

Gaussian03/98 の効率的な利用について



計算科学研究センター
南野 智

計算科学研究センターのマシン性能

ベクトル型コンピュータ	スカラ並列型コンピュータ
NEC SX-7	NEC TX-7/i9510
共有メモリ型ベクトルスーパーコンピュータ	共有メモリ型スカラ並列コンピュータ
OS : SuperUX CPU : 32node (552MHz[一部1104MHz]) メモリ : 256GB (バンド幅35.3GB/s[1node]) ピーク性能 : 282.5GFlops (8.83GFlops/node・スカラ : 1.1GFlops) ディスク : 4.5TB (8GB/s・I/Oチャネル数 : 127) (3TB[/work], 1TB[/week])	OS : IA-64版 Redhat LINUX 2.4.18-nec3.2p1.002 CPU : Itanium2 32 x 2 CPU (1ボード 4CPU) 1.3GHz メモリ : 128GB x 2メモリ ピーク性能 : 256GFlops (5.2GFlops/CPU) クロスバ帯域幅 : 51.2GB/s ディスク : 3.0TB(6.4GB/s Cellカード当たり) 1TB(/work), 2TB(/week)
Fujitsu VPP5000	SGI SGI2800/3800
分散メモリ型ベクトルスーパーコンピュータ	論理共有メモリ型スカラ並列コンピュータ
OS : UXP/V CPU : 30PE (300MHz) ピーク性能 : 288GFlops(9.6GFlops) 1.2GFlops(スカラ) メモリ : 8GB x 28node・16GB x 2node・76.8GB/s クロスバ性能 : 1.6GB/s*2 ディスク : 3TB 3.0GB/s (380MB/s x 8bus) 2TB(/work), 1TB(/week), 1TB(/save)	OS : IRIX6.5.14m CPU : 192+128CPU (1ボード2CPU) (MIPS R12000(SGI2800/3800)) ピーク性能 : 115GFlops(SGI2800) + 102GFlops(SGI3800) メモリ : 192+128GB(1GB/CPU) 25GB/s 1.6GB/s(ノード間) ディスク : 4TB

PCクラスター

PCクラスター
分散メモリ型スカラ並列コンピュータ
OS : RedHat Linux 8.0
CPU : 24node (1.8GHz)
メモリ : 24GB(バンド幅6.4GB/s[1node])
ディスク : 120GB/1CPU + 10GB/CPU
通信 : 1000Base/T

Gaussian98/03の利用状況

メーカー	マシン名	CPU使用率
NEC	SX-7	20 ~ 40%
	TX-7	20 ~ 40%
Fujitsu	VPP5000	35 ~ 55%
SGI	SGI2800	
	cco2k1(G1)	85 ~ 95%
	cco2k2(G2)	65 ~ 95%
	cco2k31(G3,G4)	20 ~ 50%

CPU点数の比率

	点数換算係数		CPU1時間当たりの消費点数(点)	
	CPU	VPU	CPU	VPU
SX-7	0.10	0.10	360.0	360.0
TX-7	0.02	-	72.0	-
VPP5000	0.050	0.050	180.0	180.0
SGI2800	0.005(0.75)	-	13.5	-

申請CPU時間 × 400 = 利用可能点数

PCクラスターは本当に安価か？

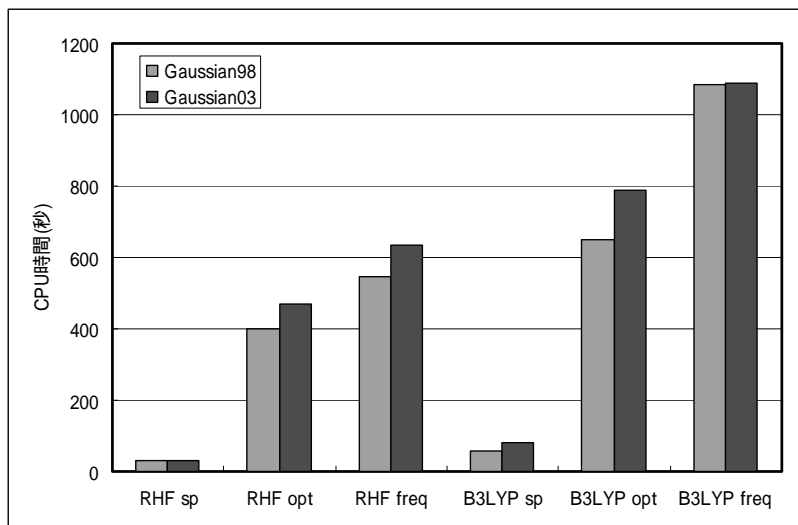
長 所	短 所
<ul style="list-style-type: none"> ・構築が非常に安価。 ・CPU時間に制限がない。 ・拡張性が高い。 ・自由度が非常に高い。 ・制約がなく、使い勝手が良い。 ・他のユーザーやジョブを気にする必要がない。 	<ul style="list-style-type: none"> ・並列計算に限界がある。 ・ネットワーク性能に限界がある。 ・PCの得意な計算にしか向かない。 ・ソフトのインストール等の手間がかかる。 ・メンテナンスの労力が大きい。 ・ハードウェアの故障等にすぐに対処できない。 ・リビジョンアップ等にすぐに対処できない場合がある。
<p>安定稼働しだすと非常に使い勝手がいいのだが、安定稼働させるために労力が必要。最悪、一定期間研究が止まることもありえる。</p>	

