VASP 应用运行优化

张文帅

wszhang@ustc.edu.cn

April 8, 2018

C	ontents		
1	动机		2
2	问题		2
3	计算对象		2
4	并行参数优化		2
	4.1 应用输入参数	· ·	$\frac{2}{3}$
5			4
9	9件追应任分析 5.1 测试硬件		4 4
	5.2 硬件适应性优化结论	· ·	5
6	应用编译优化		6
	3.1 编译选项与数学库		6
	3.2 编译优化结论		6
7	则试数据汇总		7
	7.1 E5V4 节点运行结果		7
	7.2 测试单节点核心数可被 NCORE 整除时是否更优		8
	7.3 E5V3 节点测试结果		9
	7.4 E3V5 节点运行结果	• •	10
	7.5 Fat144 节点运行结果	•••	11
	7.6 KNL 节点运行结果 (开启超线程)	• •	12
	7.7 多种编译选项与数学库测试结果....................................		14

1 动机

在校内乃至全球范围内,VASP 应用占用了很大一部分超算资源,所以对其计算速度与计算有效性的改进非常重要,可以 显著提升超算资源的使用效率与用户体验。本文将从应用并行参数方面来展示 VASP 的优化运行测试,希望不仅能给用户的 VASP 使用提供计算指导,还计划能以测试经验为基础,在 VASP 作业运行前,自动化的检测分析用户设定的各种系统与应用 的并行参数问题,在不影响计算结果的前提下,给出优化设置建议。本文档简明总结了一些早期的相对丰富的探索,先行提供给 用户参考,并期望得到足够反馈,以便进一步改进与完善,得到更加可靠有用的经验基础。

2 问题

首先,引用一段话来表明,在 VASP 计算中,具体问题具体测试的必要性:

"Geun Ho Gu,

University of Delaware

For the NPAR, I recommend doing a test to find out the most efficient number. e.g. run a same calculations multiple times with different NPAR. Also, do the same for LPLANE parameter as well. The manual instructs to use the number of node as NPAR as each parallel calculation can be run at each node minimizing communication overhead between each node. If not optimized, VASP takes extra time to comminucate between nodes, eating up your computation time. However, I have found that this instruction does not always hold up, and, really, this parameter is heavily dependent on the batch server/ node configuration. So, it is wise to do your own test to optimize this parameter (and other parameters as well). "

此外,测试发现,VASP 手册中的一些优化设置建议并非普遍适用。这是否意味着,在每次计算前,总是需要做很多次的测试才能找到最优参数呢?如果我们尽可能完整的测试参数,又将耗费很多测试时间,同时增加了人力与计算机的工作量。这使科研人员陷入两难之地,经常仅靠经验来猜测一个参数,因为速度对科研的结果没有影响,即便晚 50% 时间出结果,在科研上也是可以接受的。但这在资源利用效率上却是不可接受的,其带来了巨大的隐形的浪费。

事实上,已有的测试已经有迹象表明,不同并行进程数的计算具有一组通用的较合适的参数空间 [1],只是与 VASP 的标准 指导手册并不相同,当前的诸多测试报告(包括引文)并没有注意到这一点。这一点的重要之处在于,它可以显著的缩小待测参 数空间,使我们有机会通过不多的几次测试便可将作业优化到接近最优的参数点,使得对 VASP 计算进行自动化封装成为可能, 本文将努力为读者展示这种可行性,以便自动化的优化 VASP 的运行。

3 计算对象

本次测试的计算对象为六方晶胞结构的 ZrNCl 体系。选择这个体系源于其具有多个特征,如晶胞非立方,结构接近分层,同时轻重元素种类丰富,在只测一个材料的情况下,其具有较多的非平凡代表性,期望后期在用户的反馈下,可以对更多有代表性的体系做测试。本文中,为了全面的测试,我们不仅测试原胞与中等单胞下的多 KPOINTs 计算,也测试中等单胞与超胞下的Gamma 点计算。

我们取五个代表算例,分别为:

- 1. 原胞, 18 Atoms (Zr6N6Cl6), 272 irreducible k-points
- 2. 超胞 221, 71 Atoms (Zr24N24Cl23), 36 irreducible k-points
- 3. 超胞 221, 71 Atoms (Zr24N24Cl23), Gamma point
- 4. 超胞 441, 284 Atoms (Zr96N96Cl92), Gamma point
- 5. 超胞 661, 630 Atoms (Zr96N96Cl92), Gamma point

以下分别简记为 A18K272, A71K36, A71K1, A284K1, A630K1。前两者因为计算多 K-points, 计算程序选用标准的 vasp_std。 后三者我们只做 Gamma 点计算,因为在很大的超胞下,达到同样的计算精度,并不需要很多的 kpoints,此时,计算选用 VASP 特别为 Gamma 点计算优化的版本 vasp_gam。

4 并行参数优化

4.1 应用输入参数

计算参数设置:

SYSTEM = ZrNClISTART = 0ISMEAR = 0SIGMA = 0.4ENCUT=400 PREC=Normal NELM = 5NELMIN = 5NELMDL = 0ISYM = 1EDIFF = 1E-7LREAL = AutoLPLANE = .TRUE.KPAR = KPAR # 1 2 4 8 16 default: 1 NCORE = NCORE # 1 2 4 8 16 default: 1 $\#NPAR = \$NPAR \# 4 \ 6 \ 8 \ 16$ #NSIM = NSIM # default:4

本文主要讨论最重要的运行核心数与 KPAR、NPAR/NCORE 并行参数的关系, KPAR 指代有多少 KPOINT 被并行的处理, NCORE 指代一个 BAND 在多少 CPU 核中进行计算, NPAR 指代总计有多少个 BAND 并行处理, NCORE 与 NPAR 只能指定一个有效。一般而言, 假设总运行核心数为 32, KPAR=4, NCORE=4, 那么意味着, 有并行计算 4 个 KPOINTs, 每 个 KPOINT 使用 8 个核心, 同时每个 KPOINT 内部, 4 个 CPU 核共同做一个 BAND, 总计有 2 个 BAND 在并行。所以 KPOINT 并行属于外层的并行, BAND 并行属于较内层的并行。当人 VASP 内的并行过程还很多, 测试工作量也很大, 所以当前 VASP 应用的运行时并行效率优化还会有较大的提升空间。本测试仍有 NSIM、ECUT 等其他较重要的参数使用默认值或常用值,并未测试他们对结果的影响等等, 这将是今后需要继续完善之处。

