

ABINIT-MPによるFMO計算の 「ベンチマーク」と 「FOCUSスパコンにおける システム・並列コア数の選択」

神戸大学計算科学教育センター

鈴木洋介, 渡邊博文

2018年2月2日 (金)

はじめに

- 次のような疑問に答えたい
 - ABINIT-MPの並列化効率はどうなっているか
 - FOCUSスパコンでABINIT-MPを使う際のシステムや並列コア数の選択はどうしたらいいのか.
- 以下の点に注意
 - この発表における料金は従量課金を前提としており、金額に関しては**全て税抜き**となっている.
 - H30.4.1からFOCUSスパコン使用料金が変更される予定で、この発表では現状（現料金）とH30.4.1以降（新料金）のどちらにも対応している. 高並列計算では利用料金は実質値下げとなる.

https://www.j-focus.or.jp/focus/focus_information/entry-1690.html

計算対象と計算条件

使用プログラム：FMO計算プログラムABINIT-MP(ver. 7)

- 計算対象

- ER(略称): 「エストロゲンレセプターのリガンドバインディングドメイン(241残基, 3899原子)」と「エストロゲン(17 β エストラジオール) (44原子)」の複合体 (PDBID:1ERE)
- HIVp (略称) : 「HIV-1プロテアーゼ(198残基, 3128原子)」と「その阻害剤 (Lopinavir) (94原子)」の複合体(PDBID:1MUI)

(参考)アミノ酸残基: 7-23原子

- 計算の詳細

- 基底関数 6-31G*
- 電子相関 MP2
- MPI並列
- フラグメント分割について
 - ER:全系を自動で行った
 - HIV-P: HIV-1プロテアーゼは自動分割を利用. Lopinavirは基本的には手動分割, 自動分割も最後の方で比較

主題

1. 並列化効率について

2. ABINIT-MPをFOCUSスパコンで使う場合，どのシステムでどの程度の並列コア数を指定すればいいのか

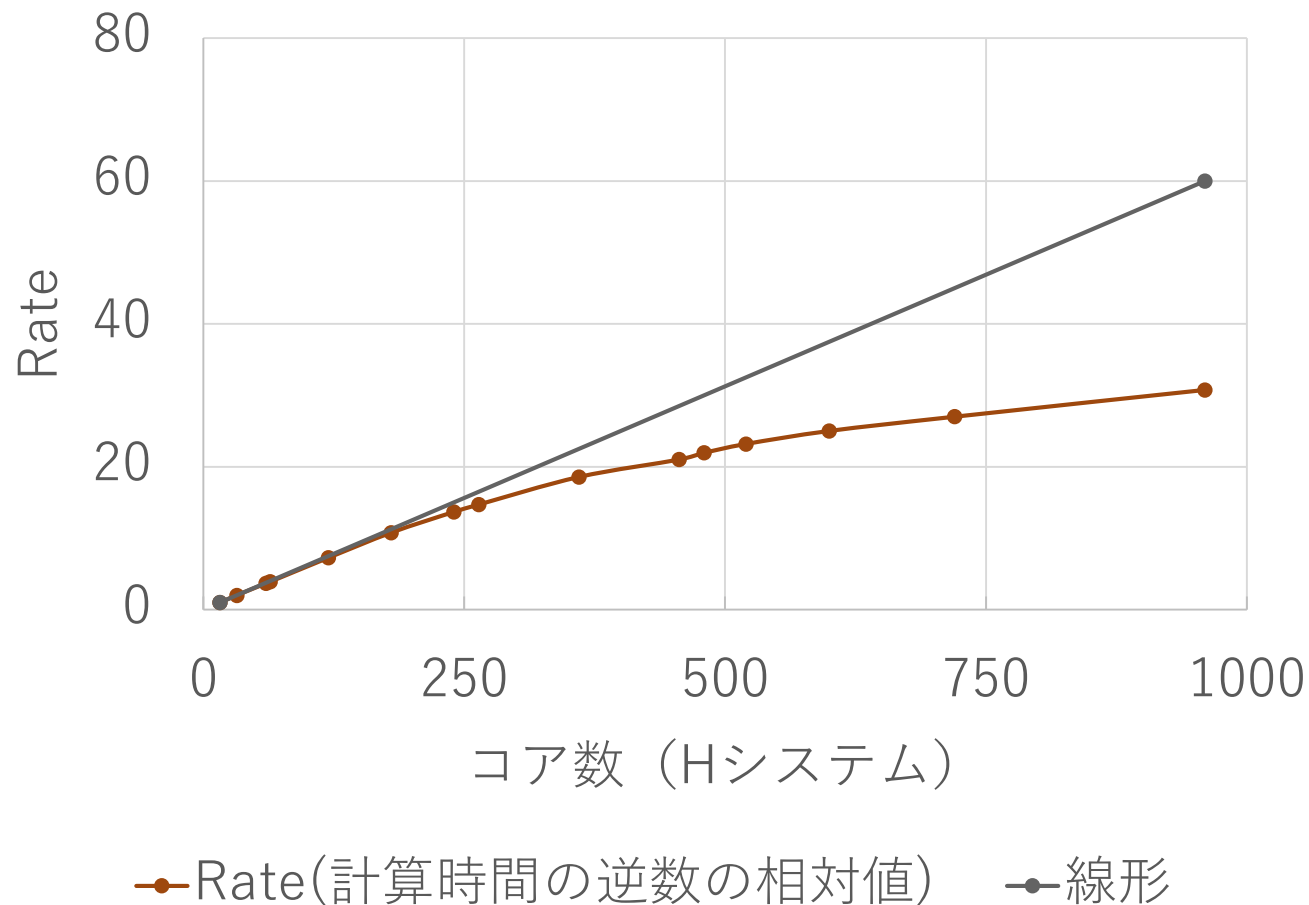
- どのシステムがいいのか
- 何コアがいいか
 - 基本編（計算時間面，スケーラビリティ，費用面）
 - 応用編（大量のデータを計算する場合）

