



第二届国产CPU并行应用挑战赛

2018 China Parallel Application Challenge On Domestic CPU

GROMACS并行计算优化报告

参赛队伍：SYSU_ASC队

指导老师：杜云飞

参赛单位：中山大学

参赛队员：张力越 丰光南 梁杰鑫 梁庭



中国计算机学会无锡分部



国家超级计算无锡中心
National Supercomputing Center in Wuxi

国家超级计算济南中心
NATIONAL SUPERCOMPUTER CENTER IN JINAN

PARATERA 并行®



主要内容

● •1.GROMACS简介

● •2.优化分析

● •3.我们的优化工作

● •4.总结



1.GROMACS简介

GROMACS
FAST. FLEXIBLE. FREE.



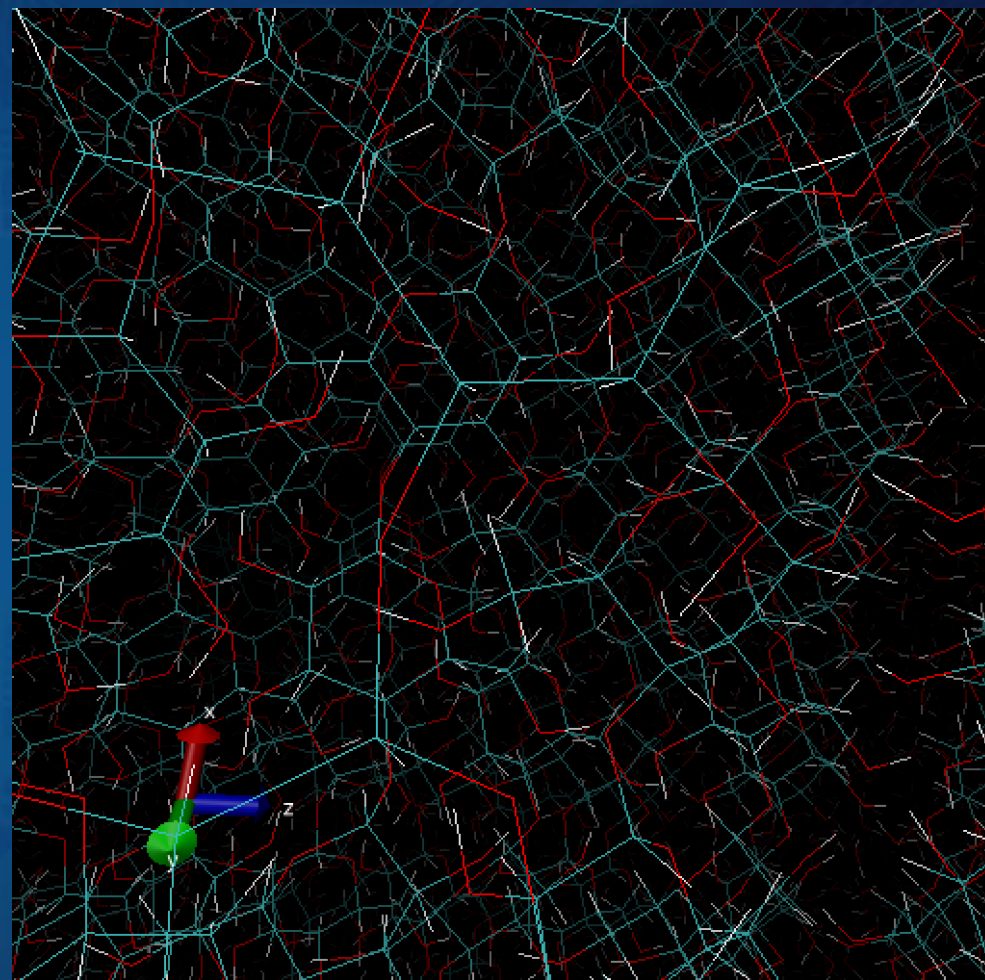
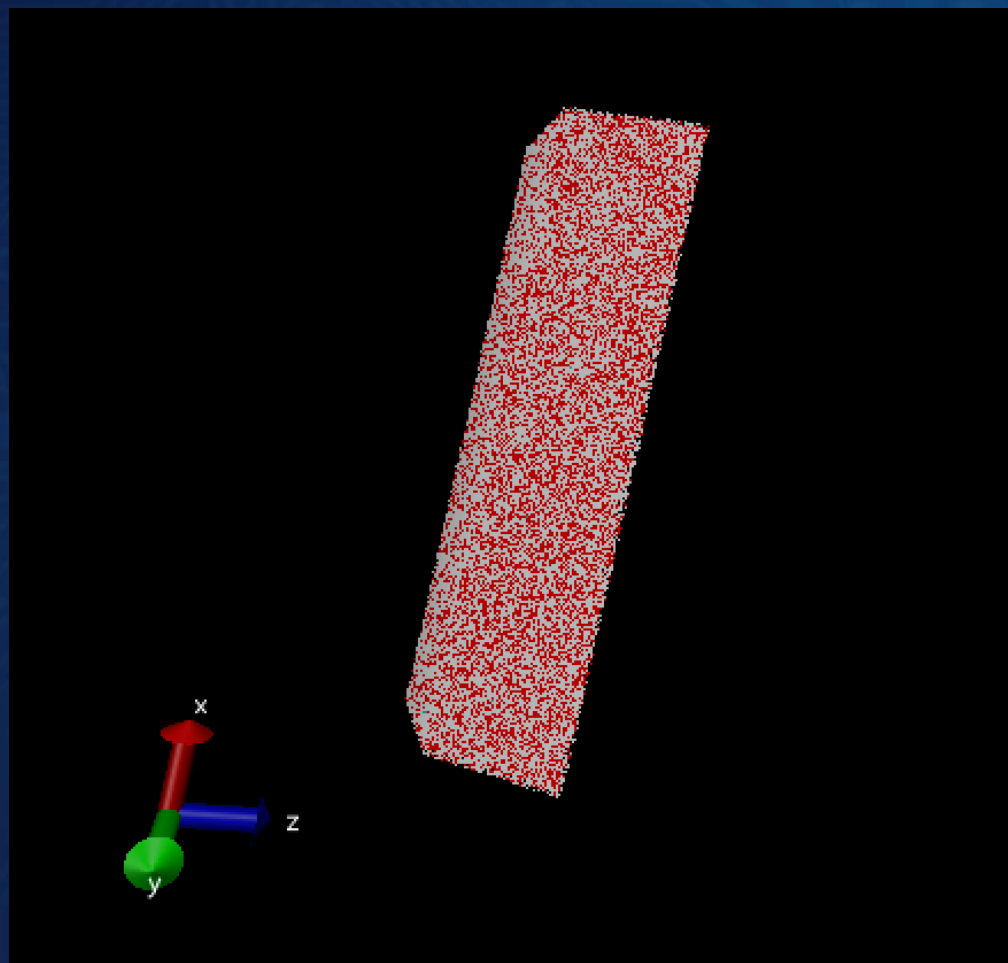
- GROMACS 是一款分子动力学应用程序，旨在模拟包含数百到数百万个粒子的系统的牛顿运动方程。
- GROMACS 设计用于模拟具有大量复杂键合相互作用的生物化学分子，包括蛋白质，脂，核酸甚至是一些非生物来源的分子，多聚物等等。





1.GROMACS简介

GROMACS
FAST. FLEXIBLE. FREE.





1.GROMACS简介

GROMACS
FAST. FLEXIBLE. FREE.



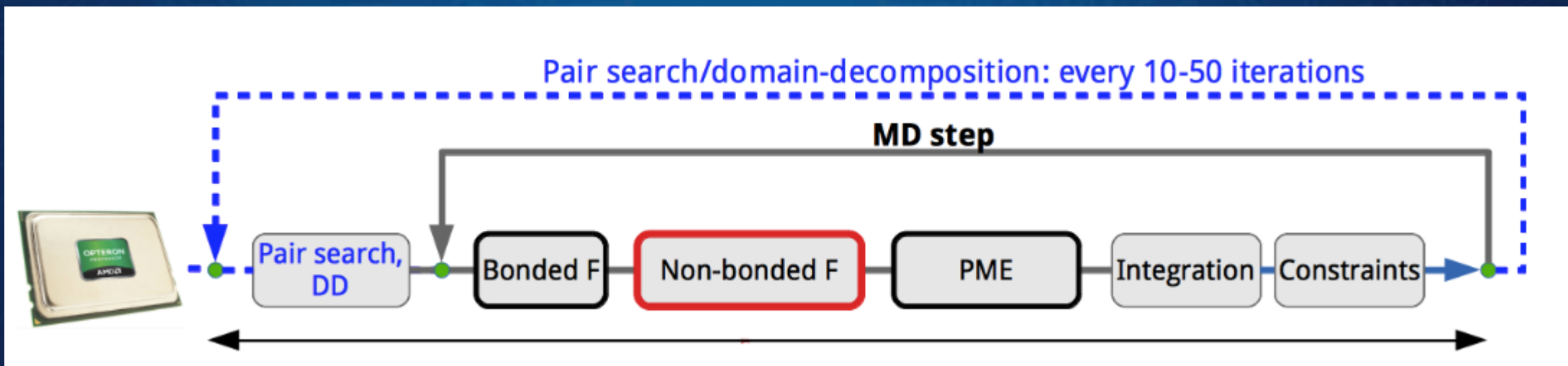
从较高级别的层面上看，GROMACS 执行以下四项任务：

- 1.PP：计算短程非键合力(nonbonded force)或粒子间 (PP) 相互作用
(计算仅限于最邻近通信)
- 2.PME：计算长程非键合力的长程部分的近似值（多节点运行中的通信密集型)
- 3.键合 (B)：计算键合力
- 4.其他：施加键合约束，向前推进原子位置以及计算近邻列表和其他。



