

LAMMPS 2Aug2023 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7月

ベンチマーク設定

- ベンチマークモデル (motorbikeS)
 - 640k water(1,920,000atoms)
 - 1000step, write/1step
 - NVTモデル
- 実行バージョン
 - LAMMPS 23Jun2022
(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/LAMMPS/lammps-2Aug2023/
- 実行システム
A,B,F,H,Q,R,S(032c,092c,192c),V,W,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「90」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))
- 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

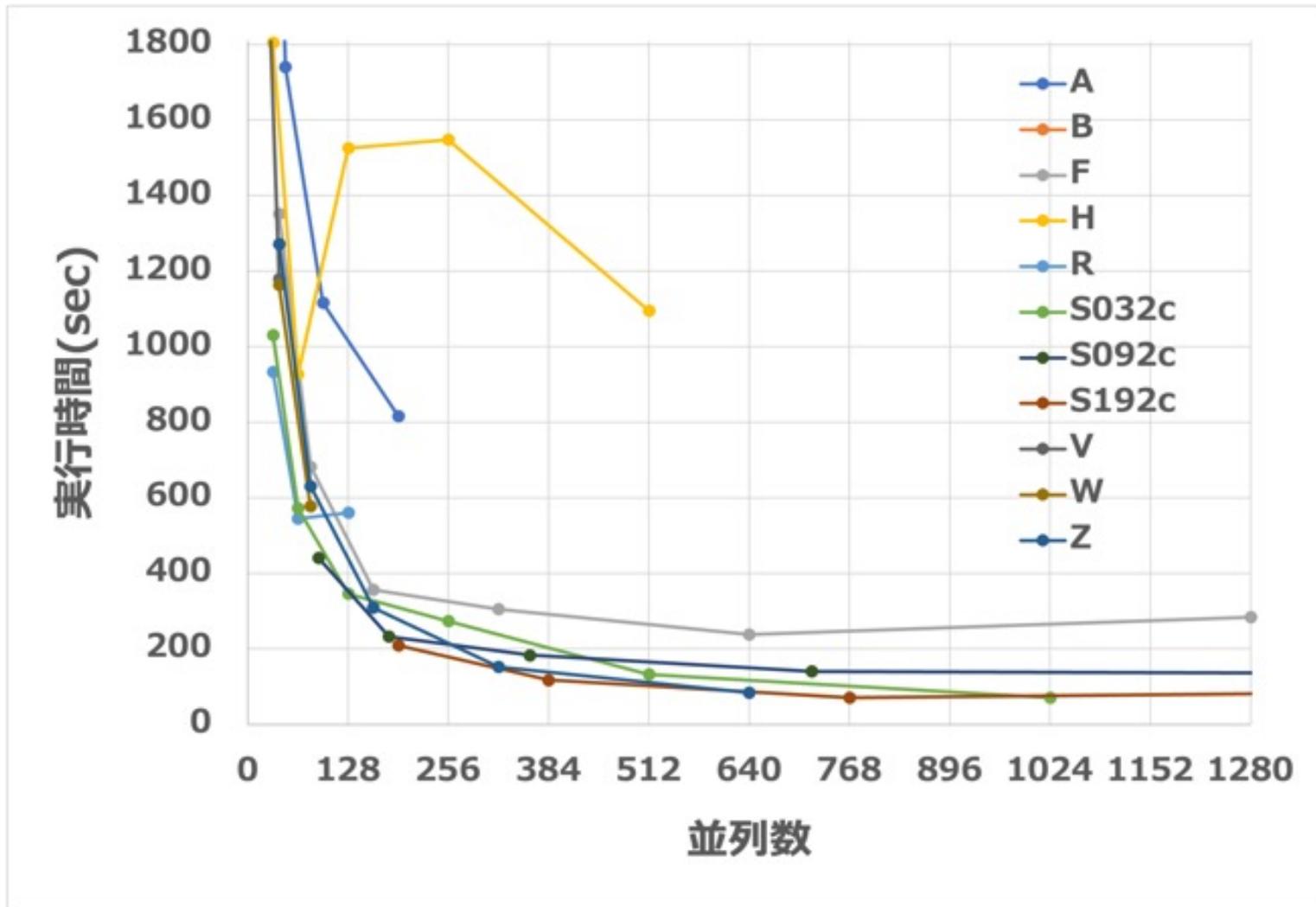
システムスペック

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ノード	2~	4~	8~	16~	32~	64~
75	75	75	70	60	50	50
100	100	---	---	---	---	---
400	400	400	360	280	200	---
75	75	75	70	60	50	50
600	---	---	---	---	---	---
400	400	400	360	---	---	---
320	320	320	288	224	160	160
800	800	800	720	560	---	---
1600	1600	1600	1600	1600	---	---
300	300	---	---	---	---	---
600	600	---	---	---	---	---
100	100	100	---	---	---	---
400	400	400	360	280	---	---

