GROMACS(2024.3)
ベンチマーク
@FOCUSスパコン

公益財団法人 計算科学振興財団

2024年9月

ベンチマーク設定

・ベンチマークモデル（benchRIB）
2M atoms, ribosome in water, 4fs time step
https://www.mpinat.mpg.de/grubmueller/bench

・実行バージョン
・GROMACS 2024.3 倍精度版
（コンパイラ：Intel OneAPI 2024, @Sシステムにてコンパイル）
・/home1/share/x86_64/el8/gromacs/gromacs-2024.3/

・実行システム
F,H,R,S(032c,092c,192c),Z
（次ページ　概要（スペック、料金）参照）

・並列数
各システム 1,2,4,8,・・・ノードにて計算
並列数 = 各システムノードあたり搭載コア数 x ノード数
（ただし　s092cシステムについてはノードあたり「84」で指定
（92=23*2*2 ロードバランス不均一が予想されるため））
- **ハイブリッド並列**：プロセスあたり**4**スレッド
並列数=プロセス数 x 4スレッド
- **MPI並列**：並列数=プロセス数

・各システムについて、実行時間と利用料金を比較

各システム概要

システムスペック（太字：ベンチマーク実施システム）

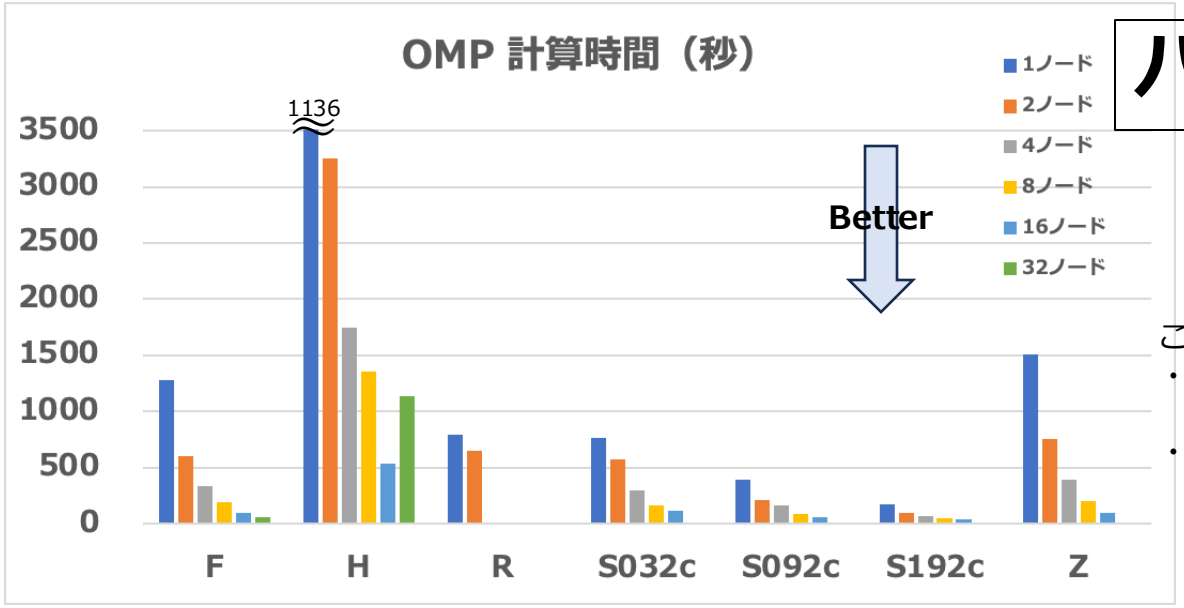
システム	ノード内コア数	最大ノード数	ベース周波数(GHz)
A	12	208	2.26
B	16	2	1.86
F	40	60	2.2
H	8	136	2.1
Q	64	1	2
R	32	10	2.8
S032c	32	39	2.4
S092c	92	16	2.4
S192c	192	16	2.4
V	20	2	2.4
W	40	2	2.4
X	48	6	1.8
Z	40	24	2.1

ノード単価料金(円)

1~	5~	9~	13~	17~	21~
75	70	65	60	55	50
100	---	---	---	---	---
400	360	320	280	240	200
75	70	65	60	55	50
600	---	---	---	---	---
400	360	320	---	---	---
320	288	256	224	192	160
800	720	640	560	480	400
1600	---	---	---	---	---
300	---	---	---	---	---
600	---	---	---	---	---
100	---	---	---	---	---
400	360	320	280	240	200

