

QuantumEspresso7.5 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
2026年6月

ベンチマークについては、以下の依存性があり、本資料においては、あくまで提示の環境、設定にて実施したことをご理解いただき、参考としてください。

- ・ビルド依存性（コンパイラ、コンパイルオプション、ビルドプラットフォーム等）
- ・ジョブ特性依存性（計算方法、サイズ、系の特性、等）

ベンチマーク設定

- ベンチマークモデル

- ausurf-Large

- https://hpc-forge.cineca.it/files/gara_tier_1/public/AuSurf-large.tar.gz

- 実行バージョン

- QuantumEspresso 7.5

- (CPU版 : Intel OneAPI 2024, @Sシステムにてコンパイル)

- (GPU版 : NVIDIA HPC 24.5, cuda 13.1, @Nシステムにてコンパイル)

- FOCUS共用領域に導入済み

- [/home1/share/x86_64/el8/espresso/espresso-7.5/\[intel,intel_omp,gpu\]](#)

- 実行システム (次ページ 概要 (スペック、料金) 参照)

- MPI/OMP@CPU実行: F,Q,R,S(008c,032c,192c),Z

- GPU実行: Nsys(H100orH200 1ノードあたり1基搭載) 最大2ノード

- HPCI AISS1(H200 1ノードあたり4基搭載) 最大1ノード

- 並列数

- CPU版 : 各システム 1,2,4,8, . . . ノードにて計算

- $\text{並列数} = \text{各システムノードあたり搭載コア数} \times \text{ノード数}$

- 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

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
N	32	4	3.25
Q	64	1	2
R	32	10	2.8
S008c	8	32	2.4
S032c	32	39	2.4
S192c	192	16	2.4
V	20	2	2.4
W	40	2	2.4
Z	40	24	2.1

ノード単価料金(円)

	1	2	4	8	16	32	64
F	300	300	300	270	210	150	---
N	1000	1000	1000	---	---	---	---
Q	300	---	---	---	---	---	---
R	200	200	200	180	---	---	---
S008c	60	60	60	55	45	30	30
S032c	300	300	300	270	210	150	150
S192c	1200	1140	1080	840	840	---	---
V	200	200	---	---	---	---	---
W	400	400	---	---	---	---	---
Z	300	300	300	270	210	150	---

ベンチマークで使ったノード数の単価を示しています。
料金の詳細は「利用料金」をご確認ください
<https://www.j-focus.or.jp/focus/fee.html>

MPI実行

- MPI版バイナリ@FOCUSスパコン (コンパイラ : IntelOneAPI2024)
/home1/share/x86_64/el8/espresso/espresso-7.5/intel/bin/pw.x

- ノード内全コアを使って計算

例 : Fシステム2ノード=40プロセスx2ノード = 80並列

S032cシステム2ノード=32プロセスx2ノード = 64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。

- 実行設定、コマンド

```
export OMP_NUM_THREADS=1 #固定
```

```
mpirun -np ${NNN} ${QEDIR}/bin/pw.x -input ${INPUT}¥
```

```
    -npool ${NPOOL} -ntg ${NTG}  ${NDop}
```

NNN : MPI並列数 (NNN=\${SLURM_NTASKS})

QEDIR : /home1/share/x86_64/el8/espresso/espresso-7.5/intel/ (共用領域MPI版導入ディレクトリ)

INPUT : インพุットファイル (INPUT="ausurf-large")

NPOOL : 8 (全計算固定)

