

# FOCUSスパコンでの NAMDベンチマーク

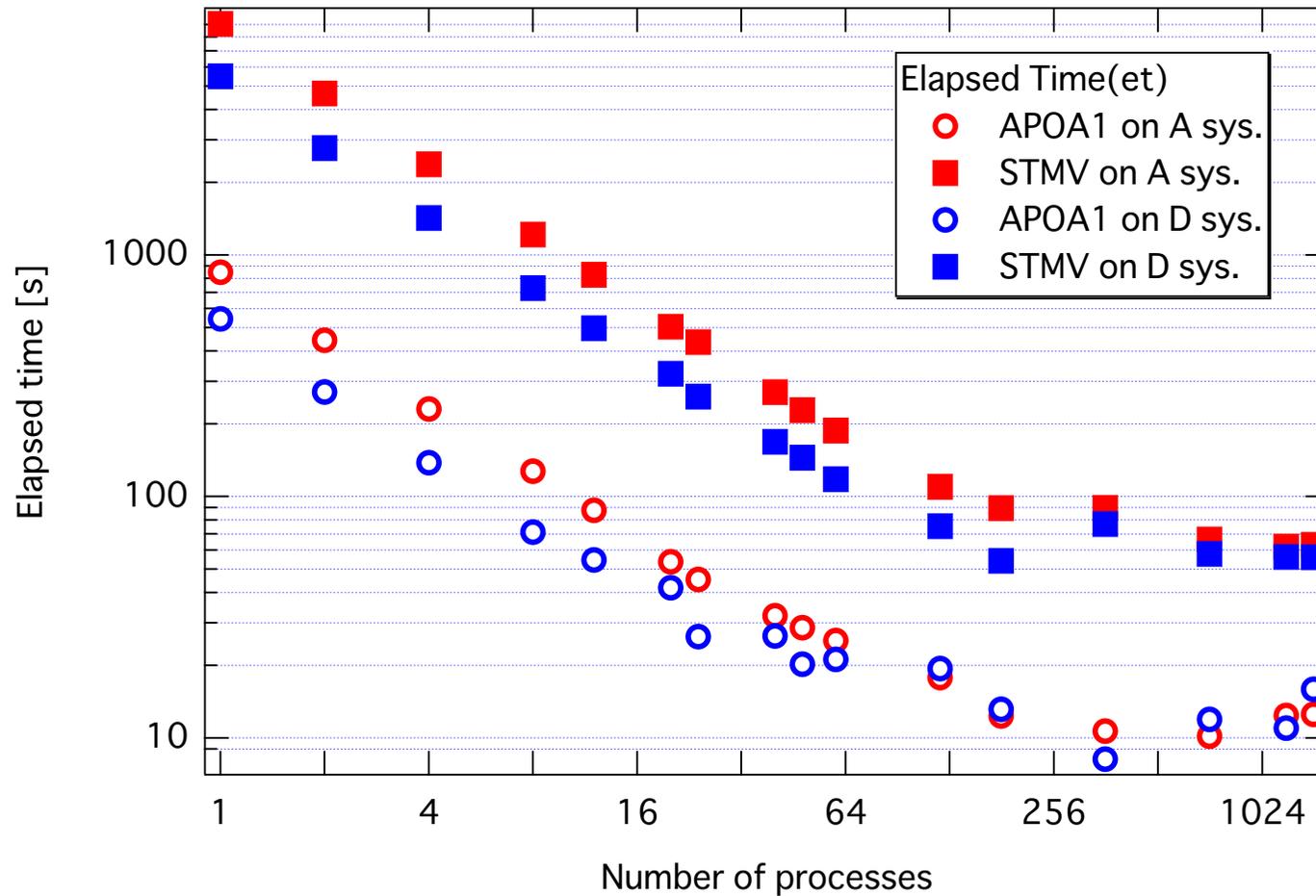
(公財)計算科学振興財団

2014/07/10

# ベンチマーク測定条件

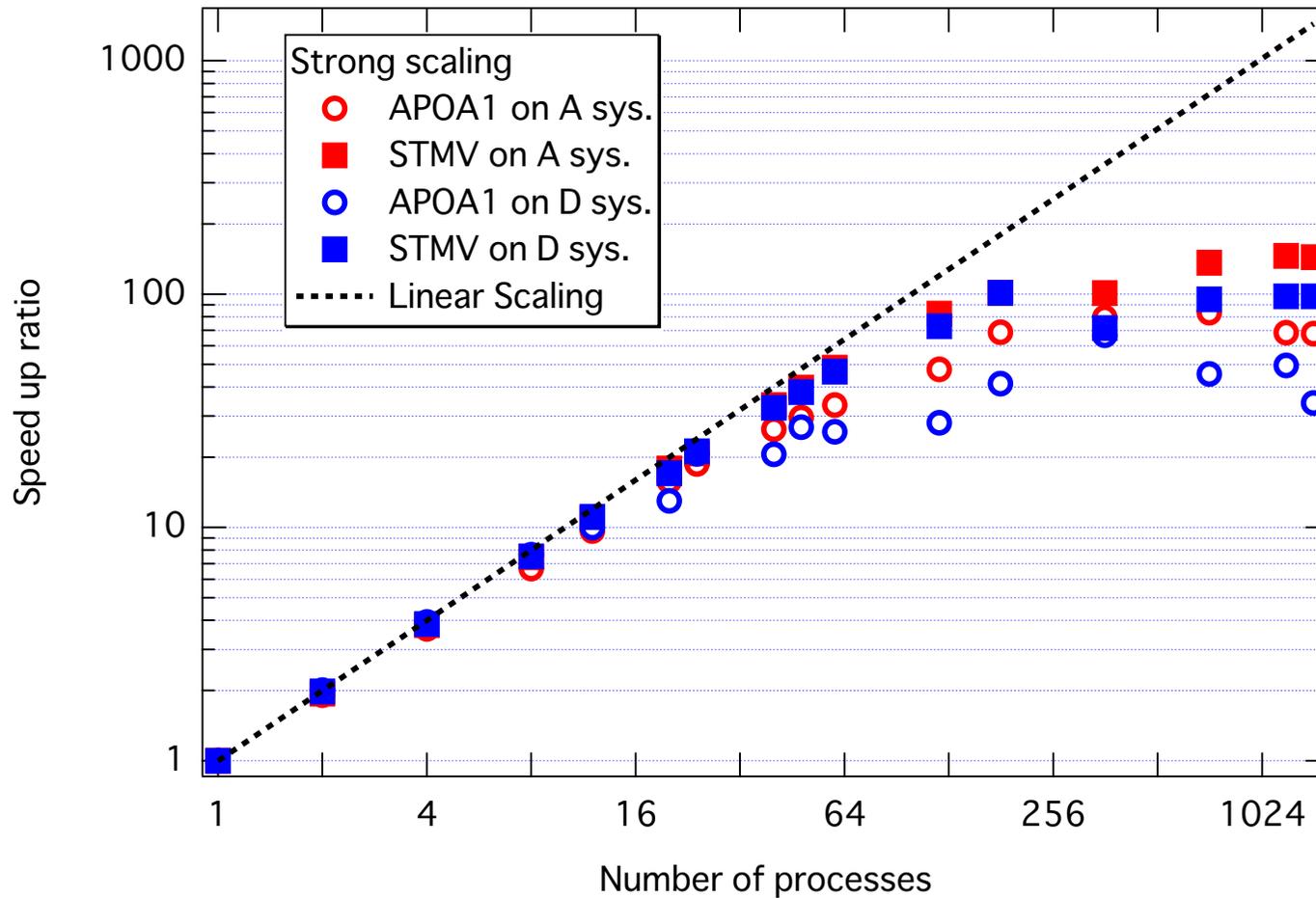
- 評価対象 NAMD version 2.9  
インテルコンパイラとMPIを利用  
インストールパス  
`/home1/share/namd/2.9/intel/impi/NAMD_2.9_Linux-x86_64-MPI`  
サンプルスクリプト  
`/home1/share/namd/2.9/PARALLEL_intel_mpi_fjsub_sample.sh`
- 測定環境  
通常運用中のFOCUSスパコンA,Dシステム  
他のジョブが存在するため共有資源(Ethernet、InfiniBand、共用ストレージ等)の干渉有り。  
複数回の測定を行い影響を小さくした。  
初回の起動時と2回目以降で実行モジュール等のディスクキャッシュインの差があるため初回起動時の測定値は除外
- ベンチマーク測定系  
<http://www.ks.uiuc.edu/Research/namd/utilities/>で公開されている以下を使用  
ApoA1 benchmark (92,224 atoms, periodic, PME)  
STMV (virus) benchmark (1,066,628 atoms, periodic, PME)

