

AMBER11 マルチ GPU 性能測定結果

2011 年 2 月 22 日

概要： このドキュメントでは、AMBER 11 マルチ GPU 版の TSUBAME2.0 での性能測定値結果および公式の性能測定結果との比較について報告する。性能測定の計算に用いる入力ファイルは AMBER 公式データをダウンロードし使用した。1 章では、AMBER パッチの適用状況などの測定条件について記載、2 章では測定の一連の手順を記載した。3 章において各入力ファイル毎に得た計算結果をグラフにして示す。

1. 1. 測定条件

	TSUBAME2.0	AMBER 公式
Amber Version	11 bugfix 11	11 bugfix 11
CPU	Intel Xeon X5670 2.93 GHz (6 cores) × 2 (Hyperthreading enabled)	Dual x Hex Core Intel X5670 2.93 GHz
MPI	openmpi 1.4.2	MVAPICH2.0 - 1.5 (With GPU Direct v1.0)
ifort	11.1.072	11.1.069
GPU	Tesla M2050	Tesla C(M)2050
nvcc	v3.2 (H キュー) v3.1 (G キュー)	v3.2
cuda driver version	260.19.26 (H キュー) 256.49 (G キュー)	260.19.14
ECC	ON (*1)	OFF
ファイルシステム	/work0 (lustre)	-
構成	3 M2050 per node + HP IB 4X QDR CX-2 DualPort PCIe HCA	1 M2050 per node + 1 Mellanox QDR IB in x16 slot or 2 M2050 per node + 1 Mellanox QDR IB in x4 slot

(*1) 2011 年 2 月 22 日現在、TSUBAME2.0 の各 GPU の ECC は ON の設定になっている。

1. 2. 入力ファイル

入力ファイルは AMBER 公式と同様のものを使用する. 入力ファイルのダウンロードは, 次の URL より行った.

http://ambermd.org/amber11_bench_files/Amber11_Benchmark_Suite.tar.gz

計算は Implicit Solvent(GB)の 3 サンプル, Explicit Solvent(PME)の 4 サンプルの計 7 サンプルについて行った. 計算を行ったサンプルの一覧を以下に示す.

- Implicit Solvent (GB)
 - TRPCage = 304 atoms
 - Myoglobin = 2,492 atoms
 - Nucleosome = 25,095 atoms

- Explicit Solvent (PME)
 - DHFR NVE = 23,558 atoms
 - DHFR NPT = 23,558 atoms
 - FactorIX NVE = 90,906 atoms FFT=128x64x64
 - FactorIX NPT = 90,906 atoms

1. 3. 性能測定対象

性能測定は、「1.2 入力ファイル」で挙げた 7つの各入力ファイルにつき次の 12通りの組合せについて H キューで行う。

- (1) 1 ノード 8CPU
- (2) 1 ノード 12CPU
- (3) 2 ノード - 各ノード 12CPU
- (4) 3 ノード - 各ノード 12CPU
- (5) 4 ノード - 各ノード 12CPU
- (6) 1 ノード 1GPU
- (7) 1 ノード 2GPU
- (8) 2 ノード - 各ノード 1GPU
- (9) 2 ノード - 各ノード 2GPU
- (10) 4 ノード - 各ノード 1GPU
- (11) 4 ノード - 各ノード 2GPU
- (12) 8 ノード - 各ノード 1GPU

ただし、例外として「TRPCage = 304 atoms」の場合のみ、(1) 1 ノード 8CPU, (2) 1 ノード 12CPU, (6) 1 ノード 1GPU のみを測定する。

また、複数キューとの結果の比較のため、「Myoglobin = 2,492 atoms」「Nucleosome = 25,095 atoms」「DHFR NVE = 23,558 atoms」「DHFR NPT = 23,558 atoms」については G キューにおける測定も行う。

ECC ON と OFF の性能測定結果との比較を行う。ただし、ECC OFF にした場合の測定は、(6) 1 ノード 1GPU の場合についてのみ H キューで行う。また、ECC OFF の測定を行う場合のみ、ドライババージョンが「1.1 測定条件」の内容と異なり 260.24 としている。

2. 測定方法

手順 1. PBS によるジョブ投入を行うため、各サンプルについてジョブスクリプト中で次のコマンドを実行する.

