Анализ эффективности архитектур x86_64 процессоров Intel и AMD для расчетов из первых принципов: исследование пакета VASP

Вечер В.С., Стегайлов В.В.

Популярность задач вычислительного материаловедения

- ARCHER – самый мощный академический суперкомпьютер в Великобритании

Code Usage on ARCHER (2014-15) by CPU Time:

Rank	Code	Node hours	Method	*GPU Acceleration*
1	VASP	5,443,924	DFT	-
3	CP2K	2,121,237	DFT	*Partial*
4	CASTEP	1,564,080	DFT	*Partial*
9	LAMMPS	887,031	Classical	+
10	ONETEP	805,014	DFT	*Partial*
12	NAMD	516,851	Classical	+
20	DL_POLY	245,322	Classical	+

52% of all CPU time used by Chemistry / Materials Science / Biomolecular Simulation

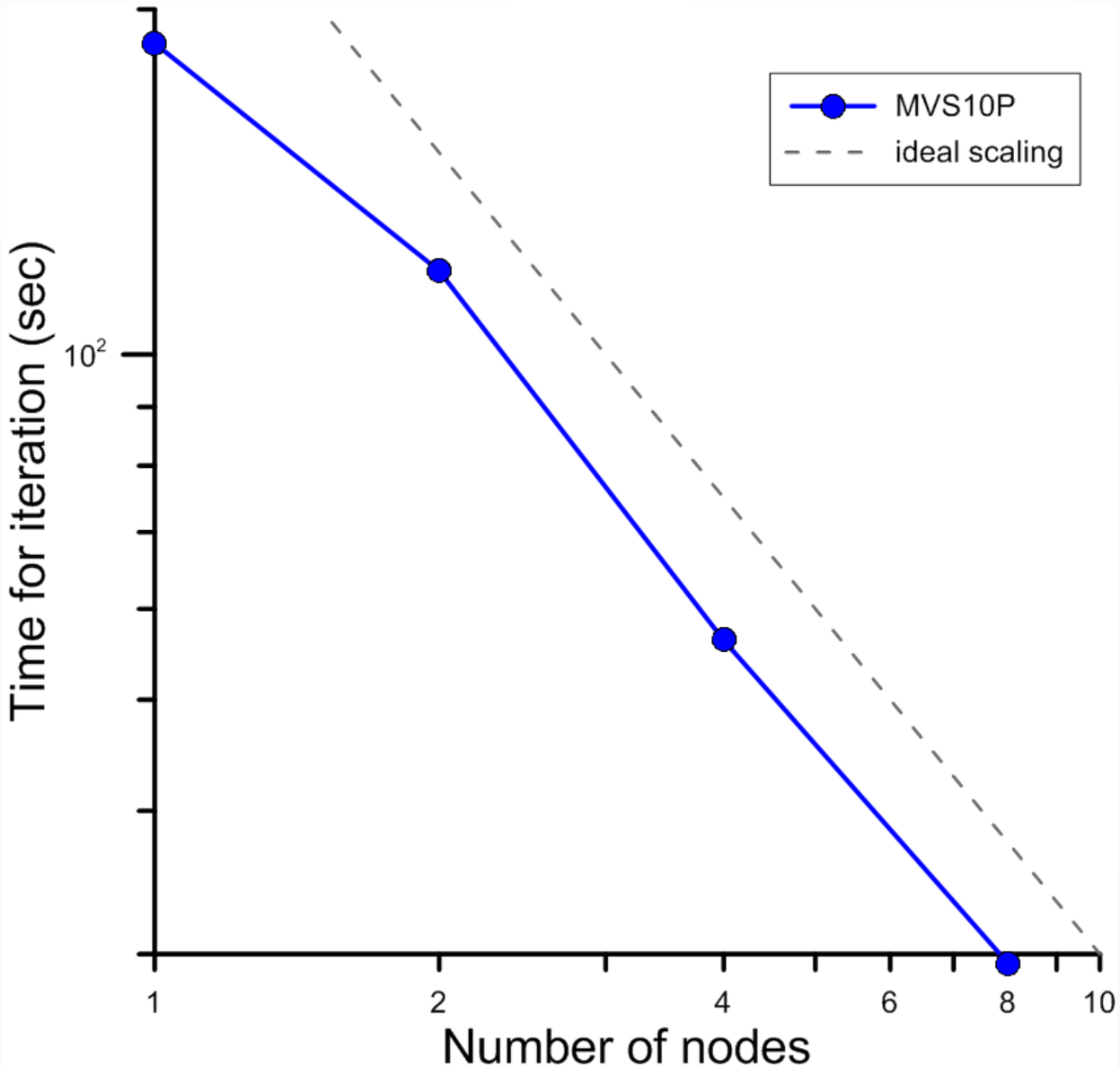
Мировые тенденции снижения энергопотребления

Green500 Rank	MFLOPS/W	Site	System	Total Power(kW)
1	6673.8	Advanced Center for Computing and Communication, RIKEN	ZettaScaler-1.6, Xeon E5-2618Lv3 8C 2.3GHz, Infiniband FDR, PEZY-SCnp	150.0
2	6195.2	Computational Astrophysics Laboratory, RIKEN	ZettaScaler-1.6, Xeon E5-2618Lv3 8C 2.3GHz, Infiniband FDR, PEZY-SCnp	46.9
3	6051.3	National Supercomputing Center in Wuxi	Sunway MPP, Sunway SW26010 260C 1.45GHz, Sunway	15371
4	5272.1	GSI Helmholtz Center	ASUS ESC4000 FDR/G2S, Intel Xeon E5-2690v2 10C 3GHz, Infiniband FDR, AMD FirePro S9150	57.2
5	4778.5	Institute of Modern Physics (IMP), Chinese Academy of Sciences	Sugon Cluster W780I, Xeon E5-2640v3 8C 2.6GHz, Infiniband QDR, NVIDIA Tesla K80	65
6	4112.1	Stanford Research Computing Center	Cray CS-Storm, Intel Xeon E5-2680v2 10C 2.8GHz, Infiniband FDR, Nvidia K80	190
7	3775.5	Internet Service (B)	Inspur TS10000 HPC Server, Intel Xeon E5-2620v2 6C 2.1GHz, 10G Ethernet, NVIDIA Tesla K40	110
8	3775.5	Internet Service (B)	Inspur TS10000 HPC Server, Intel Xeon E5-2620v2 6C 2.1GHz, 10G Ethernet, NVIDIA Tesla K40	110
9	3775.5	Internet Service (B)	Inspur TS10000 HPC Server, Intel Xeon E5-2620v2 6C 2.1GHz, 10G Ethernet, NVIDIA Tesla K40	110
10	3775.5	Internet Service (B)	Inspur TS10000 HPC Server, Intel Xeon E5-2620v2 6C 2.1GHz, 10G Ethernet, NVIDIA Tesla K40	110

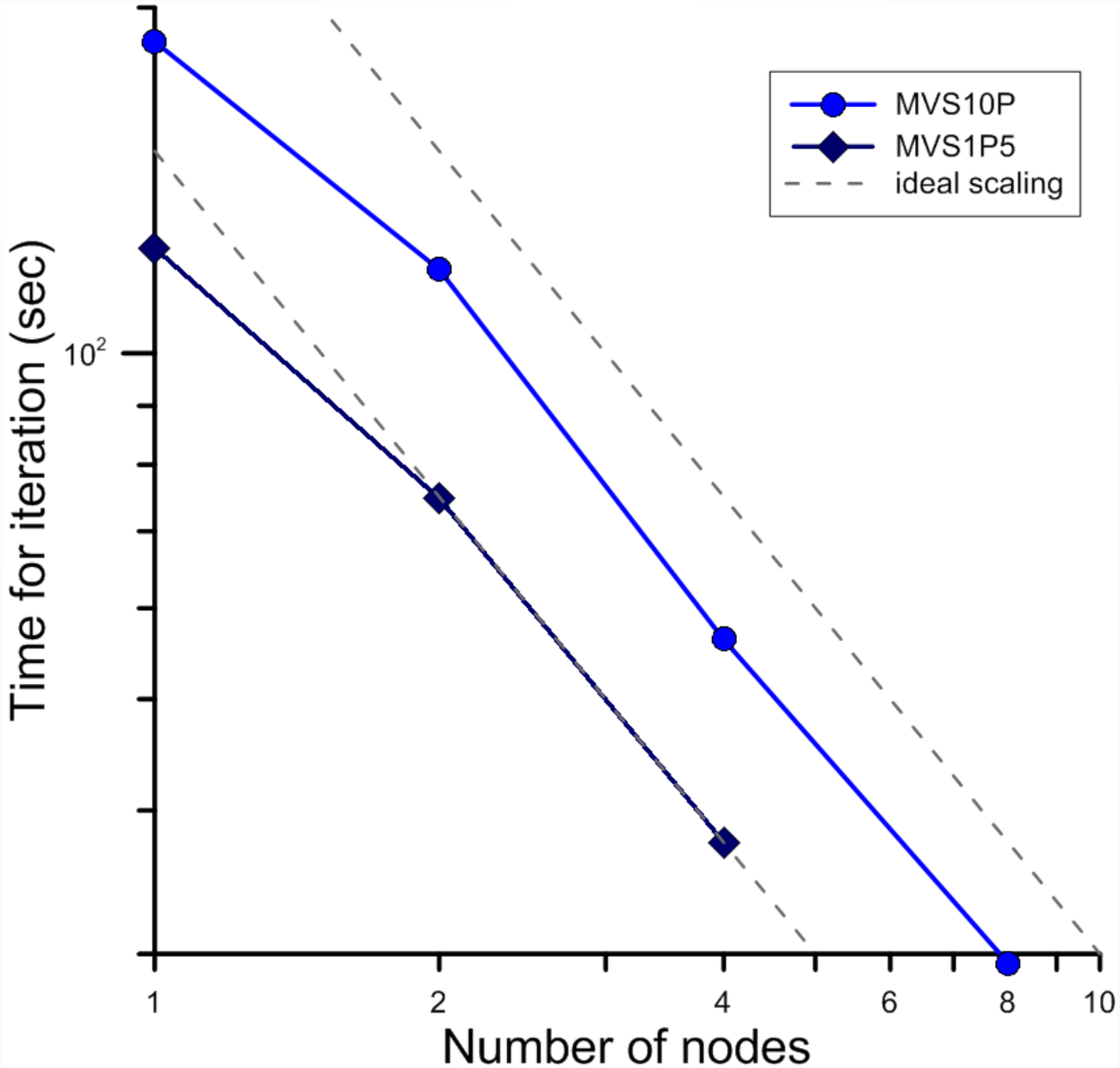
Квантовые ab-initio расчеты (VASP)

- VASP *(The Vienna Vienna Ab initio simulation package)* – самый популярный пакет для квантовых расчетов в мире (15 - 20% всей вычислительной мощности тратятся на расчеты в VASP)
- Является memory bound и compute bound кодом

