



Суперкомпьютерные дни в России

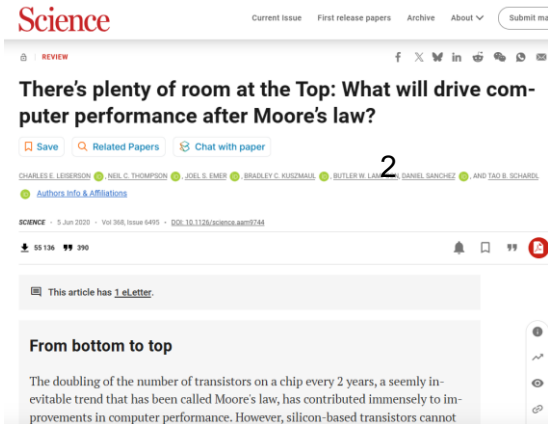
Predicting LAMMPS Throughput from CPU Specifications: A Cross-Architecture Study on Public Benchmark Data

Алексей Тимофеев. Альберт Хайрутдинов
ОИВТ РАН, НИУ ВШЭ



Можно ли предсказать производительность ПО по характеристикам ЦПУ?

Мотивация на примере перемножения матриц



Задача:

$$C = A_{4096,4096} * B_{4096,4096}$$

Алгоритм:

```
for i in xrange(4096):  
    for j in xrange(4096):  
        for k in xrange(4096):  
            C[i][j] += A[i][k] * B[k][j]
```

Можно ли предсказать производительность ПО по характеристикам ЦПУ?

Мотивация на примере перемножения матриц

Задача:

$$C = A_{4096,4096} * B_{4096,4096}$$

Алгоритм:

```
for i in xrange(4096):  
    for j in xrange(4096):  
        for k in xrange(4096):  
            C[i][j] += A[i][k] * B[k][j]
```

Вычислительное

устройство:

835 GFLOPS

Amazon AWS c4.8xlarge spot
instance, a dual-socket Intel
Xeon E5-2666 v3 system with
a total of 60 gibibytes of
memory

Version	Implementation	Running time (s)	GFLOPS	Absolute speedup	Relative speedup	Fraction of peak (%)
1	Python	25,552.48	0.005	1	—	0.00

Можно ли предсказать производительность ПО по характеристикам ЦПУ?

Мотивация на примере перемножения матриц

Задача:

$$C = A_{4096,4096} * B_{4096,4096}$$

Алгоритм:

```
for i in xrange(4096):  
    for j in xrange(4096):  
        for k in xrange(4096):  
            C[i][j] += A[i][k] * B[k][j]
```

Вычислительное

устройство:

835 GFLOPS

Amazon AWS c4.8xlarge spot
instance, a dual-socket Intel
Xeon E5-2666 v3 system with
a total of 60 gibibytes of
memory

Version	Implementation	Running time (s)	GFLOPS	Absolute speedup	Relative speedup	Fraction of peak (%)
1	Python	25,552.48	0.005	1	—	0.00
2	Java	2,372.68	0.058	11	10.8	0.01
3	C	542.67	0.253	47	4.4	0.03

Можно ли предсказать производительность ПО по характеристикам ЦПУ?

Мотивация на примере перемножения матриц

Задача:

$$C = A_{4096,4096} * B_{4096,4096}$$

Алгоритм:

```
for i in xrange(4096):  
    for j in xrange(4096):  
        for k in xrange(4096):  
            C[i][j] += A[i][k] * B[k][j]
```

Вычислительное

устройство:

835 GFLOPS

Amazon AWS c4.8xlarge spot
instance, a dual-socket Intel
Xeon E5-2666 v3 system with
a total of 60 gibibytes of
memory

Version	Implementation	Running time (s)	GFLOPS	Absolute speedup	Relative speedup	Fraction of peak (%)
1	Python	25,552.48	0.005	1	—	0.00
2	Java	2,372.68	0.058	11	10.8	0.01
3	C	542.67	0.253	47	4.4	0.03
4	Parallel loops	69.80	1.969	366	7.8	0.24
5	Parallel divide and conquer	3.80	36.180	6,727	18.4	4.33
6	plus vectorization	1.10	124.914	23,224	3.5	14.96
7	plus AVX intrinsics	0.41	337.812	62,806	2.7	40.45

