



www.paratera.com
400-888-2670

高效提升材料计算应用 在超算上的性能

李强

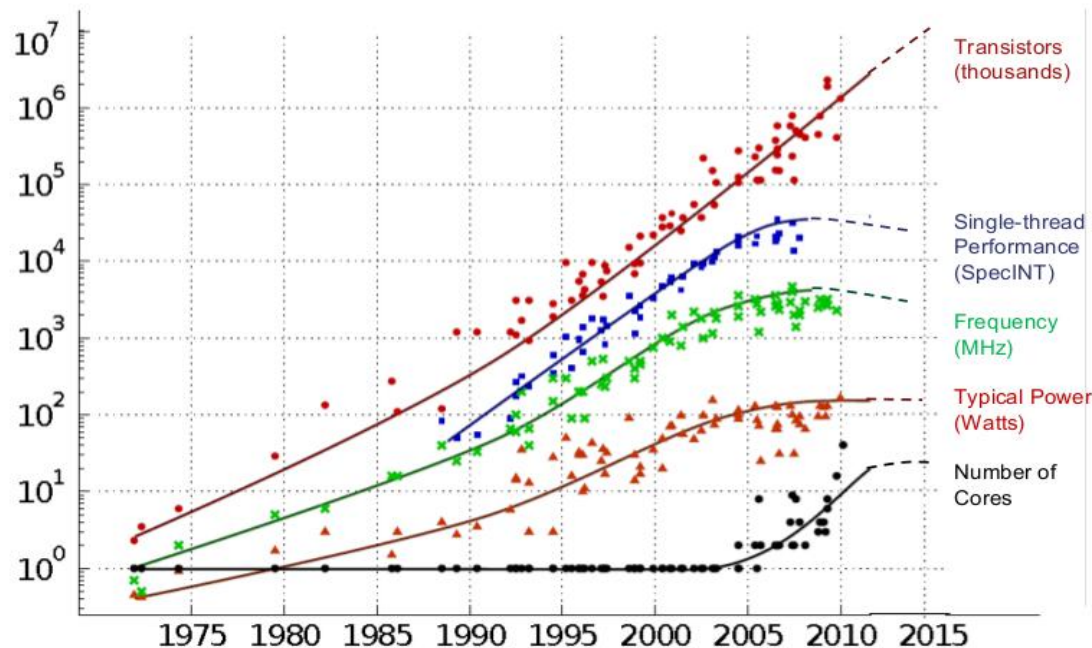
北京并行科技股份有限公司

主要内容

- 现状分析
- 解决之道
- 案例分享

硬件发展趋势：CPU

35 YEARS OF MICROPROCESSOR TREND DATA

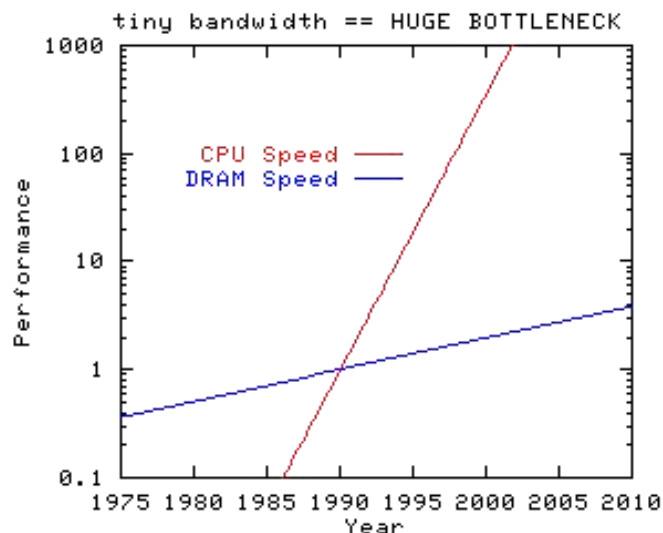


Original data collected and plotted by M. Horowitz, F. Labonte, O. Shacham, K. Olukotun, L. Hammond and C. Batten
Dotted line extrapolations by C. Moore

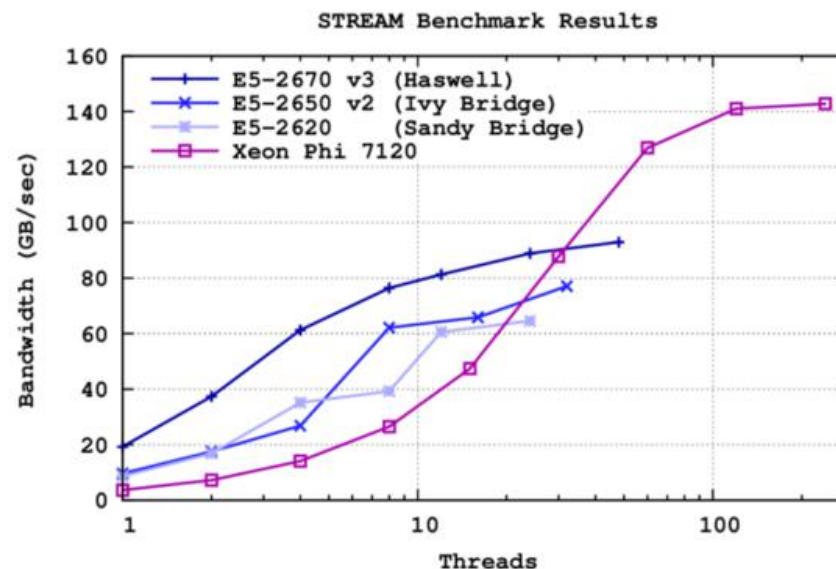
[1]. Herb Sutter, "The Free Lunch is Over, A Fundamental Turn Toward Concurrency in Software", Dr. Dobb's Journal, 30(3), March 2005.

