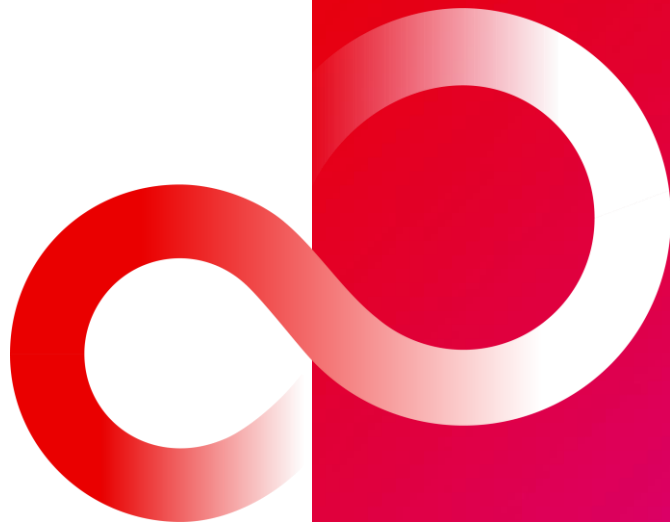


PRIMEHPC FX1000/FX700 アプリケーション関連情報

2022年5月19日
富士通株式会社



○ 要旨

○ 商用アプリケーション

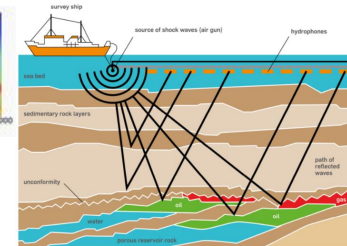
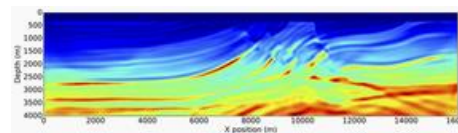
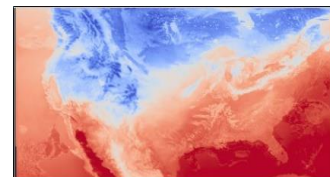
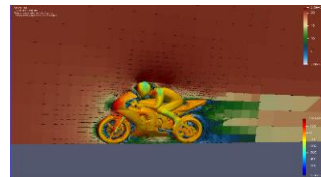
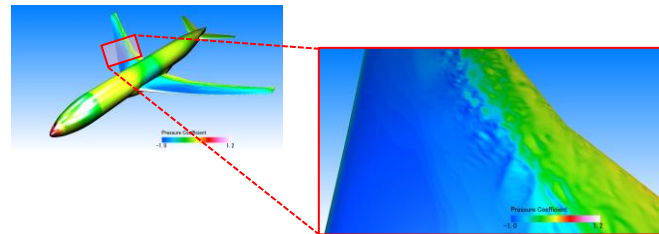
- 商用アプリケーション
- 商用アプリケーション一覧
- Ansys Fluent
- Ansys LS-DYNA
- CONVERGE
- Cradle CFD | scFLOW
- JMAG
- Poynting

○ Open-Source Software (OSS)アプリケーション

- FX1000・FX700におけるOSSの性能
- FX1000・FX700におけるOSSの電力効率
- FrontISTR
- OpenFOAM
- WRF
- LAMMPS
- QUANTUM ESPRESSO
- A64FXでのOSS利用者向け情報/ツールの提供

○ Open-Source Oil & Gasアプリケーション - Armエコシステムパートナーとの共同評価

- 石油・ガス分野のアプリにおけるA64FXの特長
- Devito
- GIRIH



要旨

PRIMEHPC FX1000・FX700

- **PRIMEHPC FX1000・FX700**には、スーパーコンピュータ「富岳」で使用されているARMアーキテクチャのプロセッサ**A64FX**を搭載



© RIKEN

A64FX processor



- ✓ Scalable Vector Extension (SVE) 512bit SIMD 命令セットを実装
- ✓ Armv8.2-Aアーキテクチャを適用
- ✓ HBM2によりメモリバンド幅を広帯域化
- ✓ 高い電力効率

FUJITSU Supercomputer PRIMEHPC



PRIMEHPC FX1000

超大規模システム向けの
スーパーコンピュータ

- ✓ 384ノード/ラック
- ✓ 水冷
- ✓ TofuインターコネクトD
- ✓ 富士通製ソフトスタック



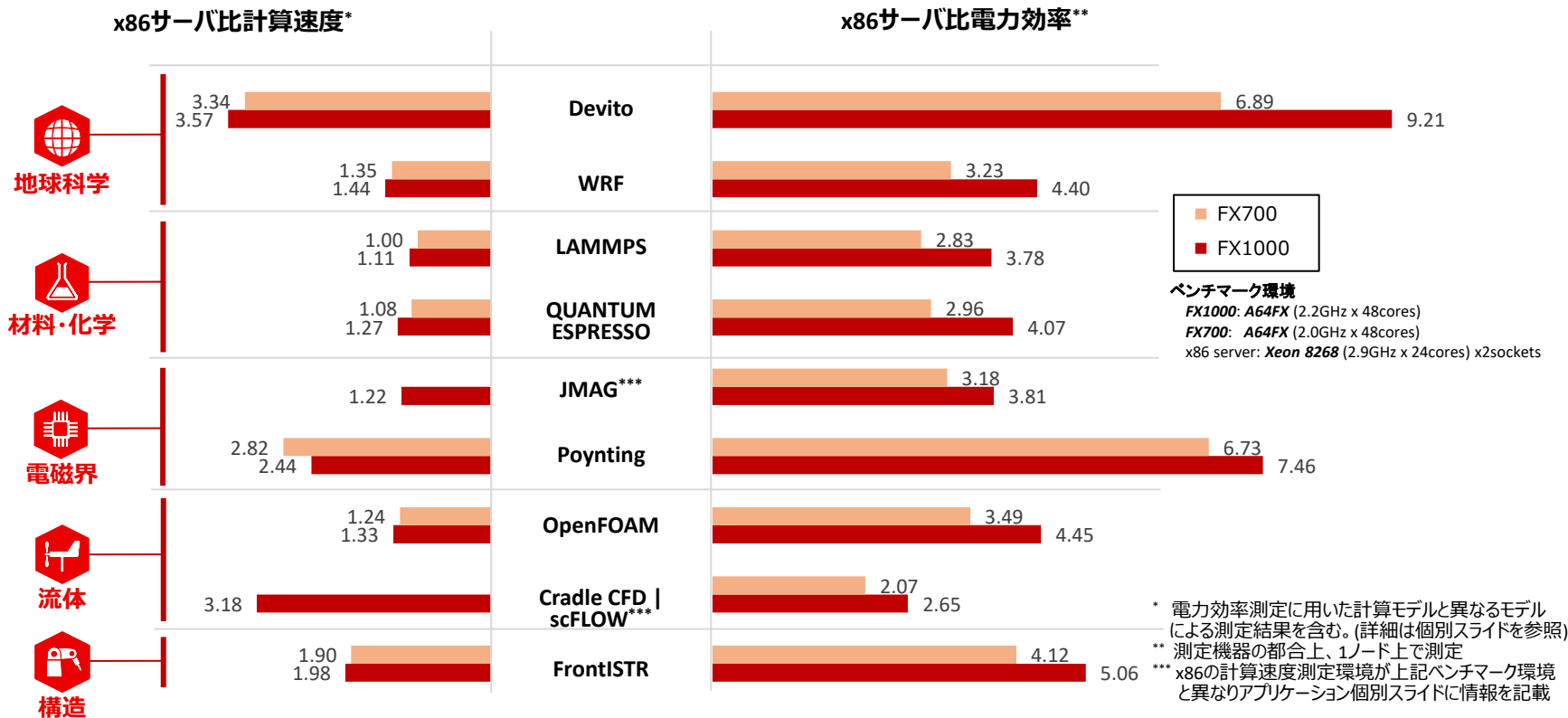
PRIMEHPC FX700

スタンダード技術をベースとした
導入しやすいモデル

- ✓ 8ノード/2Uシャーシ
- ✓ 空冷
- ✓ InfiniBand
- ✓ 商用ソフトを活用

FX1000・FX700性能

- 主要5分野のアプリケーションのFX1000・FX700上での計算速度・電力効率においてx86サーバより優れた性能を達成



商用アプリケーション

商用アプリケーション (2022年5月時点)

Amber

(by University of California, San Francisco.)



Gaussian 16

(by Gaussian, Inc.)



VASP

(by VASP Software GmbH)



COLMINA CAE 磁界

シミュレータ

(富士通株式会社)



JMAG

Simulation Technology for Electromechanical Design

(株式会社JSOL)



Poynting

(富士通株式会社)



Ansys LS-DYNA



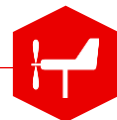
ESI Virtual Performance

Solution (VPS)

(by ESI Group)



化学



流体



電磁界



構造



その他



PRIMEHPC
FX1000



PRIMEHPC FX700

「富岳」



©RIKEN

Ansys Fluent



COLMINA CAE 粒子法鋳造解析

(富士通株式会社)



(by Convergent Science)



Cradle | scFLOW

(by HEXAGON



HELYX

(by ENGYS Ltd.)



