LU分解法（1）

東京大学情報基盤センター　准教授　塙　敏博

2016年6月14日（火）10:25-12:10

講義日程(工学部共通科目)

レポートおよびコンテスト課題
(締切:
2016年8月8日(月)24時 厳守

1. ~~4月19日(今日): ガイダンス~~
2. ~~4月26日~~
   - ~~並列数値処理の基本演算(座学)~~
3. ~~5月10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. ~~5月17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. ~~5月24日~~
   - ~~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. ~~5月31日~~
   - ~~行列-ベクトル積の並列化~~
7. ~~6月7日(8:30-10:15)~~
   ~~★大演習室2~~
   - ~~べき乗法の並列化~~
8. ~~6月7日(10:25-12:10)~~
   - ~~行列-行列積の並列化(1)~~
9. ~~6月14日(8:30-10:15)~~
   ~~★大演習室2~~
   - ~~行列ー行列積の並列化(2)~~
10. 6月14日(10:25-12:10)
    - LU分解法(1)
    - コンテスト課題発表
11. 6月28日
    - LU分解法(2)
12. 7月5日
    - LU分解法(3)
13. 7月12日
    - 新しいスパコンの紹介・お試し、他

LU分解法（中級レベル以上）の演習日程

並列化が難しいので、3週間確保してあります。

1. 今週
   - 講義（知識、アルゴリズムの理解）
   - 並列化の検討
2. 来週
   - LU分解法の逐次アルゴリズムの説明
   - LU分解法の並列化実習（1）
3. 再来週
   - LU分解法の並列化実習（2）

講義の流れ

1. LU分解法
   - ガウス・ジョルダン法
   - ガウス消去法
   - 枢軸選択
   - LU分解法
     - 外積形式、内積形式、クラウト法、ブロック形式ガウス法、縦ブロックガウス法、前進・後退代入
2. サンプルプログラムの実行
3. 並列化のヒント
4. 実習課題
5. レポート課題

LU分解法の概略

いろいろな変種があります

密行列に対する連立一次方程式

- 以下の式 $Ax = b$

  ここで A は実数の密行列　x, b は実数のベクトルとすると、解ベクトル x を求めること。
- 解ベクトルを求める方法は、以下の二種類が知られている
  1. 直接解法
     行列操作により厳密解を求める方法
  2. 反復解法
     近似解を反復計算で解に収束させ求める方法

ガウス･ジョルダン法

- 基本的な消去法により解を求める
- 第1ステップ

  第一行をもとに
  係数を消去

$$a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \cdots + a_{1n}x_n = b_1$$

$$\square \qquad a_{22}'x_2 + \cdots + a_{2n}'x_n = b_2'$$

$$\vdots$$

$$a_{n2}'x_n + \cdots + a_{nn}'x_n = b_n'$$

- 第2ステップ

  第二行をもとに
  係数を消去

$$a_{11}x_1 + \square + \cdots + a_{1n}''x_n = b_1''$$

$$a_{22}'x_2 + \cdots + a_{2n}''x_n = b_2''$$

$$\vdots$$

$$\square \qquad + \cdots + a_{nn}''x_n = b_n''$$

- 最終ステップ

$$a_{11}x_1 = b_1^*$$

$$a_{22}'x_2 = b_2^* \longrightarrow$$ 割り算のみで解を得る

$$\vdots$$

$$a_{nn}^*x_n = b_n^*$$

ガウス･ジョルダン法

- 右辺bの代わりに単位行列 Ｉ を用意して同様の操作をすれば、最終ステップでは逆行列が求まる
- 各ステップでの計算量が同じなので、並列化時の負荷バランスが良い

ガウス消去法

- 対角線より上の要素をゼロにしない方法
- 第1ステップ

第一行をもとに
係数を消去

$$a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \cdots + a_{1n}x_n = b_1$$
$$a_{22}'x_2 + \cdots + a_{2n}'x_n = b_2'$$
$$\vdots$$
$$a_{n2}'x_n + \cdots + a_{nn}'x_n = b_n'$$

- 第2ステップ

第二行をもとに
係数を消去

$$a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \cdots + a_{1n}x_n = b_1$$
$$a_{22}'x_2 + \cdots + a_{2n}'x_n = b_2'$$
$$\vdots$$
$$+ \cdots + a_{nn}''x_n = b_n''$$