1.GROMACS简介

- **GROMACS模拟分子运动的大致算法流程如下：**
- 对于每次迭代而言：
- 首先搜索需要计算粒子的键合力，然后计算粒子间相互作用力和非键合力，之后计算长程的非键合力，最后更新原子位置和邻近的列表



- 迭代完成之后，要汇总输出每一步的分子及能量变化



2.优化分析

KNL 64核 用vtune收集热点

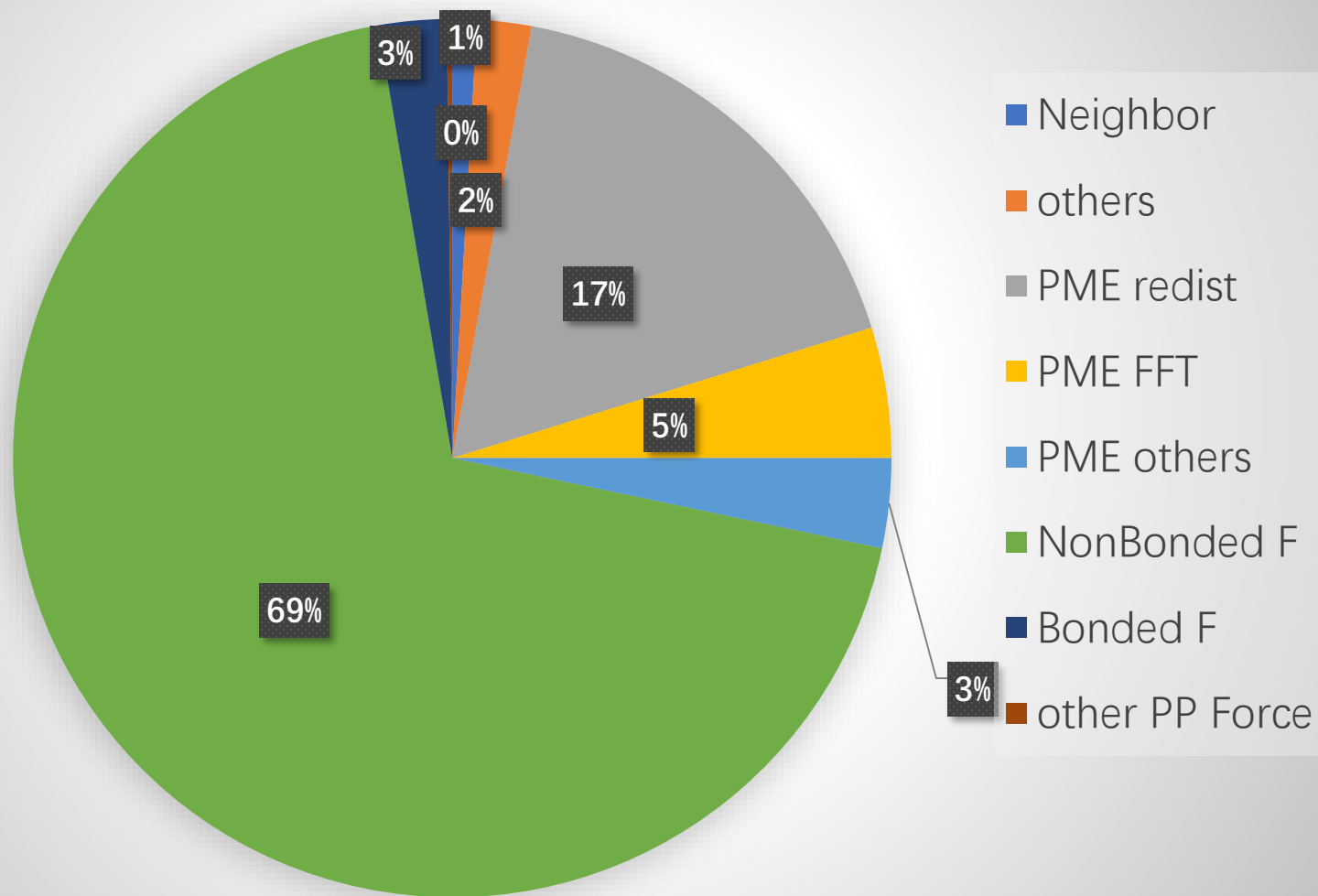
发现热点集中在PP计算的nbnxn_kernel里面



2.优化分析

• 神威 16进程 算例1 100步耗时统计

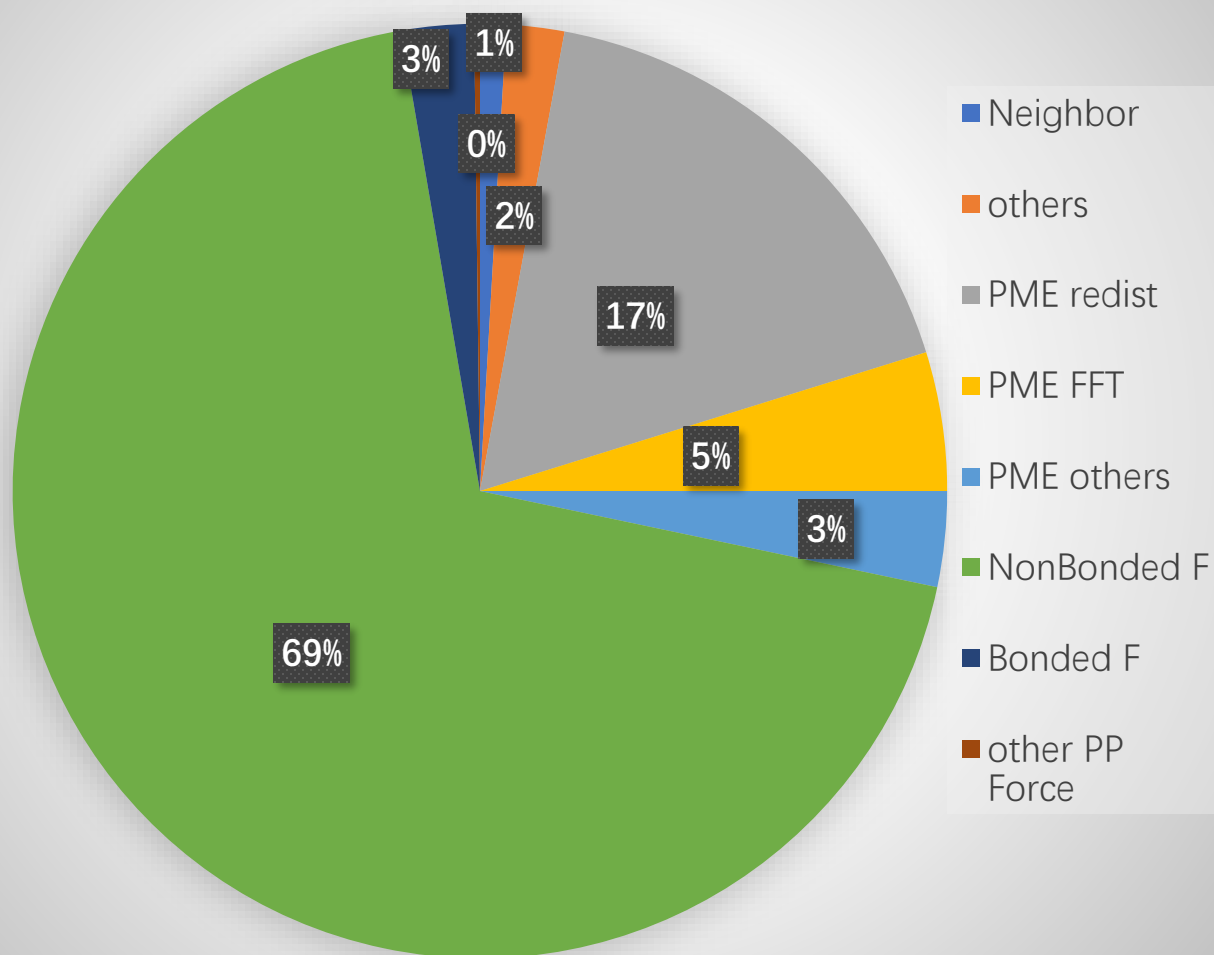
算例1热点分析





2. 优化分析

算例1热点分析



1、nonbonded力计算占据绝大多数，该计算代码在nbnxn_kernel_ref函数中

2、PME计算耗时是第二大热点，这将是第二部优化的重点

3、同时原版代码中大量的向量化优化也说明nonbonded力是计算热点所在



2.优化分析

对于主要热点`nbnxn_kernel_ref`我们的加速设想大致如下：

- 1、首先对kernel的outer循环划分算法改进，实现划分数据运行
- 2、考虑到划分之后数据量不是很大，将数据显式复制到从核，完成自己部分的计算
- 3、从核计算完成后，数据写回内存，主核进行归约操作
- 4、对inner计算部分实现手动向量化



