



UNIVERSITAS INDONESIA

PR 3 PEMROGRAMAN DI LINGKUNGAN GPU

LAPORAN TUGAS PEMROGRAMAN PARALEL

KELOMPOK III

Muhammad Fathurachman 1506706276

Otniel Yosi Viktorisa 1506706295

Yohanes Gultom 1506706345

**FAKULTAS ILMU KOMPUTER
PROGRAM STUDI MAGISTER ILMU KOMPUTER
DEPOK
MEI 2016**

DAFTAR ISI

Daftar Isi	ii
Daftar Gambar	iv
1 LINGKUNGAN PERCOBAAN	1
1.1 Lingkungan Pengembangan	1
1.2 Lingkungan Percobaan	1
1.2.1 Server GPU Fasilkom Universitas Indonesia (UI)	1
1.2.2 Personal Computer (Laptop)	2
1.2.3 Cluster Rocks University of California San Diego (UCSD)	2
2 PENGENALAN CUDA	4
2.1 Eksperimen	4
2.1.1 Eksperimen Perilaku Thread dan Block	4
2.1.1.1 Deskripsi Program	4
2.1.1.2 Hasil Eksperimen	4
2.1.2 Eksperimen Perilaku Thread dan Block	4
2.1.2.1 Deskripsi Program	4
2.1.2.2 Hasil Eksperimen	5
2.2 Kesimpulan	5
3 PERKALIAN MATRIKS-VEKTOR & MATRIKS BUJURSANGKAR	6
3.1 Eksperimen	6
3.1.1 Perbandingan Program Sekuensial dan CUDA	6
3.1.1.1 Deskripsi Program	6
3.1.1.2 Hasil Eksperimen	8
3.1.2 Program CUDA dengan Variasi ukuran <i>Grid/Block</i>	9
3.1.2.1 Deskripsi Program	9
3.1.2.2 Hasil Eksperimen	10
3.1.3 Program CUDA <i>Shared Memory</i> , CUBLAS dan MPI	11
3.1.3.1 Deskripsi Program	11
3.1.3.2 Hasil Eksperimen	13
3.2 Kesimpulan	17

4	CONJUGATE GRADIENT METHOD	19
4.1	Pendahuluan	19
4.2	Eksperimen	20
4.3	Kesimpulan	20
5	MOLECULAR DYNAMICS: AMBER	21
5.1	Pendahuluan	21
5.2	Eksperimen	21
5.3	Kesimpulan	23
6	DAFTAR KONTRIBUSI ANGGOTA	24

DAFTAR GAMBAR

3.1	Waktu eksekusi program matriks x vektor sekuensial dan CUDA . . .	8
3.2	Waktu eksekusi program matriks x matriks sekuensial dan CUDA . . .	9
3.3	Waktu eksekusi program matriks x vektor CUDA dengan variasi ukuran <i>block</i> dan <i>grid</i>	10
3.4	Waktu eksekusi program matriks bujursangkar CUDA dengan variasi ukuran <i>block</i> dan <i>grid</i>	11
3.5	Waktu eksekusi program matriks x vektor <i>global memory</i> dan <i>shared memory</i> (940M)	13
3.6	Waktu eksekusi program matriks x vektor <i>global memory</i> dan <i>shared memory</i> (GTX 970)	14
3.7	Waktu eksekusi program matriks x vektor <i>global memory</i> dan <i>shared memory</i> (GTX 980)	14
3.8	Waktu eksekusi program perkalian matriks bujursangkar <i>global memory</i> , <i>shared memory</i> , CUBLAS dan MPI (940M)	15
3.9	Waktu eksekusi program perkalian matriks bujursangkar <i>shared memory</i> dan CUBLAS (940M)	15
3.10	Waktu eksekusi program perkalian matriks bujursangkar <i>global memory</i> , <i>shared memory</i> , CUBLAS dan MPI (GTX 970)	16
3.11	Waktu eksekusi program perkalian matriks bujursangkar <i>global memory</i> , <i>shared memory</i> , CUBLAS dan MPI (GTX 980)	16
3.12	Waktu eksekusi program perkalian matriks bujursangkar <i>shared memory</i> dan CUBLAS (970)	17
3.13	Waktu eksekusi program perkalian matriks bujursangkar <i>shared memory</i> dan CUBLAS (980)	17
4.1	Algoritma Conjugate Gradient Method.	19
5.1	Eksperimen AMBER pada GPU (CUDA) dan CPU <i>cluster</i> (MPI)	22

BAB 1

LINGKUNGAN PERCOBAAN

1.1 Lingkungan Pengembangan

Program paralel yang digunakan di dalam eksperimen ini dibuat menggunakan bahasa C yang di-*compile* menggunakan pustaka OpenMPI pada sistem operasi Linux Ubuntu dan Mint.

Kode program-program dan laporan eksperimen ini kami simpan menggunakan layanan GitHub di alamat <https://github.com/yohanesgultom/parallel-programming-assignment>. Hal ini kami lakukan untuk mempermudah kolaborasi dalam pembuatan program dan laporan.

1.2 Lingkungan Percobaan

Dalam eksperimen yang dilakukan, kelompok kami menggunakan mesin-mesin dengan GPU NVIDIA dan *cluster* CPU Rocks University of California San Diego (UCSD).

1.2.1 Server GPU Fasikom Universitas Indonesia (UI)

Server dengan GPU NVIDIA merupakan lingkungan utama percobaan ini. Kelompok kami melakukan percobaan di 2 buah server Fasikom UI:

1. Server GTX 980 (152.118.31.27)
 - NVIDIA GTX 980 2048 CUDA Cores 4 GB GRAM
 - Intel(R) Core(TM) i7-3770 CPU 4 cores @ 3.40GHz
 - RAM 2x8 GB DDR3 1600 Mhz
 - SSD SAMSUNG MZ7TD128 128 GB
 - OS Debian 7 Wheezy x64
 - CUDA 7.0
 - Amber 14 dan Amber Tools 15
2. Server GTX 970 (152.118.31.34)

- NVIDIA GTX 970 1664 CUDA Cores 4 GB GRAM
- Intel(R) Core(TM) i7-3770 CPU 4 cores @ 3.40GHz
- RAM 2x8 GB DDR3 1600 Mhz
- SSD SAMSUNG MZ7TD128 128 GB
- OS Debian 7 Wheezy x64
- CUDA 7.0
- Amber 14 dan Amber Tools 15

Semua *server* ini dapat diakses dari jaringan Fasilkom menggunakan protokol *SSH* dan *credential Single Sign On* (SSO) UI. Sedangkan dari luar jaringan UI, semua *server* ini dapat diakses dengan masuk lebih dahulu ke kawung.cs.ui.ac.id menggunakan protokol *SSH* juga.

1.2.2 Personal Computer (Laptop)

Sebagai bahan perbandingan, kami juga menggunakan PC (*notebook*) yang juga menggunakan GPU NVIDIA yang mendukung CUDA:

- NVIDIA 940M 384 CUDA Cores 2 GB GRAM
- Intel(R) Core(TM) i7-5500U CPU 2 cores @ 3.40GHz
- RAM 8 GB DDR3 1600 Mhz
- SSD Crucial 250 GB
- OS Ubuntu 15.10 x64
- CUDA 7.5
- Amber 14 dan Amber Tools 15

1.2.3 Cluster Rocks University of California San Diego (UCSD)

*Cluster Rocks*¹ milik University of California San Diego (UCSD) ini dapat diakses pada alamat nbc-233.ucsd.edu menggunakan protokol *SSH* dari komputer yang telah didaftarkan *public key* nya. Berdasarkan informasi dari aplikasi *monitoring* Ganglia², cluster ini terdiri 10 *nodes* dengan total 80 prosesor.