- 最終ステップ

$$a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \cdots + a_{1n}x_n = b_1$$
$$a_{22}'x_2 + \cdots + a_{2n}'x_n = b_2'$$
$$\ddots \quad \vdots$$
$$a_{nn}^{*}x_n = b_n^{*}$$

この消去を
前進消去（forward elimination）
とよぶ

ガウス消去法

- 前進消去後、最後の項から順に解を求めていく

$$a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \cdots + a_{1n}x_n = b_1$$

$$a_{22}'x_2 + \cdots + a_{2n}'x_n = b_2'$$

$$\vdots \qquad \ddots \qquad \vdots$$

$$\downarrow$$

$$a_{nn}^{*}x_n = b_n^{*}$$

$$x_n = b_n^{*} / a_{nn}^{*},$$

$$x_{n-1} = (b_{n-1}^{+} - a_{n-1,n}^{+}) / a_{n-1,n-1}^{+},$$

$$\vdots$$

この代入処理を、後退代入（backward substitution）とよぶ

ガウス消去法

- ガウス消去法は、ガウス・ジョルダン法に比べ、消去演算をする範囲が少ない（基本行より下のみ）
  - 演算量が低下する: $n^3 \rightarrow (2/3)n^3$
- 基本行より下のみ演算するため、並列化するとガウス・ジョルダン法に比べて、負荷バランスの劣化を起こしやすい
  - 並列処理に向かないと考えた専門家がいた。
  - 現在はデータ分散の改良や通信の隠蔽技法、ハードウエア能力向上から、ガウス消去法のほうが高速である。

ピボッティング

- ガウス・ジョルダン法、ガウス消去法とも、基本行の係数がゼロだと、ゼロによる除算が生じ、計算が続行できない

$$0 \longrightarrow \underline{a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \cdots + a_{1n}x_n = b_1}$$

第1行をもとに係数を消去

$$a_{22}'x_2 + \cdots + a_{2n}'x_n = b_2'$$

$$\vdots$$

$$a_{n2}'x_n + \cdots + a_{nn}'x_n = b_n'$$

- これを回避するため、消去する列から最も係数の大きなものを選択して、基本行と入れ替える
（枢軸選択、ピボッティング、pivot selection）

ピボッティング

- ピボッティングには以下の2種の方法がある
  1. 完全ピボッティング
     更新対象全体から最大のものを選ぶ方法

$$
\begin{aligned}
a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \cdots + a_{1n}x_n &= b_1 \\
a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \cdots + a_{2n}x_n &= b_2 \\
&\vdots \\
a_{n1}x_1 + a_{n2}x_n + \cdots + a_{nn}x_n &= b_n
\end{aligned}
$$

  2. 部分ピボッティング
     更新対象の列または行から最大のものを選ぶ方式
- ピボッティングの手間、経験的な数値安定性から
  部分ピボッティングが用いられることが多い

LU分解法

- ガウス消去法のような消去処理を行列演算として定式化
- 連立一次方程式の行列表記:

$$
\begin{aligned}
a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \cdots + a_{1n}x_n &= b_1 \\
a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \cdots + a_{2n}x_n &= b_2 \\
&\vdots \\
a_{n1}x_1 + a_{n2}x_n + \cdots + a_{nn}x_n &= b_n
\end{aligned}
$$

$$
\downarrow
$$

$$
Ax = b
$$

$$
A = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ & \vdots & & \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix}, \quad x = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix}, \quad b = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{bmatrix}
$$

LU分解法

- LU分解法では、以下の3つのステップで解を計算する
- 第1ステップ：行列AのLU分解

$$A = LU, \quad L = \begin{bmatrix} l_{11} & & & \\ l_{21} & l_{22} & & \\ \vdots & & \ddots & \\ l_{n1} & l_{n2} & \cdots & l_{nn} \end{bmatrix}, \quad U = \begin{bmatrix} u_{11} & u_{12} & \cdots & u_{1n} \\ & u_{22} & & \\ & & \ddots & \vdots \\ & & & u_{nn} \end{bmatrix}$$

- 第2ステップ：前進代入

$Lc = b$ ：ベクトルcを求める

$$\begin{aligned} &Ax = b, \\ &(LU)x = b, \\ &L(Ux) = b \end{aligned} \quad \begin{cases} Lc = b, \\ c = Ux \end{cases}$$

$$\begin{bmatrix} l_{11} & & & \\ l_{21} & l_{22} & & \\ \vdots & & \ddots & \\ l_{n1} & l_{n2} & \cdots & l_{nn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{bmatrix}$$