4.2 应用参数优化结论

我们先给出一些经常在官方手册、VASP 程序屏幕输出及网络上出现的不合适的设置建议,他们可能因为时间的久远,考虑 硬件较旧,或者测试算例的不同,而导致在 TC4600 上很多不同类型的节点都不合适。本文的测试中,考虑了众多硬件条件,与 不同体系大小与 KPOINTs 下的多种代表算例,以此得出的结论,应该具备更普适的优势,同时将来会进一步的通过自动化系 统的运行更加确证或改进本文的结果。

常见的不适用的设置建议

- NPAR = $4 \sim \text{approx SQRT}(\text{ number of cores})$
 - 运行时屏幕经常输出: "For optimal performance we recommend to set NCORE = 4 approx SQRT(number of cores) NCORE specifies how many cores store one orbital (NPAR=cpu/NCORE). This setting can greatly improve the performance of VASP for DFT."
 - 此建议在 KPOINT 很多时特别不适用,其他条件下也不总是最优。
- NPAR = number of cores per compute node [2]
 - 测试发现,在本测试系统的2路节点中,这种设置不合理,经常不是最优。
- not recommend attempting run with KPAR>compute nodes, even though you may have more k-points than compute nodes. [3]

- 测试结果表明,单节点较多核心的 E5V4 节点,在 KPOINTs 较多时,最优的运行 KPAR 值远大于节点数。

优化设置结论

• NCORE 比 NPAR 具有更小的最优取值空间,可以更好的适应不同的并行核心数与节点硬件

- 在文献 [1] 中,测试了 NPAR 对运行时间的影响,对应的 NCORE 值被忽略。但是,当我们计算一下相应的 NCORE 后可知,最优 NPAR 的取值范围的上下边界值相差数十倍,而对应的最优 NCORE 空间的上下边界值基本保持数倍 以内,此结果与本文档测试结果基本符合:在不同节点类型(甚至包括构架很不同的 4 核心 E3V5 节点),不同总并行 核心数,与不同的算例下,NCORE = 8 下的运行时间经常处于最优值,且基本处于 [4,16] 空间范围内。
- VASP 默认并行参数(KPAR=1 & NCORE=1)非常低效,最优的运行参数可大大提高并行扩展性与运行速度
 - 在 E5V4-A18K272、E5V4-A71K36 例子中,默认设置下的并行极限为 24、64 核心,但是经过优化并行参数后,可以 轻松扩展到 256、128 核心,并仍保有进一步扩展空间,最大运行速度可以提高 10 倍。特别得,在 630 个原子的超大 晶胞算例 E5V4-A630K1 中,经参数优化后,不仅并行核心数从 256 提高到 384,尤其运行时间从 354s 降低到 183s。
- 由 K 点数 NKpoints 与原子数 Natoms 两者,可大致估算最佳运行并行核心数 [3]
 - 当仅作单 KPOINT 计算时,并行核心数可扩展到大约 Natoms/2
 - 当进行多 KPOINTs 计算时,并行可进一步扩展 8-16 倍。
 - 由于初始输入的 KPOINTs 可约,所以准确的 NKpoints 应该以考虑对称后的约化值为准,目前在 KPOINTs 较大时, 暂没有考虑具体数值对并行扩展性的精确影响。
- 当单节点核心数可被 NCORE 整除时,能够在部分多节点计算算例中增加效率
 - 单节点核心数可被 NCORE 整除时,可使 BAND 并行通信限制在节点内,理论上总会带来好处,否则。
 - 实践上, 在单 KPOINT 多节点算例中, BAND 通信影响较小, 原因可解释为多节点的单 KPOINT 计算本身的通讯 时间很长, 抑制了"可整除"带来的 BAND 并行通讯降低的好处。
 - 在多 KPOINT 多节点算例中,当设置 KPAR 较大时,单 KPOINT 在 1-2 个节点内运行,总体通信较小,此时 BAND 通信占比更大,故而影响更加突出,"可整除"带来的 BAND 并行通讯降低,会显著降低运行时间。如在图7.2 A18K272 算例中,当 KPAR 从 1 增大到 4 时,NCORE 为 8/7 时的运行时间从相差无几的 130/124,变为 40/28,具有显著的差异。更进一步,在图7.2中,详细展示了对于 A18K272 体系,两节点 56 核心,KPAR 设为 1,NCORE 分别取 8 与 7 时的性能分析图,可知 NCORE 为 7 时相比 NCORE 为 8 时,通信占比从 79% 降到 72%,在纯计算时间保持约 50s 不变的情况下,总的运行时间从 254s 降低到 182s。

5 硬件适应性分析

5.1 测试硬件

本次测试的硬件种类丰富,包括四种 Intel Xeon CPU 节点 (如新旧普通节点: E5V3/E5V4,高主频节点: E3V5,胖节点: Fat144),以及两种模式下的 Xeon Phi KNL 节点 (本文将默认设置的 All2All Cluster mode & Flat Memory Mode 简称为 AF Mode,将 Quadrant Cluster mode & Cache Memory Mode 简称为 QC Mode)。本文不加入对 GPU 平台测试结果的分析,因为我们的测试结果并没有提供比已有的报告更新的见解,已有的 GPU 测试报告表明,目前 VASP & GPU 无法成为有竞争力的计算平台 [4]。