¹www.rocksclusters.org

²<http://nbc-233.ucsd.edu/ganglia>

Pada *cluster* ini sudah terpasang pustaka komputasi paralel OpenMPI³ dan MPICH⁴ serta paket dinamika molekular AMBER. Program paralel MPI dan eksperimen AMBER dijalankan mekanisme antrian *batch-jobs* untuk menjamin ketersediaan sumberdaya komputasi (*computing nodes*) saat program dieksekusi. Pengaturan eksekusi program paralel ini ditangani oleh *Sun Grid Engine*⁵ yang juga tersedia dalam paket Rocks.

³<https://www.open-mpi.org/>

⁴<https://www.mpich.org/>

⁵<http://www.rocksclusters.org/roll-documentation/sge/5.4/>

BAB 2

PENGENALAN CUDA

2.1 Eksperimen

Pada bagian ini kami melakukan 2 eksperimen untuk mengamati perilaku *block* dan *thread* pada kernel dan mengamati pengaruh ukuran data terhadap eksekusi *kernel*

2.1.1 Eksperimen Perilaku Thread dan Block

@todo

2.1.1.1 Deskripsi Program

@todo

2.1.1.2 Hasil Eksperimen

@todo

2.1.2 Eksperimen Perilaku Thread dan Block

@todo

2.1.2.1 Deskripsi Program

@todo

2.1.2.2 Hasil Eksperimen

@todo

2.2 Kesimpulan

@todo

BAB 3

PERKALIAN MATRIKS-VEKTOR & MATRIKS BUJURSANGKAR

3.1 Eksperimen

Pada bagian ini kami melakukan eksperimen perkalian matriks-vektor dan matriks bujursangkar pada CPU (sekuensial), CUDA, CUDA dengan *shared memory*, CUBLAS dan CPU (*cluster MPI*) untuk membandingkan kinerjanya.

3.1.1 Perbandingan Program Sekuensial dan CUDA

Pada percobaan ini kami membuat membandingkan waktu eksekusi program perkalian matriks-vektor dan perkalian matriks bujursangkar sekuensial (CPU) dengan paralel CUDA (GPU).

3.1.1.1 Deskripsi Program

1. Program perkalian matriks-vektor/matriks bujursangkar sekuensial pada CPU `mmul.c`¹ dengan cara penggunaan program:

```
$ mmul.c [baris/kolom matrix] [baris vektor] 1 [repetisi]
```

Argumen program:

- (a) Baris/kolom matriks: ukuran baris atau kolom matriks bujursangkar
- (b) Baris vektor: ukuran vektor
- (c) Repetisi: banyaknya perkalian diulang (untuk diambil rata-ratanya)

```
$ mmul.c [baris matrix A] [kolom matriks A/baris matriks B]  
[kolom matriks B] [repetisi]
```

Argumen program:

- (a) Baris matriks A: ukuran baris atau kolom matriks bujursangkar

¹<https://github.com/yohanesgultom/parallel-programming-assignment/blob/master/PR3/problem2/mmul.c>

(b) Kolom matriks A/baris matriks B: ukuran kolom matriks A/baris matriks B

(c) Repetisi: banyaknya perkalian diulang (untuk diambil rata-ratanya)

2. Program perkalian matriks-vektor/matriks bujursangkar paralel dengan CUDA `mmul_cuda.cu`². Program ini diadaptasi dari satu sumber eksternal³. Cara penggunaannya:

```
$ mmul_cuda.cu [baris/kolom matrix] [baris vektor] 1 0 [
    repetisi]
```

Argumen program:

(a) Baris/kolom matriks: ukuran baris atau kolom matriks bujursangkar

(b) Baris vektor: ukuran vektor

(c) Repetisi: banyaknya perkalian diulang (untuk diambil rata-ratanya)

```
$ mmul_cuda.cu [baris matrix A] [kolom matriks A/baris
    matriks B] [kolom matriks B] [repetisi]
```

Argumen program:

(a) Baris matriks A: ukuran baris atau kolom matriks bujursangkar

(b) Kolom matriks A/baris matriks B: ukuran kolom matriks A/baris matriks B

(c) Repetisi: banyaknya perkalian diulang (untuk diambil rata-ratanya)

Program `mmul_cuda.cu` ini memiliki ukuran *threads/block* tetap yaitu `(TILE_WIDTH, TILE_WIDTH)` dengan nilai `TILE_WIDTH = 10`. Sedangkan ukuran *grid* akan bergantung pada ukuran matriks/vektor dengan rumus:

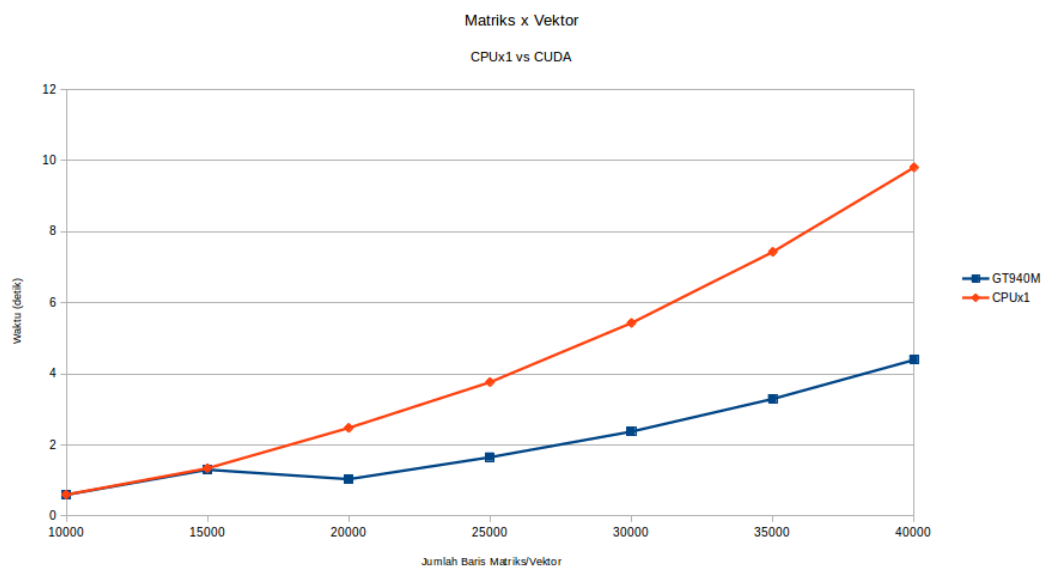
```
GRID SIZE = ((baris vektor-1) / TILE_WIDTH + 1, (baris
    matriks-1) / TILE_WIDTH + 1)
```

²https://github.com/yohanesgultom/parallel-programming-assignment/blob/master/PR3/problem2/mmul_cuda.cu

