

SX-Aurora TSUBASAの科学技術計算ライブラリ Numeric Library Collectionのご紹介

2019年12月12日

日本電気株式会社
緒方 隆盛



Orchestrating a brighter world

NEC brings together and integrates technology and expertise to create the ICT-enabled society of tomorrow.

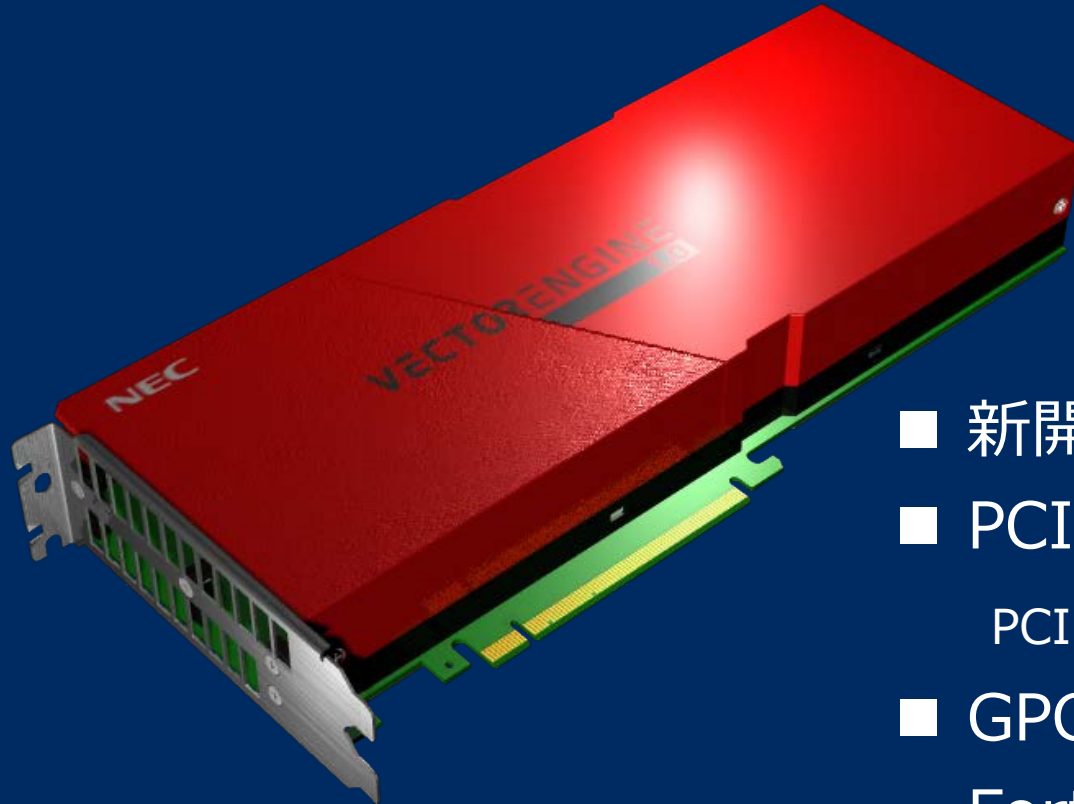
We collaborate closely with partners and customers around the world, orchestrating each project to ensure all its parts are fine-tuned to local needs.

Every day, our innovative solutions for society contribute to greater safety, security, efficiency and equality, and enable people to live brighter lives.

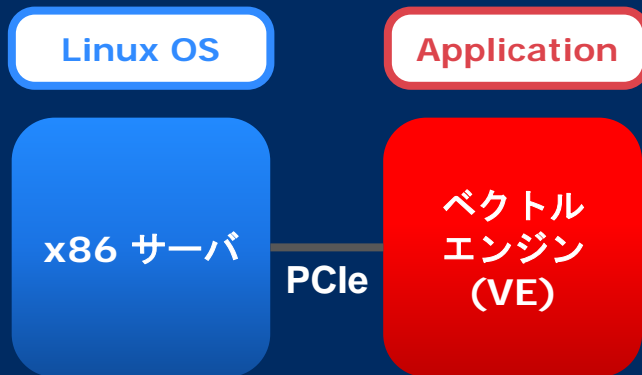
目次

1. SX-Aurora TSUBASAの概要
2. Numeric Library Collectionのご紹介
 - NLC の特長
 - HeteroSolver
 - Stencil Code Accelerator
 - SBLAS
 - ロードマップ
3. まとめ

PCIeカード型ベクトルエンジン (VectorEngine)



