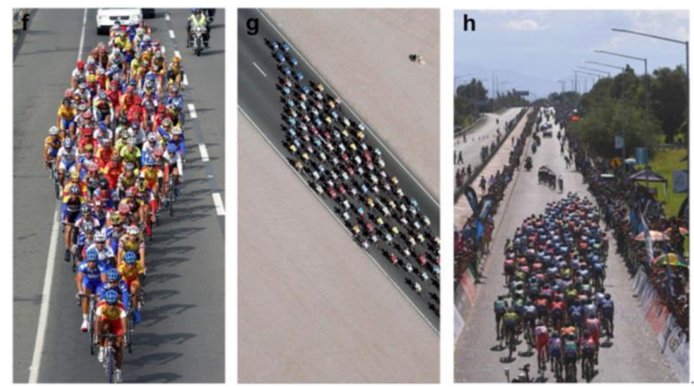


https://www.youtube.com/watch?v=ownqn0zILl8

https://phys.org/news/2016-10-nrel-exascale.html

Peloton aerodynamics interactions

Fluent
Commer-cial software for CFD

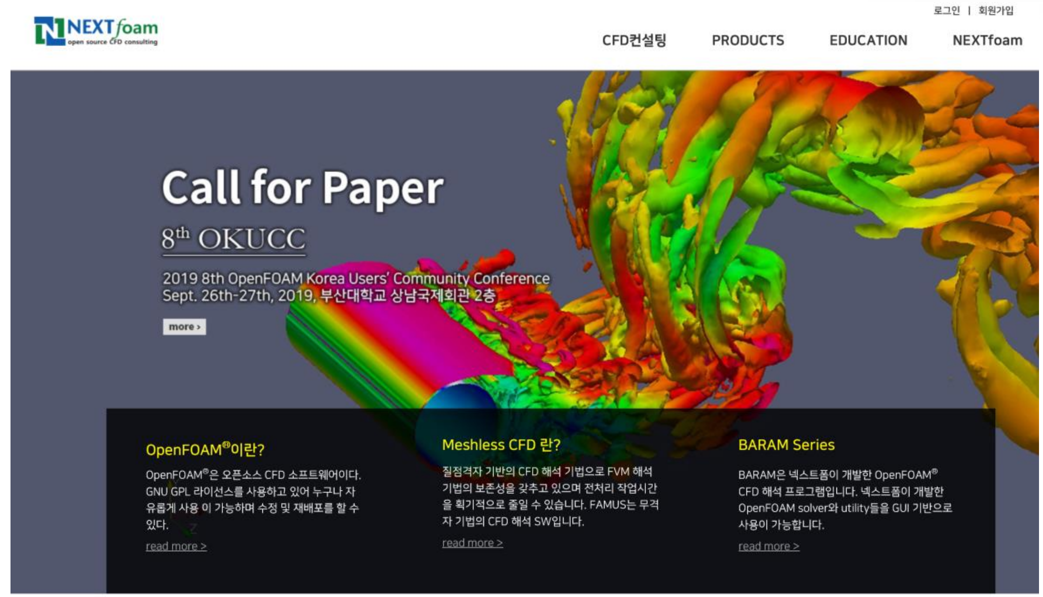



https://www.top500.org/news/worlds-largest-cfd-simulation-upends-conventional-wisdom-in-bicycle-racing/

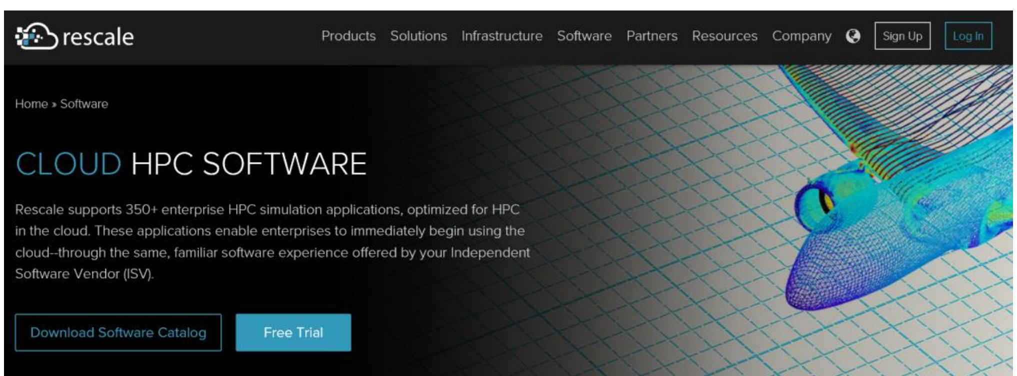
# 오픈소스 소프트웨어의 비즈니스 활용

SIMSCALE https://www.simscale.com/


NEXTfoam open source CFD consulting http://nextfoam.co.kr/




rescale https://www.rescale.com/




~~오픈씨에이~~

~~디지털에셋~~

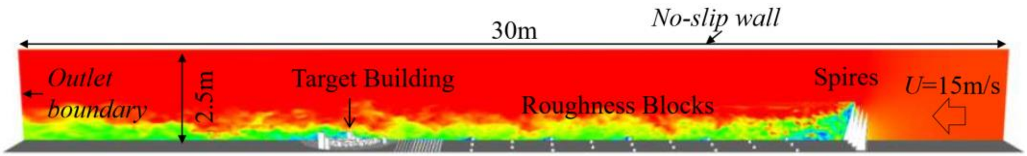
# OpenFOAM의 슈퍼컴퓨팅 활용

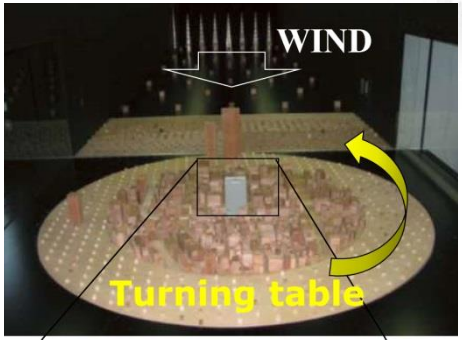
- Top500 list(June 2019, https://www.top500.org/list/2019/06/)