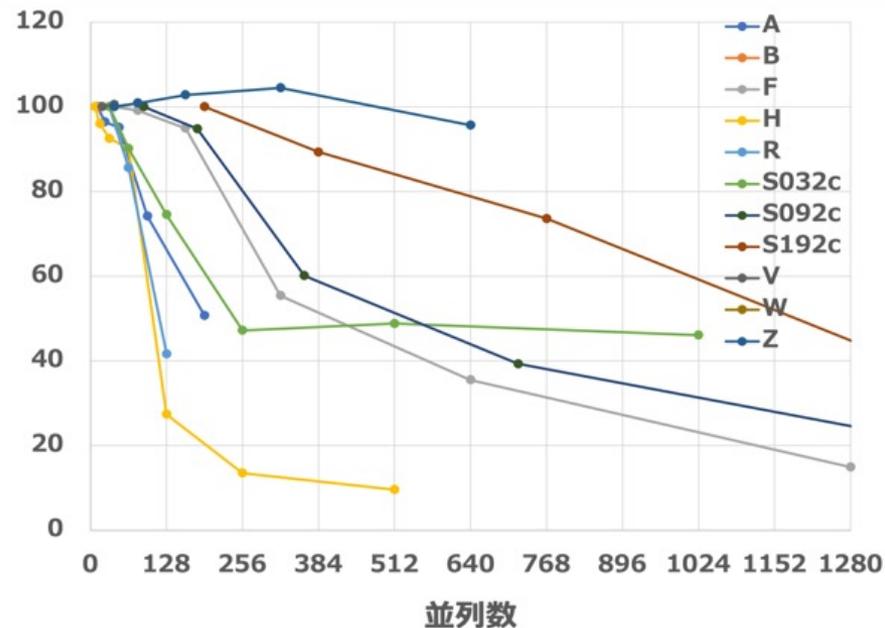
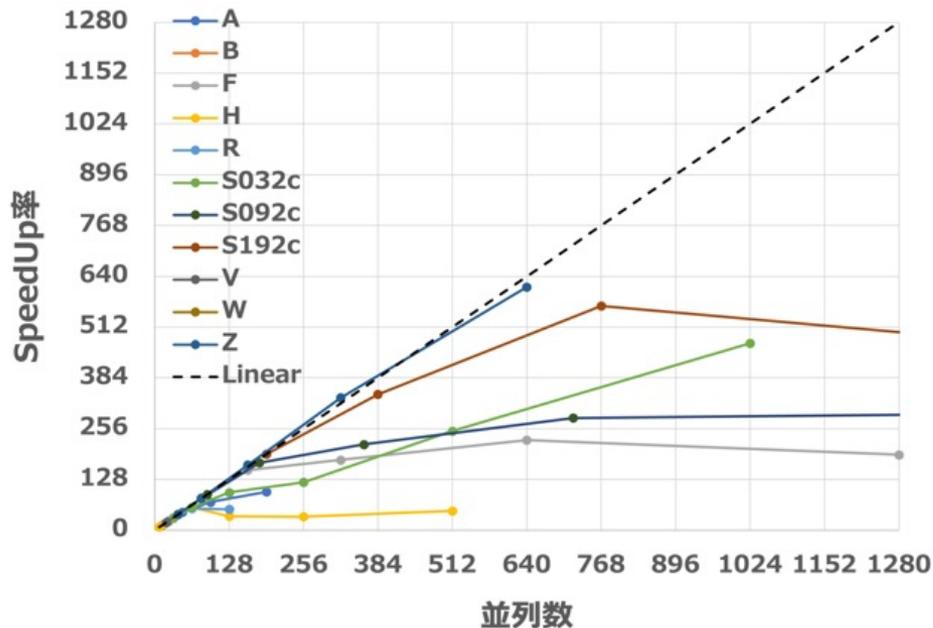
実行時間(並列数依存)



SpeedUp率 & 並列効率(並列数依存)