- 新開発ベクトルプロセッサ
- PCIe規格準拠
 - PCI Express Gen3. x16
- GPGPUと異なる実行モデル、
Fortran/C/C++の標準環境
- 演算性能：
 - 2.45TF(倍精度), 4.91TF(単精度)
- メモリ帯域 1.22TB/s
- メモリ容量 48GB



SX-Aurora TSUBASA

ベクトルエンジンの超高性能を、デスクトップタワーから、大規模データセンター対応モデルまで幅広くご提供し、利用・適用範囲を大幅に拡大

データセンターモデル

- データセンター・計算センターでの巨大処理
- 例：大規模AI・ビッグデータ、大規模シミュレーションなど
- 高性能・高スケーラビリティ・低導入/低運用コスト

オンサイトモデル

- 製造業などのシミュレーション、AI・ビッグデータ利用
- 例：大規模需要予測、製造シミュレーションなど

エッジモデル

- AI・ビッグデータのシステム組込用途
- 例：店舗毎の需要予測、医療画像等
- プログラム開発者向け

A500シリーズ

64VE搭載

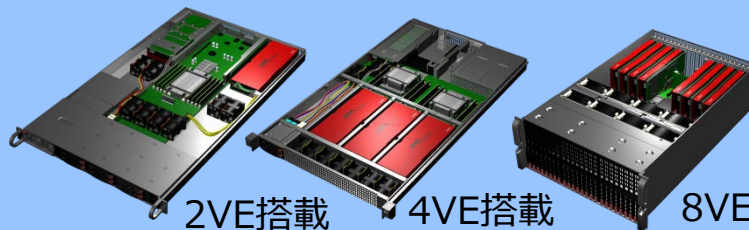


A300シリーズ

2VE搭載

4VE搭載

8VE搭載



A100シリーズ

1VE搭載



Numeric Library Collectionの特長

Numeric Library Collection(NLC)は科学技術計算で頻出する機能をベクトルエンジン向けに最適化した数学ライブラリのコレクションです。

特長

- ベクトルエンジン向けに高度に最適化
- 幅広い機能を網羅
 - 線形代数、フーリエ変換、疑似乱数生成、統計機能、...
- デファクトスタンダードのライブラリを提供
 - BLAS、LAPACK、ScaLAPACK
- オンラインマニュアルを提供

NLCに含まれるライブラリ

- ASL
 - BLAS / CBLAS
 - LAPACK
 - ScaLAPACK
 - HeteroSolver
 - Stencil Code Accelerator
 - SBLAS
- } 新機能追加

他社ライブラリ製品との比較

NLCは他社ライブラリ製品より豊富な機能を提供
 今後はディープラーニング向けの機能を拡充予定

		NLC	MKL	CUDA
線形代数	密行列計算 基本演算、連立一次方程式、固有値方程式など	✓	✓	✓
	疎行列計算 基本演算、連立一次方程式、固有値方程式など	✓	✓	✓
変換	フーリエ変換	✓	✓	✓
	Real-to-Real (DCT, etc.)	✓	✓	
	ラプラス、ウェーブレット変換	✓		
統計	疑似乱数生成	✓	✓ w/o MPI	✓ w/o MPI
	多変量解析、回帰分析など	✓		
その他	ソート	✓		
	特殊関数	✓		
	微分・積分など	✓		
	ステンシル計算	✓		
	ディープラーニング		✓	✓

疎行列連立一次方程式直接法ソルバ ベクトルエンジン(VE)とベクトルホスト(VH)が連携して求解

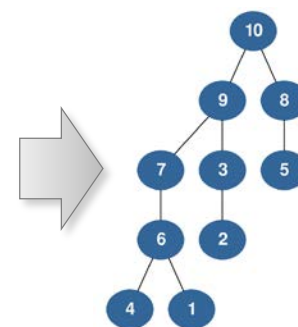
疎行列直接法解法の処理

- 前処理
 - 疎行列Aを分析
 - ← ベクトル性能を出しにくい
- 数値分解処理
 - LU分解、LDL^t分解
- 求解処理
 - 解xを算出

$$Ax = b$$

	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
1	x					x	x			
2		x	x					x		
3			x	x						x
4				x		x				x
5					x			x		
6	x			x		x			x	x
7	x						x			
8		x			x			x		x
9						x			x	
10			x	x		x		x		x

