

# 行列-行列積(2)

---

東京大学情報基盤センター 准教授 塙 敏博

2016年12月6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-行列積(2)のサンプルプログラムの実行
2. サンプルプログラムの説明
3. 演習課題(2): ちょっと難しい完全分散版
4. 並列化のヒント

# 行列-行列積の演習の流れ

- 演習課題(1)

- 簡単なもの(30分程度で並列化)
- 通信関数が一切不要

- 演習課題(2)

- ちょっと難しい(1時間以上で並列化)
- 1対1通信関数が必要

# サンプルプログラムの実行 (行列-行列積(2))

---

# 行列-行列積のサンプルプログラムの注意点

- C言語版/Fortran言語版のファイル名  
**Mat-Mat-d-rb.tar**
- ジョブスクリプトファイル**mat-mat-d.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、
- pjsub 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-行列積(2)のサンプルプログラムの実行

- 以下のコマンドを実行する

```
$ cp /lustre/gt15/z30105/Mat-Mat-d-rb.tar ./
$ tar xvf Mat-Mat-d-rb.tar
$ cd Mat-Mat-d
```
- 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-mat-d.bash
```
- 実行が終了したら、以下を実行する

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

# 行列-行列積のサンプルプログラムの実行 (C言語版)

- 以下のような結果が見えれば成功

N = 576

Mat-Mat time = 0.000074 [sec.]

5154623.644043 [MFLOPS]

Error! in ( 0 , 2 )-th argument in PE 0

Error! in ( 0 , 2 )-th argument in PE 61

Error! in ( 0 , 2 )-th argument in PE 51

Error! in ( 0 , 2 )-th argument in PE 59

Error! in ( 0 , 2 )-th argument in PE 50

Error! in ( 0 , 2 )-th argument in PE 58

.....

並列化が完成  
していないので  
エラーが出ます。  
ですが、これは  
正しい動作です



# 行列-行列積のサンプルプログラムの実行 (Fortran言語)

- 以下のような結果が見えれば成功

NN = 576

Mat-Mat time = 6.604909896850586E-003

MFLOPS = 57866.9439862109

Error! in ( 1 , 3 )-th argument in PE 0

Error! in ( 1 , 3 )-th argument in PE 61

Error! in ( 1 , 3 )-th argument in PE 51

Error! in ( 1 , 3 )-th argument in PE 58

Error! in ( 1 , 3 )-th argument in PE 55

