PCクラスタワークショップin京都2010

NECのPCクラスタ向け数値計算ライブラリ

2010年2月19日
日本電気株式会社

NECが提供するソリューション

NECのPCクラスタ向け数値計算ライブラリ

NumericFactory

数値計算ライブラリ集 (NEC製ライブラリ + オープンソースライブラリ)

2009年10月 R1.0.0 版 無償配布開始
2010年 8月 有償版リリース予定

ASLQUAD

NEC製 高速四倍精度演算ライブラリ
無償お試しインストール実施中

NumericFactory 数値計算ライブラリ集

NumericFactory 数値計算ライブラリ集

商用数値計算ライブラリ と オープンソースの数値計算ライブラリ

どの数値計算ライブラリが適しているかは、お客様ごとに異なる

OSSを積極的に取り入れた商用数値計算ライブラリを提供

NumericFactory 数値計算ライブラリ集

特徴1 : 著名な数値計算オープンソースライブラリを網羅

無償版
(R1.0.0)

ライブラリ名	機能概要	分散メモリ並列 対応ライブラリ
BLAS	ベクトル、行列の基本演算	
ParBLAS (NEC製ライブラリ)	ベクトル、行列の基本演算 (BLASの共有メモリ並列版)	
CBLAS	BLASのC言語インタフェース	
LAPACK	密行列連立1次ソルバ、固有値ソルバ、特異値分解等	
ARPACK	大規模固有値ソルバ	
METIS	行列、グラフの並べ替え、分割ライブラリ	
ASLSTAT (NEC製ライブラリ)	乱数、分布乱数、基礎統計量、推定・検定、分散分析・実験計画、多変量解析、フーリエ解析、回帰分析、ソート、順位付けなど	
SuperLU	疎行列用 直接法連立1次ソルバ (逐次版のみ提供)	
BLACS	通信インタフェースライブラリ	○
ScaLAPACK	密行列連立1次ソルバ、固有値ソルバ、特異値分解等	○
Lis	疎行列用 反復法連立1次ソルバ、固有値ソルバ	○
MUMPS	疎行列用 直接法連立1次ソルバ (MPI並列版のみ提供)	○
OpenMPI	MPIライブラリ	○

NumericFactory 数値計算ライブラリ集

特徴2 : 数値計算プログラムの開発環境構築が簡単

無償版
(R1.0.0)

Numeric Factoryでは...

- MUMPS
- Metis
- ScaLAPACK
- BLACS
- LAPACK
- BLAS (最適化済)

特徴3 : 高コストな機能について高速化

無償版
(R1.0.0)

BLAS LEVEL3 : DGEMMの性能

MKL、GotoBLASのDGEMMと比較して遜色ない性能

NumericFactory 数値計算ライブラリ集

無償版(R1.0.0 版)の動作環境:

無償版
(R1.0.0)

Intel Xeon (X5500番台) サーバで利用可能

ハードウェア	NEC Express5800シリーズ NEC LXシリーズ
OS	Red Hat Enterprise Linux Server release 5.3以降
コンパイラ	gcc 4.3.2 gfortran 4.3.2 g++ 4.3.2

gccで利用可

有償版NumericFactory : 2010年8月リリース予定

無償版(1.0.0 版) との機能の違い

無償版の機能に、以下のライブラリを追加予定

- **ASL** (NEC製科学技術計算ライブラリ)

機能 : FFT、乱数、疎行列用連立一次方程式(直接法/反復法)、特殊関数、スプライン関数、
微分方程式、数値微積分、方程式の根、線形計画法、BLAS, LAPACK相当機能 etc...

- **FFTW** (高速フーリエ変換ライブラリ)

疎行列用連立一次方程式(反復法)ライブラリや多倍長演算のライブラリの追加も検討中

動作環境

- 対応コンパイラ : Intel Compiler 11.1
- 対応プラットフォーム : NEC Expressシリーズ (Intel Xeon X5500番台)
NEC LXシリーズ