3、我们的工作

编译优化

- 单精度
- 计时并负载均衡

从核加速

- DMA缓存预取
- 负载均衡

向量化

- 循环展开
- SIMD指令

异步计算

- 主核PME从核PP异步执行



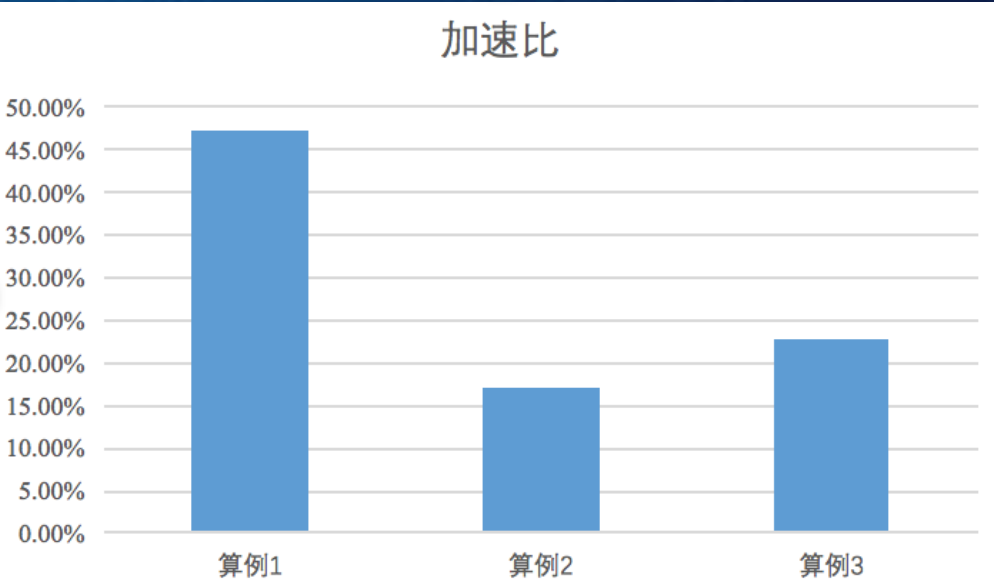
我们的工作——编译优化

- 1、双精度改为单精度
- 2、加入计时函数，启用gromacs自带的进程负载均衡



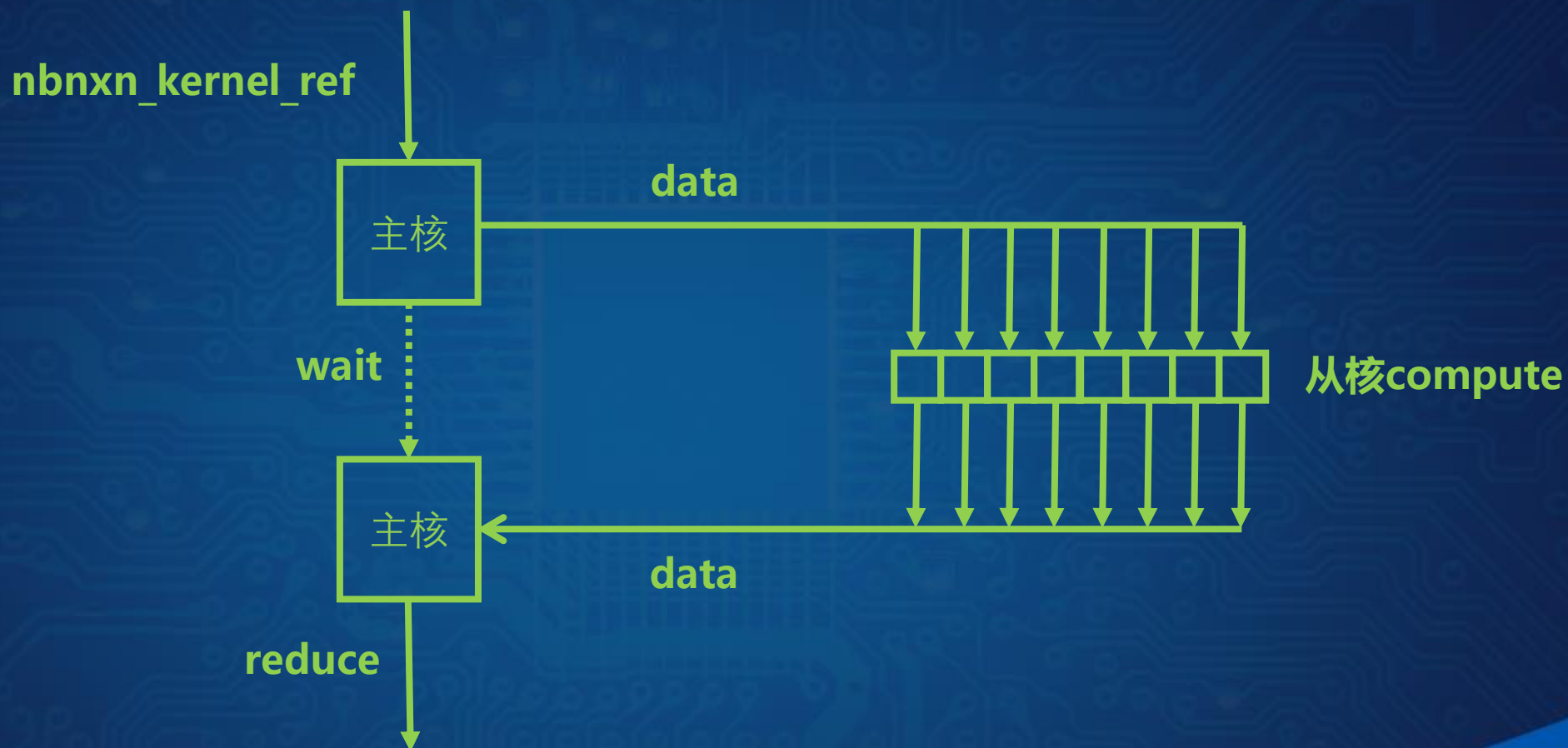
单次优化效果——编译优化

	优化前时间	优化后时间 (s)	加速比
算例1	6556.575	4449.757	47.3%
算例2	3781.820	3230.015	17.1%
算例3	578.761	470.763	22.9%





我们的工作——使用从核计算nbnxn_kernel_ref





我们的工作——从核任务划分及负载均衡

Task list :



Array f :



