EasyISTR／固有値ベンチマーク（その２）

Windows 10、Linux（VMwareゲストと実マシン）

前回からFrontISTR 5.1.1とIntel-MKLの結果を追加
第10世代Intel CPUでの結果を参考に追加

概要

ベンチマーク実施理由

- Windows用公式バイナリ（MS-MPIバージョン）は遅いと感じた
- Ubuntu, Debianではリポジトリからintel-mklをインストールできる
- MKL組み込みでどのくらい速くなるか試した

結果

- 並列計算をしない場合、Windows版はSerial ver.が良い
- MUMPSはCGに比べて、20～40倍高速
- MKLを組み込んだMUMPSが最も高速
- CGはMKL組み込みの効果がなかった

ベンチマークに使用したPCのスペック

- CPU： Intel Core i5 6600K 3.5GHz 4コア
  デスクトップPCです

- RAM: 32GB

- ドライブ
  Cドライブ: SSD(480GB)、 Eドライブ: HDD(3TB)・・・EasyISTRとSalome

  他に1TBのHDDがあり、Debian 10をインストールしています
  （BIOSからブートドライブを選べばネイティブ環境で立ち上がります）

- グラフィック： NVIDIA GTX 960

- 参考にCore i7（第10世代、第4世代）のノートパソコンのデータも加えました

Linux環境でのFrontISTRのIntel-mkl組み込み

DebianとUbuntuで確認しました

FrontISTRへのMKL組み込み方法（その１）

小川氏のver.4.6バイナリを使用する方法[1]を基本とし、intel-mkl関係で工夫した。

1. リポジトリからライブラリの導入

```
$ sudo apt install build-essential
$ sudo apt install libtrilinos-ml-dev
$ sudo apt install libtrilinos-aztecoo-dev libtrilinos-zoltan-dev
$ sudo apt install libmumps-dev libmetis-dev
$ sudo apt install intel-mkl # Debian 10では、non-free
```

2. REVOCAP_Refinerをコンパイル

```
$ tar xvf REVOCAP_Refiner-1.1.04.tar.gz
$ cd REVOCAP_Refiner-1.1.04
$ make
```

FrontISTRへのMKL組み込み方法（その２）

3. FrontISTRのビルド(その１)
   CMAKEではうまくいかなかったので、Makefile.confでビルドした。
   $ tar xvf FrontISTR-v5.1.1.tar.gz
   $ cd FrontISTR-v5.1.1

4. FrontISTRのビルド（その２）
   Makefile.conf.orgを編集して、Makefile.confとして保存する。
   Intel-mklに関する設定を次ページに示す。

FrontISTRへのMKL組み込み方法（その３）

Makefile.con抜粋（Intel-mklが関係する部分）

```
# MKL PARDISO
MKLDIR     = /usr
MKLINCDIR  = $(MKLDIR)/include/mkl
MKLLIBDIR  = $(MKLDIR)/lib/x86_64-linux-gnu

# Fortran compiler settings
F90          = mpif90 -fopenmp
F90FLAGS      = -m64 -I/usr/include/mkl
F90LDFLAGS     = -lstdc++ -L/usr/lib/x86_64-linux-gnu -lmkl_gf_lp64 -lmkl_gnu_thread -lmkl_core –lgomp
-lpthread -lm -ldl
F90OPTFLAGS    = -O2
F90FPP        = -cpp
F90LINKER      = mpif90 -fopenmp
```

