

HPC-BLAST Scaling the Life Sciences for the Intel® Many Integrated Core future

R. Glenn Brook, Ph.D., Project Lead

Shane Sawyer, Research Associate Co-Director, U.T. Intel Parallel Computing Center

Joint Institute For Computational Sciences, University of Tennessee, Knoxville

HPC-BLAST Development

- HPC-BLAST is a high-throughput, highly thread count version of the NCBI Basic Local Alignment Search Tool. Designed from the outset for use with the Intel® Many Integrated Core architecture.
- The NCBI BLAST algorithm is used extensively in the field of Bioinformatics.
- HPC-BLAST is a scalable code employing a symmetric
 MPI execution mode.
- The development of HPC-BLAST made extensive use of Rogue Wave Totalview, Allinea DDT, Intel VTune and Intel Inspector in addition to the 2013 and 2015 Intel C++ compilers.



The NCBI-BLAST algorithm: Overview

Query Query Concatenated Query Query

[1] Concatenate a batch of queries together

word	offset	[2 100
TCG	13	tab
TAC	14	coi qu
CCA	15	

[2] Build a lookup table for the concatenated query

..ATCGAGGTCATGCTACGGA..

word	offset
TCG	13
TAC	14
CCA	15

[4] Alignment proceeds in two stages around relevant matches. An ungapped alignment occurs first and is followed by a gapped alignment. The result is a substring and associated score.

..ATCGAGGTCATGCTACGGA..

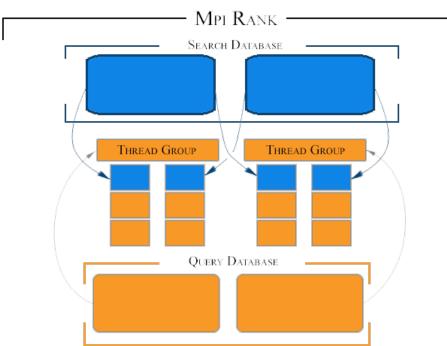
..GGGTCATGATACGA..

GATACG -----> USER

[5] Report the highest scoring substring matches to the user



HPC-BLAST Approach



Problem:

Large volumes of un-sequenced data are being generated at increasingly exponential rates. Scientists and industry, using traditional non-HPC approaches, are struggling to handle the deluge of data.

> Solution: <u>A Many Integrated Core approach</u>

High thread counts can enable scalability, performance and significant throughput of results

With **HPC-BLAST** our team has designed a new, highly threaded variant of the NCBI-BLAST approach

Completed Capability

- ✓ A coarse grain, MPI layer implementation for search database distribution.
- A highly threaded approach to query distribution and parallel searching for mid-grain parallelism.
- ✓ A bin-packing load balancer.

Enhancements in progress

- Distributed, dynamic load balancing based on local work loads.
- Large scale, parallel I/O for more efficient output of results.
- Exploring SIMD opportunities.

Preliminary Performance: Concurrency

Intel® VTune[™] 2013 concurrency analysis: 16 threads. NCBI-BLAST v.s. HPC-BLAST

Theread	COLORED STORMS		1005	1505		3005	3505	40 <u>0</u> s	4505	50 ⁰ s	550s	V Thread V Running V Hardware Ev Hardware Ev V Hardware Ev Hardware Ev
		and a das made where the first later is the first data to a solar										

NCBI-BLAST

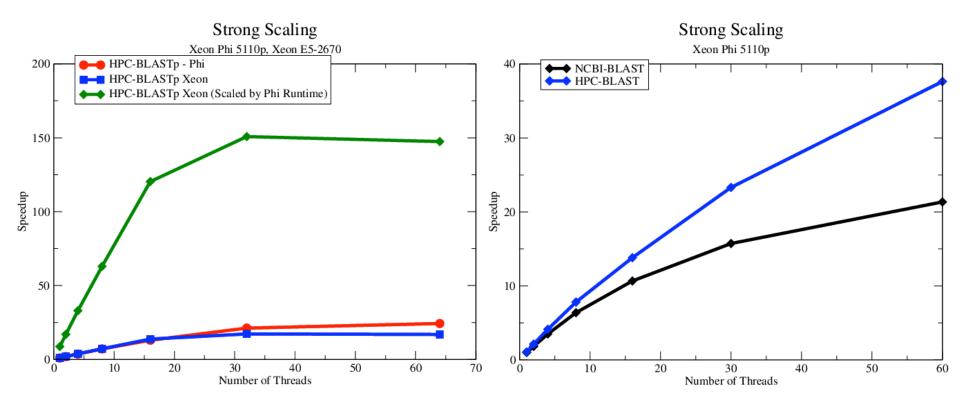
- Green bars show running threads
- Clear serialization halting performance