³Sumber:<https://gist.github.com/wh5a/4313739>

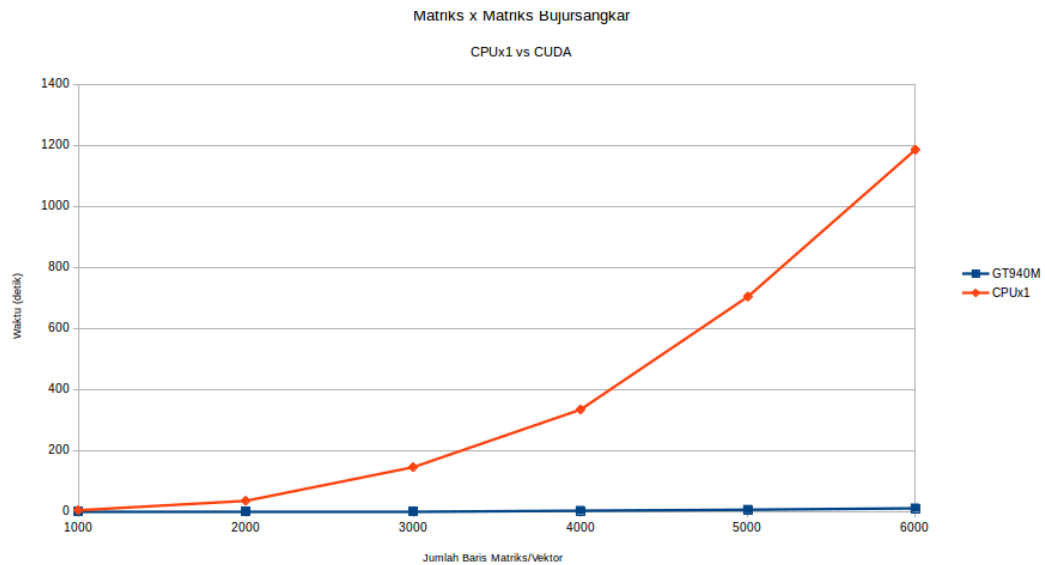
3.1.1.2 Hasil Eksperimen

Hasil eksekusi program perkalian matriks-vektor sekuensial dan CUDA (pada GPU 940M) dapat dilihat pada grafik gambar 3.1. Pada gambar tersebut terlihat bahwa waktu eksekusi program sekuensial dan CUDA masih sama dengan ukuran data 10.000 (matriks 10.000×10.000 dan vektor 10.000) hingga 15.000. Tapi pada ukuran data 20.000 hingga 40.000 terlihat bahwa program CUDA membutuhkan waktu yang lebih sedikit dibanding program sekuensial. Pada ukuran data terbesar di eksperimen ini, terlihat bahwa waktu yang dibutuhkan CUDA hanyalah $1/2$ dari program sekuensial.



Gambar 3.1: Waktu eksekusi program matriks x vektor sekuensial dan CUDA

Perbedaan waktu eksekusi terlihat semakin jelas pada hasil eksekusi program perkalian matriks bujursangkar pada grafik gambar 3.2. Waktu eksekusi program sekuensial dan CUDA hanya sama pada ukuran data 1.000 (perkalian dua matriks 1.000×1.000). Sedangkan untuk ukuran data 2.000 sampai 6.000, program CUDA membutuhkan waktu yang jauh lebih sedikit. Bahkan pada ukuran data terbesar di eksperimen ini, terlihat bahwa waktu yang dibutuhkan CUDA hanyalah $1/1000$ dari program sekuensial.



Gambar 3.2: Waktu eksekusi program matriks x matriks sekuensial dan CUDA

3.1.2 Program CUDA dengan Variasi ukuran *Grid/Block*

Tujuan dari eksperimen ini adalah membandingkan kinerja perkalian matriks-vektor/matriks bujursangkar CUDA dengan variasi ukuran *grid* dan *block*.

3.1.2.1 Deskripsi Program

Ada tujuh buah program⁴ yang digunakan pada eksperimen ini. Semua program ini diadaptasi dari satu sumber eksternal⁵. Ketujuh program ini hanya dibedakan oleh nilai `TILE_SIZE`-nya, yaitu sesuai dengan angka terakhir pada nama programnya (kecuali program `mmul_cuda.cu` yang memiliki `TILE_SIZE = 10`):

```
$ mul_cuda.cu [baris A] [kolom A/baris B] [kolom B] 0 [repetisi]
$ mul_cuda_20.cu [baris A] [kolom A/baris B] [kolom B] 0 [repetisi]
$ mul_cuda_30.cu [baris A] [kolom A/baris B] [kolom B] 0 [repetisi]
$ mul_cuda_40.cu [baris A] [kolom A/baris B] [kolom B] 0 [repetisi]
$ mul_cuda_50.cu [baris A] [kolom A/baris B] [kolom B] 0 [repetisi]
$ mul_cuda_60.cu [baris A] [kolom A/baris B] [kolom B] 0 [repetisi]
```

⁴<https://github.com/yohanesgultom/parallel-programming-assignment/tree/master/PR3/problem2>

⁵Sumber:<https://gist.github.com/wh5a/4313739>

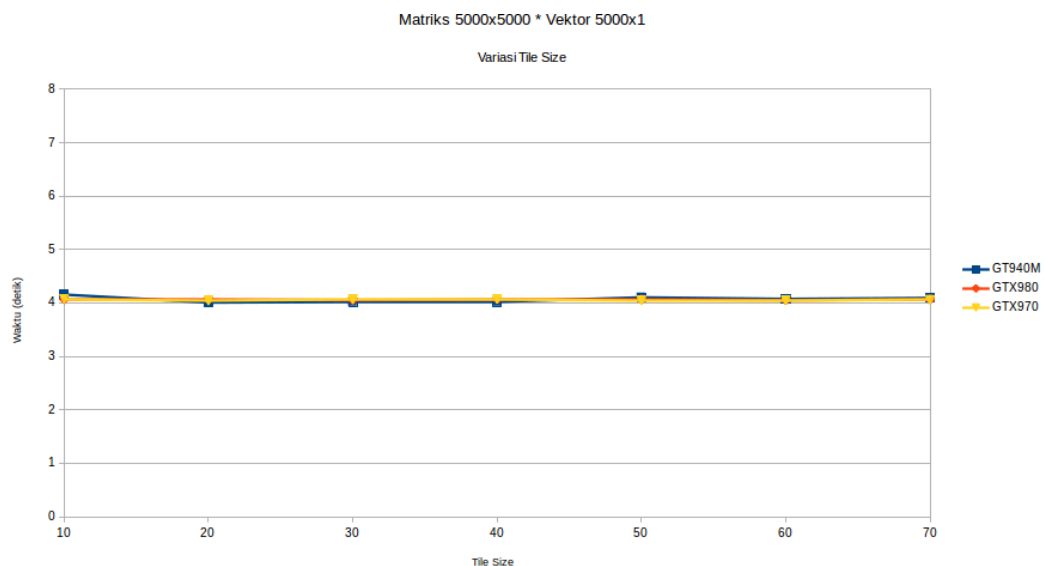
```
$ mul_cuda_70.cu [baris A] [kolom A/baris B] [kolom B] 0 [repetisi  
]
```

Seperti yang dijelaskan di eksperimen sebelumnya, program `mmul_cuda.cu` dan `mmul_cuda_XX.cu` ini memiliki ukuran *threads/block* tetap yaitu `(TILE_WIDTH, TILE_WIDTH)`. Sedangkan ukuran *grid* akan bergantung pada ukuran matriks/vektor dengan rumus:

```
GRID SIZE = ((baris vektor-1) / TILE_WIDTH + 1, (baris matriks-1)  
/ TILE_WIDTH + 1)
```

