

Amber分子動力学解析ソリューション プライマジー on Fujitsu Server PRIMERGY

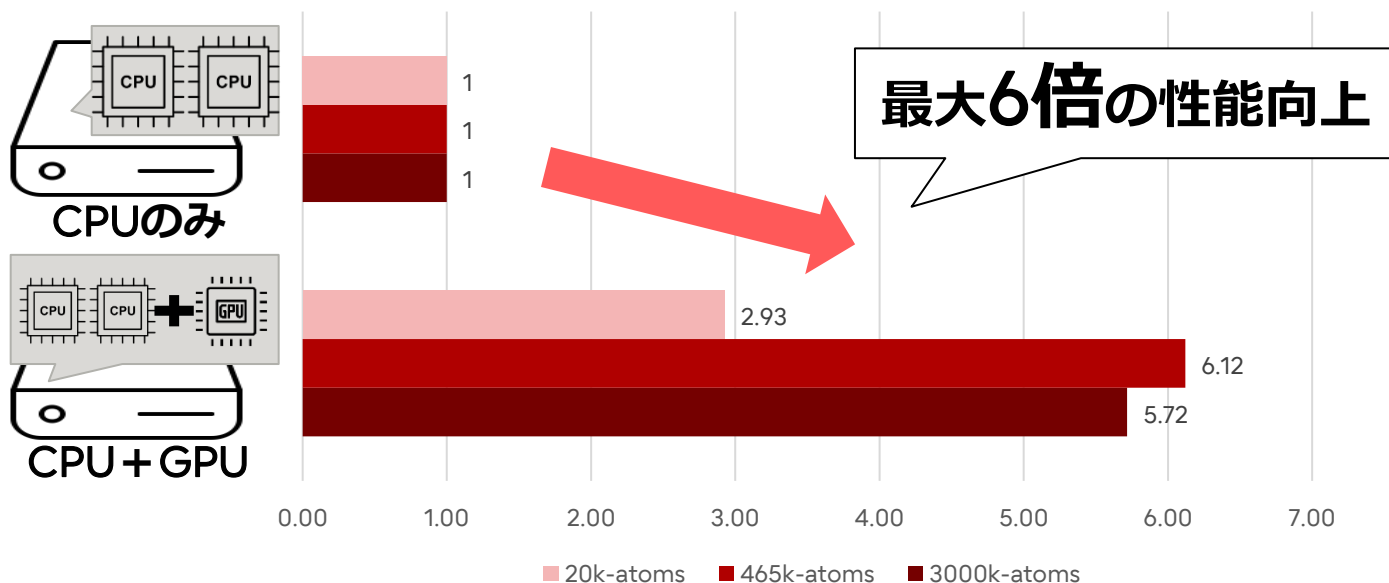
Amberを用いたGPU(NVIDIA A100)ベンチマーク -GPUの利用により解析時間を大幅に短縮-



並列処理性能に優れたGPUは、3Dグラフィックス、VR/AR、科学技術計算、そして人工知能/Deep Learningといった幅広い分野で活用され、世の中に欠かせない身近なものとなってきています。分子動力学シミュレーションアプリケーションであるAmberでもGPUを活用することで解析時間を短縮することができます。

