



富岳における密行列計算

中村宜文 理化学研究所 計算科学研究センター

第12回 High Performance Computing Physics (HPC-Phys) 勉強会

2021年8月26日 オンライン

今日お話しする内容

- 富岳
- 富岳における密行列計算の性能
 - 行列行列積
 - 行列ベクトル積
 - 逆行列計算
 - 固有値問題
 - 特異値問題
 - ~~連立一次方程式~~
 - ~~最小二乗法~~

スーパーコンピュータ「富岳」

- スーパーコンピュータ性能ランキングにおいて3期連続4冠
(2021/6, 2020/11, 2020/6)

Benchmark (2021/June)	1 st	score	2 nd	score
TOP500	富岳	442.0 PFLOPS	Summit	148.6 PFLOPS
HPCG	富岳	16.0 PFLOPS	Summit	2.93 PFLOPS
HPL-AI	富岳	2.00 EFLOPS	Summit	1.15 EFLOPS
Graph500	富岳	102,950 GTEPS	Taihulight	23,756 GTEPS

- PFLOPS : Peta floating operations per second
- EFLOPS : Exa floating operations per second
- GTEPS : Giga traversed edges per second



「富岳」概要

- 理化学研究所と富士通株式会社の共同開発

- 158,976 ノード (A64FX CPU)

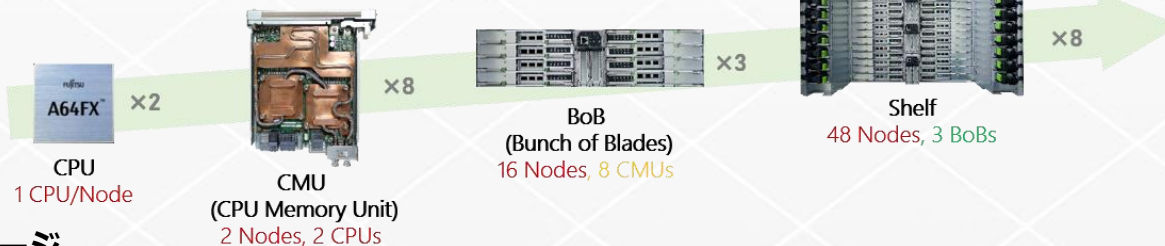
- 432 ラック

- 396 (ノード全搭載:384ノード) ラック
- 36 (ノード半搭載:192ノード) ラック

- 演算性能

- ノーマルモード (2.0 GHz)
 - 倍精度 488 PFLOPS, 単精度 977 PFLOPS, 半精度 1.95 EFLOPS, 整数 3.90 EOPS
- ブーストモード (2.2 GHz)
 - 倍精度 537 PFLOPS, 単精度 1.07 EFLOPS, 半精度 2.15 EFLOPS, 整数 4.30 EOPS

- 主記憶 : 4.85 PiB, 163 PB/s



- ストレージ

- 第一階層 : 1.6TB高速SSD/16ノード
- 第二階層 : 富士通FEFS(Lustreベースファイルシステム, 約150PB)
- 第三階層 : 商用クラウド等

対「京」比
 倍精度演算 : 約50倍
 主記憶容量 : 約5倍
 主記憶帯域 : 約30倍



Rack
 384 Nodes, 8 Shelves

Courtesy of FUJITSU LIMITED

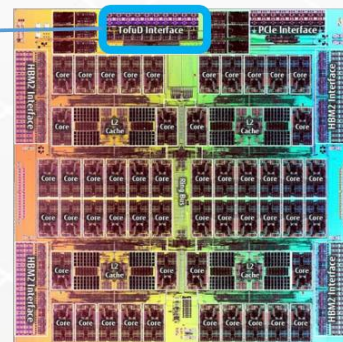
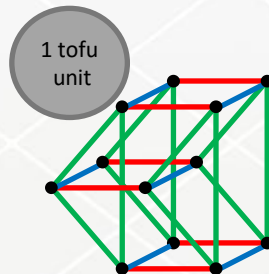
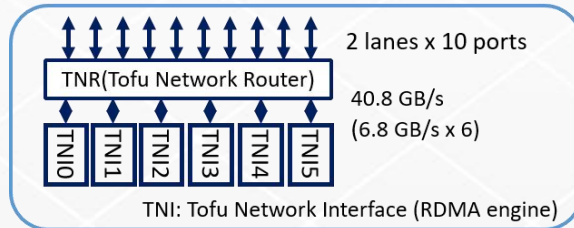
A64FX