FrontISTRへのMKL組み込み方法（その４）

5. FrontISTRのビルド(その3)
   $ ./setup.sh -p --with-tools --with-refiner --with-metis --with-mumps --with-mkl --with-ml

6. FrontISTRのビルド（その4)
   コンパイルしてバイナリを作成する
   $ make
   $ make install
   Makefile.confで設定したフォルダにバイナリが保存される

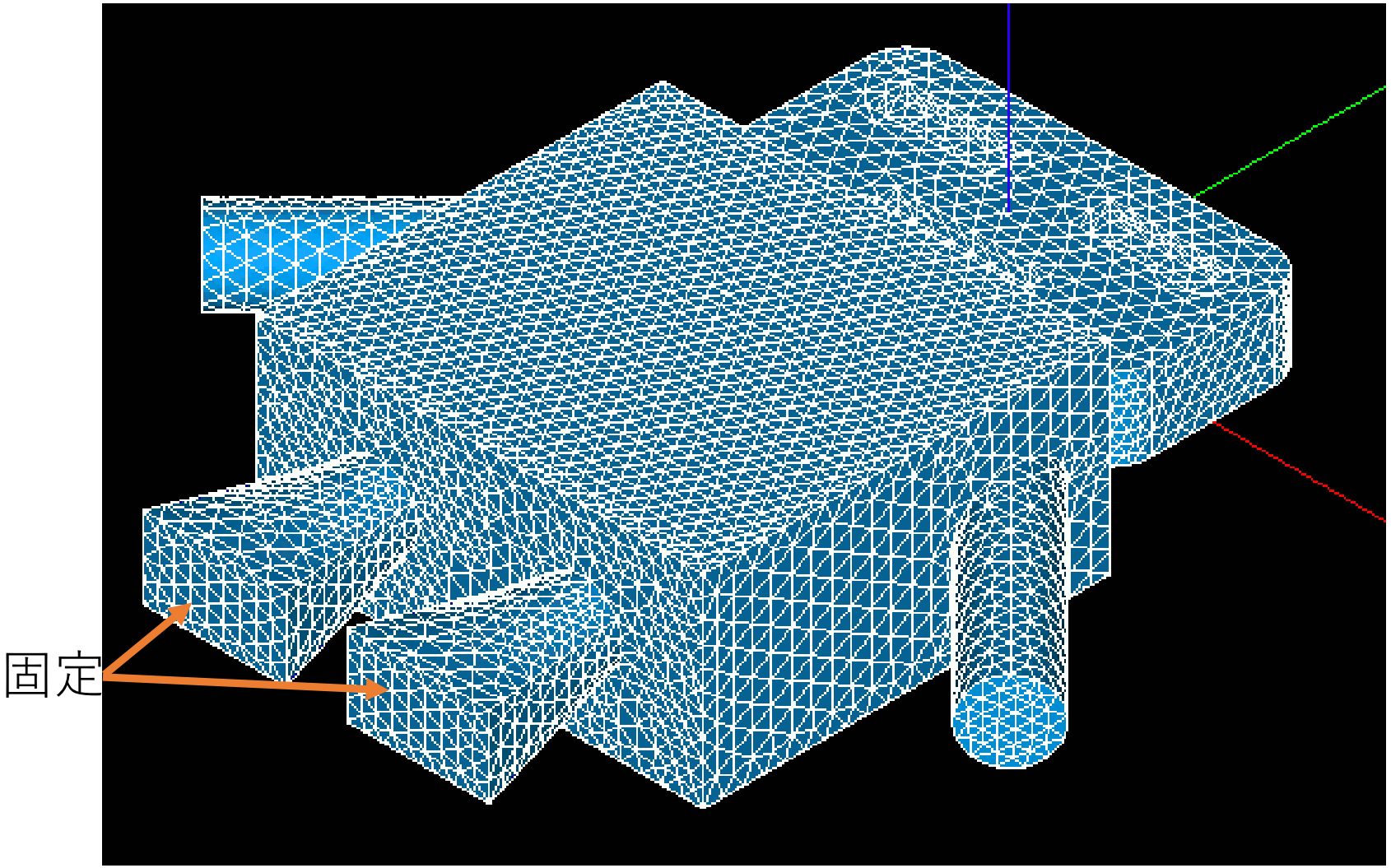
Windows上のビルドについて

- 公式サイトの情報では、MSYS2を使う環境
- リポジトリには、Intel-mklとtrilinosのバイナリがないので、敷居が高い
- MSYS2は、ローリングリリースなので、ライブラリのメジャーアップデートが入ったときに壊れる可能性がある
- 以上の理由でビルドはあきらめました