节点类别	CPU	内存 (DDR4)	硬盘	计算网络
E5V4	2*E5-2680 v4(2.4GHz-3.3GHz, 35MB L3 Cache), 共 28 核	128GB 2400MHz	240GB	100Gbps OPA
E5V3	2*E5-2680 v3(2.5GHz-3.3GHz, 30MB L3 Cache), 共 24 核	64GB 2133MHz	300GB	56 Gbps FDR
E3V5	1*E3-1240 v5(3.5GHz-3.9GHz,8MB Cache), 共4核	32 GB 2400 MHz	$500 \mathrm{GB}$	100 Gbps EDR
Fat144	8*E7-8860 v4(2.2GHz-3.2GHz,45MB L3 Cache), 共144 核	$1 \mathrm{TB} 2400 \mathrm{MHz}$	480GB	100 Gbps OPA
KNL-AF	1*Xeon Phi 7210(64 核, 1.3GHz-1.5GHz, 16 GB MCDRAM,	96GB 2133MHz	$160 \mathrm{GB}$	100 Gbps OPA
	AF Mode)			
KNL-QC	1*Xeon Phi 7210(64 核, 1.3GHz-1.5GHz, 16 GB MCDRAM,	96GB 2133MHz	$160 \mathrm{GB}$	100Gbps OPA
	QC Mode)			

Table 1: 测试系统硬件列表

5.2 硬件适应性优化结论

- 在科大 TC4600 集群的配置下, E5V4 节点均比 E5V3 具有明显的速度提升与更好的并行扩展性,速度提高达 10%-30%
 - E5V4 节点相比 E5V3 主频稍低, 睿频相同, 核心数较多, Cache/核心数之比相同, 配合的 OPA 通讯设备较快。测试数据表明, E5V4 节点的通讯优势掩盖了主频劣势, 总体性能更好。
 - 在较大体系 A284K1 下, E5V4 节点比 E5V3 的优势在最佳应用并行参数下更明显。原因考虑为:在大体系与最好的 并行参数下,通信占比被优化达到极致,进而通讯性能的微小差异将给速度带来更加明显的影响。
- E3V5 节点相比 E5V4 节点,在通信优化较好的并行参数下,具有明显快的计算速度,但在通信优化不佳的并行参数下, 速度提高不显著甚至会更低
 - E3V5 相比 E5V4 节点具有显著更高的主频,对串行程序会具有明显的优势。对于 VASP,我们需要考虑通信差异,虽然两种节点都配置了相似的 100Gbps 通信网,但是 E3V5 单节点核心数较少,故而跨节点通信的比例会高很多。所以,我们更加需要选择优化的并行参数,以使 VASP 在 E3V5 上的运行更具优势。例如,A18K272 测试表明,在128 核心下的最佳并行参数下,E3V5 运行时间为 24s,比 E5V4 的 31s 运行时间,性能上有较大改进;但是在 KPAR x NCORE 设置为 1 x 16 时,在所有运行核心数下,E3V5 的运行时间都要明显长于 E5V4 的运行时间。
- E3V5 节点核心数少,在多原子体系需要更多并行节点,会在较低的核心数下遭遇通讯瓶颈,不适合运行大规模的 VASP 计算
 - 如 A71K36 算例, E3V5 在 96 核心时具有最佳的速度, 更多核心反而带来速度的降低, 而 E5V4 则在 128 核心区间 依然有很好的并行效率。
 - 对 Gamma Only 计算,如 A284K1,在 128 核心时,E3V5 虽然运行时间更短一些,对比 E5V4 分别为 36s/44s,但 是两节点类型下,128 核心下的计算时间相比 96 核心时的降低幅度分别为 0.86/0.77,表现出 E5V3 节点下的运行时 间降低更慢,显示 E5V4 下的并行扩展效率更好一些。
- Fat144 节点具有 8 路 18 核心 CPU,内存较大,在运行小并行规模(32~48 核心以内)的大中小体系时有明显优势,但是在多并行核心时,反而没有 E5V4 队列的并行扩展性好,建议仅运行特殊需要大内存的 VASP 作业。
 - 在图(7.5)中,可以发现,对于多核心(64 核心以上时),Fat144下的 VASP 并行扩展性比 E5V4 较差,反应此时多路 CPU 间的内存共享通信出现瓶颈,相关的详细理解应该更仔细的考虑进程在 CPU 核心间的分配与通讯问题,由于篇幅时间关系,暂留作后文研究。
- KNL 节点具有 64 核心,每核心有 4 个矢量加速核,在开启超线程下,我们发现 QC 模式相比默认的 AF 模式具有全面更优的运行效率,同时在每个 KNL 节点运行超过 64 核心的单个 VASP 作业并不会带来更好的效果,在 AF 模式效果更差。
 - 在图(7.6)中, KNL3下的 A284K1 算例,相比 KNL25下的 A284K1 算例,在 128 并行进程下,前者的运行时间为 后者的 2 倍还多,说明 AF 模式下,不适合在单节点运行超过 64 并行进程的单 VASP 作业。
 - 比较
- QC 模式下的单 KNL 节点,对比 E5V4 单节点,都取优化的运行参数时:在小体系 A18K272 下,运行时间比约为 120 比 90, E5V4 具有单节点计算优势。但是在大体系 A284K1 下,运行时间比约为 130 比 140,稍具有优势。
 - 需要提及,我们另测试了 Intel 提供的一个 56 个原子的中等体系的算例,结果单机 E5V4 与单机 KNL 下的运行时间 比约为 3637: 1997, KNL 单机的计算优势很大,这说明 KNL 的计算效率比较依赖于计算体系。
 - 如果结合 KNL 单机的价格较低,则现有数据表明,单机 KNL 运行大中体系的 VASP 作业具有较高性价比。
- 比较 KNL 与 E5V4 节点的多节点并行最佳计算时间, KNL 节点的并行扩展性较低。
 - 对比图(7.7)与图(7.1),在 A18K272 体系,KNL 节点可以有效扩展到 96 核心,计算时间约为 123s,E5V4 节点可以有效扩展到 256 核心,计算时间约为 22s;在 A284K1 体系,KNL 节点可以有效扩展到 48 核心,计算时间约为 133s,在 E5V4 节点可以有效扩展到 96 核心,计算时间约为 52s。
 - 此结果表明, KNL 在最佳的计算速度上大大受限于并行扩展度, 在需要快速出结果的计算上具有劣势。