- 功耗问题 → 多核技术
- 多核技术 → 依靠主频加速应用的“免费午餐”时代结束[1]。
- 并行化及并行化优化显得尤为重要。

硬件发展趋势：内存带宽



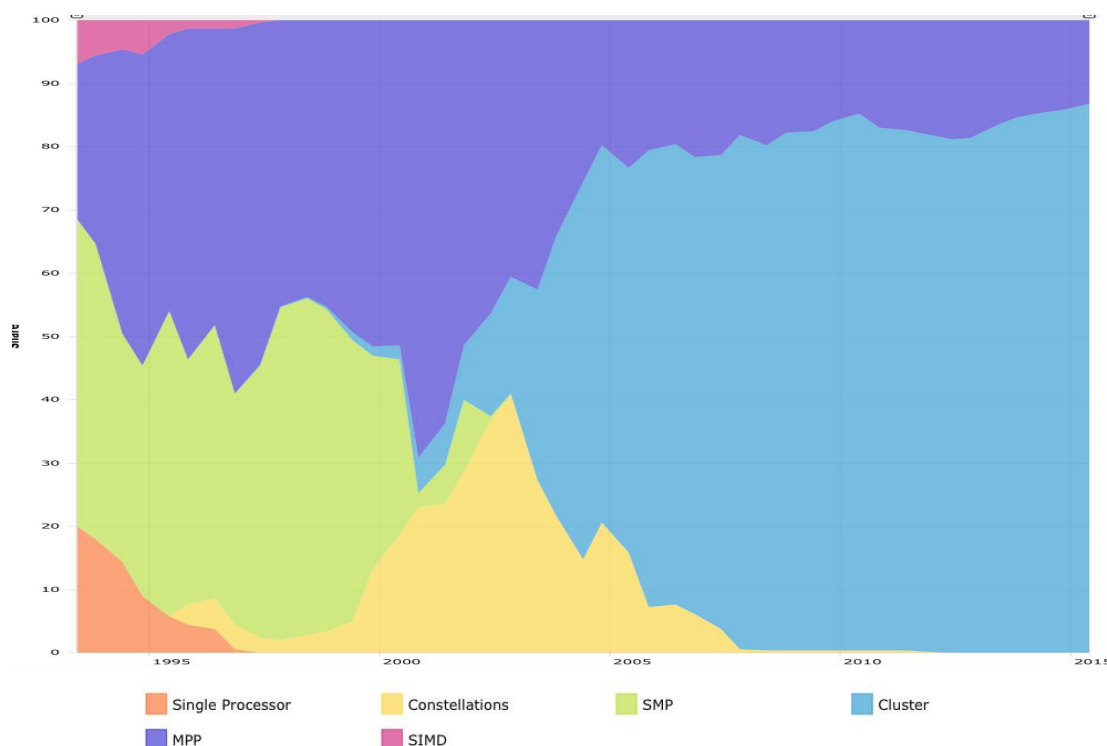
<http://www.cs.virginia.edu/stream/ref.html>



- 内存带宽的增长速度低于CPU的增长。
- 加速卡适合高内存带宽场景。

硬件发展趋势:并行计算机体系架构

Top500 并行计算机架构演变



- 2015年，仅存MPP和cluster两种架构。
- 2015年6月的排名中，cluster占86.8%（434/500）。
- Cluster容易扩展。MPP与Cluster相比，从机器占地、功耗和散热方面有优势。

应用计算云平台的解决之道

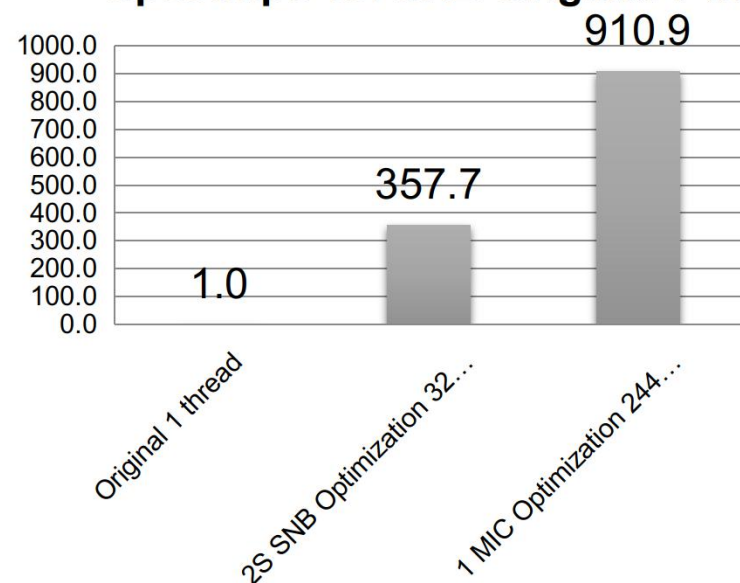
- 问题1：如何开发（优化）出具有更高效率的应用
- 问题2：如何更高效率的利用机器硬件资源
- 问题3：是否有更加高效的解决方案

