

行列-ベクトル積

東京大学情報基盤センター 准教授 埴 敏博

2016年11月1日(火)10:25-12:10

講義日程(工学部共通科目)

1. ~~9月27日(今日): ガイダンス~~
2. ~~10月4日~~
 - ~~並列数値処理の基本演算(座学)~~
3. ~~10月11日: スパコン利用開始~~
 - ~~ログイン作業、テストプログラム実行~~
4. ~~10月18日~~
 - ~~高性能プログラミング技法の基礎1
(階層メモリ、ループアンローリング)~~
5. ~~11月1日(8:30-10:15)~~
 - ~~高性能プログラミング技法の基礎2
(キャッシュブロック化)~~
6. 11月1日(10:25-12:10)
 - 行列-ベクトル積の並列化
7. 11月22日
 - べき乗法の並列化
8. 11月29日
 - 行列-行列積の並列化(1)
9. 12月6日
 - 行列-行列積の並列化(2)
10. 12月13日
 - LU分解法(1)
 - コンテスト課題発表
11. 12月20日
 - LU分解法(2)
12. 1月10日(★大演習室2)
 - LU分解法(3)
13. 1月13日(金曜、補講日)
 - 新しいスパコンの紹介・お話し、他

10/11はネットワーク障害のため演習ができなかったため
10/18の内容をほとんどやってしまった

講義の流れ

1. 行列-ベクトル積のサンプルプログラムの実行
2. 並列化の注意点
3. 並列化実習
4. レポート課題

サンプルプログラムの実行 (行列-ベクトル積)

はじめての基本演算

EMACSコマンドの再確認

- **C-** : Control キーを押しながら
- **M-** : Esc キーを押しながら
- **C-x C-s** : データセーブ
- **C-x C-c** : 終了
- **C-g** : わからなくなったとき
- **C-k** : 1行消去してバッファにコピー
(連続して入力すると複数行消去可)
- **C-y** : 上記のバッファをカーソル位置にコピー
- **C-s** : 文字列を検索し、その場所に移動。以降 **C-s** で次の候補に移動する。移動したい関数名を入れて利用する。
- **M-x goto-line** : 行きたい行に飛ぶ。入力後、行の番号を聞いてくる。

行列-ベクトル積のサンプルプログラムの注意点

- C言語／Fortran言語版のファイル名
Mat-vec-rb.tar
- ジョブスクリプトファイル**mat-vec.bash** 中のキュー名を**u-lecture** から
u-lecture5 (工学部共通科目)
に変更し、qsub してください。
 - **u-lecture** : 実習時間外のキュー
 - **u-lecture5**: 実習時間内のキュー

行列-ベクトル積のサンプルプログラムの実行(C言語)

- 以下のコマンドを実行する

```
$ cp /lustre/gt15/z30105/Mat-vec-rb.tar ./
$ tar xvf Mat-vec-rb.tar
$ cd Mat-vec
```
- 以下のどちらかを実行

```
$ cd C : C言語を使う人
$ cd F : Fortran言語を使う人
```
- 以下共通

```
$ make
$ qsub mat-vec.bash
```
- 実行が終了したら、以下を実行する

```
$ cat mat-vec.bash.oXXXXXX
```

実行結果(C言語)

- 以下のような結果が出ればOK。

N = 10000

Mat-Vec time = 0.212929 [sec.]

939.280184 [MFLOPS]

OK!

実行結果 (Fortran言語)

- 以下のような結果が出ればOK。

N = 10000

Mat-Vec time[sec.] = 0.220535993576050

MFLOPS = 906.881440312737

OK!