Simcenter STAR-CCM+

(by Siemens Digital Industries Software)



NAG Fortran Compiler

(by nag)



= 提供済み



= 提供予定



= 「富岳」で動作確認済み

商用アプリケーション一覧（2022年5月時点）

- FX1000・FX700における商用アプリケーションの提供状況。6本のアプリケーションは「富岳」で動作確認済。

カテゴリ	アプリケーション名	ベンダー	提供状況	備考
ものづくり (流体解析)	Ansys Fluent	ANSYS, Inc.	提供可能 (αバージョン)	ソルバー機能のみ提供
	COLMINA CAE 粒子法铸造解析	富士通株式会社	提供可能	「富岳」で動作確認済
	CONVERGE	Convergent Science (東アジア販売代理店: 株式会社IDAJ)	提供可能	ソルバー機能のみ提供 「富岳」で動作確認済
	Cradle CFD scFLOW	株式会社ソフトウェアクレイドル	提供可能	「富岳」で動作確認済
	HELYX	ENGYS Ltd.	提供予定*	
	Simcenter STAR-CCM+	Siemens Digital Industries Software	提供予定*	
ものづくり (構造解析)	Ansys LS-DYNA	ANSYS, Inc.	提供可能	「富岳」で動作確認済
	ESI Virtual Performance Solution(VPS)	ESI Group	提供可能	衝突安全関連(陽解法)のみ提供 「富岳」で動作確認済
ものづくり (電磁界解析)	COLMINA CAE 磁界シミュレータ	富士通株式会社	提供可能	
	JMAG	株式会社JSOL	提供予定*	「富岳」で動作確認済
	Poynting	富士通株式会社	提供可能	「富岳」で動作確認済
化学	Amber	University of California, San Francisco	提供可能	協力：オーストラリア国立大学
	Gaussian 16	Gaussian, Inc.	提供可能	
	VASP	VASP Software GmbH	提供可能	
その他	NAG Fortran Compiler	Numerical Algorithms Group Ltd	提供可能	

*時期後報 **スライド内の全てのアプリケーション名は、各ベンダーの商標または登録商標です。

○ **Ansyes Fluent**について

- ✓ 高度な物理モデルを表現し、種々の流体现象を解析できる**商用CFDソフトウェア**
- ✓ 大規模かつ複雑な計算モデルを正確かつ効率的に解析するための最高レベルの物理モデルを実装
- ✓ 詳細情報: <https://www.ansyes.com/products/fluids/ansyes-fluent>
- ✓ **FX1000・FX700**向けにリリース済み

○ 機能検証および性能評価について

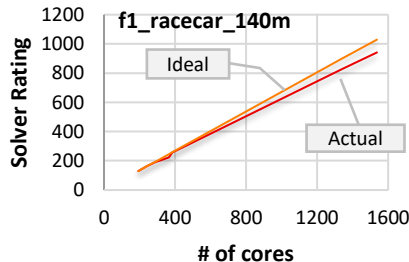
- ✓ **FX1000・FX700**で利用可能な**Ansyes Fluent** αバージョンをリリース (Ansyes 2021 R2をベースとする)
 - リリースされたバージョンは汎用Arm版で、PRIMEHPCシリーズ向け固有の実行スクリプトを同梱
 - **Ansyes Fluent** ユーザはANSYS, Inc.に依頼すれば入手可能
- ✓ **FX1000・FX700**上でテスト・評価済み
 - テストケースとして**Ansyes Fluent**の標準ベンチマークモデルである“Ansyes Fluent Benchmarks”を使用
 - **FX1000**上で1,536コア並列まで検証済み (f1_racecar_140mモデルを使用)

◆ **FX1000**上で良好なスケラビリティを確認

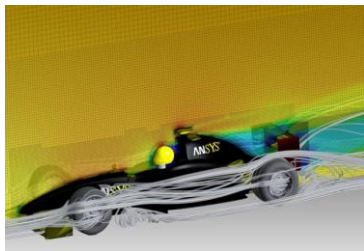
【計算事例】

計算モデル: f1_racecar_140m

F1レースカー周りの空気の流れ (1億4千万要素)



Ansyes Fluentのスケラビリティ
(Solver Rating値を使用)



f1_racecar_140m

○ 「富岳」でのチャレンジ*

- ✓ 2021年11月より「富岳」上で性能評価を開始 (課題期間: 6か月間)
- ✓ 2億8千万要素のモデル (“Ansyes Fluent Benchmarks”における最大規模のデータ) を用い、1000ノード以上の計算リソース上で性能・スケラビリティを評価予定

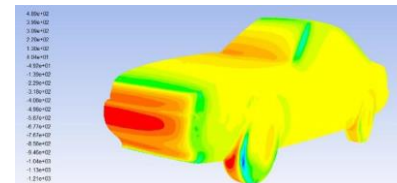
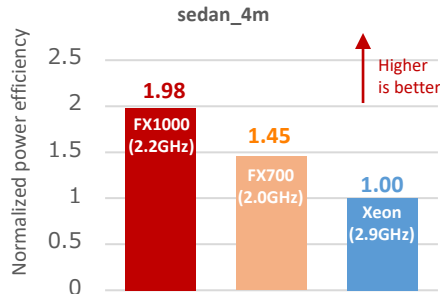
* 本研究は、HPCIシステム利用研究課題(課題番号: hp210283)を通じて、理化学研究所のスーパーコンピュータ「富岳」の計算資源の提供を受け、実施しています。

◆ **FX1000・FX700**の電力効率は**Xeon Platinum 8268** (2.9GHz)を上回る

【計算事例】

計算モデル: sedan_4m

乗用車周りの空気の流れ(4百万要素)



sedan_4m

Ansyes Fluentの電力効率 (1ノード上での評価)

© 2022 Fujitsu Limited

Ansyes®, 及びその他のすべてのANSYS, Inc.の製品名は、ANSYS, Inc.またはその子会社の米国およびその他の国における商標または登録商標です。

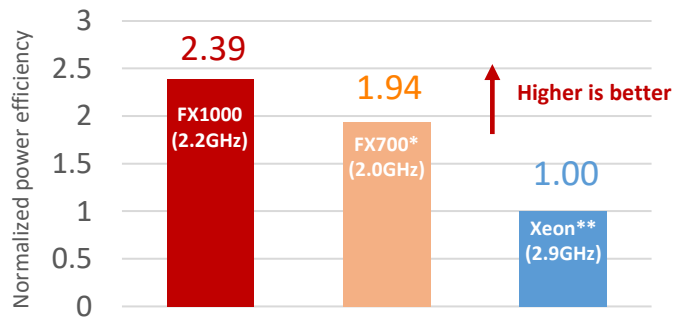
○ Ansys LS-DYNAについて

- ✓ 複雑な実問題を解析可能な、産業界をリードするマルチフィジックスシミュレーションソフトウェア
- ✓ **FX1000・FX700**および「富岳」で最初に利用可能になった商用のCAE構造解析（衝撃解析）ソフトウェア
- ✓ 2021年に単精度版を提供開始し、2022年に倍精度版を提供予定

<https://www.ansys.com/news-center/press-releases/10-15-2021-ansys-enables-more-sustainable-product-development-with-fujitsu>

○ 機能検証および性能評価について

- ✓ **Ansys LS-DYNA**の主要機能を検証済み
- ✓ 3,000コア並列までのスケーラビリティを確認済み
- ✓ **FX1000・FX700**上で優れた電力効率を発揮



Ansys LS-DYNAの電力効率
(1ノード, Car2Carモデル, 240万要素)

* FX700のファイルシステムはFEFSを利用
**Intel Xeon Platinum 8268 x2sockets(2.9GHz x 24cores)

○ 「富岳」でのチャレンジ***

高性能かつ複雑な実問題の解析に関する研究:

- ✓ 「富岳」で3万コアを用いた3,000万要素の自動車衝突解析を実施
- ✓ 一般社団法人日本自動車工業会は富士通の支援で、従来の開発プロセスの一新を目指して12,000ケースの自動車衝突解析を実施中。骨格レイアウトと強度バランスをパラメータとした多数のFEM解析結果を収集している。この解析結果を教師データとして、機械学習の予測精度と使用する教師データ数の相関関係を明らかにしようとしている。

富士通はANSYS, Inc.と協同し「富岳」上での**Ansys LS-DYNA**の性能向上に引き続き取り組む



自動車衝突解析のイメージ

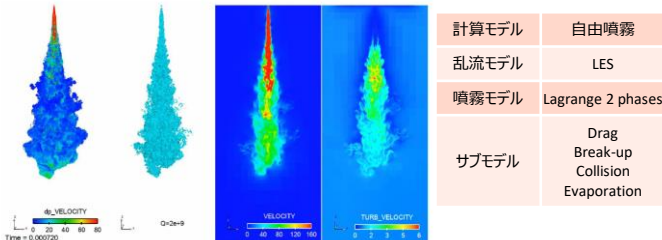
***本研究は、HPCIシステム利用研究課題(課題番号: hp200228, hp210089)を通じて、理化学研究所のスーパーコンピュータ「富岳」の計算資源の提供を受け、実施しました。