Error! in ( 1 , 3 )-th argument in PE 63

Error! in ( 1 , 3 )-th argument in PE 60

並列化が  
完成して  
いないので  
エラーが出ます。  
ですが、  
これは正しい  
動作です。

...

# サンプルプログラムの説明

- `#define N 576`
  - 数字を変更すると、行列サイズが変更できます
- `#define DEBUG 1`
  - 「0」を「1」にすると、行列-行列積の演算結果が検証できます。
- **MyMatMat関数の仕様**
  - Double型の行列A((N/NPROCS) × N行列)とB(N × (N/NPROCS)行列)の行列積をおこない、Double型の(N/NPROCS) × N行列Cに、その結果が入ります。

# Fortran言語のサンプルプログラムの注意

- 行列サイズ $N$ の宣言は、以下のファイルにあります。

`mat-mat-d.inc`

- 行列サイズ変数が、 $NN$ となっています。

`integer NN`

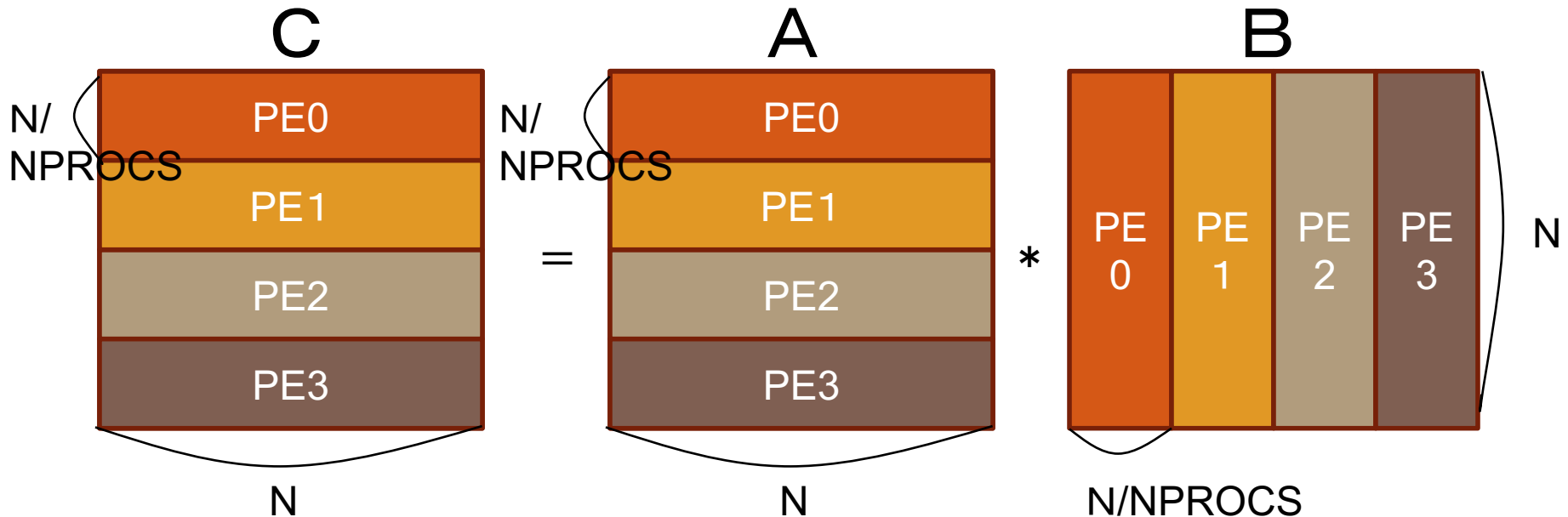
`parameter (NN=576)`

# 演習課題(1)

- **MyMatMat**関数(手続き)を並列化してください。
  - デバック時は  
`#define N 576`  
としてください。
- 行列A、B、Cの初期配置(データ分散)を、十分に考慮してください。

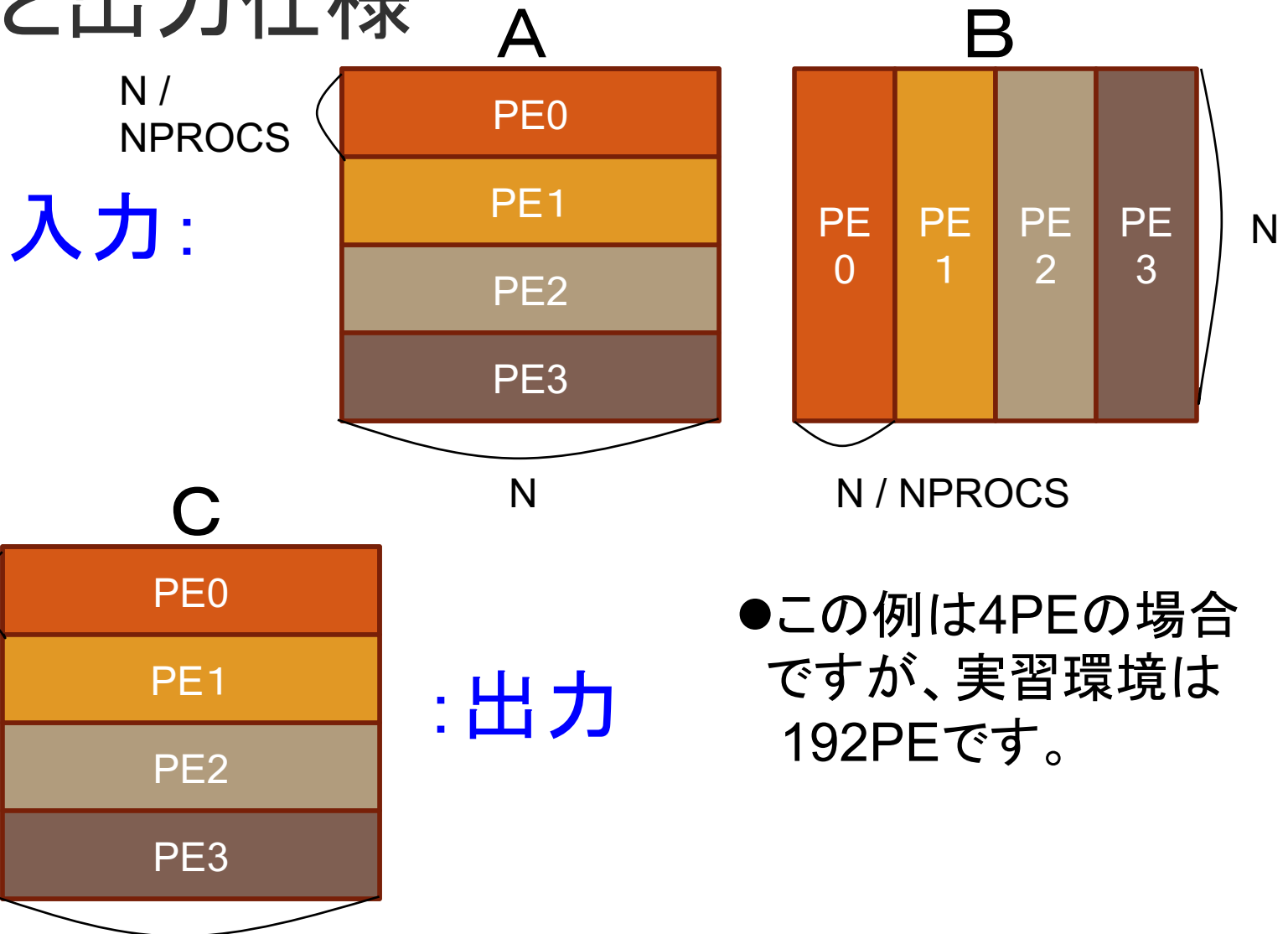
# 行列A、B、Cの初期配置

- 行列A、B、Cの配置は以下のようになっています。  
