

ABINIT-MP(Ver2-Rev8) 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

2025年4月

ベンチマーク設定

- ベンチマークモデル (HIV-P) PROTEASE AND LOPINAVIR AND WATER
原子数 : 3235
計算方法 : MP2 / 6-31G
- 実行バージョン
 - ABINIT-MP-OPEN(VER2-REV08)
(コンパイラ : Intel OneAPI 2024, @Sシステムにてコンパイル)
 - FOCUSスパコン共用領域導入
/home1/share/x86_64/el8/ABINIT-MP-OPEN/VER2-REV08/
- 実行システム
F,H,R,S(008c,032c,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
- **ハイブリッド並列** : プロセスあたり**8スレッド**
並列数=プロセス数 x 8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)

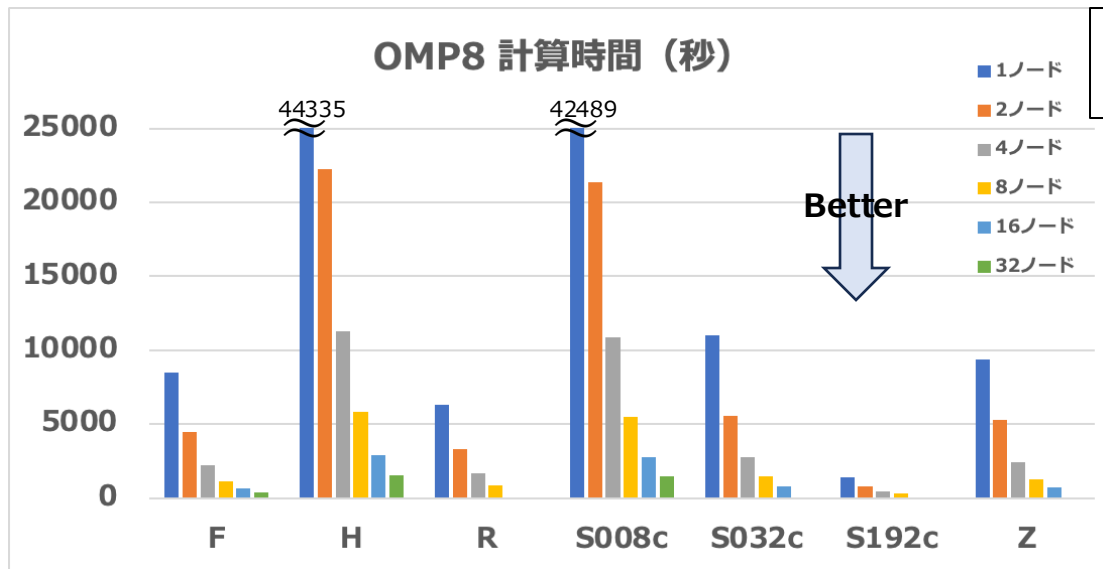
システム	ノード内 コア数	最大ノード数	ベース 周波数(GHz)
F	40	60	2.2
H	8	136	2.1
Q	64	1	2
R	32	10	2.8
s008c	8	32	2.4
S032c	32	80	2.4
S192c	192	16	2.4
V	20	2	2.4
W	40	2	2.4
Z	40	24	2.1
X	48	6	1.8

2025年度ノード単価料金(円)