>> 64K

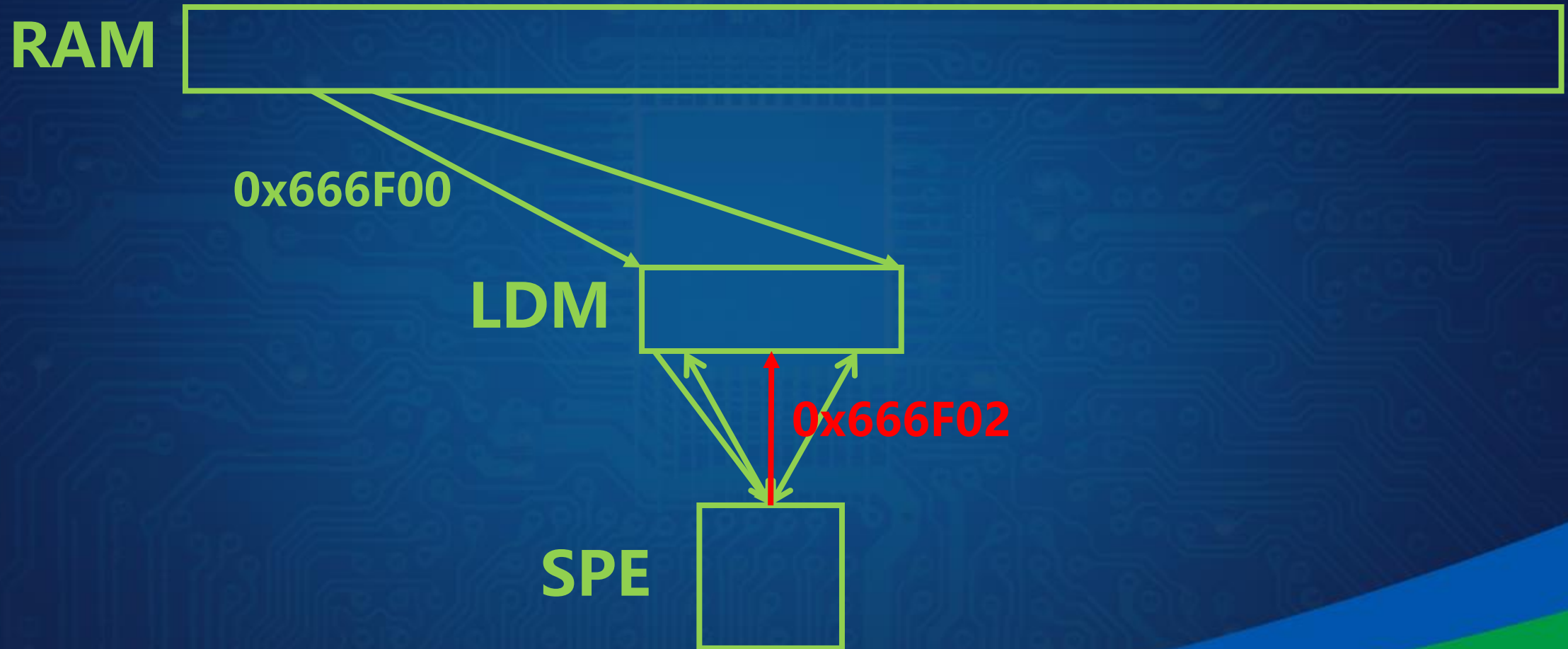


我们的工作——从核访存优化

- 1、较小的数据直接显式复制到从核的LDM中
- 2、较小的数据手动实现cache line,
动态预取较大数组, 减少内存访存次数

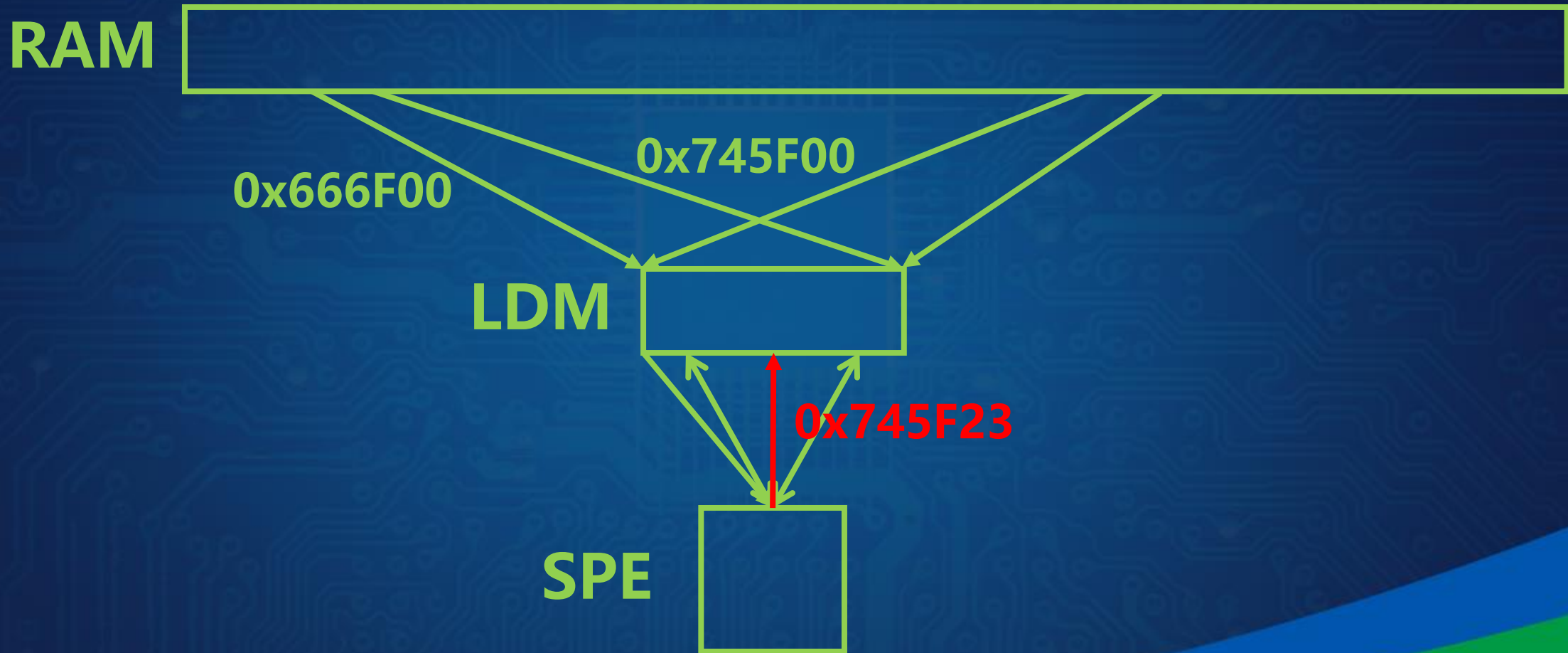


我们的工作——从核访存优化





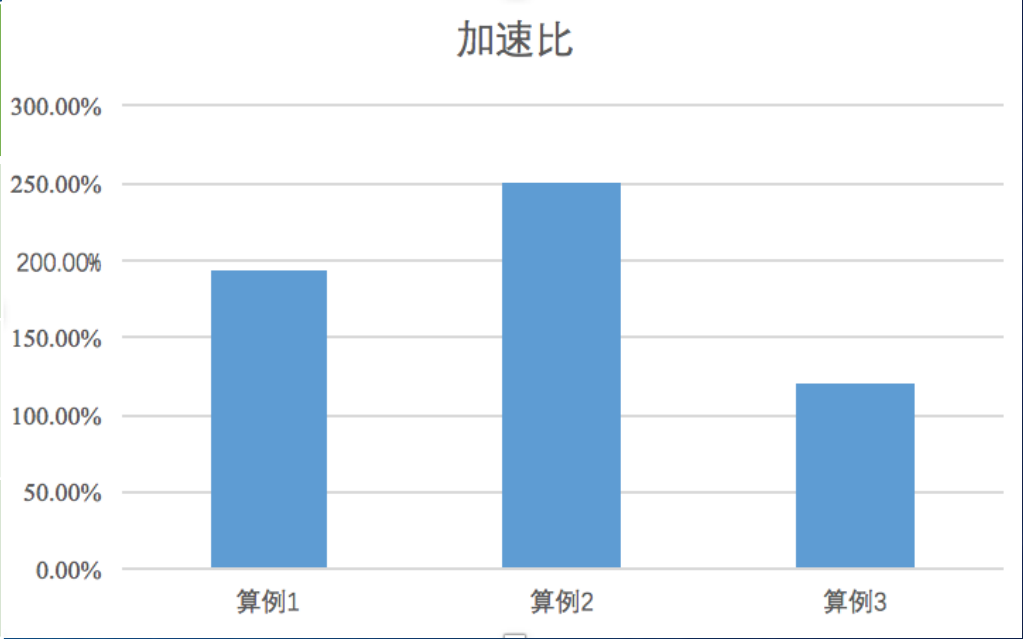
我们的工作——从核访存优化





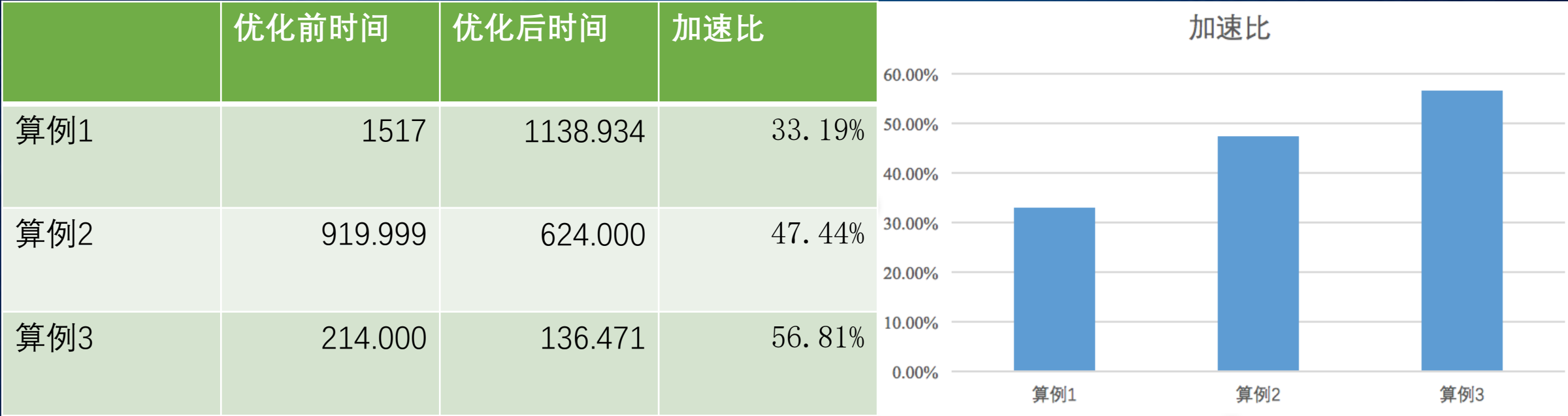
从核计算加速效果一览

	优化前时间	优化后时间	加速比
算例1	4449.757	1517	193.33%
算例2	3230.015	919.999	251.09%
算例3	470.763	214.000	119.98%