| Rank | Site | System | Cores | Rmax (TFlop/s) | Rpeak (TFlop/s) | OpenFOAM |
|---|---|---|---|---|---|---|
| 1 | DOE/SC/Oak Ridge National Laboratory<br>United States | **Summit** - IBM Power System AC922, IBM POWER9 22C 3.07GHz, NVIDIA Volta GV100, Dual-rail Mellanox EDR Infiniband<br>IBM | 2,414,592 | 148,600.0 | 200,794.9 | |
| 2 | DOE/NNSA/LLNL<br>United States | **Sierra** - IBM Power System S922LC, IBM POWER9 22C 3.1GHz, NVIDIA Volta GV100, Dual-rail Mellanox EDR Infiniband<br>IBM / NVIDIA / Mellanox | 1,572,480 | 94,640.0 | 125,712.0 | |
| 3 | National Supercomputing Center in Wuxi<br>China | **Sunway TaihuLight** - Sunway MPP, Sunway SW26010 260C 1.45GHz, Sunway<br>NRCPC | 10,649,600 | 93,014.6 | 125,435.9 | O |
| 4 | National Super Computer Center in Guangzhou<br>China | **Tianhe-2A** - TH-IVB-FEP Cluster, Intel Xeon E5-2692v2 12C 2.2GHz, TH Express-2, Matrix-2000<br>NUDT | 4,981,760 | 61,444.5 | 100,678.7 | O |
| 5 | Texas Advanced Computing Center/ Univ. of Texas<br>United States | **Frontera** - Dell C6420, Xeon Platinum 8280 28C 2.7GHz, Mellanox InfiniBand HDR<br>Dell EMC | 448,448 | 23,516.4 | 38,745.9 | O |
| 6 | Swiss National Supercomputing Centre (CSCS)<br>Switzerland | **Piz Daint** - Cray XC50, Xeon E5-2690v3 12C 2.6GHz, Aries interconnect , NVIDIA Tesla P100<br>Cray Inc. | 387,872 | 21,230.0 | 27,154.3 | |
| 7 | DOE/NNSA/LANL/SNL<br>United States | **Trinity** - Cray XC40, Xeon E5-2698v3 16C 2.3GHz, Intel Xeon Phi 7250 68C 1.4GHz, Aries interconnect<br>Cray Inc. | 979,072 | 20,158.7 | 41,461.2 | |
| 8 | National Institute of Advanced Industrial Science and Technology (AIST)<br>Japan | **AI Bridging Cloud Infrastructure (ABCI)** - PRIMERGY CX2570 M4, Xeon Gold 6148 20C 2.4GHz, NVIDIA Tesla V100 SXM2, Infiniband EDR<br>Fujitsu | 391,680 | 19,880.0 | 32,576.6 | |
| 9 | Leibniz Rechenzentrum<br>Germany | **SuperMUC-NG** - ThinkSystem SD650, Xeon Platinum 8174 24C 3.1GHz, Intel Omni-Path<br>Lenovo | 305,856 | 19,476.6 | 26,873.9 | O |
| 10 | DOE/NNSA/LLNL<br>United States | **Lassen** - IBM Power System S922LC, IBM POWER9 22C 3.1GHz, Dual-rail Mellanox EDR Infiniband, NVIDIA Tesla V100<br>IBM / NVIDIA / Mellanox | 288,288 | 18,200.0 | 23,047.2 | |
| 15 | Korea Institute of Science and Technology Information<br>Korea, South | **Nurion** - Cray CS500, Intel Xeon Phi 7250 68C 1.4GHz, Intel Omni-Path<br>Cray Inc. | 570,020 | 13,929.3 | 25,705.9 | O |