(ただし以下は4PEの場合で、実習環境は192PEです。)



- 1対1通信関数が必要です。
- 行列A、B、Cの配列のほかに、受信用バッファの配列が必要です。

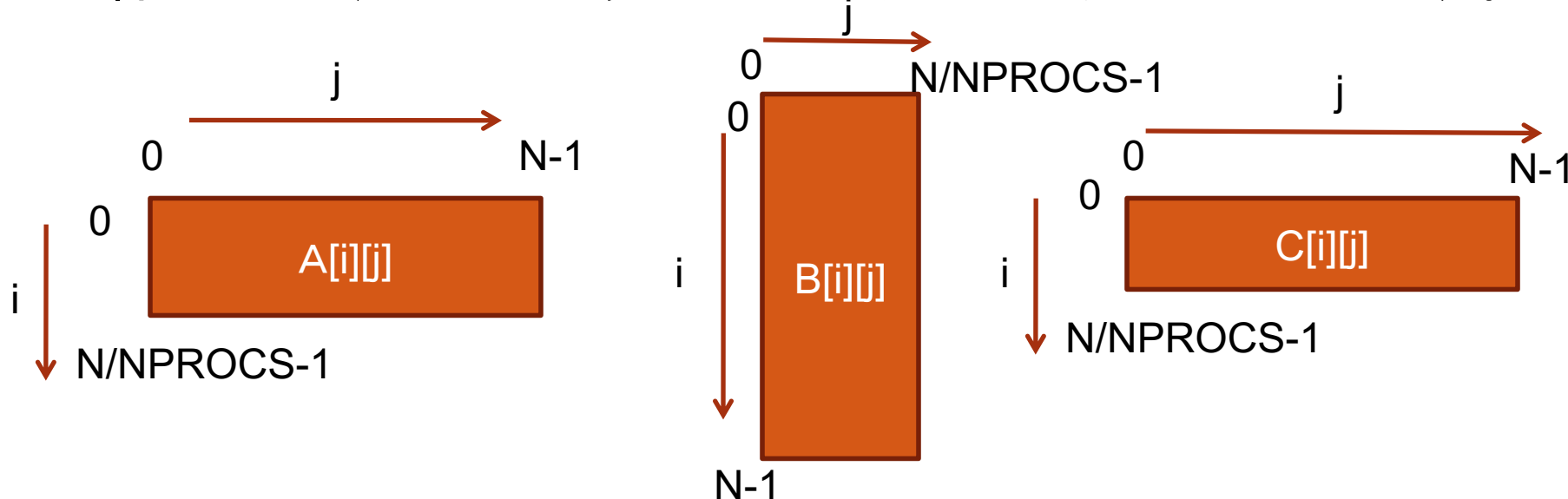
# 入力と出力仕様



- この例は4PEの場合ですが、実習環境は192PEです。

# 並列化の注意(C言語)

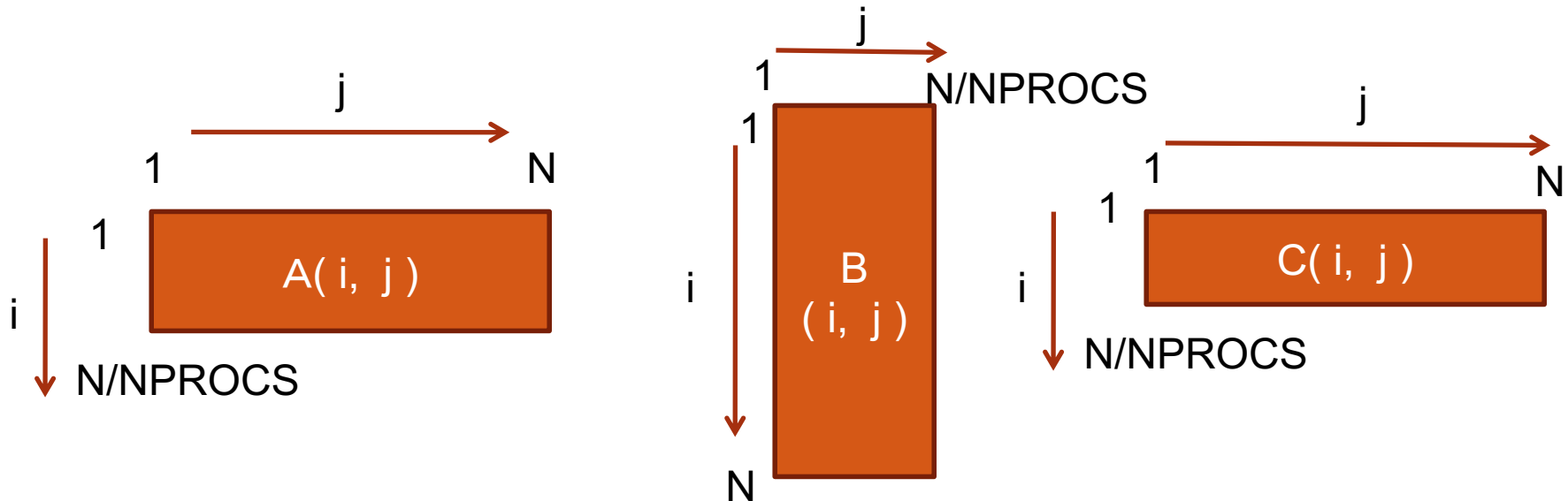
- 各配列は、完全に分散されています。
- 各PEでは、以下のようなインデックスの配列となっています。



- 各PEで行う、ローカルな行列-行列積演算時のインデックス指定に注意してください。

# 並列化の注意 (Fortran言語)

- 各配列は、完全に分散されています。
- 各PEでは、以下のようなインデックスの配列となっています。

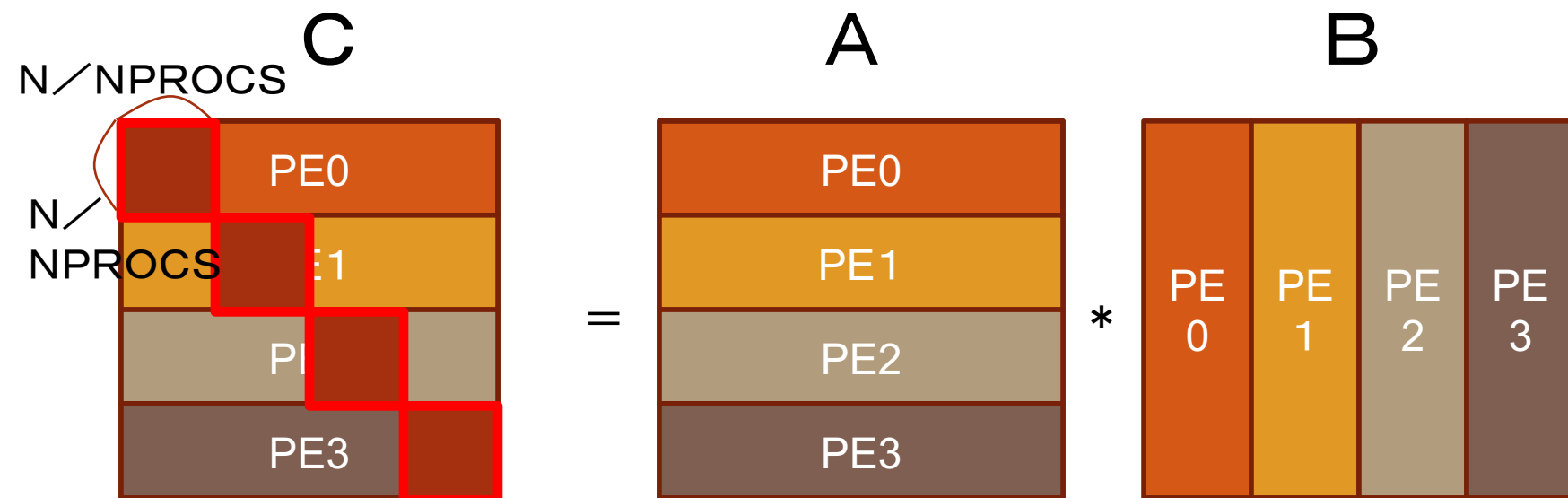


- 各PEで行う、ローカルな行列-行列積演算時のインデックス指定に注意してください。



# 並列化のヒント

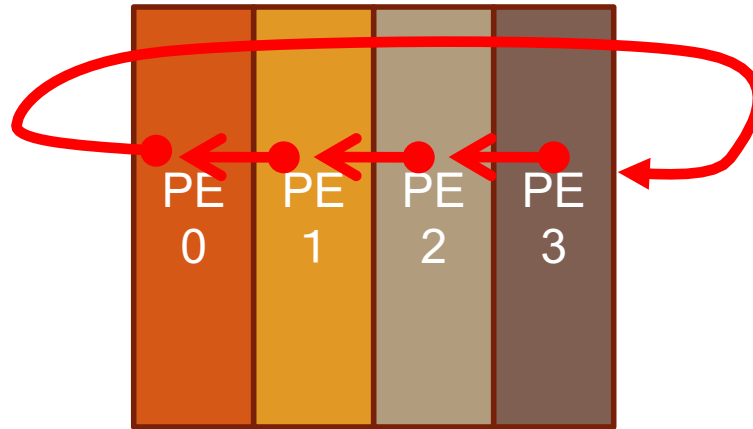
- 行列積を計算するには、各PEで**完全な行列Bのデータがない**ので、行列Bのデータについて通信が必要です。
- たとえば、以下のように計算する方法があります。
- **ステップ1**



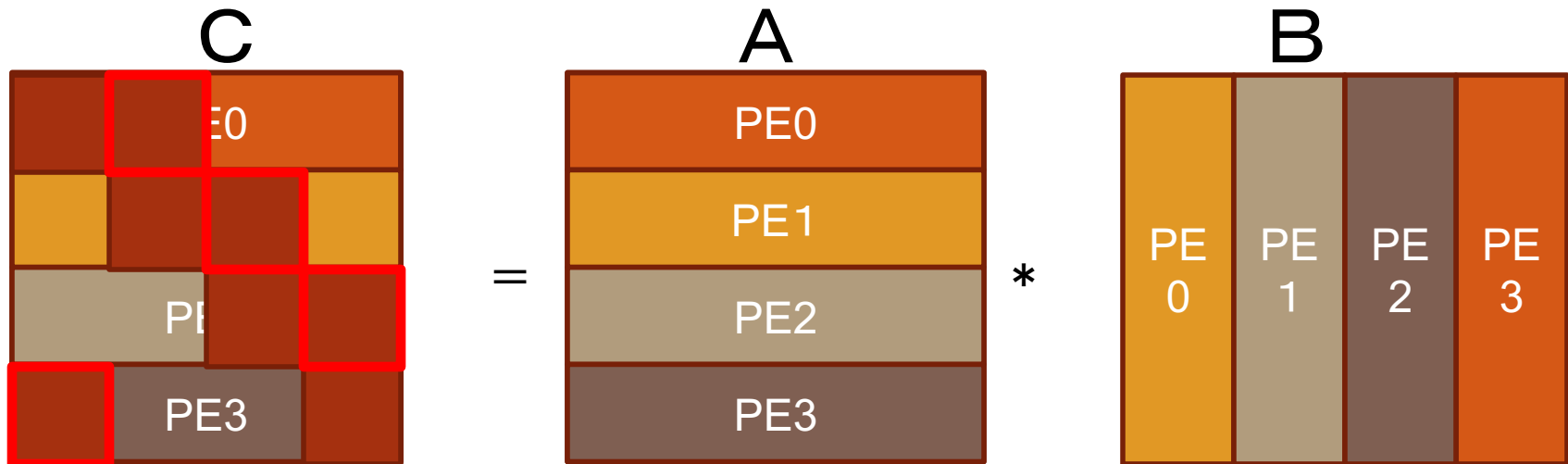
ローカルなデータを使って得られた  
行列-行列積結果

# 並列化のヒント B

• ステップ2



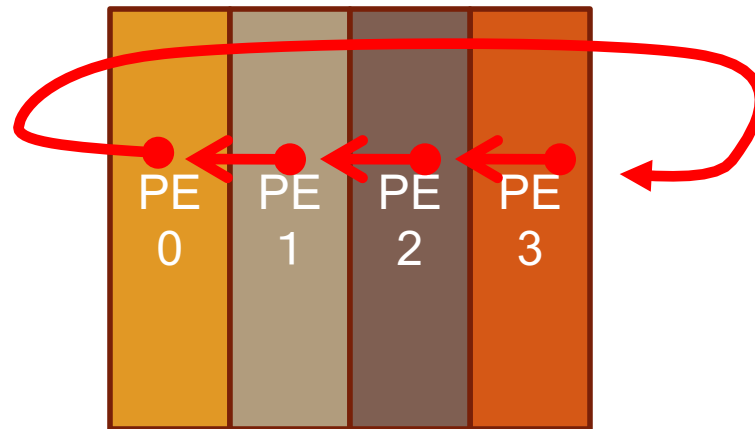