○pmemd の場合

```
time pmemd -O -i mdin -o mdout -p prmtop -c inpcrd
```

○pmemd.MPI の場合

```
time mpirun -np <CPU数> -hostfile ${PBS_NODEFILE} pmemd.MPI ¥  
-O -i mdin -o mdout -p prmtop -c inpcrd
```

○pmemd.cuda(=pmemd.cuda_SPDP) の場合

```
time pmemd.cuda -O -i mdin -o mdout -p prmtop -c inpcrd
```

○pmemd.cuda.MPI(=pmemd.cuda_SPDP.MPI) の場合

```
time mpirun -np <CPU数> -hostfile ${PBS_NODEFILE} pmemd.cuda.MPI ¥  
-O -i mdin -o mdout -p prmtop -c inpcrd
```

(補足) nucleosome の場合のみ、コマンドの引数に-ref inpcrdを追加する.

手順 2. t2sub コマンドにより, ジョブ投入を行う.

○pmemd の場合

```
t2sub -W group_list=t2g-nectest01 -q <キュー名> -l walltime=20:00:00 ¥  
-l select=1:mem=20gb ./<jobscript>
```

○pmemd.MPI の場合

・ノード内並列の場合

```
t2sub -W group_list=t2g-nectest01 -q <キュー名> -l walltime=20:00:00 ¥  
-l select=1:ncpus=<CPU 数>:mpiprocs=<CPU 数>:mem=20gb ./<jobscript>
```

・ノード間並列の場合

```
t2sub -W group_list=t2g-nectest01 -q <キュー名> -l walltime=20:00:00 ¥  
-l select=<ノード数>:ncpus=<CPU 数>:mpiprocs=<CPU 数>:mem=20gb ¥  
-l place=scatter ./<jobscript>
```

○pmemd.cuda(=pmemd.cuda_SPDP) の場合

```
t2sub -W group_list=t2g-nectest01 -q <キュー名> -l walltime=20:00:00 ¥  
-l select=1:gpus=<GPU 数>:mem=20gb ./<jobscript>
```

○pmemd.cuda.MPI(=pmemd.cuda_SPDP.MPI) の場合

・ノード内並列の場合

```
t2sub -W group_list=t2g-nectest01 -q <キュー名> -l walltime=20:00:00 ¥  
-l select=<ノード数>:ncpus=<CPU 数>:mpiprocs=<CPU 数>:gpus=<GPU 数>:mem=20gb ¥  
./<jobscript>
```

・ノード間並列の場合

```
t2sub -W group_list=t2g-nectest01 -q <キュー名> -l walltime=20:00:00 ¥  
-l select=<ノード数>:ncpus=<CPU 数>:mpiprocs=<CPU 数>:gpus=<GPU 数>:mem=20gb ¥  
-l place=scatter ./<jobscript>
```

手順 3. 計算終了後, mdout ファイルの Total wall time(並列ジョブの場合は Master Total wall time)の秒数を確認する. 秒数は, 3 回計算した結果の平均値を用いる.

手順 4. ns/day を計算する. ここで nstlim, dt(ps)は mdin 中の設定値である.

$$\text{ns} = (\text{nstlim}) \times (\text{dt(ps)}) / 1000$$
$$\text{ns/day} = \text{ns} \times 86400 / (\text{Total wall time})$$

3. 性能測定結果

以下に「1. 2 入力ファイル」で示した各入力ファイル毎の計算結果をグラフ化して示す。

「3. 1 Implicit Solvent (GB) ns/day 測定値」「3. 2 Explicit Solvent (PME) ns/day 測定値」で ns/day の TSUBAME2.0 H キュー実測値 (青色), TSUBAME2.0G キュー実測値 (紫色) TSUBAME2.0ECC OFF での実測値 (緑色), AMBER 公式値 (赤色) を棒グラフで示す。