○ CONVERGEについて

- ✓ 完全自動メッシュ、現象に応じた様々な物理モデル、ロバストな化学反応ソルバー、複雑な移動境界を容易に取り扱う機能などを備えた商用CFDソフトウェア
- ✓ 様々な産業分野で利用（エンジン、燃料噴射、排ガス後処理装置、ポンプ、圧縮機、タービン、その他）
- ✓ 詳細情報: <https://convergecf.com> / <https://www.idaj.co.jp/product/converge>
- ✓ **FX1000・FX700**および「**富岳**」向けにリリース済み

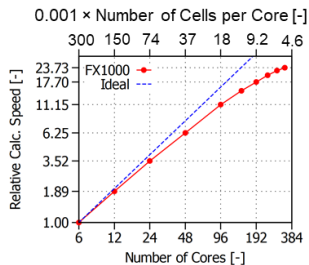
○ 機能検証および性能評価について

- ✓ **CONVERGE**の多くの主要機能の動作を**FX1000・FX700**上で確認



LES機能を用いた自由噴霧解析
(最大1,000万要素, **FX1000** 上で384 並列で実施)

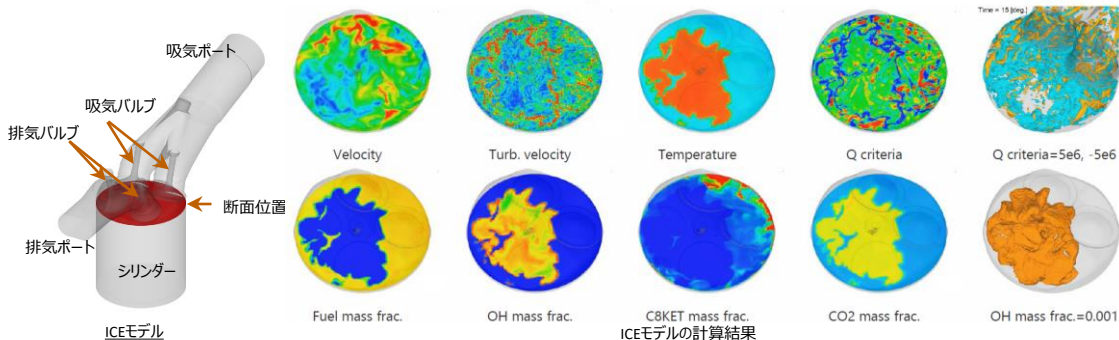
- ✓ **FX1000**上で300コア並列以上の良好なスケーラビリティを確認



定常ポート流れ解析のスケーラビリティ

○ 「富岳」を用いた**CONVERGE**の成果*

- ✓ エンジンのエネルギー効率向上を目的に、熱発生率、排気組成、ノッキングなどを評価する内燃機関(Internal Combustion Engine: ICE)モデルを用いたシリンダー筒内燃焼シミュレーションを実施した
- ✓ 全域詳細メッシュを用い詳細化学反応を考慮したLES解析により、しわ状化した火炎構造を確認できる精細な燃焼計算を2時間で完了した
- ✓ 従来のガソリンエンジンのエネルギー効率向上のみならず、精度良いノッキング予測を活用することにより、近年注目されるe-fuelなどの新燃料のエンジンの開発スピードの向上にも寄与することが期待される



計算モデル	メッシュ数	メッシュサイズ	乱流モデル	燃焼モデル	並列数	計算時間 (燃焼計算のみ)
ICE 燃焼	700万要素 (最大)	全域0.5mm	LES	詳細化学反応	4,096	2時間

○ Cradle CFD | scFLOW について

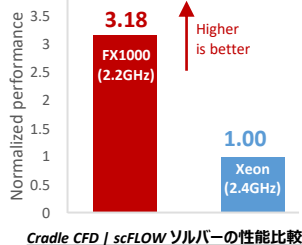
- ✓ 任意の多面体格子に対応した汎用熱流体解析システム
- ✓ 多くの分野(航空宇宙、自動車、建設、エレクトロニクス、重工業、医療・医薬品など)で利用されている
- ✓ 詳細情報: <https://www.mscsoftware.com/ja/product/scflow>
- ✓ **FX1000・FX700**および「**富岳**」向けに提供可能

○ 機能検証および性能評価について

- ✓ 全機能の動作を**FX1000・FX700**にて確認済み
- ✓ **Cradle | scFLOW**で使用している線形ソルバーについて、**FX1000**上で**Xeon Platinum 8260**と比べて優れた計算性能を確認

測定条件

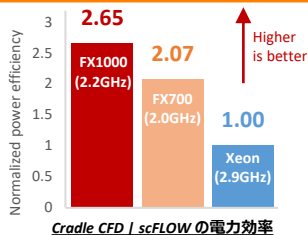
- モデル：自動車周りの空力解析
(要素数1億800万, RANS)
- 384プロセス1スレッド
- (**Xeon 8260 Platinum**) 8ノード,
(**FX1000**) 48ノード
- 100ステップ



- ✓ **Cradle CFD | scFLOW** は**FX1000・FX700**上で**Xeon Platinum 8268**と比べて優れた電力効率を確認

測定条件

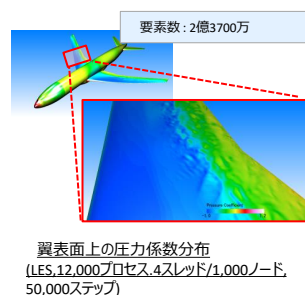
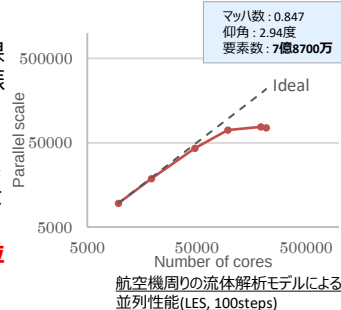
- モデル：航空機周りの流体解析
(要素数2億3700万, RANS)
- 48プロセス1スレッド
- (**Xeon 8260 Platinum**) 1ノード,
(**FX1000**) 1ノード
(**FX700**) 1ノード
- 100ステップ



○ 「富岳」でのチャレンジ*

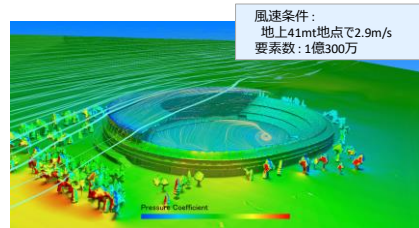
- ✓ **32ビット整数を超える数十億の要素面を含む大規模なLES解析を達成**

- ◆ 航空機の設計時には、安全性に影響を及ぼす機体の振動現象を予測することが重要な課題である。大規模なLES解析によって機体の振動予測につながる翼表面上の圧力振動や細かい渦を捉えることができる。
- ◆ 32ビット整数を超える要素面数を持つ大規模なモデルを扱うように**Cradle CFD | scFLOW**を改善。さらに高並列領域での性能を改善。
- ◆ **7億8000万要素数のモデルで最大216,000並列/4500ノードで動作を確認。**



- ✓ **並列メッシュャーによる数億要素の非構造格子作成に成功**

- ◆ メッシュ作成は一般的に大容量メモリを持つ単一マシンで実行されるが、メモリ容量が制約となり「富岳」等で使われる大規模解析用のメッシュを作成できないことがある。
- ◆ メッシュャーを分散並列化し、「富岳」上で**最大5億1100万**の非構造格子を作成できることを確認 (国立競技場の風解析モデル)
- ◆ これにより**1ノードあたりのメモリ容量に制約されないメッシュ作成が可能となった。**



国立競技場の風解析
(2,400プロセス, 4スレッド/200ノード, 2,000ステップ)

*本研究は、HPCIシステム利用研究課題(課題番号: hp200209, hp200302)を通じて、理化学研究所のスーパーコンピュータ「富岳」の計算資源の提供を受け、実施しました。

○ JMAGについて

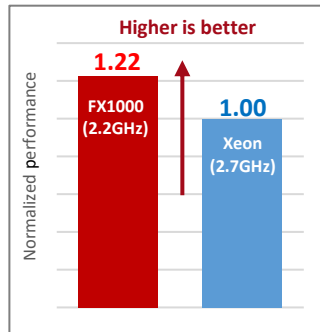
- ✓ 電気機器設計開発のためのシミュレーションソフトウェア。株式会社JOLが開発・提供。
- ✓ 自動車、電化製品、デジタル機器、電源機器、ファクトリーオートメーションなど各業界で利用。
- ✓ 詳細情報：<https://www.jmag-international.com/jp/>
- ✓ **FX1000・FX700** および「**富岳**」向けに提供予定。提供時期後報。