ベンチマーク結果における注意点

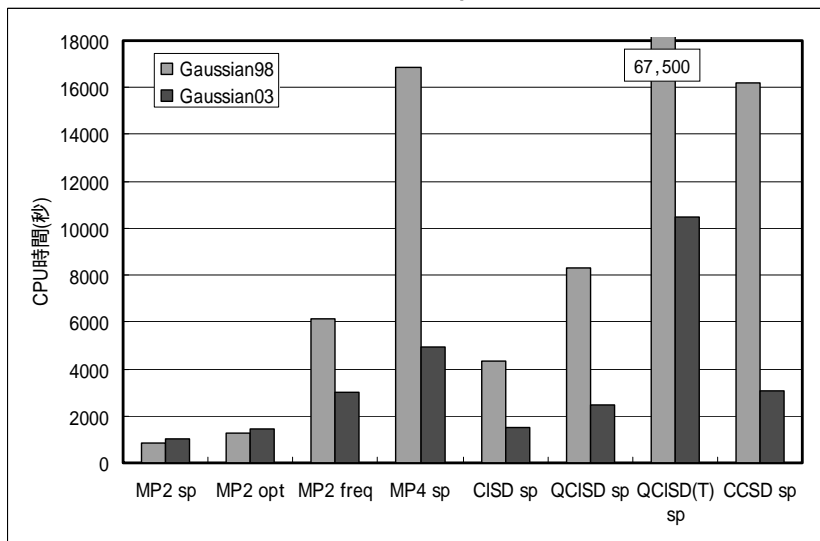
- ・平成15年12月～平成16年2月の期間に測定。
- ・計算対象: Acetic acid, methyl ester ($C_3H_6O_2$)
6-311++G** NB=152, C1対称性
- ・Gaussianのリビジョン、コンパイラ、OSのバージョンアップ等で結果が変化する可能性がある。
- ・システム側の設定等でも結果が変化する可能性がある。
- ・運用中に測定したものである。(他のプロセスの影響を受ける可能性がある)。
- ・あくまで目安である。ハードウェア等の性能と直結しない。

- ・本結果・数値を、無断で転載・発表することは厳禁とする。
(もちろんこの結果は、メーカー非公認である。)

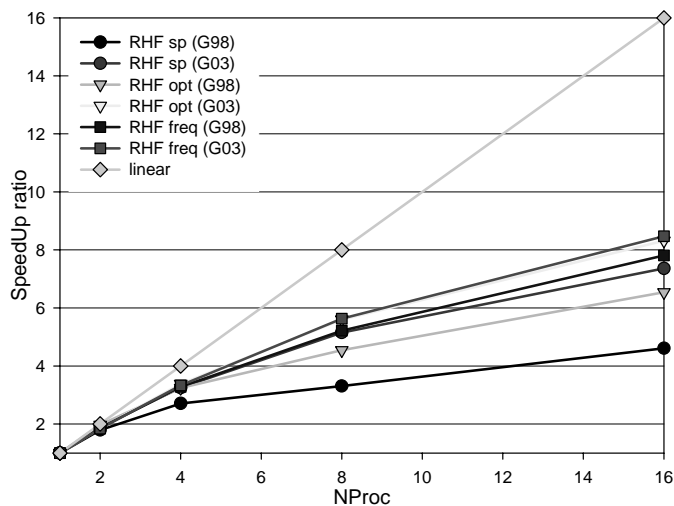
Gaussian98とGaussian03の比較 (TX-7, 1CPU, RHF DFT)



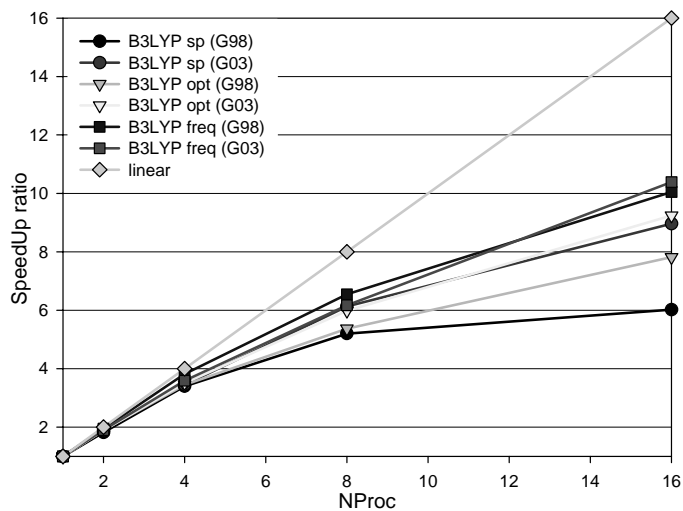
Gaussian98とGaussian03の比較 (TX-7, 1CPU, post-HF)