GPU1基搭載で最大6倍の性能発揮

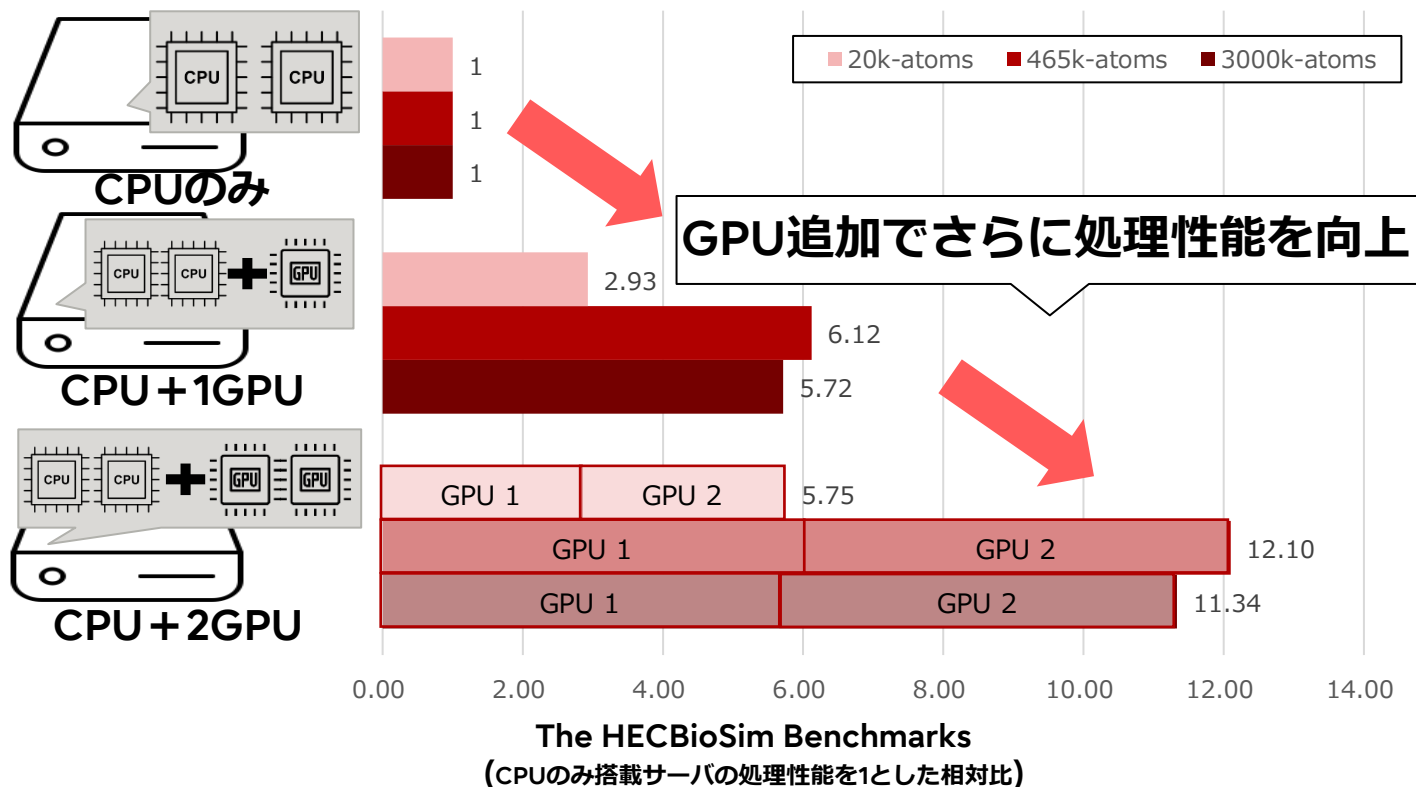
GPU(NVIDIA A100)を搭載したPRIMERGY RX2540 M6を使用することで、CPU(64Core)に比べてAmberの実行を高速化できます。測定にはThe HECBioSim Benchmarksに含まれるモデル/入力データを使用し、最大6倍の性能向上を確認しました。



The HECBioSim Benchmarks
(CPUのみ搭載サーバの実行性能を1とした相対比)

GPU2基同時並行解析で、約11倍性能向上

GPU(NVIDIA A100)を2基搭載したサーバを使い、CPUのみ(64Core)、GPU1枚、GPU2枚でAmberの単位時間あたりの処理性能を測定しました。GPU2枚の場合は、各GPUでAmberの解析処理を同時実行しています。測定にはThe HECBioSim Benchmarksに含まれるモデル/入力データを使用しています。



GPU2基で解析処理を同時実行したところ、単位時間で行える仕事量は、最大でCPUの約12倍であることが確認できました。また、各GPUは1GPUのみ搭載し解析処理を実施した場合と同程度の性能を示しており、GPUを増やすことで全体の仕事量を増やすことができ、さらに効率的に解析することが可能です。

1台のGPU2基搭載サーバにCPUのみ搭載サーバ約12台分の解析を処理させることで、導入・管理するサーバの台数を減らすことが可能となり、コスト削減に貢献します。

機種	FUJITSU Server PRIMERGY RX2540 M6
CPU	インテル® Xeon® Gold 6338 プロセッサー (2.00 GHz/32core) × 2
Memory	256GB (16GB 3200 RDIMM×16)
OS	Red Hat Enterprise Linux
GPU	NVIDIA A100(40GB)

アプリケーション	Amber 2022
Solver	pmemd(CPU測定) pmemd.cuda(GPU測定)
model	The HECBioSim Benchmarks ・ 20k-atoms、465k-atoms、 3000k-atoms

- 記載されている会社名、製品名は各社の登録商標です。
- 記載されているシステム名、製品名等には、必ずしも商標表示（®、TM）を付記していません。
- 本ベンチマークは、The HECBioSim Benchmark Suiteを使用しています。 www.hecbiosim.ac.uk

商品・サービスについてのお問い合わせは

富士通コンタクトライン（総合窓口） 0120-933-200

受付時間 9:00～12:00および13:00～17:30（土・日・祝日・当社指定の休業日を除く）

富士通公開サイト <https://www.fujitsu.com/jp/primergy/> 詳細はこちら <https://www.fujitsu.com/jp/products/computing/servers/primergy/pccluster/>