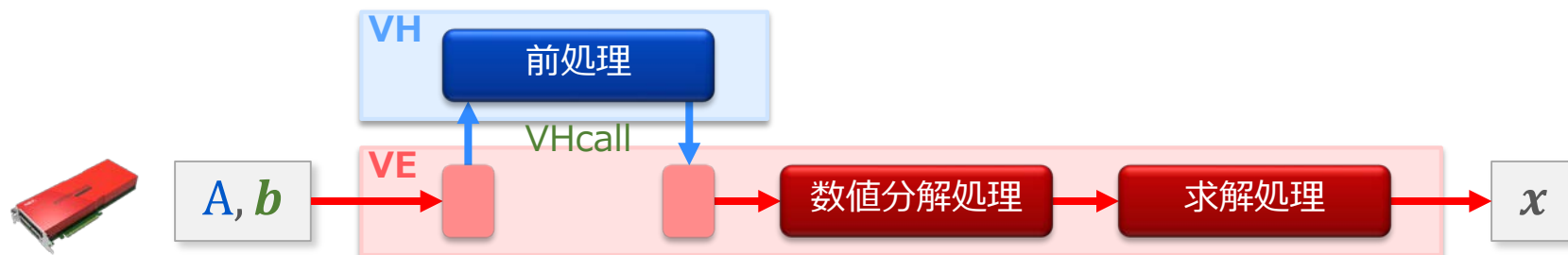
行列 A



消去木

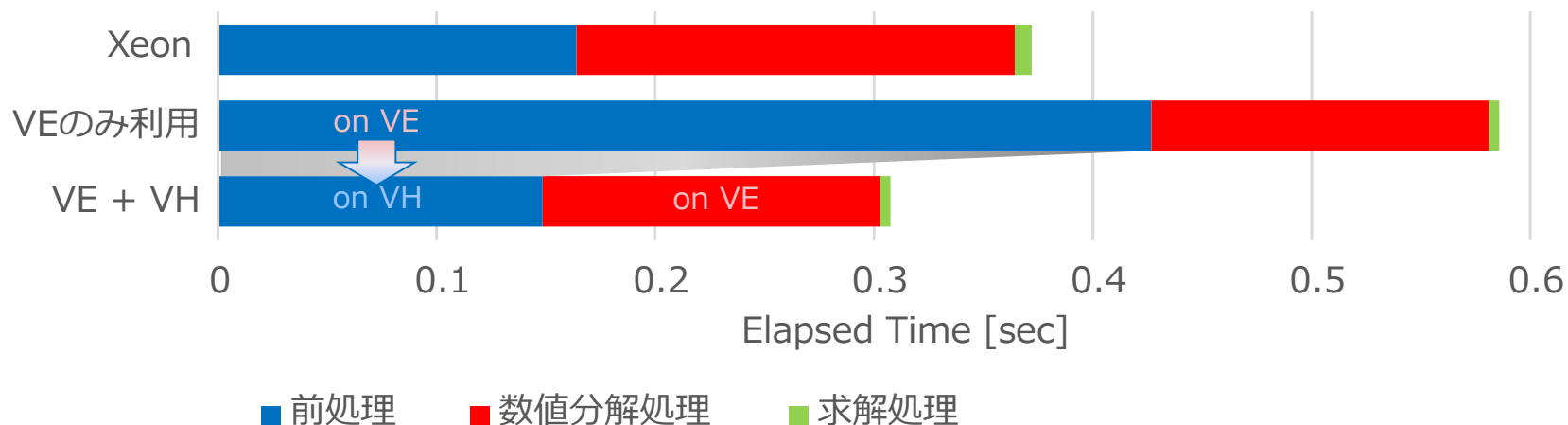
VE-VH連携を使った最適化

- ライブラリ内部で前処理に必要なデータをベクトルホスト(VH)に転送して実行



ベクトル化に不向きな前処理をベクトルホスト(VH)で実行

VE-VH連携による性能改善の効果

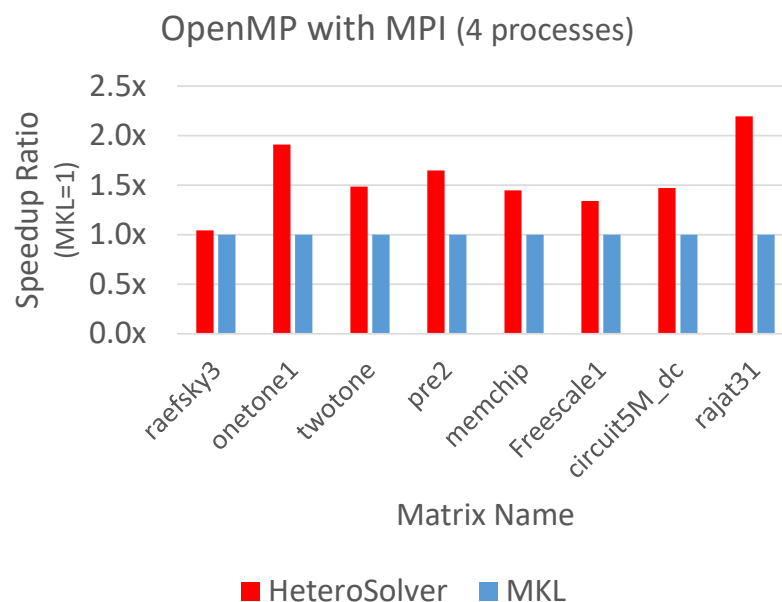
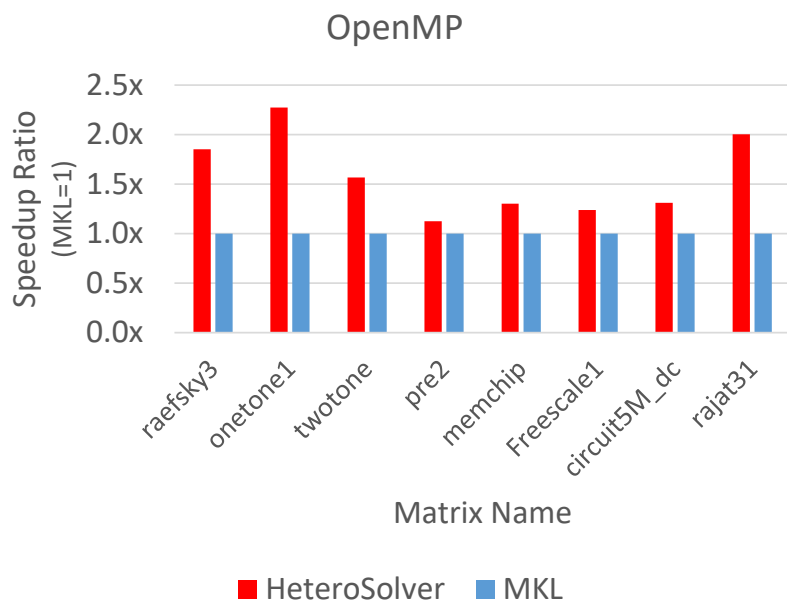


	使用したライブラリ	実行マシン
Xeon	Intel MKL PARDISO	Xeon Gold 6148 x 2 sockets (Skylake 2.4 GHz, 40 cores)