6 应用编译优化

6.1 编译选项与数学库

本部分测试中,可调节的编译参数为:

- Intel MKL: Sequential/OpenMP
- ScaLAPACK: Enable / Disable
- FFT implementation: Intel wrapper / Juergen Furtmueller (JF)
- DCACHE_SIZE: 4000 / 0

默认情况下(前面测试中使用的),我们的编译参数为 V8: Intel MKL Sequential & Enable ScaLAPACK & Intel FFT & DCACHE_SIZE = 4000

本文另外测试 3 种其他的编译版本, 分别为:

V12 : JF FFT

V14 : Disable ScaLAPACK

 $V16 : DCACHE_SIZE = 0$

此外,在 V16 编译版本中,因为官方的介绍"CACHE_SIZE=0 has a special meaning. It performs the FFT's in x and y direction plane by plane",所以我们额外调整了结构的基矢方向,将 abc 调整为 cba,以测试改变 z direction 的影响。

6.2 编译优化结论

- 对比 V8 与 V12, Intel FFT 相比 JF FFT 显著提升了 VASP 的运行速度,在小体系与大体系下提升可达 2/5, 1/5, FFT 效率的提升也使得 VASP 整体并行扩展性更好
- 对比 V8 与 V14, 开启 ScaLapack 可以显著提升多节点下(NP>24/28)的运行时间与并行扩展效率
- 对比 V8 与 V16, 讲 VASP 官方文档中建议优化的 DCACHE_SIZE 参数设为 0 后, V16 版本并没有迹象影响运行速度与并行扩展效率,当改变结构的 Z 轴方向后,仍然没有明显的迹象。

7 测试数据汇总

7.1 E5V4 节点运行结果

	22	- 14		1.40	100	170	107	100	101		1.5.5	110				1.4.4					1.40					1	400
16	- 22	5 14	1 135	148	193	1/9	127	122	131	nan	155	116	117	nan	nan	144	115	nan	nan	nan	142	nan	nan	nan	nan		- 350
24	- 209	9 15	3 121	118	nan	169	121	101	nan	nan	130	99	nan	nan	nan	114	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan		- 300
32	- 20	7 15	5 106	106	130	156	116	93	90	115	120	95	84	85	nan	103	85	80	nan	nan	97	85	nan	nan	nan		500
48	- 20	7 14	0 99	95	107	120	95	72	69	nan	98	72	61	nan	nan	78	61	nan	nan	nan	71	nan	nan	nan	nan		^{- 250} (ກ) ອ
d ∠ 64	- 320	0 14	1 95	83	99	114	87	61	60	73	85	63	51	50	62	66	51	47	48	nan	58	48	46	nan	nan		- 200 - all <u>Li</u>
96	- 289	9 17	2 110	90	100	120	80	62	58	64	75	59	51	50	nan	60	44	40	nan	nan	48	39	nan	nan	nan		- ₁₅₀ ≥
128	- 53:	3 28	6 121	89	89	196	82	58	49	59	66	50	37	38	45	51	39	33	33	40	41	33	36	31	nan		- 100
192	- 148	2 28	2 180	107	98	164	94	70	51	56	68	47	35	45	38	44	37	33	32	nan	43	31	29	nan	nan		- 50
256	- 342	9 57	9 322	148	105	305	170	71	56	55	120	49	36	30	36	54	33	26	24	27	33	25	22	22	42		0
E5V4 A18K2	1x: 72	1 1x	2 1x4	1x8	1x16	5 2x1	2x2	2x4	2x8	2x16	4x1	4x2 KPAF	4x4 R x NC	4x8 ORE	4x16	8x1	8x2	8x4	8x8	8x16	16x1	16x2	16x4	16x8	16x10	5	
10	404	0 42	2 200	260	277	415	402	271	25.2		204	272	25.2			444	426				461					1	400
16	- 40	9 43. c 20	5 590	220	577	415	405	221	332	nan	204	220	332	nan	nan	444	430	nan	nan	nan	401	nan	nan	nan	nan		- 350
24	- 38	0 38	8 335	328	nan	375	346	331	nan	nan	332	338	nan	nan	nan	363	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan		- 300
32	- 364	4 36	3 342	303	295	351	366	320	287	286	344	319	280	265	nan	333	324	288	nan	nan	350	3/5	nan	nan	nan		- 250 ල පූ
dy 48	- 31	7 27	0 242	211	. 211	247	245	206	200	nan	232	215	198	nan	nan	227	228	nan	nan	nan	262	nan	nan	nan	nan		- 200 J
64	- 294	4 22	3 199	186	5 177	201	198	188	167	160	186	194	168	154	155	199	186	164	159	nan	213	206	183	nan	nan		- 150 ≤
96	- 30:	1 21	5 167	151	. 140	173	150	137	119	121	140	134	116	111	nan	139	129	119	nan	nan	145	145	nan	nan	nan		- 50
128	- 36	7 21	5 146	127	123	158	125	114	105	100	109	109	102	92	91	118	114	104	94	95	128	120	107	107	nan		0
E5V4 A71K3	1x: 6	1 1x	2 1x4	1x8	1x16	5 2x1	2x2	2x4	2x8	2x16	4x1	4x2 KPAI	4x4 R x NC	4x8 ORE	4x16	8x1	8x2	8x4	8x8	8x16	16x1	16x2	16x4	16x8	16x1	6	
																400			5.60	717	770	0.54				- 100	00
									16	- 177	225	195	187	18	5	250		64	509	/1/	112	964	898	88.	2		
	Г						20.0)	24	- 150	188	156	153	nai	י	350		96	- 596	534	500	575	514	588	3	- 800)
	16 -	11	10	9	8	10	- 17.5	5	32	- 130	159	162	142	13	5	300		128	479	404	365	399	512	495	5		
	24 -	10	9	8	8	nan	- 15.0)	48	- 94	104	100	87	93	-	²⁵⁰ آن		192	379	299	275	268	309	303	3	- 600	e (s)
	32 -	10	9	9	8	8	- 12.5	e (s)	₫ 64	- 76	83	79	83	75	-	200 [@] L	NP	256	345	251	221	214	230	312	2		II Tim
NP	48 -	8	7	7	8	7	- 10.0	II Time	96	- 62	63	55	57	52	-	150 ×		384	353	223	189	183	183	233	3	- 400	
	64 -	8	7	6	6	7	- 7.5	Wa	128	- 56	53	45	44	50		100		512	436	258	212	196	191	228	3		
	96 -	8	6	7	5	5	- 5.0		192	- 59	46	38	41	38		50		768	706	329	229	210	219	233	3	- 200)
	128 -	10	7	6	5	5	- 2.5		256	- 82	58	43	39	41		50		1024	1213	435	277	241	244	262	2		
E5'	ل V4 ۱۲۷۱	1x1	1x2	1x4	1x8 :	Lx16	0.0		E5V4	1x1	1x2	1x4	1x8	1×1	6	0	E5	5V4	1x1	1x2	1x4	1x8	1x10	5 1x3	2	- 0	
AI	TVT		крак		JKE				MZ04N.	L	KP/	чн х М	CORE				A	JUNI		1			NE				