○ 機能検証および性能評価

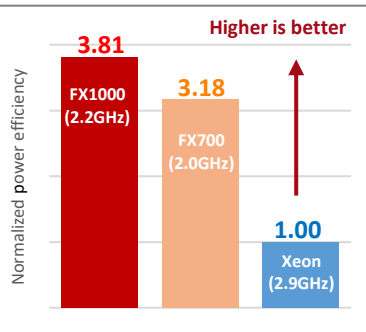
- ✓ 最大2千万要素モデル、最大8,192並列の実行まで動作を確認
- ✓ ハイブリッド並列版**JMAG HPCソルバー**を移植し、主要機能を検証済み

FX1000・FX700におけるJMAGの性能評価

- ✓ **FX1000**において**Xeon Platinum 8280** 2.7GHzに比べ同一コア数で1.22倍高速



- ✓ **FX1000・FX700**において**Xeon Platinum 8268** 2.9GHzに比べ優れた電力効率を発揮



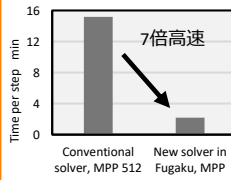
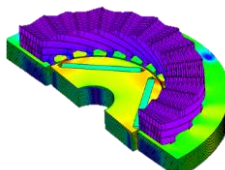
JMAGの性能比較
(正弦波入力IPMモータ、
1,000万要素、50ステップ、128ハイブリッド並列)

JMAGの1ノードの電力効率比較
(正弦波入力IPMモータ、
100万要素、10ステップ、48ハイブリッド並列)

○ 「富岳」でのチャレンジ*

- ✓ ISC2021で発表したIPMモータでの検証に加え、新たに様々な大規模モデルを対象に**JMAG**が持つ複数の磁界解析機能についての検証を「**富岳**」上で実施
- ✓ これらの結果により、**JMAG**が「**富岳**」において多様な産業界のニーズに対して実用的な時間で計算する能力を持つことを確認

PWM制御を含むIPMモータ、 1,500万要素

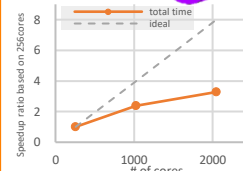
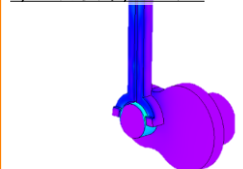


1ステップあたりの解析時間

新たな結果

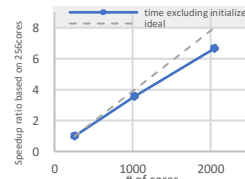
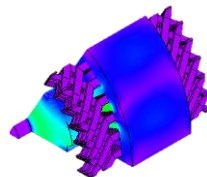
- ✓ 複数のモデルに対して「**富岳**」における**JMAG**の並列性能を確認。右の2モデルは数百ステップの計算が行われることが想定されるため、初期化時間を除いた時間で評価実施。

クラックシャフトに対する誘導加熱
による焼き入れ、
1,700万要素、1ステップ



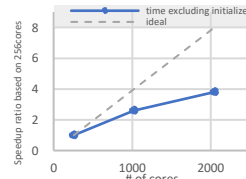
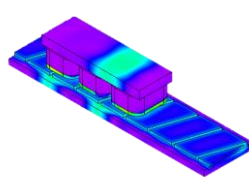
全実行時間の並列性能

オルタネータ、
1,500万要素、10ステップ



初期化時間を除いた時間の並列性能

リニアモータ、
500万要素、10ステップ



初期化時間を除いた時間の並列性能

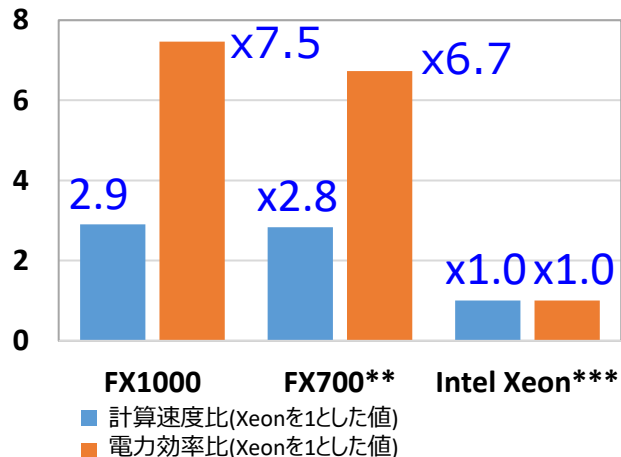
*本研究は、HPCIシステム利用研究課題(課題番号：hp200209, hp200305)を通じて、理化学研究所のスーパーコンピュータ「富岳」の計算資源の提供を受け、実施しました。

○ Poyntingについて

- ✓ 富士通が開発した、FDTD法*を用いた汎用三次元電磁波解析ソフトウェア
- ✓ FDTD法はメモリ帯域幅を必要とする一方、非常に高い並列効率を示すため、メモリ帯域幅に特長を持つFX1000・FX700において極めて高い演算性能と並列効率を発揮
- ✓ 詳細情報: <https://www.fujitsu.com/jp/solutions/business-technology/tc/sol/poynting/>
- ✓ **FX1000・FX700**および「**富岳**」向けに販売中

○ 機能検証および性能評価について

- ✓ ソルバーの主要機能を検証済み
- ✓ 115,200コア並列までスケーラビリティを確認済み
- ✓ **FX1000・FX700** 上で優れた計算速度・電力効率を発揮

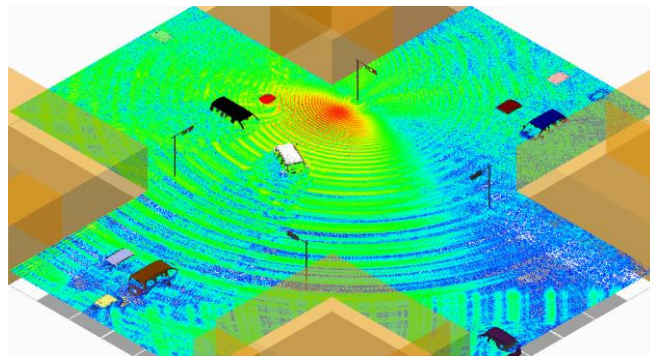


○ 「富岳」****が切り拓く電磁波シミュレーションの新たな可能性

- ✓ **Poynting**による超大規模電磁波解析を「**富岳**」上で実施
- ✓ 自動車対自動車/自動車対交通基盤の5G通信下にある交差点周辺の電波強度分布を解くことが目的
- ✓ 0.5兆格子でモデル化した交差点を対象とした100m規模の解析領域中で、レイトレーシング法などの近似解法では考慮できない、数cm以下の微細構造の影響を含めた電磁波解析が2時間で実施できることを確認



格子数: 0.5兆格子
計算時間: 2時間 (「富岳」115,200コア並列)



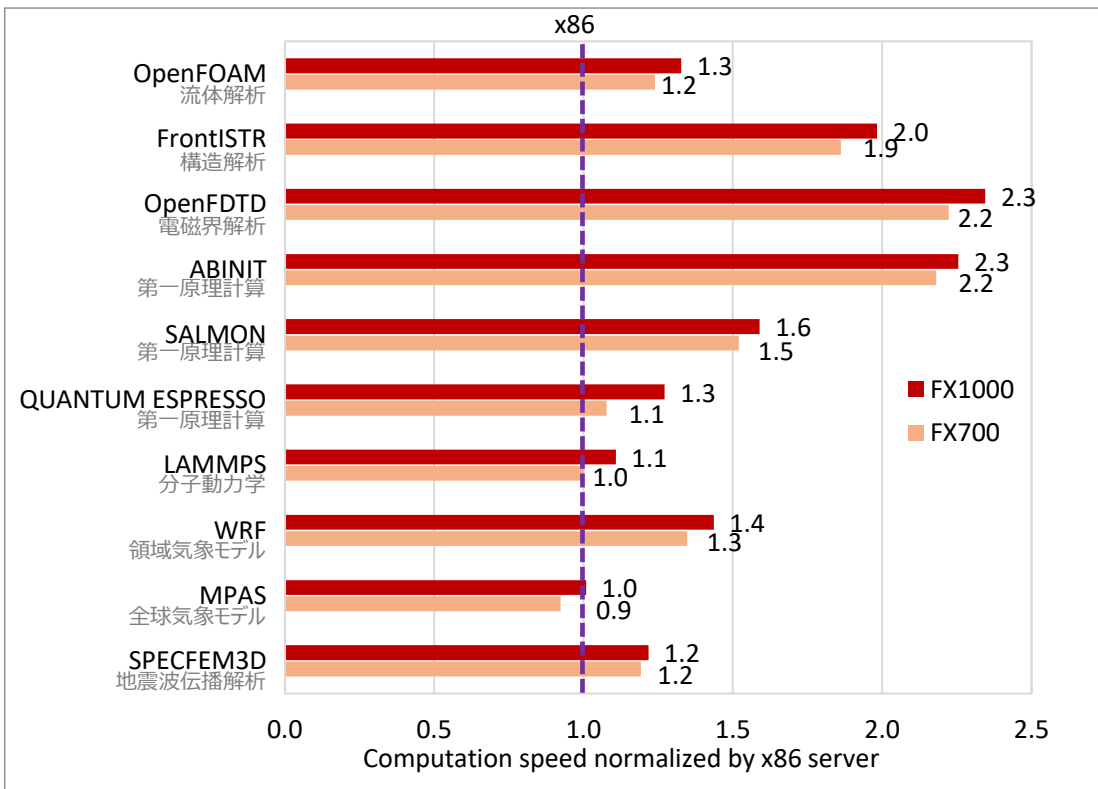
解析結果: 交差点を移動する自動車周辺の電波強度分布

*FDTD法: Finite-Difference Time-Domain method(有限差分時間領域法) **FX700のファイルシステムとしてFEFSを利用 ***Intel Xeon Platinum 8268 x2sockets(2.9GHz x 24cores)
****本成果は理化学研究所との富岳クラウドプラットフォーム共同研究によって実施されました。