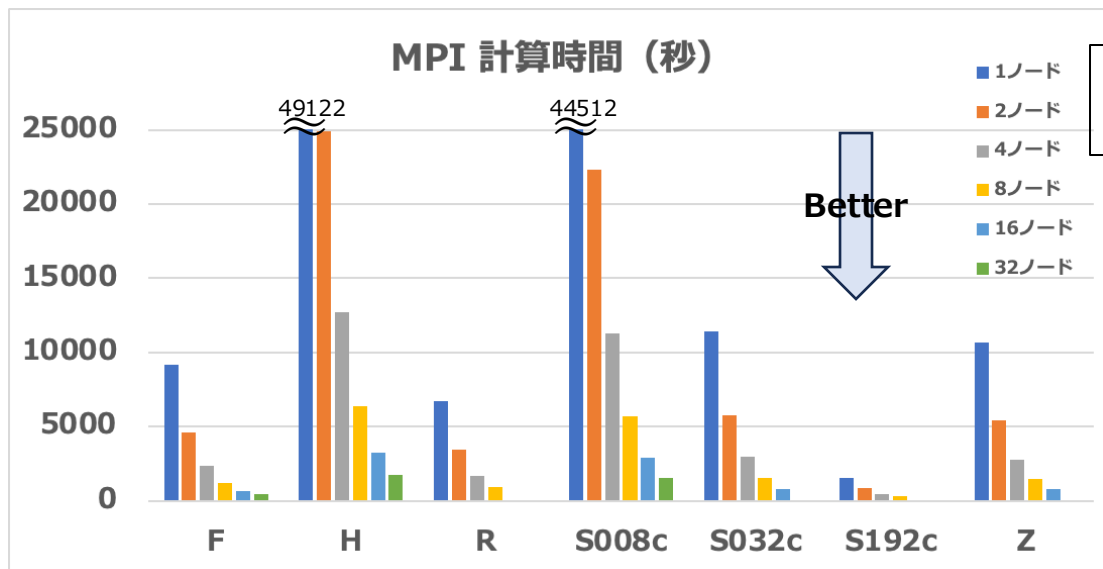
1~	5~	9~	13~	17~	21~
300	270	240	210	180	150
60	55	50	45	40	35
450	---	---	---	---	---
300	270	240	---	---	---
60	55	50	45	40	35
320	288	256	224	192	160
(別表)				---	---
250	---	---	---	---	---
500	---	---	---	---	---
300	270	240	210	180	150
100	---	---	---	---	---

	1	2	3	4	5	6	7~
S192c	1200	1140	1080	1020	960	900	840

実行時間(ノード数依存)



ハイブリッド並列



MPI並列

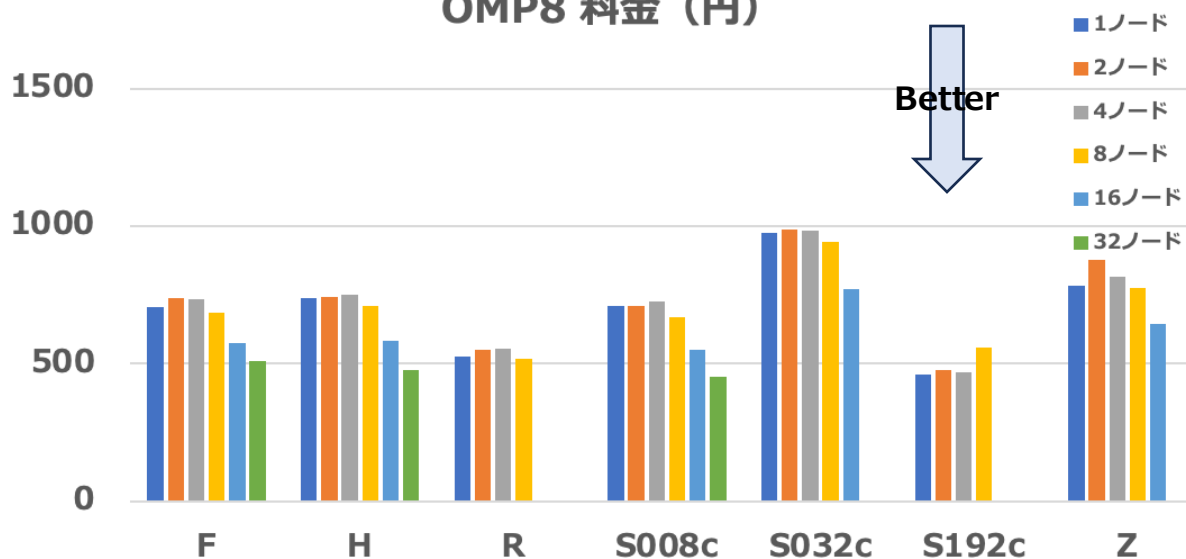
このケースでは

- ・ハイブリッドとMPI並列比較において大きな差異はない。
強いて言うならば、
ハイブリッドが優位 (速い)