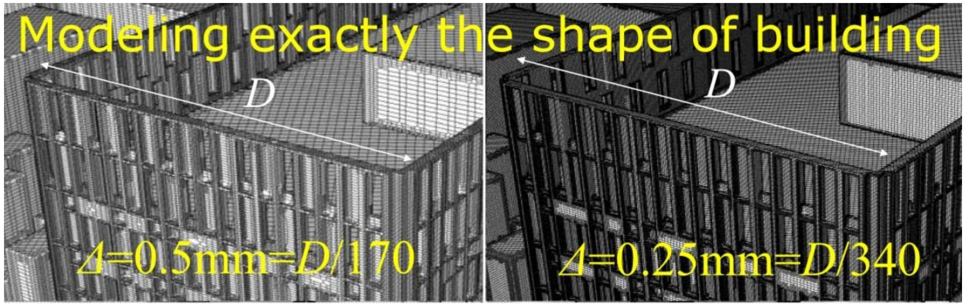
# OpenFOAM의 슈퍼컴퓨팅 활용

## LES for Wind Tunnel Test of Tokyo city



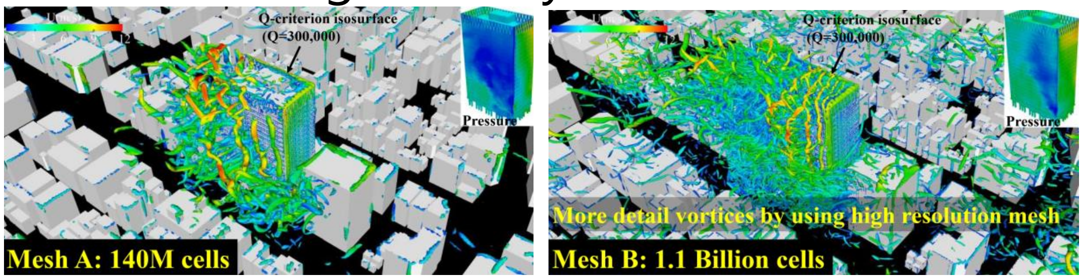




## High resolution mesh



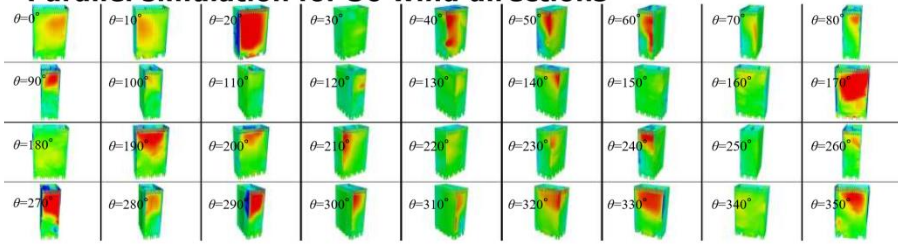

**Mesh A: 140M cells** **Mesh B: 1.1billion cells**

## High fidelity simulation




## Shape optimization

**Parallel simulation for 36 wind directions**




(Reference: Pham Van PHUC, etc, Large Scale Transient CFD Simulations for Buildings using OpenFOAM on a World's Top-class Supercomputer, The 4th Annual OpenFOAM User Conference 2016)

# 소프트웨어 및 하드웨어 비용 문제 검토

- 상용 소프트웨어 비용은 병렬효율 극대화를 위한 장애 요인

ANSYS Elastic license


Geometry interfaces: 1AEU/h
(Autodesk, CATIA V5, Creo Parametric)

ECAD Translators & Optimization: 2AEU/h
Pre/Post & HPC Pack: 4AEU/h

Solver: 8AEU/h

최근 구매 고려: 3,000원~4,000원/AEU

Amazon EC2

| Name | VCPU | ECU | Memory | $ Per Hour | Type |
|---|---|---|---|---|---|
| m4.10xlarge | 40 | 125 | 160 GB | $2.000 | General Purpose |
| m5.12xlarge | 48 | 173 | 192 GB | $2.304 | General Purpose |
| m5.24xlarge | 96 | 345 | 384 GB | $4.608 | General Purpose |
| c5.4xlarge | 16 | 68 | 32 GB | $0.680 | Compute Optimised |
| c5.9xlarge | 36 | 141 | 72 GB | $1.530 | Compute Optimised |
| c5.18xlarge | 72 | 281 | 144 GB | $3.060 | Compute Optimised |

KISTI www.kisti.re.kr

Nurion

| 계산노드 구분 | 노드 사용 시간(A) (구좌당) | 시간당 이용료(C)/ (1노드 기준) |
|---|---|---|
| KNL | 6,400 노드 시간 | 156원 |
| SKL | 3,200 노드 시간 | 312원 |

# CONTENTS



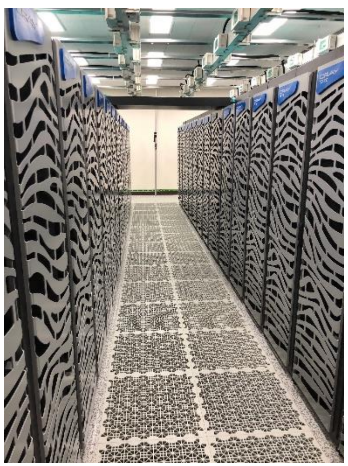
# NURION supercomputer

- 5th supercomputer of KISTI: Cray CS500
  - Total 8,437 nodes, Rpeak 25.7Pflops
  - Service start of October 2018

KNL: 8,305 nodes: (3.0464Tflps*8305=25.3Pflops)
SKL: 132 nodes: (3.072Tflps*132=405.5Tflops=0.4Pflops)

온 국민이 다 함께 누리는 국가 슈퍼컴퓨터

OPA cable



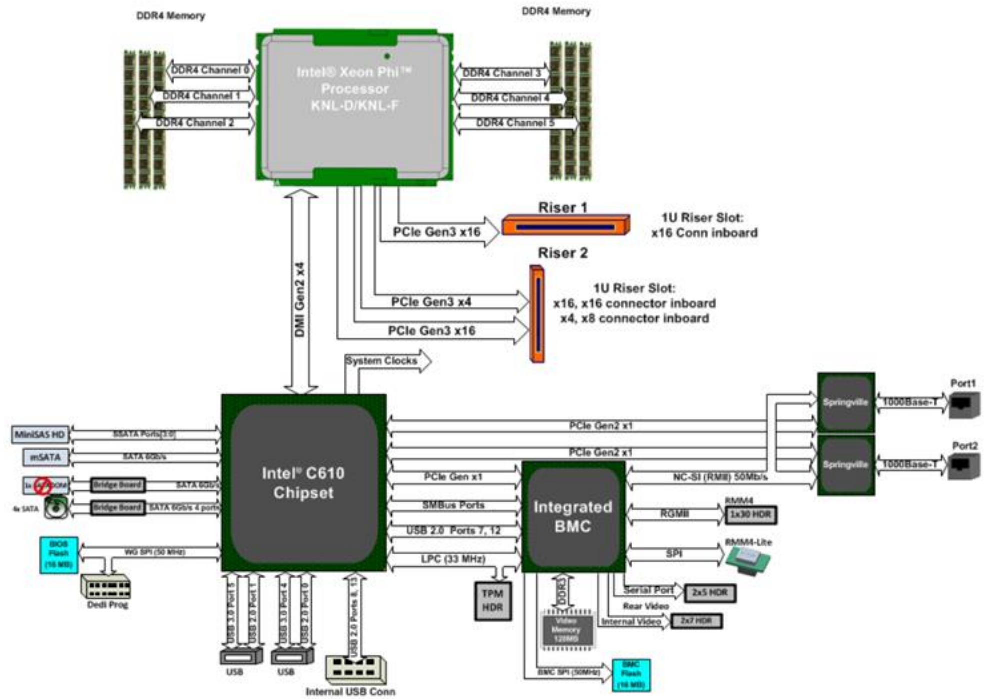
front


back

# KNL for major nodes of NURION

- KNL compute node - Cray 3112-AA000T
  - 1 x Intel Xeon Phi KNL 7,250 processor(68 cores per processor)
  - 96GB(6*16GB) DDR-2400 RAM
  - 1x Single-port 100Gbps OPA HFI card
  - 1x On-board GigE(RJ45) port

| | KNL |
|---|---|
| Number of cores | 68 |
| SIMD width (doubles) | 8 * 2 |
| Multiply/add in 1 cycle | 2 |
| Clock speed(Gcycle/s) | 1.4 |
| DP Gflop/s/core | 44.8 |
| DP Gflops/s/processor | 3,046 |