Architecture	Armv8.2-A SVE (512-bit SIMD) Fujitsu extension : hardware barrier, sector cache, prefetch
Core	48 (+ 2 or 4 assistant cores) 4 core memory group (4 CMG)
TFLOPS	2.0 GHz) DP: 3.072, SP: 6.144, HP: 12.288 2.2 GHz) DP: 3.3792, SP: 6.7584, HP: 13.5168
L1 cache (at 2GHz)	L1D/core: 64 KiB, 4way 256 GB/s (load), 128 GB/s (store) B/F=4
L2 cache (at 2GHz)	L2/CMG: 8 MiB, 16way L2/node: 4 TB/s (load), 2 TB/s (store) B/F=2 L2/core: 128 GB/s (load), 64 GB/s (store)
Memory	HBM2 32 GiB, 1024 GB/s B/F=0.3
Interconnect	Tofu Interconnect D (28 Gbps x 2 lane x 10 port) 6 Tofu network interface (RDMA engine) 40.8 GB/s (6.8 GB/s x 6)
I/O	PCIe Gen3 x16
Technology	7nm FinFET

Architecture Information <https://github.com/fujitsu/A64FX>

富岳のネットワーク

- Tofu interconnect D
- Topology (X,Y,Z,a,b,c) : (24,23,24,2,3,2)
- Tofuハードウェアバリアによる高速縮約
 - 実数3つまで、整数8つまで
- リンクバンド幅 : 6.8 GB/s
- インジェクションバンド幅 : 40.8 GB/s
- 6基のRDMAエンジンによる同時通信
- キャッシュインジェクション機能
 - 受信データを直接L2\$に書く込み、キャッシュミス削減できる