3. 1 Implicit Solvent (GB) ns/day 測定値

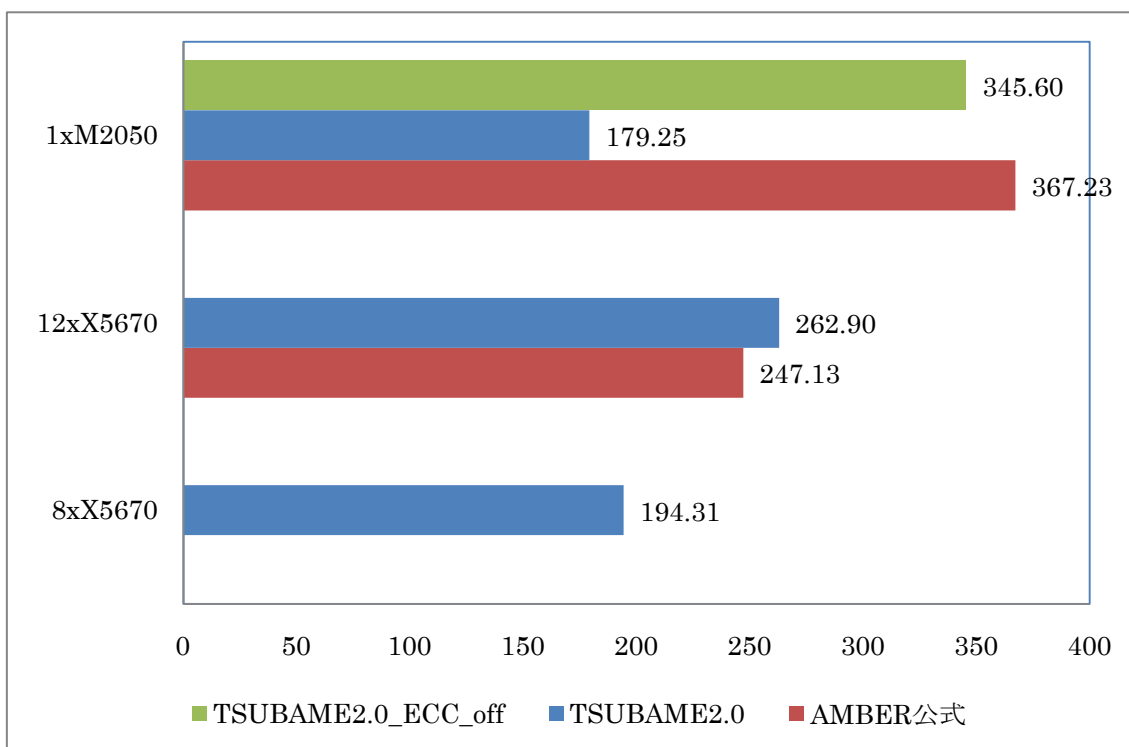


図 3-1-1 TRP Cage=304 atoms ns/day