应用开发问题——代码现代化

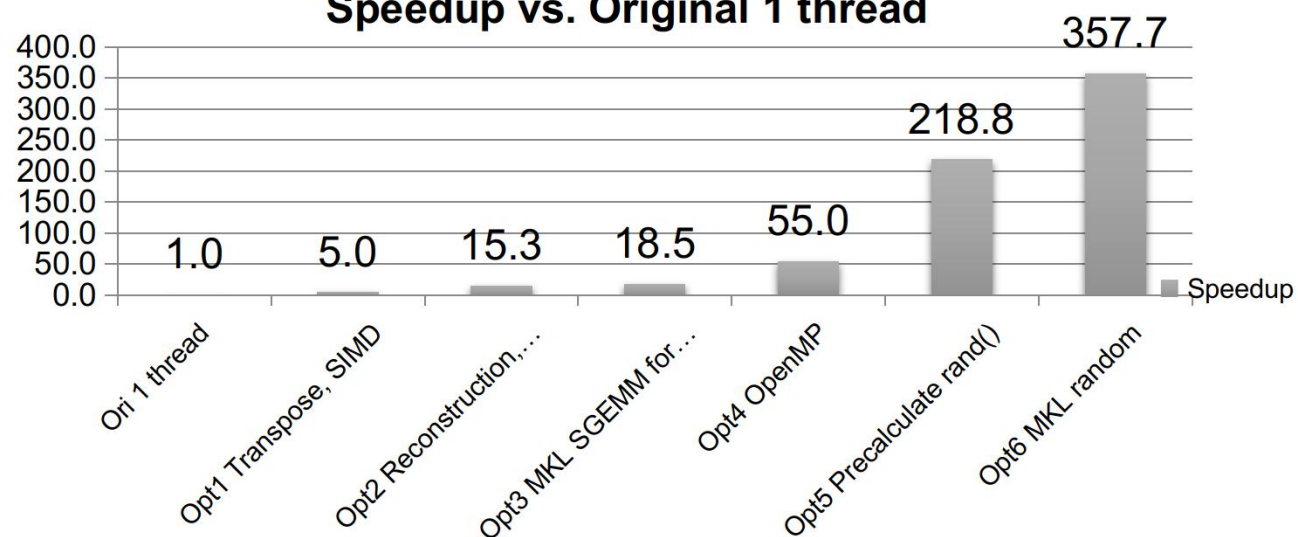
Deep Learning 代码现代化后在Intel® Xeon®和Intel® Xeon® Phi™上的加速比

	Intel® Xeon® E5 2670 – 1 threads baseline	Intel® Xeon® E5 2670 – 32 threads optimization	Intel® Xeon® Phi™ – 244 threads optimization
Time	77.335 s	0.2162 s	0.085 s