サンプルプログラムの説明(C言語)

- `#define N 10000`
数字を変更すると、**行列サイズが変更**できます
- `#define DEBUG 1`
「1」としてコンパイルすると、演算結果が正しいことがチェックできます。
- 再コンパイルは、以下のように入力します。
`% make clean`
`% make`

Fortran言語のサンプルプログラムの注意

- 行列サイズNNの宣言は、以下のファイルにあります。

`mat-vec.inc`

- 行列サイズ変数が、NNとなっています。

`integer NN`

`parameter (NN=10000)`

演習課題

- **MyMatVec**関数(手続き)の<中身>を並列化してください。
 - デバック時には、
 - **#define N 288**
にしてください。そうしないと、実行時間が大変かかってしまいます。
 - **#define DEBUG 1**
にして、結果を検証してください。

演習課題の注意

- データが各PEに完全に分散された状態から初めてください。
(**データ分散の処理は不要です**)
- 以下はデータの中身を気にする人に:
 - 結果を検証する場合、行列とベクトルの初期データはすべて1です。
 - 結果を検証しない場合には、行列とベクトルの初期データに、疑似乱数を使っています。
 - 疑似乱数は、乱数の種を固定しない限り各PEで同じ値になることは保証されません。
 - このサンプルプログラムでは、**srand()**関数で乱数の種を固定していますので全PEで同じ乱数系列が発生されます。
 - 逐次と同じデータの中身を並列版で保障する場合、自分の担当部分まで乱数が発生させて、不要な場所は発生した乱数を捨てる必要があります。

演習課題の注意

- 本実習では、MPI通信関数は不要です。
- このサンプルプログラムでは、
演算結果検証部分が並列化されていない
ため、MatVec関数のみを並列化しても、
検証部でエラーとなります。
 - 検証部分も、計算されたデータに各PEで対応する
ように、並列化してください。
 - 検証部分においても、行列-ベクトル積と同様の
ループとなります。

MPI並列化の大前提(再確認)

• SPMD

- 対象のメインプログラム(mat-vec.c)は、
 - **すべてのPEで、かつ、**
 - **同時に起動された状態**から処理が始まる。

• 分散メモリ型並列計算機

- 各PEは、完全に独立したメモリを持っている。**(共有メモリではない)**

本実習プログラムのTIPS

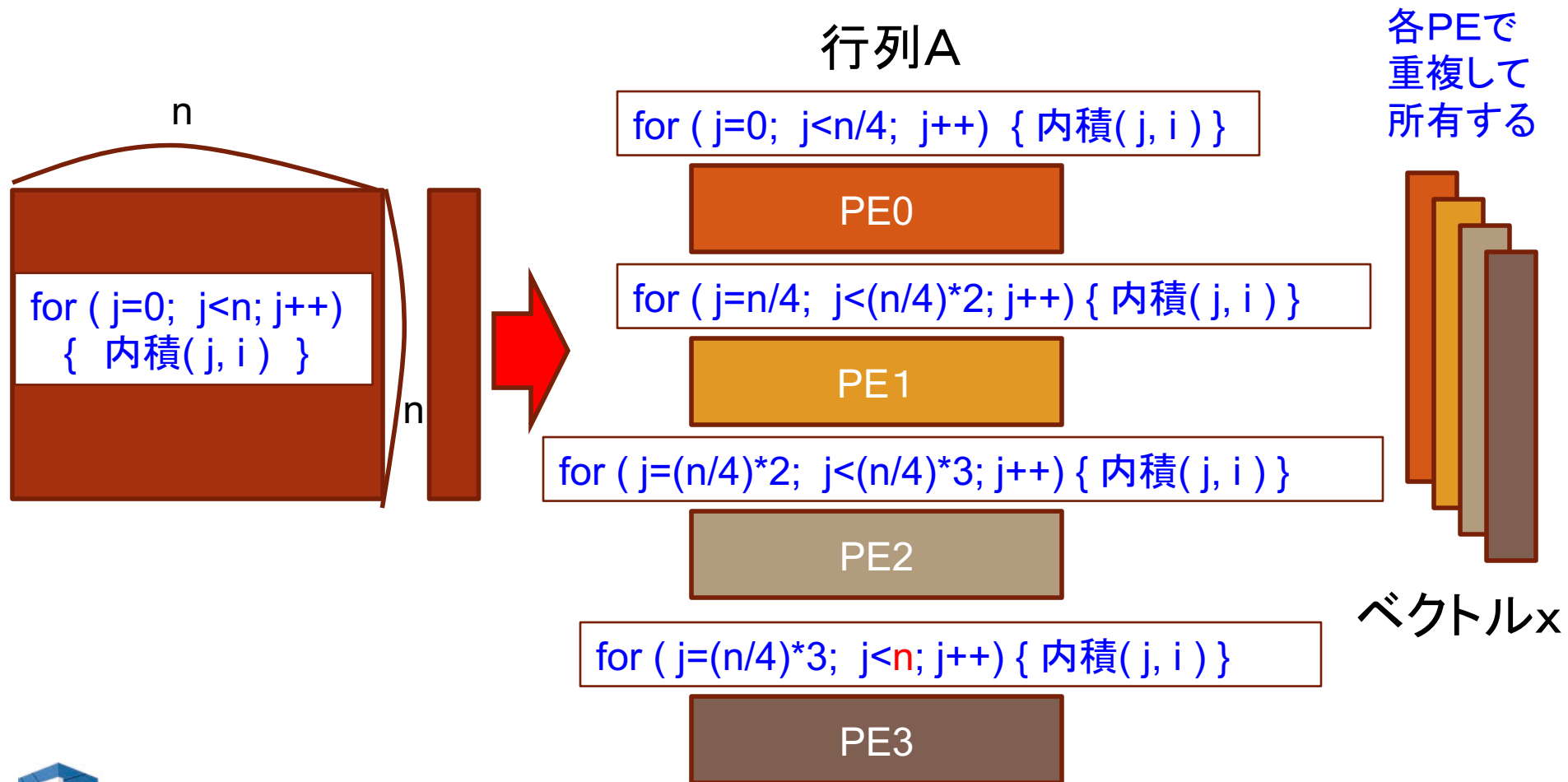
- **myid, numprocs は大域変数です**
 - myid (=自分のID)、および、numprocs(=世の中のPE台数)の変数は大域変数です。