自分の持っているデータを  
ひとつ左隣りに転送する  
(PE0は、PE3に送る)  
【循環左シフト転送】



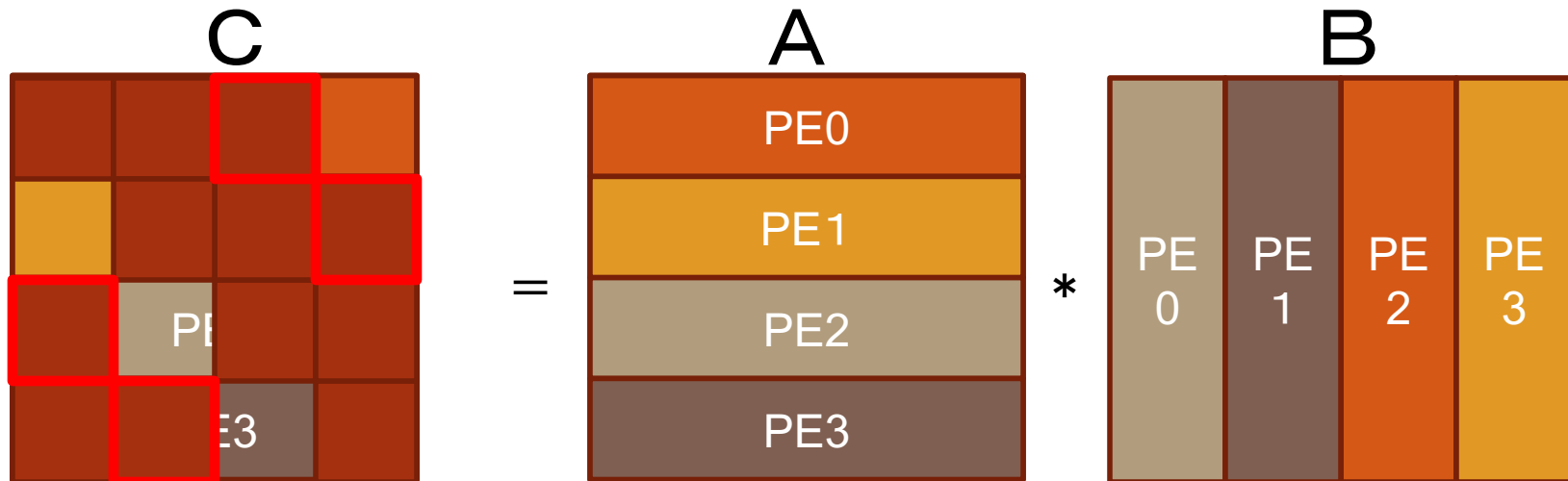
ローカルなデータを使って得られた  
行列-行列積結果

# 並列化のヒント B

## ステップ3




自分の持っているデータを  
ひとつ左隣りに転送する  
(PE0は、PE3に送る)  
【循環左シフト転送】



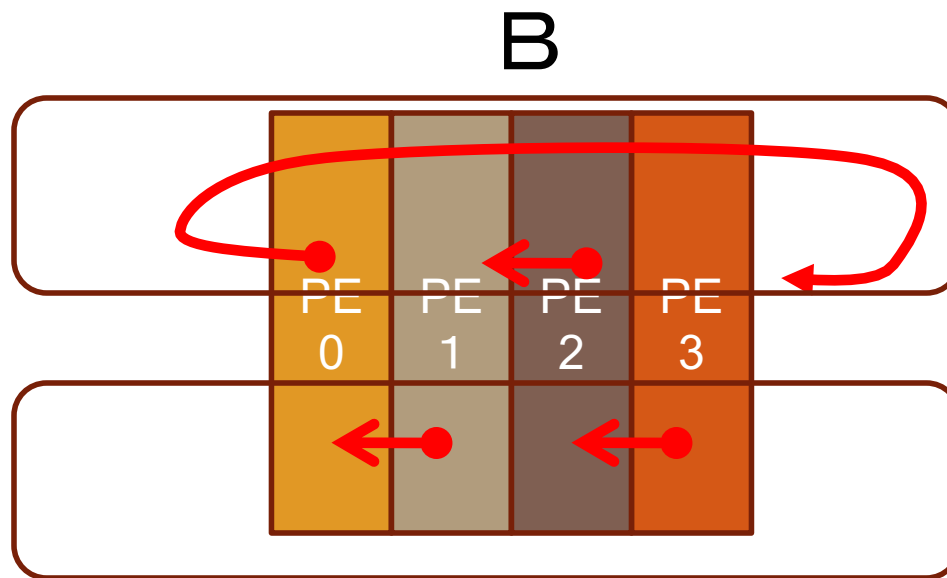
ローカルなデータを使って得られた  
行列-行列積結果

# 並列化の注意

- 循環左シフト転送を実装する際、全員がMPI\_Sendを先に発行すると、その場所で処理が止まる。  
(正確には、動いたり、動かなかったり、する)
    - MPI\_Sendの処理中で、場合により、バッファ領域がなくなる。
    - バッファ領域が空くまで待つ(スピンウェイトする)。
    - しかし、バッファ領域不足から、永遠に空かない。
  - これを回避するため、以下の実装を行う。
    - PE番号が2で割り切れるPE:
      - MPI\_Send();
      - MPI\_Recv();
    - それ以外のPE:
      - MPI\_Recv();
      - MPI\_Send();
- それぞれに対応
- 

# 並列化の注意

- つまり、以下の2ステップで、循環左シフト通信をする



**ステップ1:**  
2で割り切れるPEが  
データを送る

**ステップ2:**  
2で割り切れないPEが  
データを送る

# 基礎的なMPI関数—MPI\_Send