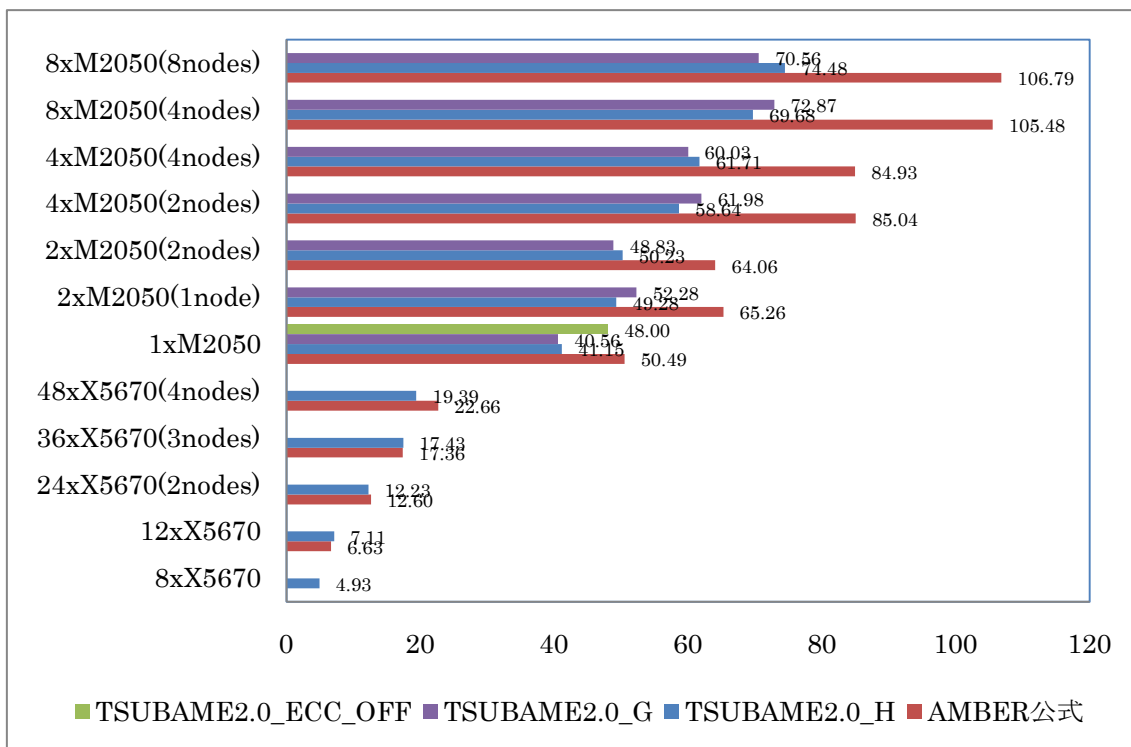


図 3-1-2 Myoglobin = 2,492 atoms ns/day

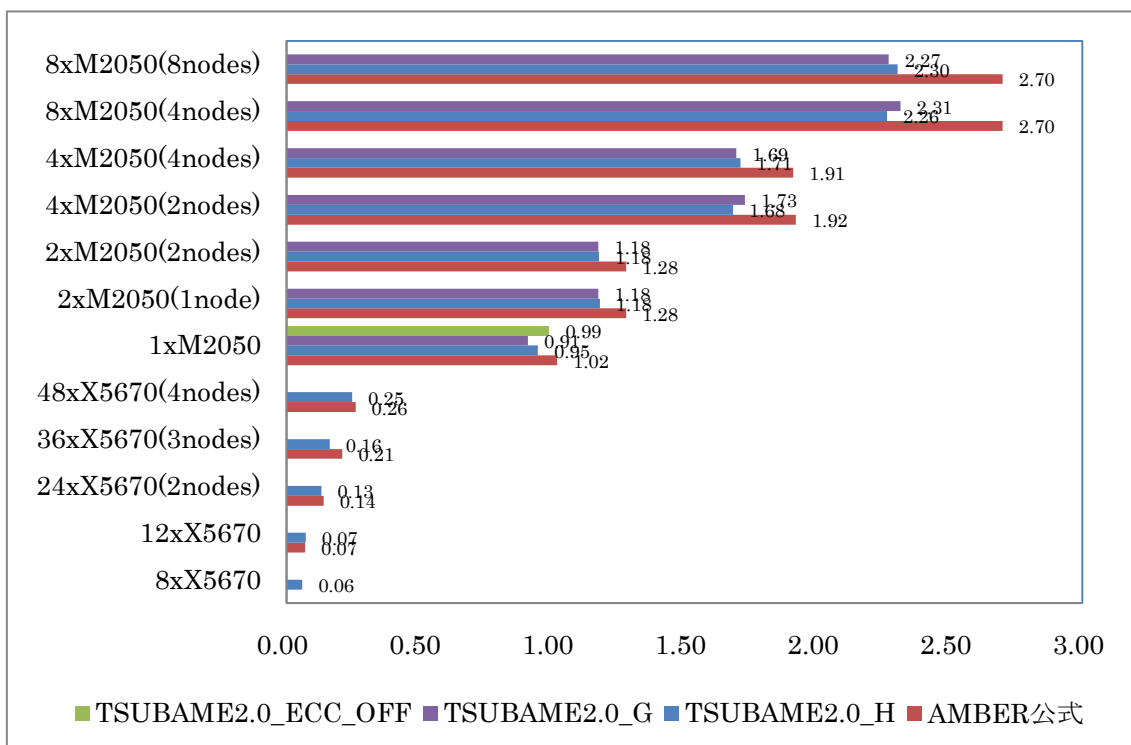


図 3-1-3 Nucleosome = 25,095 atoms ns/day