3. 「タンパク質-小分子リガンド複合体」における

手動フラグメント分割による効率化

1.並列化効率について

HIVpをHシステムで計算した場合のスケーリング



- 250コア程度までは線形に近い
 - HIVpは実際に創薬研究の対象となるタンパク質複合体であり、スケーリングがよくなるように選んだ系ではない。

1. 並列化効率について

2. ABINIT-MPをFOCUSスパコンで使う場合、どのシステムでどの程度の並列コア数を指定すればいいのか

- どのシステムがいいのか
- 何コアがいいか
 - 基本編（計算時間面、スケーラビリティ、費用面）
 - 応用編（大量のデータを計算する場合）

3. 「タンパク質-小分子リガンド複合体」における

手動フラグメント分割による効率化

今回検討したシステム

ノード間に並列に向いているとされる
A,D,F,Hの4つのシステムを対象とした.

	ノード数	ノード構成(CPU)	ノード構成 (メモリ)	ノード時間単価 (円/ノード時間) (基本料金)	1コア1時間あたりに換算 (円)	1コアあたりのメモリ (MB)
Aシステム	224	2.26GHz(6コア) × 2CPU	48GB	100	8.33	4000
Dシステム	80	2.5GHz(10コア) × 2CPU	64GB	300	15	3200
Fシステム	14	2.2GHz(20コア) × 2CPU	128GB	500	12.5	3200
Hシステム	136	2.1GHz(8コア) × 1CPU	64GB	100	12.5	8000

メモリの設定について

- メモリを設定を適切にしないと計算が途中終了してしまうことがある.
- 基本的には, ajfファイルでの設定”memory”を1コアあたりのメモリよりもやや小さく設定する.
- MP2計算の場合は”memorymp2”を設定することも検討すべき.
- 今回の設定

システム	1コアあたりのメモリ	計算対象	今回の設定(MB)	
			memory	memorymp2
A	4000	ER	3500	設定なし
		HIVp	3500	設定なし
D	3200	ER	2800	2200
		HIVp	2800	設定なし
F	3200	ER	2700	設定なし
		HIVp	2800	設定なし
H	8000	ER	7500	設定なし
		HIVp	7500	設定なし