```
• ierr = MPI_Send(sendbuf, icount, idatatype, idest,  
  itag,  icomm);
```

- **sendbuf** : 送信領域の先頭番地を指定する
- **icount** : 整数型。送信領域のデータ要素数を指定する
- **idatatype** : 整数型。送信領域のデータの型を指定する
- **idest** : 整数型。送信したいPEのicomm内でのランクを指定する。
- **itag** : 整数型。受信したいメッセージに付けられたタグの値を指定する。
- **icomm** : 整数型。プロセッサ集団を認識する番号である  
 コミュニケータを指定する。
- **ierr (戻り値)** : 整数型。エラーコードが入る。

# 基礎的なMPI関数—MPI\_Recv (1/2)

```
• ierr = MPI_Recv(recvbuf, icount, idatatype, isource,  
                 itag,  icomm,  istatus);
```

- `recvbuf` : 受信領域の先頭番地を指定する。
- `icount` : 整数型。受信領域のデータ要素数を指定する。
- `idatatype` : 整数型。受信領域のデータの型を指定する。
  - `MPI_CHAR` (文字型)、`MPI_INT` (整数型)、`MPI_FLOAT` (実数型)、`MPI_DOUBLE` (倍精度実数型)
- `isource` : 整数型。受信したいメッセージを送信するPEのランクを指定する。
  - 任意のPEから受信したいときは、`MPI_ANY_SOURCE` を指定する。

# 基礎的なMPI関数—MPI\_Recv (2/2)

- **itag** : 整数型。受信したいメッセージに付いているタグの値を指定する。
  - 任意のタグ値のメッセージを受信したいときは、**MPI\_ANY\_TAG** を指定する。
- **icomm** : 整数型。PE集団を認識する番号であるコミュニケータを指定する。
  - 通常では**MPI\_COMM\_WORLD** を指定すればよい。
- **istatus** : MPI\_Status型(整数型の配列)。受信状況に関する情報が入る。
  - 要素数が**MPI\_STATUS\_SIZE**の整数配列が宣言される。
  - 受信したメッセージの送信元のランクが **istatus[MPI\_SOURCE]**、タグが **istatus[MPI\_TAG]** に代入される。
- **ierr(戻り値)** : 整数型。エラーコードが入る。



# 実装上の注意

## • タグ (itag) について

- `MPI_Send()`, `MPI_Recv()` で現れるタグ (itag) は、任意の `int` 型の数字を指定してよいです。
- ただし、同じ値 (0 など) を指定すると、どの通信に対応するかわからなくなり、誤った通信が行われるかもしれません。
- 循環左シフト通信では、`MPI_Send()` と `MPI_Recv()` の対が、2 つでてきます。これらを別のタグにした方が、より安全です。
- たとえば、一方は最外ループの値 `iloop` として、もう一方を `iloop+NPROCS` とすれば、全ループ中でタグがぶつかることがなく、安全です。

# さらなる並列化のヒント

---

以降、本当にわからない人のための資料です。  
ほぼ回答が載っています。

# 並列化のヒント

1. 循環左シフトは、PE総数-1回 必要
2. 行列Bのデータを受け取るため、行列B[][]に関するバッファ行列B\_T[][]が必要
3. 受け取ったB\_T[][] を、ローカルな行列-行列積で使うため、B[][]へコピーする。
4. ローカルな行列-行列積をする場合の、対角ブロックの初期値: ブロック幅\*myid。ループ毎にブロック幅だけ増やしていくが、Nを超えたら0に戻さなくてはならない。

# 並列化のヒント(ほぼ回答、C言語)

- 以下のようなコードになる。