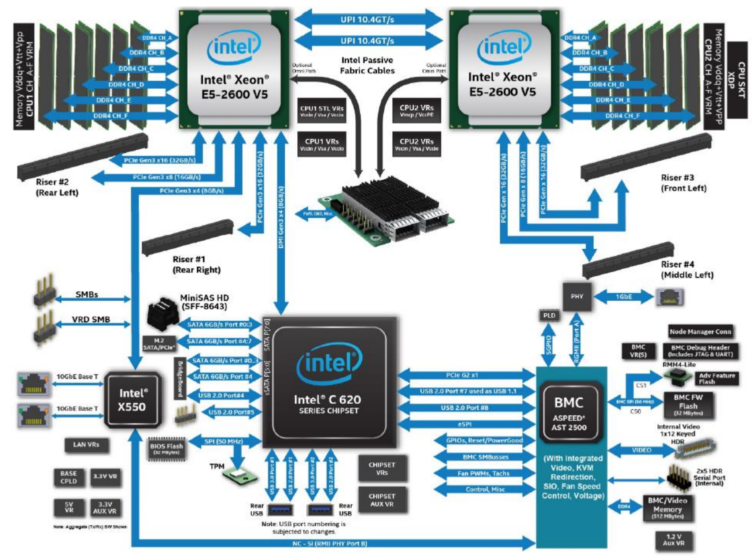



Korea Institute of Science and Technology Information
www.kisti.re.kr

# SKL for NURION

- SKL compute node - Cray 3111-BA000T
  - 2 x Intel Xeon SKL 6148 processors
  - 192GB (12x 16GB) DDR4-2666 RAM
  - 1x Single-port 100Gbps OPA HFI card
  - 1x On-board GigE(RJ45) port

| | SKL |
|---|---|
| Number of cores | 20 |
| SIMD width (doubles) | 8 * 2 |
| Multiply/add in 1 cycle | 2 |
| Clock speed(Gcycle/s) | 2.4 |
| DP Gflop/s/core | 76.8 |
| DP Gflops/s/processor | 1,536 |




# OpenFOAM 설치 소개

- KISTI 슈퍼컴퓨팅 블로그를 통한 누리온 설치 소개
  https://blog.ksc.re.kr/140

사용자 지침서/누리온(NURION)

## 누리온 OpenFOAM 사용자 지침서

천연사이다 | 2019.05.28 15:17

본 문서는 누리온 시스템에서 OpenFOAM 소프트웨어 사용을 위한 기초적인 정보를 제공하고 있습니다.
따라서, OpenFOAM 소프트웨어 사용법 및 누리온/리눅스 사용법 등은 포함되어 있지 않습니다.
누리온/리눅스 사용법에 대한 정보는 헬프데스크 홈페이지 (http://helpdesk.ksc.re.kr)의 자료실 내에 누리온 사용자 지침서 등을 참고하시기 바랍니다.
OpenFOAM 사용법에 대한 정보는 OpenFOAM 사이트(https://www.openfoam.com, https://openfoam.org, http://openfoamwiki.net)를 참고하시기 바랍니다.

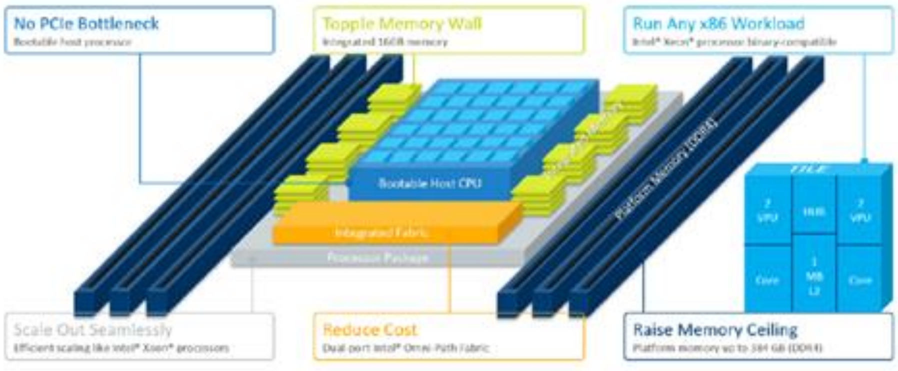
**1. 소프트웨어 설치 정보**
**(1) 설치 버전**
- 4.1(KNL, SKL), 5.0(KNL, SKL)

**(2) 설치 위치**

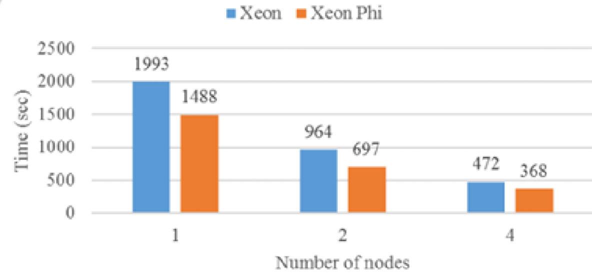
| Version | CPU 구분 | 설치 경로 | 비고 |
|---|---|---|---|
| 4.1 | KNL | /apps/applications/OpenFOAM/4.1/intel/17.0.5/impi/17.0.5/mic-knl/OpenFOAM | |
| | SKL | /apps/applications/OpenFOAM/4.1/intel/17.0.5/impi/17.0.5/x86-skylake/OpenFOAM | |
| 5.0 | KNL | /apps/applications/OpenFOAM/5.0/intel/18.0.3/impi/18.0.3/mic-knl/OpenFOAM | |
| | SKL | /apps/applications/OpenFOAM/5.0/intel/18.0.3/impi/18.0.3/x86-skylake/OpenFOAM | |