NTG : 1poolあたりのプロセス数(np/nk)の約数でk-point(=8)以下の最大値

NDop : 1poolあたりのプロセス数(np/nk)が4以下の場合は

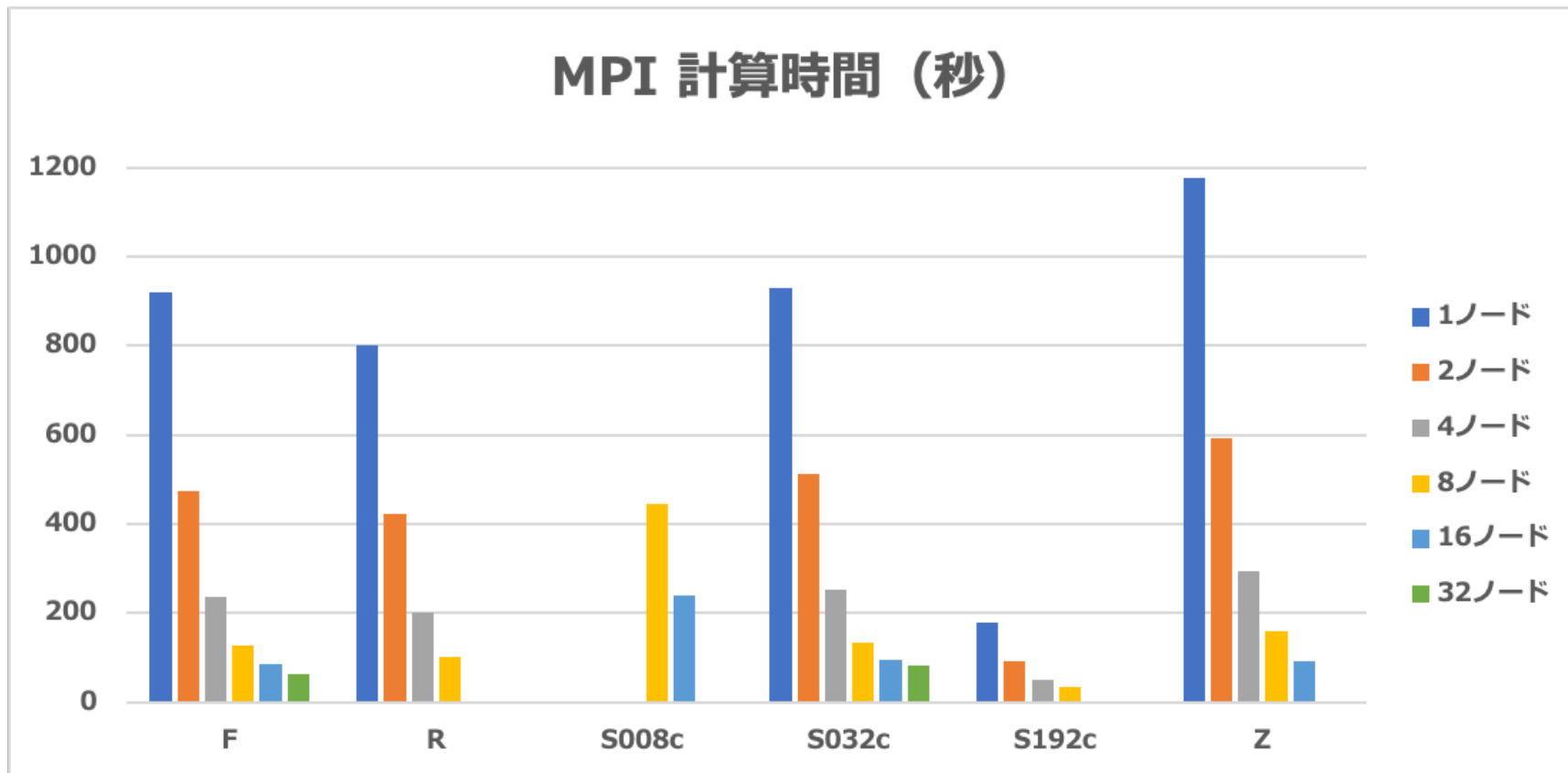
コレスキーエラー発生するケースが多いので -nd=1(ScaLAPACKの対角化並列数) とする

- 実行時間の評価

QuantumEspresso 出力の WALL TIMEを採用

```
$ grep "PWSCF.*WALL" [出力ファイル]
```


実行時間(ノード数依存)