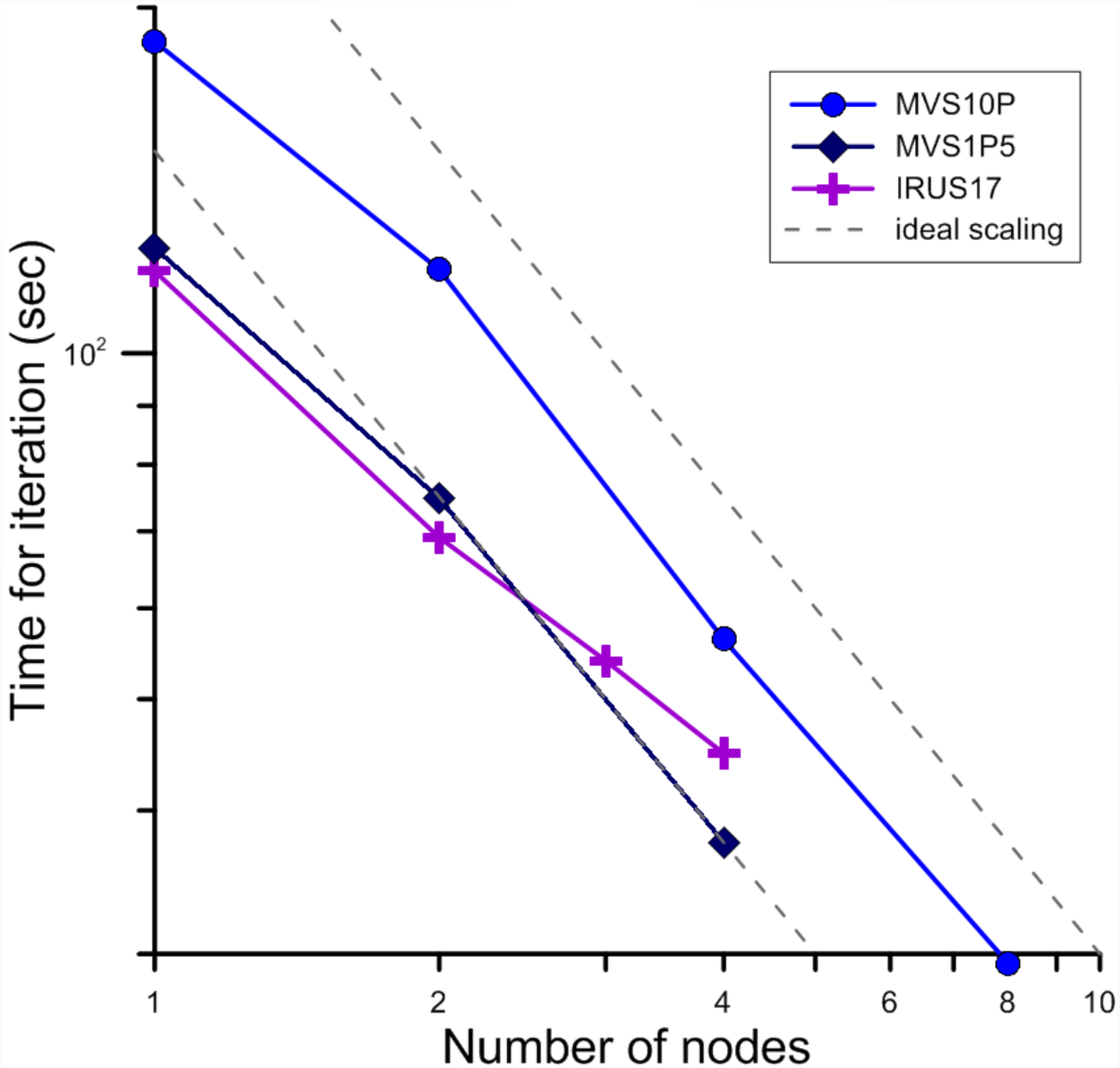
Масштабируемость VASP



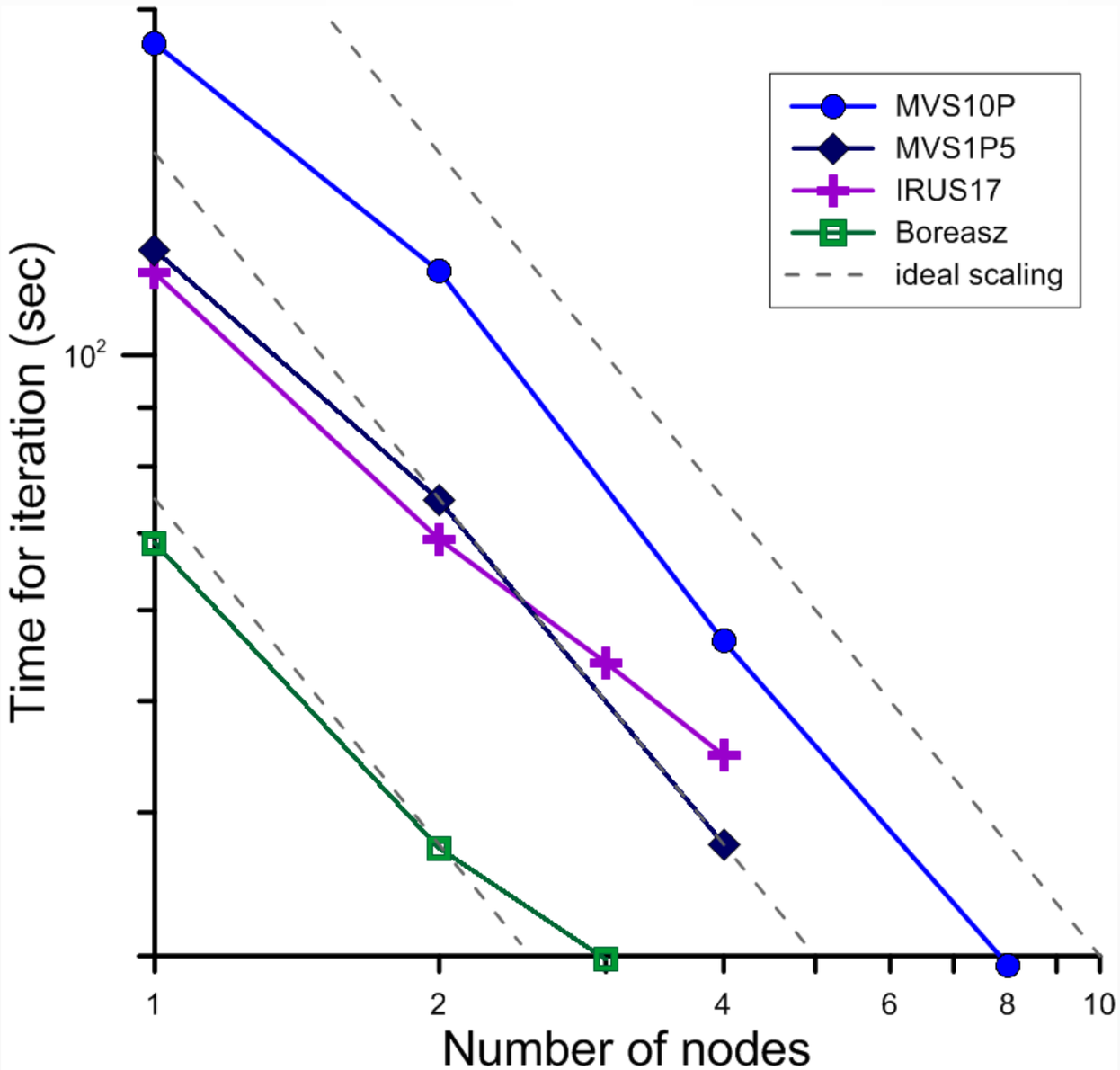
Масштабируемость VASP



Масштабируемость VASP



Масштабируемость VASP

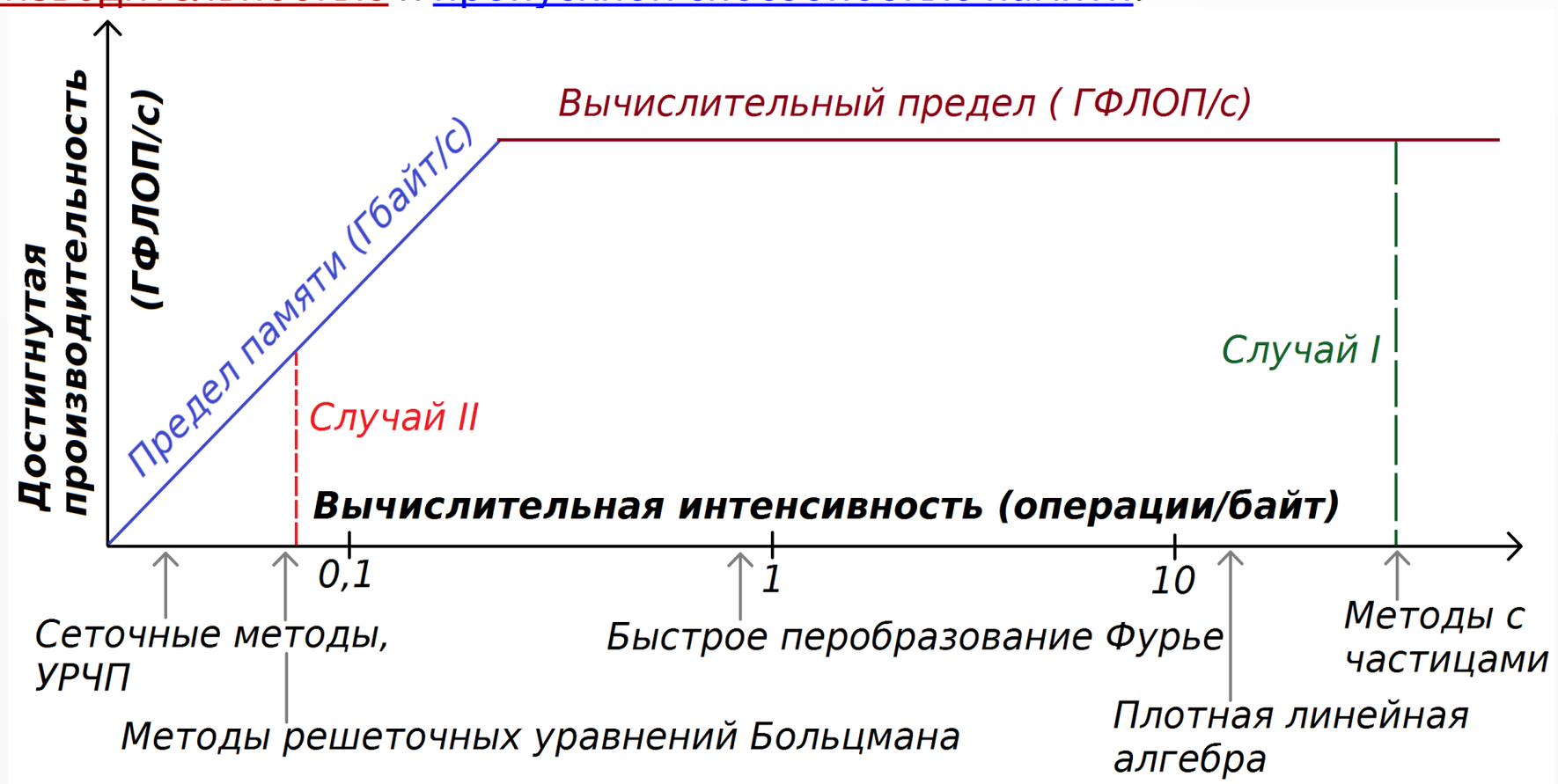


Разнообразие современных архитектур

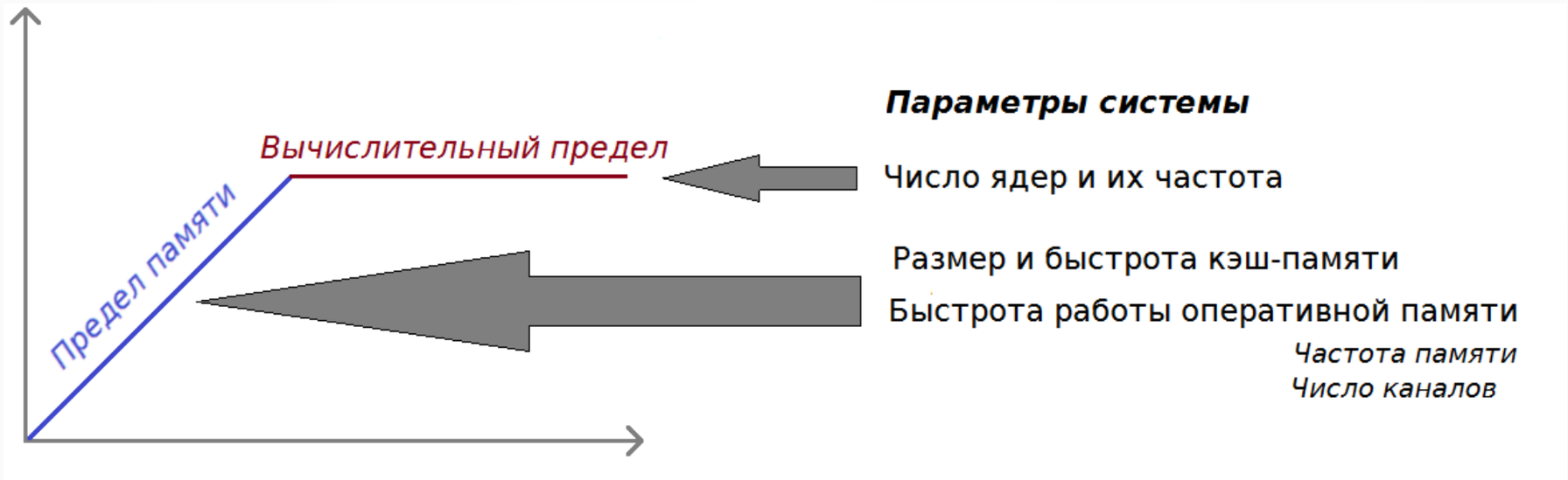
CPU type	N_{cores}	$N_{mem.ch.}$	LLC (Mb)	CPU_{freq} (GHz)	$DRAM_{freq}$ (MHz)
Single socket, Intel X99 chipset					
Xeon E5-2620v4	8	4	20	2.1	2133
Xeon E5-2660v4	14	4	35	2.0	2400
Single socket, AMD B350 chipset					
Ryzen 1800X	8	2	16	3.6	2400
Nvidia Jetson TX2 (2 Denver + 4 Cortex-A57 cores)					
Tegra “Parker”	2+4	4 (32-bit)	2+2	2.0	1866
Dual socket, Intel C602 chipset (the MVS10P cluster)					
Xeon E5-2690	8	4	20	2.9	1600
Dual socket, Intel C612 chipset (the MVS1P5 cluster)					
Xeon E5-2697v3	14	4	35	2.6	2133
Dual socket, Intel C612 chipset (the IRUS17 cluster)					
Xeon E5-2698v4	20	4	50	2.2	2400
Quad socket, IBM Power 775 (the Boreasz cluster [21])					
Power 7	8	4	32	3.83	1600