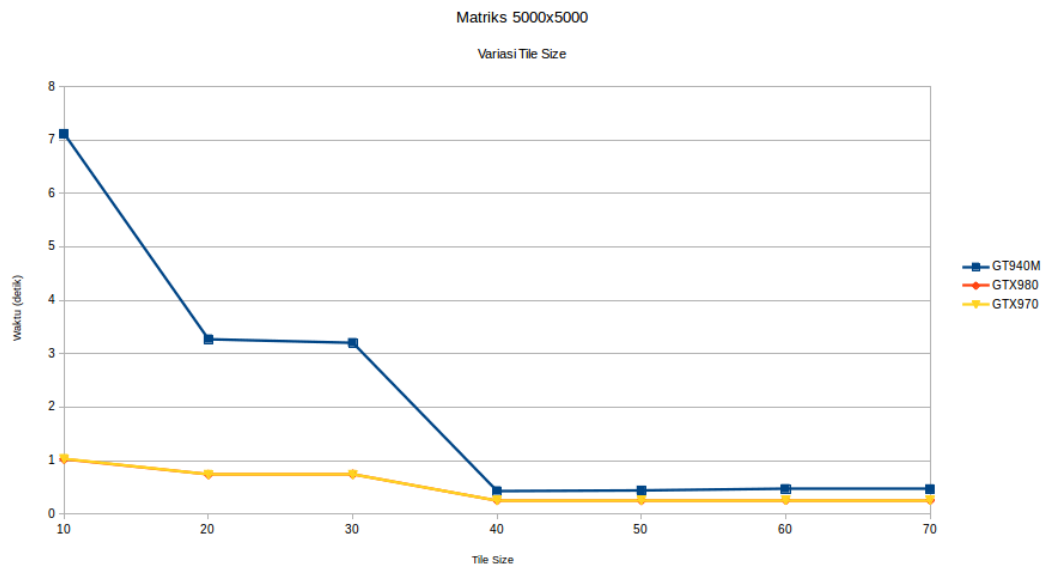
3.1.2.2 Hasil Eksperimen

Eksperimen perkalian matriks-vektor CUDA dengan ukuran data tetap (matriks 5.000×5.000 dan vektor 5.000) variasi ukuran *block* dan *grid* pada tiga buah GPU (GTX 980, GTX 970 dan 940M) memberikan hasil seperti pada grafik gambar 3.3. Hasil eksperimen menunjukkan bahwa tidak ada perbedaan signifikan ketika dilakukan variasi ukuran *block* dan *grid*. Hal ini terjadi secara konsisten di semua GPU yang digunakan.



Gambar 3.3: Waktu eksekusi program matriks x vektor CUDA dengan variasi ukuran *block* dan *grid*

Sedangkan pada perkalian matriks bujursangkar (dua buah matriks 5.000×5.000) yang hasilnya ditunjukkan pada gambar 3.4, terlihat adanya penurunan waktu eksekusi ketika ukuran `TILE_SIZE` diperbesar (ukuran *threads/block* semakin besar dan ukuran *grid* semakin kecil). Tetapi ketika ukuran `TILE_SIZE` dibuat lebih besar dari 40, tidak ada perubahan waktu eksekusi yang signifikan.



Gambar 3.4: Waktu eksekusi program matriks bujursangkar CUDA dengan variasi ukuran *block* dan *grid*

3.1.3 Program CUDA *Shared Memory*, CUBLAS dan MPI

Pada eksperimen ini akan diamati perbedaan waktu eksekusi program perkalian matriks-vektor CUDA yang hanya menggunakan *global memory* (normal) dan yang menggunakan *shared memory* (*optimized*). Selain itu untuk kasus perkalian matriks bujursangkar, akan dibandingkan waktu eksekusi program CUDA dengan *global memory* (normal), CUDA dengan *shared memory* (*optimized*), CUBLAS dan MPI (25 CPU pada *cluster UCSD*).

3.1.3.1 Deskripsi Program

1. Program perkalian matriks-vektor/matriks bujursangkar paralel dengan CUDA `mmul_cuda.cu`⁶. Program ini diadaptasi dari satu sumber eksternal⁷.

Cara penggunaannya:

```
$ mmul_cuda.cu [baris A] [kolom A/baris B] [kolom B] 0 [
  repetisi] [optimized]
```

Argumen program:

- (a) Baris matriks A: ukuran baris atau kolom matriks bujursangkar

⁶https://github.com/yohanesgultom/parallel-programming-assignment/blob/master/PR3/problem2/mmul_cuda.cu

⁷Sumber: <https://gist.github.com/wh5a/4313739>

- (b) Kolom matriks A/baris matriks B: ukuran kolom matriks A/baris matriks B
- (c) Repetisi: banyaknya perkalian diulang (untuk diambil rata-ratanya)
- (d) *Optimized*: menggunakan *global memory* saja (0) atau optimasi dengan *shared memory* (1)

Program `mmul_cuda.cu` ini memiliki ukuran *threads/block* tetap yaitu (`TILE_WIDTH`, `TILE_WIDTH`) dengan nilai `TILE_WIDTH = 10`. Sedangkan ukuran *grid* akan bergantung pada ukuran matriks/vektor dengan rumus:

```
GRID SIZE = ((baris vektor-1) / TILE_WIDTH + 1, (baris
             matriks-1) / TILE_WIDTH + 1)
```

2. Program perkalian matriks-vektor/matriks bujursangkar paralel dengan CUBLAS `mmul_cublas.cu`⁸. Program ini diadaptasi dari satu sumber eksternal⁹. Cara penggunaannya:

```
$ mmul_cublas.cu [baris A] [kolom A/baris B] [kolom B] [
  repetisi]
```

Argumen program:

- (a) Baris matriks A: ukuran baris atau kolom matriks bujursangkar
- (b) Kolom matriks A/baris matriks B: ukuran kolom matriks A/baris matriks B
- (c) Repetisi: banyaknya perkalian diulang (untuk diambil rata-ratanya)

3. Program perkalian matriks-vektor/matriks bujursangkar paralel dengan MPI `mmul_rowwise.c`¹⁰. Cara penggunaannya:

```
$ mmul_rowwise.c [baris A] [kolom A/baris B] [kolom B]
```

Argumen program:

- (a) Baris matriks A: ukuran baris atau kolom matriks bujursangkar
- (b) Kolom matriks A/baris matriks B: ukuran kolom matriks A/baris matriks B

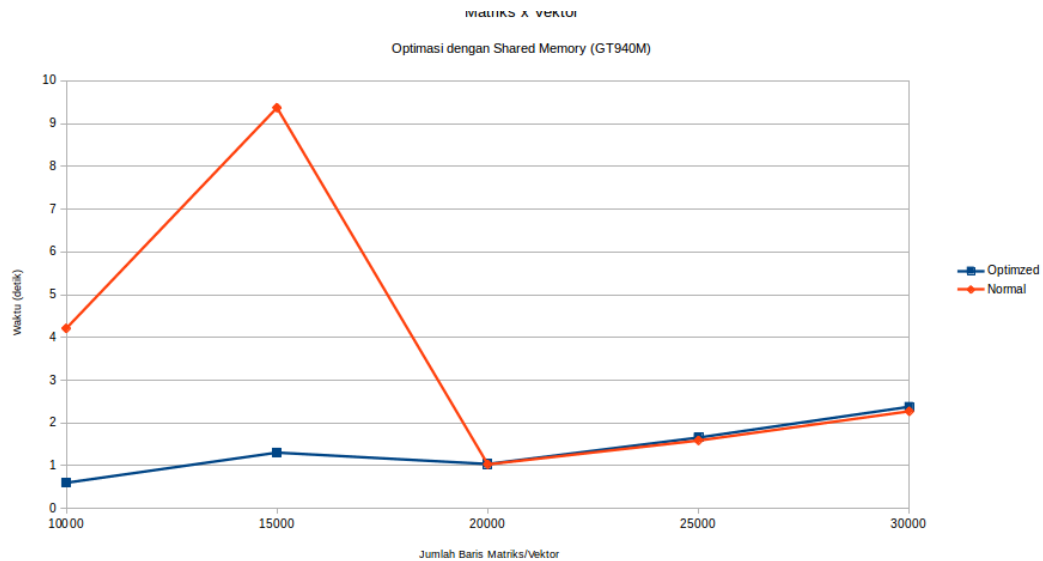
⁸https://github.com/yohanesgultom/parallel-programming-assignment/blob/master/PR3/problem2/mmul_cublas.cu

⁹https://raw.githubusercontent.com/sol-prog/cuda_cublas_curand_thrust/master/mmul_1.cu