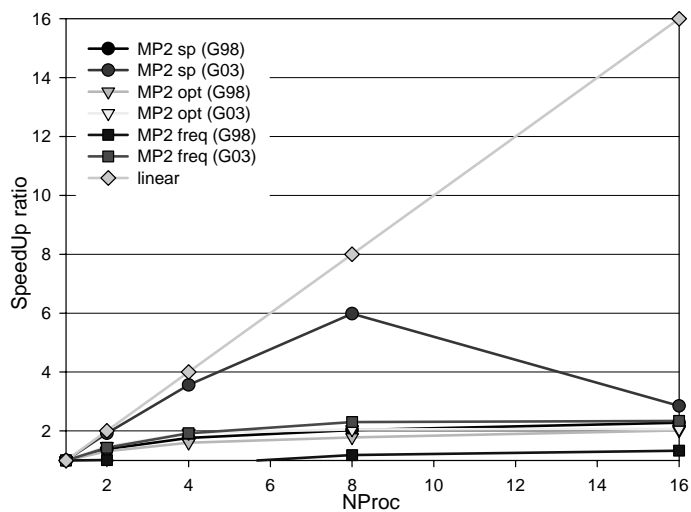
Gaussian98とGaussian03の比較 (TX-7の並列度 RHF)



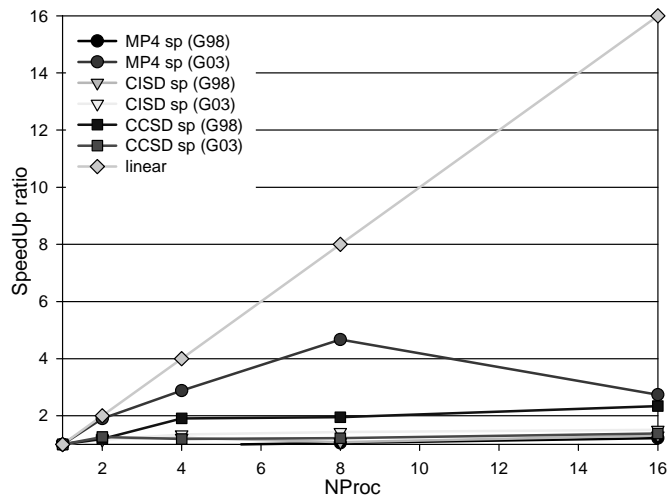
Gaussian98とGaussian03の比較 (TX-7の並列度 DFT)



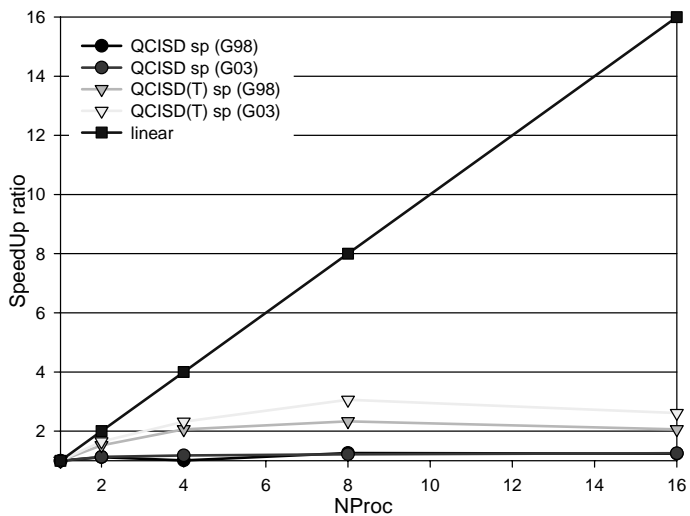
Gaussian98とGaussian03の比較 (TX-7の並列度, MP2)



Gaussian98とGaussian03の比較 (TX-7の並列度, MP4 CISD CCSD)



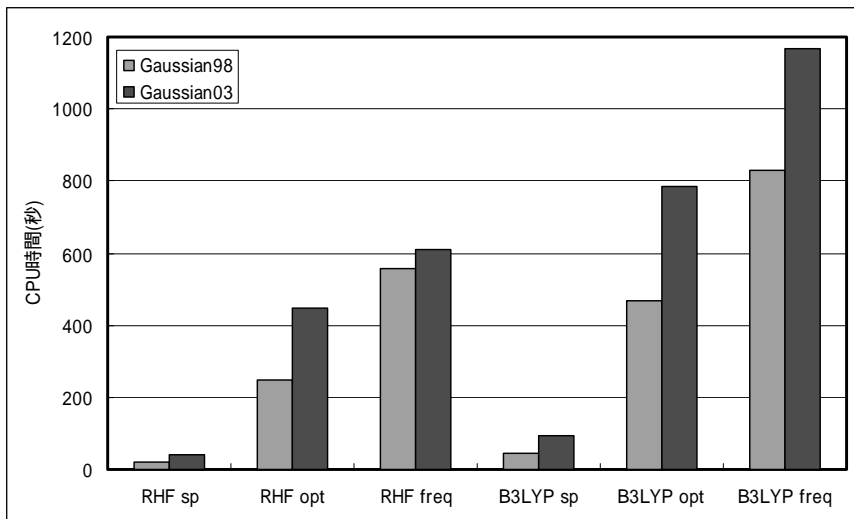
Gaussian98とGaussian03の比較 (TX-7の並列度, QCISD QCISD(T))