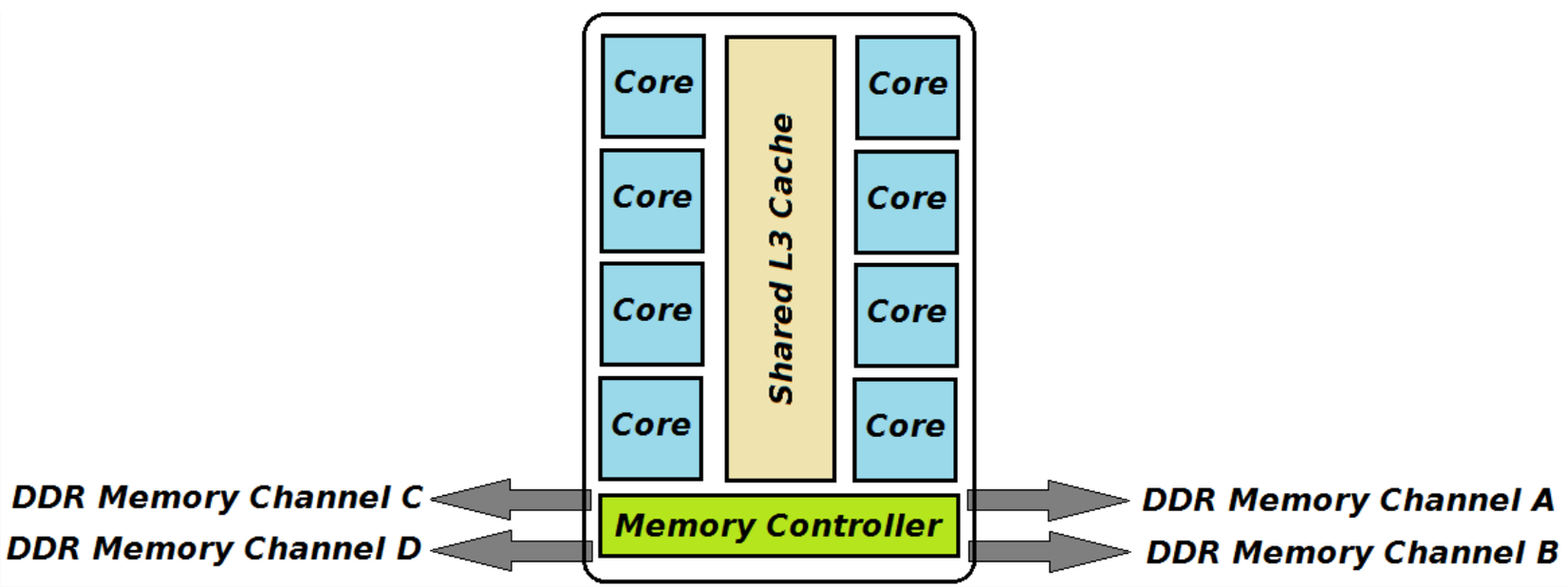
Оценка производительности моделью Roofline

- Разные алгоритмы характеризуются разной **вычислительной интенсивностью** – отношением количества арифметических операций к объему переданных данных.
- Максимальная производительность разных алгоритмов *ограничивается* пиковой производительностью и пропускной способностью памяти.

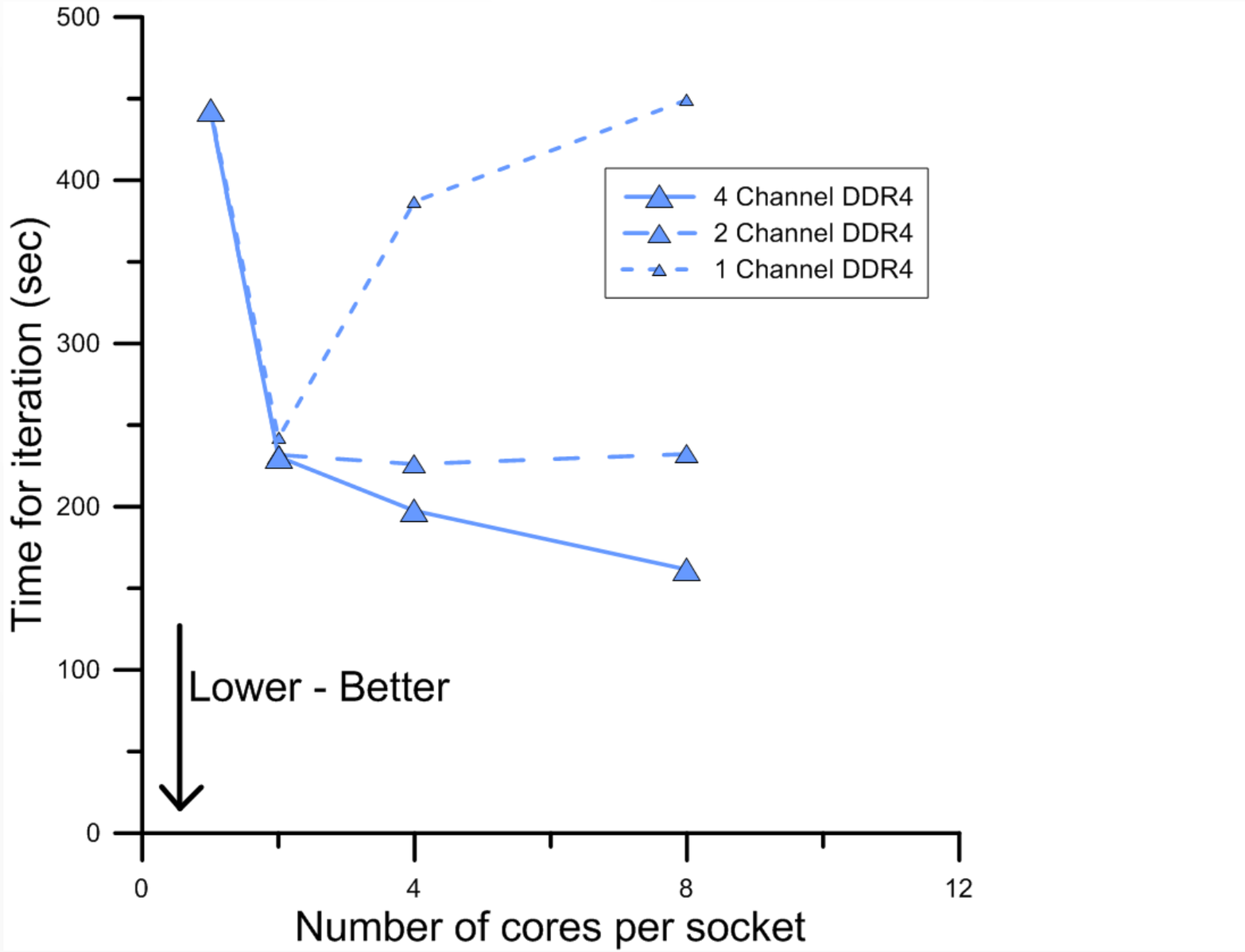


Влияние архитектуры узла на производительность в VASP





Пример – влияние числа каналов памяти на скорость расчета (8core Xeon E5-2620v4)



Как учесть все параметры системы и оценить эффективность расчета?

- Разные системы ранжируем по параметру баланса между производительностью процессора и памяти

$$\frac{\text{Теоретическая пиковая производительность } (R_{peak}) \ [\ FLOP / sec\ ]}{\text{Пропускная способность памяти } [\ Megabytes / sec\ ]} = \text{Баланс } [\ FLOP / byte\ ]$$

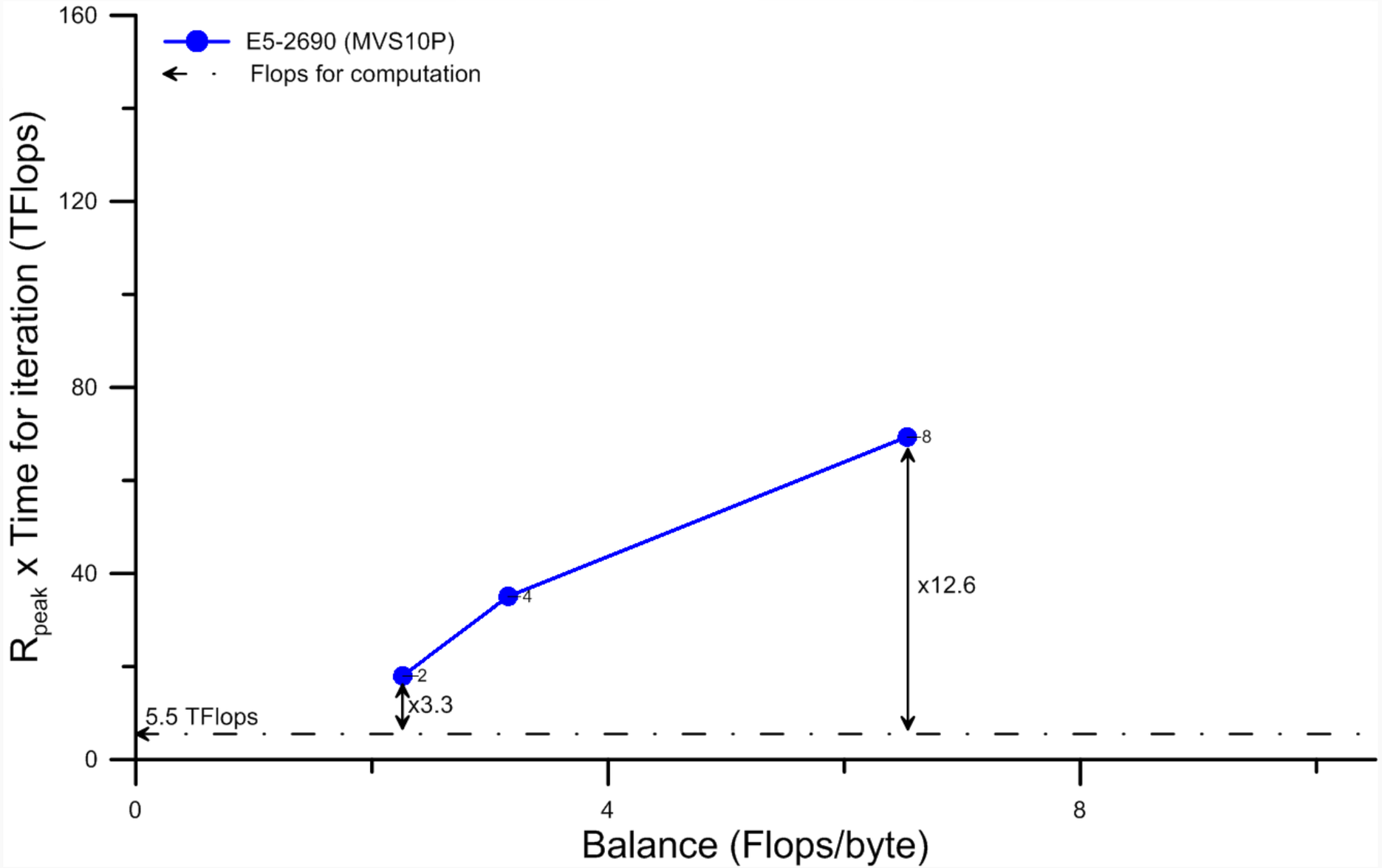
- **Не**эффективность расчета на конкретной системе оцениваем как

$$\text{Теоретическая пиковая производительность } (R_{peak}) \ [\ FLOP / sec\ ] \times \text{время итерации VASP } (T_{iter}) \ [\ sec\ ] = \text{Число операций, которое могло БЫ быть выполнено } [\ FLOP\ ]$$

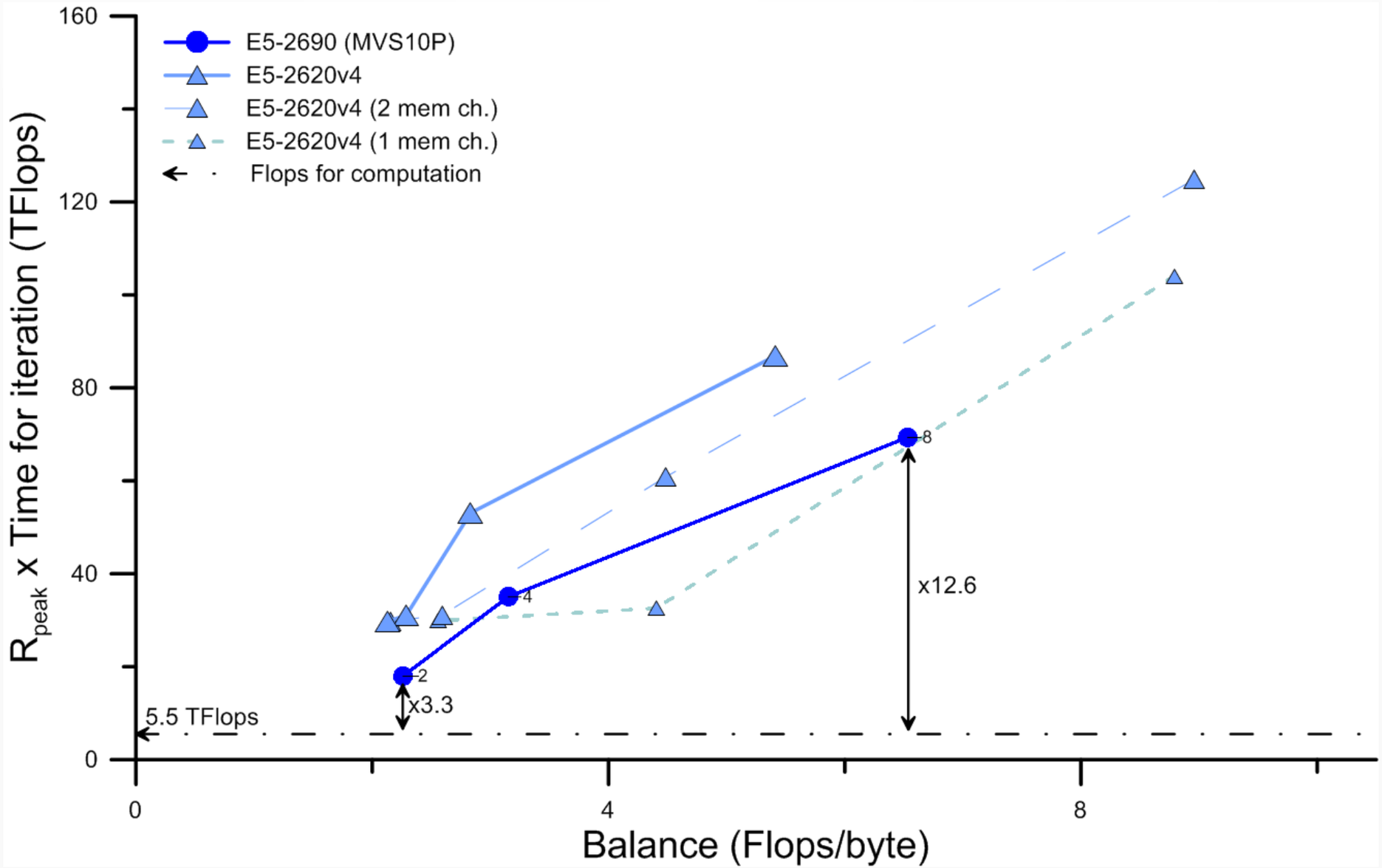
Как учесть все параметры системы и оценить эффективность расчета-2