Open-Source Software (OSS) アプリケーション

FX1000・FX700におけるossの性能

○ FX1000・FX700 のx86サーバと比較した計算速度



- これらのOSSにおいて、**FX1000**と**FX700** の計算速度はx86サーバと比較して最大2.3倍となっている。
- 計算速度は下記によって高速化されている。
 - ✓ SVEを用いたマイクロアーキテクチャの改善
 - ✓ メモリバンド幅の広帯域化 (HBM2)
- A64FX向けにコードチューニングされており、コンパイラおよびライブラリも改善されている。



FX1000



FX700

Benchmark Platform

FX1000: A64FX (2.2GHz x 48cores)

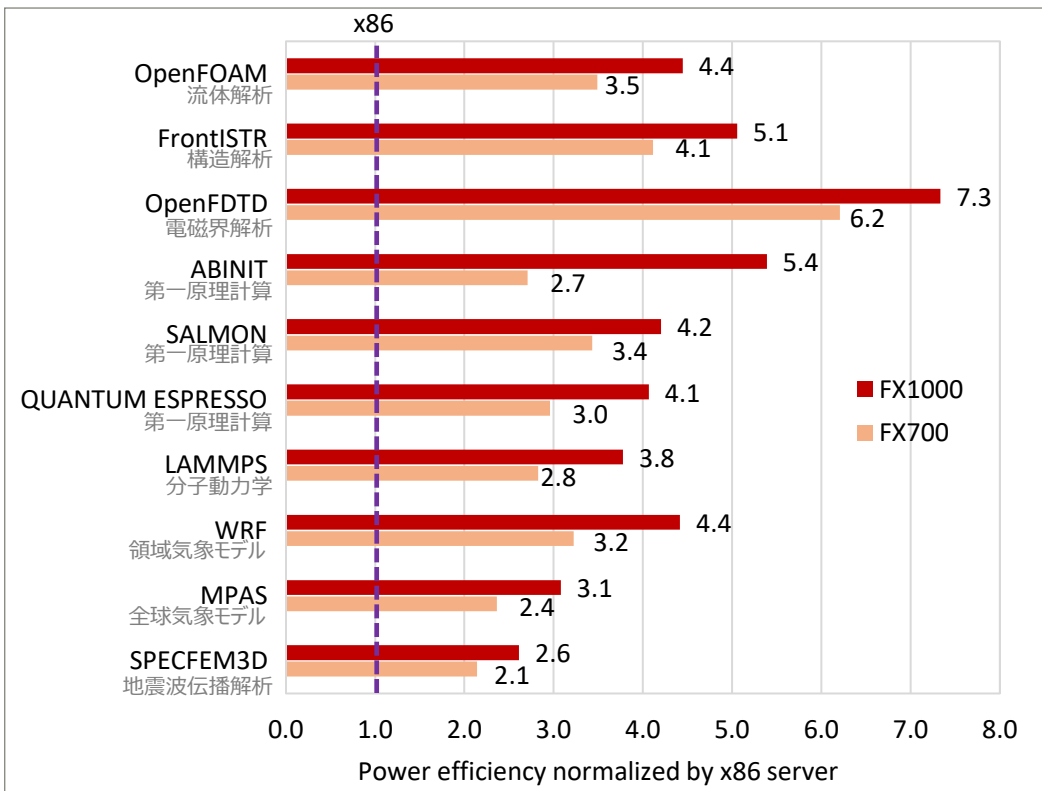
FX700: A64FX (2.0GHz x 48cores)

x86 server: **Xeon 8268** (2.9GHz x 24cores) x2



FX1000・FX700におけるOSSの電力効率

○ **FX1000・FX700** のx86サーバと比較した電力効率



- **FX1000**と**FX700** の電力効率はx86サーバと比較して、少なくとも2倍以上であり、非常に電力効率は高くなっている。
- **FX1000**はGreen500でトップとなった富岳と同じ省エネルギーテクノロジーが使われている。このテクノロジーは大規模な計算機システムにおいて、高い電力効率を実現する。**FX700**はシャーシの中に空冷システムが入っているため、**FX1000**と比較して電力効率は低くなっている。



FX1000



FX700

Benchmark Platform

FX1000: A64FX (2.2GHz x 48cores)

FX700: A64FX (2.0GHz x 48cores)

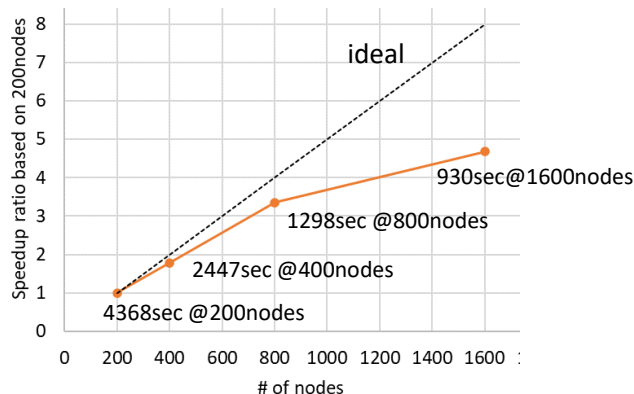
x86 server: **Xeon 8268** (2.9GHz x 24cores) x2

○ FrontISTRについて

- ✓ **FrontISTR** はオープンソースの大規模並列構造解析FEMプログラムであり、大変形、接触、各種非線形材料を含む様々な非線形解析を並列計算機上で効率よく実行できる。
- ✓ **FrontISTR** は **FrontISTR Commons** (<https://www.frontistr.com/>) によって開発および配布されている。また、**A64FX** 向けのチューニングコードを [github.com](https://github.com/fujitsu/FrontISTR) (<https://github.com/fujitsu/FrontISTR>) から入手することができる。

○ 性能評価

7,600万要素の短繊維配合ゴムモデルを用いて、「富岳」において最大1600ノードまでの**FrontISTR** のスケーラビリティを確認した。

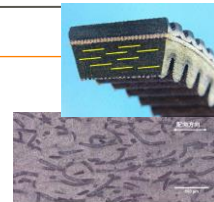


FrontISTR のストロングスケール性能 (大変形及び材料非線形を考慮、時間ステップ13分割、SSOR前処理付きCG法、ノードあたり4p12t並列)

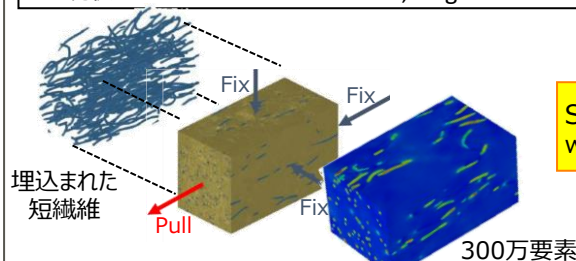
○ 「富岳」でのチャレンジ*

三ツ星ベルト株式会社様の短繊維配合ゴムに関する研究を富士通が支援

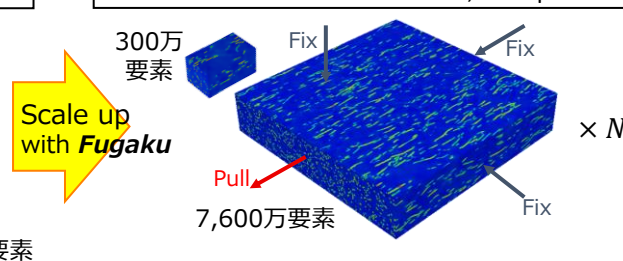
- ✓ 摩擦伝動ベルトに用いられる短繊維配合ゴムの機械的特性を評価するために、大規模解析が必要とされている。従来の解析規模では、応力集中部の様子を確認することしかできなかった。
- ✓ 我々は200から最大1600までの富岳の計算ノードを使用し、7,600万要素の大規模解析モデルが実用的な時間内で計算可能であることを確認した。
- ✓ 今後、複数のケースで短繊維配合ゴムの解析を実行することにより、長さ、うねり、配向ばらつきといった複雑な繊維状態と、機械的特性の関係を明らかにしていく。



現状: 2mm x 1mm x 1mm area, single case



目標: 5mm x 5mm x 1mm area, multiple cases



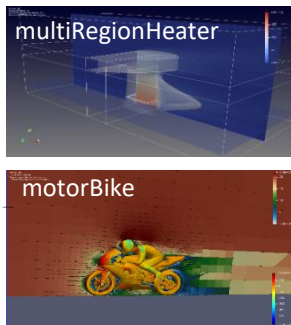
*この計算は富岳クラウドの利用の実証に向けた理研・FOCUS-VINASの共同調査で提供された計算資源を利用して実行した

○ OpenFOAMについて

- ✓ **Open-source Field Operation And Manipulation (OpenFOAM)**はオープンソースのCFDソフトウェアで、熱伝導解析や乱流解析といった豊富な解析機能を有する。[\(https://www.openfoam.com/\)](https://www.openfoam.com/).

