

LAMMPS@FOCUS ベンチマーク

2022.09 FOCUS運用グループ

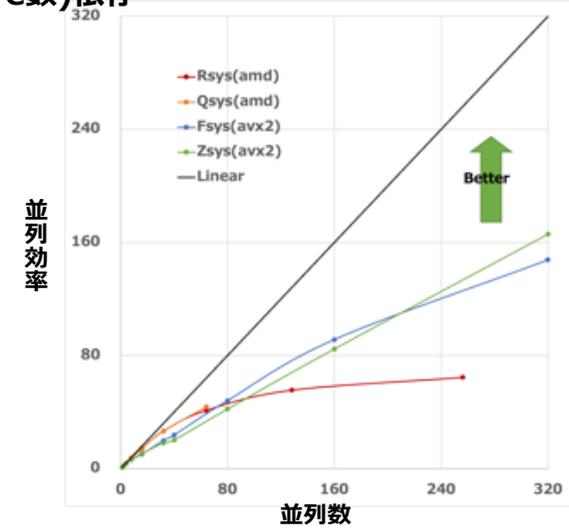
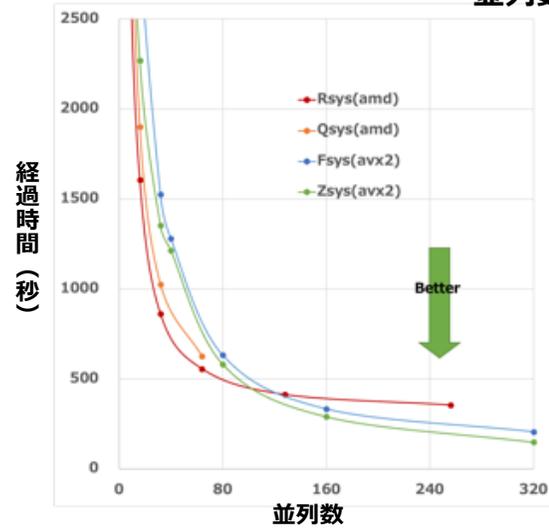
- lammmps-8Apr2021/src/Imp_intel_cpu_intelmpi_[avx2,amd]
- フラットMPI(OpenMP未使用)
- 640k water(1920000atoms)
- 1000step, wirte/1step
- NVTモデル

データ：経過時間(秒)

並列数	ノード数	Rsys(amd)	Qsys(amd)
1	1	22921	27330
2	1	11554	13825
4	1	5982	7185
8	1	3076	3811
16	1	1607	1901
32	1	861	1025
64	2	556	625
128	4	413	-----
256	8	355	-----

並列数	ノード数	Fsys(avx2)	Zsys(avx2)
1	1	30426	24554
2	1	16425	12741
4	1	8336	6967
8	1	4734	3914
16	1	2930	2269
32	1	1525	1353
40	1	1280	1214
80	2	632	582
160	4	333	290
320	8	206	148

並列数(core数)依存



ノード数依存

