

白皮书

医疗
英特尔® 至强® 可扩展处理器
英特尔® oneAPI 工具套件

英特尔助力火山引擎加速 VASP 医药分子模型运算

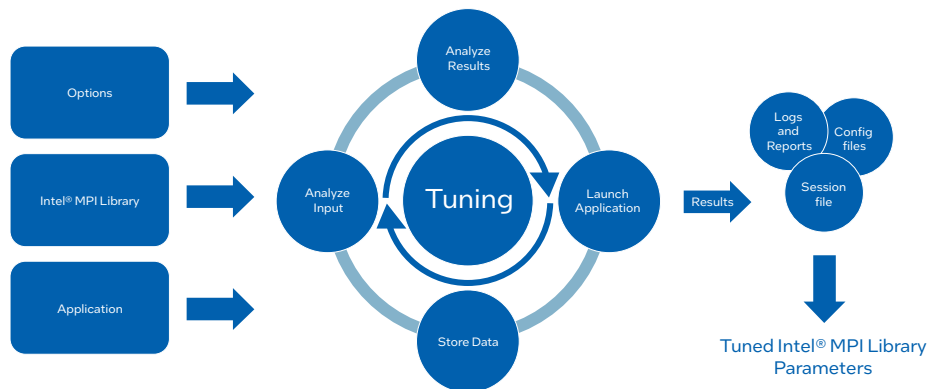


背景

某医药公司在使用 VASP 生物医药分子模型优化自己的算法时遇到了性能低下的问题，为了解决这个问题，一起针对 VASP 分子模型的特点，进行技术匹配，最终发现，英特尔® oneAPI 工具套件中的 MPI 库能够助其获得理想结果。

使用的技术

MPI (Message Passing Interface)，是开发者们在科学计算程序中，用于在参与计算的不同 CPU、或服务器节点之间进行消息传递的一组规范或接口，通过这组接口，能帮助开发工程师们在不同的计算平台上快速编写可跨平台移植的并行计算程序，提升开发效率。



VASP (全称 Vienna Ab-initio Simulation Package) 是维也纳大学 Hafner 小组开发的进行电子结构计算和量子力学-分子动力学模拟软件包。它是材料模拟和计算物质科学研究中最流行的商用软件之一。

测试

测试环境基于火山引擎 g2i 实例，采用双路版第三代英特尔® 至强® 可扩展处理器，提供强劲性能。

目录

- 背景 1
- 使用的技术 1
- 测试 1
- 结论 2

a. 测试步骤

步骤 1, 安装英特尔® OneAPI 工具套件, 并使能环境变量;

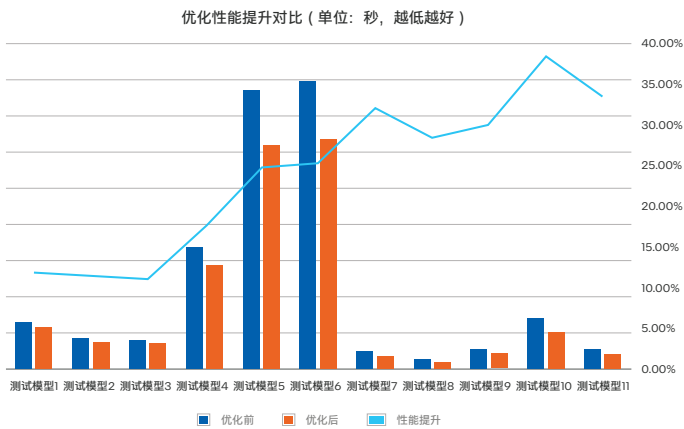
步骤 2, 基于 OneAPI 中的英特尔® Compiler 和 MKL (数学核心函数库), 编辑 VASP 软件包的 makefile, 编辑相关库的地址, 打开编译器优化配置, 编译构建 VASP 程序;

步骤 3, 获取测试用例, 运行 VASP 程序:

```
Bash
cd PATH-TO-CASE
mpirun -genv I_MPI_DEBUG=5 -np 4 PATH-TO/
binary/vasp_std
```

b. 优化效果

基于业务模型提供定制化解决方案, 其中包括使用英特尔® oneAPI 工具套件提升性能:



实际性能受使用情况、配置和其他因素的差异影响。更多信息请见 www.Intel.cn/PerformanceIndex

c. 异常 case 优化:

客户测试中遇到了一个异常 case, 导致容易超时甚至运算失败等问题, 而且在不同的配置下最终运算结果会有小幅度的差异。

通过英特尔与火山引擎联合定位分析, 最终选择了新版本的英特尔® MPI, 结合测例中的 NPAR 参数调优:

- VASP 官方推荐实践: $NPAR \approx \sqrt{\# \text{ of cores}}$
- 调优后的最佳实践: 去掉 NPAR 这个参数, 可以获得平衡的性能以及稳定的结果输出

结论

火山引擎向该生物医药科技公司提供了基于英特尔® oneAPI 工具套件中的 MPI 库, 广泛赋能更加数字化和智能化的药物研发效率升级, 并对 VASP 分子训练模型进行了 NUMA 亲和性优化, 极大地提高了运算性能, 从而提高研发成功率、降低研发成本。

关于火山引擎

火山引擎是字节跳动旗下的云服务平台, 将字节跳动快速发展过程中积累的增长方法、技术能力和应用工具开放给外部企业, 帮助企业构建用户体验创新、数据驱动决策和业务敏捷迭代等数字化能力, 实现业务可持续增长。

关于英特尔

英特尔 (NASDAQ: INTC) 作为行业引领者, 创造改变世界的技术, 推动全球进步并让生活丰富多彩。在摩尔定律的启迪下, 我们不断致力于推进半导体设计与制造, 帮助我们的客户应对最重大的挑战。通过将智能融入云、网络、边缘和各种计算设备, 我们释放数据潜能, 助力商业和社会变得更美好。如需了解英特尔创新的更多信息, 请访问英特尔中国新闻中心 newsroom.intel.cn 以及官方网站 intel.cn。



¹ 测试日期为 2022 年 9 月, 该数据由字节跳动提供, 英特尔并不控制或审计第三方数据。请您审查该内容, 咨询其他来源, 并确认提及数据是否准确。

法律声明

英特尔并不控制或审计第三方数据。请您审查该内容, 咨询其他来源, 并确认提及数据是否准确。

性能测试结果基于 2022 年 9 月进行的测试, 且可能并未反映所有公开可用的安全更新。详情请参阅配置信息披露。没有任何产品或组件是绝对安全的。

英特尔技术特性和优势取决于系统配置, 并可能需要支持的硬件、软件或服务得以激活。产品性能会基于系统配置有所变化。没有任何产品或组件是绝对安全的。更多信息请从原始设备制造商或零售处获得, 或请见 intel.cn。

声明: 本文仅用于宣传英特尔和合作伙伴的科技技术。英特尔不以任何方式宣传或介绍医疗机构、医疗服务, 也不为任何药品、医疗器械、保健食品等做推荐或证明。