VEのみ利用	HeteroSolver 試作版	SX-Aurora TSUBASA (1.4 GHz, 8 Cores)
VE + VH	HeteroSolver	

使用した行列: <https://www.cise.ufl.edu/research/sparse/matrices/Simon/raefsky3.html>

HeteroSolverの利用によりSkylake(40コア)より高速に求解が可能に

ベンチマーク

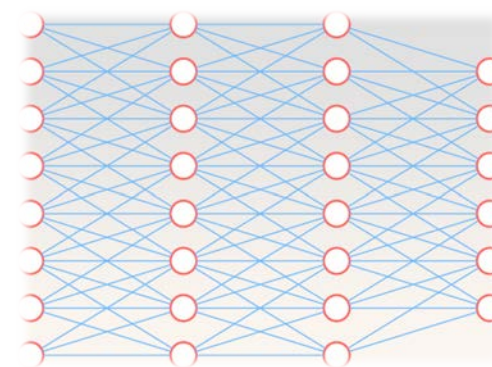
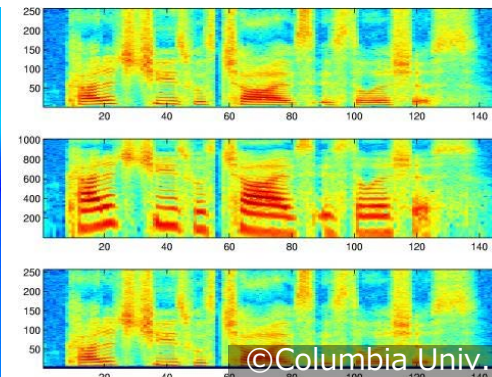
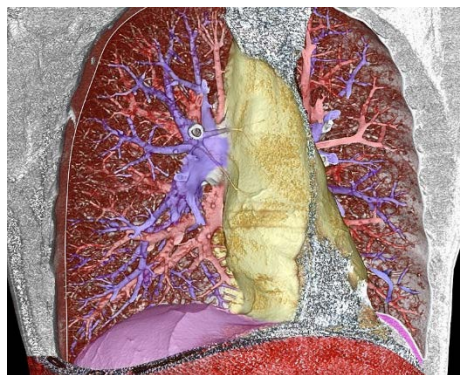
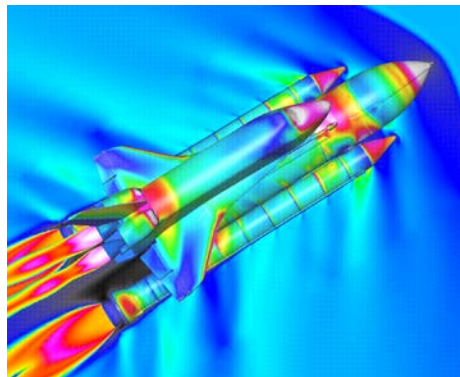


