

## Сравнение производительности с использованием SurfaceGrowth на GPU и CPU

В связи с тем, что перевод кода программы SurfaceGrowth с версии для GPU на CPU может занять длительное время, на данный момент непосредственное сравнение производительности GPU и CPU версий SurfaceGrowth не представляется возможным. Поэтому проведем формальное сравнение длительности выполнения SurfaceGrowth на GPU с длительностью расчетов программы IndentGrMPI на нескольких ядрах CPU.

Программа IndentGrMPI написана в 2009 году в Сумском государственном университете (СумГУ) для моделирования методом классической молекулярной динамики процесса расслоения графитового образца при взаимодействии с адгезивным нановыступом атомного силового микроскопа. Расчеты проводились в 2009 году, результаты опубликованы в работах [4, 7] (см. ссылки в документе “SurfaceGrowth\_doc\_rus.pdf”), в которых можно найти подробное описание модели. Отметим только, что здесь мы рассматриваем результаты, полученные с использованием потенциала Леннарда-Джонса для межслойных взаимодействий в графите, т. к. расчеты с использованием RDP проходят приблизительно в 3 раза дольше. Приложение IndentGrMPI реализовано на языке C, для параллелизации применялась спецификация MPI, отладка проводилась на реализации Microsoft MPI. Release версия, использовавшаяся в расчетах, собиралась с MPICH2-1.0.7.

Расчеты IndentGrMPI проводились на беоульф кластере СумГУ, состоящем из 12 узлов. Каждый узел содержит CPU Intel® Core™ 2 Duo E6600, 2.4 GHz, сеть 1Gbit Ethernet. Расчеты SurfaceGrowth проводились на GPU NVIDIA® GeForce™ GTX 260, содержащей 216 ядер, частота 1.5 GHz. Средняя длительность выполнения одного временного шага и 130000 шагов (что составляет длительность расчетов в IndentGrMPI) для некоторых расчетов, проведенных на 4 и 8 ядрах CPU, и на GPU, представлены в таблице.

Система	Число атомов	1 шаг (мс)	130000 шагов (с)	130000 шагов (ч)
4 CPU	11503	130	16254	4.5
8 CPU	11503	90	11128	3.1
1 GPU	31432 (shear)	20	3025	0.84
1 GPU	55296 (bulk)	30	4584	1.27
1 GPU	5872 (surface growth)	7	976	0.27

Отметим, что длительность выполнения одного временного шага (третья колонка) не учитывает дополнительных задержек, связанных с выводом данных в файлы. Поэтому длительность 130000 временных шагов не равна произведению длительности одного шага на 130000, а превышает это значение.

Проведем формальное сравнение производительности CPU и GPU, исходя из количества частиц и длительности расчета одного временного шага. Из таблицы можно видеть, что для системы, в  $31432/11503 = 2.7$  раз большей, расчет на GPU проходит в  $90/20 = 4.5$  раз быстрее, чем на 8 ядрах CPU. Ускорение составляет  $2.7 \cdot 4.5 = \mathbf{12.1}$  раз по сравнению с **8 ядрами CPU**. Для системы, в  $55296/11503 = 4.8$  раз большей, расчет на GPU проходит в  $90/30 = 3$  раза быстрее, чем на 8 ядрах CPU. Ускорение составляет  $4.8 \cdot 3 = \mathbf{14.4}$  раз по сравнению с **8 ядрами CPU**. Учитывая то, что 8 ядер CPU дают ускорение приблизительно в 4 раза, по сравнению с одним ядром CPU, формальное ускорение вычислений на GPU составило **48** и **57** раз по сравнению с одним ядром CPU для соответствующих размеров системы.

Однако стоит учитывать, что в IndentGrMPI использовался метод ячеек, а не списки соседей, как в SurfaceGrowth. К тому же расчет потенциала Бреннера в IndentGrMPI является более затратным, чем потенциалов, использовавшихся в SurfaceGrowth. Данные факторы могут снизить реальное ускорение в 2 – 3 раза. Тем не менее, оно все равно составит более **10** раз.