# Optimized OpenFOAM v5.x setting

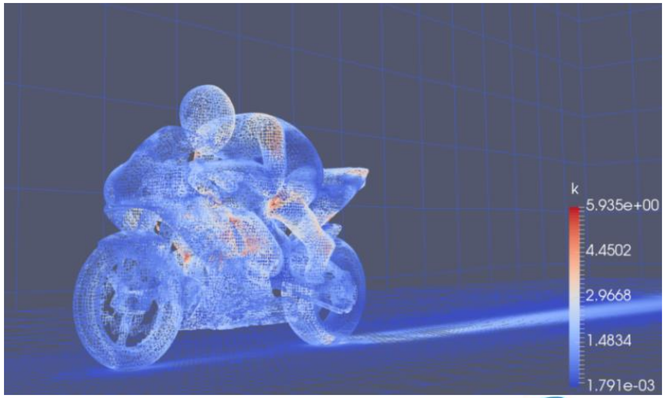
- Intel KNL architecture processor as NURION major node
  - Large scale integrated processor of Xeon Phi
  - High-bandwidth memory (2 times vector units bigger than original memory)




[Structure of Intel Xeon Phi KNL]



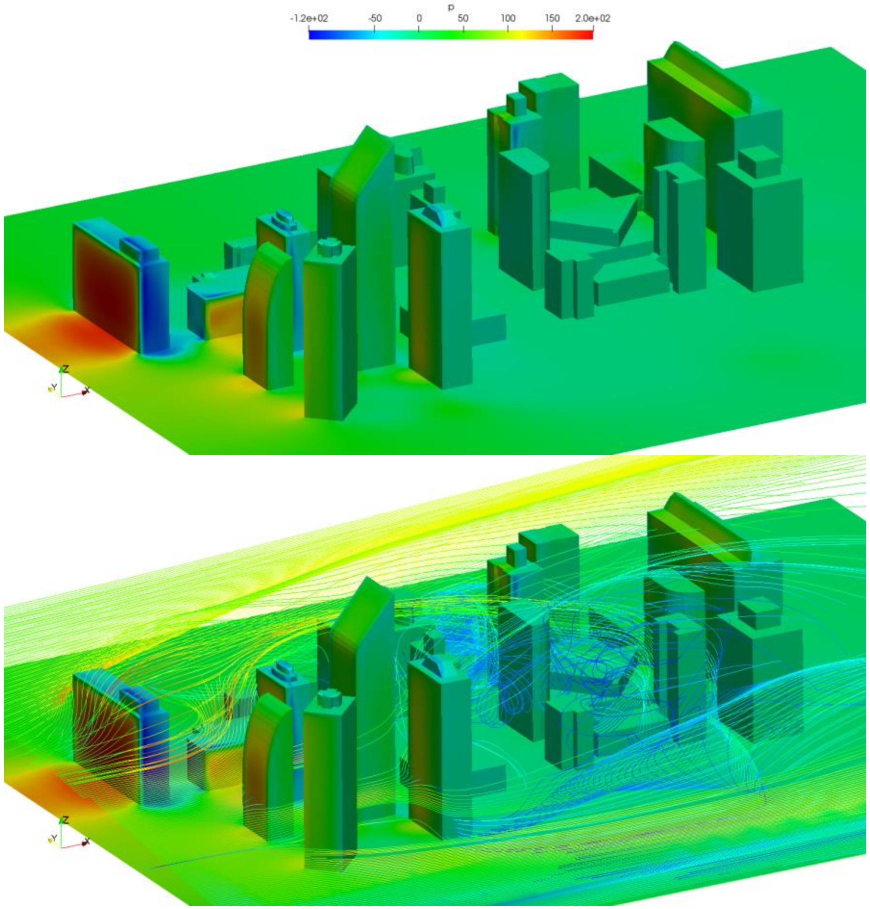

- OpenFOAM v5.x installation and execution
  - Optimal compiler option for to KNL installation
  - Execution option usage by matrix solver with intel optimized smootherKNL or libhbm library for flat memory mode
  - OpenMPI vs. IntelMPI



# Parallel computing in NURION KNL

- Fine mesh example of windAroundBuildings
  - mesh: #32,738,734
  - solver: simpleFoam