	実行マシン
HeteroSolver	SX-Aurora TSUBASA (1.4 GHz, 8 Cores)
MKL	Xeon Gold 6148 x 2 sockets (Skylake 2.4 GHz, 40 cores)

使用した行列: SuiteSparse Matrix Collection (<https://sparse.tamu.edu/>)からダウンロード

ステンシル計算の応用分野

- 科学技術シミュレーション
 - 流体解析
 - 熱伝導解析
 - 電磁場解析
 - など
- 信号処理
 - 音響、ソナー
 - レーダ、無線通信
 - など
- 画像 / 3Dデータ処理
 - 画像編集・加工
 - データ圧縮
 - 認識
 - 医療診断 (生検, CT, MRI, ...)
 - など
- 機械学習
 - ディープラーニング (CNN)



■ ステンシル計算の例

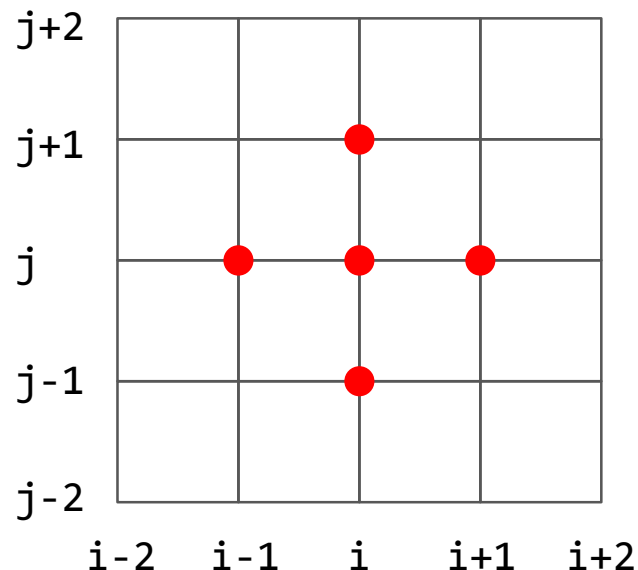
```
real :: a(0:ni+1,0:nj+1)
real :: b(1:ni,1:nj)
      :
do itr=1,maxitr
      :
do j=1,nj
do i=1,ni
    b(i,j)=0.25*( &
        a(i ,j-1) &
        +a(i-1,j ) &
        +a(i+1,j ) &
        +a(i ,j+1))
end do
end do
      :
a(:,:)=b(:,:)
end do
```

ラプラス方程式

$$\frac{\partial}{\partial x^2} A + \frac{\partial}{\partial y^2} A = 0$$

↓ 離散化
有限差分

$$b_{i,j} = \frac{1}{4} (a_{i,j-1} + a_{i-1,j} + a_{i+1,j} + a_{i,j+1})$$



■ ステンシル計算の例 – SCA利用

```
real :: a(0:ni+1,0:nj+1)
real :: b(1:ni,1:nj)
real,parameter :: c(5)=(/ &
    0.25,0.25,0.0,0.25,0.25/)
:
do itr=1,maxitr
:
    call sca_compute_with_1x1ya_s( &
        ni,nj,1, &
        ni+2,nj+2,a(1,1), &
        ni,nj,b(1,1),c,0.0)
:
    a(:,:)=b(:,:)
end do
```