- Используя аппаратные счетчики платформ Интел, было измерено **реально выполненное** количество операций с плавающей запятой – 5.5 Терафлоп за итерацию
- Сравним количество выполненных операций, и количество операций, которых можно было бы выполнить.
  - Чем выше это соотношение, тем более эффективно работает подсистема памяти

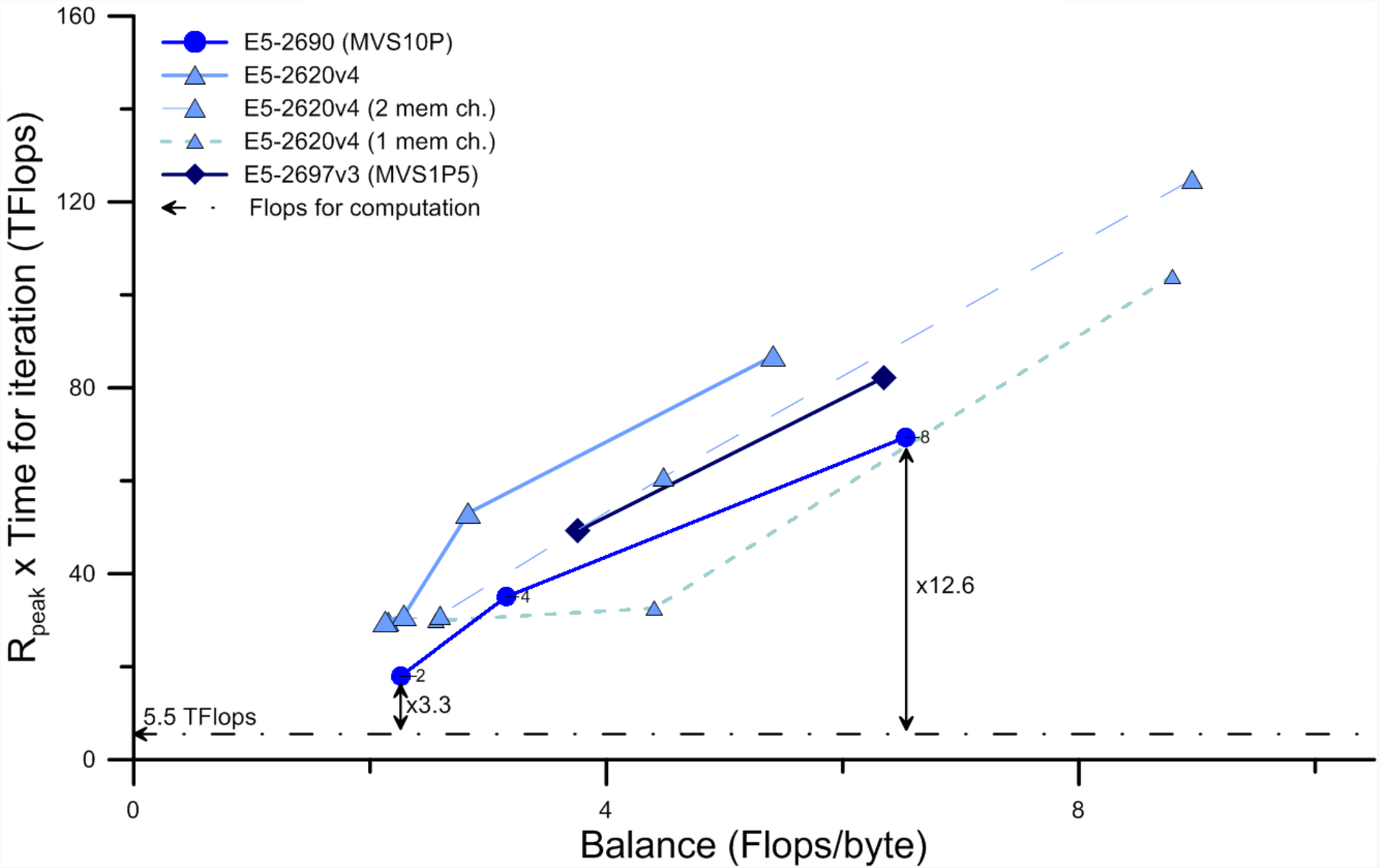
Влияние баланса на скорость расчета



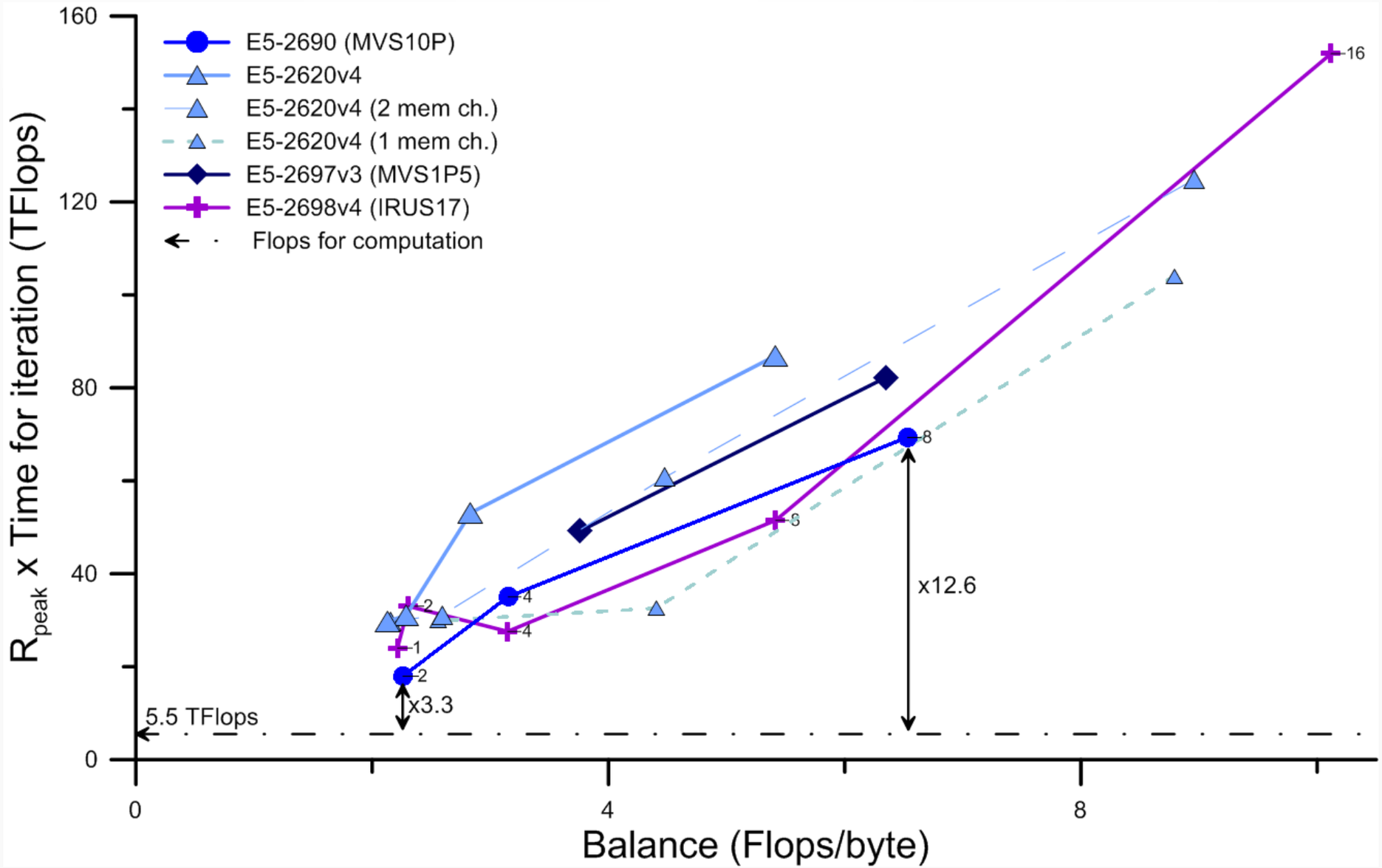
Влияние баланса на скорость расчета



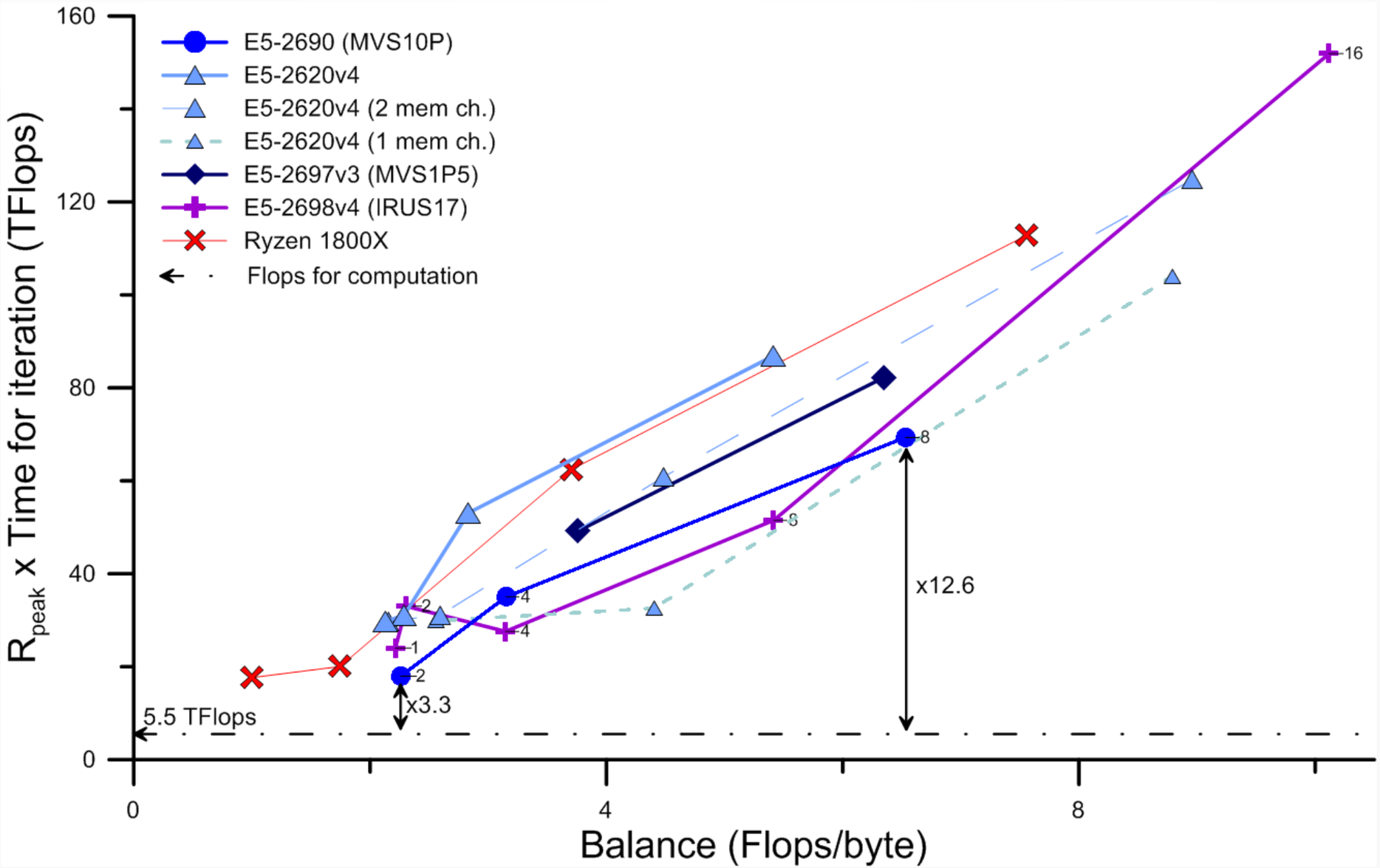
Влияние баланса на скорость расчета