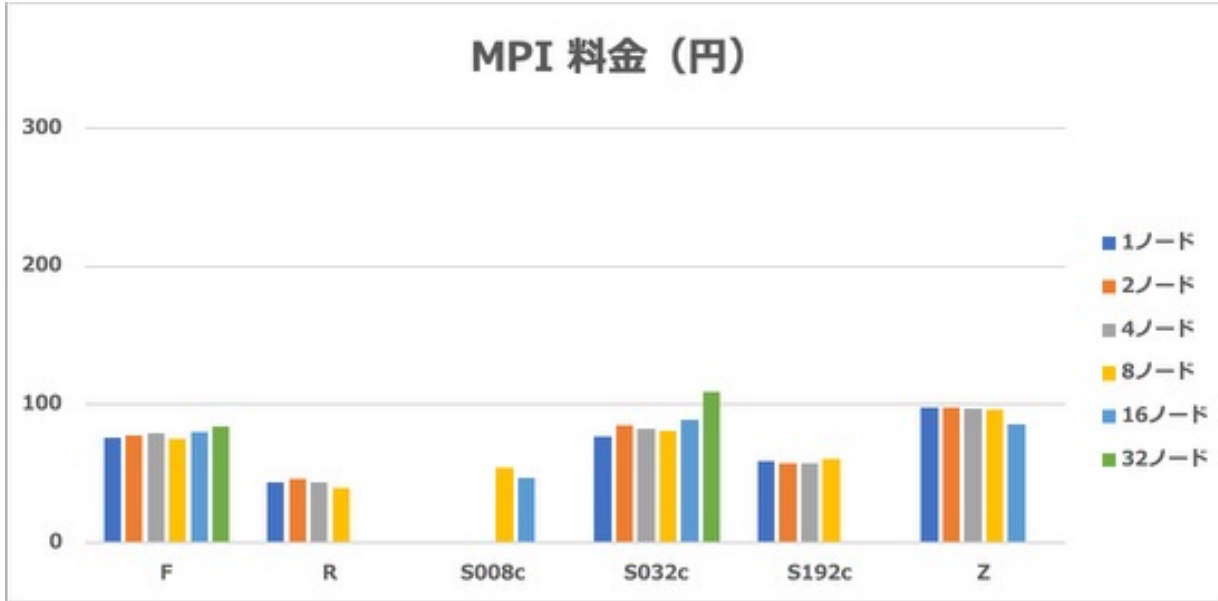


・ S008c 1,2,4ノード (8,16,32並列) はメモリ不足のため実行不可

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。

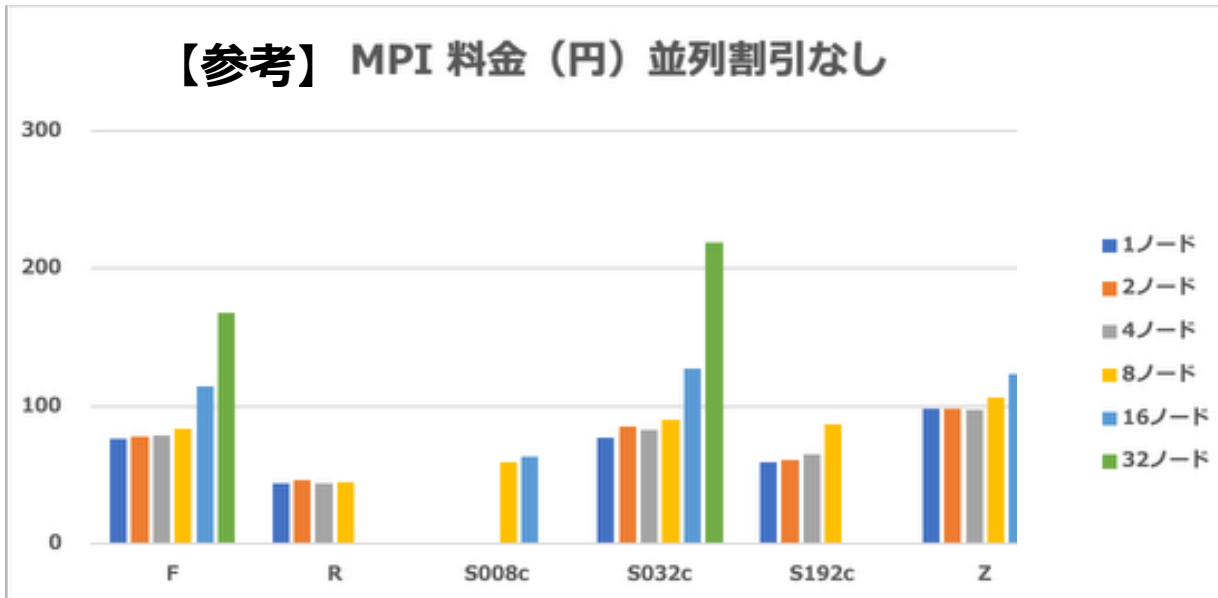
- ・ FOCUSスパコンにおいてはノード時間での課金となるため、ノード数依存でのコストを検討



・ 単価の高いS192cシステムを利用しても高速に終了すれば、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。

・ Rシステムのコストパフォーマンスがよい
ただし、ノード間通信の多い計算の場合は並列効率が落ちることが考えられる。
(Rsys : ノード間速度10Gbps)



【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。

MPI/OMPハイブリッド実行

- ハイブリッド版バイナリ@FOCUSスパコン (コンパイラ : IntelOneAPI2024)
/home1/share/x86_64/el8/espresso/espresso-7.5/intel_omp/bin/pw.x
- プロセスあたりのスレッド数 = 8 (全計算通して固定)
- ノード内全コアを使って計算
例 : Fシステム2ノード=5プロセスx8スレッドx2ノード = 80並列
S032cシステム2ノード=4プロセスx8スレッドx2ノード = 64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。

• 実行設定、コマンド

```
export OMP_NUM_THREADS=8 #固定
mpirun -np ${NNN} ${QEDIR}/bin/pw.x -input ${INPUT}¥
        -npool ${NPOOL} -ntg ${NTG} ${NDop}
```

NNN : MPI並列数 (NNN=\${SLURM_NTASKS})

QEDIR : /home1/share/x86_64/el8/espresso/espresso-7.5/intel_omp/
(共用領域ハイブリッド版導入ディレクトリ)

INPUT : インพุットファイル (INPUT="ausurf-large")

NPOOL : 8 (全計算固定)