¹⁰https://github.com/yohanesgultom/parallel-programming-assignment/blob/master/PR3/problem2/mmul_rowwise.c

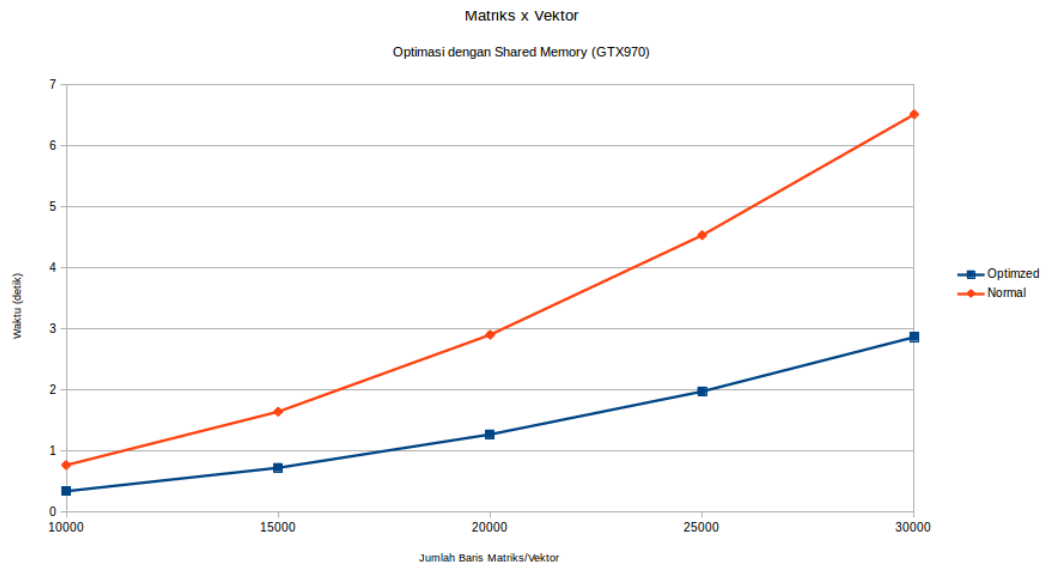
3.1.3.2 Hasil Eksperimen

Seperti yang terlihat pada gambar 3.5, hasil eksekusi perkalian matriks-vektor CUDA yang hanya menggunakan *global memory* dan yang dioptimasi dengan menggunakan *shared memory* pada GPU 940M menunjukkan bahwa optimasi dengan *shared memory* hanya mengurangi waktu eksekusi untuk ukuran data di bawah 20.000 (matriks 20.000×20.000 dan vektor 20.000). Sedangkan untuk ukuran yang lebih besar waktu eksekusinya sama.

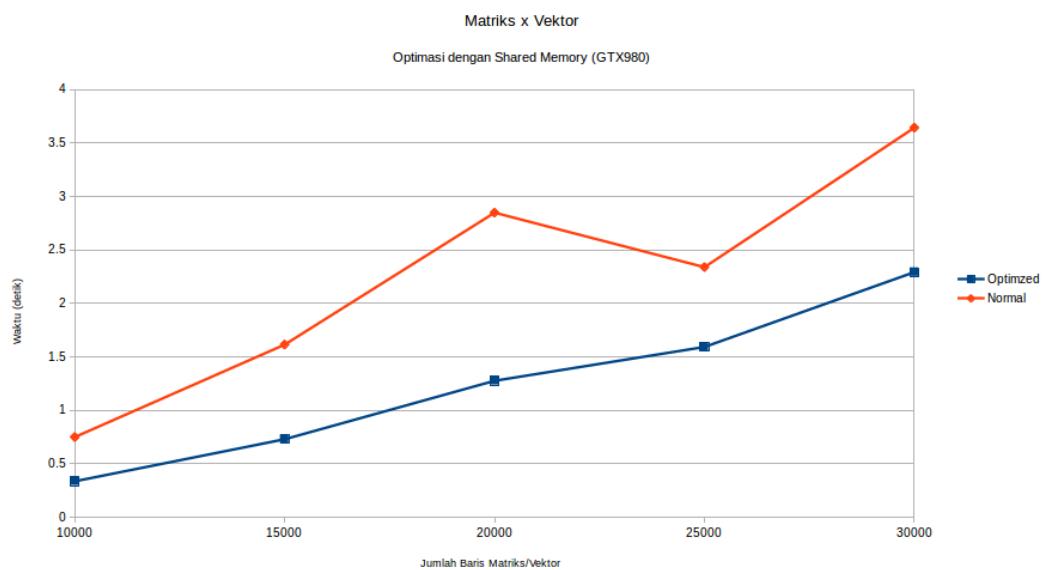


Gambar 3.5: Waktu eksekusi program matriks x vektor *global memory* dan *shared memory* (940M)

Hasil berbeda kami dapati pada GPU GTX 970 (gambar 3.6) dan GTX 980 (gambar 3.7) di mana program perkalian matriks-vektor dengan *shared memory* selalu lebih cepat (0,5-3 detik) dari program yang hanya menggunakan *global memory*. Menurut kami hal ini disebabkan karena sumber daya GPU 940M juga dipakai oleh OS mesinnya untuk menampilkan *Graphical User Interface* (GUI). Di mana untuk GPU lainnya, OS yang digunakan tidak menggunakan GUI sehingga sumber daya GPU hanya digunakan oleh program CUDA.



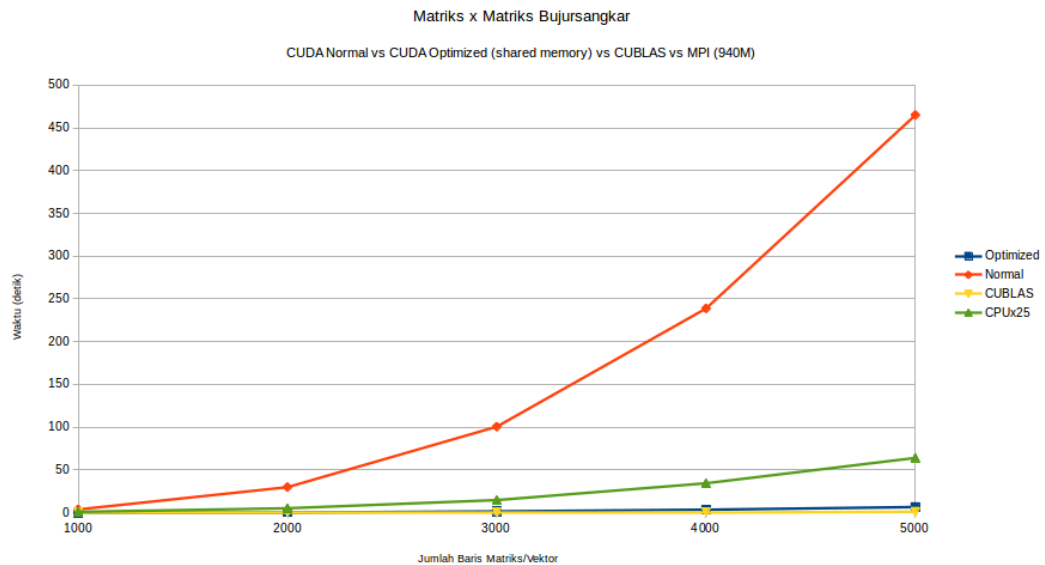
Gambar 3.6: Waktu eksekusi program matriks x vektor *global memory* dan *shared memory* (GTX 970)