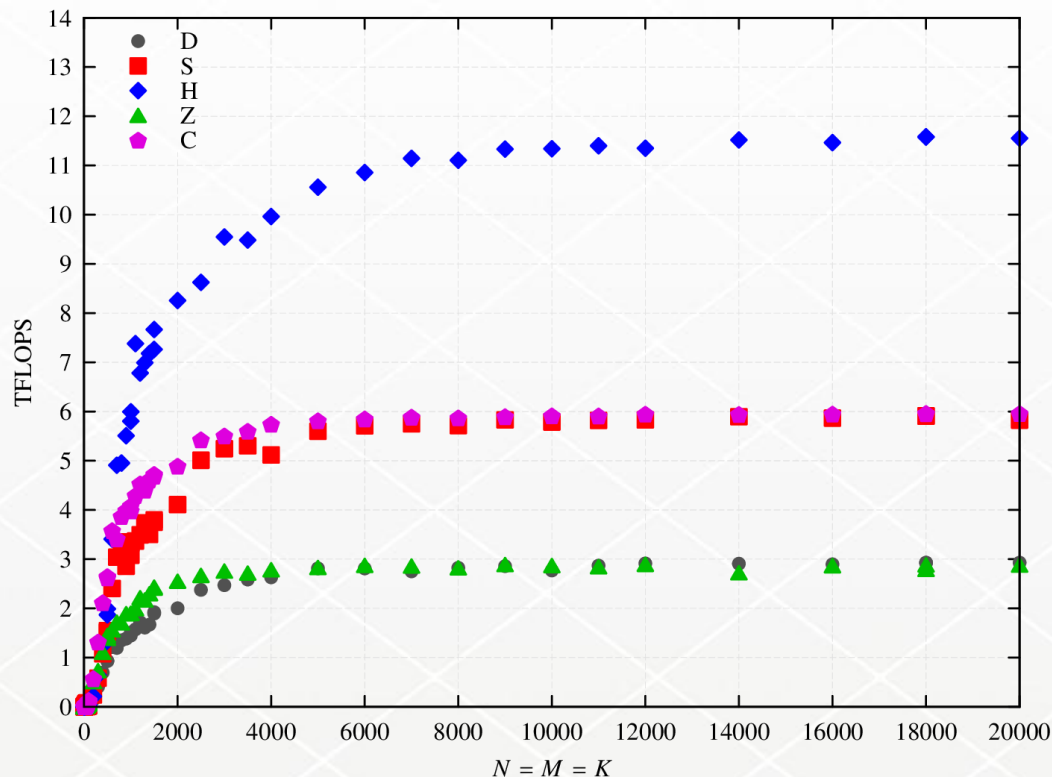
Courtesy of Fujitsu

富岳における密行列計算の性能

- **コンパイルオプション： -Kfast,openmp -SSL2BLAMP**
 - SSL2スレッド並列版（SSL2BLAMP）をリンク
- **行列行列積**
- **行列ベクトル積**
- **逆行列計算**
- **固有値問題**
- **特異値問題**

行列行列積 (GEMM)