- 第3ステップ：後退代入

$Ux = c$

：解ベクトルxを求める

$$\begin{bmatrix} u_{11} & u_{12} & \cdots & u_{1n} \\ & u_{22} & & \\ & & \ddots & \vdots \\ & & & u_{nn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_n \end{bmatrix}$$

LU分解法

- 行列AのLU分解$A = LU$には、データアクセスの違いから以下の3種の方法が知られている
  1. 外積形式ガウス法（outer-product form）
     - 普通の消去法から導出
  2. 内積形式ガウス法（inner-product form）
     - LU分解がなされたとして、Lの対角要素を1に固定して導出
  3. クラウト法（Crout method）
     - LU分解がなされたとして、Uの対角要素を1に固定して導出

LU分解法の種類

- 外積形式（outer-product form）ガウス法
  - ガウス消去法と同等の操作でLU分解する
  - 第 k 列を消去したい場合、

$$
\begin{aligned}
a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \cdots\cdots + a_{1n}x_n &= b_1 \\
a_{22}x_2 + \cdots\cdots + a_{2n}x_n &= b_2 \\
&\cdots \\
\boxed{a_{kk}x_k} + \cdots + a_{kn}x_n &= b_k \\
\boxed{\cdots} & \\
\boxed{a_{nk}x_k} + \cdots + a_{nn}x_n &= b_n
\end{aligned}
$$

係数 a_{kk} を用いて $a_{k,k+1}, a_{k,k+2}, \cdots, a_{k,n}$ を消去

外積形式ガウス法

- すなわち列の消去は、

$$a_{ik} - a_{kk}(a_{ik} / a_{kk}),\ i = k+1, k+2, \ldots, n$$

- これを行列表記にすると、行列Lを

$$L_k = \begin{bmatrix} 1 & & & & \\ & \ddots & & & \\ & & 1 & & \\ & & l_{k+1,k} & 1 & \\ & & \vdots & & \ddots \\ & & l_{mk} & & 1 \end{bmatrix}, \quad l_{ik} = -(a_{ik} / a_{kk}),\ i = k+1, \ldots, n$$

とすると、この消去は　$L_k A_k = U_{k+1}$

外積形式ガウス法

- 一般的に

$$L_{n-1}L_{n-2}\cdots L_2 L_1 A = U$$

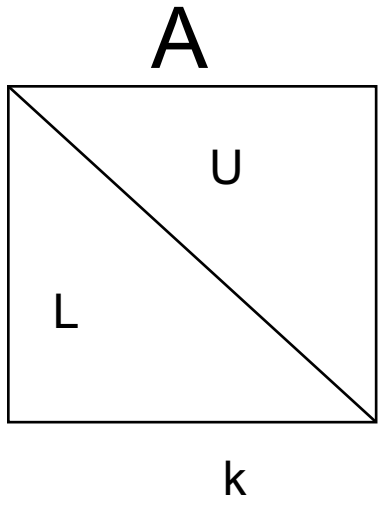
- したがってLU分解は

$$\begin{aligned} A &= (L_{n-1}L_{n-2}\cdots L_2 L_1)^{-1} U \\ &= ({L_1}^{-1}{L_2}^{-1}\cdots{L_{n-2}}^{-1}{L_{n-1}}^{-1})U \\ &= LU \end{aligned}$$

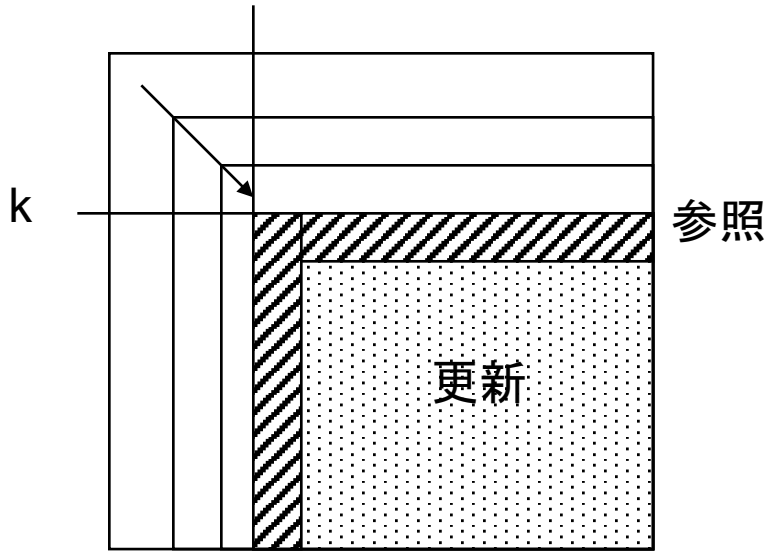
- ここで、${L_k}^{-1}$ は L_k の要素の符号を反転させたものであり、容易に得られる
  - 消去作業が終われば行列Lが得られる