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。

OMP8 料金 (円)

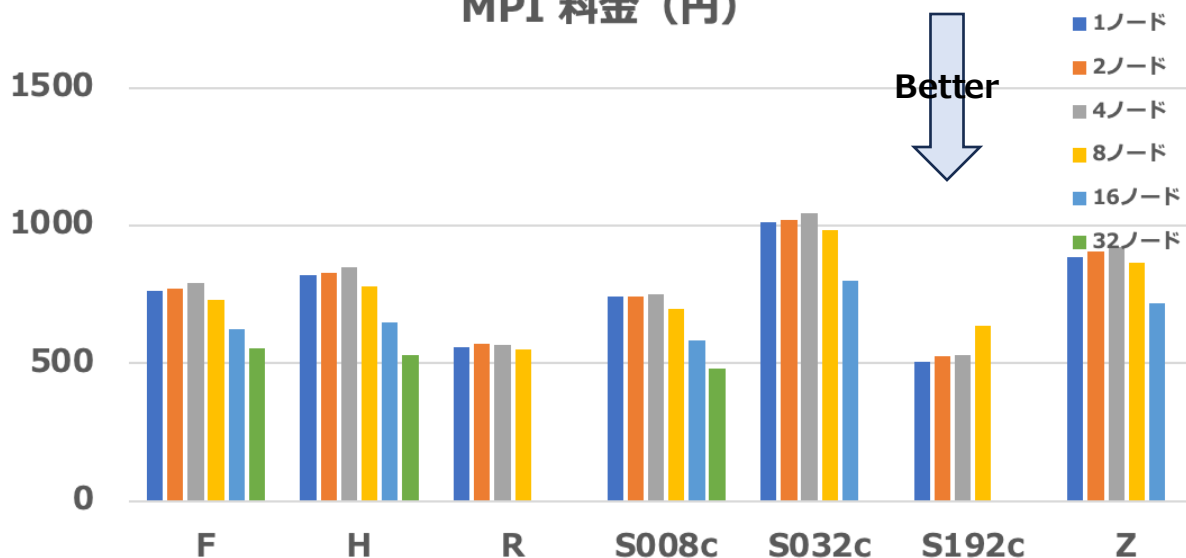


ハイブリッド並列

このケースでは

- ・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)
- ・並列効率が高く、約512並列まで効率が落ちない(次ページ参照)。
- ・また、並列割引の効果もあり、多ノード並列でも料金が下がる場合が多く見られる。
- ・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。(ただし、並列効率が悪くなり始める1024並列(8ノード)未満にまで)

MPI 料金 (円)