# 実行経過時間(秒)



実行経過時間からFOCUSの共用ディレクトリのNAMMDについては  
DシステムはAシステムの最大1.8倍高速、並列数が増えるにつれて差が縮小

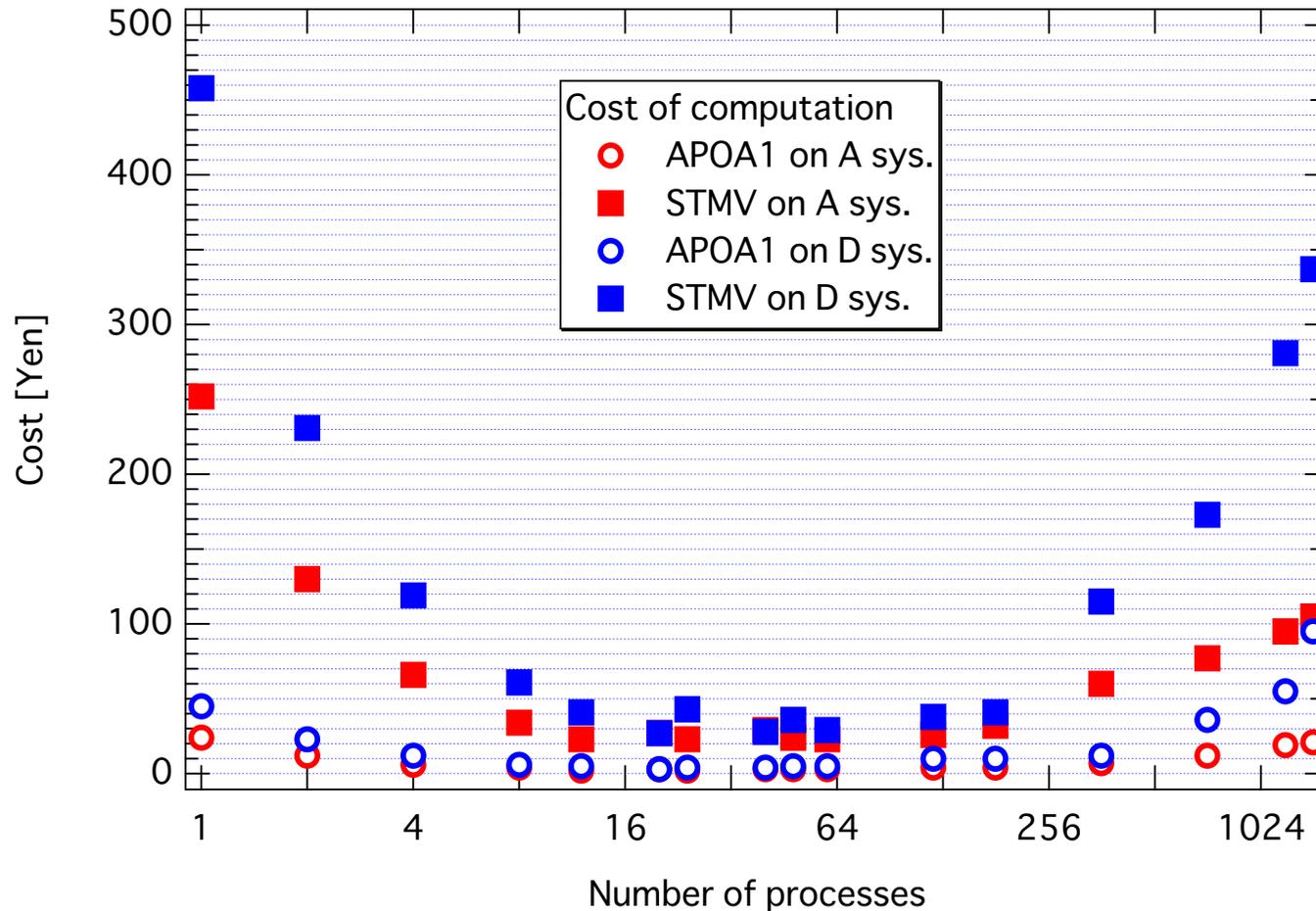
# 並列速度向上率



APOA1はSTMVより係が小さいため並列速度向上率が16並列を超えたあたりから劣化  
STMVでは64並列を超えたあたりから劣化

# 計算コスト

平成26年度のFOCUSスパコンの課金単価により算出



コストだけならばAPOA1, STMVの両方でAシステムの方が計算コストが低い  
コストパフォーマンスという点では12並列～64並列の範囲が良好

# コスト比 \* 速度比

計算が早く終わることを評価:  $\text{cost}(A)/\text{cost}(D) * \text{et}(A)/\text{et}(D)$