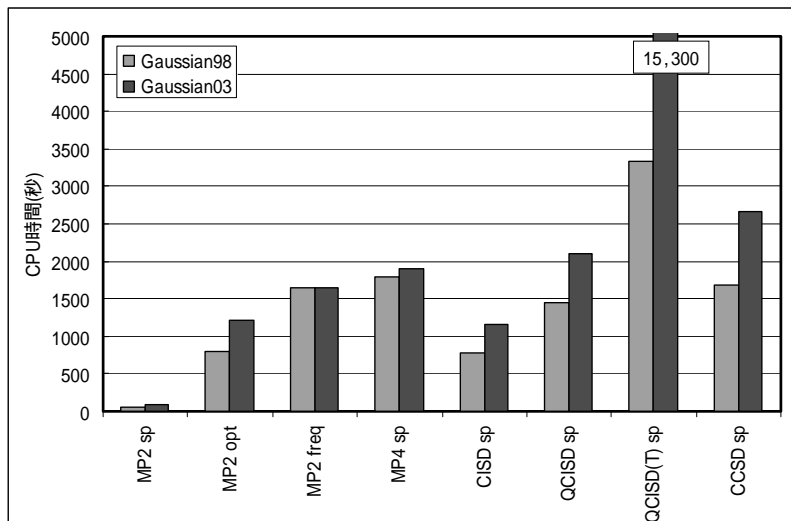
TX-7のまとめ

- ・全体的にGaussian03の方が、並列効率が良くなっている。
- ・TX-7のDFT計算は並列化度が高く、効率的な計算が可能である。
- ・Gaussian98に比べ、Gaussian03では、1CPUでのpost-HF計算が速くなっている。
- ・post-HF計算はほとんど並列化が効かないので、並列で実行する際には、あまり効率は良くない。
- ・ただし、MP2、MP4は並列化が効くようになった。しかし、8CPUまででそれ以上のCPUを使って計算を行う場合は、逆に効率が低下する。

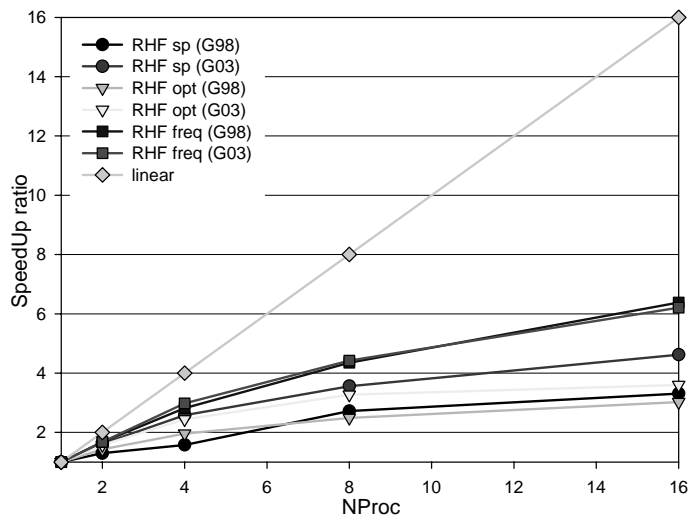
Gaussian98とGaussian03の比較 (SX-7, RHF DFT)



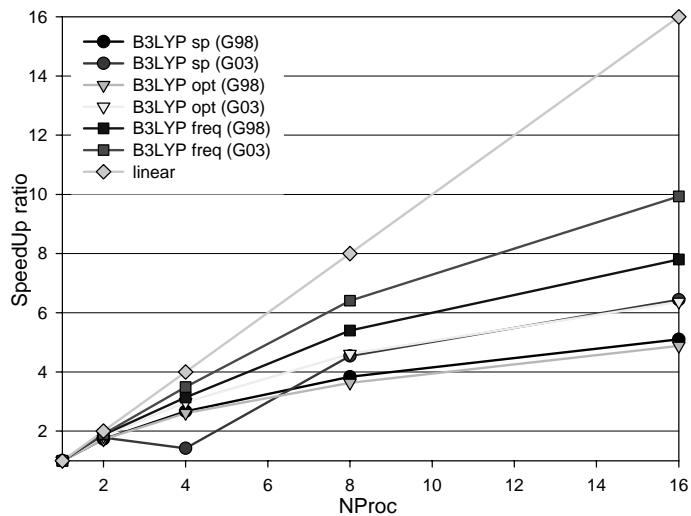
Gaussian98とGaussian03の比較 (SX-7, post-HF)