外積形式ガウス法（C言語）

```
for (k=0;  k<n;  k++) {
   dtmp =  1.0 / A[k][k];
   for (i=k+1;  i<n;  i++) {
      A[i][k] = A[i][k]*dtmp;
   }
   for (j=k+1;  j<n; j++) {
        dakj = A[k][j];
        for (i=k+1;  i<n;  i++) {
           A[i][j] = A[i][j]–A[i][k]*dakj;
        }
}
```

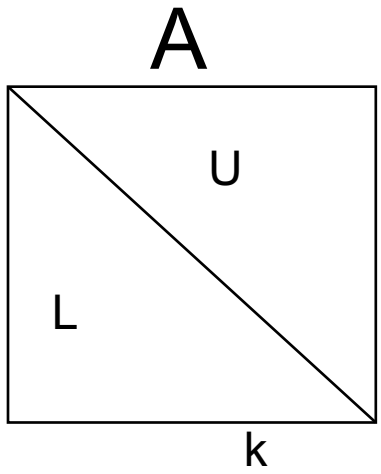


注意：
Lの対角要素は
1であることを仮定
（計算しない）
→Uの対角要素を
入れる

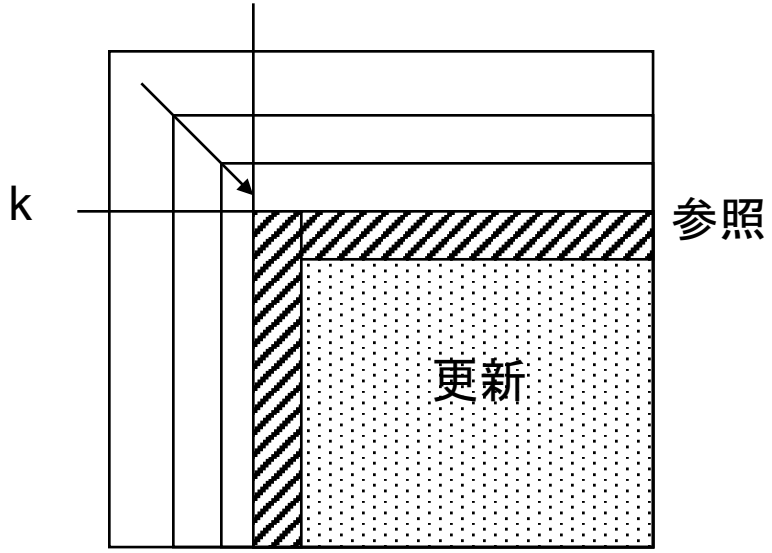


外積形式ガウス法（Fortran言語）

```
do k=1,  n
   dtmp =  1.0d0 / A(k, k)
   do i=k+1, n
      A(i, k) = A(i, k) * dtmp
   enddo
   do  j=k+1, n
      dakj = A(k, j)
      do i=k+1, n
         A(i, j) = A(i, j)–A(i, k)*dakj
      enddo
   enddo
enddo
```



注意：
Lの対角要素は
1であることを仮定
（計算しない）
→Uの対角要素を
入れる



外積形式ガウス法のまとめ

- 外積形式ガウス法では分解列の右側の領域が更新される
  - right-lookingアルゴリズムと呼ばれる
- 外積形式ガウス法は並列化に向く
  - 処理の中心の更新領域が多い
    - 負荷バランスよくデータ分散できる
  - 更新処理が、分解行と分解列という少ないデータを所有するだけで、要素ごとに独立して行える