从核负载均衡效果一览





向量化

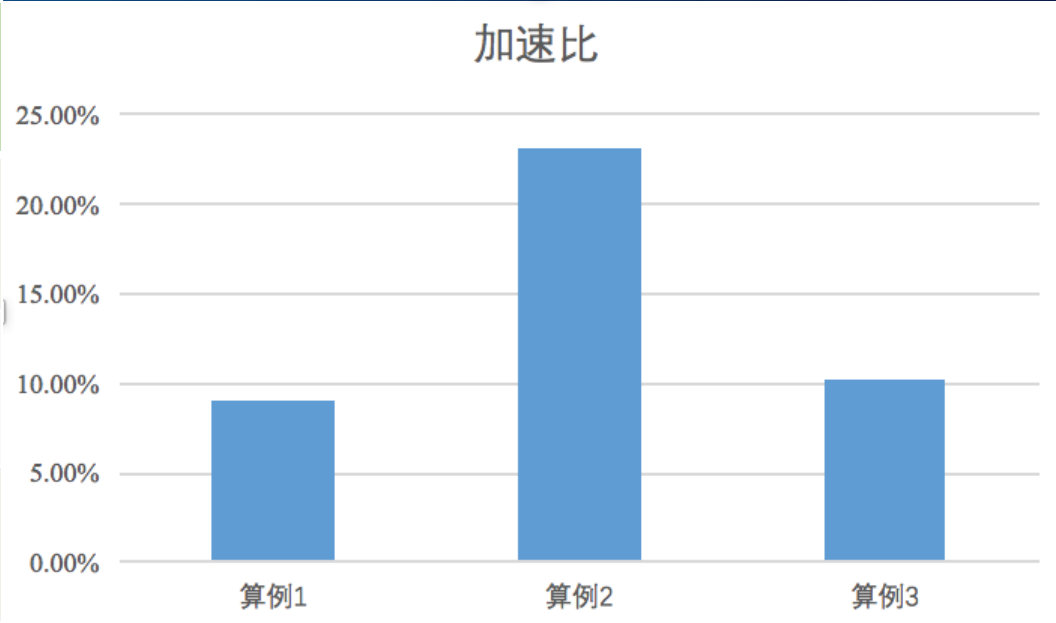
主要针对inner部分做了向量化

- 1、采用floatv4向量指针和simd_load装载，实现向量计算
- 2、展开循环，提高无依赖指令数量，充分填满流水线



向量化优化效果一览

	优化前时间	优化后时间 (s)	加速比
算例1	1138.934	1045.1	8.98%
算例2	624.000	506.900	23.10%
算例3	136.471	123.800	10.23%





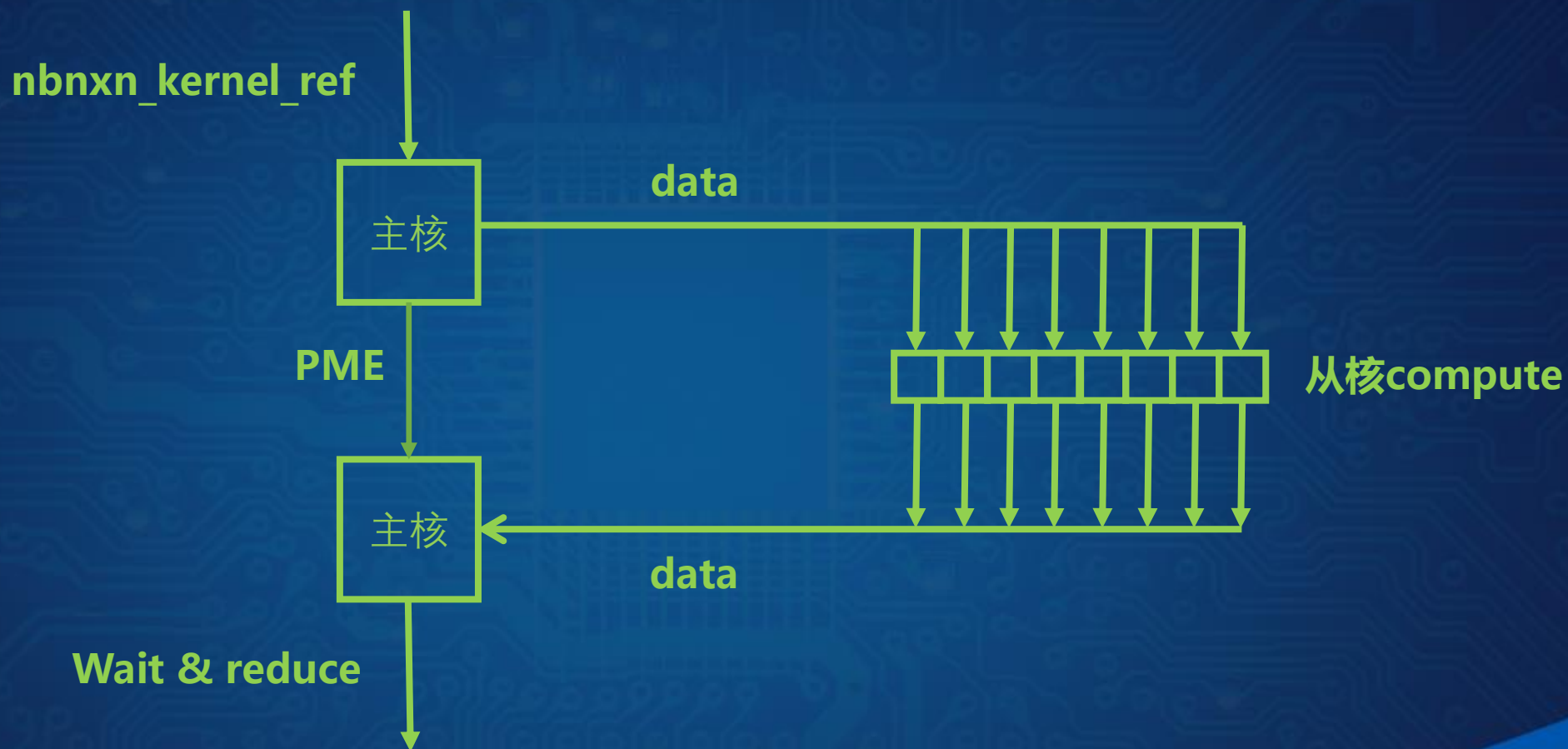
我们的工作——主从核异步计算

将没有依赖性的PP和PME计算并发运行，主核计算PME，从核计算PP，实现异步计算





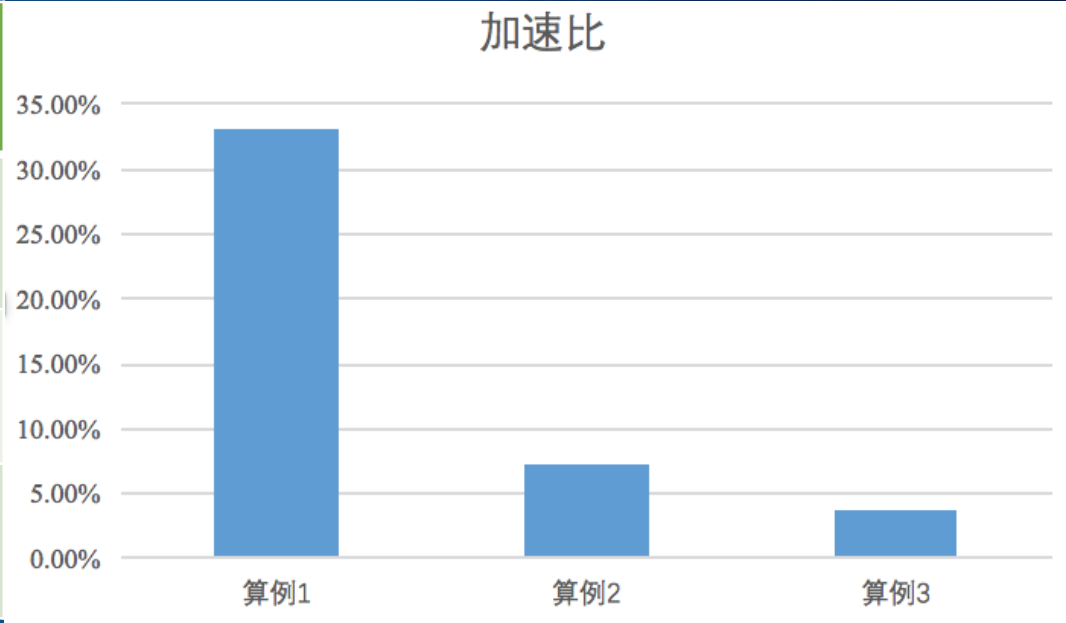
我们的工作——主从核异步计算





主从核异步优化效果一览

	优化前时间	优化后时间	加速比
算例1	1045.1	785	33.13%
算例2	506.900	472.551	7.27%
算例3	123.800	119.415	3.67%