NTG : 1poolあたりのプロセス数(np/nk)の約数でk-point(=8)以下の最大値

NDop : 1poolあたりのプロセス数(np/nk)が4以下の場合は

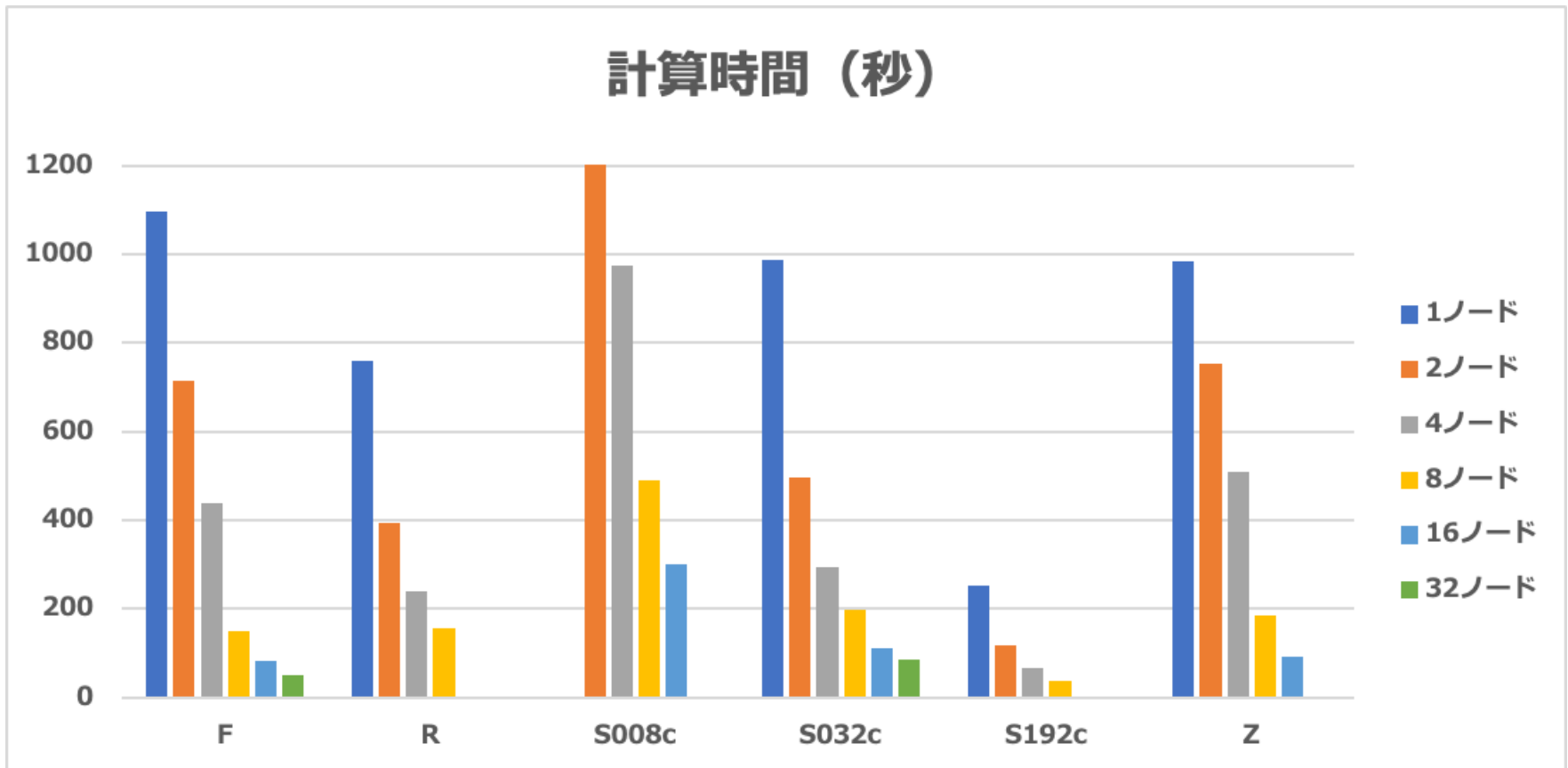
コレスキーエラー発生する場合が多いので -nd=1(ScaLAPACKの対角化並列数) とする

• 実行時間の評価

QuantumEspresso 出力の WALL TIMEを採用

```
$ grep "PWSCF.*WALL" [出力ファイル]
```

実行時間(ノード数依存)