固有解析ベンチマーク結果

解析に用いたメッシュ

四面体2次要素（前回発表した[2]のと同じモデルです。）
Nodes 60786　　elements type:342　37317



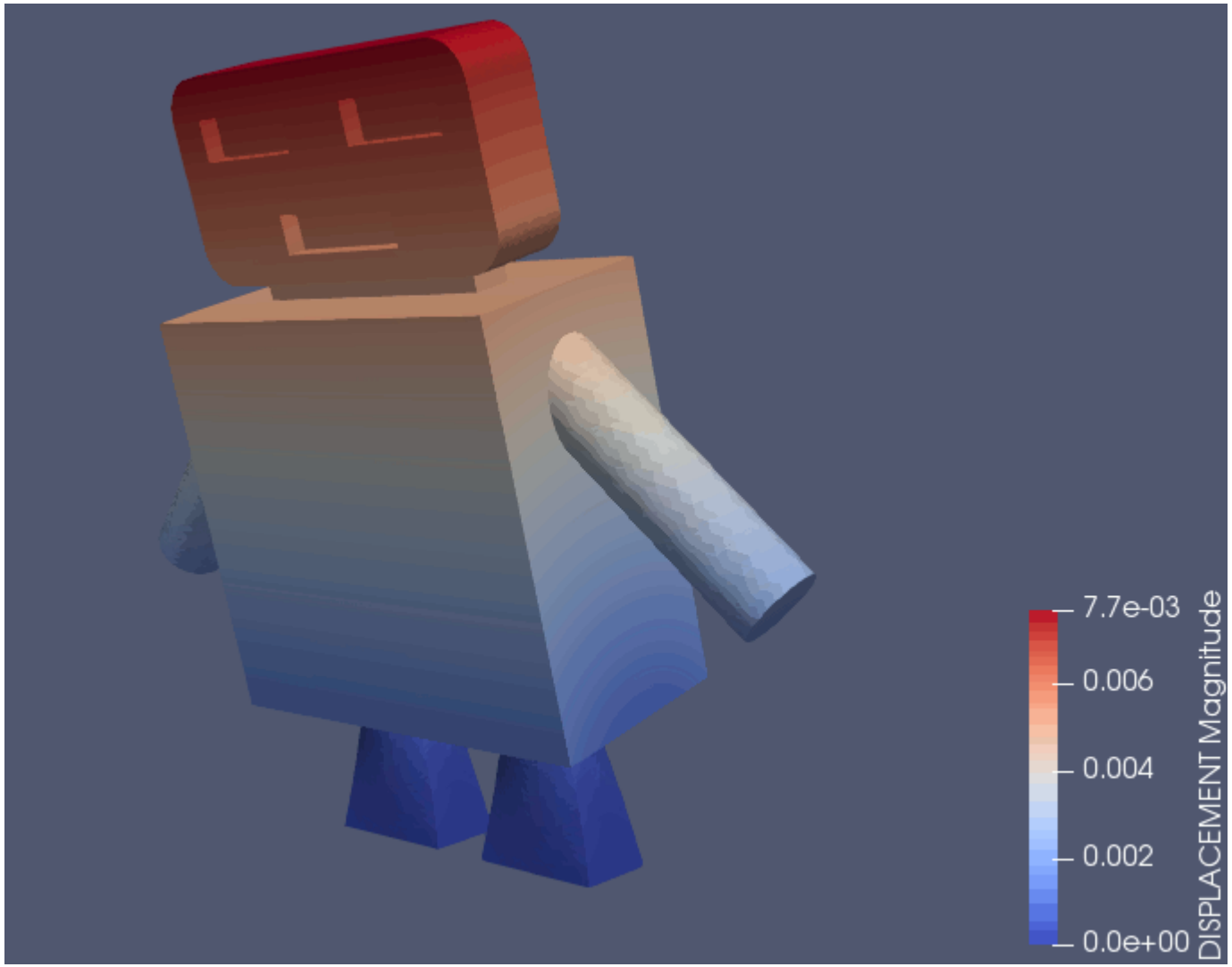
FrontISTRのソルバー

- FrontISTRの線形ソルバーと前処理[3]によると、
  よく使うのは「CG」と「MUMPS」とのことです

- Windows 10、仮想マシンのUbuntuと実マシンのDebian 10の環境でこの2種類のソルバーでの解析時間を比較しました

- メッシュ分割による並列計算は、適用していません

デフォルトの５次モードまで解析（図は１次モードの変位）



Windowsバイナリでのベンチマーク結果（4コア）

	FrontISTR 4.6 Windows 10 Pro 公式バイナリを使用		FrontISTR 5.1.1、Windows 10 Pro、公式バイナリを使用					
			MS-MPI ver.				Serial ver.	
			旧MPI		新MPI			
	CG	MUMPS	CG	MUMPS	CG	MUMPS	CG	MUMPS
Total （秒）	603.48 （21倍）	28.77 （1倍）	977.03 （20倍）	48.06 （1倍）	1054.88 （35倍）	29.73 （1倍）	551.29 （20倍）	27.59 （1倍）
Pre （秒）	2.41	2.41	2.31	2.31	2.07	2.07	2.11	2.14
Solve （秒）	601.07	26.40	974.73	45.75	1052.81	27.66	549.18	25.45