四、优化总结

优化前后时间及加速比

	原版时间	优化后时间	加速比
算例1	6556.575	785	835.2%
算例2	3781.820	472.551	800.3%
算例3	578.761	119.415	484.7%

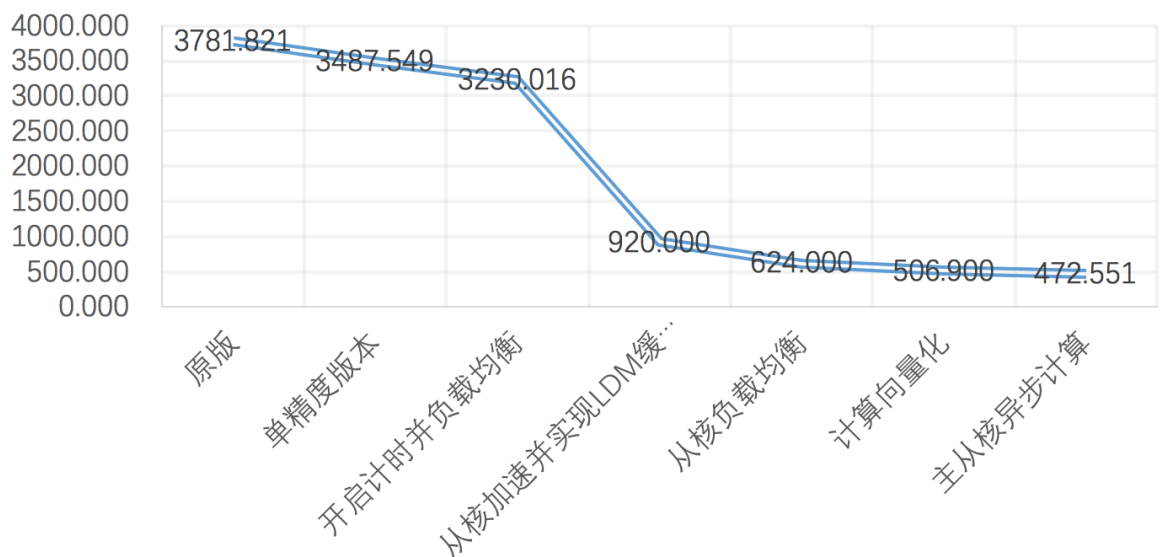


整体运行时间

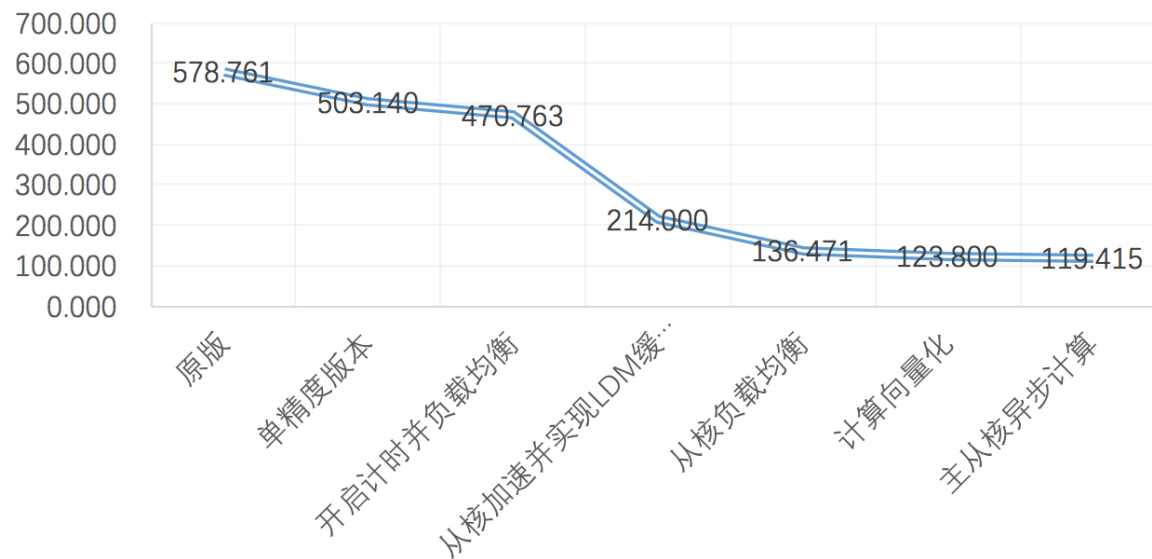
算例1



算例2



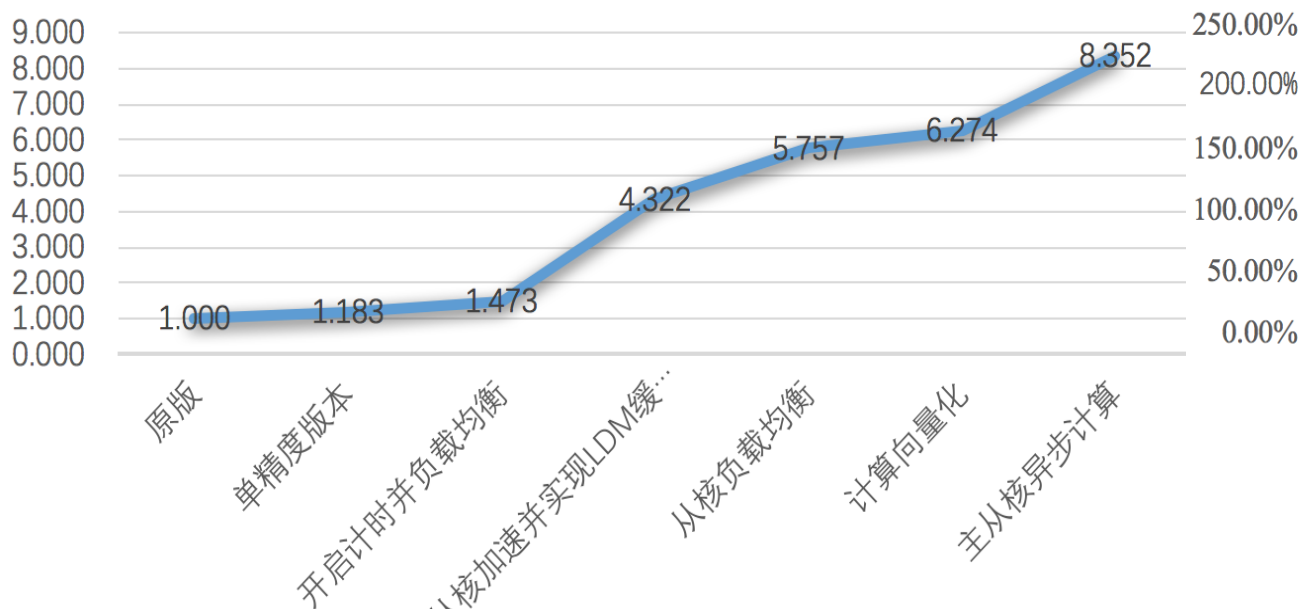
算例3



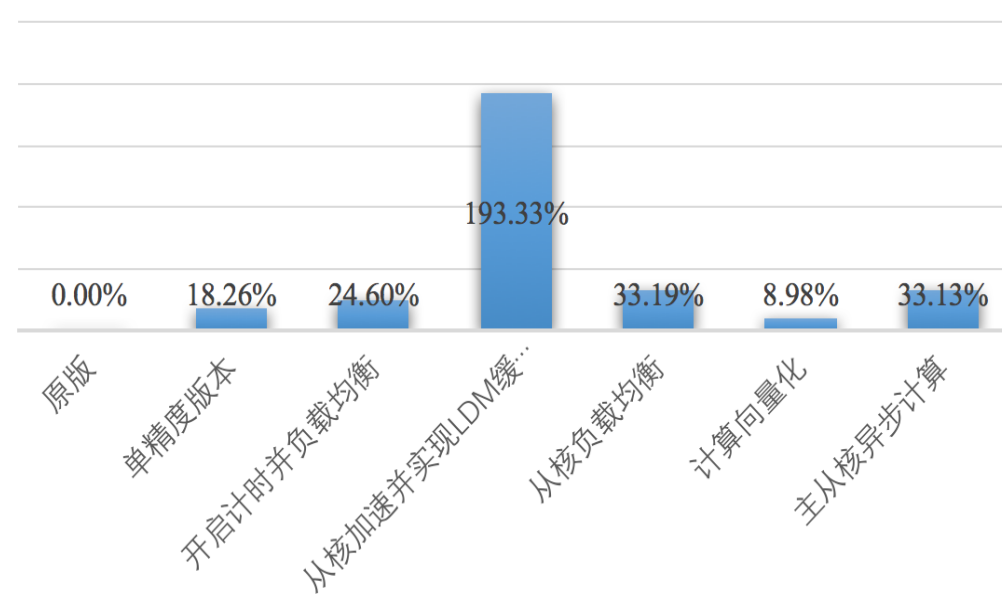


算例1 优化加速情况

算例1加速比



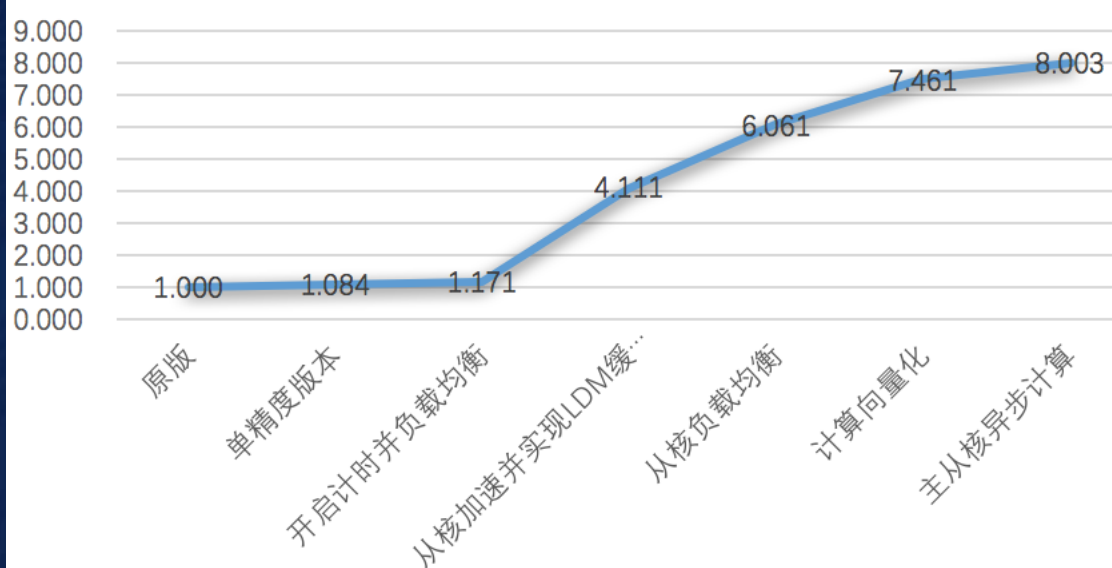
每次优化加速百分比