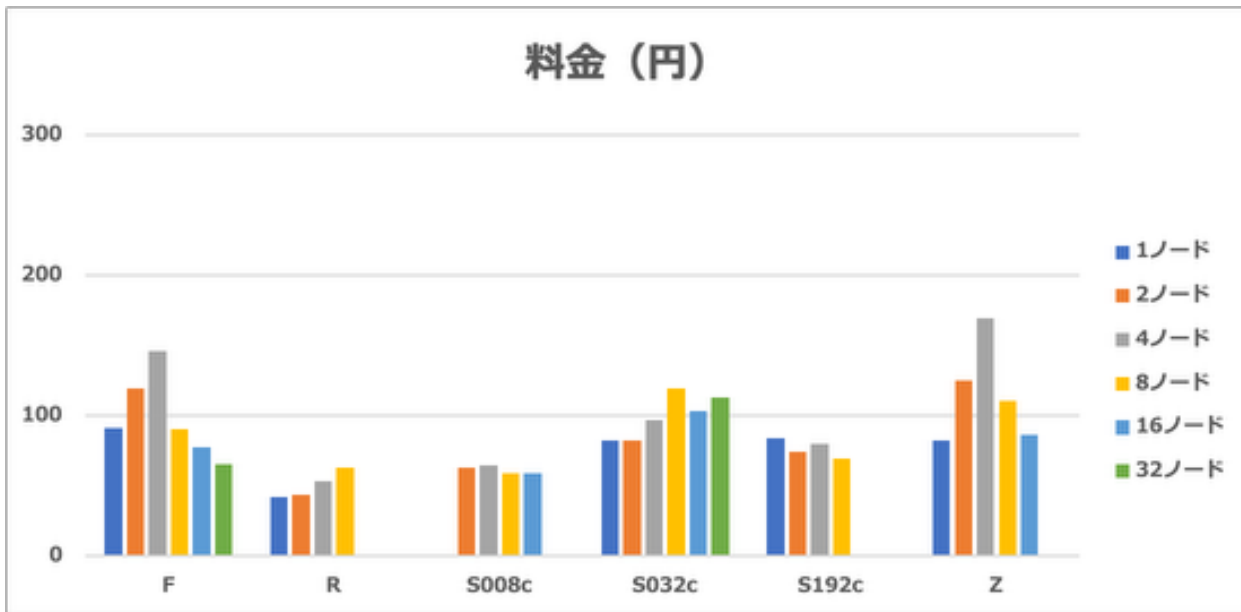


・ S008c 1ノード (8並列) はメモリ不足のため実行不可

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。

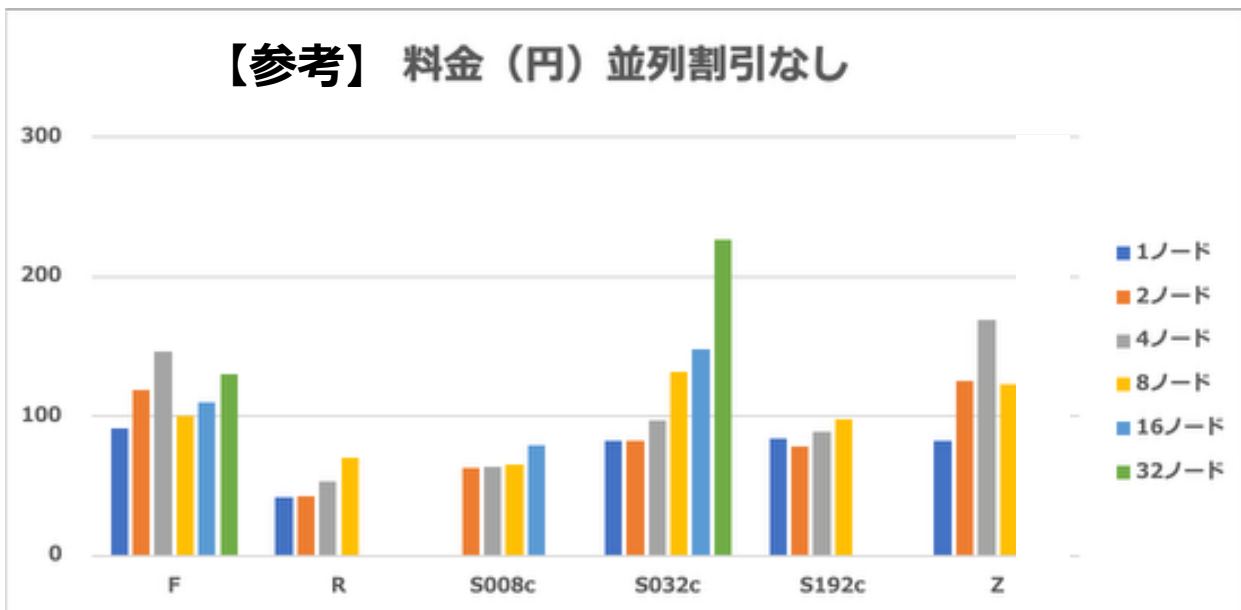
- ・ FOCUSスパコンにおいてはノード時間での課金となるため、ノード数依存でのコストを検討



・ 単価の高いS192cシステムを利用しても高速に終了すれば、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。

・ Rシステムのコストパフォーマンスがよい
ただし、ノード間通信の多い計算の場合は並列効率が落ちることが考えられる。
(Rsys : ノード間速度10Gbps)



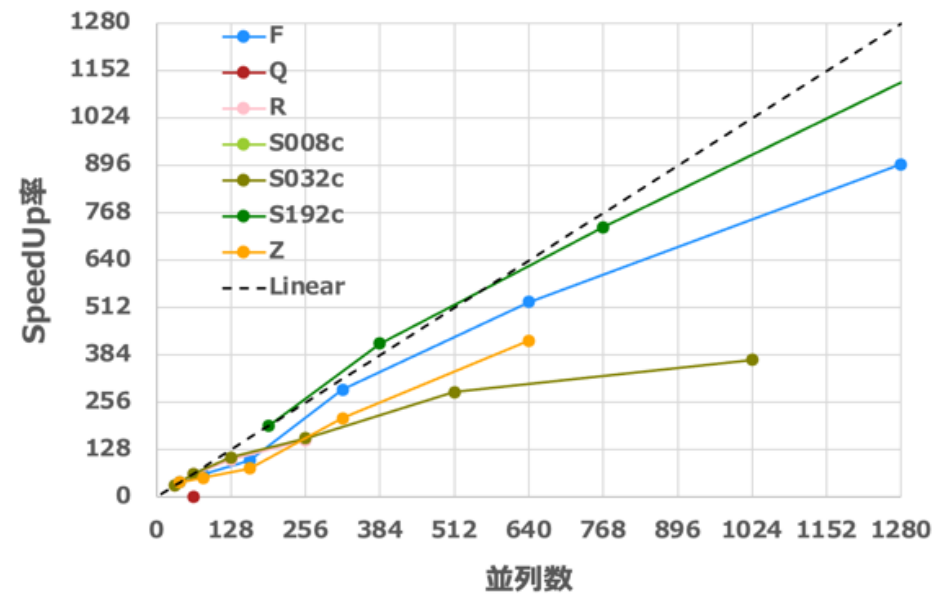
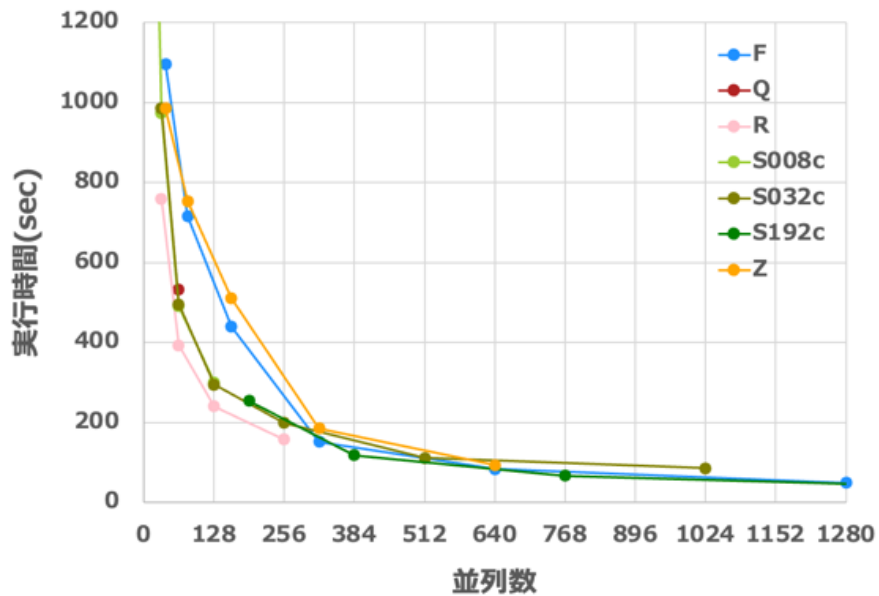
【参考】