	Q© Q+ Q−Q#	10s	20s	30s 40	s 50s	60s	70s	80s 9	0s 100s	110s	120s	130s	140s	150s	160s	170s	180s	190s	200s	210s	220s	23237.6s	F	Three	ad	
	hpc_blastp_w		ניאע באנשע א	يع بعد بين أن الأرام	الشريح ثمدري		densi min		in a frants a si				تعامانه	د الالأد ال	يشعينين	ير بي بين بين	antico di s		Minine to -				<u>-</u>		Runnin	a
	hpc_blastp_w			: 11 (1997) 1997 (1997) 1997	وإلما الجرادات	inininis	וודושושו	زر زبر ربر بعر زب	TIMIMIMU	THE PARTY OF	त ना ता गा गा	TITTT	1111111		MAJIMA	M. Maria		INTERN	h n							
	hpc_blastp_w	ATTRACTOR OF	IIMIMÌMN	ير بشير أير أير ي	رثد ثعريفريدا	I) IN MUM	شيرتيريه	MÌMÌMÍMI	ويروني والمراجع والمراجع	in na ha mìt	ני אורארוד	الأتاثلاثات	MINIMS	ini wina in	الاثلاثيان	ذر بد ز بد بند	شر زر ریش	أنر بيبر بير بشر	n	с на <u>с</u>	1.1	1.1.1		🗹 Ha	dware	Ev
	hpc_blastp_w		ألاثلاثات	ر این بر زیر زیر زیر	ثدر قد ثمر يشر	يد يقد ري ر أ يد	لالاثلاثية	شير أندر عثر يثدهم	يق بدر رز بدل	التدريدة أديث	عر بدر شر اعن	ير فر يقدّ يقد أ	سنسنط	المالياتي	ير (يقدّ يحد أن	الدالة أللا	التألف					10 I I		لايتقاد	INSTR	
	hpc_blastp_w	 A statistical sector 	أريد ثيريد ثير	ند ثد ثمر تعاد ند بعد	يبدأ رزيد زيري	قريقر زيرزيين	رژ بخر بخر بخر	المريح رشر أبد أر	للا إلا يقد يقد أن	وأربعا بارتش	هر بشريد رايد ا	فر فر شر از از از ا	ورايريي	دأمريد تتع	عذرين يشربه						0.1 0.1					Ľ
	hpc_blastp_w	n inin maina baa	وتعقد أعتدان	أد أعل أعلد شد أد أس	زيد زيز بيزيين	يقد أيقد زاد زايل	وعر زر زور ار	ti u ti ni ni ni ni ni n	يع (ير يعر بغر أ	ر عقد عقد عد و ش	تذريب ليعرز بعداريه	شنينيين	والمورز وزيدا	DIVITIAN	أشرار والمرابحان	li –							í Ir	A Hard	ware E	v
Ð	hpc_blastp_w	BARRED DATA	يسرير زيرية	شريد ريد نقد ريز ري	اثر الشريد بير	أوولا أوران	أد لا ألا الا	وأحر أحز أحز المرا	راد بارز برور به	والالتدار أورش	ي القريد بر أ	يتر بر زير تر زير ز	تتقلقتني	والأشتع	ŴW;	1.1				1.111100					dware	Ev
	hpc_blastp_w	and a late to be part	ند ز مز بغیر ز مر ز	يؤد أعادين أيتربحها	أ يعد بعد أبد أن أ	risinisini	أعثر أحذابه	فأعقد ثار أعقد شر	وإرار فيتراجع فرا	ير يو ز يو يشر يو	n in a statistic	أعد أدري أحالها	nininin									and an effective		мпа	uware	EV
f	hpc_blastp_w	1) 12 10 12 12 12 12 12 12 12 12 12 12 12 12 12	أند زاعة عقد أعد	يزاعد أراعد بأعد أراعك ا	يترز وأعقد أنعده	النافر بعزيهم	يليد أعشد أيد أبه	ير تعد أو أيثر أو	وتر والبني بنداول	a dan bada da kabara	(DÁTIMM I)		میں رابیل رابیل ا نت											لانتقاد	INSTR	
	hpc_blastp_w	الشريان المرامز ال	أندار أحذامهم	تروار عشر تروابد أعتره	فتشريد فتدفه	يرفر فراعلي	ال الد الله الله ال	ير زين بخري	فرز فراعته فريقه	a de la company de la comp	ت فتطعنه	MINIMIN	11							0.011-0						
	hpc_blastp_w	أدر اعتدادا عتداد	يثر يعجد إير الأبر	ثمث بعد ثد تربعد أند أر	ذيقر زيرز يقرك	a ni ni ni na n	أعتر يشر زر زريد	MINIMI	يرز بر المرابق	tá katá si také ta	الا بد الأ الأد ا	(17) و المراجع	1 1													
	hpc_blastp_w		أحمد أحذامت	أحداد بالأعاد بمعتده	أر أد بعد أدر أن	الألاث الشرابة	اسر باز ر زر بخ	أر شريقين أر شرا	اب زير بغر ندر	والمراجعة المثرار	ÁTMMD:									1.1.1						
	hpc_blastp_w	1000	ششريدزير	والشراعين أنجز أنجز الح	لمتمطمين	ير بعذ يذ يند :	فستحشي	سر شريد ژيژ بغ	وا وا وا وا و	MARK MINUT												100				
	hpc_blastp_w		شر تر تعاد اعت	المراجأ تشارين بمراد	ششي	يد ثما في	الأراد ألأرك	د تر الد العد الد	الأ الكرك أكرا	IMBU:									1							
	hpc_blastp_w		أسد بخر خريد	عديقد ذريار تحازي	الشريبين بثرين	يدار برايد أنبث	عد اشر الحر الله		ثد شريد زيده	طلأتك											1					
	lana lala des co																						2			
	Hardware E		di seka kut tin ka di	an de de service de la ca	in pailint b	de life et e ver	dataliiliathan	il deine et their			inatelian (a	belizeerie İse	l ikusiatik	di ti sta			and and an a second			لدادر العادية	ha din du di di a sa	مسمعيد				