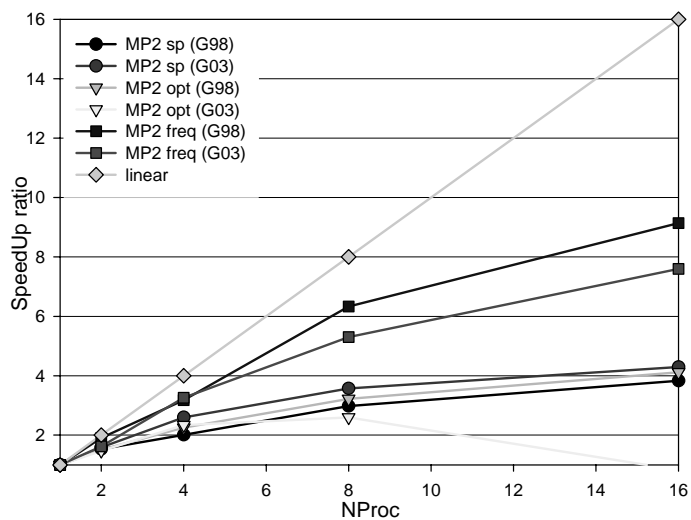
Gaussian98とGaussian03の比較 (SX-7の並列度, RHF)



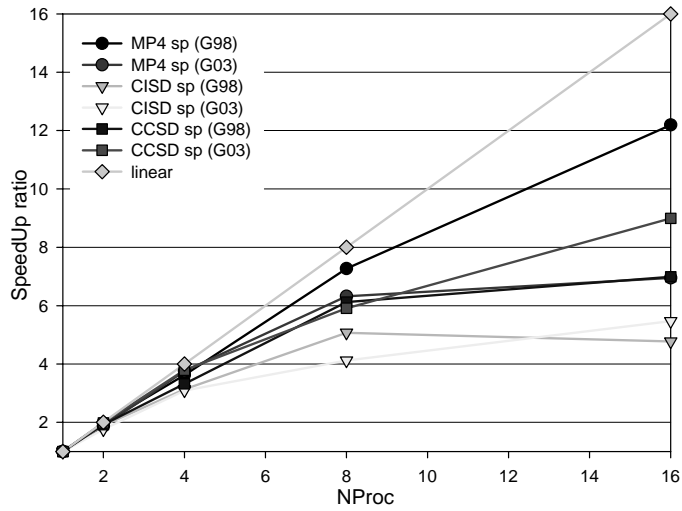
Gaussian98とGaussian03の比較 (SX-7の並列度, DFT)



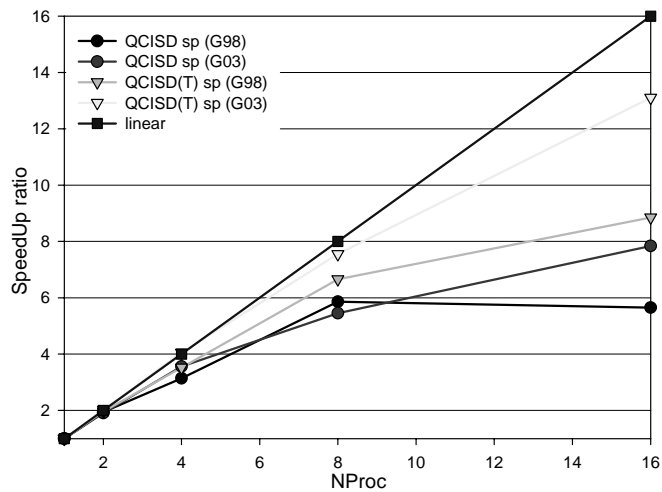
Gaussian98とGaussian03の比較 (SX-7の並列度, MP2)



Gaussian98とGaussian03の比較 (SX-7の並列度, MP4 CISD CCSD)



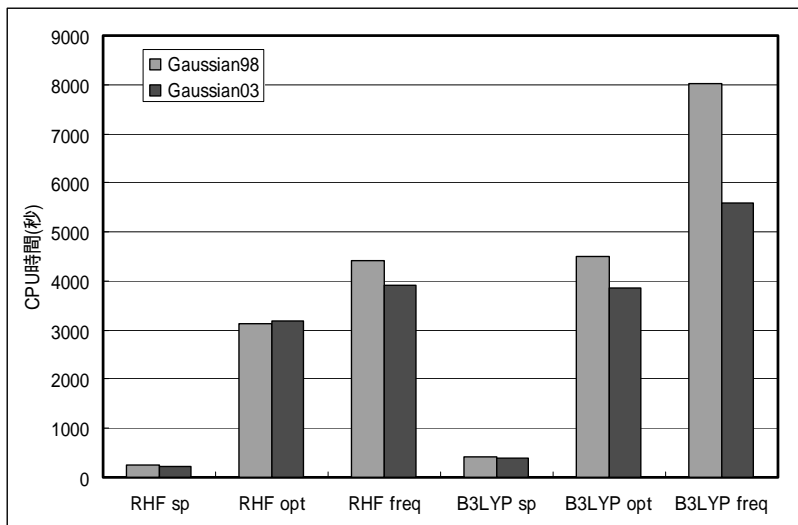
Gaussian98とGaussian03の比較 (SX-7の並列度, QCISD QCISD(T))