内積形式ガウス法

- 内積形式（innner-product form）ガウス法
  - LU分解がなされたと仮定した上で、行列Lの対角要素を1として導出した方法

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ & \cdots & \cdots & \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & & & \\ l_{21} & 1 & & 0 \\ \vdots & & \ddots & \\ l_{n1} & l_{n2} & \cdots & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_{11} & u_{12} & \cdots & u_{1n} \\ & u_{22} & & \\ & 0 & \ddots & \vdots \\ & & & u_{nn} \end{bmatrix}$$

$a_{11} = u_{11}$, ← u_{11} が求まる

$l_{21}u_{11} = a_{21},\ l_{31}u_{11} = a_{31}, \ldots,\ l_{n1}u_{11} = a_{n1}$

↖ l_{21} が求まる

内積形式ガウス法

- この導出作業を一般化すると、以下の二部分に分かれる
  - (I) uの導出部
  - (II) (I)で得られた値を元に、L の導出部
- まとめると
  - (I) $u_{1k} = a_{1k}$

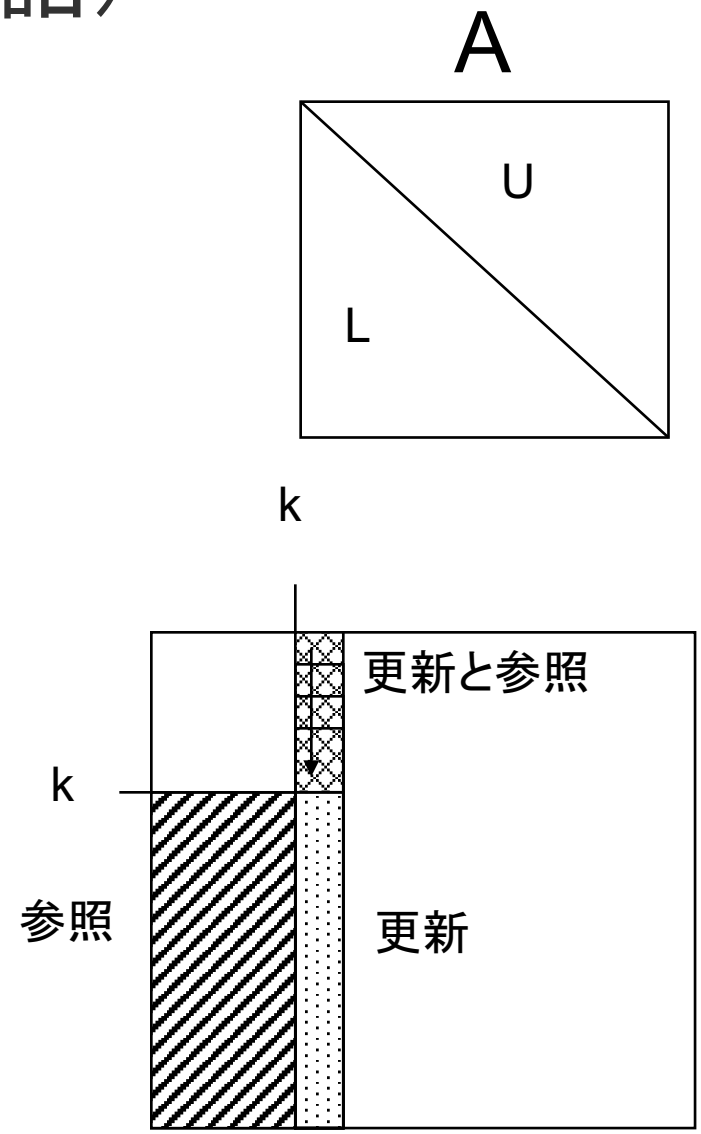
$$u_{ik} = a_{1k} - \sum_{j=1}^{i-1} l_{ij} u_{jk}, (i = 2,3,\ldots,k)$$

  - (II)

$$l_{ik} = (a_{ik} - \sum_{j=1}^{k-1} l_{ij} u_{jk}) / u_{kk}, \quad (i = k+1, k+2,\ldots,n)$$