HPC-BLAST

- Concurrency is
 dramatically improved
- First pass at threading model implementation. Improvements continue with optimization!

Preliminary Performance: Speedup



- Speedups scaled by 1 thread NCBI BLAST on Xeon Phi.
- Used nr.01 partition as subject database.
- 128 Queries taken from subject database.

- Speedups scaled by 1 thread NCBI BLAST on Xeon Phi.
- HPC-BLAST used two ranks each with same subjects.
- Used nr.01 partition as subject database.
- 534 Queries taken from subject database.

Insights

- Leveraging full performance requires thread concurrency and vectorization.
- Flexibility in expressing parallelism at all levels to tune performance crucial for code not readily mapped to architecture.
- VTune is very helpful in identifying hotspots; Inspector is useful in finding race conditions.
- One of the key remaining challenges is to refactor hotspots to utilize SIMD operations while matching output produced by standard implementation.



THANK YOU

Shane Sawyer Research Associate, Joint Inst. for Comp. Sciences Shane-Sawyer@Tennessee.edu

R. Glenn Brook, Ph.D.

Co-Director, U.T. Intel Parallel Computing Center Director, Application Acceleration Center of Excellence Chief Technology Officer, Joint Inst. for Comp. Sciences Project Lead: HPC-BLAST

Bhanu Rekepalli, Ph.D.

Computational Scientist, Joint Inst. for Comp. Sciences Adjunct Asst. Professor, Univ. of Tennessee Project Co-lead: HPC-BLAST

Glenn-Brook@Tennessee.edu

Brekapal@Tennessee.edu



SC14 BOF: Performance Tuning and Functional Debugging for Intel® Xeon Phi™ Processors