```
ib = n/numprocs;
for (iloop=0; iloop<NPROCS; iloop++ ) {
    ローカルな行列-行列積 C = A * B;
    if (iloop != (numprocs-1) ) {
        if (myid % 2 == 0 ) {
            MPI_Send(B, ib*n, MPI_DOUBLE, isendPE,
                    iloop, MPI_COMM_WORLD);
            MPI_Recv(B_T, ib*n, MPI_DOUBLE, irecvPE,
                    iloop+numprocs, MPI_COMM_WORLD, &istatus);
        } else {
            MPI_Recv(B_T, ib*n, MPI_DOUBLE, irecvPE,
                    iloop, MPI_COMM_WORLD, &istatus);
            MPI_Send(B, ib*n, MPI_DOUBLE, isendPE,
                    iloop+numprocs, MPI_COMM_WORLD);
        }
        B[ ][ ] ~ B_T[ ][ ] をコピーする;
    }
}
```

# 並列化のヒント(ほぼ回答、C言語)

- ローカルな行列-行列積は、以下のようなコードになる。

```
jstart=ib*( (myid+iloop)%NPROCS );
for (i=0; i<ib; i++) {
    for(j=0; j<ib; j++) {
        for(k=0; k<n; k++) {
            C[ i ][ jstart + j ] += A[ i ][ k ] * B[ k ][ j ];
        }
    }
}
```

# 並列化のヒント(ほぼ回答, Fortran言語)

- 以下のようなコードになる。