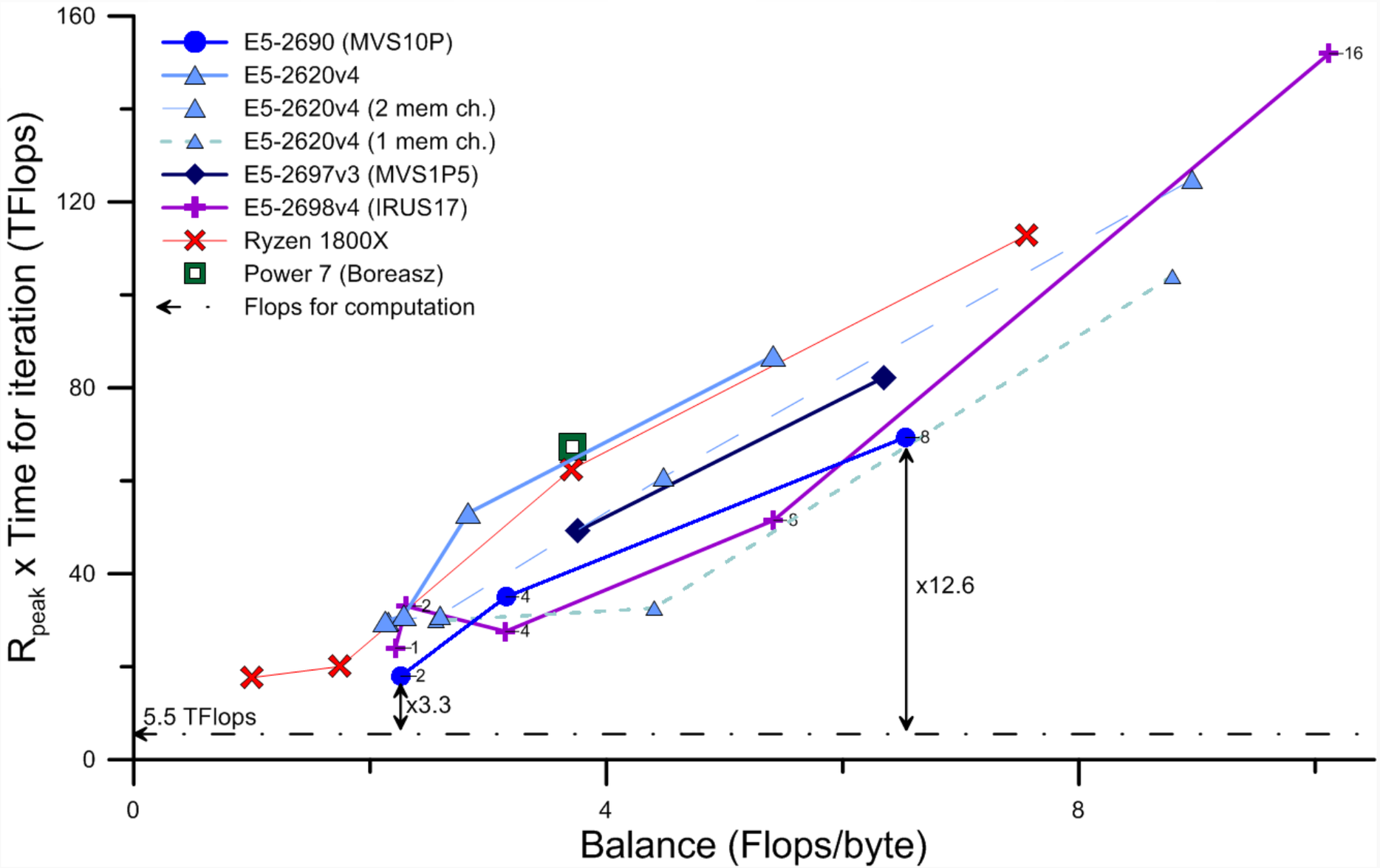
Влияние баланса на скорость расчета



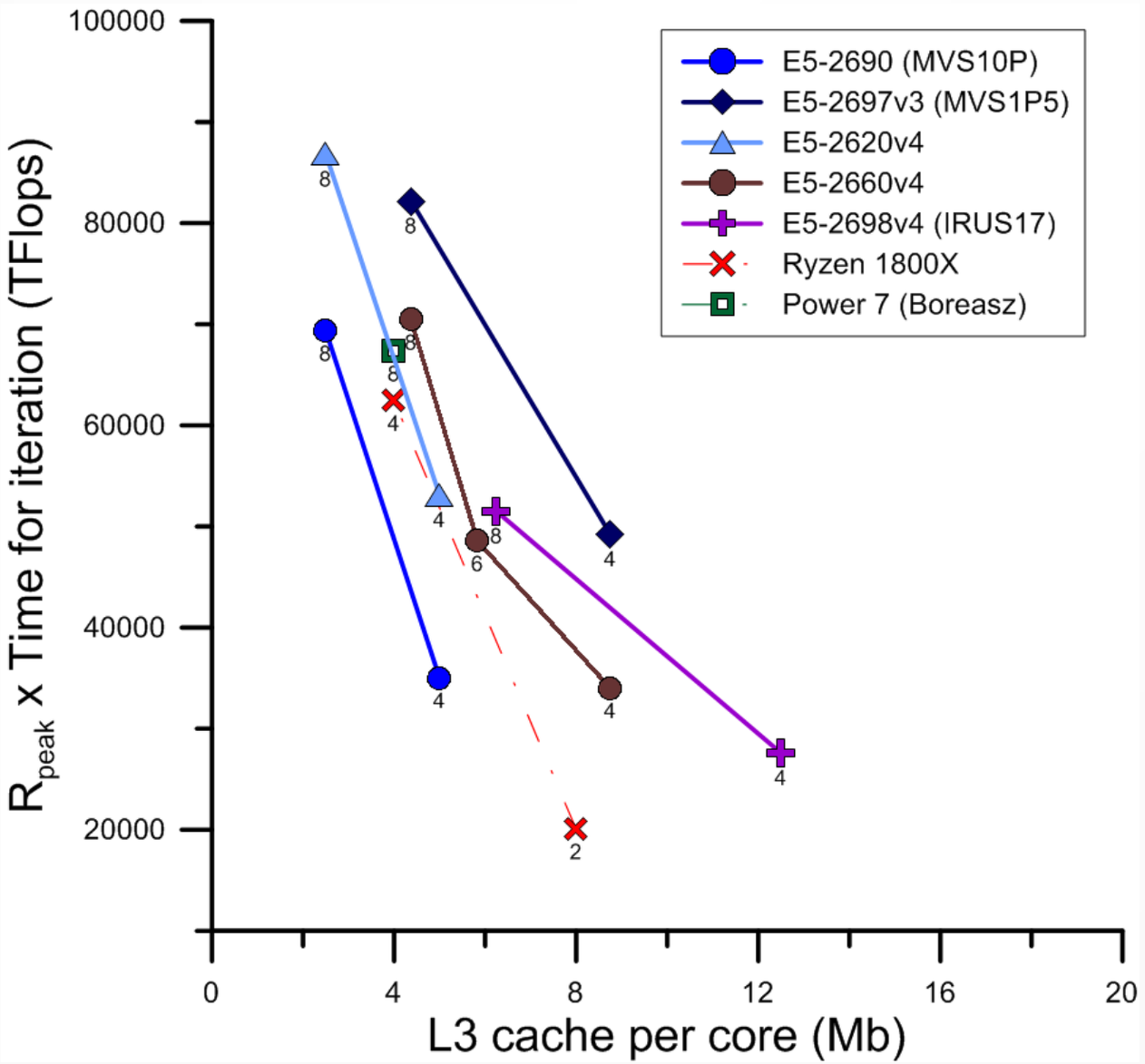
Влияние баланса на скорость расчета



Влияние баланса на скорость расчета



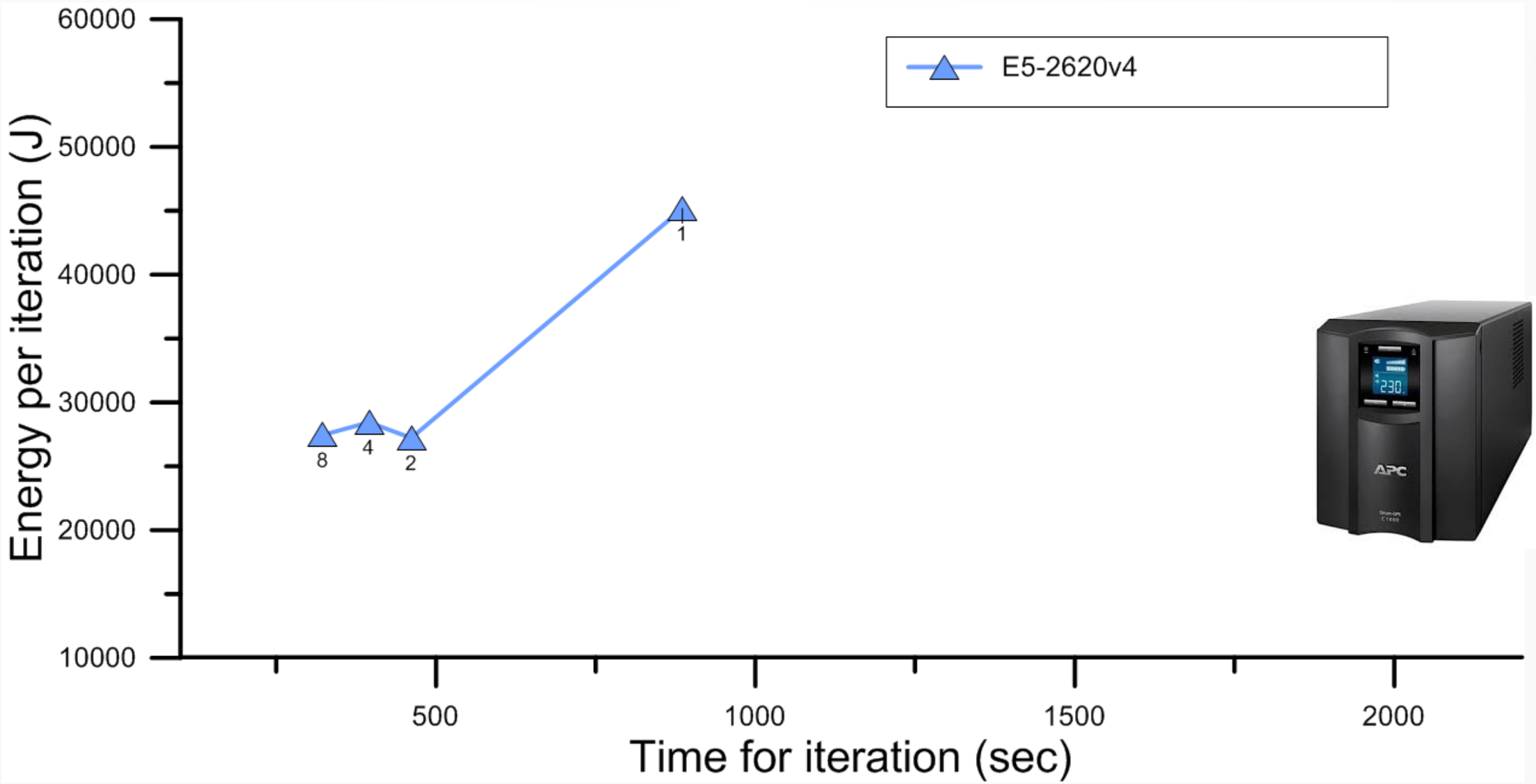
Пример 2 – влияние кэша на скорость расчета



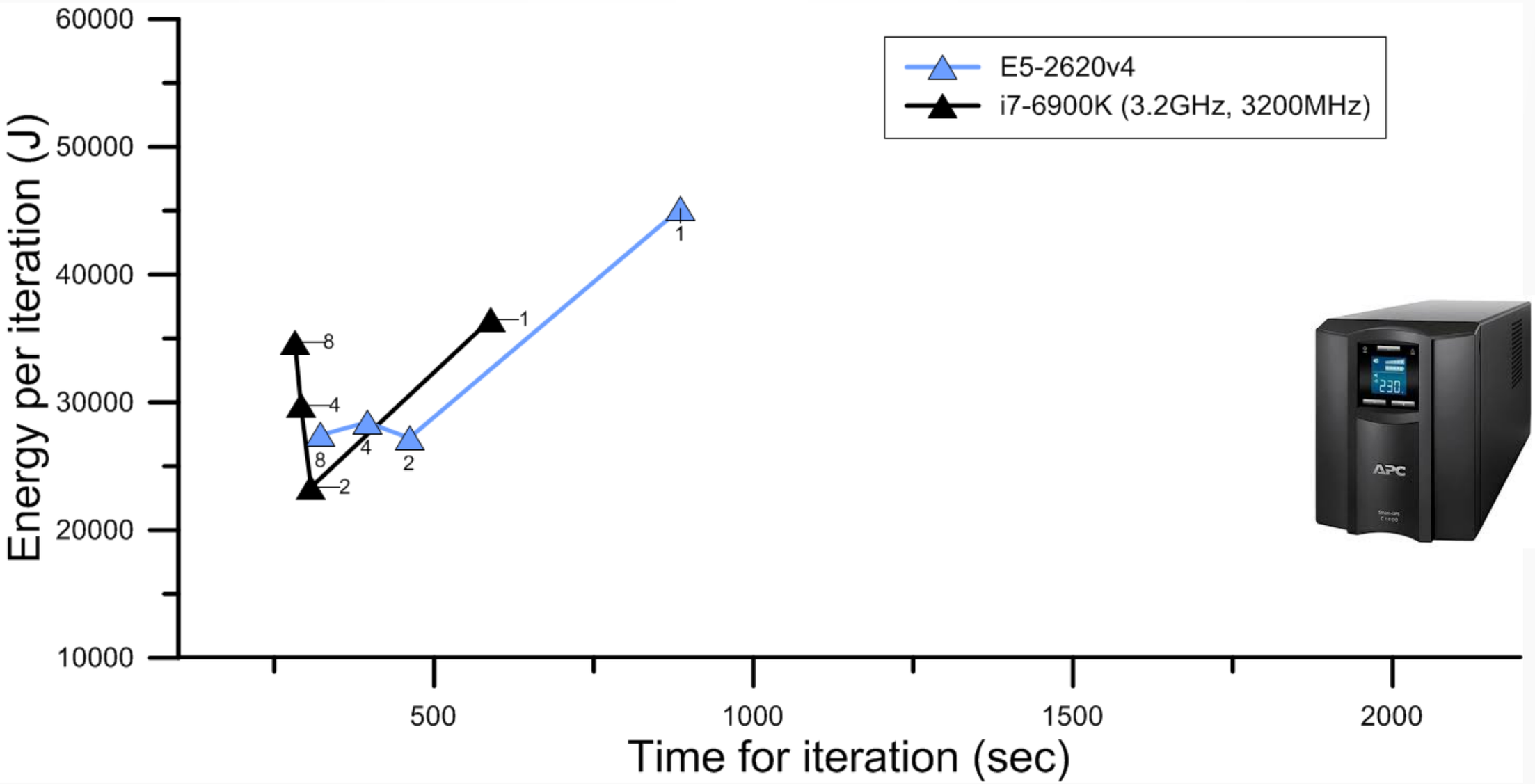
Энергопотребление

- Большинство работ посвящено потреблению одного компонента системы – центрального процессора или памяти.
- В этой работе мы аппаратно измеряли потребление всего вычислительного устройства.

