

VCCクラスターを利用したLAMMPSの GPU計算・MPI並列計算(予告資料)

防衛大 萩田

2016.6.1 13:30～15:00

高分子材料系LAMMPS大規模計算の活用入門セミナー @阪大うめきた
高分子材料系LAMMPS大規模計算の活用入門

1

LAMMPSとアクセラレータ

- LAMMPSは、TITANの大規模計算で利用。
 - GPGPUを利用した計算の高速化。
- 次は、CORIで、Xeon Phi (KNL)。
- GPGPUやXeon Phiなどは、HPCで重要。
 - 特に、MD等のコモディティ化された計算の実用では、中規模クラスターでのコスト問題がポイント。
- Sandiaで、Kokkosライブラリで、アクセラレータへの包括的な対応を検討。
- KNLについては、Intelの支援が、積極的。

2

米国 / Intel / LAMMPS

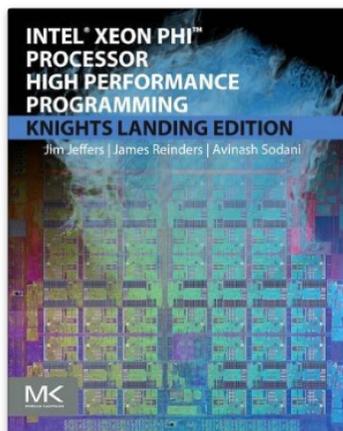


Classical Molecular Dynamics Simulations with LAMMPS Optimized for Knights Landing

May 2, 2016

Submitted by WILLIAM B. (Intel) on May 2, 2016 [翻訳](#)

- 下記の本では、LAMMPSの最適化作業の実例を紹介しているとのこと。
- すなわち、
**LAMMPSは
KNL-ready.**



Intel Xeon Phi Processor High Performance Programming, Second Edition: Knights Landing Edition (英語) ペーパーバック - 2016/7/15
James Jeffers (著), James Reinders (著), & 1 その他

すべてのフォーマットおよびエディションを表示する

ペーパーバック
¥ 7,217 **プライム**

¥ 7,217 より 1 新品

3

米国 / CORI phase 2

- KNLベースのスパコン。
 - Over 9,300 single-socket nodes in the system
 - 96 GB DDR4 memory per node using 6 channels
 - 30ペタ。
 - Dragonfly トポロジ。
 - 3dトーラスに比べhop数減。
 - Fat-tree比、倍のglobal BW.

東大Oakforest-PACS
(25ペタ+)
8208ノード。
Omni-Path fat-tree
128GB mem /node?

CORI PHASE II SCHEDULE

Before Cori can be released to users, it must be delivered, integrated with Phase I, and accepted. This page is the resource for the Cori upgrade and installation schedule.

Impact on NERSC Users

While NERSC is making every effort to minimize inconvenience to users, there are some unavoidable downtimes of Cori Phase I for the upgrade of its operating system and integration with Cori Phase II that will total up to seven weeks.

[Back to Top](#)

Cori Phase II Preparation and Installation Key Dates

Below is the current schedule for the installation of Cori (*tentative dates are italicized and followed by an asterisk*)

Event	Date
Cori Phase I Operating System Update	June 6-20, 2016
Cori Phase II Delivery	<i>mid-July, 2016 *</i>
Cori Phase I & Cori Phase II Integration	<i>Beginning late August, 2016 (5 weeks) *</i>
Cori Acceptance testing	<i>Beginning in September *</i>
NESAP Early Users on Cori	<i>Beginning in October *</i>

4

中国 / Intel / LAMMPS

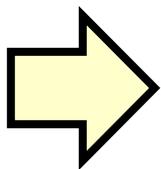
HPCwire

April 28, 2015

Blacklisting Doesn't Slow Intel Investment in China

John Russell

- first **Intel Parallel Computing Center in China** with the Chinese Academy of Sciences
- initial 2-year collaboration around several key scientific codes, but a **specific one is LAMMPS.**



中国でも、LAMMPSは、いろいろ使っている模様。

2台の100ペタ計算機では??

Intel phi KNL / LAMMPS



Articles

Molecular Dynamics Research Enhanced by More Scalable LAMMPS HPC Code

Thu, 04/14/2016 - 12:28pm

by Linda Barney

April 14, 2016

- Introducing Intel Parallel Computing Centers RWTH Aachen and CAS-CINC
 - Intel Parallel Computing Center (Intel PCC) at RWTH Aachen University (located in Aachen, Germany)
 - Tersoff and Buckingham ポテンシャル計算の最適化 (完了)
 - PPPMの高速化。
 - Computer Network Information Center (CNIC) of the Chinese Academy of Sciences (CAS-CNIC)
 - DPD計算。(公開直前?)
 - Our work is also focusing on doing code modernization to improve vectorization to support offload to coprocessors and to support fast math calculations.”