MyMatVec関数内で、引数設定や宣言なしに、参照できます。

- **myid, numprocs の変数を使う必要があります**
 - MyMatVec関数を並列化するには、myid、および、numprocs変数を利用しないと、並列化できません。

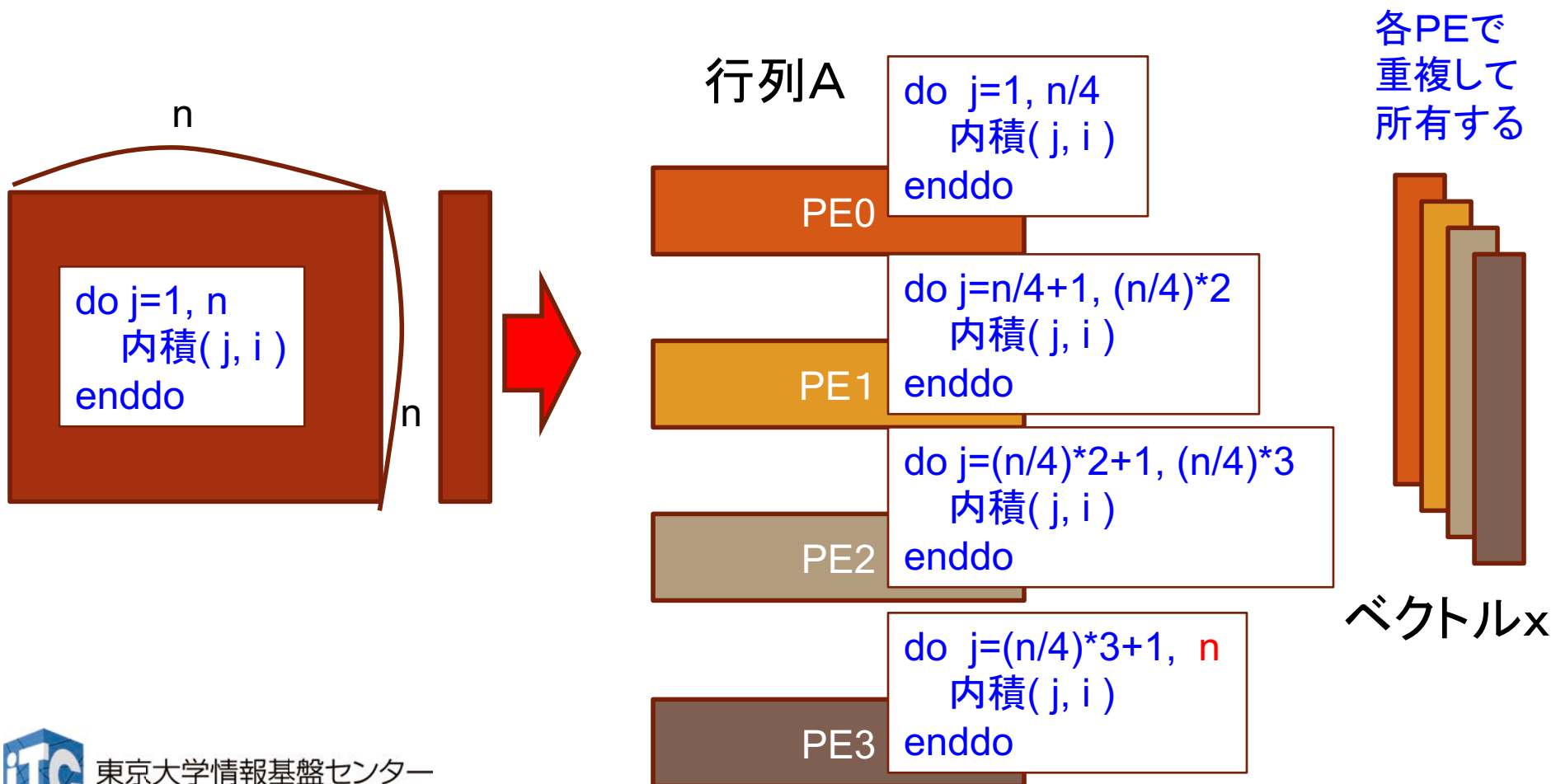
並列化の考え方(C言語)

