**Тестирование различных вариантов запуска программы NAMD на ГПУ части Ломоносова, 7 ноября 2013.**

**Параметры компиляции:**

NAMD версия 2.9

Компилятор: Intel

MPI: Intel MPI

CUDA: 5.0 (версия с и без CUDA)

Все библиотеки и компилятор подгружены из стандартных модулей доступных на 7 ноября.

**Тестирование системы 1.**

(нуклеосома в воде 1.5 млн атомов, радиусы обрезания 12 А, rigid bonds =all, PME каждый 2 шаг )

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| Количество узлов | Tasks-per-node | CUDA on/off | Производительность,  Количество дней необходимое для расчета 1 наносекунды |
| 64 | 8 | On | 0.25 |
| 64 | 8 | Off | 0.37 |
| 128 | 8 | On | 0.21 |
| 128 | 8 | off | 0.20 |
| 128 | 4 | on | 0.20 |
| 128 | 4 | off | 0.43 |
| 256 | 8 | on | 0.19 |
| 256 | 8 | off | 0.15 |
| 256 | 4 | on | 0.19 |
| 256 | 2 | on | 0.18 |
|  |  |  |  |
|  |  |  |  |

**Тестирование системы 2.**

(нуклеосома в воде 1.5 млн атомов, радиусы обрезания 12 А, rigid bonds =all, PME каждый 2 шаг, c дополнительным расчетом расстояний между концами ДНК на каждом шаге )

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| Количество узлов | Tasks-per-node | CUDA on/off | Производительность,  Количество дней необходимое для расчета 1 наносекунды |
| 32 | 8 | On | 0.4 |
| 64 | 8 | off | 0.38 |
| 64 | 8 | On | 0.3 |
| 64 | 4 | on | 0.3 |
| 64 | 2 | on | 0.43 |
| 128 | 8 | On | 0.66 |
| 128 | 8 | off | 0.54 |
| 256 | 2 | off | 0.39 |
| 256 | 8 | off | 2 |
| 256 | 8 | on | 2.5 |
| 512 | 1 | off | 0.39 |
|  |  |  |  |
|  |  |  |  |

**Тестирование системы 3, сравнение с Cray XE6**

(нуклеосома в воде 350 тыс. атомов, радиусы обрезания 12 А, rigid bonds =all, PME каждый 2 шаг)

|  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- |
| Количество узлов | Tasks-per-node | CUDA on/off | Производительность,  Количество дней необходимое для расчета 1 наносекунды | Cray XE6 |
| 32 | 8 | On | 0.13 |  |
| 32 | 8 | off | 0.18 |  |
| 64 | 8 | off | 0.12 | 0.12 |
| 64 | 8 | On | Проблема запуска |  |
| 80 | 8 | off | 0.14 |  |
| 80 | 8 | on | 0.17 |  |
| 256 | 8 |  |  | 0.045 |
| 512 | 8 |  |  | 0.029 |