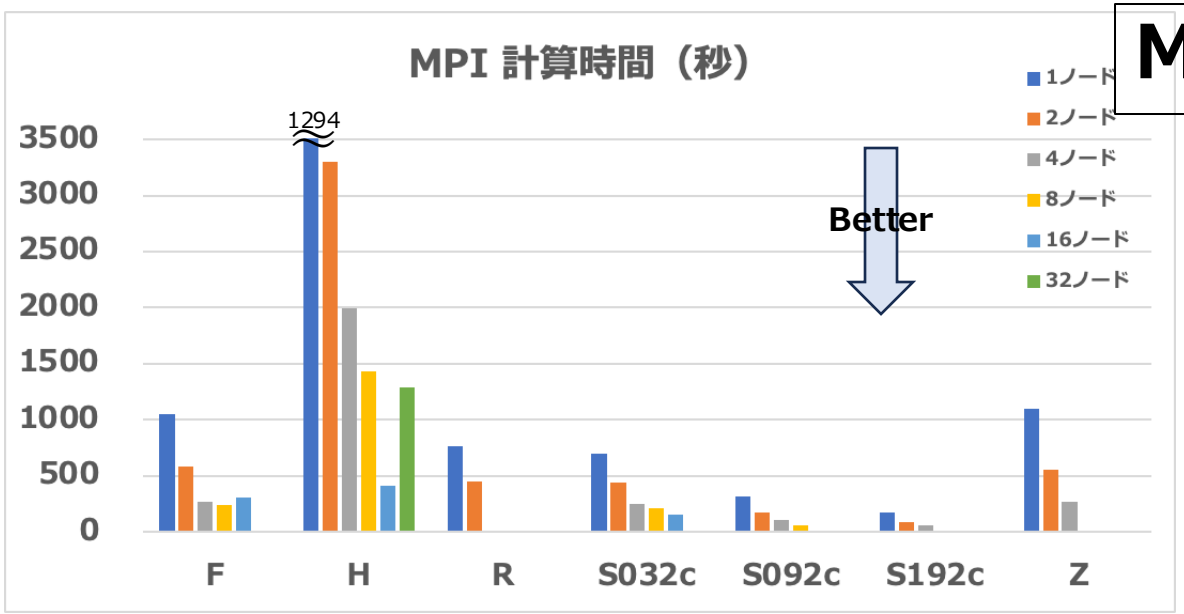
実行時間(ノード数依存)