    stead-state incompressible flow analysis



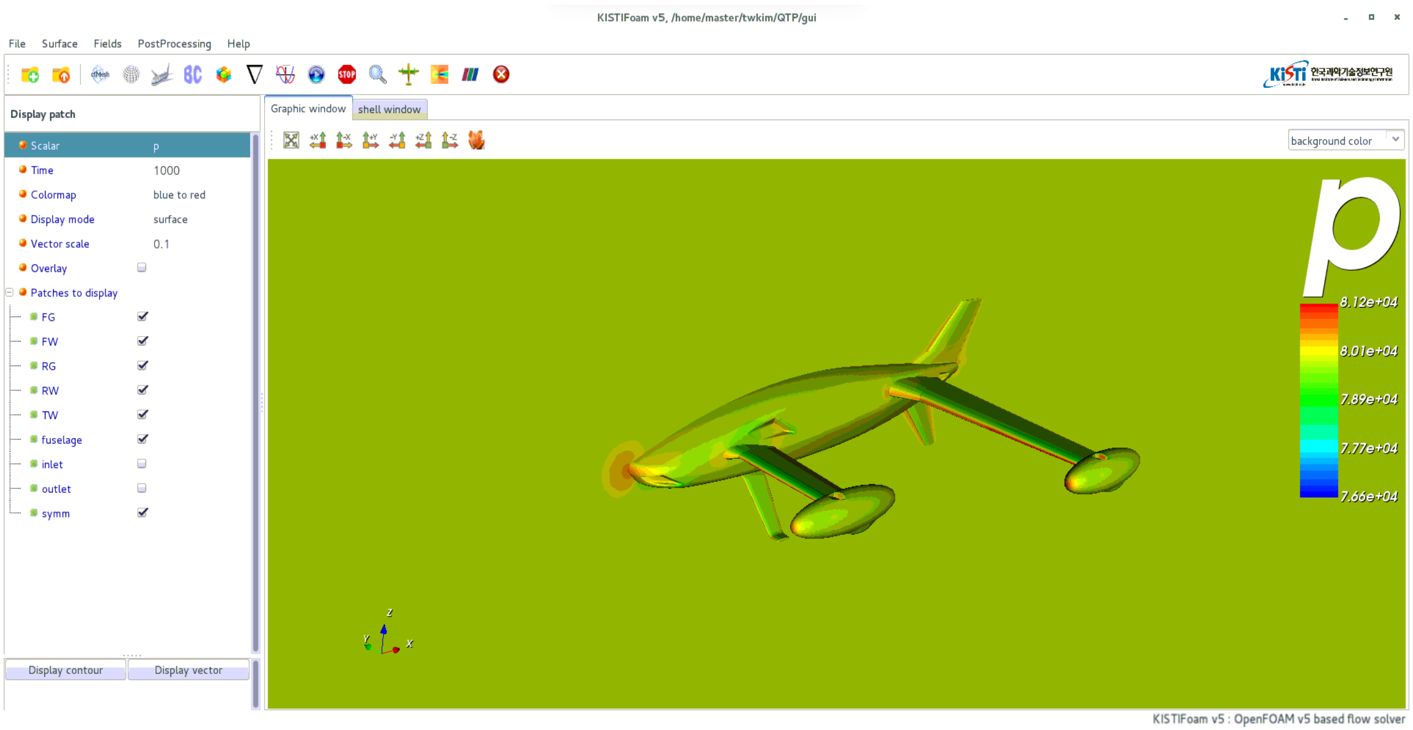

libhbm library environment:

HBM_SIZE 60, HBM_THRESHOLD 16
MPI_BUFFER_SIZE 1000000

| #node | #core | ClockTime(s) |
|---|---|---|
| 1 | 64 | 25,686 |
| 2 | 32 | 20,202 |
| 4 | 16 | 11,806 |
| 8 | 8 | 11,113 |
| 16 | 4 | 11,061 |
| 16 | 16 | 3,449 |

# KISTFoam v1.0 GUI tool

- OpenFOAM v5.x based GUI tool
  - Recommendation of CentOS v7 or UBUNTU v18.04 OS
  - Limited to Incompressible flow/thermal analysis
  - Inclusion of CFMesh for meshing in KISTIFoam
    (But, KISTIFoam-snappy is served separately for snappyHexMesh)



# CONTENTS

# KISTI 슈퍼컴퓨터 지원 프로그램

## ▪ 하드웨어 자원 사용 방법

### 유료 지원

**일반회원제**

- ·1구좌/100만원 단위 계약
- ·KNL:6,400h/node
- ·SKL:3,200h/node

**총액회원제**

- ·국가차원 지원 필요 사업을 위한 기관 간 계약 체결

※KNL(Intel Knight Landing): 매우 많은 CPU 코어를 사용해 거대 문제 해결
※SKL(Intel Skylake): 상대적으로 작은 규모 문제를 빠르게 해결

※과금 시간: SRU(Service Resource Unit) time

<신청>
https://helpdesk.ksc.re.kr/

### 무료 지원

**초고성능컴퓨팅 기반 R&D 혁신지원 프로그램**

·선정: 금년도 5월, 8월, 11월 3회 시행

| 거대연구 | 창의연구 | 혁신지원 |
|---|---|---|
| ·5PF급 이상 문제 대상<br>· KNL 5,400,000 h/node 할당 | ·계산과학,인공지능 등 연구 대상<br>·최대 KNL 320,000 h/node 또는 SKL 160,000 h/node 할당 | ·계산과학 혁신, 산업체 문제 해결 대상<br>최대 KNL 160,000 h/node 또는 SKL 80,000 h/node 할당 |