3. 2 Explicit Solvent (PME) ns/day 測定値

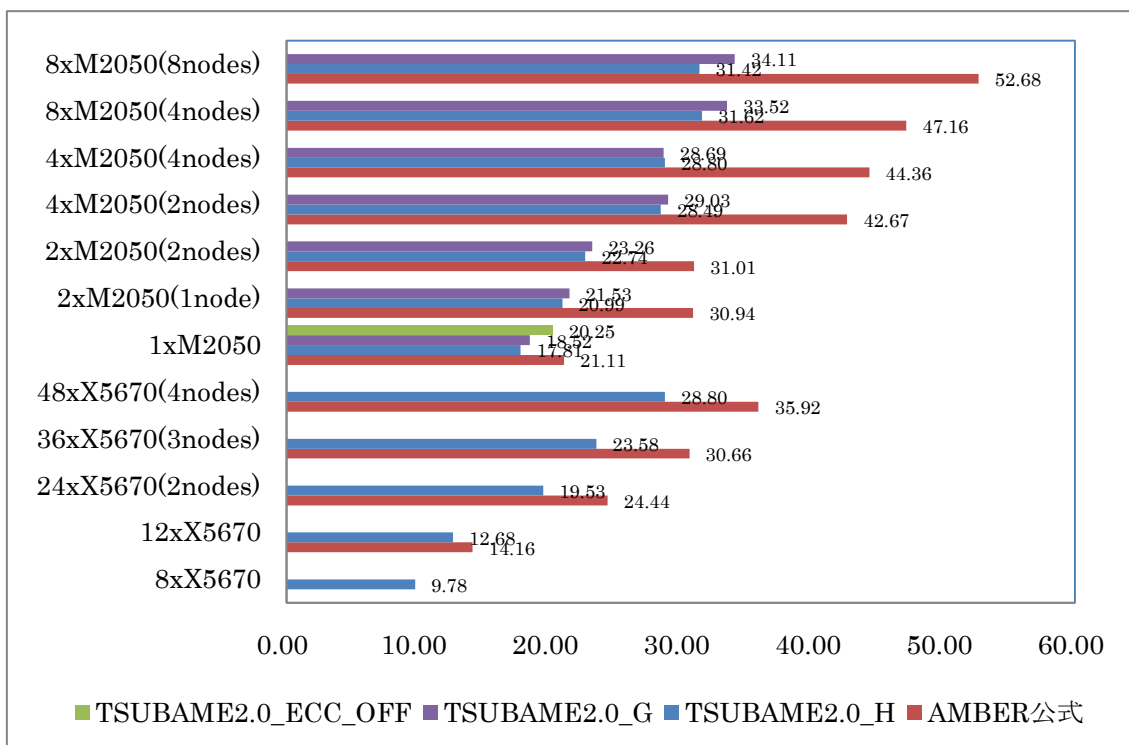


図 3-2-1 DHFR NVE = 23,558 atoms ns/day