```
ib = n/numprocs
do iloop=0, NPROCS-1
  ローカルな行列-行列積 C = A * B
  if (iloop .ne. (numprocs-1) ) then
    if (mod(myid, 2) .eq. 0 ) then
      call MPI_SEND(B, ib*n, MPI_DOUBLE_PRECISION, isendPE,
&        iloop, MPI_COMM_WORLD, ierr)
      call MPI_RECV(B_T, ib*n, MPI_DOUBLE_PRECISION, irecvPE,
&        iloop+numprocs, MPI_COMM_WORLD, istatus, ierr)
    else
      call MPI_RECV(B_T, ib*n, MPI_DOUBLE_PRECISION, irecvPE,
&        iloop, MPI_COMM_WORLD, istatus, ierr)
      call MPI_SEND(B, ib*n, MPI_DOUBLE_PRECISION, isendPE,
&        iloop+numprocs, MPI_COMM_WORLD, ierr)
    endif
    B ⇨ B_T をコピーする
  endif
enddo
```

# 並列化のヒント(ほぼ回答, Fortran言語)

- ローカルな行列-行列積は、以下のようなコードになる。

```
imod = mod( (myid+iloop), NPROCS )
jstart = ib* imod
do i=1, ib
  do j=1, ib
    do k=1, n
      C( i , jstart + j ) = C( i , jstart + j ) + A( i , k ) * B( k , j )
    enddo
  enddo
enddo
```

# 来週へつづく

---

## LU分解法(1)