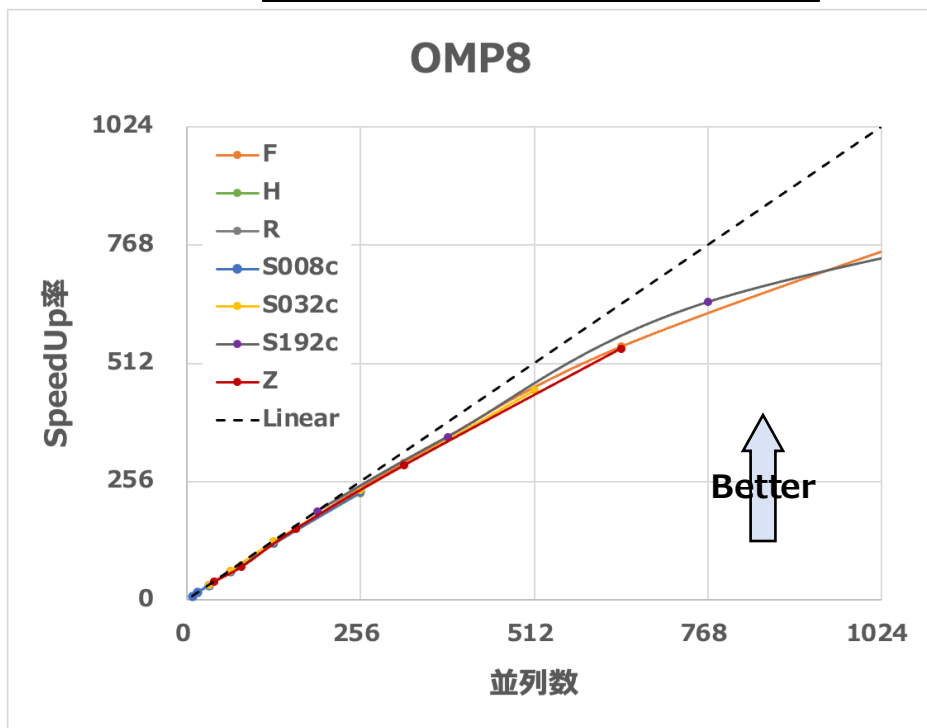
MPI並列

SpeedUp率(並列数依存)

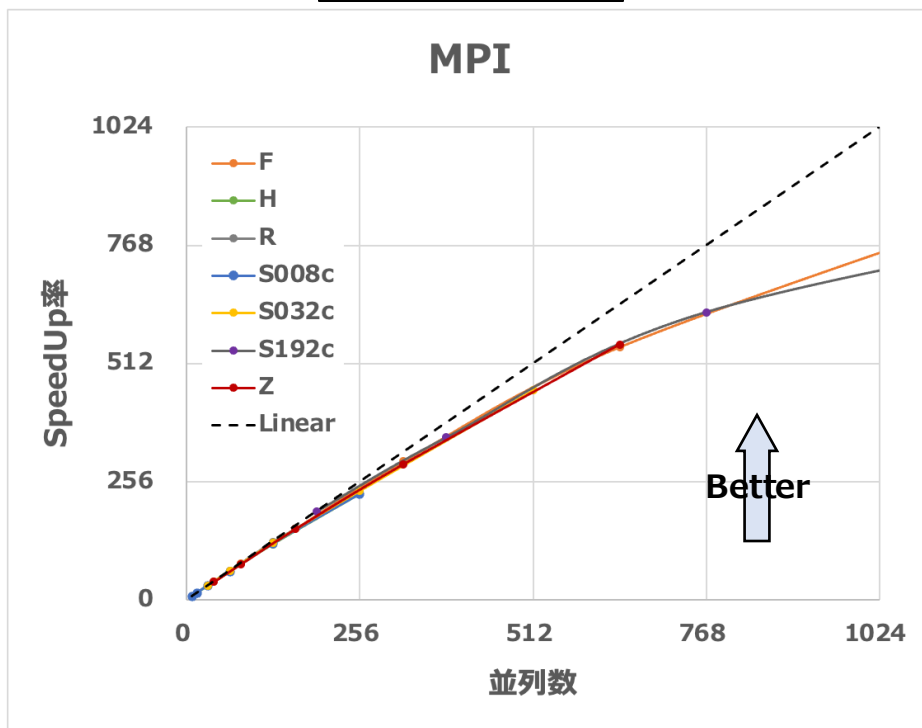
SpeedUp率 = 実行時間(1並列)/実行時間(N並列)

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、

- どちらも高い並列効率 (SpeedUp率) を示している、ハイブリッド並列の方がMPI並列と比較して、やや並列効率落ちにくいと言える。
- 特に512並列まではどちらも高い効率を保っている。並列効率が落ちにくいAblinit-MPの理論的な特徴を反映した結果である。ただし、フラグメントの構成等により大きく変わる可能性がある点は注意。