• SIMDアルゴリズムの考え方(4PEの場合)



並列化の考え方 (Fortran言語)

• SIMDアルゴリズムの考え方 (4PEの場合)

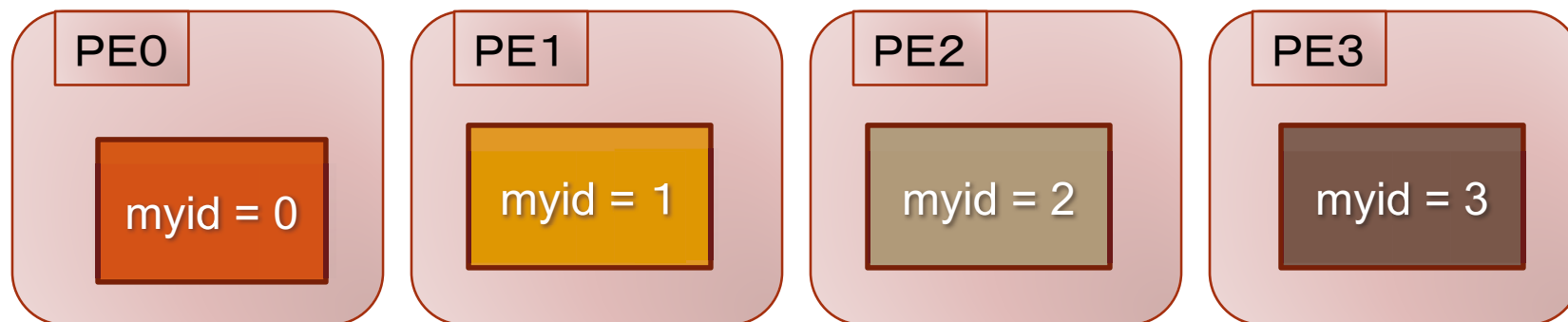


初心者が注意すること

- 各PEでは、**独立した配列が個別に確保**されます。



- `myid`変数は、`MPI_Comm_rank()`関数が呼ばれた段階で、**各PE固有の値**になっています。



並列化の方針(C言語)

1. 全PEで行列Aを $N \times N$ の大きさ、ベクトル x 、 y を N の大きさ、確保してよいとする。
2. 各PEは、担当の範囲のみ計算するように、ループの開始値と終了値を変更する。
 - ブロック分散方式では、以下になる。
(n が numprocs で割り切れる場合)

```
ib = n / numprocs;  
for ( j=myid*ib; j<(myid+1)*ib; j++) { ... }
```