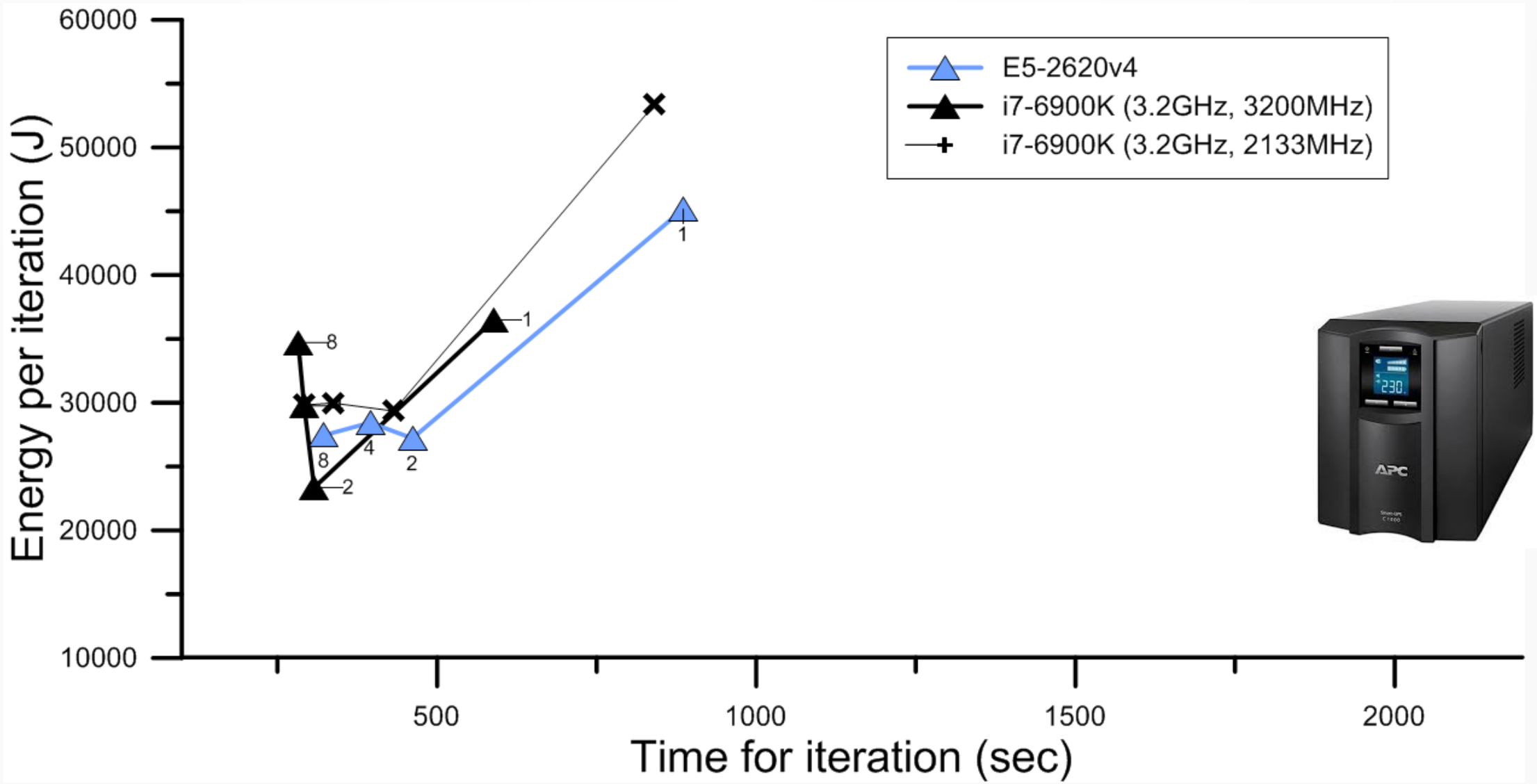
Энергопотребление разных платформ



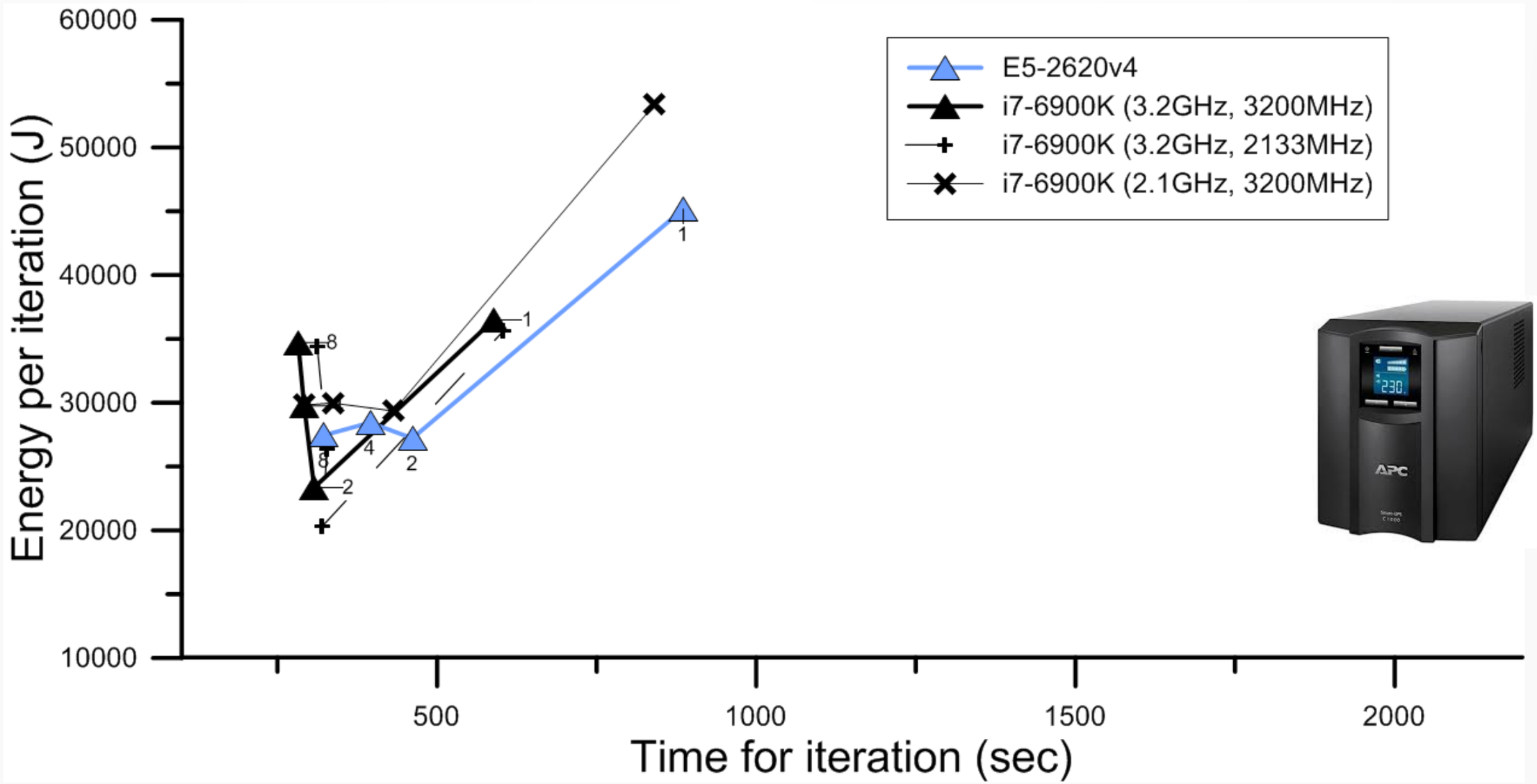
Энергопотребление разных платформ



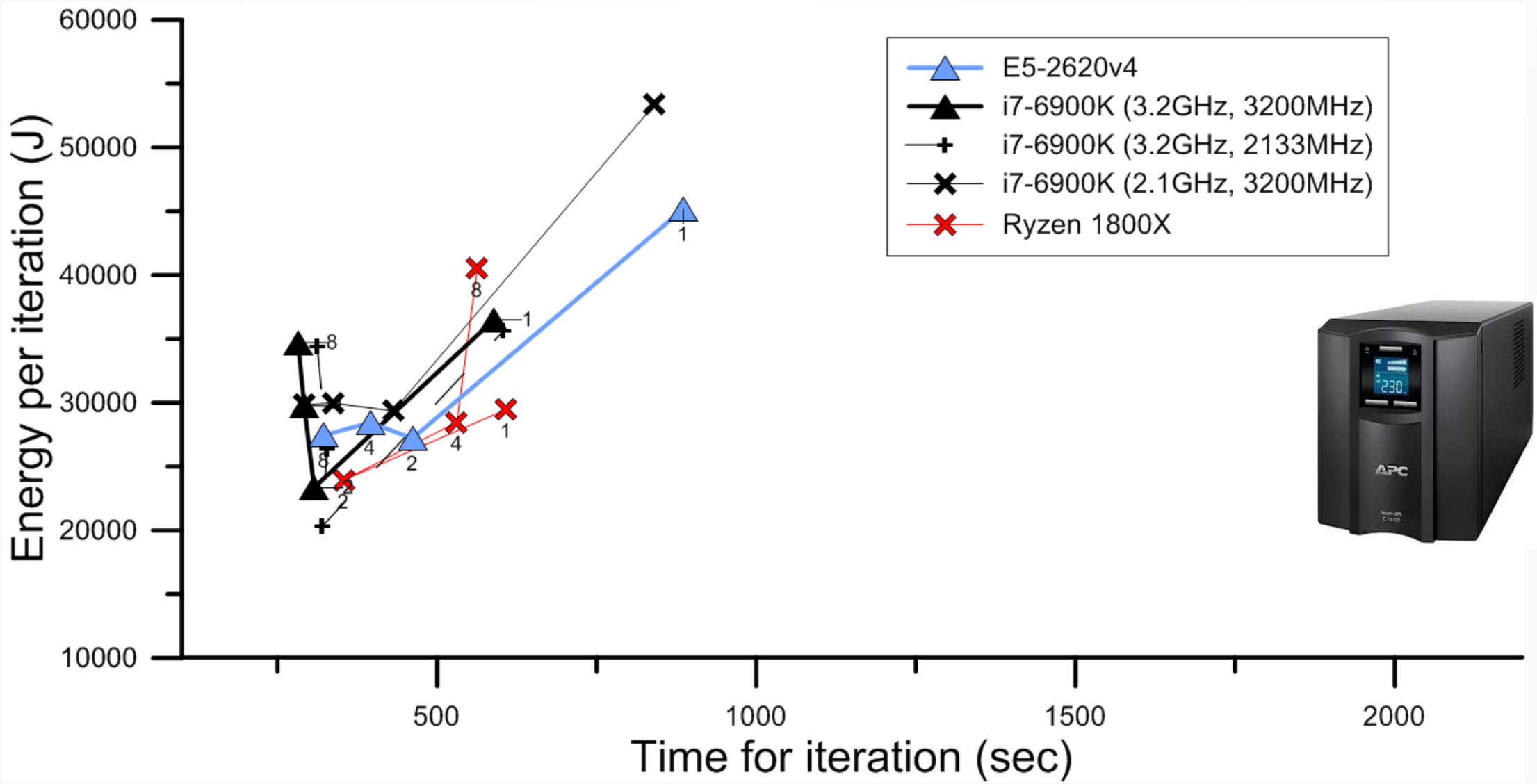
Энергопотребление разных платформ



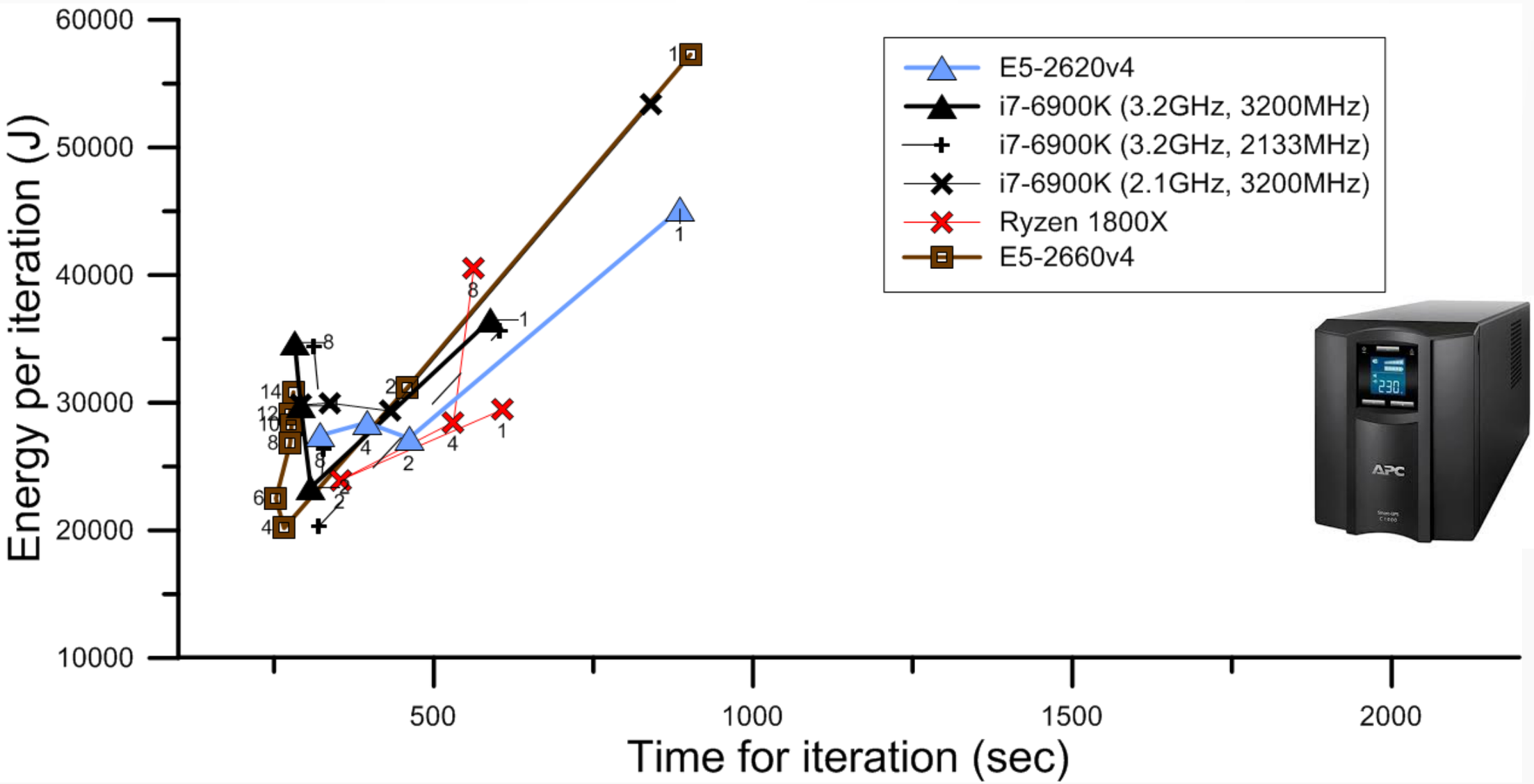
Энергопотребление разных платформ



Энергопотребление разных платформ