FOCUSスパコンの 従量課金について

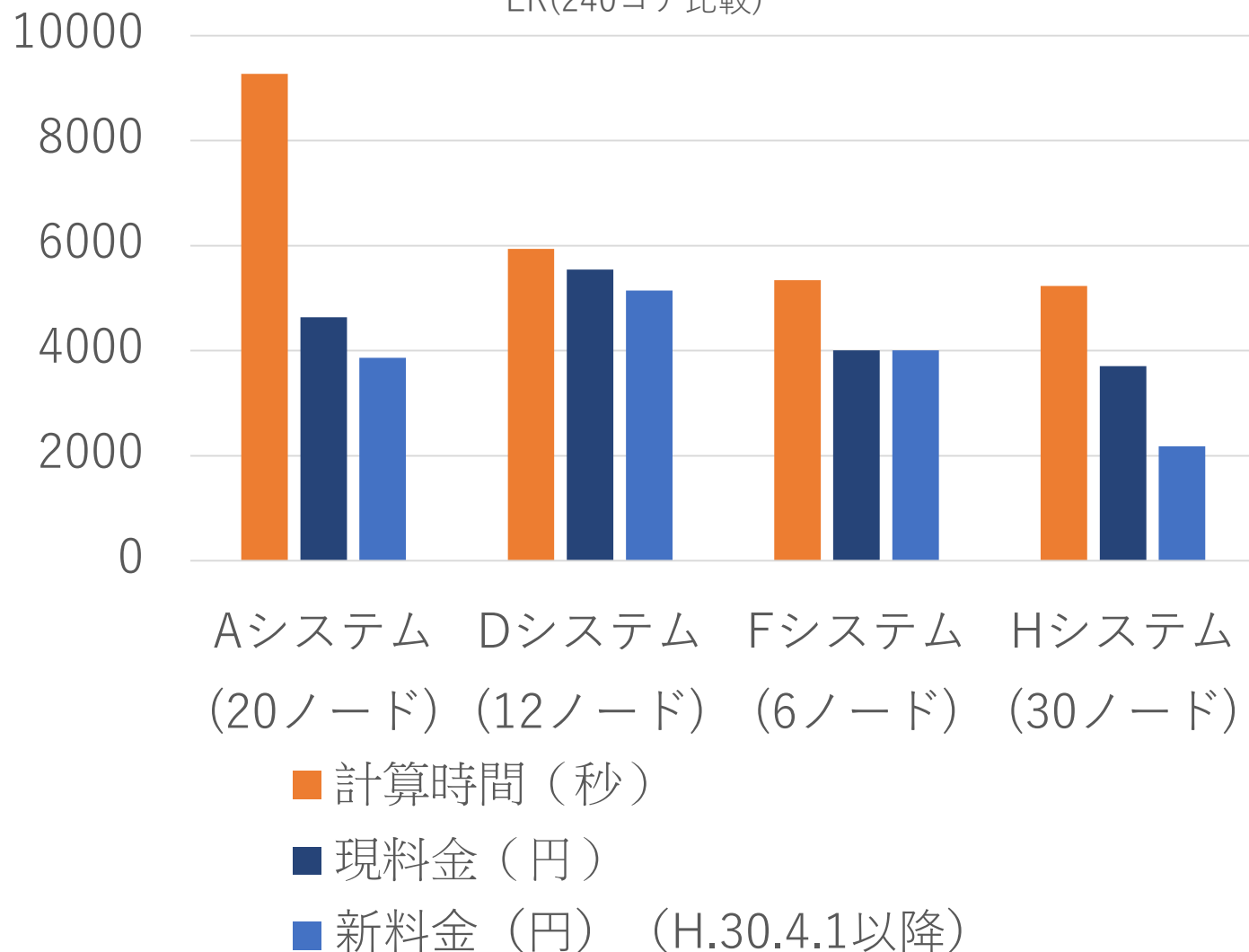
—現状のHシステムを例に—

- ジョブ毎の「ノード時間」 × 「ノード時間単価」 で求められる
 - Hシステムで160コアの並列計算を4時間したとする.
 - Hシステムは1ノードは8コアである
 - 160コア使うと $160/8=20$ なので20ノード使うことになる.
 - したがってノード時間は $20 \times 4=80$ ノード時間となる.
 - ノード時間単価はノード数毎に決まっており20ノードだと「90円／ノード時間」（あとで詳述）
 - 結局 $80 \times 90=7200$ 円となる
- Hシステムの場合は1ノード8コア
 - 例えば153コアから160コアはいずれも20ノード使うことになる.
 - コアの指定に関しては8コアを単位として計算した方が良い.

どのシステムがいいのか(ERの場合)

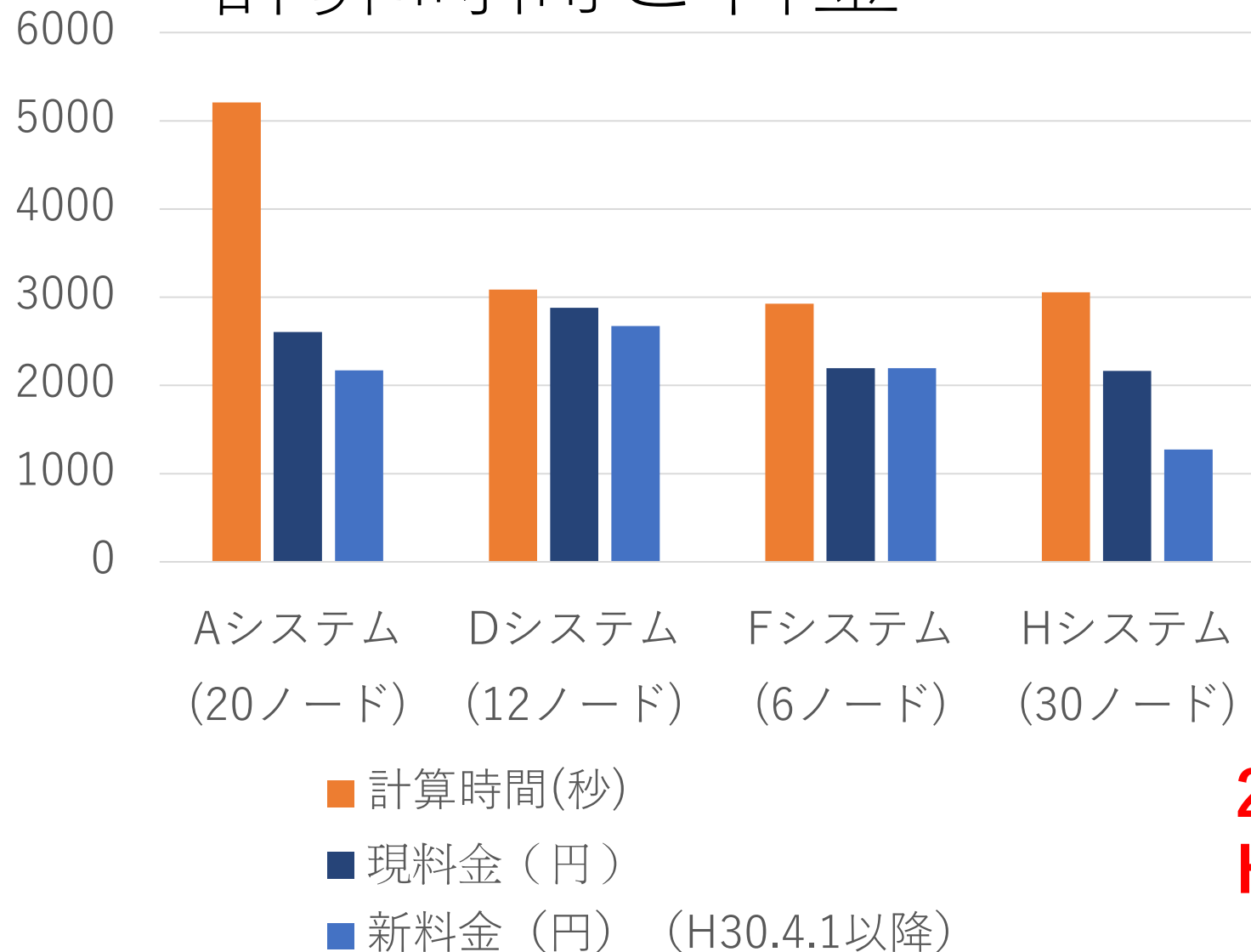
-計算時間と料金-

ER(240コア比較)