3. (2の並列化が完全に終了したら)各PEで担当のデータ部分しか行列を確保しないように変更する。
 - 上記のループは、以下のようになる。
for (j=0; j<ib; j++) { ... }

並列化の方針 (Fortran言語)

1. 全PEで行列Aを $N \times N$ の大きさ、ベクトル x 、 y を N の大きさ、確保してよいとする。
2. 各PEは、担当の範囲のみ計算するように、ループの開始値と終了値を変更する。
 - ブロック分散方式では、以下になる。
(n が numprocs で割り切れる場合)

```
ib = n / numprocs
```

```
do j=myid*ib+1, (myid+1)*ib .... enddo
```

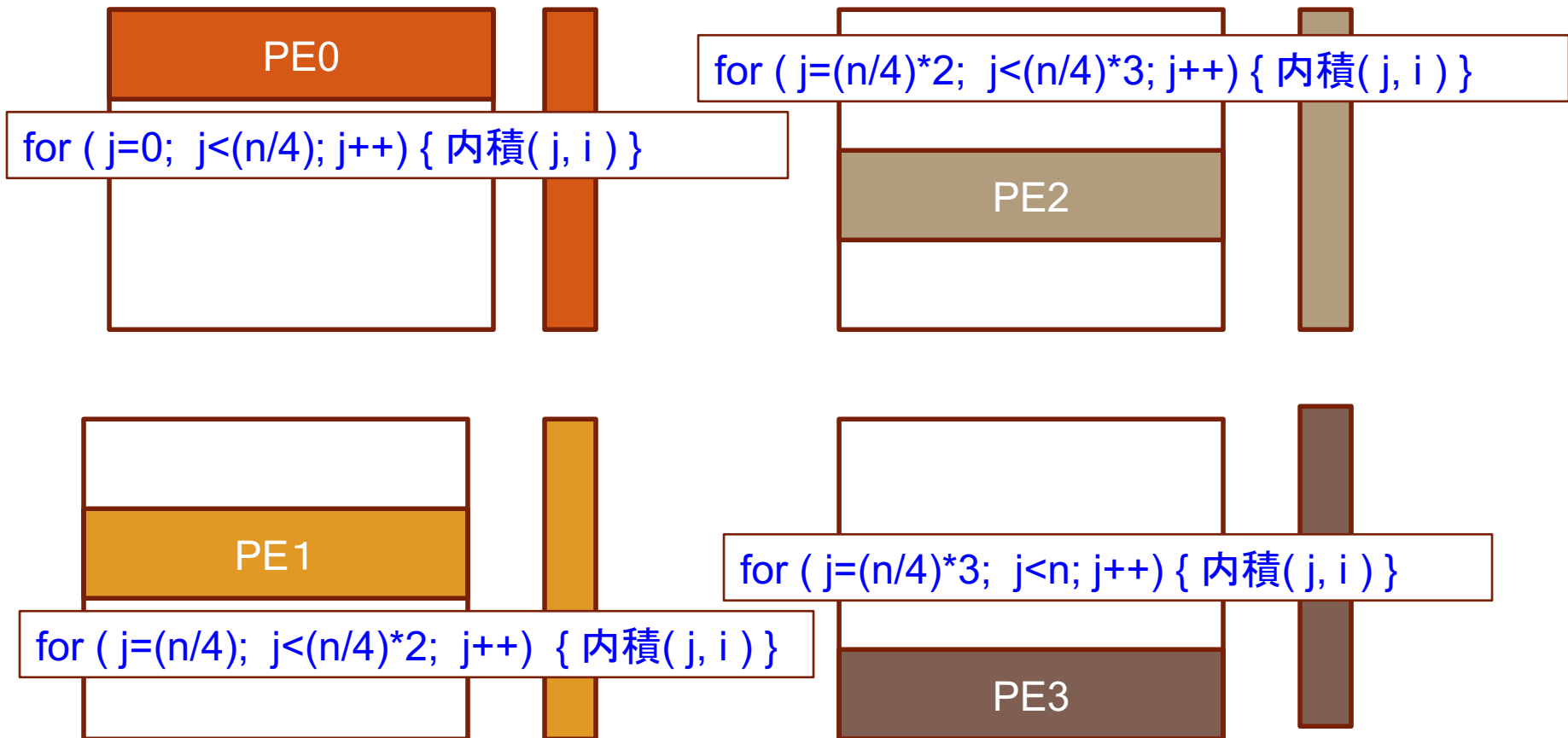
3. (2の並列化が完全に終了したら)各PEで担当のデータ部分しか行列を確保しないように変更する。
 - 上記のループは、以下のようになる。

```
do j=1, ib .... enddo
```