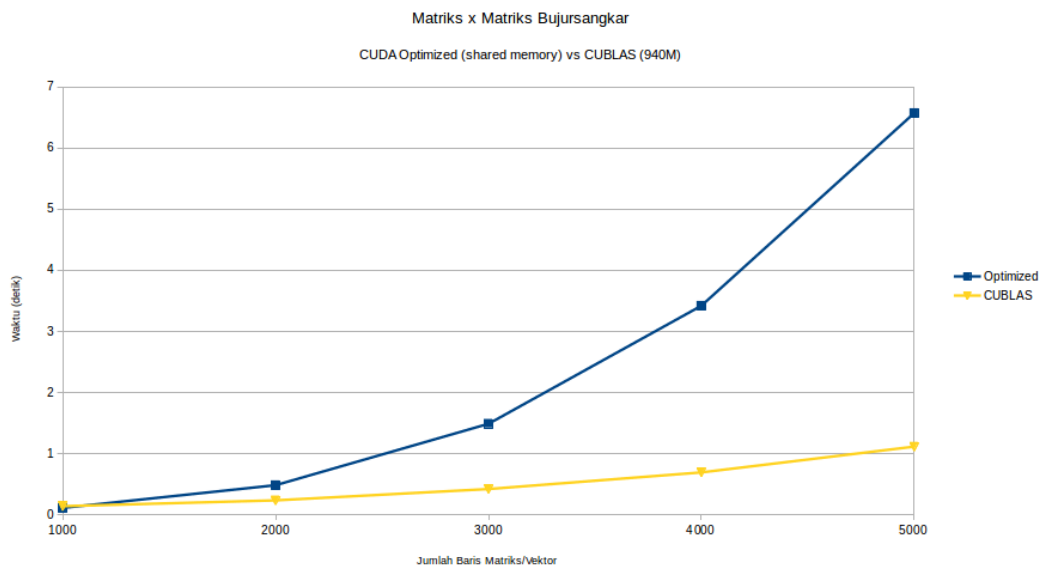
Gambar 3.7: Waktu eksekusi program matriks x vektor *global memory* dan *shared memory* (GTX 980)

Pada kasus perkalian matriks bujursangkar, perbandingan dilakukan sekaligus pada program CUDA dengan *global memory*, CUDA dengan *shared memory*, CUBLAS dan MPI. Pada GPU 940M (gambar 3.8) terlihat bahwa yang paling lambat adalah program CUDA dengan *global memory* saja. Urutan program dari yang paling lambat sampai paling cepat adalah program CUDA dengan *global memory* saja, MPI (*cluster 25 CPU*), CUDA dengan *shared memory* dan CUBLAS.

Jika dilihat lebih rinci (gambar 3.9), terlihat bahwa sebenarnya pada ukuran matriks di bawah 1.000, program CUDA dengan *shared memory* sama cepat dengan CUBLAS. Baru pada ukuran lebih besar dari itu CUBLAS lebih cepat daripada program CUDA dengan *shared memory*.



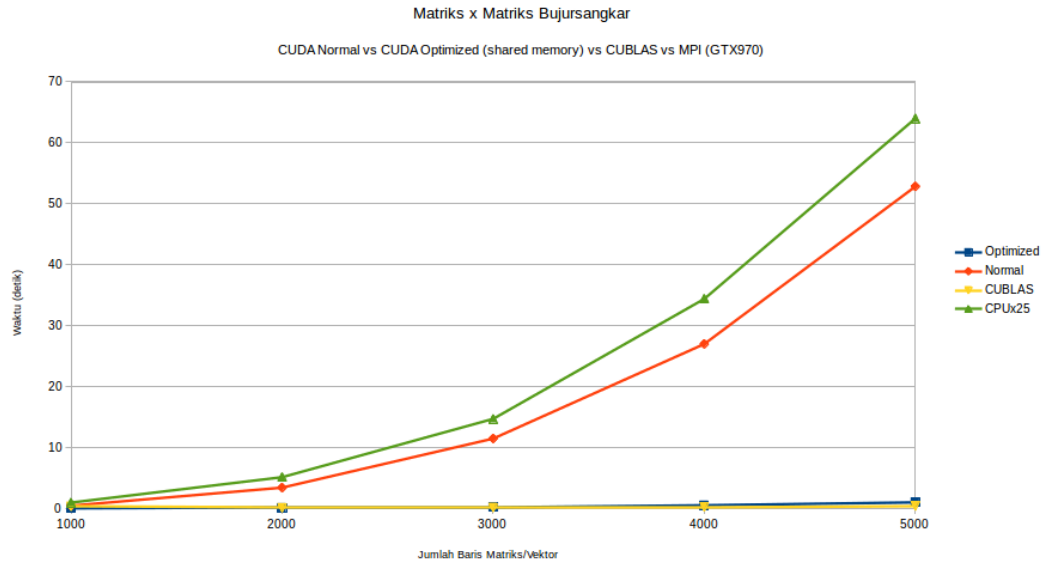
Gambar 3.8: Waktu eksekusi program perkalian matriks bujursangkar *global memory*, *shared memory*, CUBLAS dan MPI (940M)



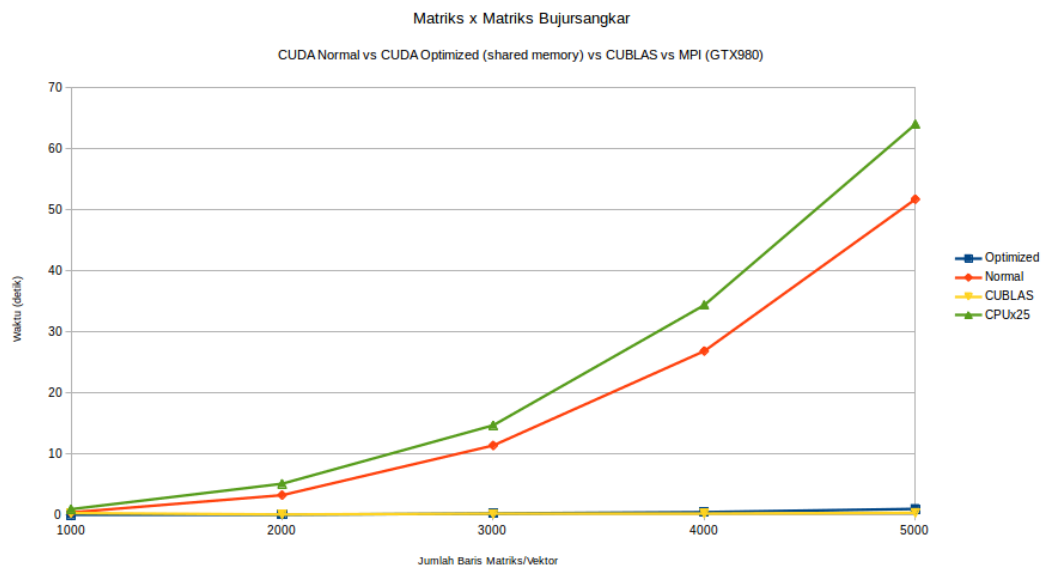
Gambar 3.9: Waktu eksekusi program perkalian matriks bujursangkar *shared memory* dan CUBLAS (940M)

Hasil yang berbeda ditunjukkan pada perkalian matriks bujursangkar pada GTX 970 dan GTX 980 (gambar 3.10 dan gambar 3.11), yaitu MPI (*cluster* 25 CPU)

adalah yang paling lambat dibanding yang lain. Setelah program MPI, urutan program yang terlambat hingga tercepat adalah CUDA dengan *global memory*, CUDA dengan *shared memory* dan CUBLAS.