- すべて240コアで計算
- 計算時間, 料金共にHシステムが一番良い
- Fシステムが次点

どのシステムがいいのか(HIVpの場合) -計算時間と料金-



- 全て240コアで計算
- FシステムとHシステムが拮抗
 - 新料金ではHシステムがさらに安くなる
- 現状, Fシステムは比較的混雑しておりHシステムはその点で有利

**2つの結果を総合して
Hシステムがおすすめ！**

1. 並列化効率について

2. ABINIT-MPをFOCUSスパコンで使う場合、どのシステムでどの程度の並列コア数を指定すればいいのか

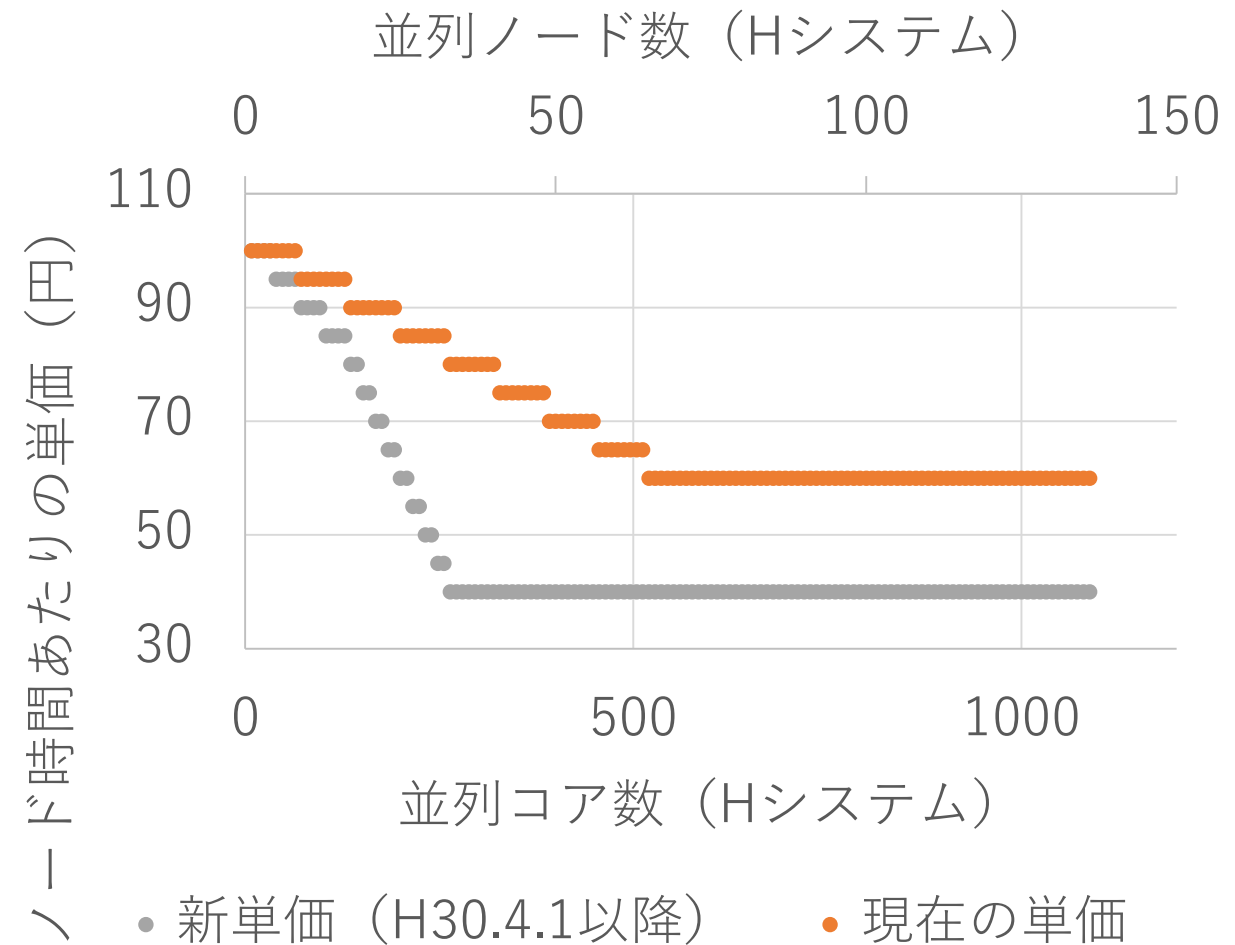
- どのシステムがいいのか
- 何コアがいいか
 - 基本編（計算時間面、スケーラビリティ、費用面）
 - 応用編（大量のデータを計算する場合）