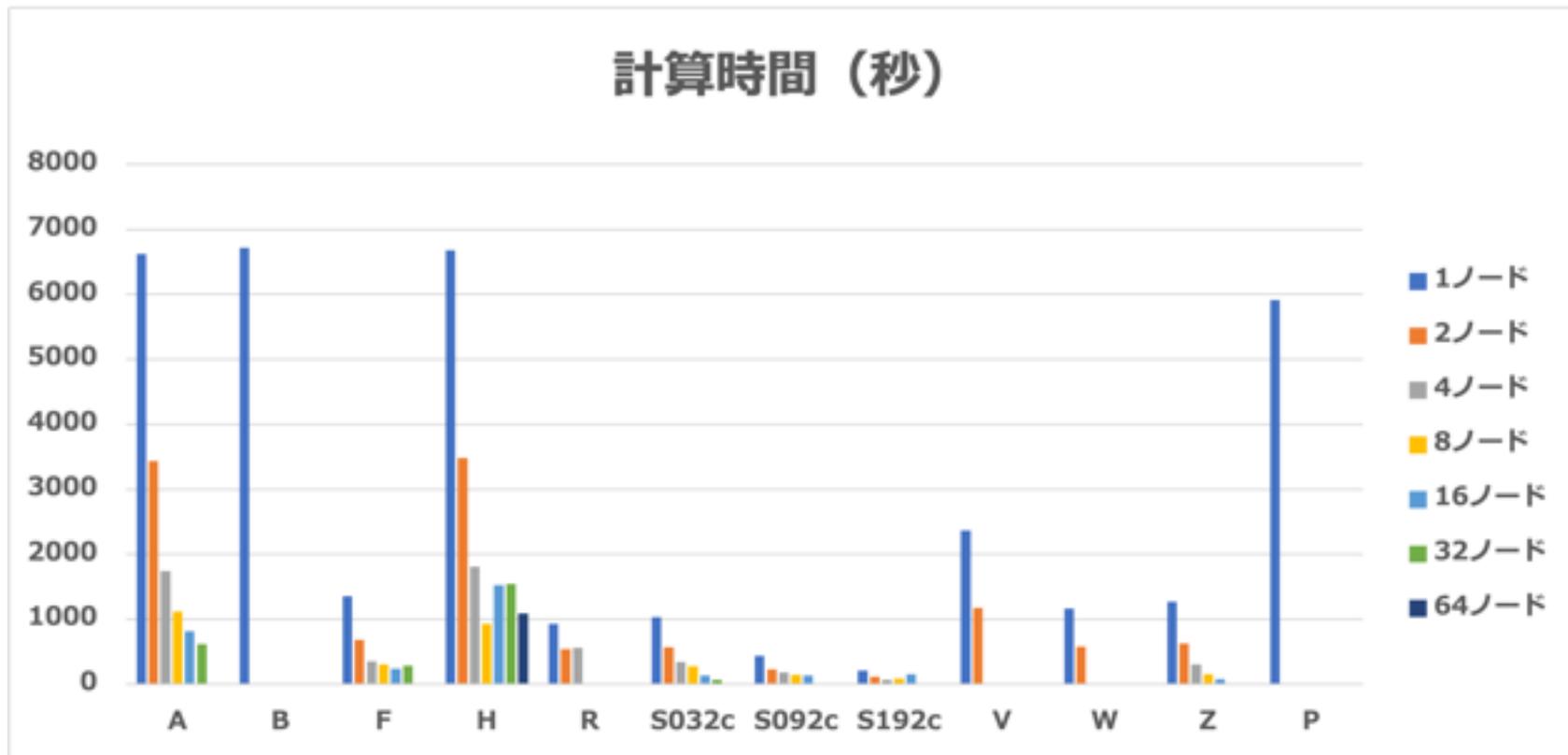
SpeedUp率 = 実行時間(1並列) / 実行時間(N並列)
並列効率 = SpeedUp率 / N

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。



- ・高速ネットワークを搭載していない
H, Rシステムは並列効率がよくない。

実行時間(ノード数依存)



ノード内全コアを使って計算 (ただしS092cについては1ノードあたり90コアとして実行した)