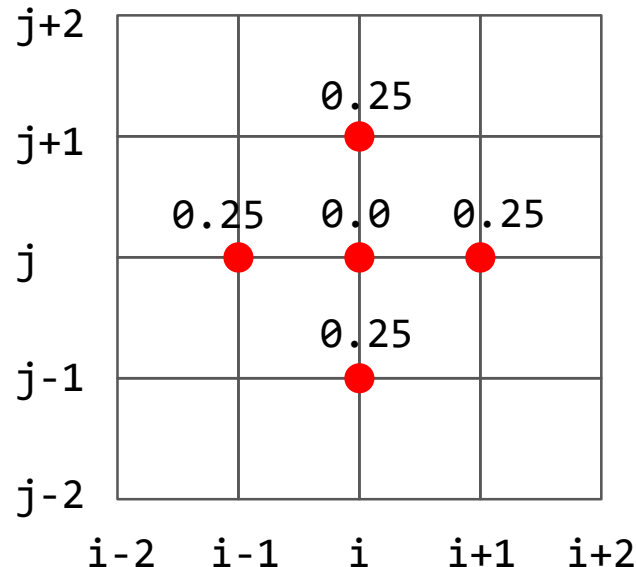


ラプラス方程式

$$\frac{\partial}{\partial x^2} A + \frac{\partial}{\partial y^2} A = 0$$

↓ 離散化
有限差分

$$b_{i,j} = \frac{1}{4} (a_{i,j-1} + a_{i-1,j} + a_{i+1,j} + a_{i,j+1})$$



Stencil Code Accelerator: ステンシルの形状

56ケースものステンシル形状に対応した機能を提供

ステンシルの形状

- 対応しているステンシルの形状

- {X,Y,Z}-方向



- {XY,XZ,YZ}-平面



- {XY,XZ,YZ}-軸方向



- {XY,XZ,YZ}-対角方向



- XYZ-立体



- XYZ-軸方向



- 各形状について以下のサイズに対応

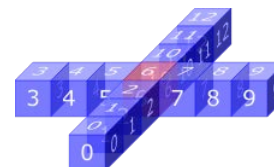
- 1



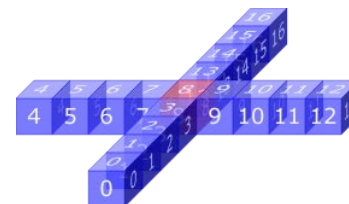
- 2



- 3



- 4



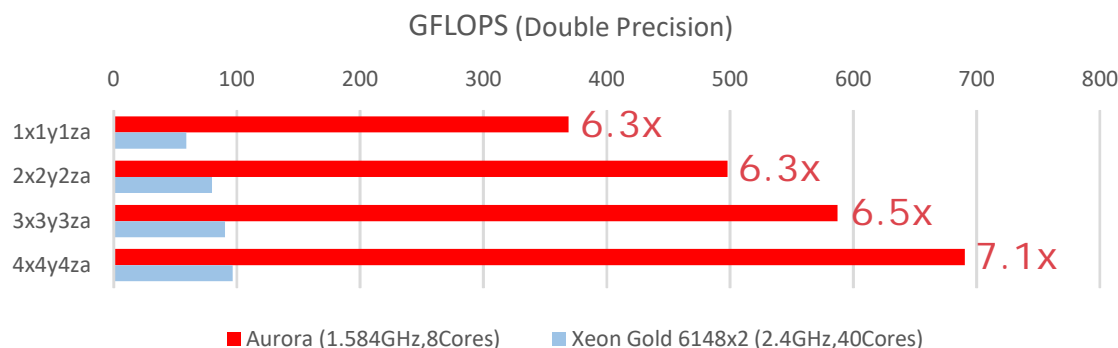
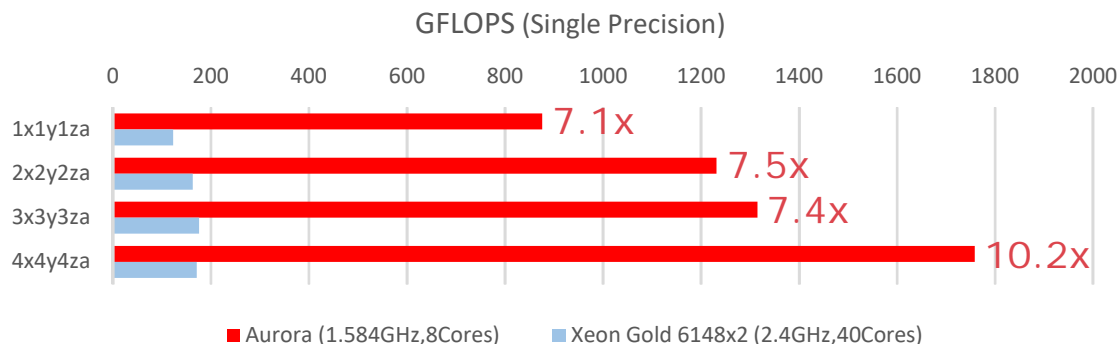
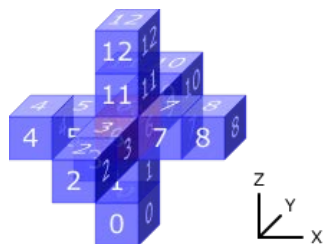
Stencil Code Acceleratorの性能