- MS-MPIのバージョンに注意が必要
  （バージョンにより、MUMPS、CGの速度が変わる）
- CG（MS-MPI ver.は特に遅い）と比べて、MUMPSは20～35倍高速
- 並列計算しない場合は、Serial ver.が良い

Debian 10実マシン環境（4コア、BIOSで切り替え）

	Frontistr 4.6 openblas		Frontistr 5.1.1 openblas		Frontistr 5.1.1 Intel-mkl	
	CG	MUMPS	CG	MUMPS	CG	MUMPS
Total（秒）	556.14（35倍）	15.74（1倍）	490.57（31倍）	15. 86（1倍）	490.89（36倍）	13.59（1倍）
Pre（秒）	1.66	1.72	1.78	1.78	1.77	1.76
Solve（秒）	554.49	14.02	488.79	14.08	489.12	11.82

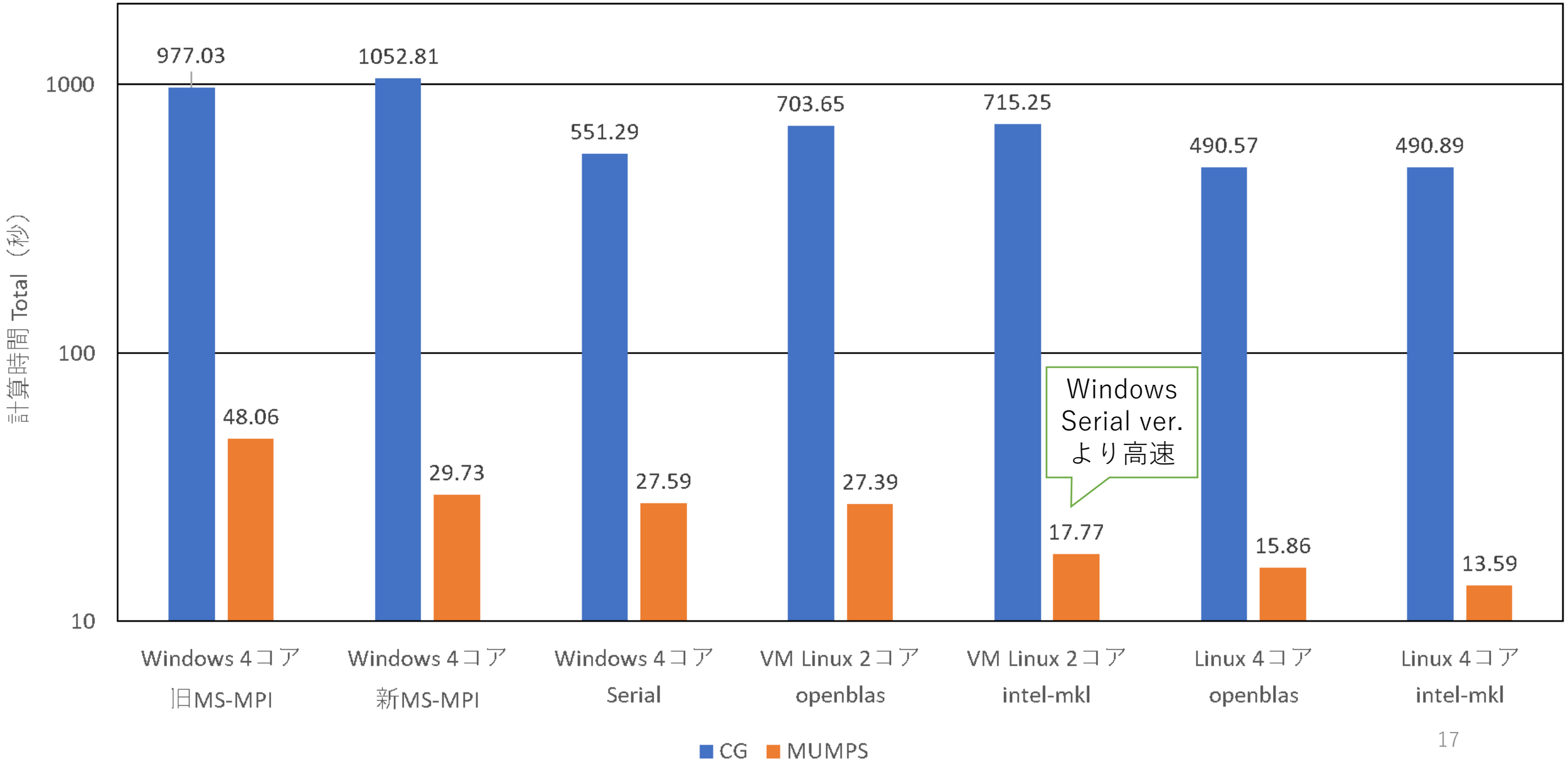
- CGと比べて、MUMPSが31～36倍高速
- Intel MKLを組み込んだMUMPSが最も高速
- CGは大きな差はない