※S092システムでは1ノードあたり84並列



ハイブリッド並列

このケースでは
- 概ね1ノードの場合はMPI並列計算の方が効率的である。
- 複数ノードの場合はハイブリッド並列を推奨

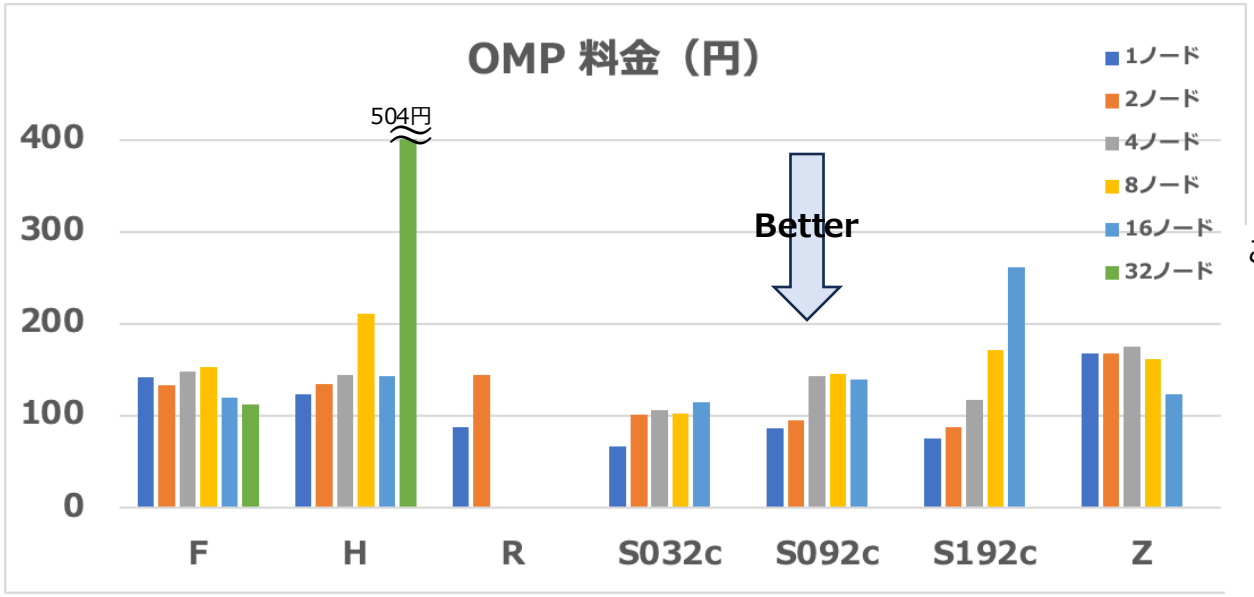


MPI並列

利用料金(ノード数依存)

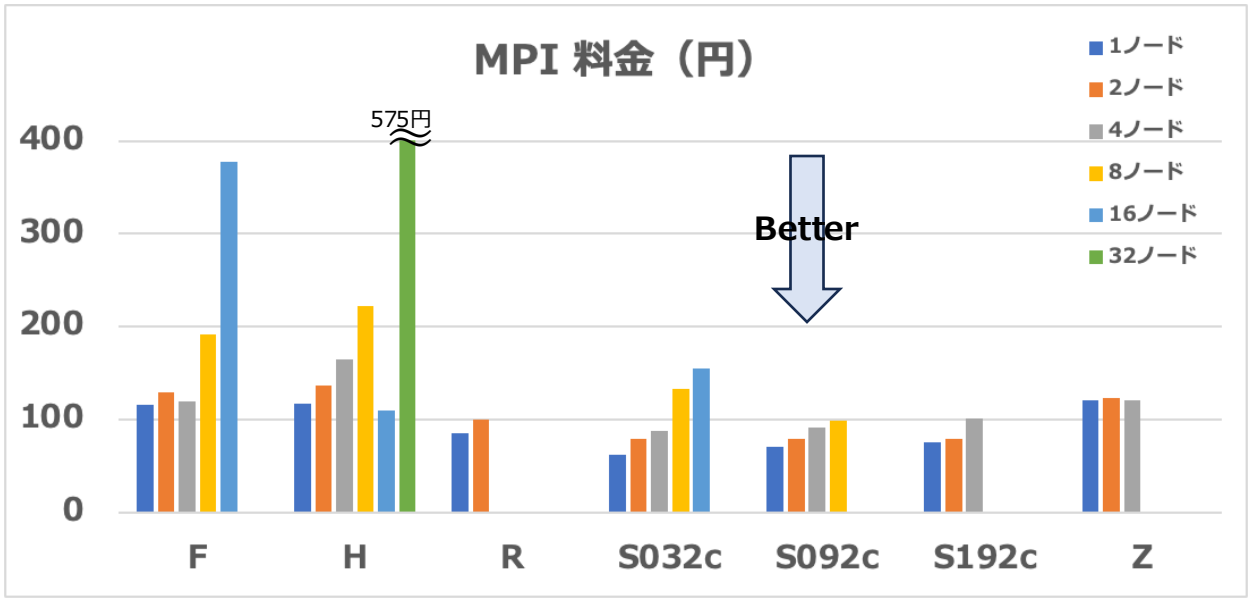
※S092システムでは1ノードあたり84並列

各システムの料金単価は「各システム概要」を参照してください。



ハイブリッド並列

このケースでは
- 費用を抑えて計算できるのは
  Sシステム1ノード(S032c,S092c,S192c)
  - ハイブリッド(67,87,75円)
  - MPI (62,71,75円)
  特にS192cは高い単価にも関わらず、
  コストパフォーマンスが高い。
- 主なシステムでは多ノード実行でも
  費用は単ノード費用と大きく変わらない。
  （並列割引の効果）