SCAの利用によりXeon Skylake(40コア)より6.3~10.2倍も高速

ベンチマーク結果

- ステンシルの形状: XYZ-軸方向, サイズ 1~4 ← 科学技術計算での頻出ケース
- データサイズ: 1024 x 1024 x 1024
- プロセッサ:

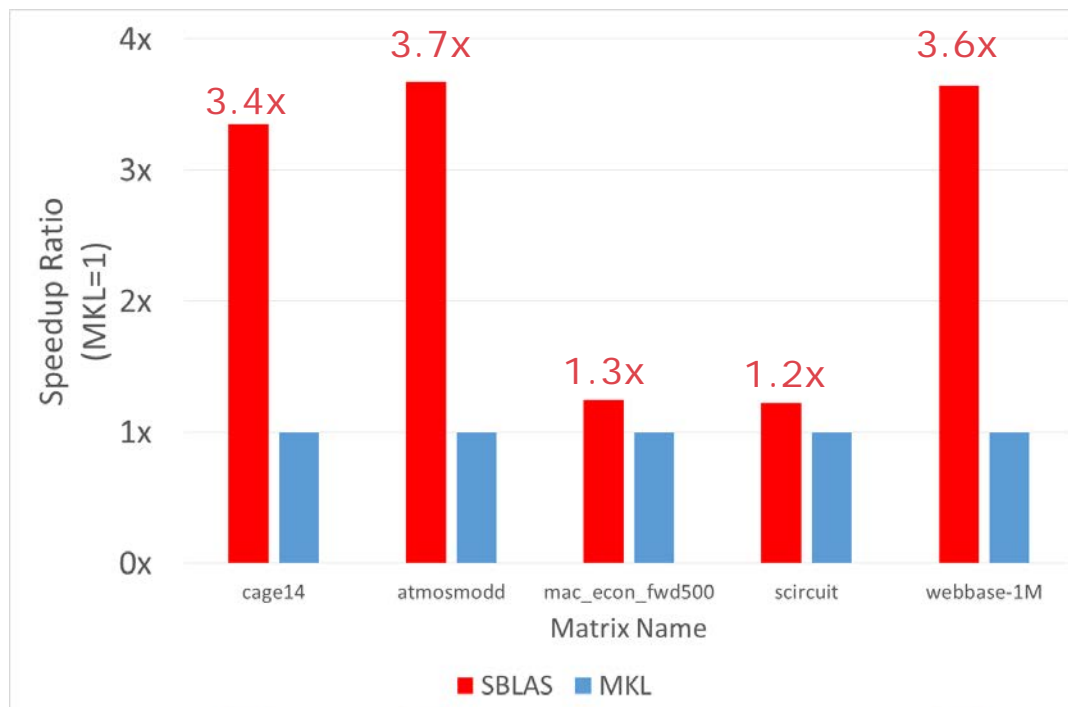
- Aurora 1.584 GHz, 8コア
- Xeon Gold 6148 x 2 ソケット (Skylake 2.4 GHz, 40コア)



◆ 上記性能は、ベクトルレジスタをキャッシュとして利用しメモリ負荷を削減することにより達成

疎行列ベクトル積の機能を新規に追加、MKLより1.2倍～3.7倍高速

ベンチマーク結果



実行マシン	
SBLAS	SX-Aurora TSUBASA (1.4 GHz, 8 Cores)
MKL	Xeon Gold 6132 x 2 sockets (Skylake 2.6 GHz, 56 cores)

使用した行列: SuiteSparse Matrix Collection (<https://sparse.tamu.edu/>)

より高性能で、汎用的で、使いやすくするために機能強化を継続



2020年2月

ASL:

高度にベクトル化・共有メモリ並列化したソート機能を追加

FFTW3インタフェース:

Guruインタフェース対応

2020年7月頃

スクリプト言語対応【プレビュー公開】:

PythonからNLCを利用する機能

計画中

AI向けライブラリ:

ディープラーニングまたは統計的機械学習向けの機能強化

計画中

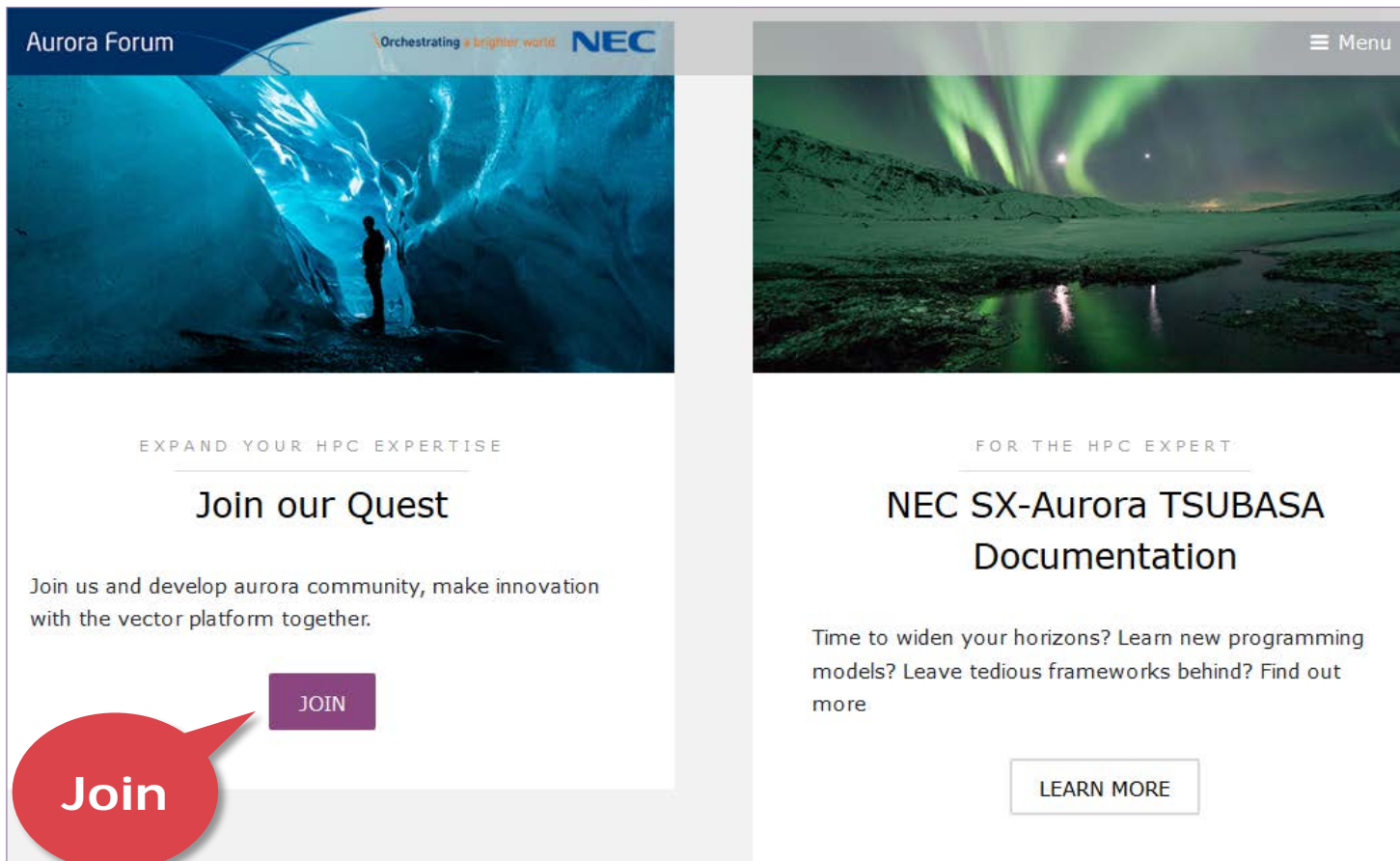
ASL:

線形代数機能の使いやすさを改善するためのAPI拡張

Aurora Forum Website

製品マニュアル・技術情報はAurora Forum Websiteにて公開中

- URL - <https://www.hpc.nec/>



Aurora Forum

Orchestrating a brighter world

NEC

Menu

EXPAND YOUR HPC EXPERTISE

Join our Quest

Join us and develop aurora community, make innovation with the vector platform together.

JOIN


Join

FOR THE HPC EXPERT

NEC SX-Aurora TSUBASA Documentation

Time to widen your horizons? Learn new programming models? Leave tedious frameworks behind? Find out more.

LEARN MORE



まとめ

- NLCは、他社ライブラリ製品より幅広い機能を提供しています。
- HeteroSolverは、VE-VH連携を使って性能改善しています。
- ステンシル計算は、SCAの利用により劇的に計算時間を短縮できます。
- 製品マニュアル・技術情報は、Aurora Forum Webサイトに公開しています。



 **Orchestrating** a brighter world

NEC