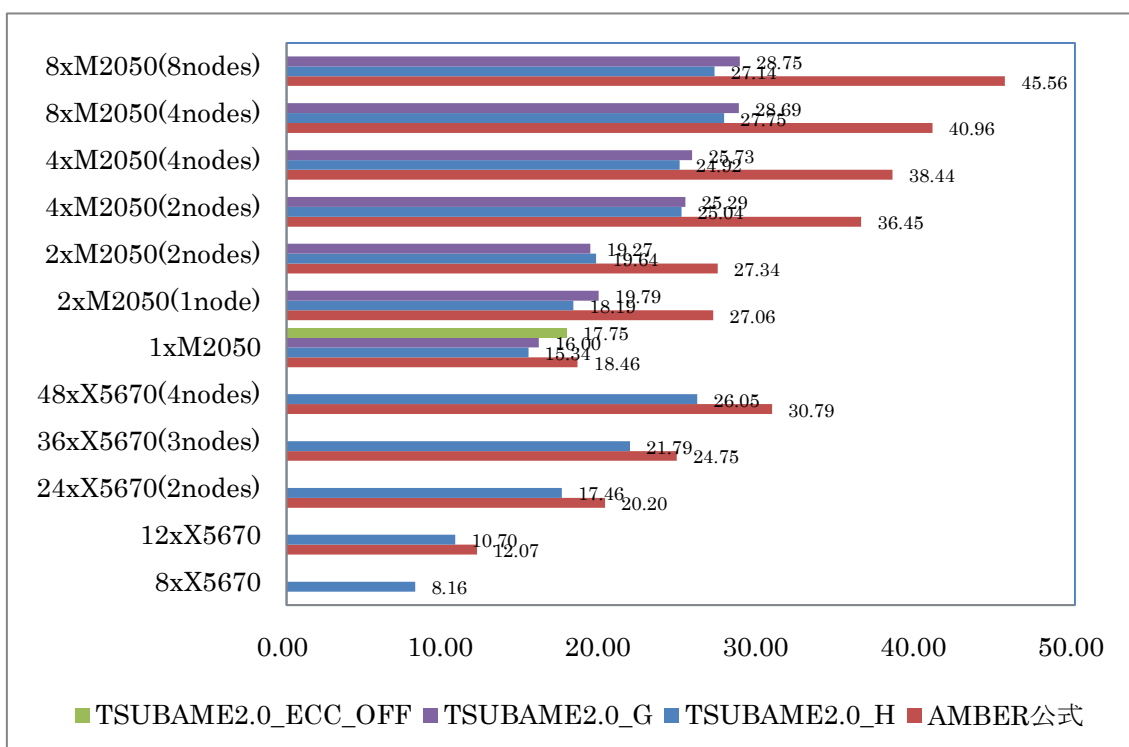


図 3-2-2 DHFR NPT = 23,558 atoms ns/day

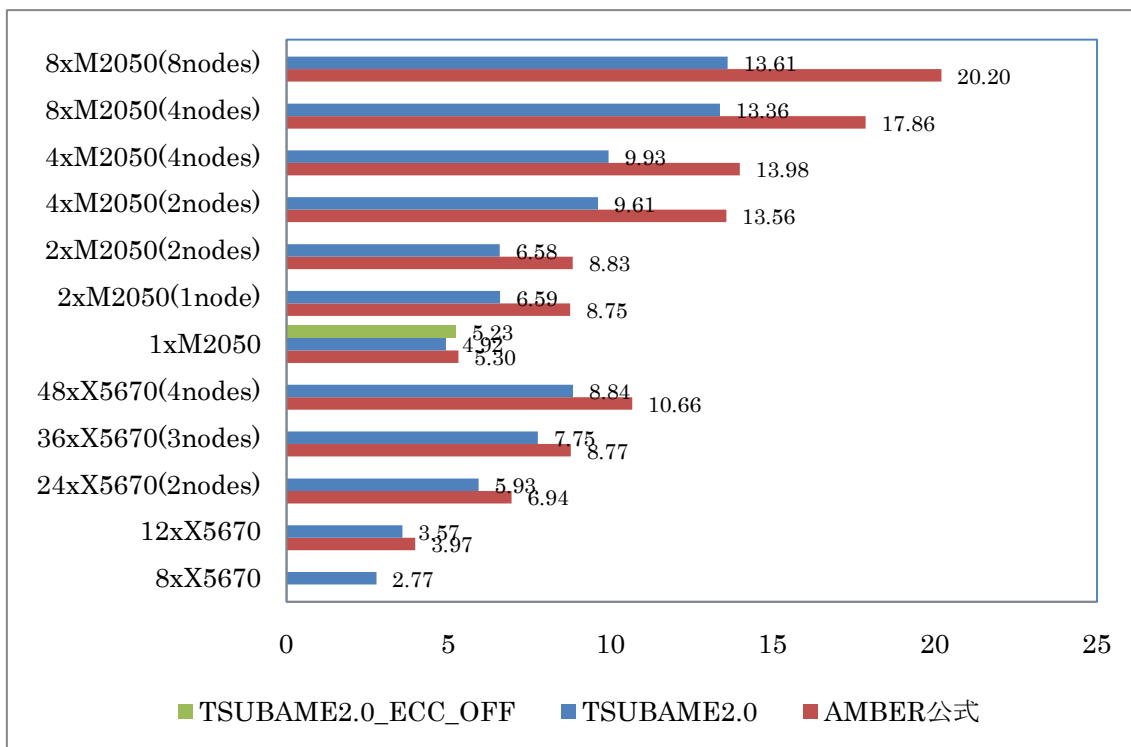