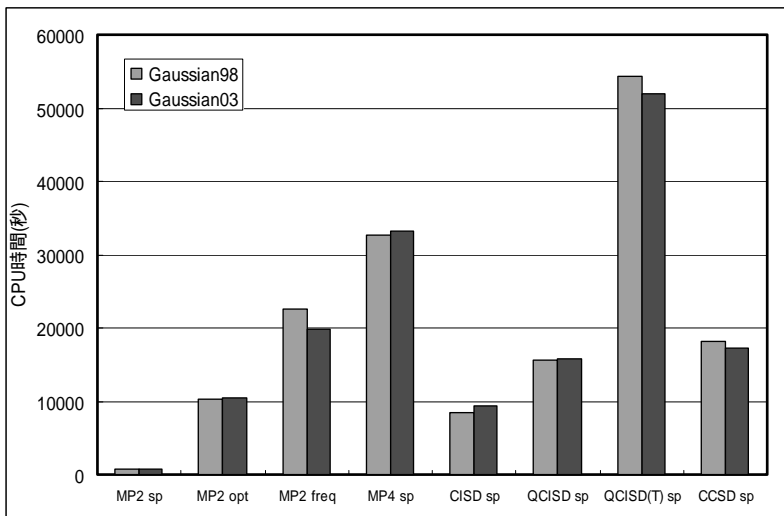
SX-7のまとめ

- ・SX-7では、post-HF計算でも並列が効く。
- ・Gaussian03になって計算速度が全体的に悪化した。(これはGaussian社が、並列を重視したアルゴリズムを導入したことが影響しているかもしれない。)
- ・現状では、Gaussian98で計算できてしまうものは、Gaussian98で計算した方が良い。
- ・しかし、NECは独自にGaussian03のチューニングを行い、今後のリビジョンに反映させることを表明しているので、今後改善される可能性は高い。

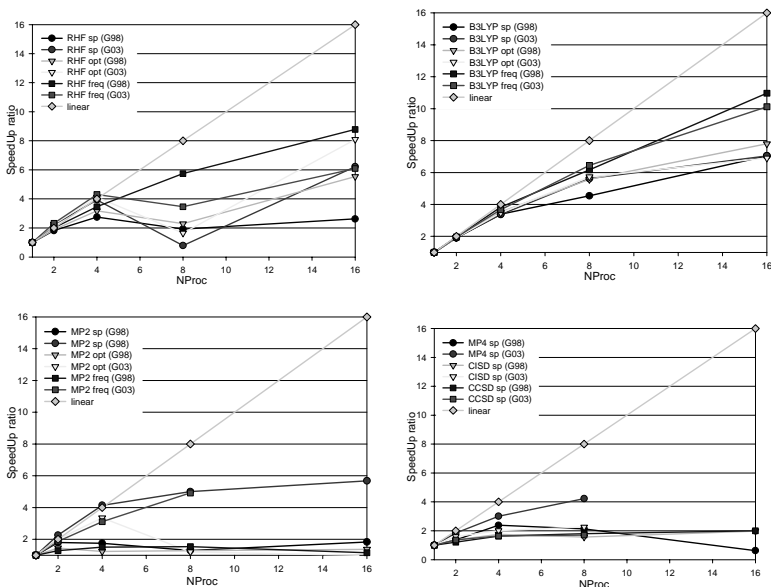
Gaussian98とGaussian03の比較 (SGI2800, 1CPU, RHF, DFT)



Gaussian98とGaussian03の比較 (SGI2800, 1CPU, post-HF)



Gaussian98とGaussian03の比較 (SGI2800, 並列度)



SGI2800のまとめ

- ・TX-7と同様に、Gaussian03ではMP2やMP4で並列効率が良くなっていると思われる。
- ・Gaussian98とGaussian03で、全体的な傾向に大きな差は出なかった。
- ・DFT計算をする場合は、並列化効率が高いので、有効だと思われる。
- ・SGI2800では、運用中に測定した事がもろに出てしまったため、結果が不安定だった。(非常にキューが込んでいた)。
- ・今後、MIPSマシンの開発予定はないと思われるので、著しい性能の向上は見込めないかもしれない。

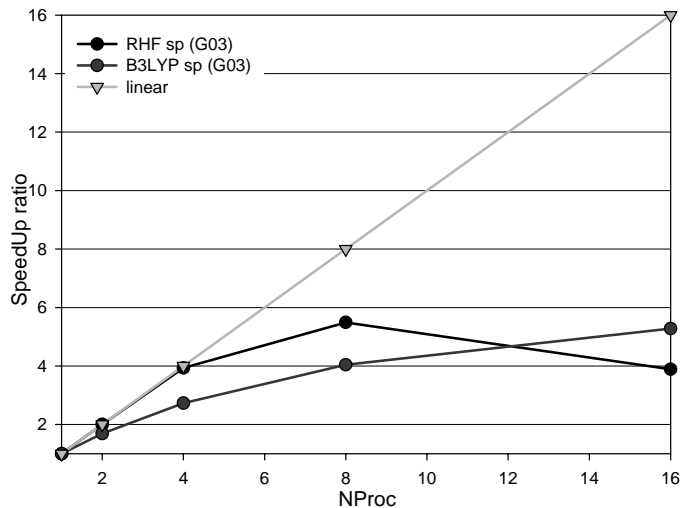
ベクトル化率の結果(VPP5000)