3. 「タンパク質-小分子リガンド複合体」における

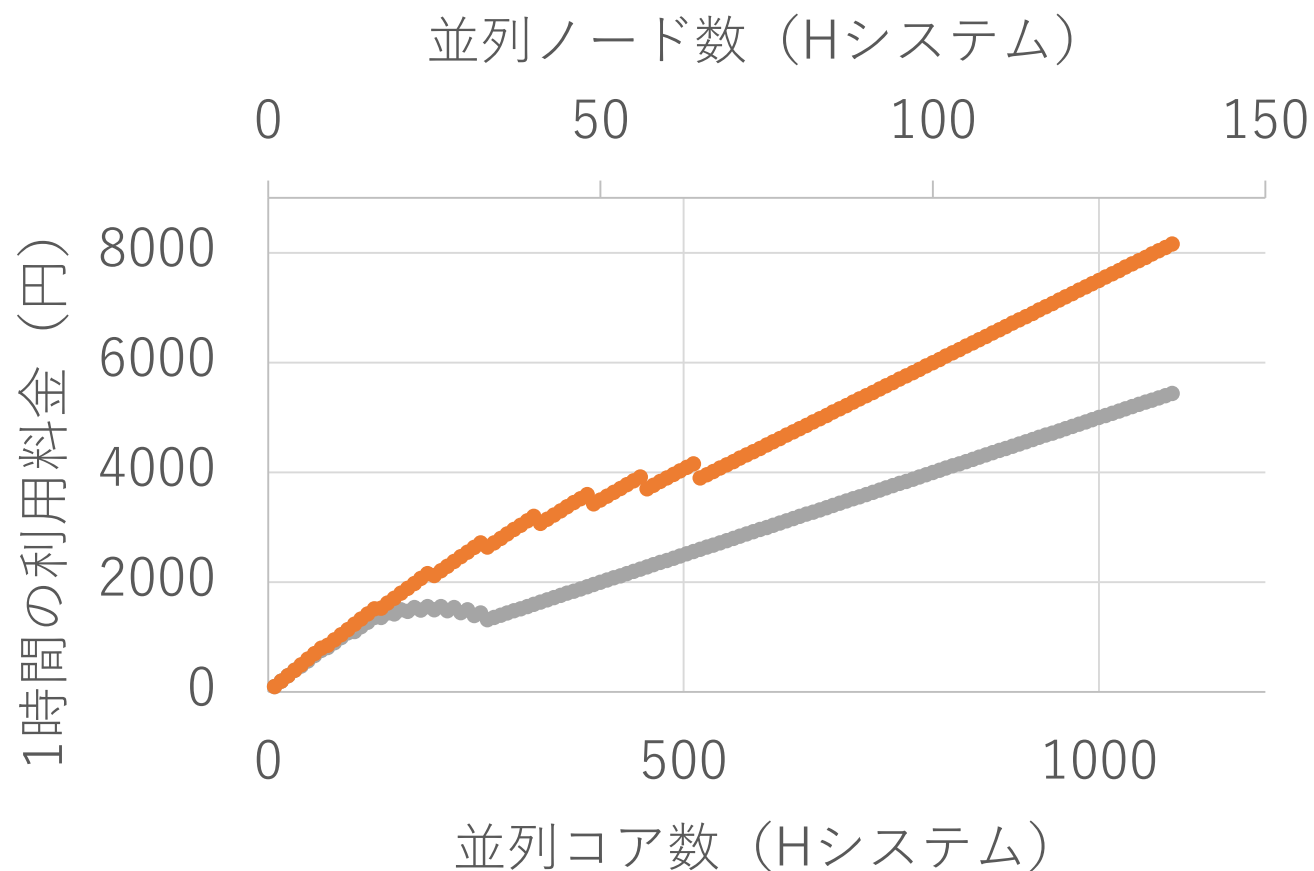
手動フラグメント分割による効率化

Hシステムのノード時間単価

- 従量課金（ジョブ毎）
= 「ノード時間」 ×
「ノード時間単価」
- 並列割引＝並列コア数が
大きいほど単価が安い



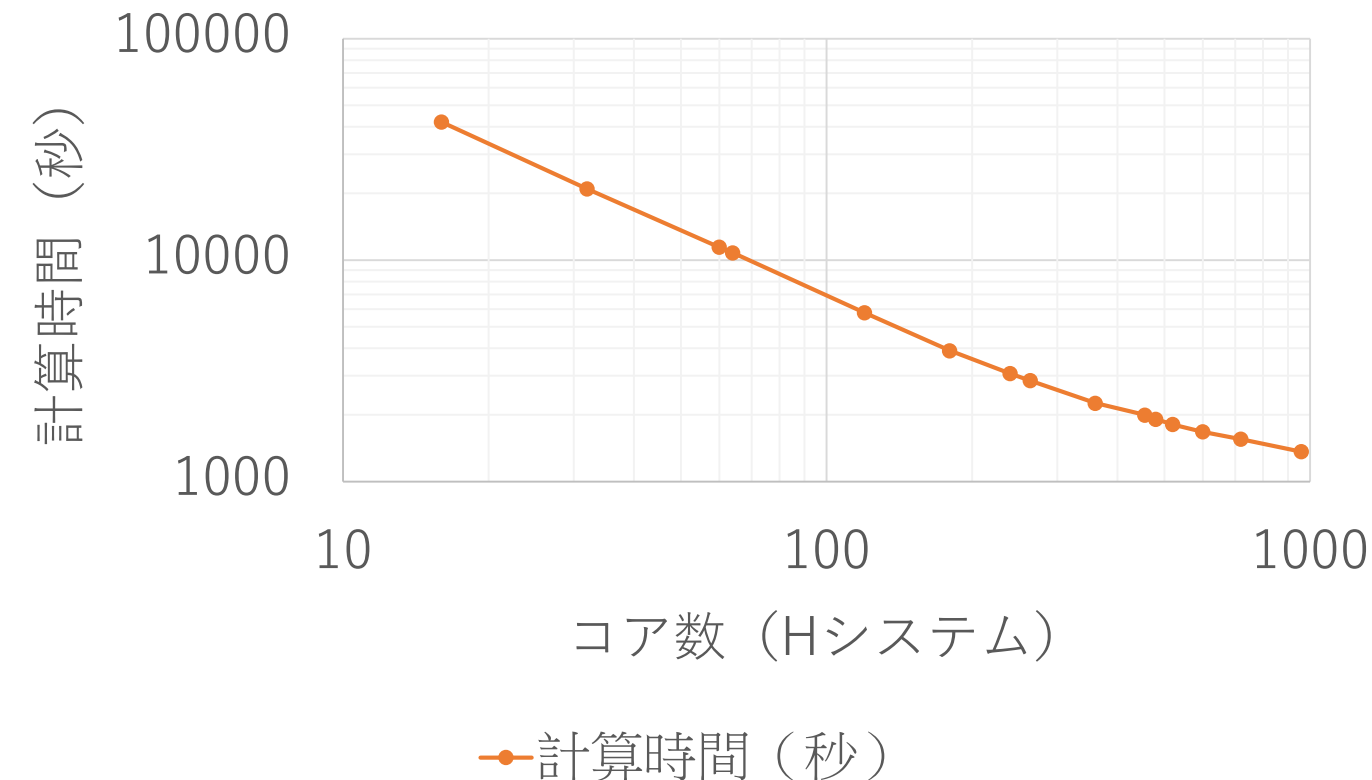
Hシステムで1時間計算した時の料金



- 新料金 (H.30.4.1以降)
- 現料金

- 現在
 - 割引境界値に注意
 - 例えば64ノード (512コア) よりも65ノード (520コア) の方が良さそう