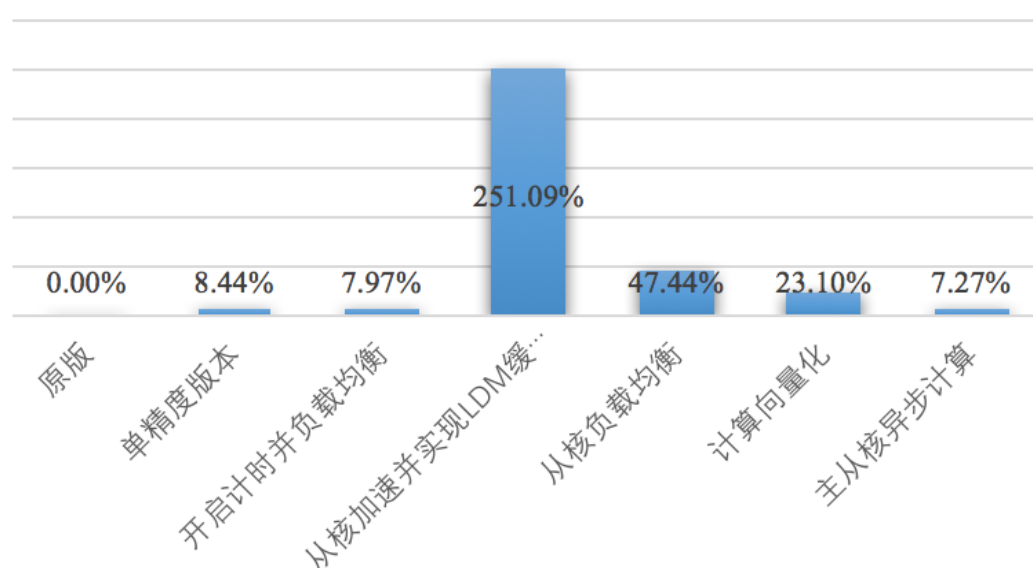


算例2 优化加速情况

算例2加速比

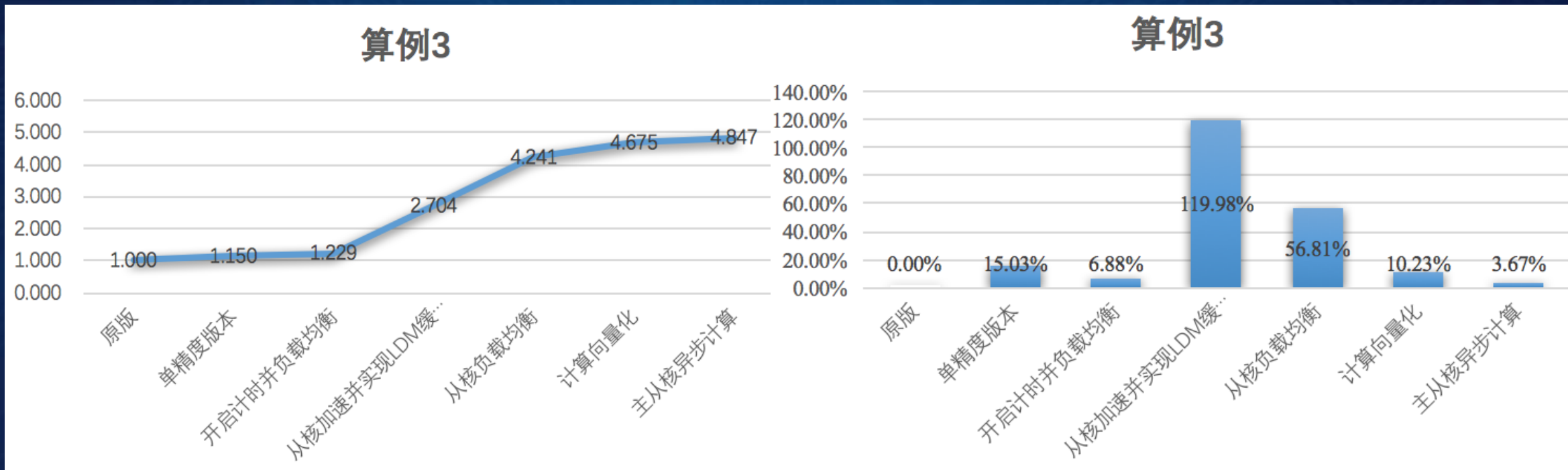


每步优化加速百分比





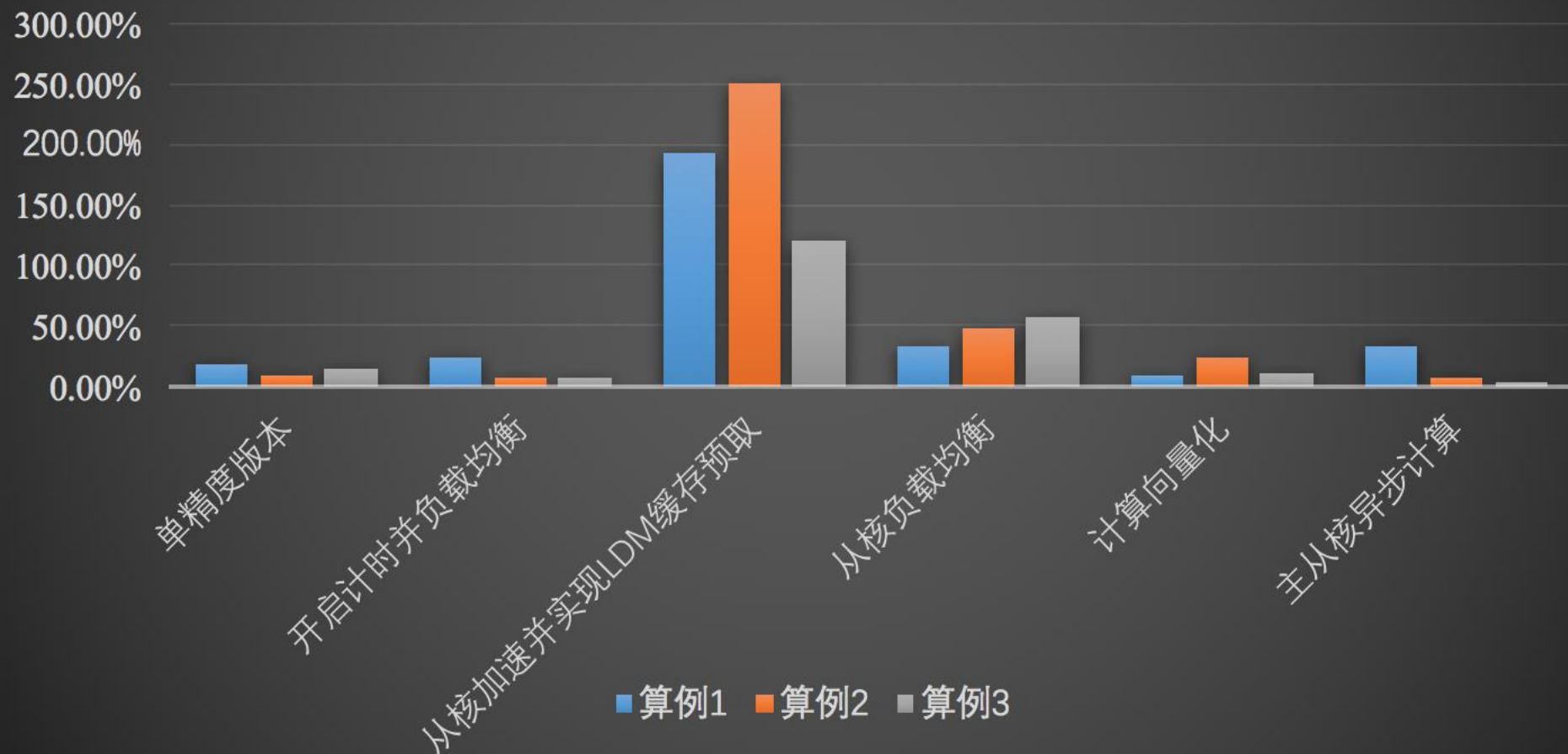
算例3 优化加速情况





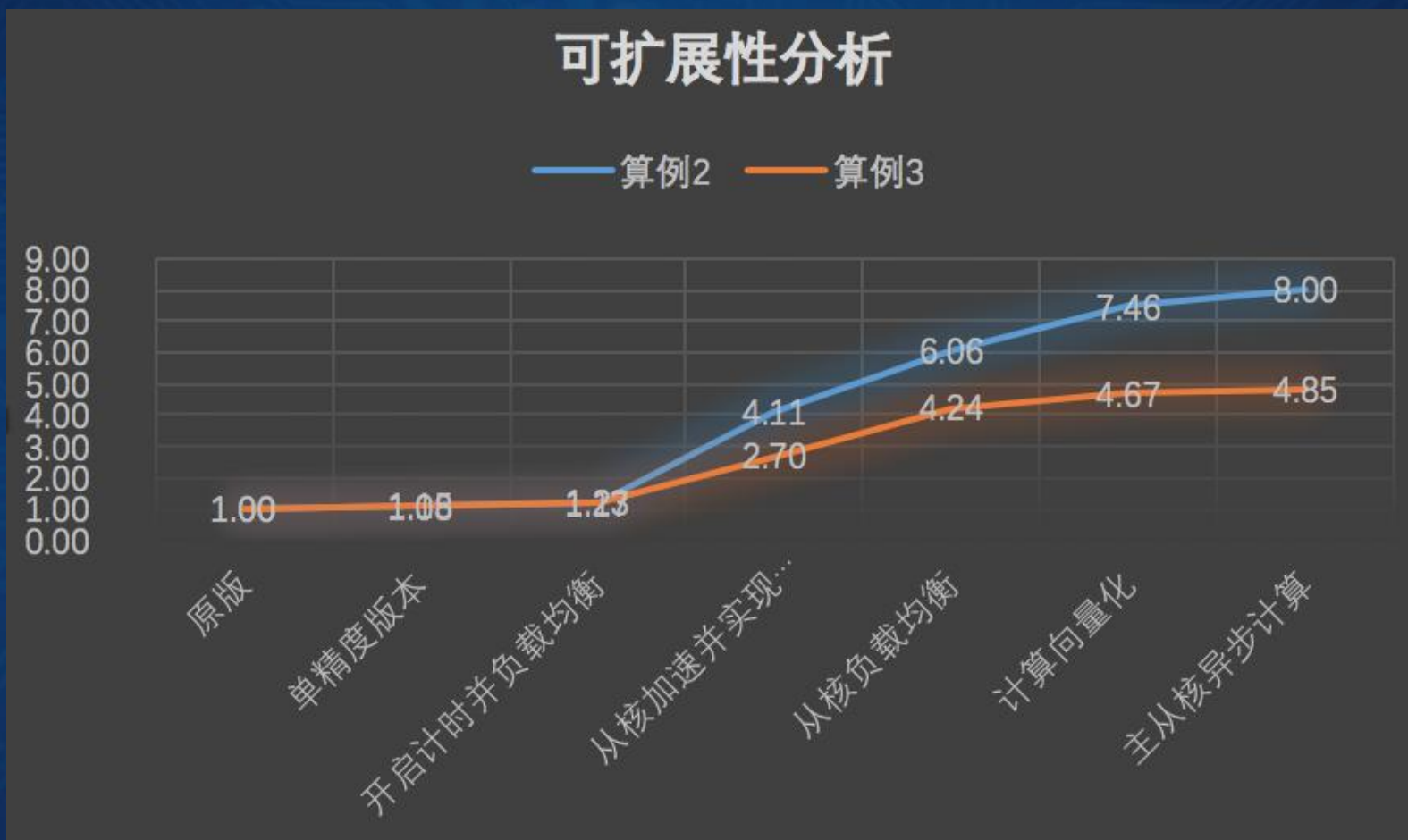
不同算例每步优化加速效果对比

每次优化加速效果对比





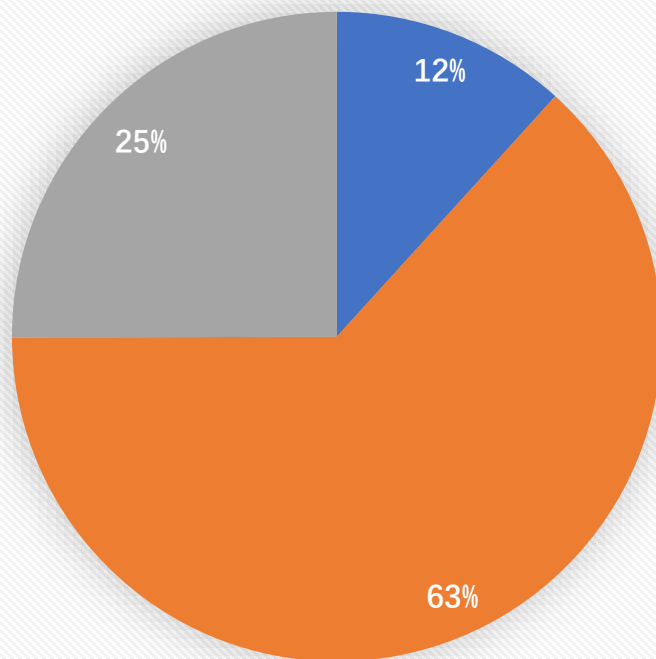
算例2算例3可扩展性分析





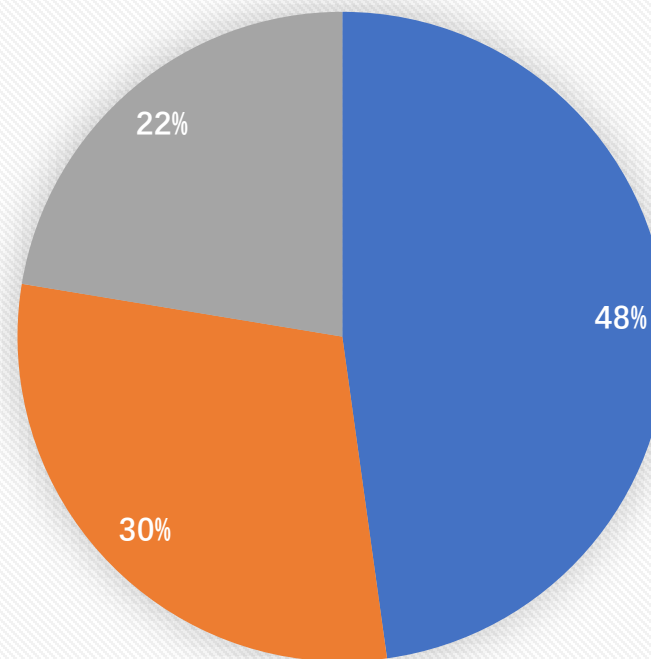
可扩展性分析

算例2



■ Comm. energies ■ PP Force ■ others ■

算例3



■ Comm. energies ■ PP Force ■ others ■



四、总结

我们从计算、访存、模型三个方面进行了优化：

- 1、使用athread库利用从核实现PP计算核并行化
- 2、使用软件实现的缓存预取优化访存开销
- 3、使用预估计算量的负载均衡使任务划分更均匀
- 4、对PP计算核进行了部分向量化
- 5、PME与PP主从核异步计算彼此掩盖了部分计算时间



第二届国产CPU并行应用挑战赛

2018 China Parallel Application Challenge On Domestic CPU

THANKS



中国计算机学会无锡分部



国家超级计算无锡中心
National Supercomputing Center in Wuxi



国家超级计算济南中心
NATIONAL SUPERCOMPUTER CENTER IN JINAN

PARATERA 并行®