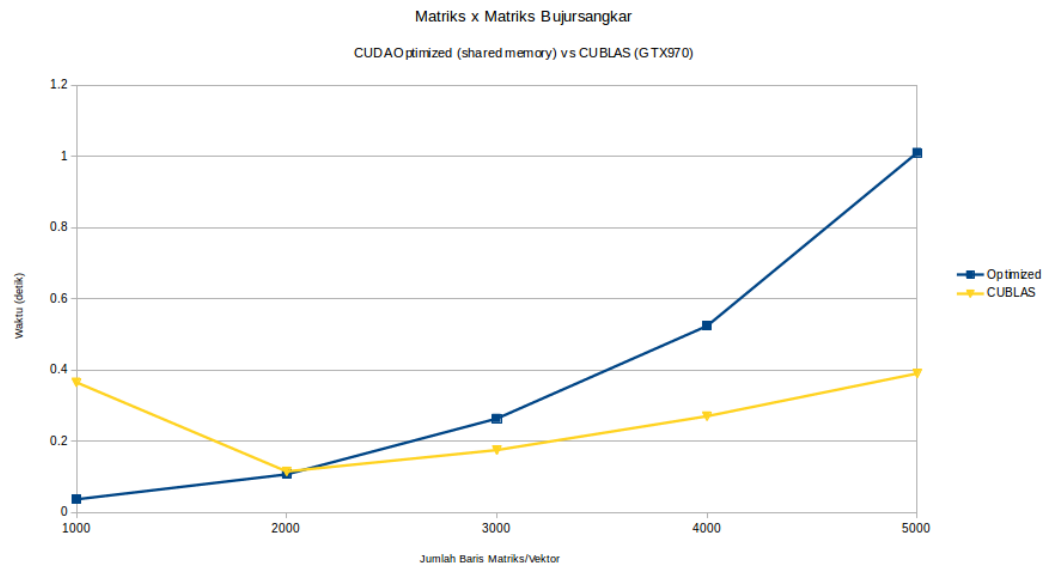
Gambar 3.10: Waktu eksekusi program perkalian matriks bujursangkar *global memory*, *shared memory*, CUBLAS dan MPI (GTX 970)



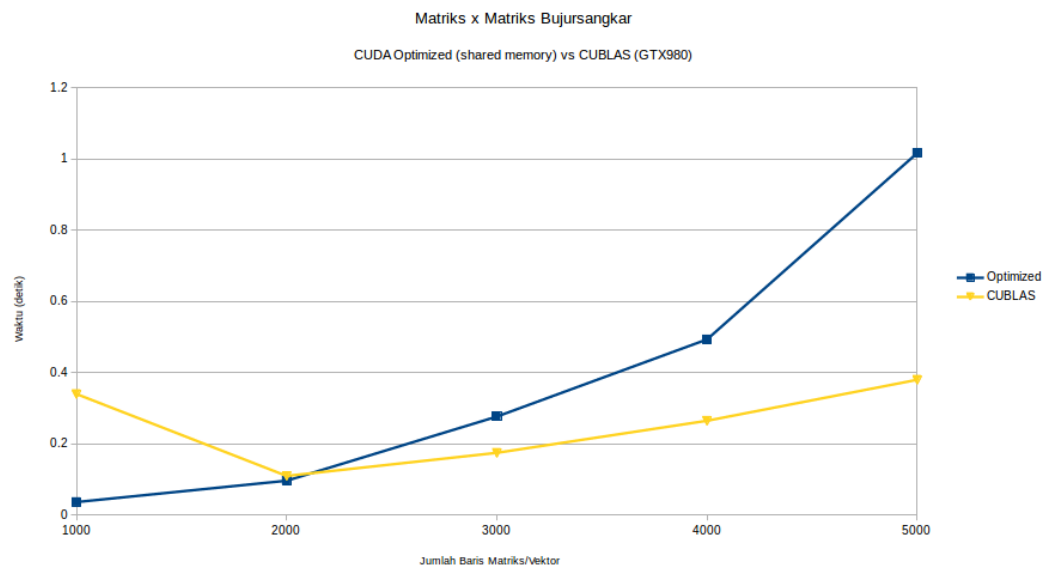
Gambar 3.11: Waktu eksekusi program perkalian matriks bujursangkar *global memory*, *shared memory*, CUBLAS dan MPI (GTX 980)

Hasil perbandingan waktu eksekusi perkalian matriks bujursangkar CUDA dengan *shared memory* dan CUBLAS pada GTX 970 dan GTX 980 (gambar 3.12 dan gambar 3.11) ternyata agak mirip dengan hasil pada 940M (gambar 3.9), yaitu

CUBLAS lebih cepat dari CUDA dengan *shared memory* pada ukuran matriks yang besar (dalam eksperimen ini lebih besar dari 2.000).



Gambar 3.12: Waktu eksekusi program perkalian matriks bujursangkar *shared memory* dan CUBLAS (970)



Gambar 3.13: Waktu eksekusi program perkalian matriks bujursangkar *shared memory* dan CUBLAS (980)

3.2 Kesimpulan

Berdasarkan hasil eksperimen di atas, kami menarik beberapa kesimpulan:

1. GPU (CUDA) lebih cepat dari CPU (baik sekuensial maupun paralel dengan MPI) untuk kasus perkalian matriks/vektor dengan banyak elemen (dan operasi)
2. Program CUDA dapat dioptimasi dengan menggunakan *shared memory* karena *shared memory* dapat diakses lebih cepat dari *global memory*
3. Dalam kasus dunia nyata, penggunaan library CUBLAS untuk melakukan operasi matriks/vektor lebih disarankan karena sudah dioptimasi khususnya untuk operasi terhadap data yang sangat besar
4. Jika menggunakan CUDA perlu diperhatikan konfigurasi ukuran *block* dan *grid* yang optimal untuk algoritma dan arsitektur GPU yang dipakai karena pada operasi perkalian matriks bujursangkar waktu proses akan lebih lambat jika konfigurasi tidak sesuai

BAB 4

CONJUGATE GRADIENT METHOD

4.1 Pendahuluan

Conjugate gradient method digunakan untuk menyelesaikan persamaan linear $Ax = b$ di mana matriks koefisiennya bersifat simetris dan definit positif. Matriks A $n \times n$ dikatakan simetris jika $a_{ij} = a_{ji}$ untuk $i, j = 1, \dots, n$. Matriks A dikatakan definit positif jika untuk setiap vektor x bukan nol, perkalian skalar $x \cdot Ax$ menghasilkan nilai lebih besar dari nol. Algoritma conjugate gradient method ditunjukkan pada Gambar 4.1. r_k merupakan sisa atau selisih antara b dengan Ax_k , sedangkan p_k merupakan *search direction*.

```

k = 0; x0 = 0; r0 = b
while (||rk||2 > tolerance) and (k < max_iter)
    k++
    if k = 1
        p1 = r0
    else
        βk =  $\frac{r_{k-1} \cdot r_{k-1}}{r_{k-2} \cdot r_{k-2}}$  // minimize ||pk - rk-1||
        pk = rk-1 + βkpk-1
    endif
    sk = Apk
    αk =  $\frac{r_{k-1} \cdot r_{k-1}}{p_k \cdot s_k}$  // minimize q(xk-1 + αpk)
    xk = xk-1 + αkpk
    rk = rk-1 - αksk
endwhile
x = xk

```

Gambar 4.1: Algoritma Conjugate Gradient Method.

Pada implementasi paralel CGM, matriks A akan didistribusikan menggunakan fungsi `MPI_scatter` kepada setiap proses dan masing-masing proses mendapat sebanyak $n \times n / p$ data. Algoritma tersebut dijalankan di setiap proses untuk setiap bagian distribusi matriks A .

4.2 Eksperimen

@todo

4.3 Kesimpulan

@todo

BAB 5

MOLECULAR DYNAMICS: AMBER

5.1 Pendahuluan

AMBER (*Assisted Model Building with Energy Refinement*) adalah paket program untuk menjalankan simulasi dinamika molekular (*molecular dynamics*) yang dikembangkan oleh *University of California, San Fransico*. Alamat *website* resmi dari AMBER adalah <http://ambermd.org>.