○ 性能評価

- ✓ 計算速度は多くの場合でx86よりも速く、コードチューニングにより高速化されている。ループ構造におけるベクトル化の促進によってA64FXの計算速度を大きく改善する。
- ✓ 2種類のベンチマークモデルを実行した。1つは空力解析のmotorBike(LES)モデルで、もう1つは熱流体解析のmultiRegionHeater (RANS)モデルである。motorBikeモデルでは、PCGとGAMGの2種類の行列ソルバを使用した。

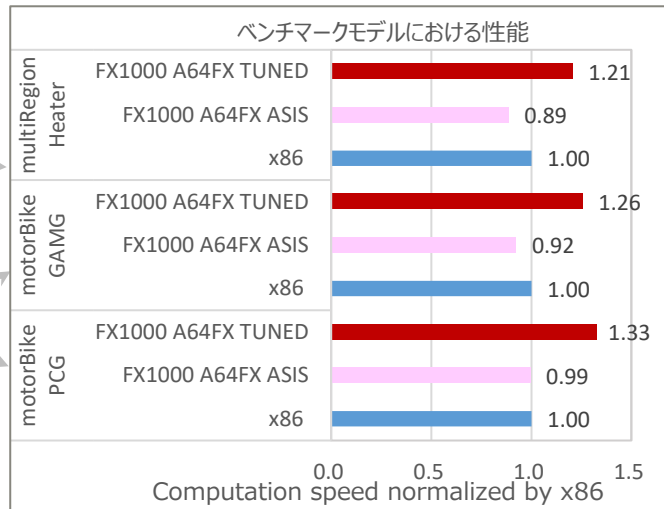


OpenFOAM: v1812
Benchmark Platform

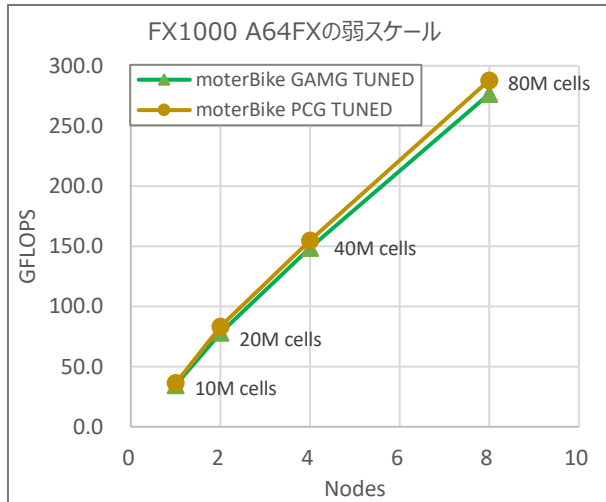
FX1000 A64FX (2.2GHz x 48cores)

x86: Xeon 8268 (2.9GHz x 24cores) x2

入力データ: multiRegionHeaterおよびmotorBike



2種類のベンチマークモデルを実行した。FX1000においてASISとチューニングコードを用いている。チューニングによって、x86と比較して計算速度は高速になっている。
(multiRegionHeater: 15M cells, motorBike:10M cells)



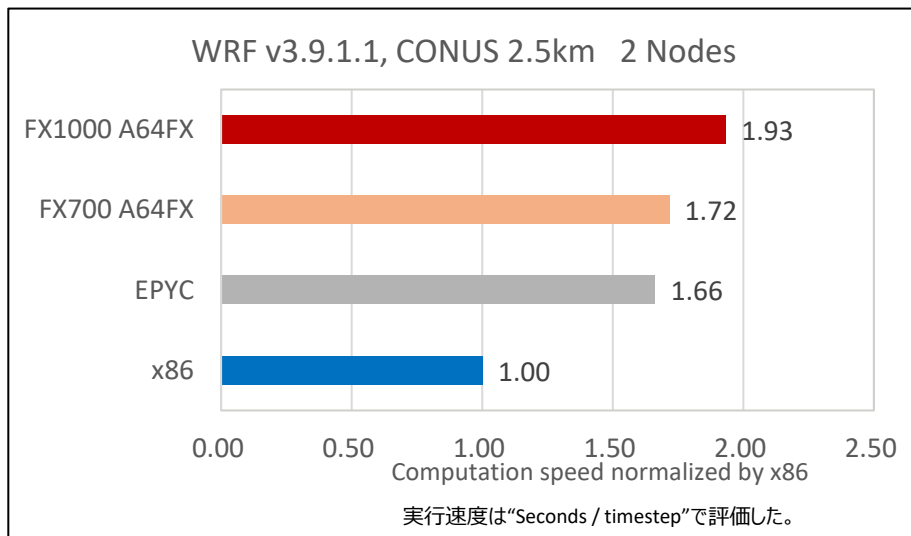
motorBikeモデルの弱スケールビリティを示す。コア数に比例してモデル規模を増加させている。FX1000は理想に近いスケールビリティとなっている。

○ WRFについて

- ✓ **The Weather Research and Forecasting (WRF) Model** は次世代のメソスケール数値気象予報システムであり、大気圏の研究および気象予報に適用される。このソフトウェアは、2種類の時系列解析コード、データ同化システム、並列計算のサポートおよびシステムの高い拡張性が特徴である。
(<https://www.mmm.ucar.edu/weather-research-and-forecasting-model>)

○ 性能評価

- ✓ 下図はベンチマークモデルCONUS 2.5kmの評価結果である（ここでは2ノード利用している）。
- ✓ **A64FX**システムにおけるWRFの実行性能は、**A64FX**の高いメモリバンド幅によってその他のシステムよりも速くなっている。



WRF: version 3.9.1.1 (チューニングコード)

Benchmark platform

FX1000 A64FX (2.2GHz x 48cores)

FX700 A64FX (2.0GHz x 48cores)

x86: **Xeon P8260M** (2.4GHz x 24cores) x2

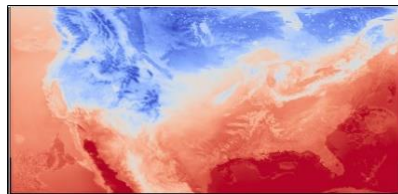
EPYC : 7742 (2.25GHz x 64cores) x2

入力データ

CONUS 2.5km

- 1501x1201x35

- 3 時間予報



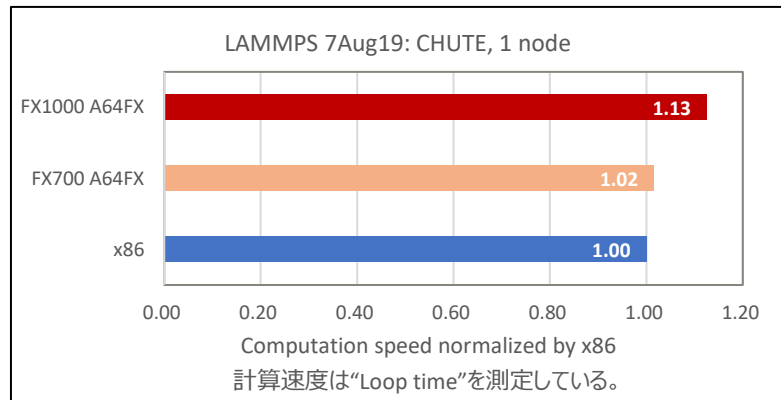
(https://www2.mmm.ucar.edu/wrf/bench/benchdata_v3911.html)

○ LAMMPSについて

- ✓ **Large-scale Atomic / Molecular Massively Parallel Simulator (LAMMPS)**は材料設計を目的とした古典分子動力学のシミュレーションコードである。このソフトは、特に並列計算機で実行するように設計されている。 (<https://www.lammps.org/>)

○ 性能評価

- ✓ **FX1000**の実行速度はx86の1.13倍となった。SIMD化とデータアクセスの効率化によって、**FX1000**と**FX700**の性能が向上した。
- ✓ ベンチマークモデルのCHUTEを評価に用いた。時間ループの90%程度をしめるPAIRとMODIFYの部分がSIMD化と高メモリバンド幅によって高い性能となった。



LAMMPS: version 7Aug19 (Tuned code)