Figure 7.1: E5V4 节点下, 5 种结构的测试结果(图片坐下角为运行平台与算例类型)



Figure 7.2: E5V4 节点下,测试核心数 28 可被 NCORE 整除是否会更加有益。除前面 3 张常规测试外,后面两张展示了,对于 A18K272 体系,在两节点 56 核心, KPAR 设为 1, NCORE 分别取 8 与 7 时的性能分析图。

																										400
16	237	157	146	159	204	191	139	128	139	nan	160	121	120	nan	nan	147	118	nan	nan	nan	143	nan	nan	nan	nan	- 350
24	248	202	161	154	nan	196	144	124	nan	nan	148	116	nan	nan	nan	129	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan	- 300
32	234	177	135	138	174	161	121	104	103	135	126	97	93	97	nan	106	85	82	nan	nan	100	84	nan	nan	nan	- 250 ල
₽ 48	251	197	165	140	177	131	117	94	83	nan	109	79	73	nan	nan	82	64	nan	nan	nan	73	nan	nan	nan	nan	- 200 - <u>T</u> ime
64	397	203	156	149	182	137	107	92	79	98	92	72	60	59	81	70	55	51	55	nan	60	50	48	nan	nan	- 150 🗡
96	350	239	188	183	219	153	114	99	87	106	74	66	57	52	nan	61	47	44	nan	nan	47	39	nan	nan	nan	- 100
128	657	404	206	200	241	237	111	102	99	109	83	75	52	53	63	54	45	39	39	54	42	35	40	34	nan	- 50
E5V3	1x1	1x2	1x4	1x8	1x16	2x1	2x2	2x4	2x8	2x16	4x1	4x2	4x4	4x8	4x16	8x1	8x2	8x4	8x8	8x16	16x1	16x2	16x4	16x8	16x16	- 0



Figure 7.3: E5V3 节点下的测试结果(图片坐下角注明了运行平台与算例类型)

																											400
16	- 240	172	143	150	204	190	142	125	135	nan	158	122	112	nan	nan	136	110	nan	nan	nan	126	nan	nan	nan	nan		350
24	- 200	157	119	119	nan	154	112	93	nan	nan	121	92	nan	nan	nan	107	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan	-	300
32	- 187	139	102	102	132	131	91	76	80	108	100	75	67	77	nan	84	66	61	nan	nan	74	60	nan	nan	nan	-	250 ග
dy 48	- 183	130	100	95	111	106	83	66	64	nan	82	66	50	nan	nan	65	51	nan	nan	nan	55	nan	nan	nan	nan	┢	Time Time
64	- 291	138	99	84	105	100	76	57	58	73	68	51	43	46	60	56	47	38	41	nan	47	37	35	nan	nan	┢	150 ×
96	- 239	164	117	102	116	100	72	56	55	63	59	52	42	38	nan	48	47	35	nan	nan	38	30	nan	nan	nan	-	100
128	- 415	266	125	105	110	157	82	58	52	61	64	46	44	37	44	40	44	33	28	36	34	26	24	26	nan	-	50
E3V5	1x1	1x2	1x4	1x8	1x16	2x1	2x2	2x4	2x8	2x16	4x1	4x2	4x4	4x8	4x16	8x1	8x2	8x4	8x8	8x16	16x1	16x2	16x4	16x8	16x16		0
A18K2	2											KPA	R x NC	ORE													
																											400
16	- 440	447	398	386	415	416	397	361	349	nan	369	375	334	nan	nan	376	375	nan	nan	nan	431	nan	nan	nan	nan		350
24	- 327	318	276	278	nan	287	269	264	nan	nan	260	262	nan	nan	nan	272	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan		550
																											300
32	- 271	260	249	237	249	229	234	211	209	221	219	206	193	185	nan	212	212	194	nan	nan	236	239	nan	nan	nan		250 (s
₫ 48	239	202	182	171	192	174	167	147	151	nan	154	142	143	nan	nan	156	153	nan	nan	nan	172	nan	nan	nan	nan		200 ^m H
64	- 234	179	162	172	173	147	141	137	133	142	128	128	116	117	135	127	122	112	110	nan	135	135	125	nan	nan		150 ×
		100	140	1.45	146	100	100	100			100			05				00			07	100					100
96	- 231	183	140	143	146	132	120	102	99	11/	106	92	82	85	nan	93	94	83	nan	nan	97	103	nan	nan	nan		50
128	- 395	310	247	272	301	233	195	191	210	213	161	164	162	161	182	136	135	121	135	148	121	107	110	102	nan		50
E3V5 A71K30	1x1	1x2	1x4	1x8	1x16	2x1	2x2	2x4	2x8	2x16	4x1	4x2 KPA	4x4 R x NC	4x8 ORE	4x16	8x1	8x2	8x4	8x8	8x16	16x1	16x2	16x4	16x8	16x16		0
									_			20.0	C								4	00					
					16 -	11	10	9	1	0	9		_	1	.6 - 1	76	224	194	189	188		50					
												- 17.5	ō	-		10	140	122	120			50					
					24 -	8	8	6	ç) n	an	- 15.0)	2	24 - 1	10 .	140	122	128	nan	- 3	00					