- 2018年4月1日以降
 - 31ノード(248コア)以上が非常にお得

何コアがいいか- 計算時間の検討

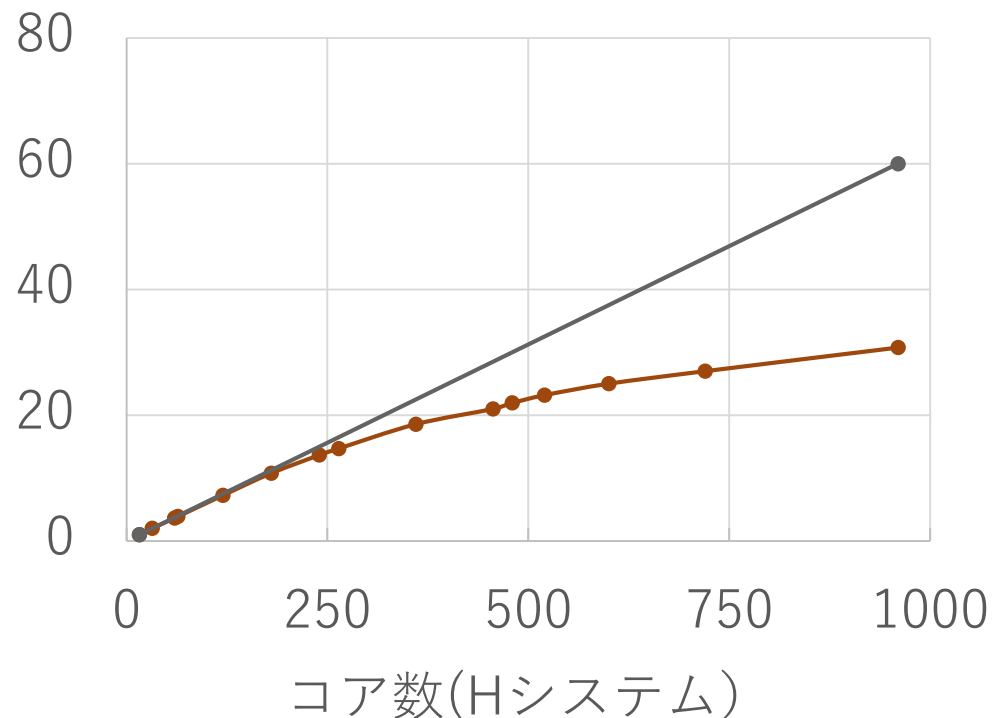


- 計算対象: HIVp
- 実行した960コア(=120ノード) (全136ノード) までコア数が多いほど計算時間が短い
- 早く終わらせたい (1つの) 計算がある場合はコア数はできるだけ大きくして良い

Scalabilityの検討 (HIVp)

Hシステム上のABINIT-MPの

Strong scailing(対象：HIVp)



—●— Rate(計算時間の逆数の相対値)