ASLQUAD[®] 高速四倍精度演算ライブラリ
ASL QUADruple Precision Arithmetic Library

ASLQUAD[®] 高速四倍精度演算ライブラリ

ASL QUADruple Precision Arithmetic Library

ASLQUAD : 高速な四倍精度演算を提供する数値計算ライブラリ

数値計算プログラムの開発で厄介な数値誤差を軽減

ASLQUAD[®] 高速四倍精度演算ライブラリ

ASL QUADruple Precision Arithmetic Library

四倍精度基本演算

四則演算 +, -, *, /, **
比較演算 <, >, <=, >=, ==, /=
複素数にも対応

四倍精度数学関数

最大値、最小値、総和、内積、平方根、立方根、逆平方根
三角関数、指数関数、対数関数、双曲線関数
逆三角関数、逆双曲線関数、型変換など
複素数にも対応

四倍精度サブルーチン

行列積 $C = C \pm AB$
連立1次直接法方程式 $Ax = b$
標準固有値方程式 $Ax = \lambda x$
一般化固有値方程式 $Ax = Bx$
特殊関数 ベッセル関数、ガンマ関数、ログガンマ関数、
誤差関数、余誤差関数

無償お試しインストール実施中！
お客様のご要望に応じて、機能のカスタマイズも致します。

ASLQUAD[®] 高速四倍精度演算ライブラリ

ASL QUADruple Precision Arithmetic Library

ASLQUADの特徴

データ形式：double-double形式

使用言語

- Fortran90, C++から使用可能

性能チューニング

- 一部機能で、Intel Xeonプロセッサ向けにSSE命令を使ってアセンブラチューニング

使用例 : 行列積プログラム

Fortran90

```
PROGRAM SAMPLE_FORTRAN90
USE ASLQUAD           ! モジュール指定
TYPE(quad), dimension(256,256) :: A, B, C
~
A=1q0; B=2q0; C=3q0   ! 配列構文式
do K = 1, 256
  do J = 1, 256
    do I = 1, 256
      C(I, J) = C(I, J) + A(I, K) * B(K, J)
    enddo
  enddo
enddo
~
END
```

面倒な double-double 形式の演算に
煩わされることなく、高速な四倍精度演算が可能！

C++

```
#include aslquad.h      // ヘッダファイル指定
using namespace ASLQUAD;

int main (void){
  Quad a[256][256], b[256][256], c[256][256];
  ~
  for (int i = 0; i < 256; i++)
    for (int k = 0; k < 256; k++)
      a[i][k] = 1.0;           // 配列aの初期化

  for (int k = 0; k < 256; k++)
    for (int j = 0; j < 256; j++)
      b[k][j] = 2.0;         // 配列bの初期化

  for (int i = 0; i < 256; i++)
    for (int j = 0; j < 256; j++)
      c[i][j] = 3.0;         // 配列cの初期化

  for (int i = 0; i < 256; i++)
    for (int j = 0; j < 256; j++)
      for (int k = 0; k < 256; k++)
        c[i][j] = c[i][j] + a[i][k] * b[k][j];
  ~
}
```

まとめ

NECでは、数値計算ライブラリでPCクラス向けソリューションを提供しています。

NumericFactory 数値計算ライブラリ集

- R1.0.0 版 無償配布中

URL: <http://www.nec.co.jp/APSOFT/SX/nf/>

- 2010年8月 有償版リリース予定

ASLQUAD[®] 高速四倍精度演算ライブラリ ASL QUADruple Precision Arithmetic Library

- 無償お試しインストール実施中

お客様のご要望に応じて、機能のカスタマイズも致します。

(ご参考) NECの科学技術計算ソリューション

NECでは、様々な科学技術計算向けのソリューションを実施しています。

数値計算ソリューション

- 数値計算ライブラリ利用のコンサルティング
- 数値計算ライブラリの性能評価
- 高精度計算支援
- 製品提供 (NumericFactory, ASLQUAD)

可視化ソリューション

- リアルタイム可視化ソリューション
- 受託可視化サービス
- 可視化コンサルティング
- 製品提供 (RVSLIB)

プログラム高速化ソリューション

- プログラム分析
- プログラム高速化支援
- プログラム並列化 (SMP, MPI)

GPGPUソリューション

- プログラム分析
- GPGPU対応化サービス
- プログラム高速化支援
- 利用コンサル、講習会

数値解析ソリューション

- 気象 / 流体解析プログラム開発
- 計算化学プログラム開発
- 受託解析サービス
- プログラムの移植支援

お問い合わせ先：
support@asl.jp.nec.com

Empowered by Innovation

NEC