Figure 7.4: E3V5 节点下的测试结果(图片坐下角注明了运行平台与算例类型)

																										r 400
16 -	186	139	152	171	220	139	114	122	142	nan	125	100	108	nan	nan	116	91	nan	nan	nan	119	nan	nan	nan	nan	- 350
24 -	168	141	137	150	nan	125	99	100	nan	nan	100	80	nan	nan	nan	88	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan	- 300
32 -	171	122	113	130	169	110	83	87	98	138	84	70	73	84	nan	81	64	67	nan	nan	77	64	nan	nan	nan	- 250 ල
dy 48 -	197	121	112	117	145	101	77	77	81	nan	77	58	59	nan	nan	66	49	nan	nan	nan	60	nan	nan	nan	nan	- 200 -
64 -	339	140	110	109	134	113	76	70	74	97	78	55	52	61	81	62	51	47	54	nan	58	46	47	nan	nan	- 150 🖉
96 -	309	187	122	118	130	133	85	69	70	83	79	61	51	52	nan	66	47	42	nan	nan	52	41	nan	nan	nan	- 100
128 -	589	336	152	122	131	207	105	79	67	81	84	68	49	51	59	65	51	44	41	52	53	45	40	42	nan	- 50
Fat144	1x1	1x2	1x4	1x8	1x16	2x1	2x2	2x4	2x8	2x16	4x1	4x2	4x4	4x8	4x10	5 8x1	8x2	8x4	8x8	8x16	16x1	16x2	16x4	16x8	16x16	L 0
A18K272	2											KPA	R x NG	CORE												
16 -	317	282	279	285	311	306	286	285	286	nan	351	324	285	nan	nan	322	317	nan	nan	nan	378	nan	nan	nan	nan	- 400
24 -	263	241	220	226	nan	234	220	215	nan	nan	217	222	nan	nan	nan	236	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan	- 300
32 -	233	224	215	200	223	207	210	190	192	215	210	203	191	190	nan	242	232	203	nan	nan	234	235	nan	nan	nan	- 250 @
⊈ 48 -	228	188	163	158	176	165	160	140	145	nan	152	142	137	nan	nan	151	156	nan	nan	nan	174	nan	nan	nan	nan	- 200 ()
Z ···	241	184	165	152	160	157	157	145	137	152	149	154	136	130	143	157	153	141	136	nan	164	166	155	nan	nan	
04	202	214	162	144	142	161	142	1 2 1	114	102	107	100	111	106		127	100	114	100	nan	121	126	100	nan	nan	- 100
90 -	290	214	105	144	145	101	145	151	114	122	127	120	111	100	nan	152	121	114	nan	nan	131	150	nan	nan	nan	- 50
128 -	386	248	1/8	153	146	1//	143	133	122	116	129	131	128	114	108	135	141	122	111	110	158	143	129	120	nan	
Fat144 A71K36	1x1	1x2	1x4	1x8	1x16	2x1	2x2	2x4	2x8	2x16	4x1	4x2 KPA	4x4 R x NC	4x8 CORE	4x10	5 8x1	8x2	8x4	8x8	8x16	16x1	16x2	16x4	16x8	16x16	Ū
												- 20 (n		_							100				
					16 -	10	7	7	g)	8	20.	5	:	16 -	128	158	147	144	148						
					24 -	8	8	7	7	n	an	- 17.	5	Ĩ	24 -	92	107	101	105	nan		50				
					21							- 15.0	0								- 3	300				
					32 -	9	8	8	7		8	- 12.	5 (s)	3	32 -	85	88	101	94	96	- 2	250 (s				
				NP	48 -	11	9	8	8	:	9	- 10.	Time	AN 4	48 -	62	66	71	66	71	- 2					
					64 -	11	12	9	ç	1	.0	- 7.5	Wall	(64 -	65	68	65	74	73	- 1					

Figure 7.5: Fat144 节点下的测试结果 (图片坐下角注明了运行平台与算例类型)