	ベクトル化率	MFlops	平均ベクトル長
RHF sp	94.68	688.5	494
RHF opt	95.22	762.4	527
RHF freq=anal	84.70	244.5	101
B3LYP sp	91.77	635.5	254
B3LYP opt	92.72	700.3	266
B3LYP freq=anal	93.74	698.5	139
RMP2(full) sp	95.68	827.0	389
RMP2(full) opt	94.89	662.9	284
RMP2(full) freq=anal	96.40	1107.5	175
RMP4(full) sp	99.45	4757.3	496
CISD(full) sp	95.80	1323.8	336
QCISD(full) sp	96.52	1750.9	432
QCISD(T)(full) sp	98.36	3012.0	490
CCSD(full) sp	95.16	1427.8	410
CAS(4,4) sp	62.58	95.3	13

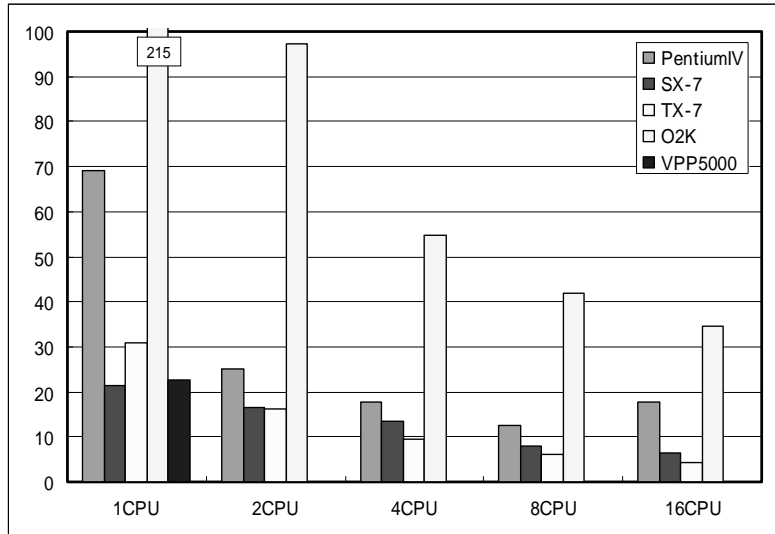
VPP5000のまとめ

- ・MP2 freqやMP4、CCSDなどのpost-HF計算では単一CPUで1GFlops以上の計算速度を出しており、非常に効率が高い。これらはいずれもベクトル化率が95%程度と非常に高い。(おそらく、Gaussian98では、同じベクトル機であるSX-7も同様な傾向を示すと考えられる。)
- ・特にQCISD(T)やMP4(full)計算では98%~99%とベクトル化率が高く、ピーク性能の40%~50%を出している。

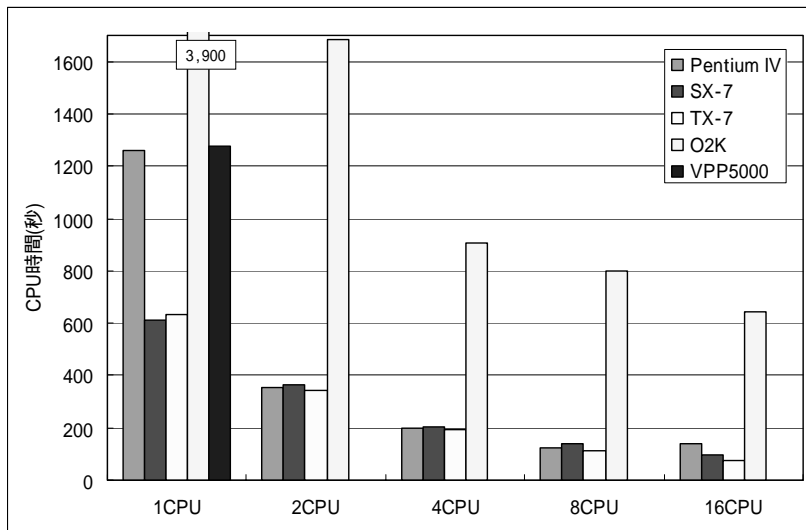
Pentium の並列化度



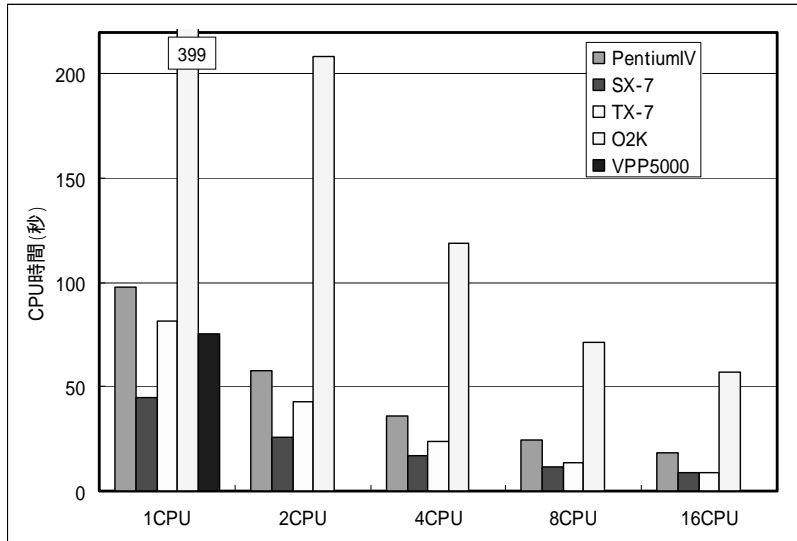
各マシンごとのCPU時間の比較 (RHF SP)