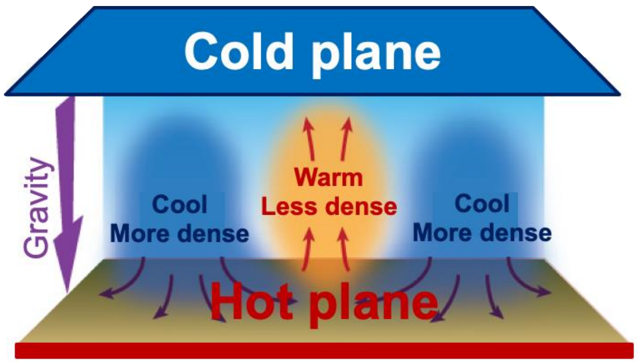
**최적병렬화 지원**

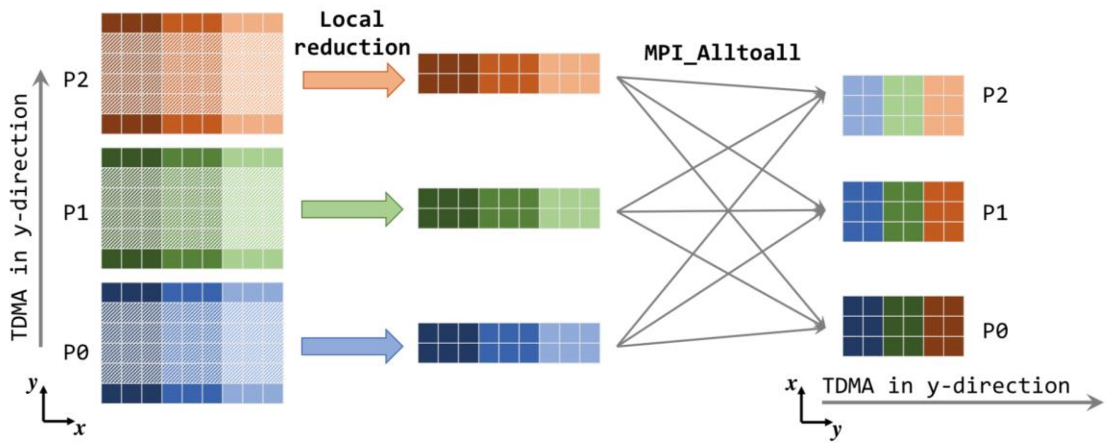
| 정기 | 수시 |
|---|---|
| **·매년 1월 모집**<br>· 성능최적화 지원을 최소 6개월에서 최대 1년 동안 (예외 인정) 수행 | **· 신청 후 2주 내 선정 결정**<br>· 코드 포팅, 성능최적화, 쓰레드 병렬화, 단순한 노드 병렬화, 활용 환경 개선 등 |

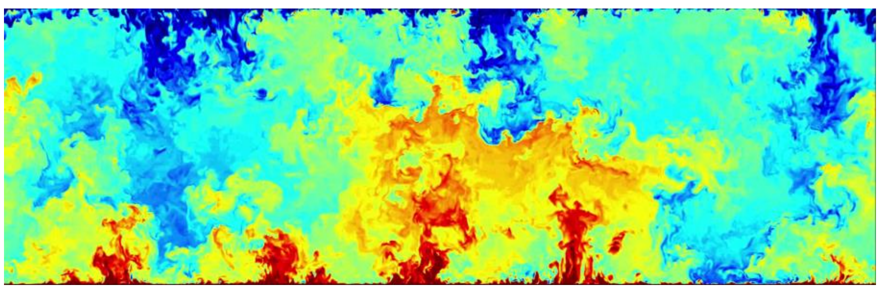
<신청>
https://enables.ksc.re.kr/

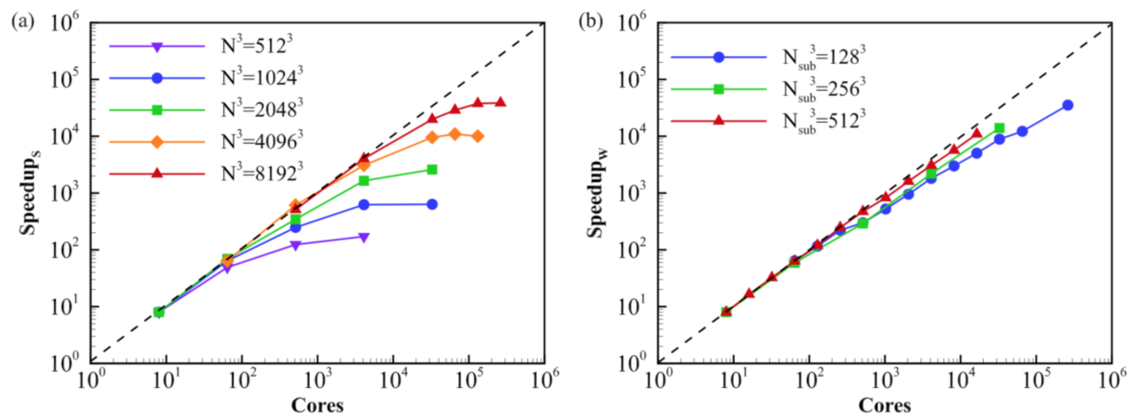
# 열유동해석 기술지원 결과

- 7.5PF급 세계 최고 수준 대규모 열유동 해석을 통한 초거대문제 해결
  - 고정밀 대규모 난류 열유동 해석코드(PaScaL_TDMA) 2,048노드(139,000코어)까지 병렬 확장