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。

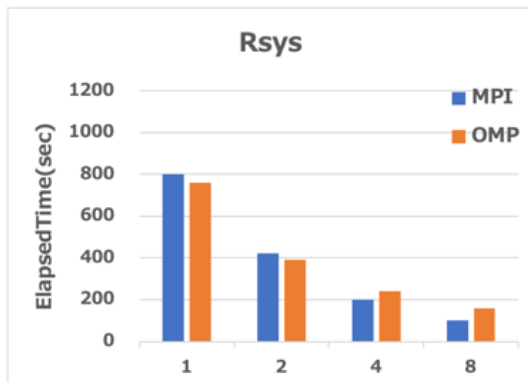
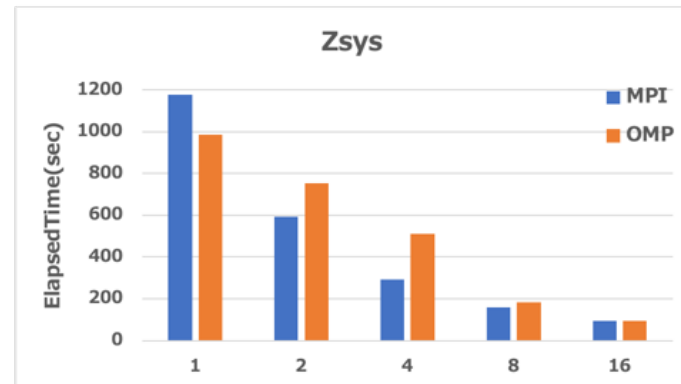
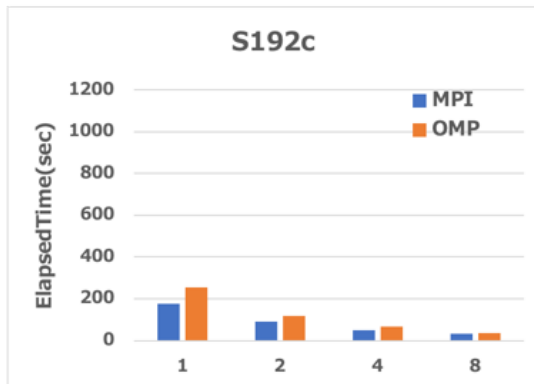
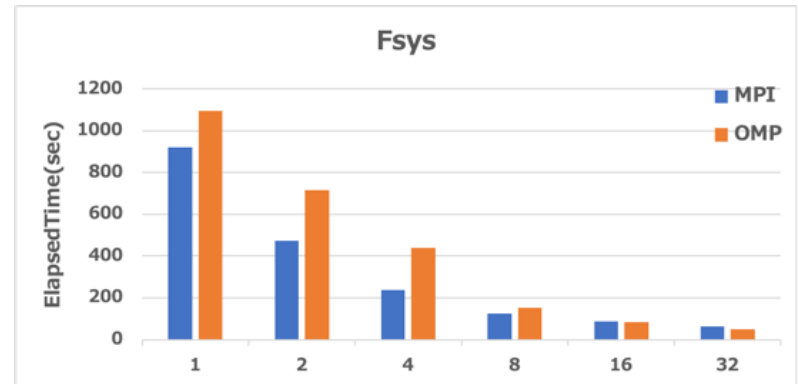
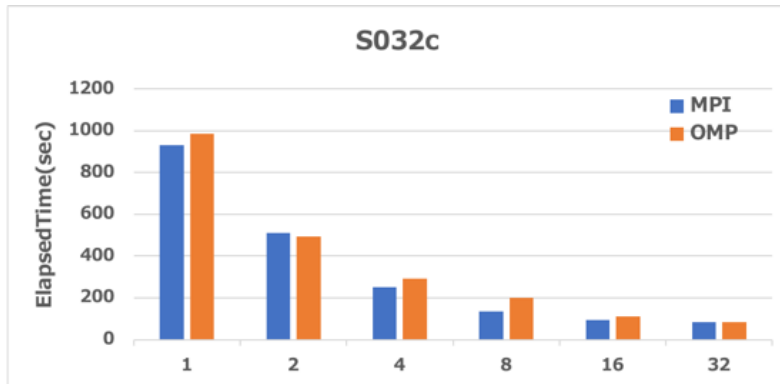
実行時間とSpeedUp率(並列数依存)