AMBER digunakan untuk berbagai eksperimen dinamika molekular seperti simulasi pergerakan fisik dari atom dan molekular, pemodelan protein dan eksperimen yang terkait dengan perancangan obat (*drug discovery*).

AMBER didistribusikan dalam dua bagian:

1. AMBER (berbayar, versi terakhir 14)
2. AMBERTool (*opensource* GPL, versi terakhir 15)

AMBER memiliki dua mode instalasi, yaitu berbasis CPU (dengan OpenMPI) dan berbasis GPU (dengan CUDA). Petunjuk instalasi dapat dilihat di <http://jswails.wikidot.com/installing-amber14-and-ambertools14>.

5.2 Eksperimen

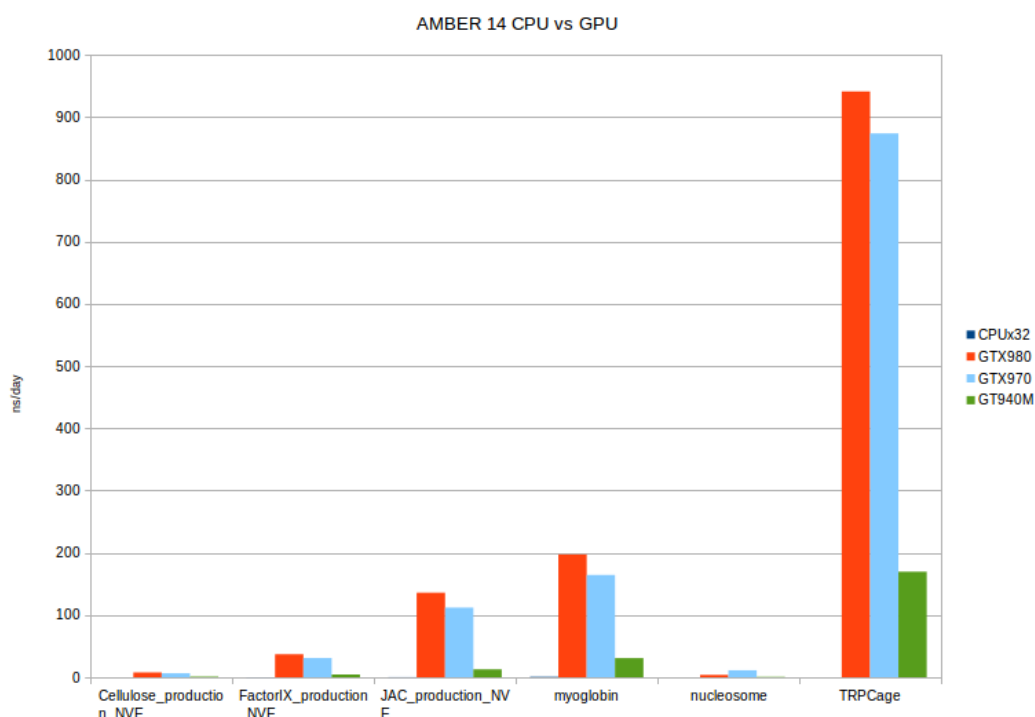
Percobaan dilakukan dengan menjalankan 6 buah eksperimen yang disediakan pada AMBER GPU *Benchmark Suite* yang diperoleh dari *website* resmi AMBER http://ambermd.org/Amber14_Benchmark_Suite.tar.bz2. Enam buah eksperimen yang kami jalankan adalah:

1. TRPCAGE Production (304 atoms, 1.000 nsteps)
2. Myoglobin Production (2,492 atoms, 25.000 nsteps)
3. JAC Production NVE (23,558 atoms, 1.000 nsteps)
4. Nucleosome Production (25,095 atoms, 200 nsteps)
5. Factor IX Production NVE (90,906 atoms, 10.000 nsteps)

6. Cellulose Production NVE (408,609 atoms, 10.000 nsteps)

Pada eksperimen ini kami mengamati kecepatan proses (ns/day) pada mesin yang berbeda, yaitu:

1. UCSD cluster 32 CPU + OpenMPI (nbc-233.ucsd.edu)
2. GTX 980 + CUDA 7.0 (Fasilkom UI)
3. GTX 970 + CUDA 7.0 (Fasilkom UI)
4. GT 940M + CUDA 7.5 (PC/notebook)



Gambar 5.1: Eksperimen AMBER pada GPU (CUDA) dan CPU *cluster* (MPI)

Hasil yang kami dapatkan adalah direpresentasikan oleh diagram pada gambar 5.1. Pada hasil eksperimen ini kinerja (ns/day) *cluster* CPU (MPI) sangatlah kecil jika dibandingkan dengan kinerja semua tipe GPU, yaitu selalu di bawah 1,0. Nilai kinerja GPU yang tercepat adalah GTX 980 diikuti GTX 970 yang sedikit di bawahnya. Kinerja GPU 940M cukup jauh di bawah kedua GPU lainnya tapi tetap masih 2-30 kali lebih cepat daripada *cluster* CPU.

Selain itu hasil eksperimen juga menunjukkan bahwa eksperimen dinamika molekular yang paling membutuhkan banyak sumber daya (ns/day terkecil) adalah Cellulose Production NVE dan Nucleosome Production yang memiliki rasio jumlah atom : nsteps terbesar.

5.3 Kesimpulan

Berdasarkan hasil eksperimen yang kami lakukan, kami mengambil kesimpulan sebagai berikut:

1. AMBER 14 berjalan jauh lebih efisien di GPU dibanding di CPU (MPI) bahkan sampai 200x lebih cepat (Myoglobin Production) bahkan ketika dibandingkan dengan 940M yang termasuk kelas *mainstream-mobile*.
2. AMBER 14 menggunakan kemampuan GPU dengan optimal sehingga bias terlihat jelas perbedaan kemampuan antar GPU. Dalam eksperimen ini 940M yang merupakan GPU kelas *mainstream-mobile* terlihat jelas kinerjanya jauh di bawah GTX 970 dan GTX 980 yang termasuk kelas *high-end-PC*.
3. Kebutuhan sumberdaya komputasi percobaan dinamika molekular tergantung pada banyaknya jumlah atom serta nsteps yang dilakukan. Semakin besar rasio jumlah atom : nsteps, maka semakin besar sumberdaya komputasi yang dibutuhkan dan semakin lama waktu proses yang dibutuhkan.

BAB 6

DAFTAR KONTRIBUSI ANGGOTA

Kontribusi tiap anggota kelompok pada tugas ini adalah sebagai berikut:

Otniel Yosi Viktorisa:

1. Eksperimen, presentasi & laporan topik 1 perilaku *block* dan *grid* pada CUDA
2. Eksperimen, presentasi & laporan topik 3 *Conjugate Gradient Method*

Yohanes Gultom:

1. Eksperimen, presentasi & laporan topik 2 perkalian matriks-vektor dan matriks bujursangkar dengan CPU (sekuensial), CUDA, CUDA dengan *shared memory*, CUBLAS dan CPU (*cluster MPI*)
2. Instalasi AMBER 14 dan AMBER Tools 15 pada server GTX 980 dan GTX 970 Fasilkom UI sebagai persiapan topik 4
3. Eksperimen, presentasi & laporan topik 4 AMBER dengan enam jenis *benchmarking set* dari *website* resmi AMBER pada 3 GPU dan 1 cluster (UCSD)

Muhammad Fathurachman:

1. Mengeksplorasi eksperimen topik 2 matriks-vektor dan matriks bujursangkar dengan CUDA