● $\alpha * AB + \beta * C$

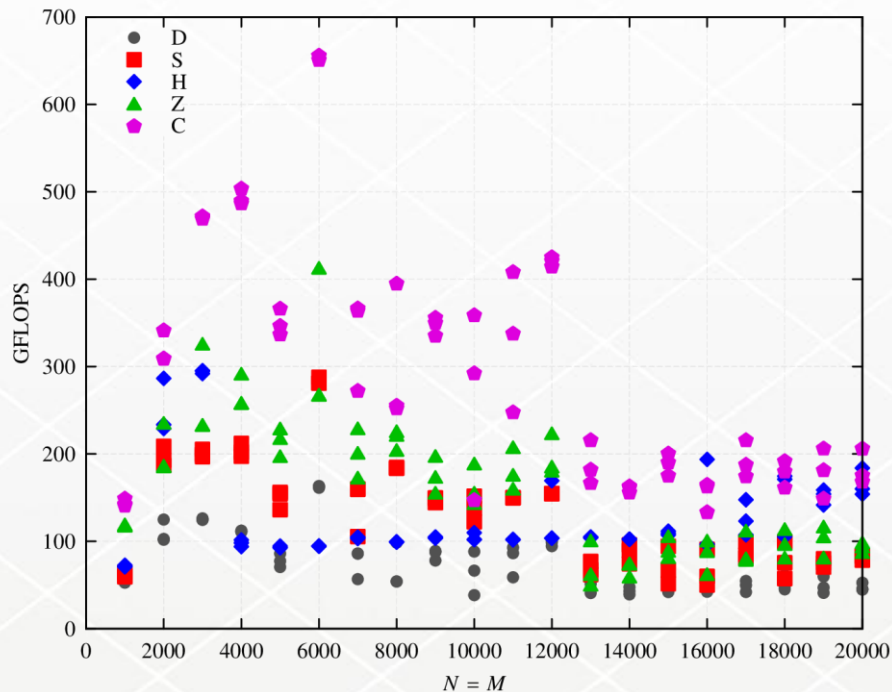


行列サイズが大きいときの
演算性能はピーク比の約95%

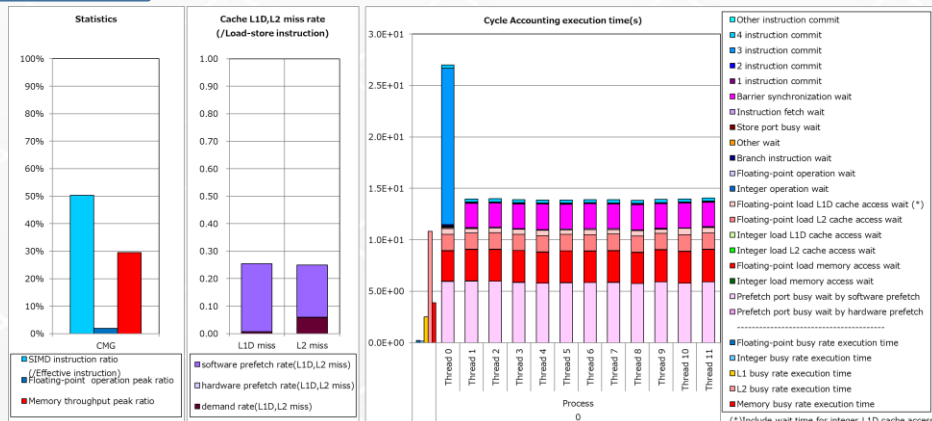
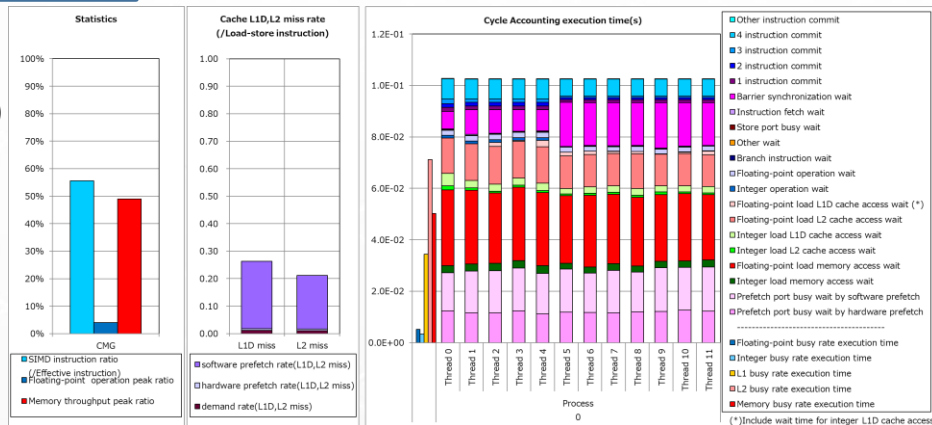
行列ベクトル積 (GEMV)

N=2400 (D)

- Alpha * Ax + beta y
- B/F (Nが大きいとき) : 4(D), 2(S), 1(H), 2(Z), 1(C)
- 測定結果 : 性能が不安定

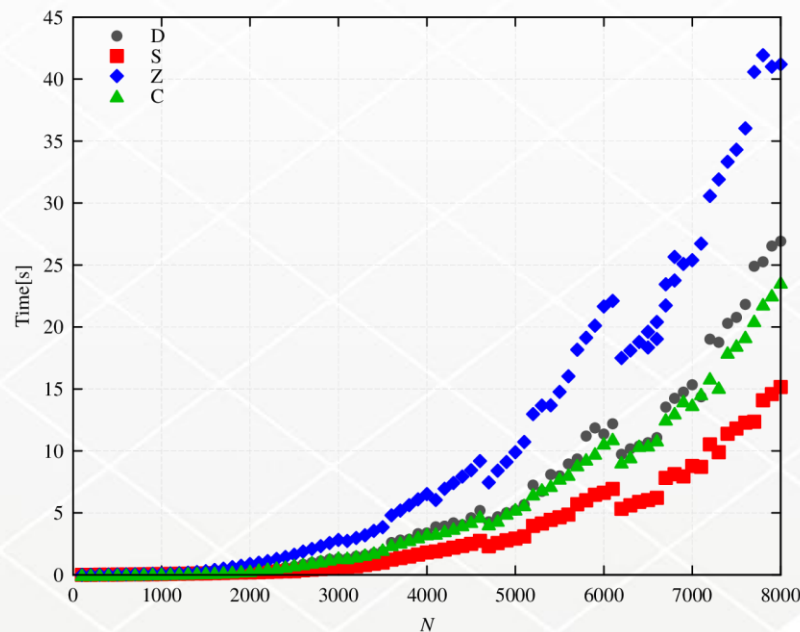
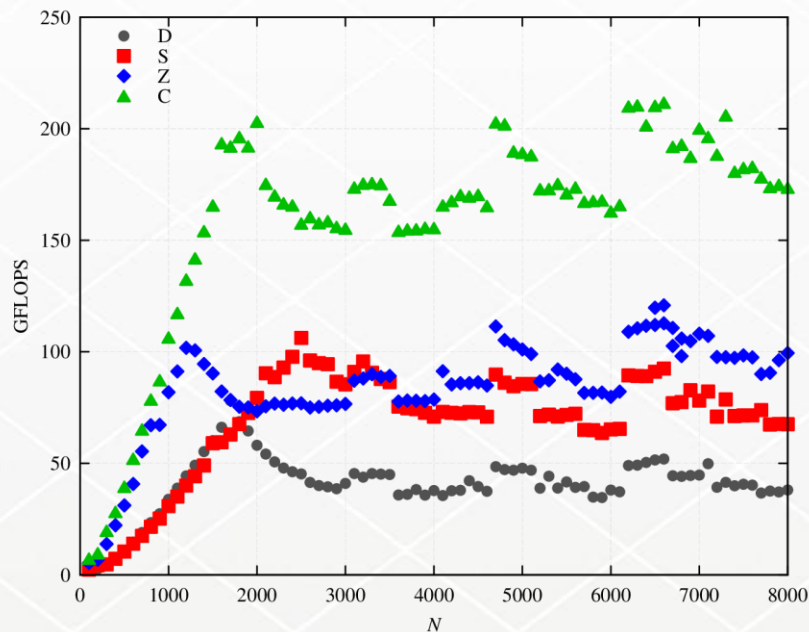