Открытые данные бенчмарка openbenchmarking

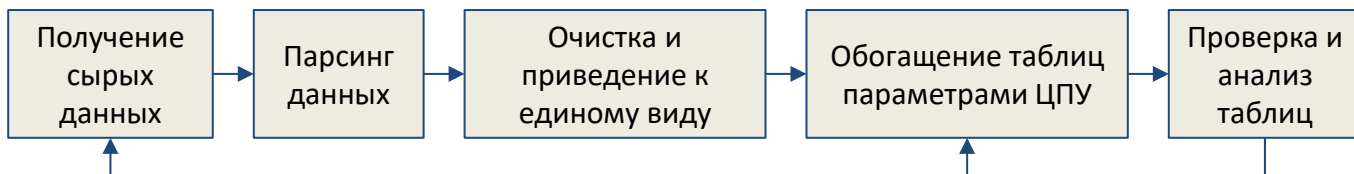
Сочетаний пакет-версия-бенчмарк - 27

Всего записей - 2608 (AMD - 1520, Intel - 1021, other - 67)

Процессоров (процессорных систем) - 235 (AMD - 82, Intel - 125, other - 28)

Конвейер обработки данных

Конвейер обработки и подготовки данных



Метрика производительности

Гигафлопс (GFLOPS) — это единица измерения производительности вычислительной техники, означающая 1 миллиард операций с плавающей запятой в секунду за тактовый цикл

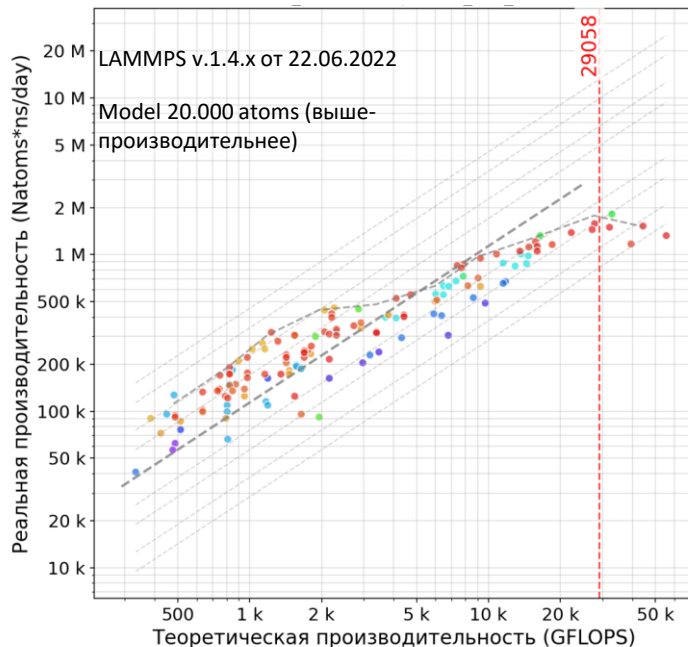
$$GFLOPS = \frac{FP32 \cdot C \cdot F}{1000}$$

- $FP32$ - количество операций с плавающей запятой за тактовый цикл (одинарная точность, 32 бита на число)
- C - количество ядер на процессоре
- F - базовая частота процессора, МГц

Производительность от GFLOPS

Зависимость реальной производительности бенчмарка (Natoms*ns/day) от теоретической производительности процессора (GFLOPS)

- Intel Skylake / Kaby Lake
- Intel Cascade Lake
- Intel Comet Lake
- Intel Ice Lake
- Intel Alder Lake / Raptor Lake
- Intel Sapphire Rapids
- Intel Emerald Rapids
- Intel Granite Rapids
- Intel Meteor Lake / Arrow Lake
- AMD Zen / Zen+
- AMD Zen 2
- AMD Zen 3
- AMD Zen 4
- AMD Zen 5