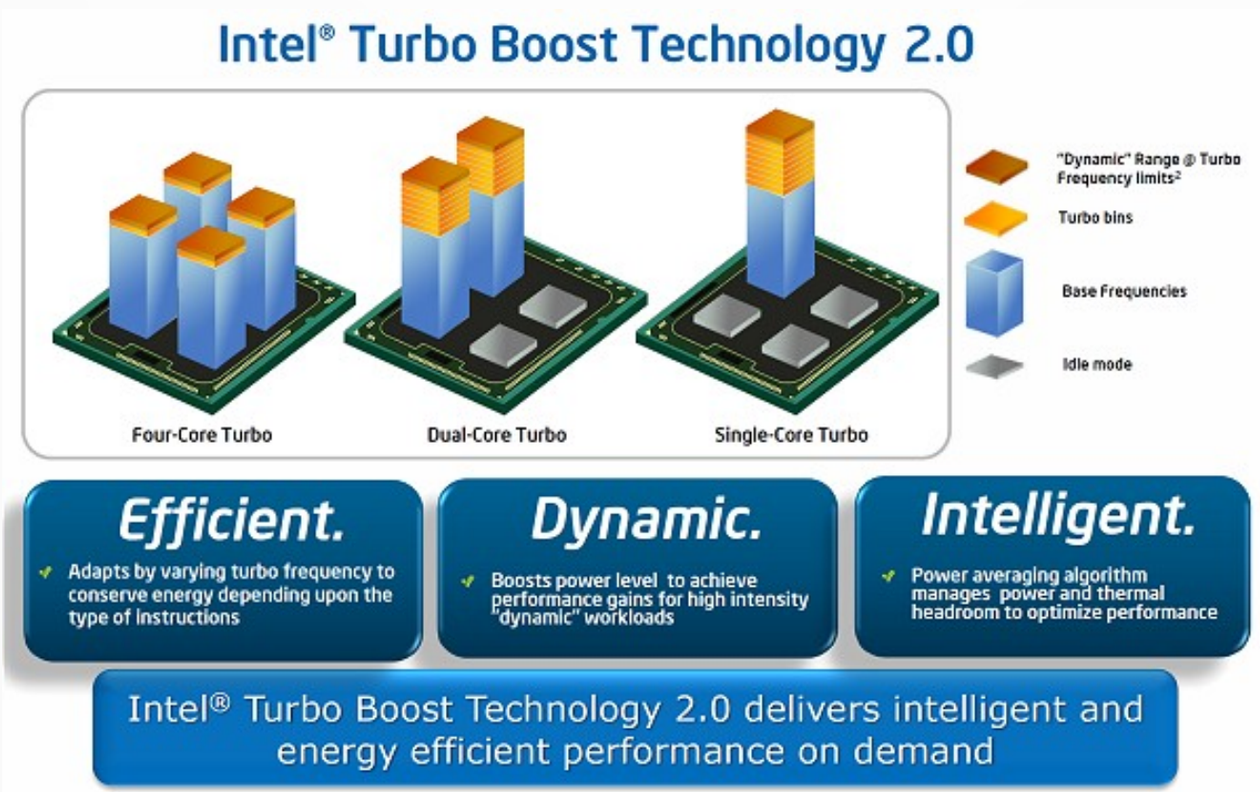


Энергопотребление разных платформ

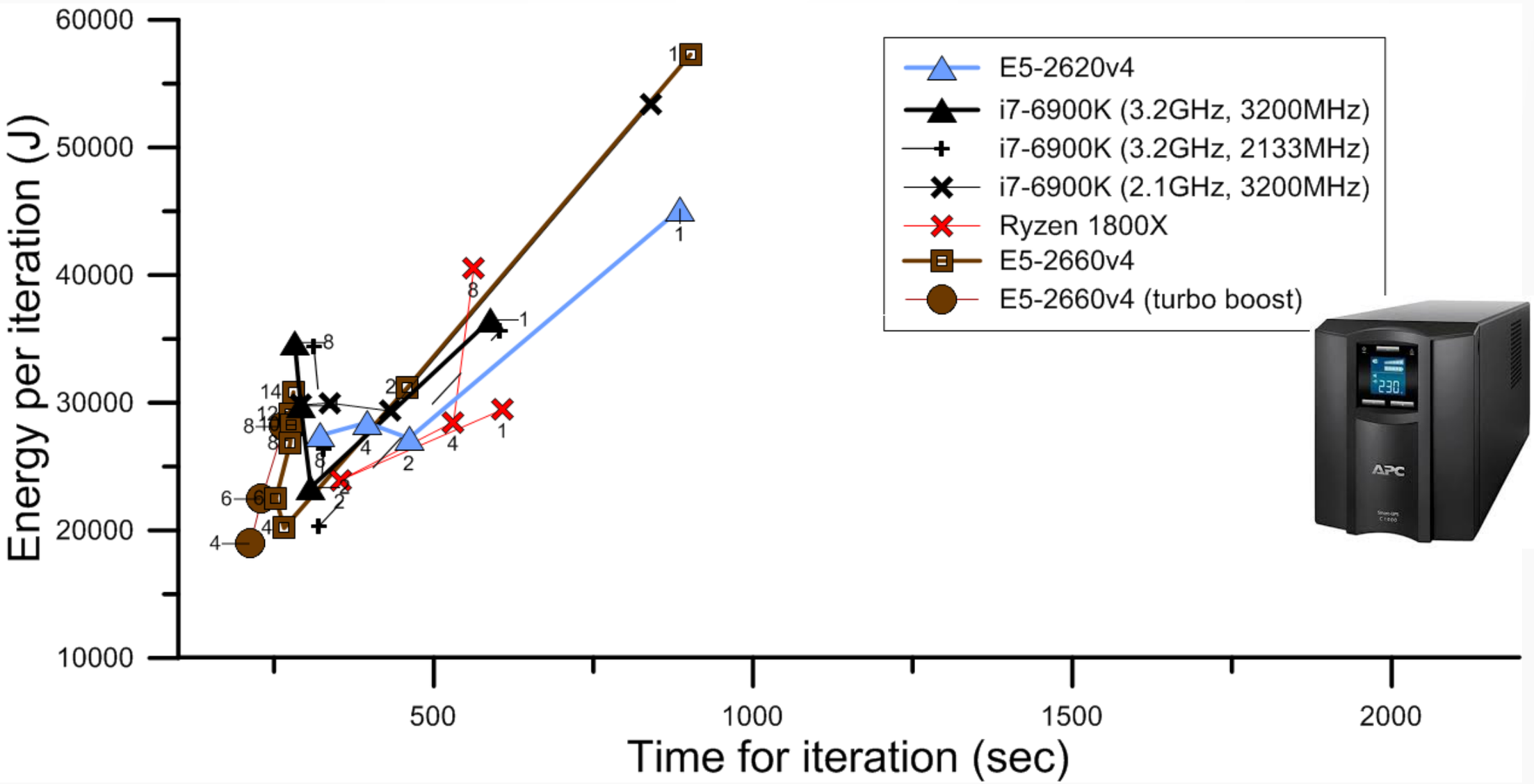


Технология Turbo Boost

- Технология Turbo Boost позволяет автоматически увеличивать тактовую частоту процессора свыше номинальной, если позволяет система охлаждения
- Чем меньше задействовано ядер – тем больше авторазгон