並列化の方針(行列-ベクトル積)

(C言語)

- 全PEで $N \times N$ 行列を持つ場合

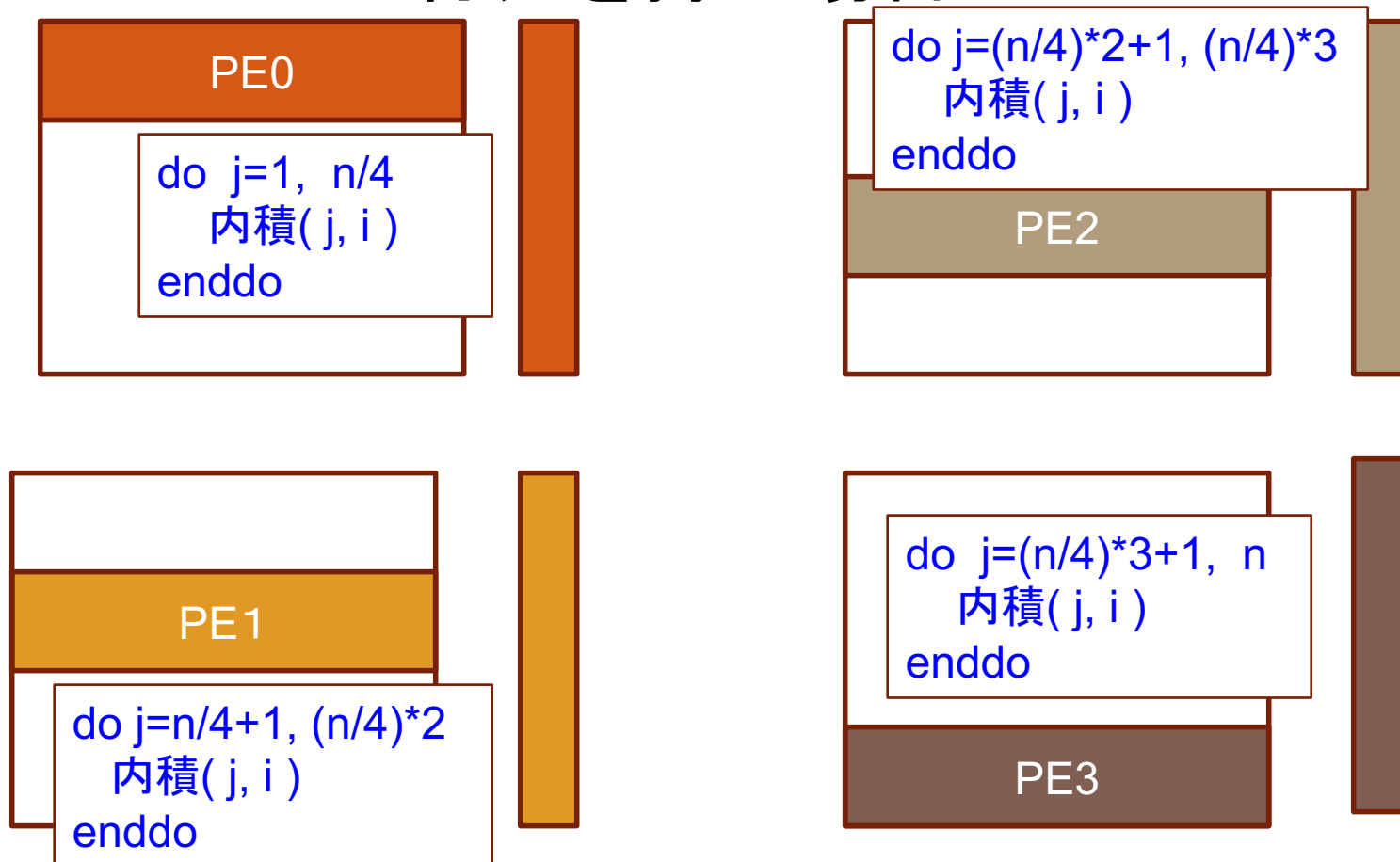


※各PEで使われない領域が出るが、担当範囲指定がしやすいので実装がしやすい。

並列化の方針(行列-ベクトル積)

(Fortran 言語)

