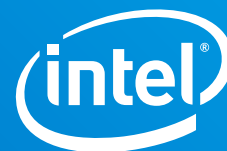


案例研究

高性能计算 (HPC)



分子科学研究所 利用新型高性能分子模拟器 推动突破性研究

英特尔® Omni-Path 架构和英特尔® 至强® 可扩展处理器将帮助解决更大的难题。



高性能分子模拟器一览

- 双重配置可用于大规模并行计算和快速串行计算
- 采用英特尔® 至强® 金牌 6148 处理器和英特尔® 至强® 金牌 6154 处理器, 共 40,558 个内核
- 计算能力是旧系统的 7.3 倍

执行概要

[分子科学研究所 \(IMS\)](#) 借助双用途系统显著扩展了计算能力。该双用途系统旨在为研究人员提供高性能并行计算和大内存串行处理服务。该新型系统基于英特尔® 至强® 金牌 6148 处理器和英特尔® 至强® 金牌 6154 处理器构建, 配备 800 GB 英特尔® SSD DC 3520 数据中心系列固态硬盘, 所有组件通过英特尔® Omni-Path 架构互连。

挑战

日本分子科学研究所 (IMS) 是一家先进的分子科学研究中心 (涵盖理论和实验研究)。该研究所设有四个研究部门: 理论与计算分子科学部、光分子科学部、材料分子科学部、生命与配位化合物分子科学部。该组织为分子科学界提供了一个开展联合研究的场所, 并通过国内和国际关系部门交换研究人员。分子科学研究所的科学家还与日本及世界各地的广大研究人员开展合作, 为分子科学知识的前沿探索提供支持。分子科学研究所的超级计算机一直用于量子化学计算、能带计算和分子动力学模拟方面的重要工作。其最新的科研成果已发表在《自然》(参见 2016 年 2 月 25 日刊, 第 530 卷, 第 465-468 页) 等多种科学期刊上。

分子科学研究所计算科学研究中心 (RCCS) 主任 Shinji Saito 表示: “实现真正突破的最大难题在于, 研究人员必须在我们的超级计算机上运行海量的试错计算, 以了解新的结构和行为。”尽管分子动力学 (MD) 模拟通常针对并行计算进行了高度优化, 但许多量子化学 (QC) 算法往往以串行方式运行。由于科学家需要研究的艰巨课题涉及这两种类型的计算, 这导致他们必须等待很久才能获得所需的数据并继续进行下一步工作。无论研究人员需要进行哪种类型的计算 (串行或并行), 分子科学研究所都要为研究人员提供充足的 CPU 时间来原因解决此类难题。

“我们以前的超级计算机是在 2011 年安装的。”Saito 评论道, “它们使用的是六年前的技术。其内核数量和运算速度已无法满足当今用户的需求。”

解决方案

分子动力学计算可同时使用数千个内核。与内核数量较少的系统相比, 采用非阻塞方式互连的更多内核使研究人员能够更快地运行作业, 或运行比以前大得多的作业。但是, 采用串行处理方法的量子化学计算则需要海量的内存和最快的 CPU 时钟速度才能快速获得结果。“由于分子科学研究所同时支持这两种计算领域的研究, ”RCCS 部门负责人 Fumiyasu Mizutani 说道, “而多内核 CPU 的内核速度通常比较低, 因此我们需要一款能提供两种配置的解决方案: 一个拥有数千个内核的系统和一个内核数量较少但速度更快并且拥有海量内存的系统。”

分子科学研究所与 NEC* 合作安装了两个通过英特尔® Omni-Path 架构互连的 Supermicro* 服务器集群。这台新机器被称为“高性能分子模拟器”。它具有 1.8 petaFLOPS Linpack* 和 3.1 petaFLOPS 的理论峰值性能¹，在 2017 年 11 月的 Top500 排行榜中位列第 70 名。它于 2017 年 10 月 1 日在分子科学研究所正式投入使用。