MPI並列

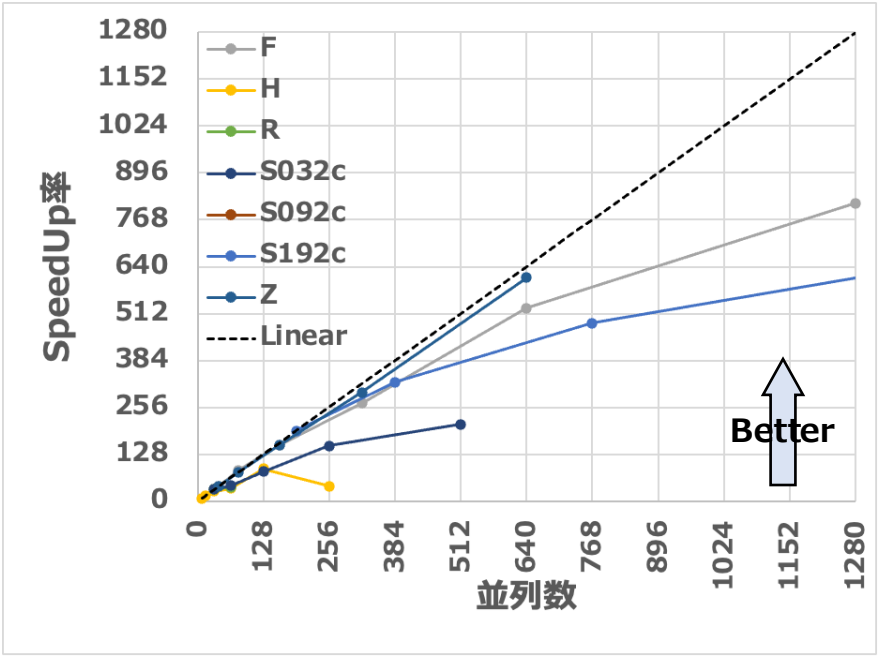
※S092システムでは1ノードあたり84並列

SpeedUp率(並列数依存)

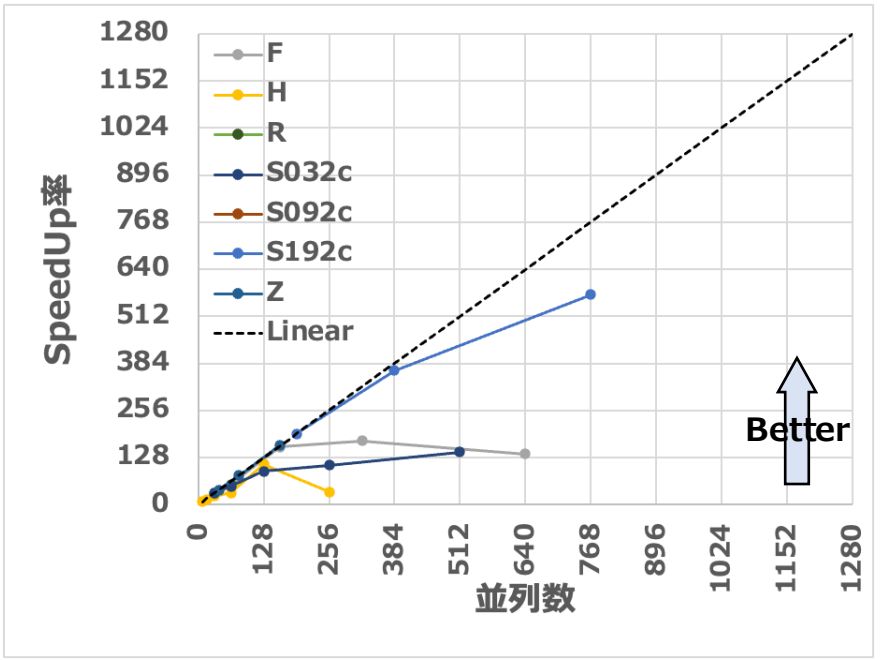
SpeedUp率 =実行時間(1並列)/実行時間(N並列)

実行時間(1並列) =各システム1ノードでの実行時間＊ノード搭載コア数　とした。

ハイブリッド並列



MPI並列



このケースでは、
・ハイブリッド並列の方がMPI並列と比較して、効率のよい並列計算ができている。
・MPI並列の場合は約128並列で並列効率は飽和しており、
　ハイブリッド並列の方が飽和値は大きい。
　大規模並列計算（128並列以上）の場合はハイブリッド並列を推奨