5.0

2.5

0.0

96 -

128 -

Fat144

A284K1

1x1

1x2

KPAR x NCORE

1x2 1x4 1x8

KPAR x NCORE

96 -

128 -

Fat144 A71K1

1x1

1x16

1x4 1x8

1x16

																											1000	<u> </u>
1	6 - 8	04	678	683	754	964	628	557	561	642	nan	555	482	530	nan	nan	524	448	nan	nan	nan	502	nan	nan	nan	nan	· 1000)
2	4 - 7:	13	622	578	609	nan	522	450	438	nan	nan	451	376	nan	nan	nan	381	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan	- 800	
3	2 - 6	53	562	519	535	627	452	385	379	407	511	354	324	324	351	nan	319	290	290	nan	nan	297	285	nan	nan	nan	- 600	(s)
d 4	B - 7	68	593	544	536	605	436	408	367	386	nan	355	320	303	nan	nan	305	285	nan	nan	nan	272	nan	nan	nan	nan	000	Time
6	4 - 12	266	675	580	559	626	463	426	377	388	447	339	336	312	316	381	311	307	292	294	nan	281	292	278	nan	nan	- 400	Wall
9	6 - 14	478	1087	814	739	783	704	590	529	505	552	449	496	415	405	nan	425	427	369	nan	nan	360	394	nan	nan	nan	- 200	
12	8 - 31	100	2160	1088	892	871	1232	669	562	518	600	495	491	432	418	482	412	450	396	400	450	404	422	381	378	nan		
KNL3	1:	×1	1x2	1x4	1x8	1x16	2x1	2x2	2x4	2x8	2x16	4x1	4x2	4x4	4x8	4x16	8x1	8x2	8x4	8x8	8x16	16x1	16x2	16x4	16x8	16x16	· 0	
Alon	212												KFA		JORE													-
1	6 - 8	02	678	681	756	964	627	560	560	638	nan	552	499	501	nan	nan	526	453	nan	nan	nan	499	nan	nan	nan	nan	· 1000)
2	4 - 7:	15	625	588	610	nan	520	448	438	nan	nan	429	375	nan	nan	nan	379	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan	nan	- 800	
3	2 - 6	61	562	516	535	629	447	383	379	412	514	353	323	319	352	nan	313	289	291	nan	nan	308	283	nan	nan	nan	- 600	(s)
dy 4	B - 7	64	587	545	535	606	434	405	368	384	nan	354	318	302	nan	nan	298	285	nan	nan	nan	275	nan	nan	nan	nan	000	Time (
6	4 - 12	293	673	580	557	626	463	424	377	388	447	347	334	315	320	382	307	307	290	291	nan	281	293	279	nan	nan	- 400	Wall
9	6 - 9	91	732	574	550	569	460	369	343	331	367	280	275	247	252	nan	248	231	216	nan	nan	217	211	nan	nan	nan	- 200	
12	8 - 17	745	1148	597	527	551	679	367	320	304	338	261	240	217	220	246	200	193	182	183	216	185	181	169	173	nan		
KNL2	4 1:	, x1	1x2	1x4	1x8	1x16	2x1	2x2	2x4	2x8	2x16	4x1	4x2	4x4	4x8	4x16	8x1	8x2	8x4	8x8	8x16	16x1	16x2	16x4	16x8	 16x16	- 0	
A18K	272												KPA	R x NC	ORE													
													40	0									400					
						16	309	381	. 37	4 3	72 3	392		_		16 - 3	322	380	372	372	392	2						
													- 35	0									350					
						24	261	323	3 30	5 3	13 r	nan	- 30	0		24 -	260	323	305	314	nar		300					
						32	249	306	5 32	7 3	07 3	806	- 25	o (s		32 -	248	305	327	305	304		250 7	0				
					0	40	257	202	21	۰ ^م	0.2 5	0.1	20	, me (0	10	257	202	21.0	202	201		200	ב				
					Z	48	257	502	2 31	0 Z	92 3	501	- 20	U∏	ž	48 - 4	237	502	210	292	501		200 ii ;	=				
						64	288	325	5 33	8 3	59 3	338	- 15	0 🎽		64 - 3	290	324	336	359	340		150 \$	000				
						96	436	383	37	4 3	92 3	876	- 10	0		96 - 2	235	239	236	242	229	, -	100					
						128	528	477	7 43	24	36 4	166	- 50		1	28 - 2	226	216	201	198	216	5	50					
								_	、 _ '				L ₀										0					
					K A	NL3 284K1	1x1	1x2 KP	2 1x AR x	4 1 NCOP	x8 1 RE	x16			KNL A284	24 4K1	1X1	1x2 KPAF	1x4 R x NC	1x8 ORE	1x1	Ь						

Figure 7.6: KNL 节点 AF Mode 下的测试结果(图片坐下角注明了运行平台与算例类型, KNL3 表示作业分配到 KNL3 单节点 上运行, 每节点最多 128 进程。KNL24 表示作业分配到 KNL2 与 KNL4 两个节点上, 每节点最多 64 进程)



Figure 7.7: KNL 节点 QC Mode 下的测试结果(图片坐下角注明了运行平台与算例类型, KNL6 与 KNL78 含义同上, KNL678 表示作业分配到 KNL6、KNL7、KNL8 三个节点上, 每节点最多 60 进程)

7.7 多种编译选项与数学库测试结果

本测试部分,时间仍取前五个电子步的运行时间总和,与之前测试不同之处在于,应用输入参数 NELMDL 取为默认值(即前五步中,以固定的初始电子密度构造新的哈密顿量),因此与五步之后的电子步运行稍有差异,因为本项测试仅比较不同编译参数下的相对速度,不研究最佳运行速度大小,所以影响不大。