Benchmark platform

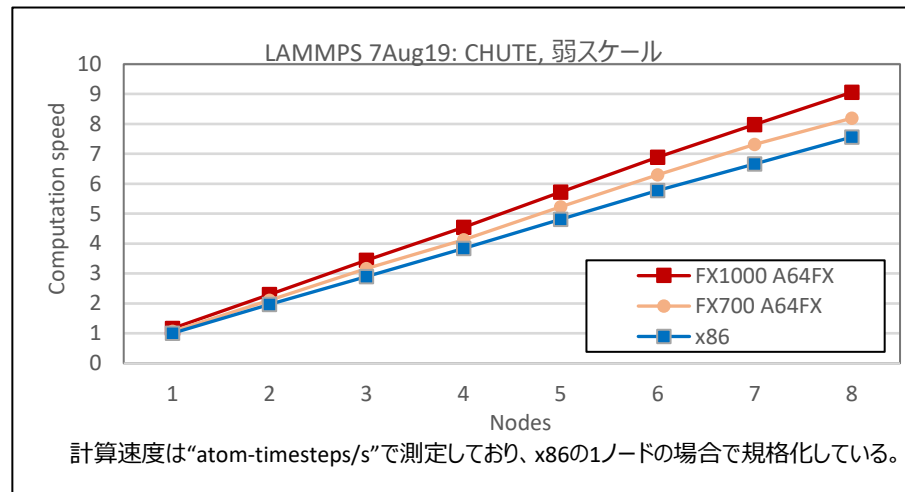
FX1000 A64FX (2.2GHz x 48cores)

FX700 A64FX (2.0GHz x 48cores)

x86: **Xeon P8260M** (2.4GHz x 24cores) x2

入力データ: “CHUTE” Granular chute flow

12,800,000 atoms (/node) for 100 timesteps



FX1000と**FX700**はほぼ理想的なスケラビリティとなっている。

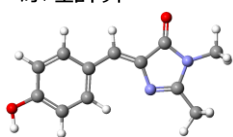
○ QUANTUM ESPRESSOについて

- ✓ **QUANTUM ESPRESSO**は第一原理計算を用いた電子構造計算と名のスケールにおける材料設計のためのオープンソースソフトウェアである。
(<https://www.quantum-espresso.org/>).

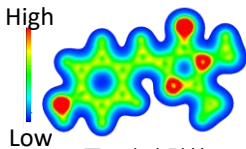
○ 性能評価

- ✓ **QUANTUM ESPRESSO 6.4.1**を用いて**A64FX**の実行速度を測定した。

- ✓ 第一原理計算

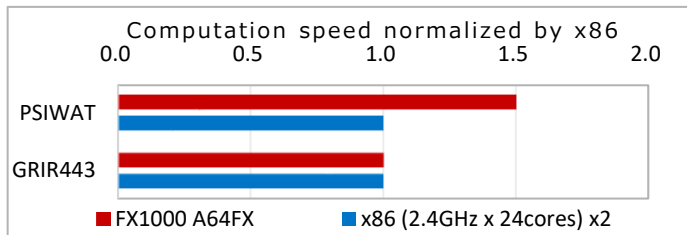


分子構造



電子密度計算

- ✓ QEF benchmarkにおいて、**A64FX**はx86 (2.4GHz x 24cores) x2 と比較して、1.5倍程度速い。



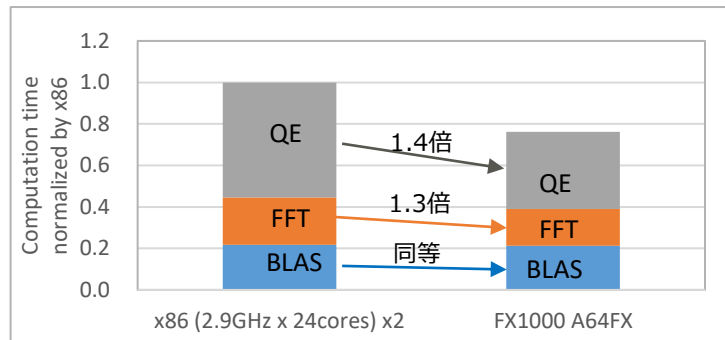
PSI-WAT: QEF/benchmarks/PSI-WAT/psiwat.in, 8 nodes
GRIR443: QEF/benchmarks/GRIR443/grir443.in, 8 nodes

Benchmark platform

FX1000 A64FX (2.2GHz x 48cores)
x86: **Xeon P8260M** (2.4GHz x 24cores) x2

- ✓ 構造最適化シミュレーションにおいて、**A64FX**はx86 (2.9GHz x 24cores) x2 と比較して、1.3倍程度速い。

- QE^{*1}: 高いメモリバンド幅とSIMD命令によって、1.4倍速くなった。
- FFT^{*2}: 配列長の拡大とSIMD命令によって、1.3倍速くなった。
- BLAS^{*3}: キャッシュの利用によって、同等の速度となった。



*入力データ: Structural Optimization Simulation (SCF calculation),
QEF/benchmarks/small-benchmarks/test_1.in, 224 atomsを使用

*1: ELPAを固有値計算で使用 (<https://github.com/fujitsu/elpa>)

*2: FFTW3は富士通でチューニングしたものを使用 (<https://github.com/fujitsu/fftw3>)

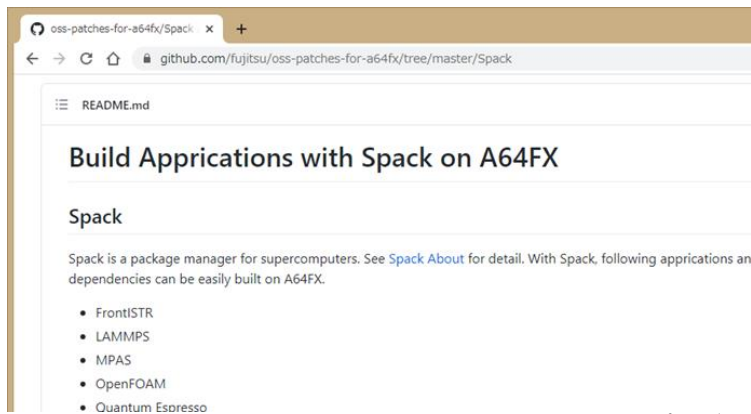
*3: FUJITSU SSL II Libraryを使用

Benchmark platform

FX1000 A64FX (2.2GHz x 48cores)
x86: **Xeon 8268** (2.9GHz x 24cores) x2

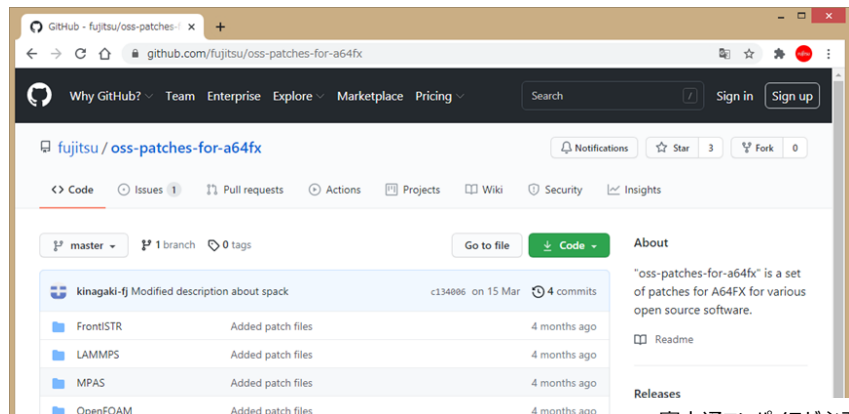
A64FXでのOSS利用者向け情報/ツールの提供

Spackを用いたインストールガイドとビルドスクリプト



富士通コンパイラが必要

高速化チューニング情報とパッチ



富士通コンパイラが必要

○ 対象のOSS



○ 対象のOSS



○ 情報サイト (Spack*で提供)

<https://github.com/fujitsu/oss-patches-for-a64fx/tree/master/Spack>

○ 情報サイト (富士通の公式Github)

<https://github.com/fujitsu/oss-patches-for-a64fx>

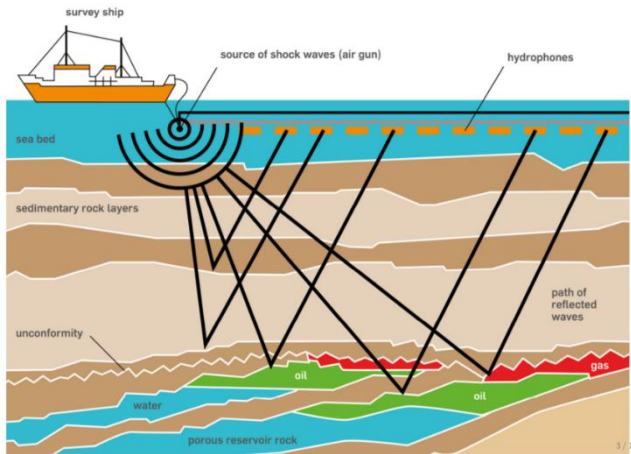
*Spack : Lawrence Livermore National Laboratoryで開発されたOSSパッケージマネージャーである。様々な計算機環境・アプリケーション向けにレシピと呼ばれるビルドスクリプトが用意されており、簡単にアプリをインストールできる。アプリケーションに必要な依存ライブラリも、1つのコマンドで同時にビルドできる。<https://spack.readthedocs.io/en/latest/>