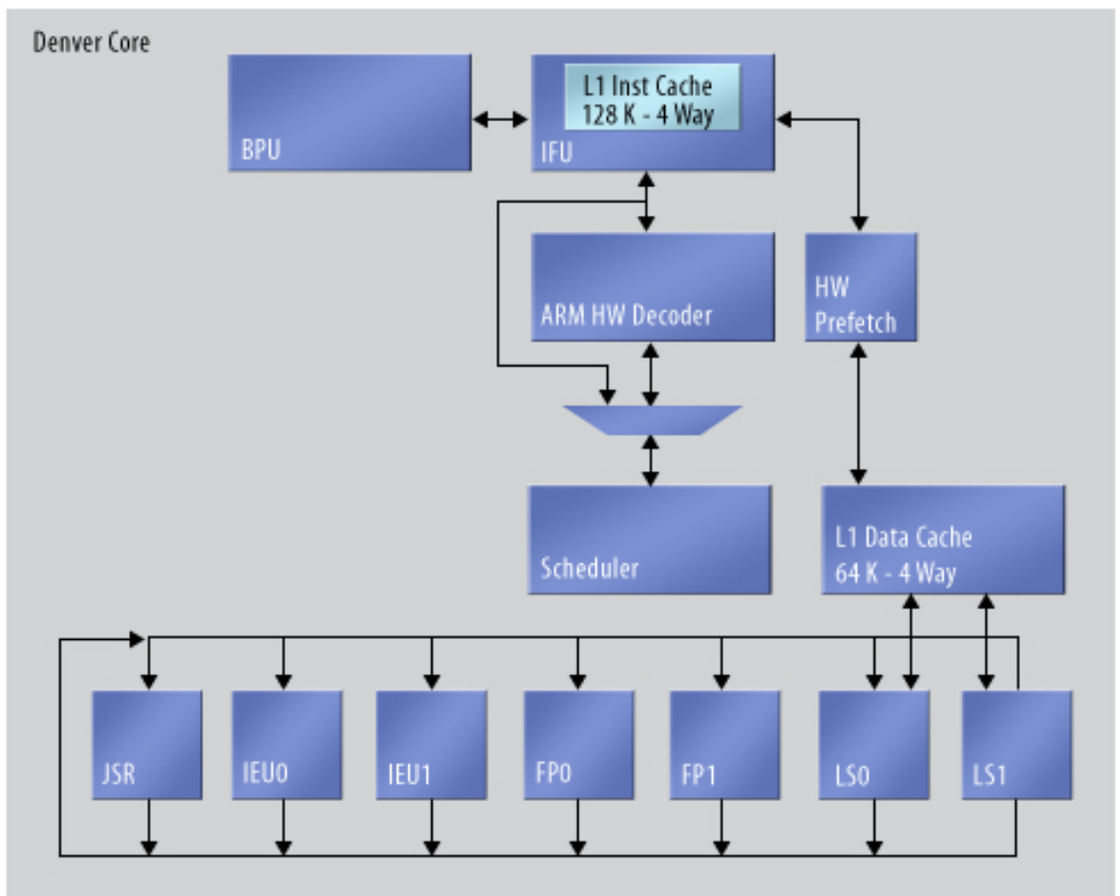


Энергопотребление разных платформ

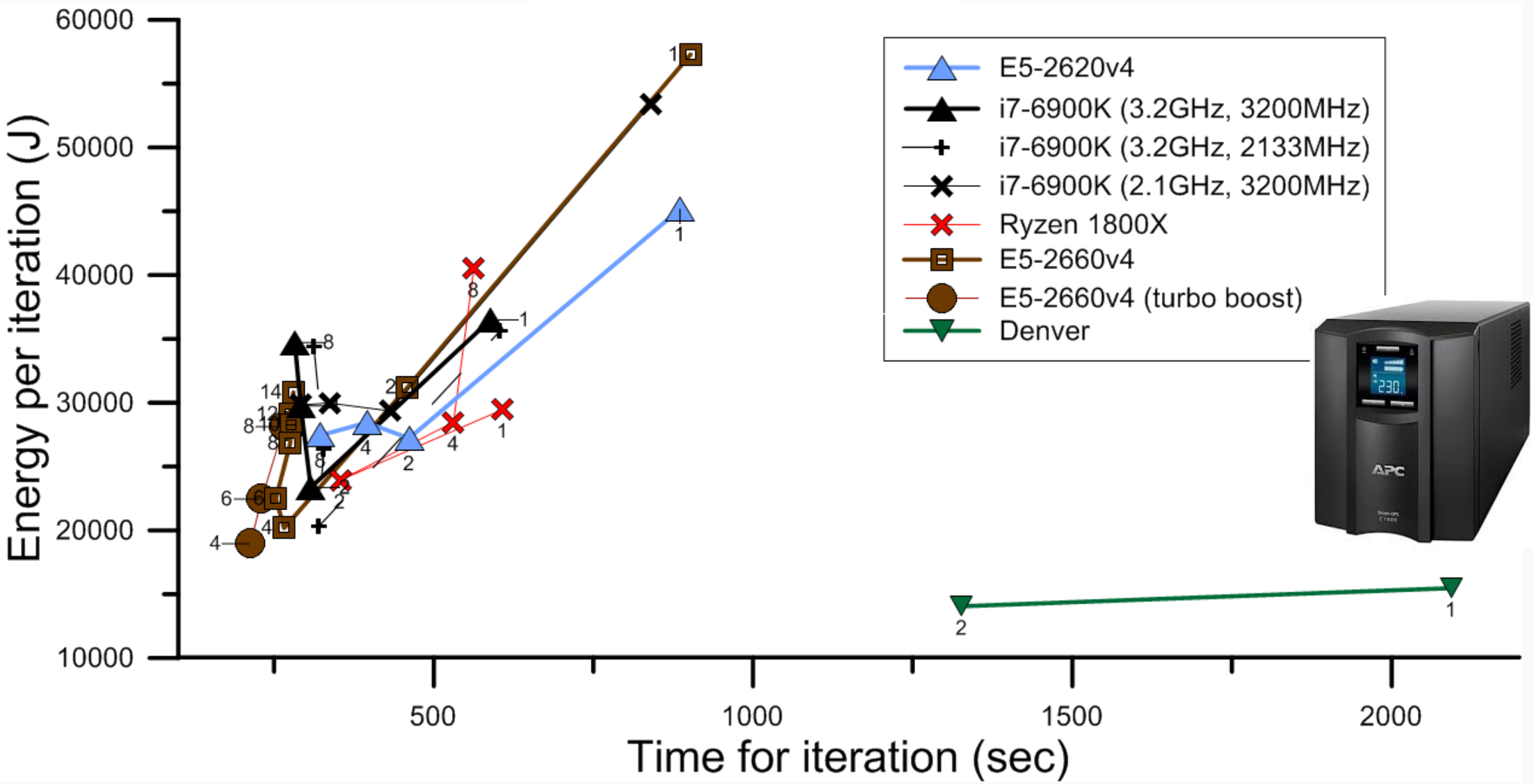


Nvidia Denver

- Nvidia представила свою архитектуру CPU под наименованием Denver
  - Совместима с набором инструкций ARM-32/64bit
  - Отсутствует out-of-order execution, присутствует бинарный рекомпилятор для оптимизации выполнения кода



Энергопотребление разных платформ



Выводы для VASP

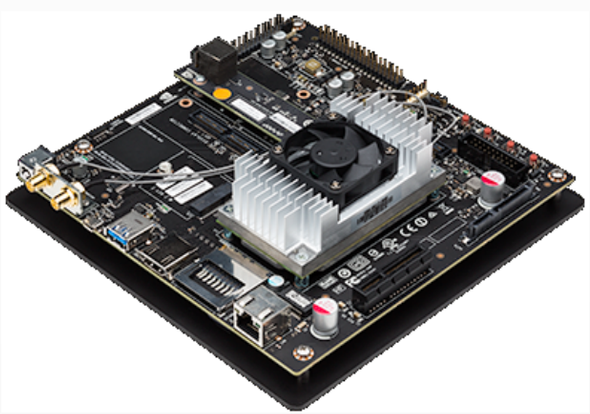
- 1. На одной тестовой задаче проведено сравнение 8 типов процессоров различных производителей (Intel, AMD, IBM и Nvidia).
- 2. Для Intel Xeon Broadwell проведено варьирование частот процессора и памяти, а также числа каналов DRAM.
- 3. Установлено наличие универсального тренда $R_{peak}*\tau_{iter}$ от значения баланса Флоп/Байт.
- 4. Для расчетов VASP оптимальным является использование 1-2 ядер на один канал памяти. Большее число ядер не приводит к ускорению, но повышает потребление энергии.
- 5. Существенный выигрыш в эффективности дает большее значение L3 кэша на ядро и возможность разгона ядер за счет технологии TurboBoost.

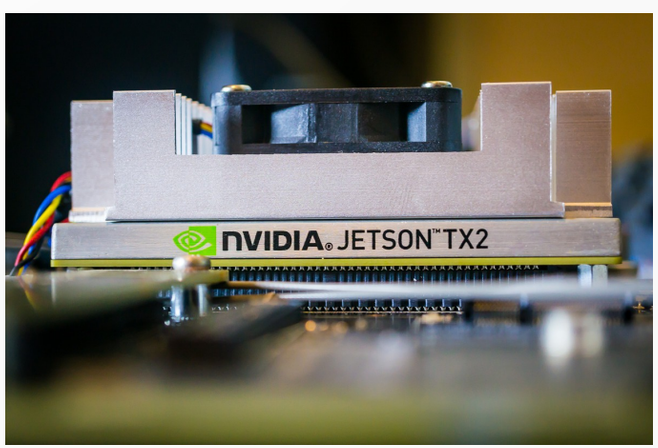
1. Stegailov V., Vecher V. Efficiency analysis of Intel and AMD x86_64 architectures for ab initio calculations: a case study of VASP // Communications in Computer and Information Science, Springer. **Принято в труды конференции RuSCD 2017.**

2. Stegailov V., Vecher V. Efficiency analysis of Intel, AMD and Nvidia 64-bit hardware for memory-bound problems: a case study of ab initio calculations with VASP // Lecture Notes in Computer Science, Springer. **Принято в труды конференции PPAM 2017.**

Ускоренная на GPU классическая молекулярная динамика

- Программный пакет - LAMMPS
- Миникомпьютеры Nvidia Jetson TK1 ,TX1 и TX2
  - TK1: ARM Cortex A15 4 ядра, графическое ядро Kepler (128 ядер) + 2 Гб LPDDR3 RAM
  - TX1: ARM Cortex A57 4 ядра, графическое ядро Maxwell (256 ядер) + 4 Гб LPDDR4 RAM
  - TX2: ARM Cortex A57 4 ядра + Nvidia Denver II 2 ядра, графическое ядро Pascal (256 ядер) + 8Гб LPDDR4 RAM

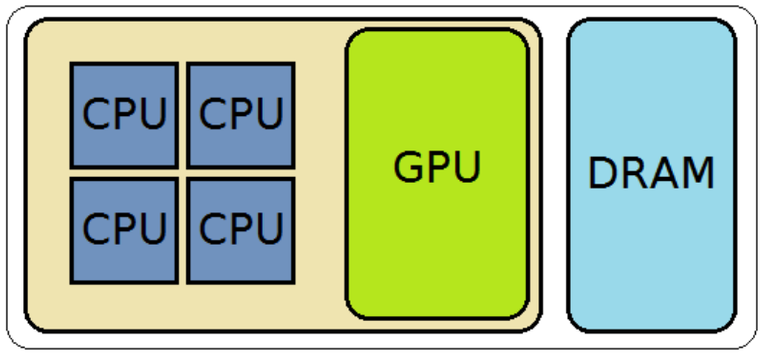




Ручная регулировка частот

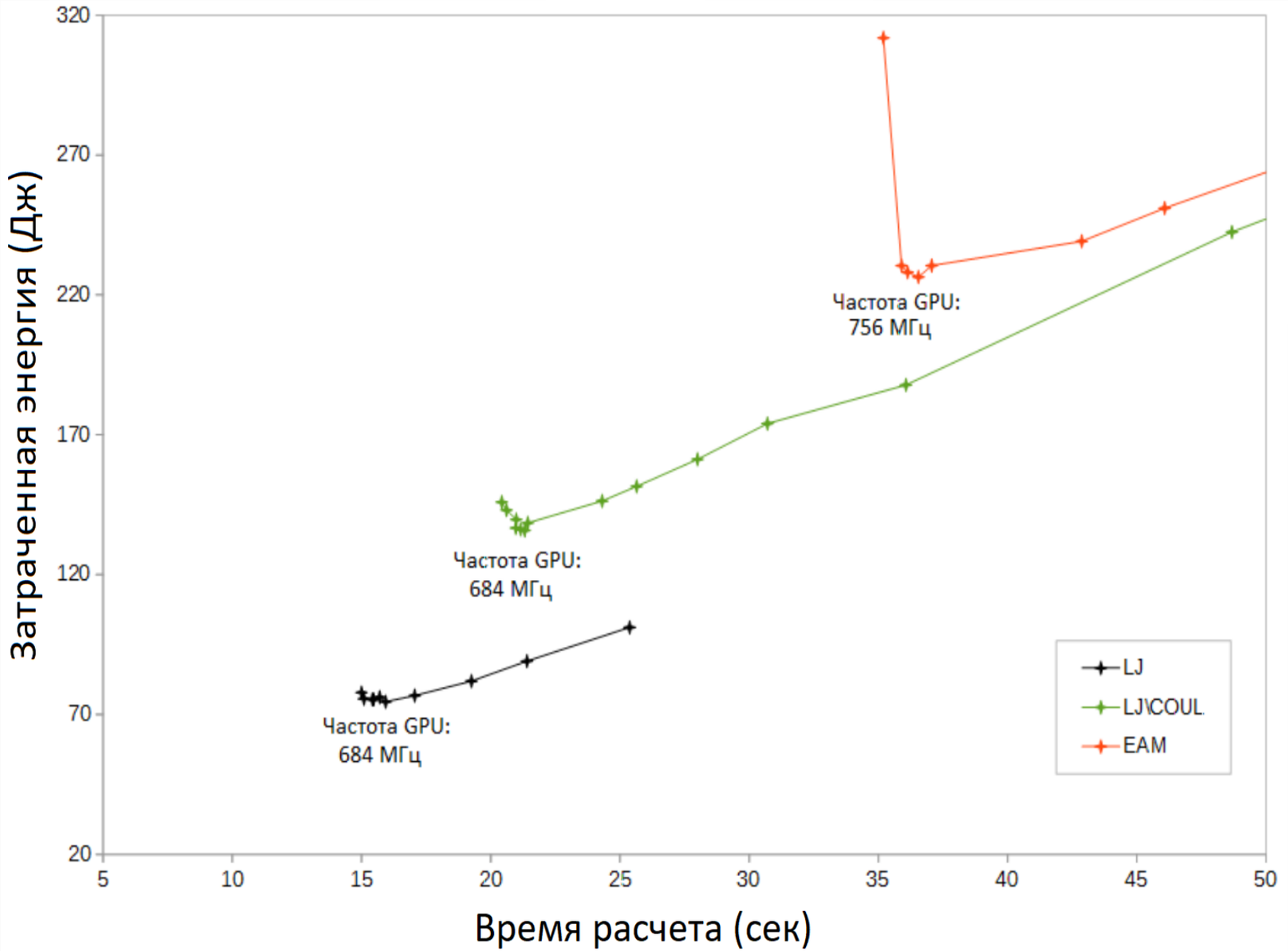
- Миникомпьютеры **позволяют** пользователю вручную **задавать частоты** графического ядра (GPU) и оперативной памяти (DRAM)

$$P = \alpha C_{Load} V_{DD}^2 f$$



Частоты:	GPU	DRAM
	852 МГц	924 МГц
	804 МГц	396 МГц
	756 МГц	204 МГц
	708 МГц	102 МГц
	684 МГц	
	648 МГц	
	612 МГц	
	540 МГц	
	468 МГц	
	396 МГц	
	324 МГц	
	252 МГц	
	180 МГц	
	108 МГц	
	72 МГц	

Способ минимизации энергопотребления GPU (частота памяти 924МГц)



Выводы для ускоренной на GPU классической МД

Существует принципиальная возможность подобрать такую комбинацию частот памяти и ядер, при которой скорость расчета будет немного меньше, а энергопотребление — значительно меньше.

1.Nikolsky V., Stegailov V., Vecher V. Efficiency of Tegra K1 and X1 Systems-on-Chip for Classical Molecular Dynamics // Proceedings of the 14th International Conference on High Performance Computing & Simulation (HPCS-2016), Innsbruck, Austria. 2016. P. 682-689.

2. Vecher V., Nikosky V., Stegailov V. GPU-accelerated molecular dynamics: energy consumption and performance // Communications in Computer and Information Science, Springer.

3.Nikosky V., Vecher V., Stegailov V. Performance of MD-algorithms on hybrid systems-on-chip Nvidia Tegra K1 & X1 // Communications in Computer and Information Science, Springer