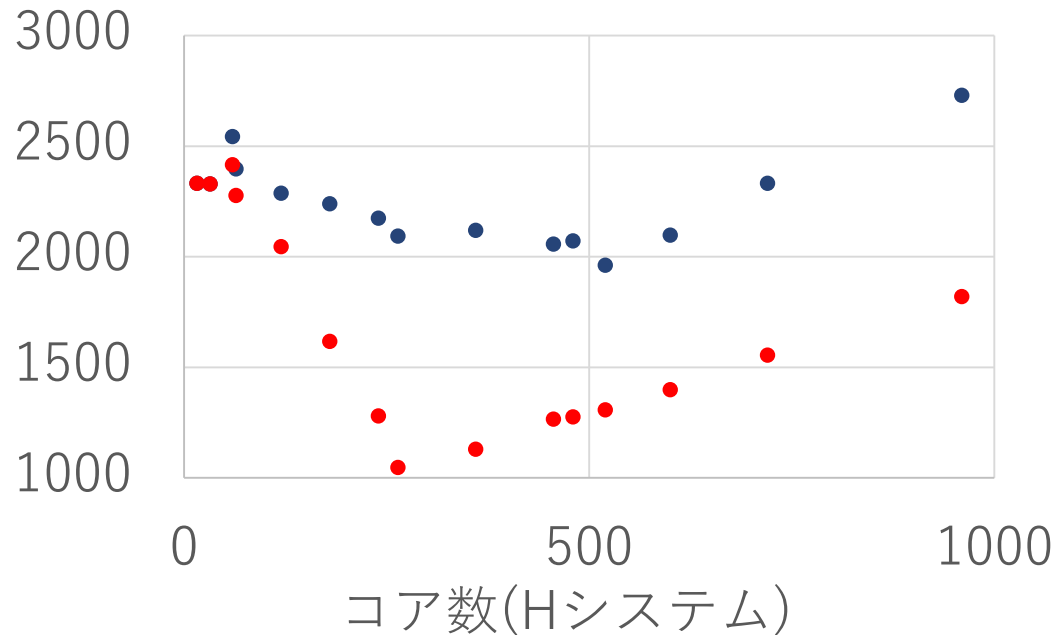
—●— ideal

- Strong scaling
 - 同じ計算をコア数を大きくした時どのくらい早くなるか
- 計算資源の有効活用という観点からすると、250コア程度以下が望ましい
- 大量の種類の計算を早く終わりたい場合、コアを小さめにして複数のジョブの同時実行が良い