Рейтинг групп ЦПУ по производительности

group	mean	std	count	ci_lower	ci_upper
Intel Granite Rapids	3.5747	0.7850	2	2.4867	4.6626
Intel Emerald Rapids	2.0982	0.6186	2	1.2409	2.9555
AMD Zen 5	1.8988	1.2920	17	1.2846	2.5129
Intel Sapphire Rapids	1.6012	0.4863	12	1.3260	1.8764
AMD Zen 4	0.9798	0.7912	39	0.7315	1.2281
Intel Ice Lake	0.9236	0.4908	8	0.5835	1.2638
Intel Arrow Lake	0.8526	0.2386	2	0.5219	1.1833

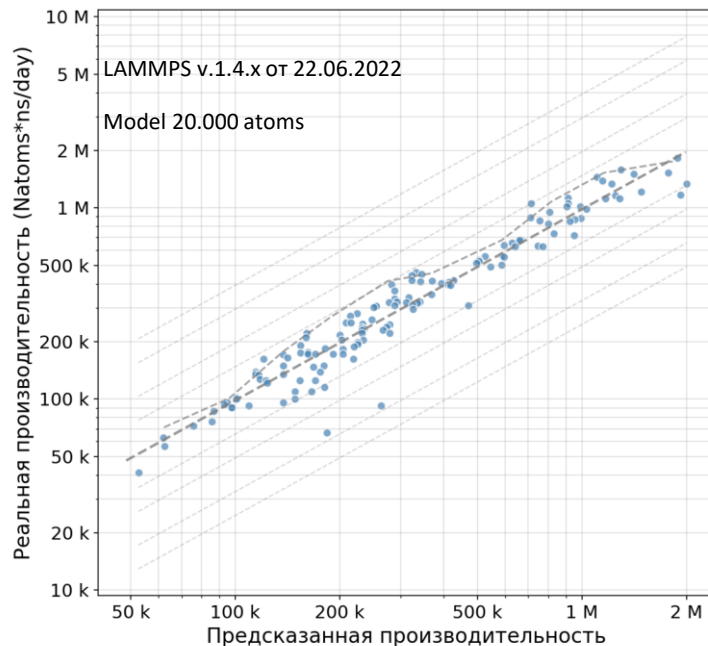
Рейтинг групп процессоров по производительности для LAMMPS v.1.4.x от
22.06.2022 Model 20.000 atoms

Степенная регрессия

Эмпирическая формула на основе множественной степенной регрессии в логарифмических координатах для LAMMPS v.1.4.x от 22.06.2022 Model 20.000 atoms:

$$\log_{10}(\text{Natoms} \cdot \text{ns/day}) = 2.619 + (-0.134) \times \log_{10}(\text{MemBW}) + 0.280 \times \log_{10}(\text{GFLOPS}) + 0.197 \times \log_{10}(\text{Cache L3}) + 0.287 \times \log_{10}(\text{Cache L2})$$

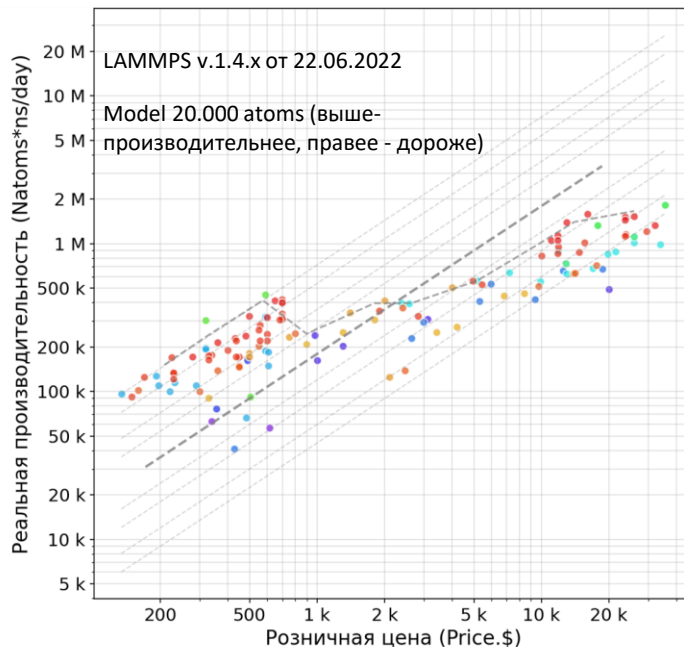
$$R^2 = 0.903, \text{MAPE} = 16.6\%$$



Производительность от цены

Зависимость реальной производительности бенчмарка (Natoms*ns/day) от розничной цены процессора (Price. \$)