Windows上のVMwareのゲスト(2コア)

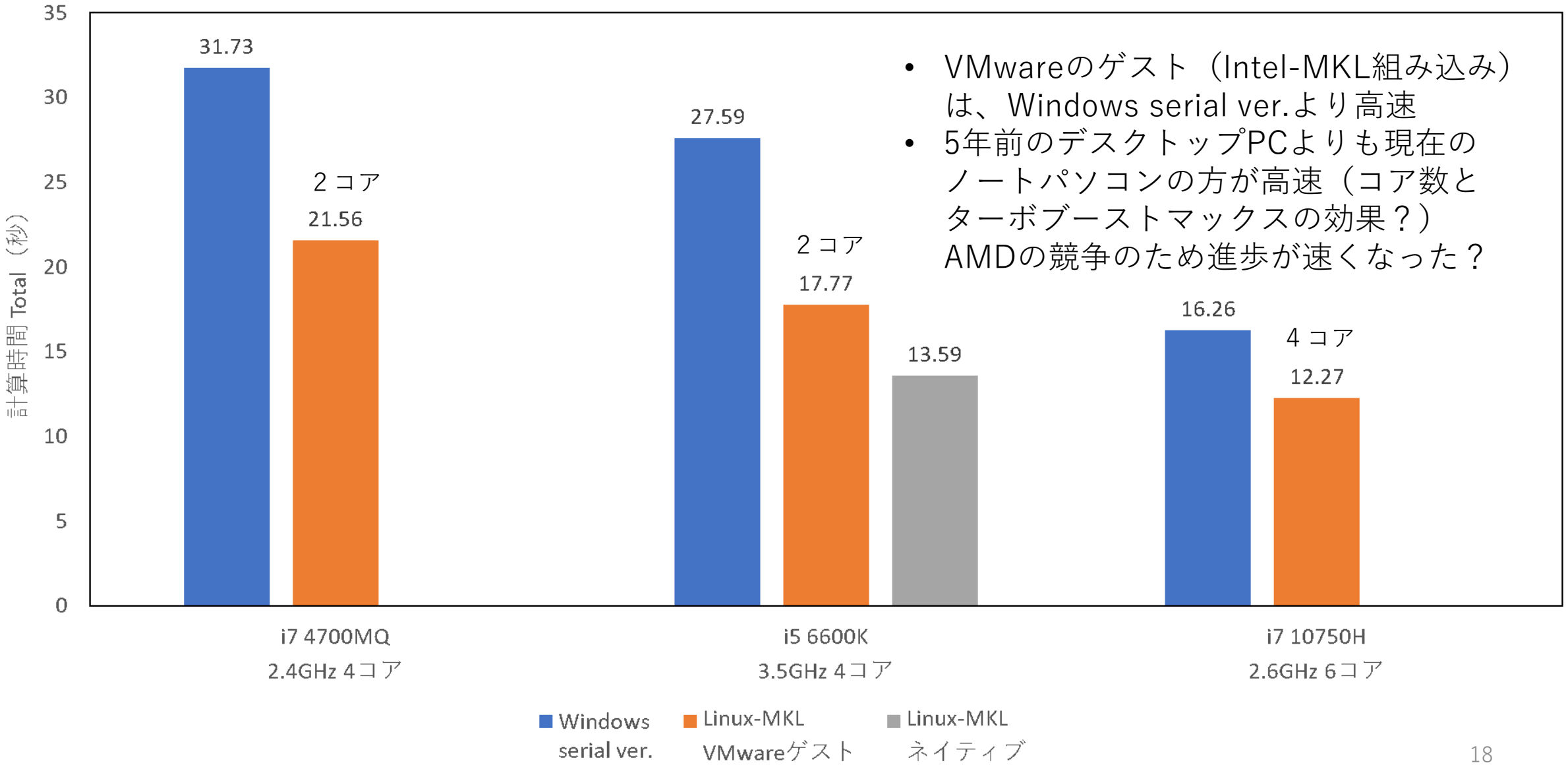
	Frontistr 4.6 Openblas Ubuntu 18.04		Frontistr 5.11 Openblas Ubuntu 20.04		Frontistr 5.11 Intel-mkl Ubuntu 20.04	
	CG	MUMPS	CG	MUMPS	CG	MUMPS
Total (秒)	775.78 (30倍)	25.99 (1倍)	703.65 (26倍)	27.39 (1倍)	715.25 (40倍)	17.77 (1倍)
Pre (秒)	2.01	2.01	2.19	3.12	3.21	2.23
Solve (秒)	773.77	23.97	701.45	24.26	712.03	15.55