Speedups vs. SNB Original 1 thread

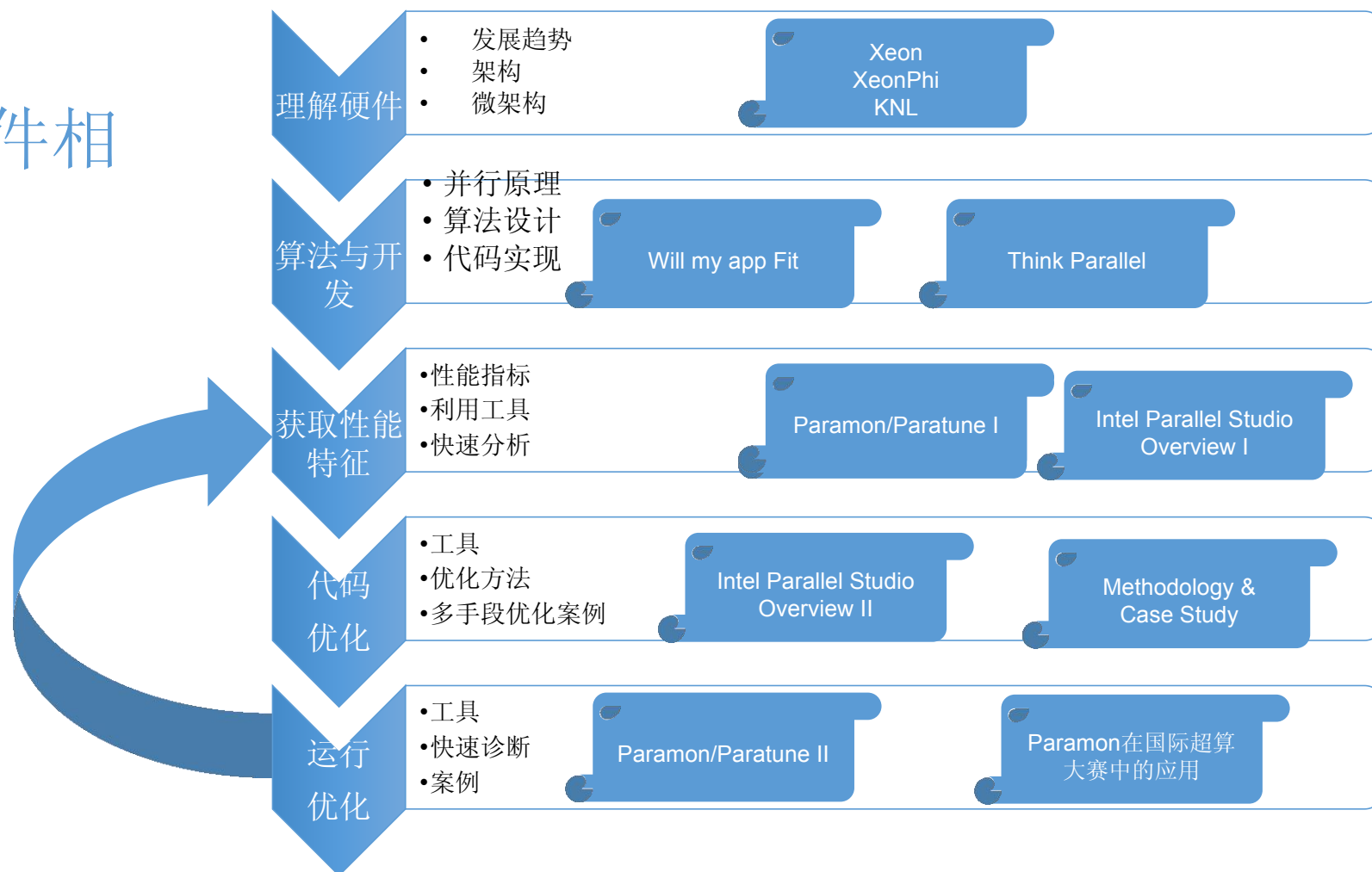


Speedup vs. Original 1 thread



代码现代化方法与工具

应用与硬件相
辅相成



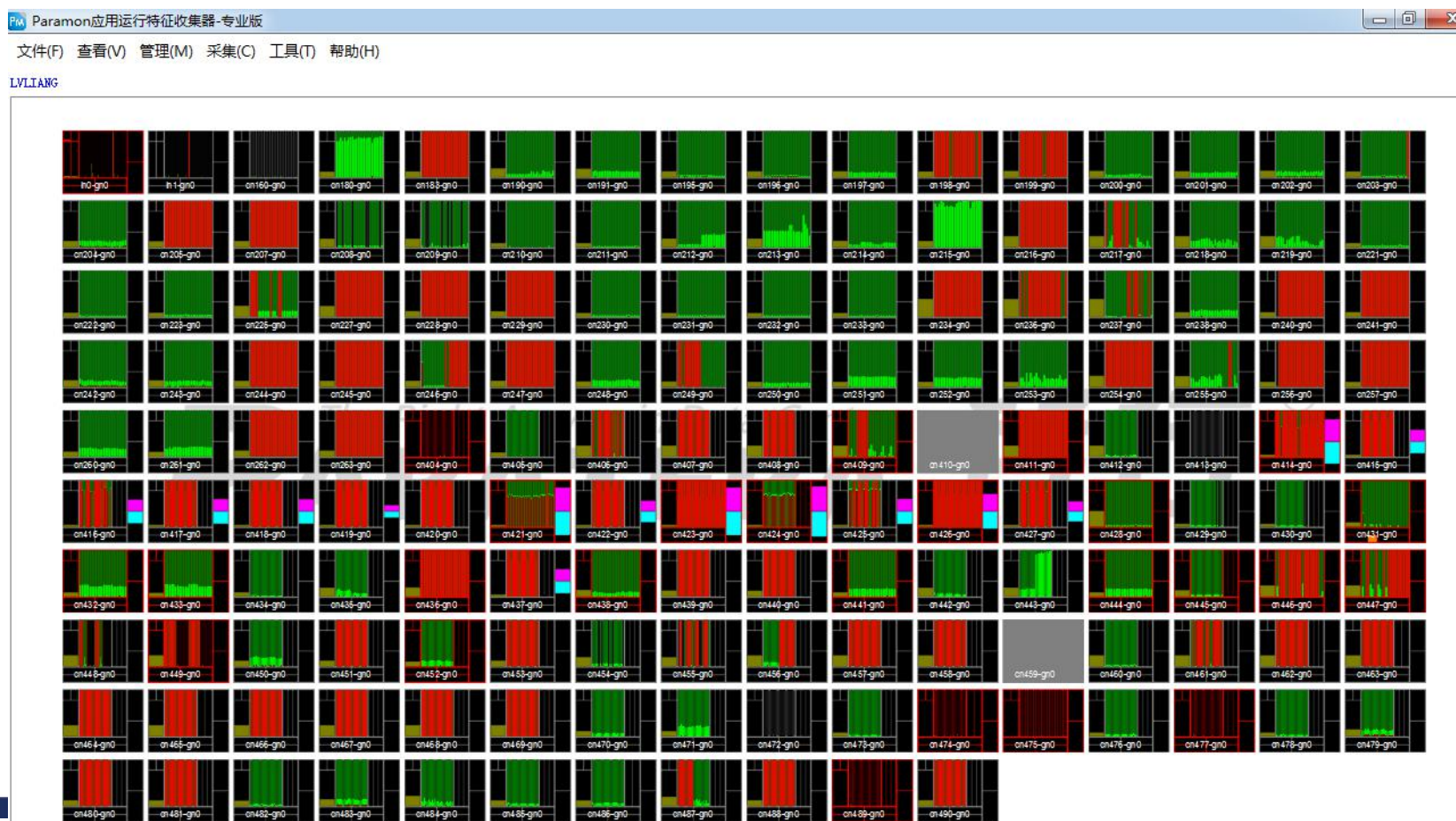
对用户的好处：省钱

- 途径：
 - 通过提高性能加速比，减少运算时间，帮助用户省钱。
 - 选择廉价核时的平台，在相同运算时间前提下，帮助用户省钱。

应用运行特征收集器—— Paramon

The Right Answer in Data Center 并行®
高性能计算·云计算解决方案

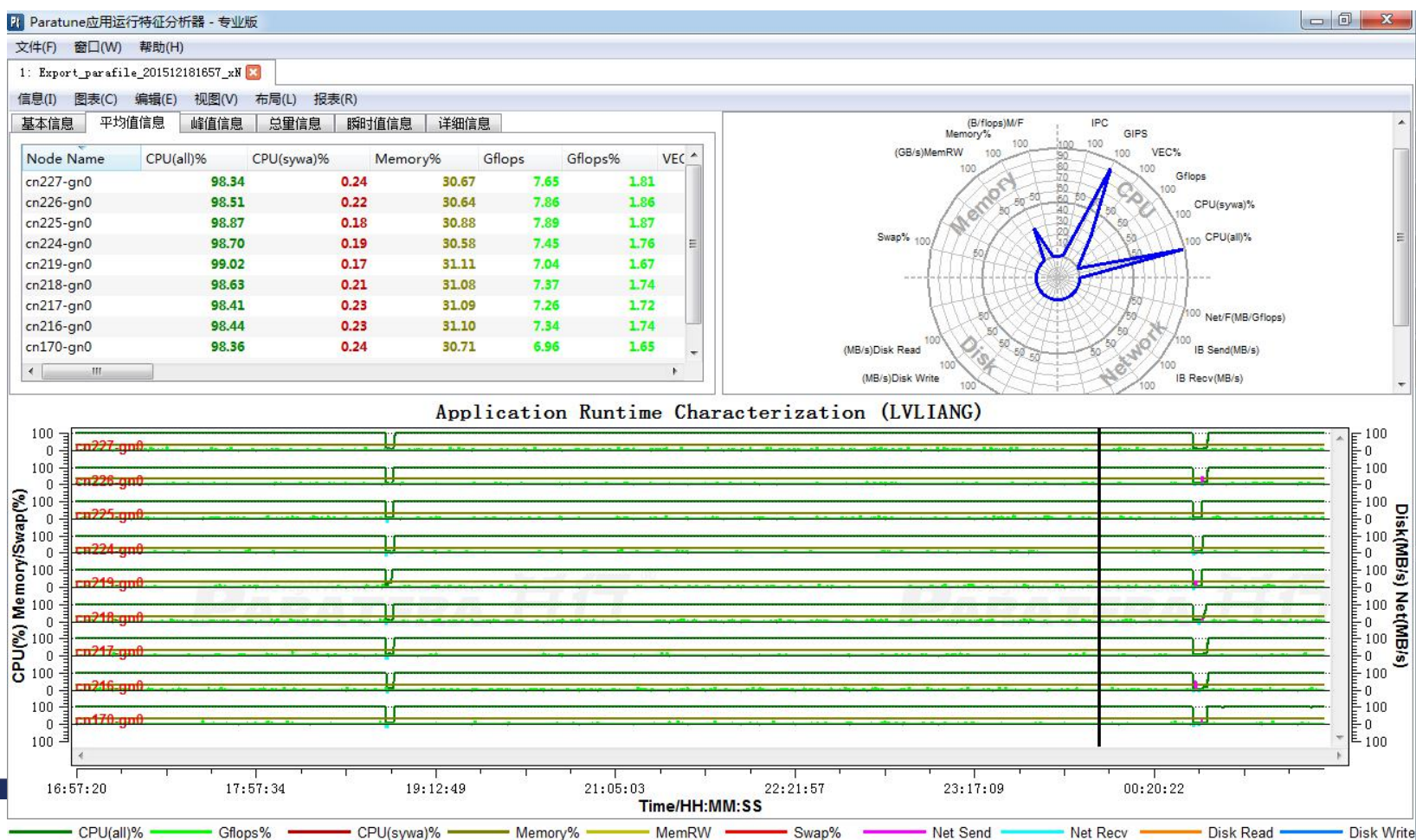
- 实时查看应用运行状况，分析应用性能问题
- 记录应用运行特征文件



应用运行特征分析器—— Paratune

The Right Answer in Data Center
PARATERA 并行®
高性能计算·云计算解决方案

离线多维度分析应用运行特征
寻找应用性能瓶颈，提供程序优化方向



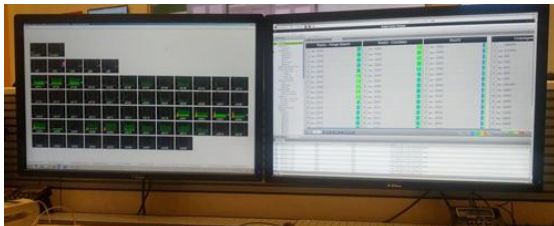
Case List

- CAS IPE: MD code, prepare for Gorden Bell, improve performance up to **31.99%** on TianHe Sys
- DaQing Research Institute: GeoCluster, improve performance for **15%**
- BGP: GeoEast system, Model T, improve performance up to **190%**
- EPRI: ADPSS, improve the performance up to as high as **134.05%**