Open-Source Oil & Gas アプリケーション Armエコシステムパートナーとの共同評価

石油・ガス分野のアプリにおけるA64FXの特長

- ✓ **地震探査解析 (Seismic simulation)** は石油探査に関わる重要技術である
- ✓ 大規模な3Dデータの解析により石油・ガスが埋蔵する地質構造を推定する
- ✓ **A64FX**の広帯域メモリ・ベクトル演算機構(SVE: Scalable Vector Extension)で高速に計算可能である

➤ 地震探査解析の概念図

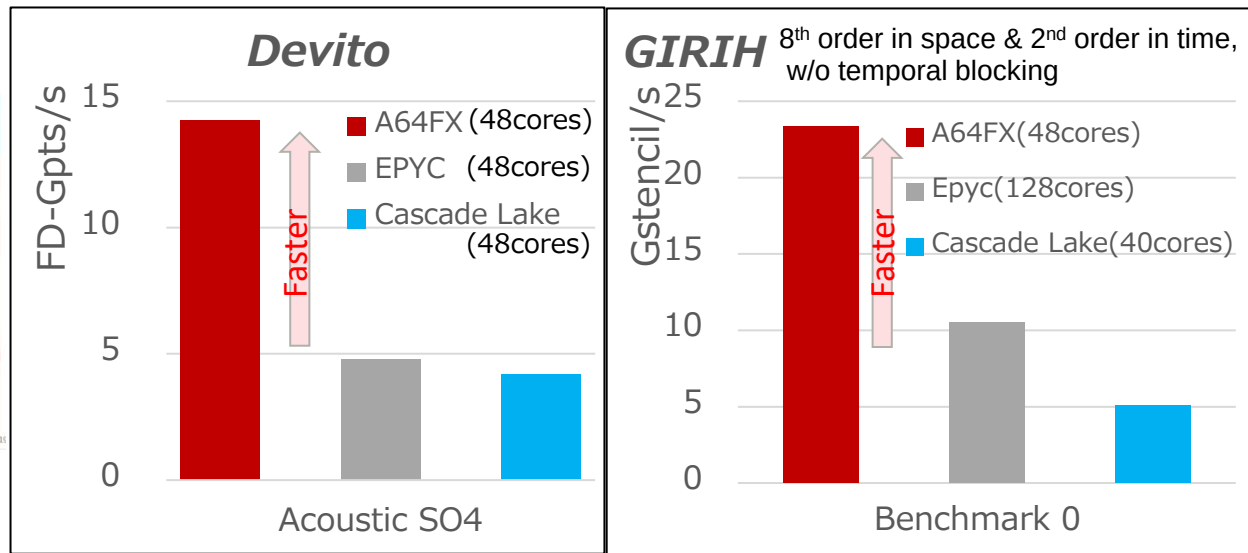


<https://www.devitoproject.org/>



<https://github.com/ecrc/girih>

➤ A64FXにおける地震探査解析の計算速度の例



○ Devito について

- ✓ インペリアルカレッジ・ロンドン* で開発された解析プログラム作成・実行用フレームワークである
- ✓ ドメイン固有言語で記述された解析プログラムから、高度に最適化した実行用コードを動的に生成・実行する機能を備え、様々なHPC環境で高速な解析計算を実行できる
- ✓ 石油・ガス探査に関わる地質構造推定のための逆解析のコアとなる有限要素法などが柔軟に扱える

* Imperial college London <https://www.devitoproject.org/>

○ 性能データ

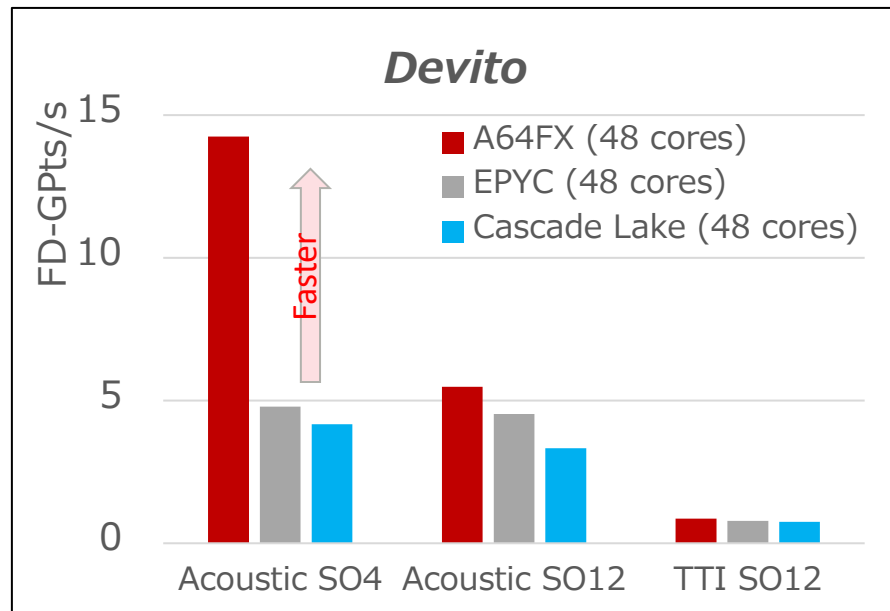
- ✓ **A64FX** の性能は、他のCPUを凌駕しており、特にAcoustics SO4(空間4次の音波解析)でその傾向が顕著である
- ✓ **HBM (High Bandwidth Memory)** と **SVE (Scalable Vector Extension)** が高速計算の鍵となる

✓ 参考文献:

https://www.youtube.com/watch?v=-2LrXL6Y2g&list=PLcsG4X8Zn_UAdbYQODr5PQLCcdCo_sovO&index=36&t=61s



- **A64FX**: 2.2GHz 48cores 32GB HBM2
12 threads x 4 MPI process to fit A64FX Core Memory Group
- **Xeon 9275CL**: 2.4GHz 24cores x 2 sockets
- **EPYC 7R32**: 3.3GHz 48cores



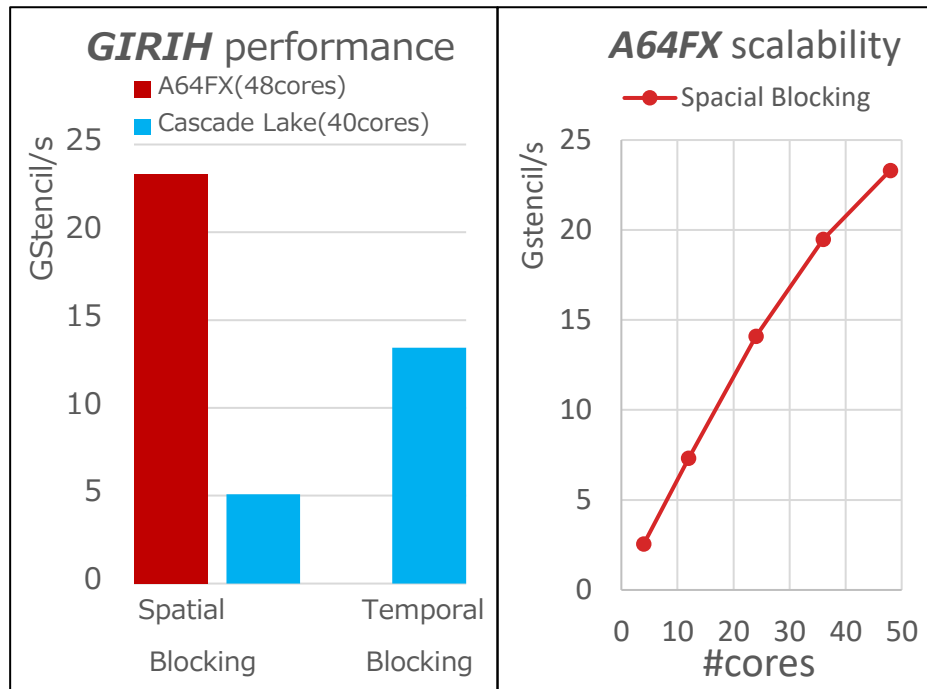
○ GIRIHについて

- ✓ サウジアラビア・アブドラ王立科学技術大学 (**KAUST** *) で開発された高速ステンシル計算プログラムである
- ✓ MWD法 (Multicore Wavefront Diamond tiling; temporal blocking) とよばれる独自の計算高速化手法に加え、通常の空間データブロック化手法 (spatial blocking) が実装されている

* **KAUST**: King Abdullah University of Science and Technology

○ 性能データ

- ✓ **A64FX** は、単純な空間データブロック化手法による計算で目覚ましい高性能が得られており、この性能は、**Cascade Lake**のMWD法による性能をも上回っている
- ✓ **HBM (High Bandwidth Memory)** と **SVE (Scalable Vector Extension)** が高速計算の鍵となる
- 8th order, domain size 1024x1024x512, Single precision (benchmark 0)
- **A64FX**: 2.2GHz 48cores 32GB **HBM2** (Tuned code)
1/3/6/9/12 threads x 4 MPI process **A64FX CMG**向けに調整
(**CMG=Core Memory Group**)
- **Cascade Lake** の性能値は**KAUST**がSC20の際に公開してる**github**
<https://github.com/ecrc/girih> の値を引用



Thank you