6

日本／●●／LAMMPS

- 微妙かも。（そこまで、力を入れていない。）
- 名大で、FX100でオマケ程度に実施。
 - 数学関数(exp, pow)の問題 (inline展開)。
 - SIMDの問題。
- RISTがワークショップ開催。(2016年2月)
- 東大の新スパコン(with KNL)は、IntelのLAMMPSチューニングの恩恵が受けられる！

7

LAMMPSでのアクセラレータ対応

① USER-CUDA package

- 基本、GPU内での計算のみに対応。規模が限定的。

② GPU package

- CPUとGPUを併用した計算に対応。
- 東工大 TSUBAME2.5での動作を確認済。

③ USER-INTEL package

- Xeon PhiのOffloadモードに対応。
- 名大CX400での動作を確認済。

④ KOKKOS package

- 最近のGPUにも対応。（Cuda6.5以上、C++11）
- 現状、XeonPhiは、Nativeモードのみ対応。
 - 名大CX400などの共用スパコン環境では、利用不可。

最近のアップデート

- 3 May 2016
 - Upgrade to the Kokkos library included in LAMMPS.
- 22 Mar 2016
 - Mike Brown (Intel) sent some performance enhancements to the USER-INTEL package.
- 21 Mar 2016
 - There is also an upgrade to the KOKKOS package for accelerated styles.
- 25 Feb 2016
 - Fixed a bug with the USER-CUDA package not compiling, due to including some not-ready-to-release code.
- Stable version (16 Feb 2016)
- 15 Feb 2016
 - Mike Brown (Intel) made an update to the USER-INTEL package, which also added some new styles:
- 26 Jan 2016
 - Mike Brown (Intel) provided some new bond styles for the USER-INTEL package:

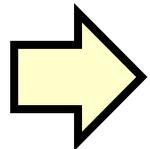
最近のアップデート 2

- 19 Dec 2015
 - Rodrigo Canales, Markus Hohnerbach, Ahmed E. Ismail, and Paolo Bientinesi have added optimized Tersoff and Buckingham potentials to the USER-INTEL package. The speed-up can be greater than 3x for simulations on Intel processors and coprocessors (Xeon Phi).
- 20 Nov 2015
 - Trung Nguyen enhanced the pair_style tersoff/gpu potential in the GPU package to allow for multiple GPU threads/atom.
- 5 Oct 2015
 - Mike Brown (Intel) added an option to the suffix command and corresponding command-line switch for specifying a "hybrid" setting for 2 suffixes, e.g. intel and omp. This allows the second to be used if the first package is not available.
- 24 Sep 2015
 - Biswajit Mishra (Shell) fixed a bug in the USER-INTEL package that could cause incorrect special bond settings to be applied for small simulations where the cutoff is greater than half of the simulation box size.
 - Stan Moore (Sandia) added several new Kokkos-accelerated fixes and computes, including fix nvt, fix nph, fix npt, fix deform, and fix wall/reflect.
- 15 Jul 2015
 - Released a new version of the Kokkos accelerator library as bundled with LAMMPS. A couple of Kokkos related bugs in LAMMPS were also fixed.

Kokkosパッケージ

- Sandia のTrilinosプロジェクトの一部。
 - 主開発者: Dr. Christian Trott
- GPGPUとXeon-Phiや今後のMany coreのアクセラレータ(組み合わせ)への対応が目的。
- (現状) 2つの実行モード
 - “host”: CPU + XeonPhiのNativeモード。
 - “device”: CUDA経由のGPGPUのみ。
 - two MPI tasks, 8 threads per CPU

```
% mpirun -np 2 lmp_cuda -k on t 8 g 2 -sf kk -in in.lj
```



最新GPU向けには、こちらが良い。

概要

- LAMMPSでのアクセラレータ利用は、要注目。
- 概ねCPUの2~3倍程度が、トレンド？
 - CPUサーバと、HighEnd-GPUのコスト比(電力・価格)や、手間との競合。
 - だが、、、**活用は、必至。**
 - 何をすべきかは、他のアプリとは異なる状況。
- LAMMPS実事例でのベンチマーク整備が重要。
 - 具体的に、どうしたら、速く(効率よく)計算できるか、計算機に詳しい人に、調べてもらうため。
 - GPUは、東工大TSUBAME、阪大 VCCクラスター。
 - Xeon-Phiは、名大 CX400。+ 東大 新スパコン。

今回のねらい

- 計算科学、計算機科学の両者におけるLAMMPSでのGPU-Phi利用のスキルアップ。
 - 開発者技術ではなく、**利用者技術に焦点**。
- 実事例のヒアリング・試験実施を通じて、情報を集約する。その関連作業の分担をする。
- 実際に、GPUとPhiをLAMMPSで利用する。
 - 協力： 大阪大学CMC、名古屋大学 情報基盤センター
 - KNLの先行事例としてのLAMMPSを評価し、効用とコード内部を知ることで、独自アプリ・コードの改良に貢献することも期待の1つ。