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。



MPI vs ハイブリッド



- ・横軸：ノード数
- ・表記：OMP= MPI/OMPハイブリッド
- ・計算時間について低並列部はMPI が優勢
F,Zsysについては高並列部でMPI/ハイブリッドが逆転

GPU実行

実行対象システム

- **Nシステム**

n001,n002: ノードあたりH100 1基搭載

n003,n004: ノードあたりH200 1基搭載

- **HPCI AISS1**※

ノードあたりH200 4基搭載

※HPCI AISS1

多様な分野におけるAI活用による科学研究の革新を推進を目的とした、

AI for Science のためのプラットフォーム

HPCI アクセスポイント神戸(APKB)利用者に提供中。

APKB利用、登録については[こちら](#)

- GPU版バイナリ@FOCUSスパコン (コンパイラ: NVIDIA HPC 24.5, cuda 13.1)
/home1/share/x86_64/el8/espresso/espresso-7.5/gpu/bin/pw.x

- ベンチマーク内容

1プロセス/GPU1基 に割当

- Nシステム(ノードあたりGPU1基) 1プロセス x [1,2]ノード (異なるGPU間の並列不可)

- HPCI AISS(ノードあたりGPU4基)=[1,2,3,4]プロセスx1ノード

※各システムのGPU搭載数等は前ページ「実行対象システム」を参照してください。

- 実行設定、コマンド

```
case ${SLURM_NTASKS_PER_NODE} in          #プロセス数に応じてGPUを指定
  1) export CUDA_VISIBLE_DEVICES=0 ;;
  2) export CUDA_VISIBLE_DEVICES=0,1 ;;
  3) export CUDA_VISIBLE_DEVICES=0,1,2 ;;
  4) export CUDA_VISIBLE_DEVICES=0,1,2,3 ;;
  *) echo "Please enter a valid value."; exit 1 ;;
esac
mpirun -np ${NNN} ${QEDIR}/bin/pw.x -input ${INPUT}
```

NNN : MPI並列数 (NNN=\${SLURM_NTASKS})

QEDIR : /home1/share/x86_64/el8/espresso/espresso-7.5/gpu/ (共用領域GPU版導入ディレクトリ)

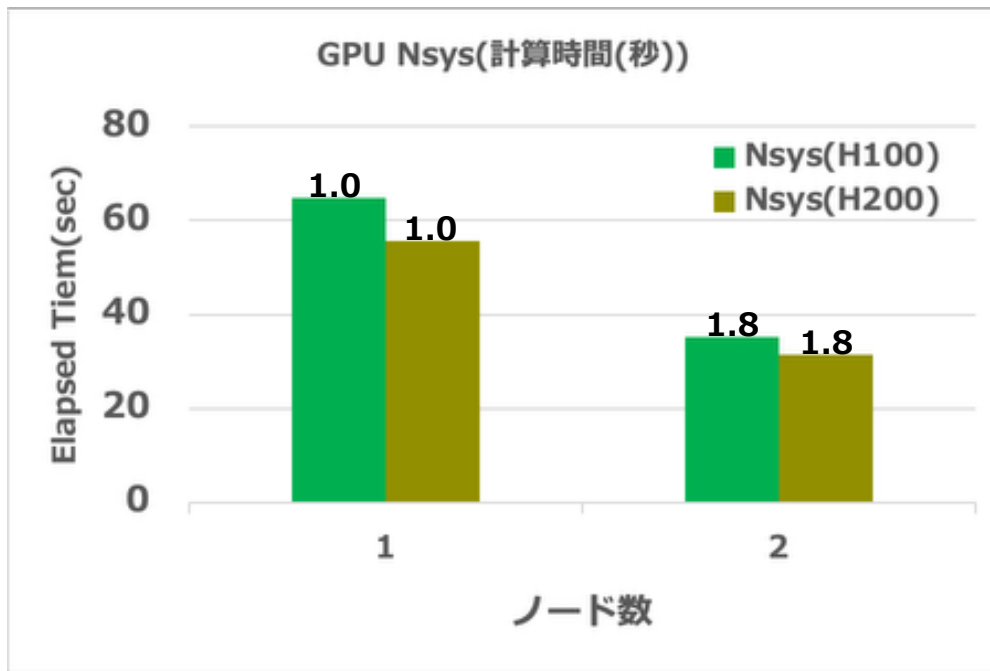
INPUT : インプットファイル (INPUT="ausurf-large")