- CGと比べて、MUMPSは26倍～40倍高速
- Intel MKLを組み込んだMUMPSが最も高速
- CGは大きな差はない

FrontISTR-V5.1.1でのベンチマーク結果



他のマシンでのベンチマーク結果（FrontISTR 5.1.1, MUMPS）



- VMwareのゲスト（Intel-MKL組み込み）は、Windows serial ver.より高速
- 5年前のデスクトップPCよりも現在のノートパソコンの方が高速（コア数とターボブーストマックスの効果？）AMDの競争のため進歩が速くなった？

VMwareゲスト（Linux/MKL組み込み）の評価

メリット

- Windows版より高速（MUMPSソルバー）
- DirectMKLが使える（FrontISTR ver. 5.Xの場合。4.6はNG）
- イメージのコピーにより他のマシンへ環境を移植できる

デメリット

- ファイルを消してもディスクの使用量が減らない
  （SSDの場合、VMwareのディスク圧縮は危険？）
- これを避けるため、共有フォルダで作業するとディスクアクセスが極端に遅くなる（open-vm-tools-desktop）
- ゲストOS（Linux）からマルチディスプレイが使えない

結果のまとめ

- 並列計算を実施しない場合、Windows版はSerial ver.が良い

- MUMPSは、CGと比べて20～40倍高速
  現在のPCであれば、RAMを64GB（ノート）、128GB（デスクトップ）まで増設できるので、MUMPSでかなりの範囲を解析できると思われる

- Intel MKLを組み込んだMUMPSソルバーが最も高速（Linux環境で確認した）
  仮想マシンでもWindows Serial ver.よりも高速

- 仮想環境でのLinux（mkl組み込み）は、速度やDirectMKLを使用できるメリットがあるが、デメリットもある
  マシンや解析内容に応じて、環境を選定することを推奨します

参考／最近のIntel製CPUの仕様

- 第10世代Core i7
  - 購入したノートパソコン（Core™ i7-10750H）の場合
  - ６コア１２スレッド
  - 高負荷の場合でもクロックアップするインテル® ターボ・ブースト・マックス・テクノロジー 3.0 に対応

- 第11世代Core i7
  - 最近発売されたCore™ i7-11370Hの場合
    ---このCPUを搭載したVAIO Zは、RAM 32GB, 1TB SSDで約40万円と高価
  - ４コア８スレッド
  - ターボ（４コア）：4.6GHz
  - Intel® AVX-512に対応

- デスクトップパソコンなら第11世代が良い。ノートパソコンは時間があればコア数の多い第11世代のCPUが出荷されるまで待った方がよいと思います。

参考資料

1. オープンソース大規模並列FEM非線形構造解析プログラム FrontISTR v4.6のインストール (ubuntu 16.04 LTS)
   https://qiita.com/michioga/items/b9bc6d5c04318b107714

2. EasyISTR固有値解析ベンチマーク
   http://opencae.gifu-nct.ac.jp/pukiwiki/index.php?%C2%E8%A3%B6%A3%B9%B2%F3%CA%D9%B6%AF%B2%F1%A1%A720190511

3. FrontISTRの線形ソルバーと前処理
   https://www.frontistr.com/seminar/160318/LINEQ_Solver_fixed.pdf