图 3-2-3 FactorIX NVE = 90,906 atoms FFT=128x64x64 ns/day

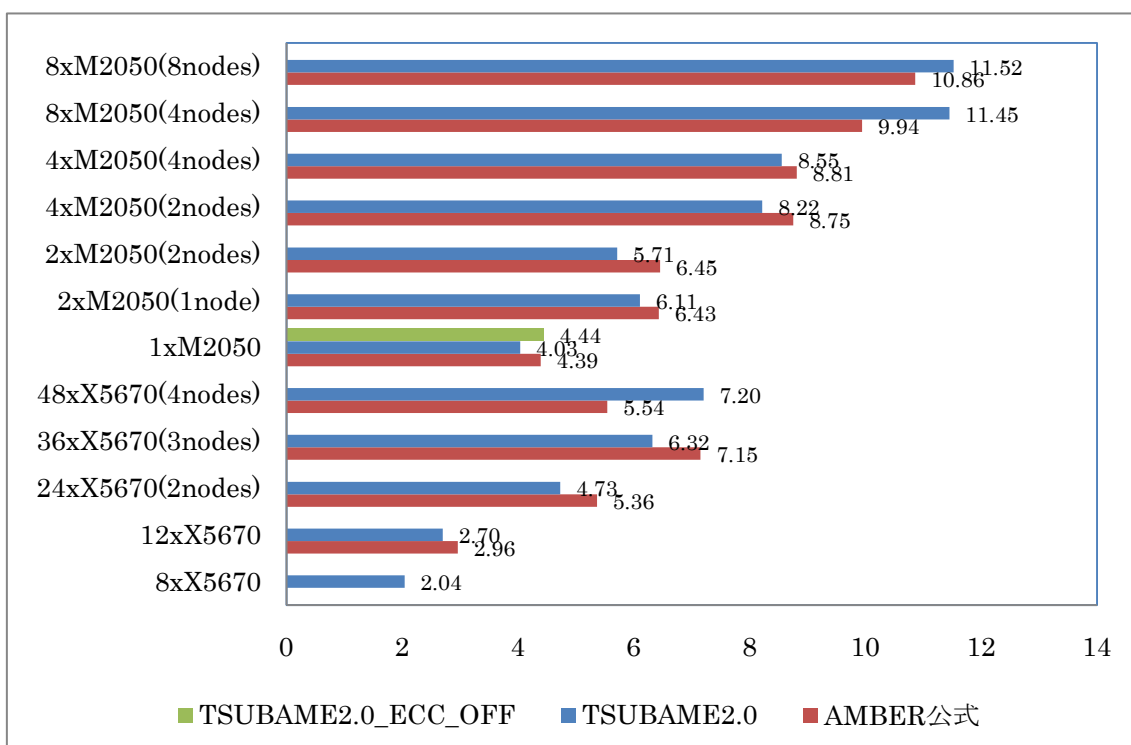


图 3-2-4 FactorIX NPT = 90,906 atomsns/day

以上