N=20000 (D)



一般行列の逆行列

- GETRF：一般行列のLU分解
- GETRI：GETRFで求めたLU分解を使って逆行列を計算
- ある行列サイズまで性能向上し、それより大きいサイズでは性能が下がることもある



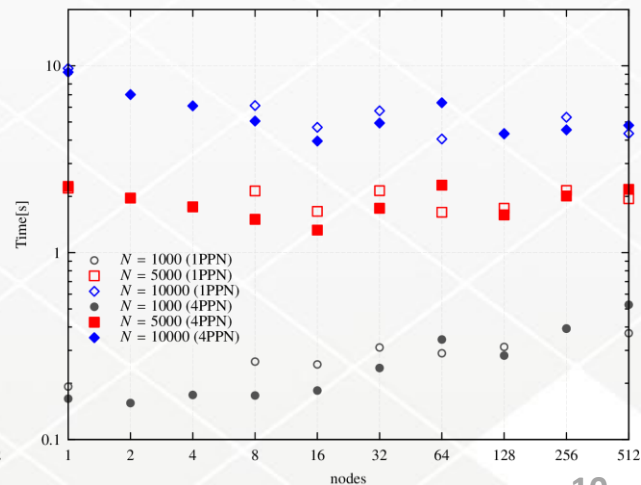
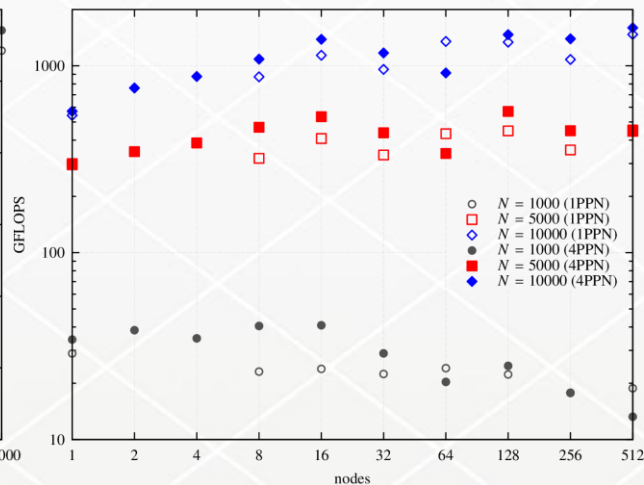
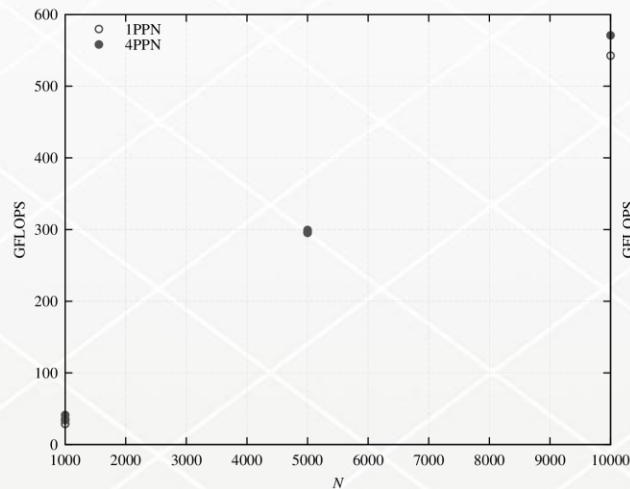
固有値問題 (EigenExa (v2.7, 2021/04/01))