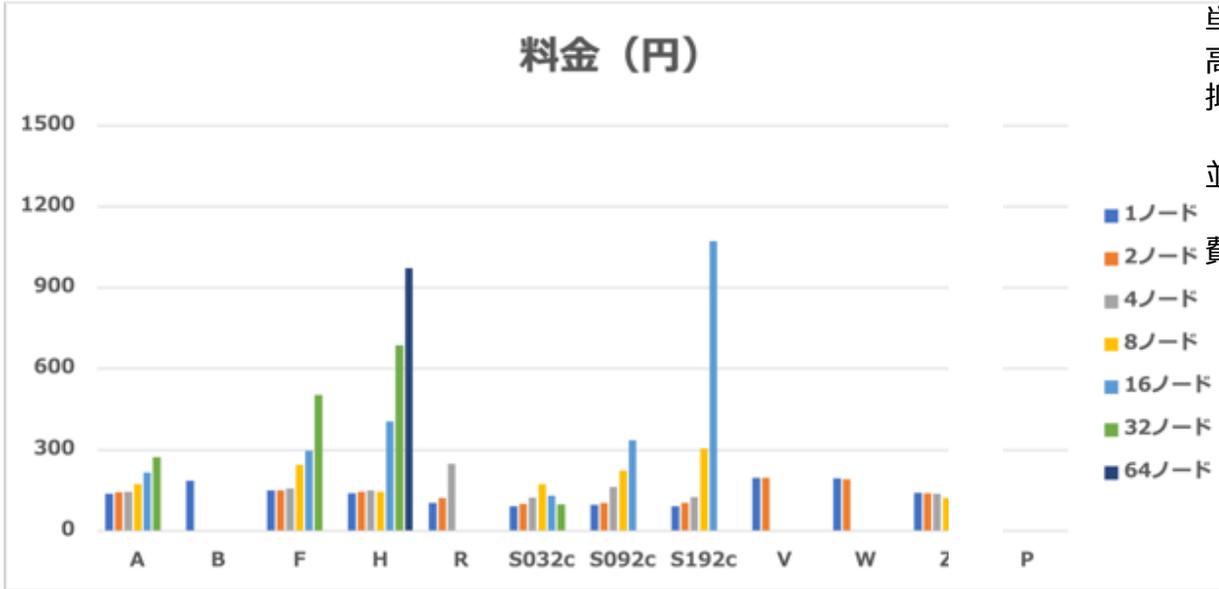
例：Fシステム2ノード=40コアx2ノード = 80並列

S092cシステム2ノード=90コアx2ノード = 180並列

各システムのコア数は「各システム概要」を参照してください。

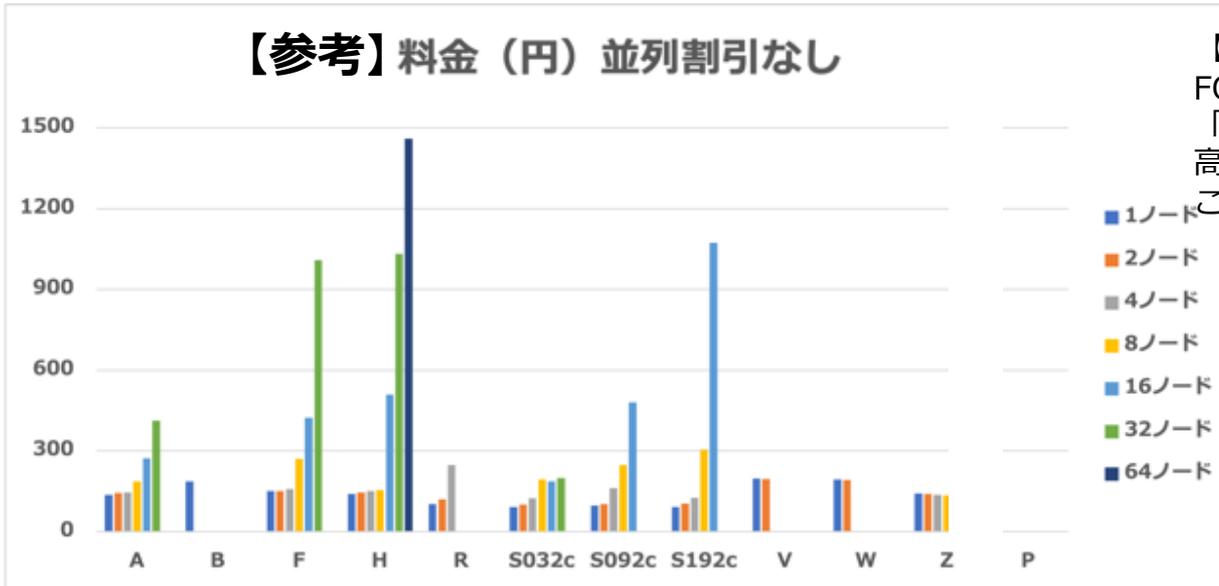
利用料金(ノード数依存)

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。



単価の高いS192cシステムを利用して高速に終了すれば、他システムより費用を抑えて実行できる。

並列割引制度により高並列の場合も（並列効率が100%以下でも）、費用が抑えられる。



【参考】

FOCUSスパコンの主なシステムでは「並列割引」料金を設定しており、高並列実行するほど単価が下がる。この並列割引がなかった場合を参考に示す。