并行科技支持嫦娥三号项目

The Right Answer in Data Center
PARATERA 并行
高性能计算·云计算解决方案

- 测量程序的并行化、优化、算法改进
 - ✓ 测量处理卫星位置由最初的**5分钟**处理完成最终达到**5秒**完成
- 提供高可用实时机群软件系统
- 提供现场技术保障，软件异常Paramon可以在第一时间报警



可用超算平台

- 天河二号(广州超算):
 - Intel(R) Xeon(R) CPU E5-2692 v2 @ 2.20GHz 12core/socket 2sockets
 - 64GB
 - 3 X 31S1P cards
- 天河一号(长沙超算):
 - Intel(R) Xeon(R) CPU X5670 @ 2.93GHz 6core/socket 2sockets
 - 48GB
 - 1 X M2050 GPGPU
- GPU云平台
 - Intel(R) Xeon(R) CPU E5-2620 v3 @ 2.40GHz 6core/sockets 2sockets
 - 192GB
 - 4 X Tesla K40m, 12GB(12,079,136,768 bytes)

Demo

HPC Cloud: ParaAPP

The Right Answer in HPC
PARATERA 并行[®]
高性能计算 · 云计算技术服务

作业信息			
作业号~	作业名	运行时间	状态
106302	fgoals_1es	45d 14h 10...	r
106395	fgoals_1es	45d 22h 43...	r
106397	fgoals_1es	48d 4h 57...	r
106400	fgoals_1es	48d 12h 11...	r
107264	S_br_8401	5d 18h 47...	dr
107476	f17.csh	2h 29m 0s	r
107478	f18.csh	2h 27m 45s	r
107480	f11.csh	2h 26m 30s	r
107484	f26.csh	2h 23m 30s	r
107514	S_br_8601	1h 15m 45s	r
107521	S_br_8401	1h 13m 15s	r
107485	f10.csh	0s	qw
107487	f18.csh	0s	qw
107489	f11.csh	0s	qw
107491	f17.csh	0s	qw
107531	S_br_8701	0s	qw
105633	z_bch_01	0s	Eqw
105928	test_2dog	0s	Eqw

应用与运维
服务

PAPP

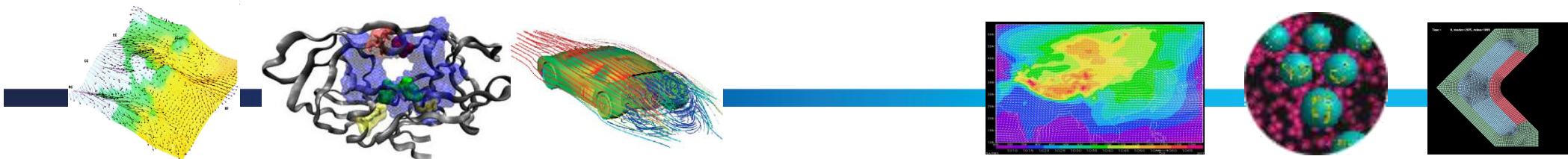
移动超算

一键式作业
提交

- **有效机时增值**: 提供最优化的应用软件, 保障同一应用执行速度达到顶尖水平, 优化机时成本
- **7*24小时在线支持**: 行业顶级应用专家利用在线运维工具及时响应各种运行过程中的问题
- **专业周月报**: 利用大数据挖掘你看不到的使用信息, 优化未来使用

- **作业状态跟踪**: 赠送ParaAlarm手机客户端App, 随时监控作业状态
- **计算随行**: 通过手机取消或重新提交作业, 随时管理超算作业
- **主动提醒**: 主动推送作业完成信息和作业报警信息

- **一键提交**: 客户端图形界面, 最快只用点击鼠标一次, 即可提交作业
- **文件自动上传下载**: 并支持断点续传, 数据加密传输
- **定制使用**: 用户可以定制化自己的应用和作业