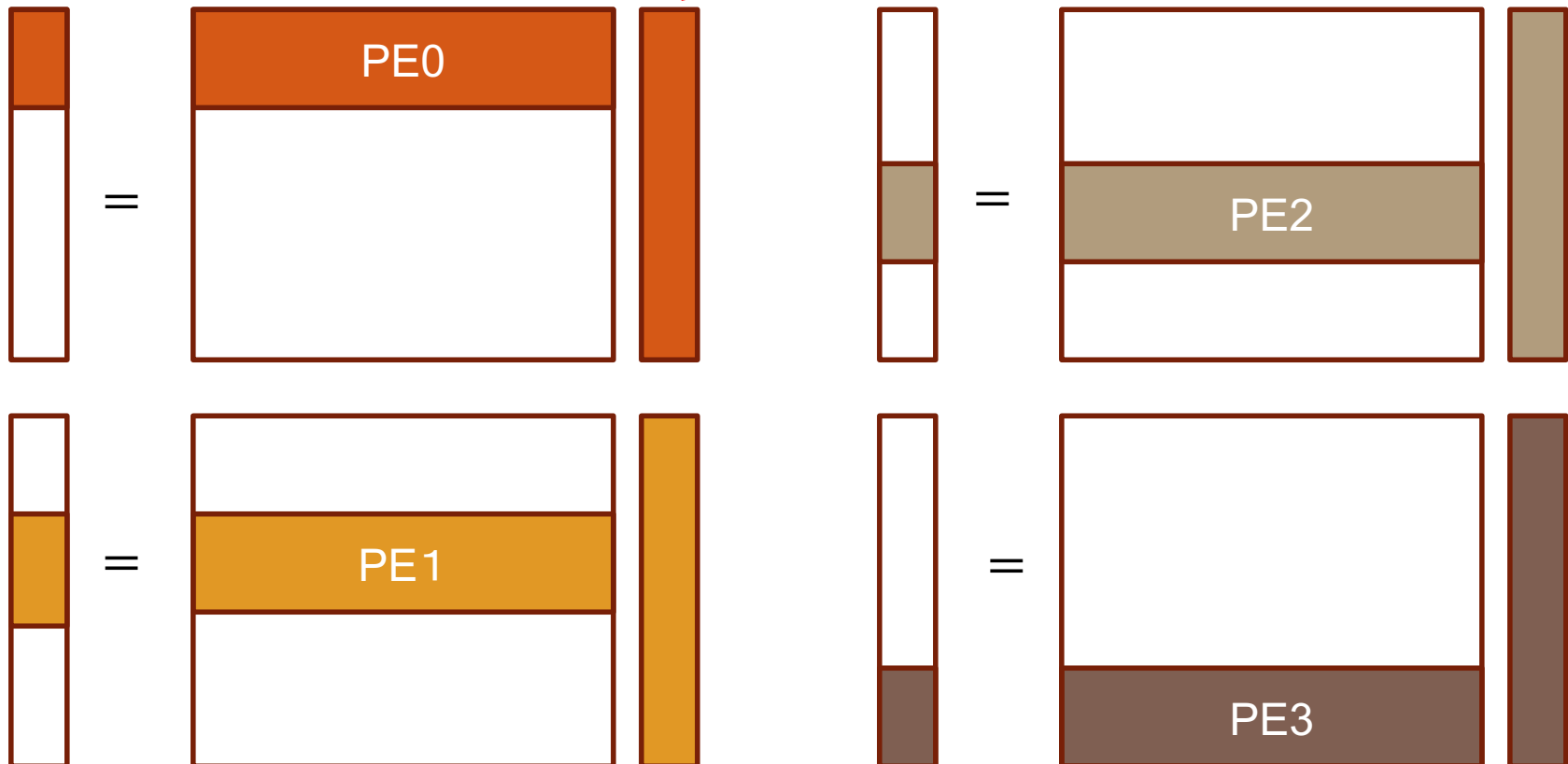
• 全PEで $N \times N$ 行列を持つ場合



※各PEで使われない領域が出るが、担当範囲指定がしやすいので実装がしやすい。

並列化の方針(行列-ベクトル積)

- この方針では、 $y = Ax$ のベクトル y は、以下のように一部分しか計算されないことに注意！



並列化時の注意

- **演習環境は、288PEです。**
- **動作確認には、サンプルプログラムにあるデバック機能を利用しましょう。**
 - **並列化は、<できた>と思ってもバグっていることが多い！**
 - **このサンプルでは、PE0がベクトルyの要素すべてを所有することが前提となっています。**

出力結果を考慮して検証部分も並列化してください。

- Nを小さくして、`printf`で結果(ベクトルy)を目視することも、デバックになります。しかし、Nを目視できないほど大きくする場合にバグることがあります。目視のみデバックは、経験上お勧めしません。
- **数学ライブラリ開発では、できるだけ**数学(線形代数)の知識を利用した方法で、理論的な解と結果を検証することをお勧めします。****

発展実装 (NがPE数で割切れない時)

- NがPE数の288で割り切れない場合
 - 配列確保: $A[N/288 + (N - (N/288) * 288)]$
 - ループ終了値: PE287のみ終了値がnとなるように実装

```
ib = n / numprocs;
if ( myid == (numprocs - 1) ) {
    i_end = n;
} else {
    i_end = (myid+1)*ib;
}
for ( i=myid*ib; i<i_end; i++) { ... }
```

発展実装(担当データしか持たない時)

- 担当データ分しか所有しない場合