- 参考

- <https://www.r-ccs.riken.jp/labs/lpnctr/projects/eigenexa/>

- https://www.hpci-office.jp/pages/e_meeting_A64FX_210317/#topic-1

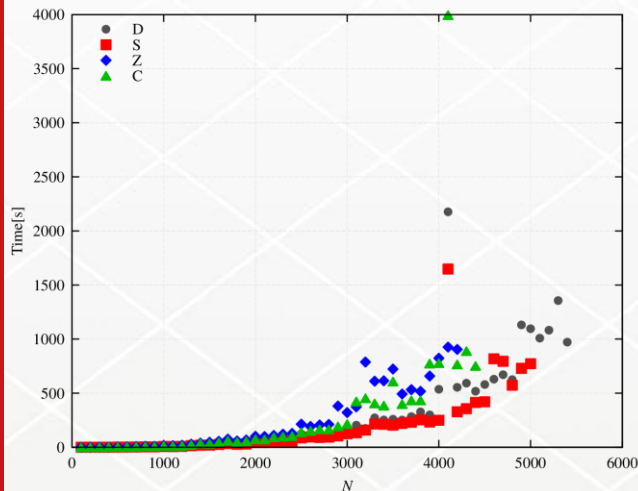
- 1PPNと4PPNで若干性能差あり



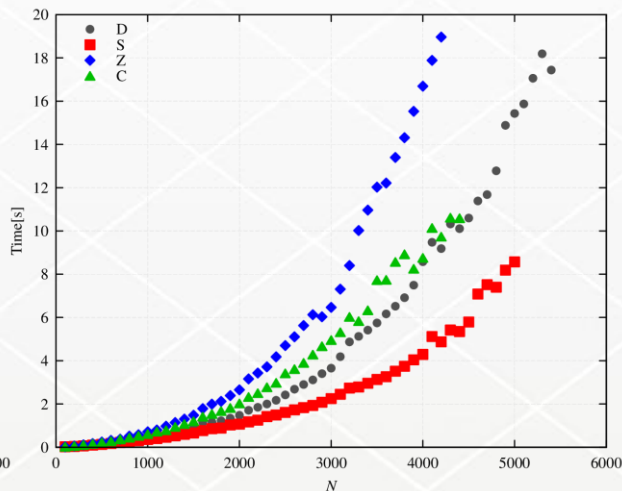
特異値問題

- **GESVD** : GESDDと比較して非常に遅い。なぜか $N=4100$ が特に遅い。
- **GESDD** (分割統治法版) を使うと良い
- 特異値、特異ベクトルの精度は見ていない

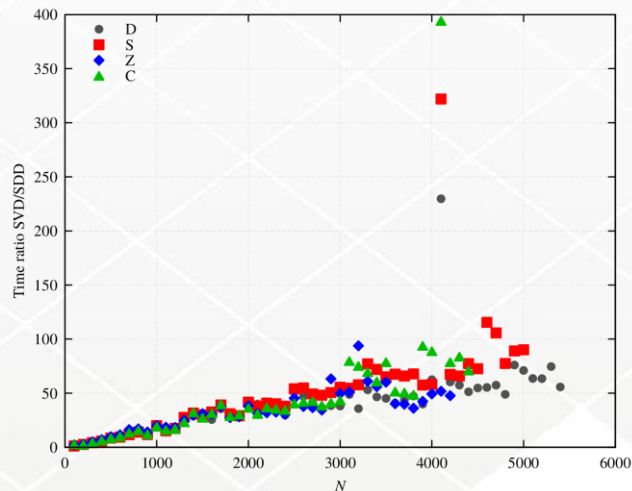
GESVD



GESDD



比



まとめ

- スーパーコンピュータ「富岳」を紹介した
- 富岳における密行列計算の性能を紹介した
 - GEMM : 想定通りの性能
 - GEMV : 性能は悪い、バラツキ、スレッドインバランスがある。要詳細調査
 - 逆行列 : ある行列サイズまで性能向上し、それより大きいサイズでは性能が下がることもある
 - EigenExa : 最大約500 GFLOPS/node、1PPNと4PPNで性能差あり
 - SVD : 分割統治法を使うと良い