Figure 7.8: 多种编译选项与数学库测试结果

								_																			-	- 400
	16 -	226	139	136	147	194	180	128	120	131	nan	155	116	116	nan	nan	145	115	nan	nan	nan	141	nan	nan	nan	nan		- 350
	24 -	210	154	120	116	nan	171	122	100	nan	nan	130	99	nan	nan	nan	113	nan		- 300								
	32 -	212	156	105	110	131	161	118	91	90	112	118	91	80	84	nan	100	81	78	nan	nan	94	81	nan	nan	nan		- 250 ଜ
ď	48 -	212	143	101	97	107	122	96	73	69	nan	97	73	60	nan	nan	75	60	nan	nan	nan	67	nan	nan	nan	nan		- 200 -
2	64 -	323	142	97	83	102	113	86	59	59	74	85	62	51	51	64	67	53	47	48	nan	58	48	46	nan	nan		150
	04	200	172	104	00	102	115	70	50	55	67	70	57		41		57	42			nan	45	70		nan	nan		- 100
	96 -	288	172	104	88	98	115	79	58	50	62	12	57	44	41	nan	50	42	37	nan	nan	45	37	nan	nan	nan		- 50
1	.28 -	528	281	118	87	86	173	79	56	47	57	63	49	35	36	42	49	37	30	31	38	38	32	29	30	nan		- 0
V8 A18	K272	1x1	1x2	1x4	1x8	1x16	2x1	2x2	2x4	2x8	2x16	4x1	4x2 KPAI	4x4 R x NC	4x8 ORE	4x16	8x1	8x2	8x4	8x8	8x16	16x1	16x2	16x4	16x8	16x16		
		071	100	107	204	262	212	100	175	100		100	170	170			101	1.00				100						- 400
	16 -	271	190	187	204	263	213	182	175	192	nan	190	170	172	nan	nan	181	169	nan	nan	nan	182	nan	nan	nan	nan		- 350
	24 -	227	187	156	154	nan	195	155	136	nan	nan	153	134	nan	nan	nan	137	nan		- 300								
	32 -	302	268	211	241	218	211	205	163	154	229	152	170	130	166	nan	141	159	132	nan	nan	162	139	nan	nan	nan		- 250 (ŋ
NP	48 -	298	210	223	148	193	171	153	187	88	nan	108	145	109	nan	nan	127	78	nan	nan	nan	110	nan	nan	nan	nan		- 200 Ĕ
	64 -	426	190	211	135	175	154	143	92	150	91	137	101	64	120	102	72	107	87	64	nan	90	101	64	nan	nan		150 🎽
	96 -	331	247	154	147	173	146	125	120	66	135	103	66	94	99	nan	68	98	71	nan	nan	50	61	nan	nan	nan		100
1	.28 -	604	380	184	152	134	226	91	82	130	66	75	113	64	44	53	60	68	67	48	51	67	64	52	37	nan		- 50
V12	l	1x1	1x2	1x4	1x8	1x16	2x1	2x2	2x4	2x8	2x16	4x1	4x2	4x4	4x8	4x16	8x1	8x2	8x4	8x8	8x16	16x1	16x2	16x4	16x8	16x16		- 0
A18k	<272												KPA	R x NC	ORE													
	16 -	234	145	135	151	195	180	133	124	133	nan	156	122	120	nan	nan	144	123	nan	nan	nan	146	nan	nan	nan	nan		- 400
	24 -	208	158	129	116	nan	167	123	106	nan	nan	127	100	nan	nan	nan	114	nan		- 350								
	32 -	439	384	334	318	351	313	273	252	228	288	228	183	186	190	nan	177	180	166	nan	nan	197	169	nan	nan	nan		- 300
0	40	405	207	274	242	275	225	224	167	170	n an	210	170	121	nan		164	125				120						ی 250 - عمر قل
z	40 -	405	507	2/4	242	275	233	234	107	170	nan	210	170	151	nan	nan	104	155	nan	nan	nan	129	nan	nan	nan	nan		
	64 -	561	273	231	225	260	209	216	196	186	160	161	136	137	136	143	133	104	108	112	nan	109	102	100	nan	nan		. 100
	96 -	451	303	224	205	260	196	171	153	134	171	133	130	110	108	nan	117	94	82	nan	nan	95	80	nan	nan	nan		- 50
1	.28 -	721	458	229	197	245	260	161	129	128	142	132	117	105	106	115	91	87	81	80	95	76	68	65	70	nan		- 0
V14 A18	<272	1x1	1x2	1x4	1x8	1x16	2x1	2x2	2x4	2x8	2x16	4x1	4x2 KPA	4x4 R x NC	4x8 ORE	4x16	8x1	8x2	8x4	8x8	8x16	16x1	16x2	16x4	16x8	16x16		
	1																											- 400
	16 -	222	139	139	150	197	180	128	123	134	nan	155	118	118	nan	nan	145	118	nan	nan	nan	146	nan	nan	nan	nan		- 350
	24 -	207	154	122	119	nan	172	123	103	nan	nan	133	104	nan	nan	nan	119	nan		- 300								
	32 -	211	158	108	113	136	156	115	96	97	121	120	93	84	89	nan	105	87	83	nan	nan	99	87	nan	nan	nan		- 250 ල
NP	48 -	209	139	101	99	111	120	96	75	73	nan	102	74	62	nan	nan	78	63	nan	nan	nan	71	nan	nan	nan	nan		- 200 Ĕ
	64 -	321	141	97	83	100	115	87	60	61	73	85	62	52	53	65	67	52	47	50	nan	58	48	47	nan	nan		- 150 Š
	96 -	281	168	103	87	98	114	79	58	57	62	70	57	44	42	nan	56	42	36	nan	nan	45	38	nan	nan	nan		100
1	28 -	523	281	117	86	87	172	77	57	47	56	62	48	34	39	43	48	37	31	32	37	40	31	28	31	nan		- 50
V16	l	1x1	1x2	1x4	1x8	1x16	2x1	2x2	2x4	2x8	2x16	4x1	4x2	4x4	4x8	4x16	8x1	8x2	8x4	8x8	8x16	16x1	16x2	16x4	16x8	16x16		- 0
A18	K272												KPA	R x NC	ORE													
	16 -	215	137	128	132	155	173	127	114	117	nan	151	115	110	nan	nan	142	113	nan	nan	nan	144	nan	nan	nan	nan		- 400
	24 -	204	151	113	105	nan	166	118	95	nan	nan	128	99	nan	nan	nan	115	nan		- 350								
	32 -	205	155	100	102	112	152	114	86	82	91	116	91	76	77	nan	102	82	76	nan	nan	98	82	nan	nan	nan		- 300
۵.	40	206	120	07	02	05	110	0.2	60	67	nan	96	71	50	nan	nan	76	61	nan	nan	nan	70	nan	nan	nan	n an		-250 s a 200 E
z	48 -	200	138	51	92	95	119	93	09	03	nan	90	/1	56	nan	nan	70	01	ndfi	ndfi	ndfi	70	nafi	nafi	ndfi	nan		
	64 -	316	142	94	77	90	110	84	56	56	62	82	63	48	46	53	64	52	44	45	nan	56	47	43	nan	nan		- 100 ≤
	96 -	282	168	104	84	92	112	77	57	53	55	69	55	41	38	nan	54	41	35	nan	nan	45	36	nan	nan	nan		- 50
1	.28 -	520	283	116	85	80	166	77	53	44	51	60	48	33	33	38	47	36	29	29	31	39	31	26	28	nan		- 0
V16c A18M	ab (272	1x1	1x2	1x4	1x8	1x16	2×1	2x2	2x4	2x8	2x16	4x1	4x2 KPAI	4x4 R x NC	4x8 ORE	4x16	8x1	8x2	8x4	8x8	8x16	16x1	16x2	16x4	16x8	16x16		v

Figure 7.9: 多种编译选项与数学库测试结果

References

- $[1] \ http://www.hector.ac.uk/support/documentation/software/vasp/Ncore_and_npar_summary.pdf$
- [2] https://cms.mpi.univie.ac.at/vasp/vasp/Parallelisation_NPAR_NCORE_LPLANE_KPAR_tag.html
- [3] https://www.nsc.liu.se/~pla/blog/2015/01/12/vasp-how-many-cores/
- [4] https://www.slideshare.net/jmskelton/vaspgpu-on-balena-usage-and-some-benchmarks