 - 各PEが、ローカルインデックス(0~ $n/288$ 、もしくは0 ~ ($n/288 + (N - (N/288) * 288)$))のほかに、各PEが所有するデータのグローバルインデックス(0~ n)を知る必要がある。
 - ベクトル x データを集めた後、ベクトル x データにアクセスする際
 - A、 y : ローカルインデックスでアクセス
 - x : グローバルインデックスでアクセス
 - ブロック分散なら簡単。
 - サイクリック分散だと、ちょっと工夫がいる。
 - モジュロ関数($a\%b$)を利用する。

レポート課題

1. [L10] 行列-ベクトル積において、列方式、および行方式の性能を比較し、考察せよ。なお、並列化する必要はない。
2. [L10] サンプルプログラムを並列化せよ。このとき、行列A およびベクトルx、yのデータは、全PEで $N \times N$ のサイズを確保してよい。
3. [L15] サンプルプログラムを並列化せよ。このとき、行列A およびベクトルxは、初期状態では、各PEに割り当てられた分の領域しか確保してはいけない。

(すなわち、逐次のメモリ量の1/288とすること。ただし、並列化のための作業領域分は除く。)

問題のレベルに関する記述:

- L00: きわめて簡単な問題。
 - L10: ちょっと考えればわかる問題。
 - L20: 標準的な問題。
 - L30: 数時間程度必要とする問題。
 - L40: 数週間程度必要とする問題。複雑な実装を必要とする。
 - L50: 数か月程度必要とする問題。未解決問題を含む。
- ※L40以上は、論文を出版するに値する問題。

レポート課題

4. [L20] サンプルプログラムを並列化したうえで、
ピュアMPI実行、および、ハイブリッドMPI実行で
性能が異なるか、実験環境(8ノード、288コア)を
駆使して、性能評価せよ。
- 1ノードあたり、36MPI実行、1MPIx36スレッド実行、
2MPIx18スレッド実行、4MPIx9スレッド実行など、
組み合わせが多くある。

来週へつづく

べき乗法