- 実行時間の評価

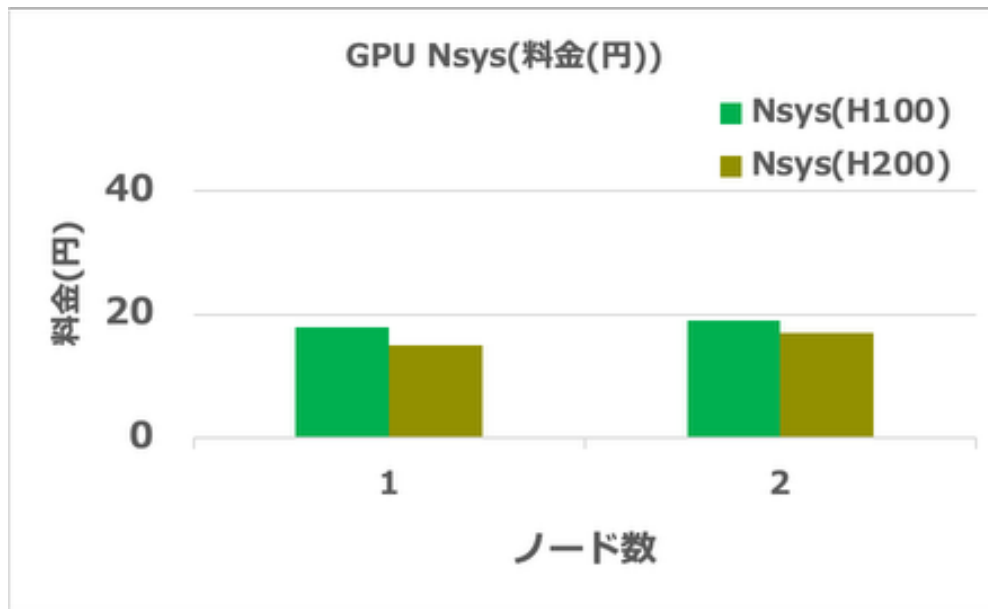
QuantumEspresso 出力の WALL TIMEを採用

\$ grep "PWSCF.*WALL" [出力ファイル]

Nシステム

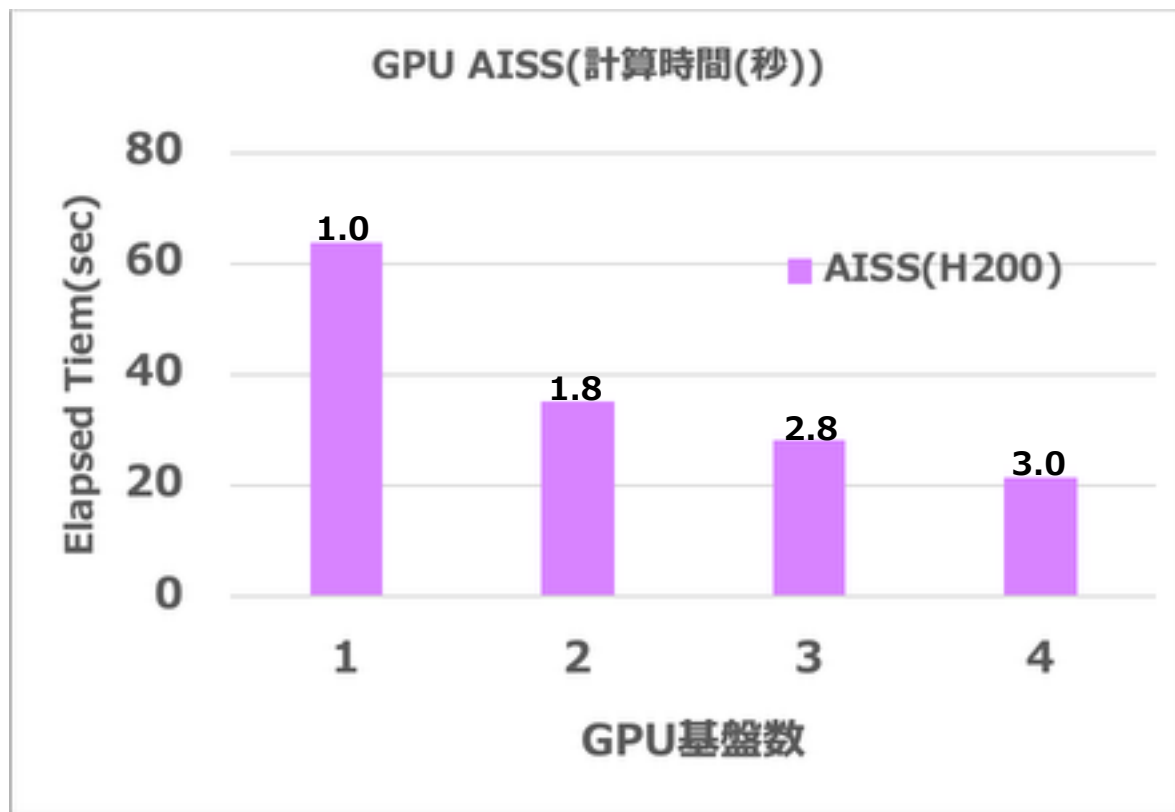


- 計算時間において、H100/H200の比較ではH200のほうが優位
- 棒グラフ上の数値は
SpeedUp率=実行時間(1ノード)/実行時間(nノード)
2ノード(2GPU利用)の場合の理想値 (リニア) は2



- CPUメニーコア S192c
MPI1ノード192並列の実行時間が178秒で課金額59円と比較してもGPU利用の場合は約半額の18円(H100), 15円(H200)と安価で実行できることを確認できた。
- 1ノード (1GPU) →2ノード(2GPU)並列においてもこの場合は2倍に近い速度で経過時間が半分程度になったため、料金についてはほぼ同一という結果となった。
結果を得るまでの時間が短い方が良いという場合は2ノードで2GPUを利用し、少しでも総コストが低い方が良い場合は1ノード1GPUでの実行を推奨する。

HPCI AISS1



- 棒グラフ上の数値は
 $\text{SpeedUp率} = \frac{\text{実行時間}(1\text{GPU})}{\text{実行時間}(n\text{GPU})}$ ($n=1,2,3,4$)
リニアにまではいかないが、基盤数に基づいた速度向上を確認