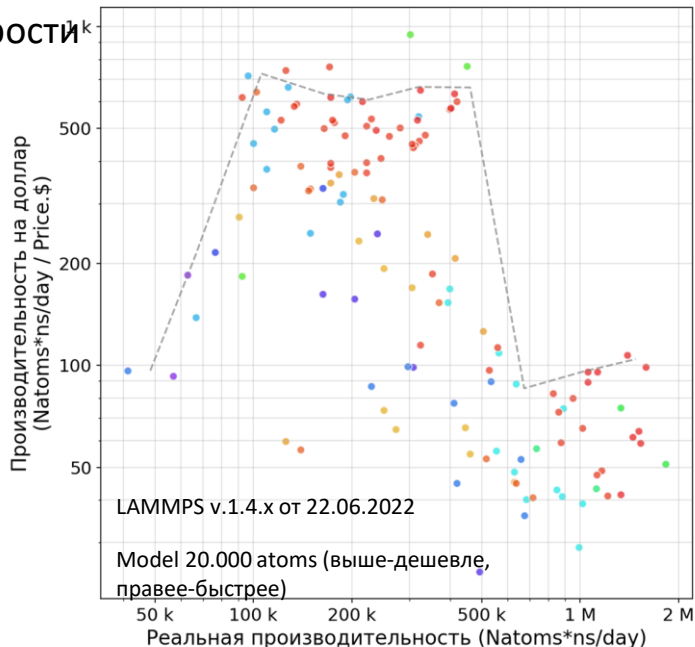
- | | |
|----------------------------------|------------------|
| ● Intel Skylake / Kaby Lake | ● AMD Zen / Zen+ |
| ● Intel Cascade Lake | ● AMD Zen 2 |
| ● Intel Comet Lake | ● AMD Zen 3 |
| ● Intel Ice Lake | ● AMD Zen 4 |
| ● Intel Alder Lake / Raptor Lake | ● AMD Zen 5 |
| ● Intel Sapphire Rapids | |
| ● Intel Emerald Rapids | |
| ● Intel Granite Rapids | |
| ● Intel Meteor Lake / Arrow Lake | |



Эффективность по стоимости и скорости^k вычислений

Зависимость реальной производительности на доллар бенчмарка ($\text{Natoms} \cdot \text{ns/day} / \text{Price. \$}$) от реальной производительности ($\text{Natoms} \cdot \text{ns/day}$)

- | | |
|----------------------------------|------------------|
| ● Intel Skylake / Kaby Lake | ● AMD Zen / Zen+ |
| ● Intel Cascade Lake | ● AMD Zen 2 |
| ● Intel Comet Lake | ● AMD Zen 3 |
| ● Intel Ice Lake | ● AMD Zen 4 |
| ● Intel Alder Lake / Raptor Lake | ● AMD Zen 5 |
| ● Intel Sapphire Rapids | |
| ● Intel Emerald Rapids | |
| ● Intel Granite Rapids | |
| ● Intel Meteor Lake / Arrow Lake | |



Сравнение Lammops, Gromacs, NAMD

Зависимость реальной производительности бенчмарка (Natoms*ns/day) от розничной цены процессора (Price. \$) в зависимости от пакета

- GROMACS: GROMACS_2025.4 ($R^2=0.903$, slope=0.88)
- LAMMPS: LAMMPS_22Jul2025_Update_2 ($R^2=0.877$, slope=0.62)
- NAMD: NAMD_3.0b6 ($R^2=0.673$, slope=0.65)