何コアがいいのか（料金面）

Hシステム上のABINIT-MPによるFMO計算（対象:HIVp）

コア数を増加させたとき（ノード時間単価が一定になるまで）



● 料金（円） ● 新料金（円）

「ノード時間の増加効果」 < 「並列割引の漸増効果」



料金は減少

• グラフについて

- 現料金は520コア（H30.4.1以降の新料金は264コア）で最小値を持つ

ABINIT-MPをFOCUSスパコンで使う場合、どのシステムでどのくらいのコアを使えばいいのか

ーここまでのまとめー

1.FMOのMPI並列には**Hシステム**がお勧め

2.コア数はどうすべきか？

- *とにかく速度重視なら、コア数は大きければ大きいほど良い

- *スケーラビリティの観点からは**250コア程度以下**が良い

- *計算料金の安さを求めるなら

 - ー現在は**520コア**

 - ーH30.4.1以降は**264コア**

1. 並列化効率について

2. ABINIT-MPをFOCUSスパコンで使う場合，どのシステムでどの程度の並列コア数を指定すればいいのか

- どのシステムがいいのか
- 何コアがいいか
 - 基本編（計算時間面，スケーラビリティ，費用面）
 - 応用編（大量のデータを計算する場合）

3. 「タンパク質-小分子リガンド複合体」における

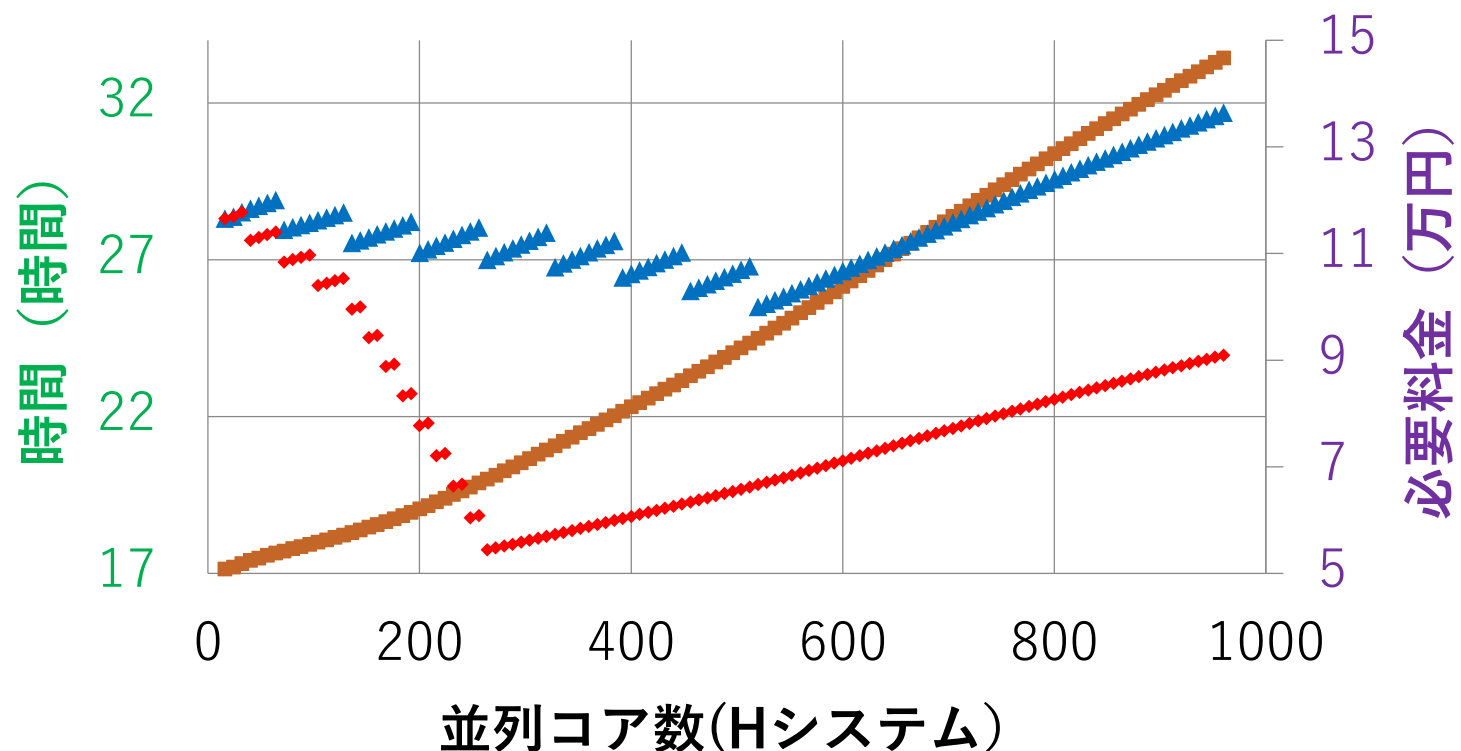
手動フラグメント分割による効率化

大量のデータを計算する場合のコア数の選択

- 大量（複数）の分子系を計算する場合は、ジョブを複数投入することになる。（Hシステムの場合1ユーザ200個まで同時に投入可能）
- コア数の選択については、「計算時間」と「コスト」から選択
- スケーラビリティの結果から、早い計算を重視するなら小コアを選択すべき。ただし、料金は高くなりそう。
- 場合によってはノードの空き状況を勘案
- ここではHIVpと同等の物質を50種類計算することを想定する
 - 「各コア数での計算時間」についてはHIVpの計算による実測に基づいているが、一部簡略化した上での推定があり、概算である。
 - 計算時間の推定では並列コア数ごとの「総必要ノード時間」を「68ノード」（全ノードは136ノード）で割って推定した。

HIVpと同様の計算を50回するときの 並列コア数の選択

Hシステムでの50回HIVpを計算する場合の
「料金」と「時間」の見積もり



■ 総必要ノード時間/(68ノード) ▲ 現在の料金(万円)

◆ 新料金 (万円) (H30.4.1以降)

Hシステム上のABINIT-MPの計算の実測に基づいた推定

- 選択候補をあげる
 - 現在(並列割引境界値を利用)
 - 520コア (24.5時間, 10.0万円)
 - 328コア (21.1時間, 10.7万円)
 - 264コア (20.0時間, 10.9万円)
 - 136コア (18.3時間, 11.2万円)
 - 16コア (17.1時間, 11.7万円) など
 - 2019年4月1日以降
 - ほぼ一択
 - **264コア** (20.0時間, 5.4万円)
 - さらに早く計算したい場合は他のシステム(F,A,Dなど)を併用すべき
 - 例えば1/4のジョブをFシステムで240コアで流すと2.9万円程度かかり計算時間は約15.0時間となる
 - 合計は $5.4 \times 3/4 + 2.9 = \text{約}7.0$ 万円
 - 参考
 - 216コア (19.3時間, 7.2万円)
 - 248コア (19.7時間, 6.0万円)

3. 「タンパク質-小分子リガンド複合体」における 手動フラグメント分割による効率化 -HIVp（HIVプロテアーゼとlopinavirの複合体）の場合-

- ABINIT-MPにおいてAuto fragment を適用すると
 - タンパク質とDNAに関しては適切に働く
 - それ以外の物質が含まれている場合，その物質に関して分割せず1つのフラグメントとして扱う
- これまでのここで示した計算では，HIVpに関してはAuto fragment はせず手動分割していた。
 - タンパク質に関しては自動分割の結果を用いてとlopinavirは4つに手動分割
- 計算時間とコストは次のようになる（対象:HIVp,Hシステムの240コアで計算）

条件		結果		
Autofragment	IFCD	時間（分）	料金（円）	新料金(円)
OFF	YES	52	2180	1280
OFF	NO	69	2900	1710
ON	NO	840	35670	20980

原子数が多いリガンドを含む場合は 手動分割した方がよい

- リガンドの原子数や原子軌道数に注目

計算対象	リガンド	リガンドの原子数	原子軌道数
HIVp	Lopinovir	94原子	786
ER	エストロゲン	44原子	348
(参考)	アミノ酸残基	最大23原子	最大213

大きいので手動分割が必要

- IFCDはできれば使った方がいい.
 - (今回の計算では基本的には使っている)
 - 計算の高速化手法の1つ
- 手動分割の設定法は本日午後に解説します.

まとめ

- FOCUSにおけるABINIT-MPのMPI並列ではHシステムがおすすめ
 - 1つの計算の計算時間にこだわるならコア数はできるだけ大きくして良い
 - 費用をできるだけ安くしたいなら
 - 今：520コア
 - H30.4.1以降 264コア
 - 大量のデータの計算
 - 今：520,328,264,136,16など（左はコスト重視，右は計算時間重視）
 - H30.4.1以降：264コア（時間をさらに短縮したいなら，他のシステムの併用を）
- 「タンパク質-小分子リガンド複合体」の場合，原子数が大きいリガンドに関してはmanual fragmentを実行した方がいい