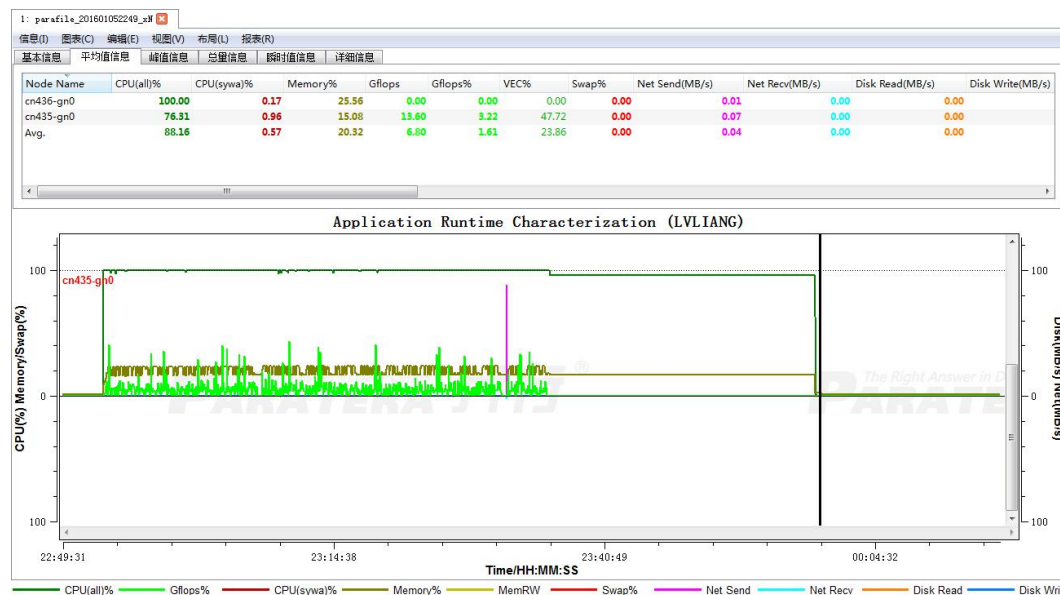


Benefit for Scientists

- 节约HPC集群构建成本
- 简单到极致的作业提交管理方式，让超算不再困难
- 极大幅度的降低学习成本，提高工作效率
- 使用优化过的应用，可以节省计算时间和成本开支
- 7*24小时在线运维工具，让应用状态清晰掌握
- 专业的服务团队保障作业顺利运行
- 移动超算，随时随地

vasp应用支持

- vasp-gamma（结构优化任务）

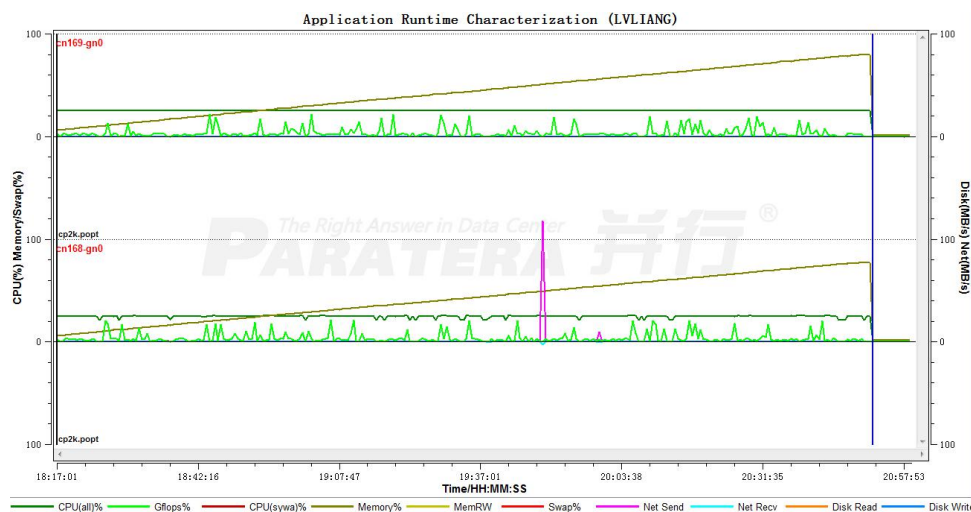


- 大量vasp-gamma作业计算完成后无法正常结束
- 上图可见cn435节点的作业在23:30左右已经完成计算任务，后面计算Gflops持续为0，查看输出文件该作业已经得到了需要的结果，于0:00手动杀死。

CP2K应用支持

作业信息:

JobName	节点数	使用核数
CP2K	2	48



内存跑满，导致程序中断

在编译CP2K时，去掉默认编译选项 `-heap-`

`arrays`

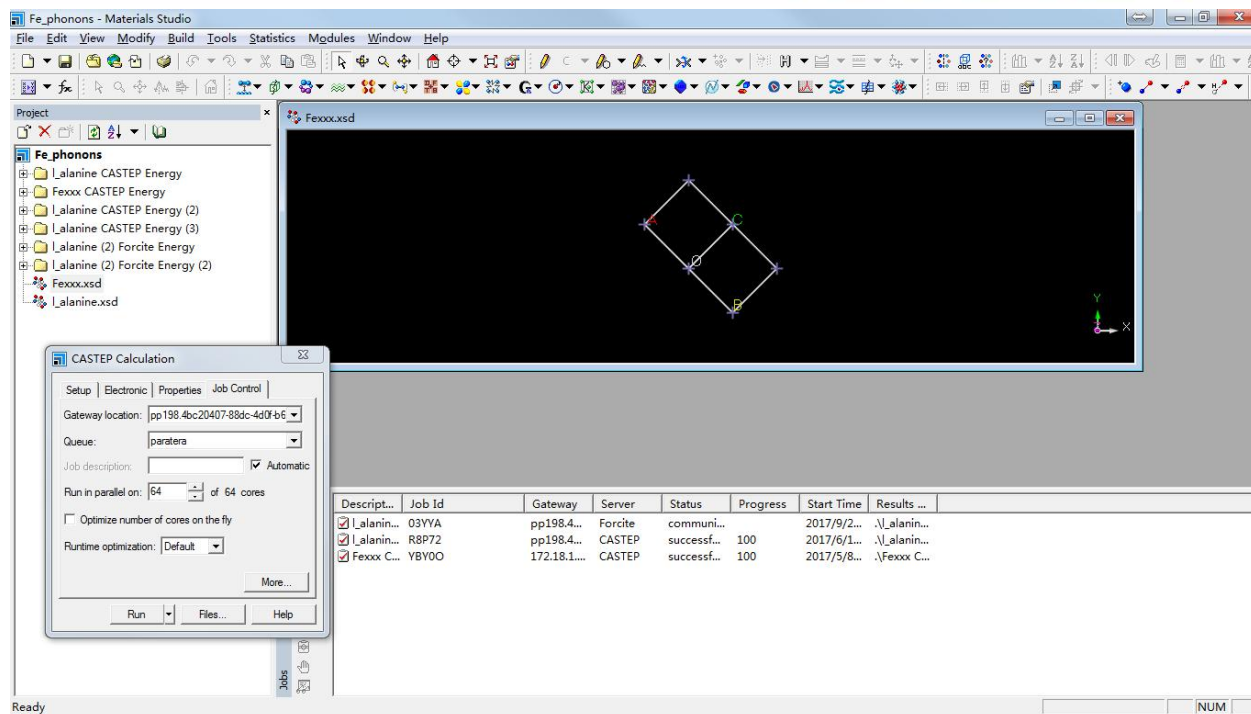
Materials Studio应用支持

传统MS使用方法

1. 资源有限
2. 机器性能一般
3. 看不到作业信息

MS超算端使用方法

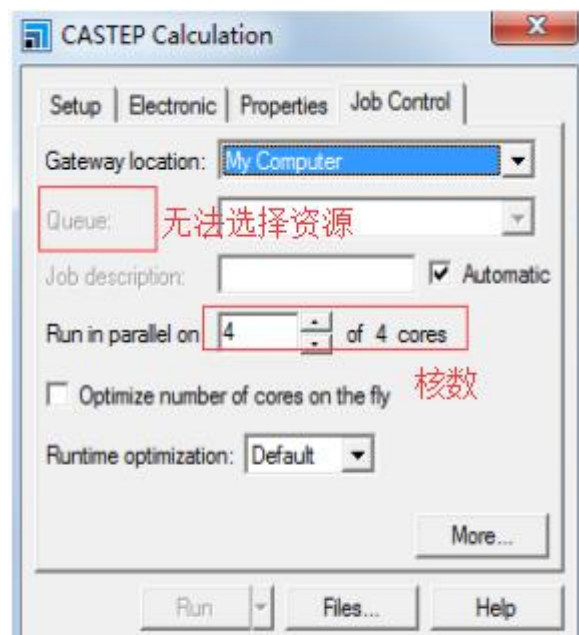
1. 使用方便，无需学习linux知识
2. 资源充足，可大规模计算
3. 机器性能优良
4. 可以查看作业性能



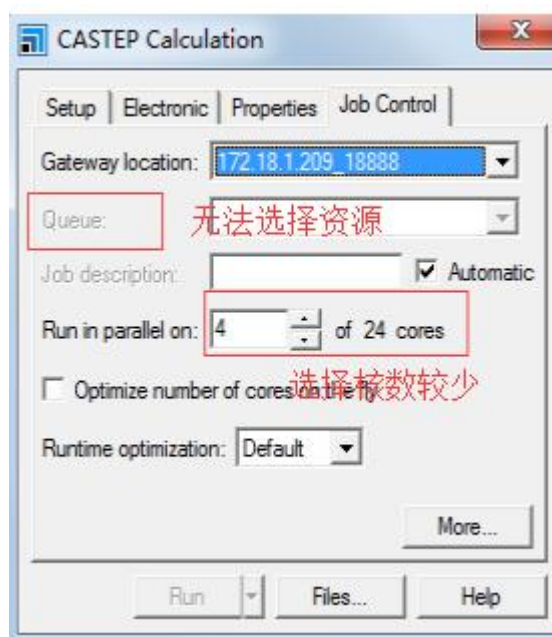
Material studio使用方法

MS三种提交方法对比

本地提交



本地集群



超算提交



Paratera Introduction

- 北京并行科技股份有限公司：
 - ✓ 成立于**2007**年，注册资本**3199**万元，净资产**1亿元**，2015年完成A轮融资，**100%国内资本组成**
 - ✓ 面向高性能计算、云计算、大数据计算数据中心
 - ✓ **6个常驻办事处**，天津、上海、西安、武汉、成都、广州
 - ✓ 产品技术型公司，员工**150+**，技术人员**60+**，多位**Intel**、**IBM**、**RedHat**等国际顶尖公司前员工加盟

高性能计算行业领军的IT软件服务公司

THANKS

北京并行科技有限公司
Beijing PARATERA Tech Co., Ltd.

📍 北京市海淀区上地信息路甲28号科实大厦B座B-10D 📠 100085
✉ service@paratera.com ☎ 010-82780567 📠 010-82899028

www.paratera.com
400-888-2670