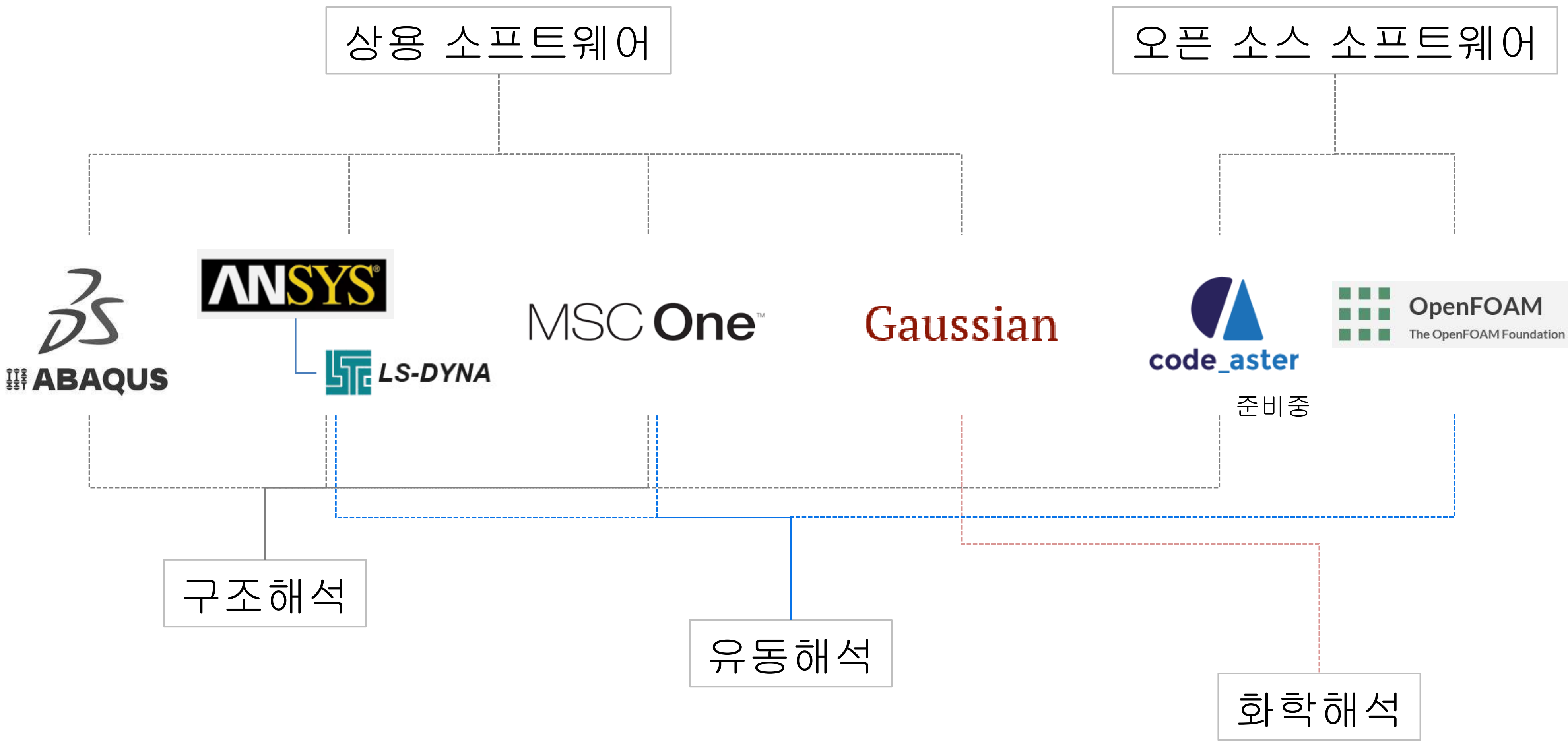





# KISTI 슈퍼컴퓨터 지원 프로그램

- 공학해석 소프트웨어 지원



# CONTENTS

# KISTI의 OpenFOAM 서비스 준비 상황

기초
정리단계
(19/03~06)

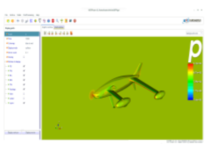
진입
단계
(19/06~11)

활성화
단계
(19/12~)

NEXTfoam open source CFD consulting

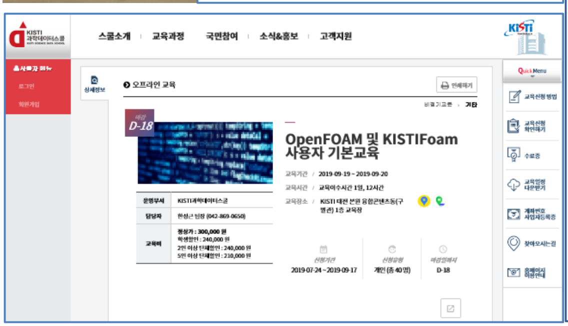
용역자료

유지보수

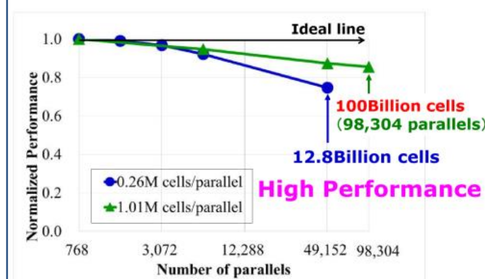


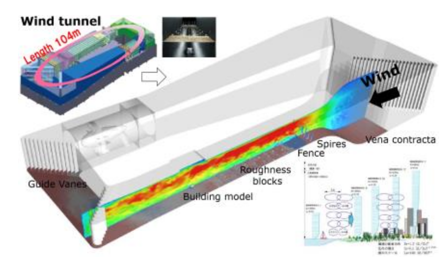
기본교육









# KISTI 교육 프로그램 소개

## 교육 목적

- 누리온 슈퍼컴퓨터 탑재 OpenFOAM(유동해석용 오픈소스 코드)의 산·학·연 관련자 대상 기본교육
- KISTI 개발 OpenFOAM용 GUI 툴인 KISTIFoam의 사용법 교육
- 점진적인 대규모 유동해석 분야를 위한 슈퍼컴퓨터 이용 활성화

## 교육 홍보 및 교육 일정

| 2019/9/6 | 2019/9/https://kacademy.kisti.re.kr27 | 2019/9/19~20 | 2019/10/15~16 | 2019/11/14~15 |
|---|---|---|---|---|
| 한밭대 산학협력단 소개 | OKUCC 발표 (부산) | 데이터스쿨 강의 (대전) | 데이터스쿨 강의 (서울) | 데이터스쿨 강의 (대전) |

## 교육 일정

교육비

-------------------------

정상가 : 300,000 원
학생할인 : 240,000 원
2인 이상 단체할인 : 240,000 원
5인 이상 단체할인 : 210,000 원

## 교육 내용

| 일차 | 시간 | 내용 | 강사 |
|---|---|---|---|
| 1일차 | 09:30~12:00 | 1. OpenFOAM 소개<br>2. OpenFOAM 설치 및 테스트 | 윤태호 |
| | 13:10~16:30 | 3. OpenFOAM 및 누리온 슈퍼컴퓨터 활용법 소개<br>4. OpenFOAM 예제 실습 | |
| 2일차 | 09:30~12:00 | 5. KISTIFoam 소개<br>6. KISTIFoam 설치 및 테스트 | |
| | 13:10~16:30 | 7. 격자 생성 실습<br>8. KISTIFoam 활용 예제 실습 | |

## 교육 신청

KISTI 과학데이터스쿨
KISTI SCIENCE DATA SCHOOL

https://kacademy.kisti.re.kr

# 감사합니다.

(thyoon@kisti.re.kr)