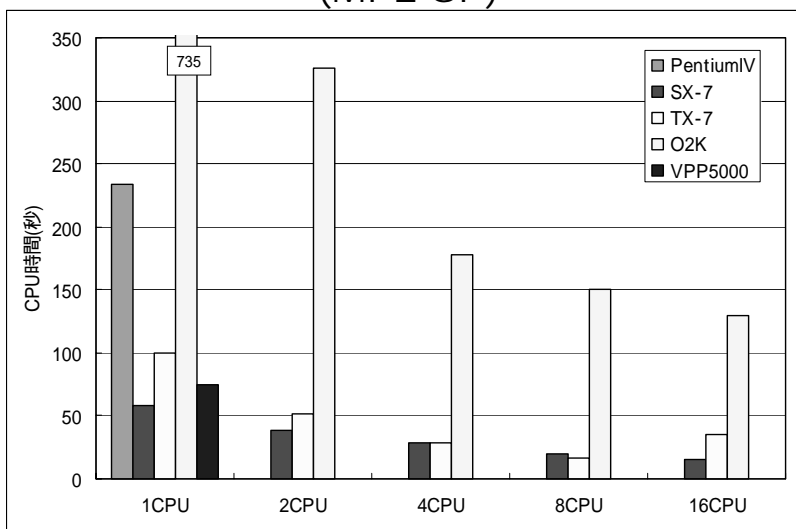
各マシンごとのCPU時間の比較 (RHF freq)



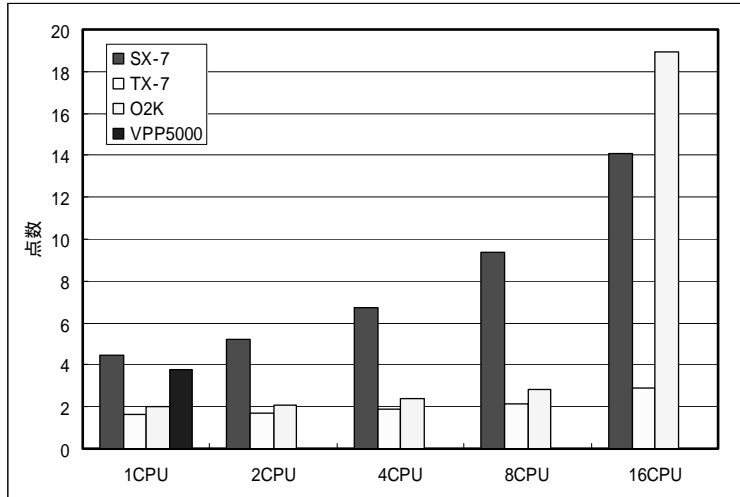
各マシンごとのCPU時間の比較 (B3LYP SP)



各マシンごとのCPU時間の比較 (MP2 SP)



CPU点数比 (B3LYP sp)



まとめ

- ・単体の計算速度、並列度など、TX-7の Gaussian03は非常に効率が良い。
- ・Pentiumマシンは、通信などの問題で、あまり高並列にしても効率が良くない。
- ・Gaussian98に比べ、Gaussian03は並列効率が高くなっている。
- ・ベクトルマシン(SX-7)については、Gaussian98の方が効率的である。(ただし、SX-7はNECが独自にチューンを行うことを表明しているため、今後改善されると思われる。)

WWWを用いたGaussianジョブ入力インターフェース

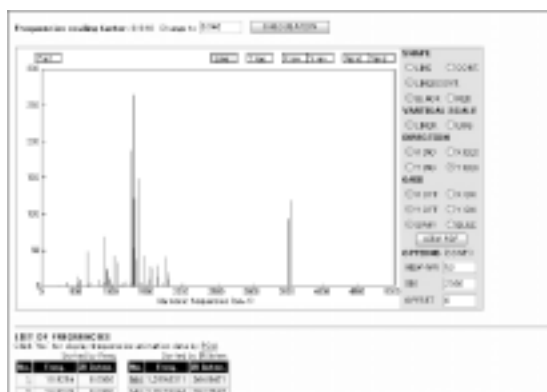


WWWインターフェースを用いて、ログインすることなしにジョブの投入が可能になる。

左図例: WebMO

<http://www.webmo.net/>

計算科学研究センター公開サービス



分子模型や、分子軌道を表示する可視化ツール PGV

http://goofy.ims.ac.jp/pgv/pgv_jp.htm



Gaussianの出力ファイルから、IRスペクトルや振動のアニメーションを作成するHP

<http://www.rccs.orion.ac.jp/fq/>