分子模拟器的两个系统运行在英特尔® 至强® 金牌 6148 处理器（具有 20 个内核，用于分子动力学的大规模并行运算）和英特尔® 至强® 金牌 6154 处理器（具有 18 个内核，运行频率为 3.0 至 3.7 GHz（睿频），提供执行量子化学串行操作所需的速度）上。为满足不同类型工作负载的需求，20 核节点采用全对等带宽（FBB）拓扑结构配置，而更快的节点是 1:3 超额预订的，因为它们在运行自己的大内存需求作业时不需要进行太多的通信。

此外，分子模拟器还配备了 800 GB 英特尔® SSD DC 3520 数据中心系列固态硬盘。

结论

自分子模拟器投入使用后，已运行了许多使用量子化学计算、分子动力学模拟、内存传输和磁盘性能程序的基准测试。此外，用户已经开始在新系统上运行其研究项目。改进的 Test397（一种几何优化和频率计算）的一项基准测试，在新系统上使用 Gaussian09 Rev.d01 的速度比旧系统快 2.1 倍¹。新系统具有 40,588 个内核，计算能力是分子科学研究所之前系统的 7.3 倍²。

“尽管该内存密集型工作负载的这些高斯基准测试结果是在应用任何‘Spectre’和‘Meltdown’软件缓解和固件更新之前所计算出的结果，”Mizutani 指出，“但进一步的代码测试表明应用安全更新后对性能没有影响。”

现在，有 80 个活跃用户的约 1000 个使用 1 到 1000 个内核的作业正在新系统上持续、高效地运行。

解决方案摘要

分子科学研究所利用新型高性能分子模拟器支持广泛的分子科学研究，包括计算研究。新系统为大规模并行操作和内存密集型高速串行计算提供了极高的计算能力。它集成了 40,588 个英特尔® 至强® 金牌 6154 处理器和英特尔® 至强® 金牌 6148 处理器内核，所有组件通过英特尔® Omni-Path 架构互连。在 2017 年 11 月的 Top500 排行榜上，该系统位列第 70 名。

更多信息

进一步了解[分子科学研究所](#)。

进一步了解[英特尔® 至强® 可扩展处理器](#)。

进一步了解[英特尔® Omni-Path 架构](#)。

进一步了解[英特尔® 固态硬盘](#)。

解决方案配置

- 采用英特尔® 至强® 金牌 6148 处理器和英特尔® 至强® 金牌 6154 处理器，共 40,588 个内核
- 216,768 GB 内存
- 英特尔® Omni-Path 架构高带宽网络
- 英特尔® SSD DC 3520 系列固态硬盘

¹ NEC LX 集群，英特尔® 至强® 金牌 6148/6154 处理器，英特尔® Omni-Path 架构，40,558 个内核，3.1 petaFLOPS 理论峰值性能

² Fujitsu PRIMERGY CX250 & RX300，英特尔® 至强® E5-2690/E5-2697v3 2.9GHz/2.6GHz，Infiniband FDR/QDR，12,992 个内核，理论性能为 0.437427 petaFLOPS，<https://www.top500.org/site/48473>



性能测试中使用的软件和工作负载可能仅在英特尔微处理器上进行了性能优化。

诸如 SYSmark 和 MobileMark 等测试均系基于特定计算机系统、硬件、软件、操作系统及功能。上述任何要素的变动都有可能导测试结果的变化。请参考其他信息及性能测试（包括结合其他产品使用时的运行性能）以对目标产品进行全面评估。如需了解更多信息，请访问 www.intel.cn/benchmarks。

由于要进行额外的测试，基准测试结果可能需要修改。结果取决于测试中使用的具体平台配置及工作负载，可能不适用于任何特定用户的组件、计算机系统或工作负载。结果并不一定能代表其他基准性能测试，其他基准性能测试可能会不同程度地受到消除漏洞措施的影响。

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。没有计算机系统是绝对安全的。更多信息，请见 www.intel.cn/xeonscalable，或从原始设备制造商或零售商处获得更多信息。

基准性能测试结果在实施近期针对“Spectre”和“Meltdown”漏洞的软件补丁和固件更新之前发布。实施更新后，这些结果可能不再适用于您的设备或系统。

英特尔不控制或审计本文提及的第三方基准测试数据。

英特尔、英特尔标识、至强是英特尔公司在美国和/或其他国家的商标。* 其他的名称和品牌可能是其他所有者的资产。