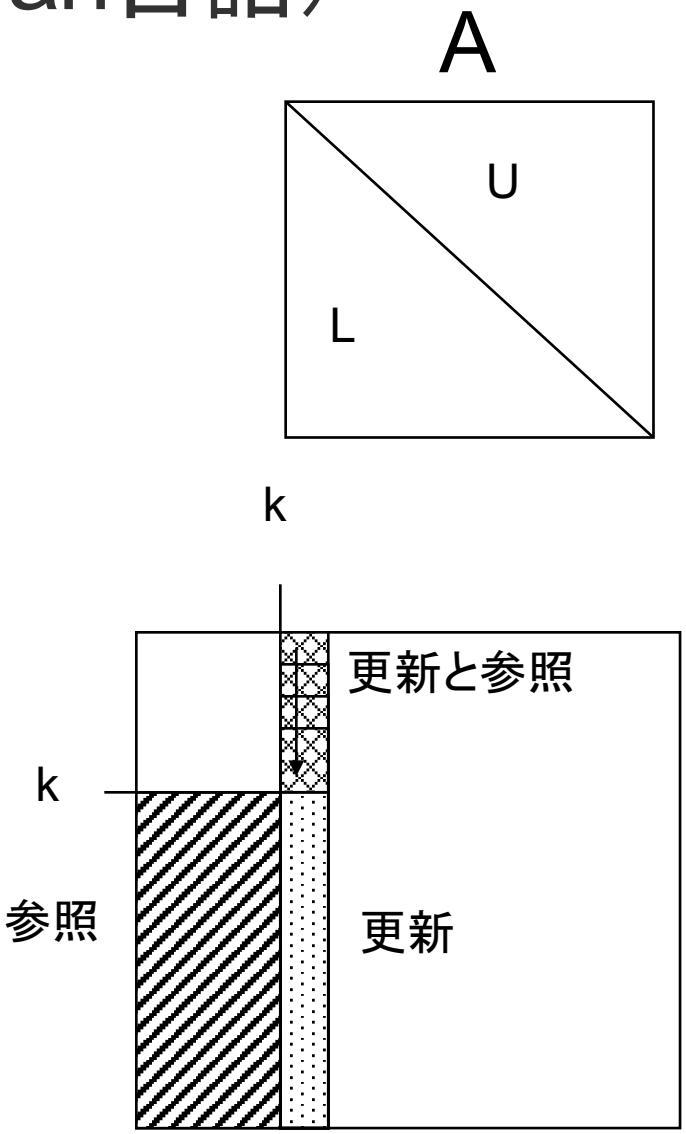
内積形式ガウス法（C言語）

```
for (k=0;  k<n; k++) {
   for (j=0;  j<k;  j++) {
      dajk = A[j][k];
       for (i=j+1 ;  i<n; i++) {
          A[i][k]= A[i][k] –A[i][j]*dajk;
       }
   }
   A[k][k]=1.0 / A[k][k];
   for (i=k+1 ;  k<n;  k++) {
         A[i][k]=A[i][k]*A[k][k];
  }
}
```



内積形式ガウス法（Fortran言語）

```
do k=1, n
  do j=1, k
    dajk = A(j, k)
    do i=j+1, n
      A(i, k)= A(i, k) –A(i, j) * dajk;
    enddo
  enddo
  A(k, k) =1.0d0 / A(k, k)
  do i=k+1, n
    A(i, k)=A(i, k) * A(k, k)
  enddo
enddo
```



内積形式ガウス法のまとめ

- 内積形式ガウス法では、分解列の左側の領域が主に参照される
  - left-lookingアルゴリズムと呼ばれる
- 内積形式ガウス法の並列化
  - 行列Aを列方向分散（＊，Cyclic）
    - 参照領域のデータがないので、通信多発
      （ベクトルリダクションが毎回必要）
  - 行列Aを行方向分散（Cyclic，＊）
    - 上三角行列Uの要素（データ数が少ない）を所有すれば、独立して計算可能

クラウト法

- クラウト法（Clout Method）
  - LU分解がなされたと仮定した上で、行列Uの対角要素を1として導出した方法（cf. 内積形式ガウス法）

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ & \cdots & \cdots & \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} l_{11} & & & \\ l_{21} & l_{22} & & 0 \\ \vdots & & \ddots & \\ l_{n1} & l_{n2} & \cdots & l_{nn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & u_{12} & \cdots & u_{1n} \\ & 1 & & \\ 0 & & \ddots & \vdots \\ & & & 1 \end{bmatrix}$$

$$l_{11} = a_{11},\ l_{21} = a_{21},\ l_{n1} = a_{n1}$$ ← Lの第1列が求まる

$$l_{11}u_{12} = a_{12},\ l_{11}u_{13} = a_{13}, \ldots,\ l_{11}u_{1n} = a_{1n}$$

u_{12} が求まる

クラウト法

- この計算を一般化すると、
  - Lの第k列を求める場合

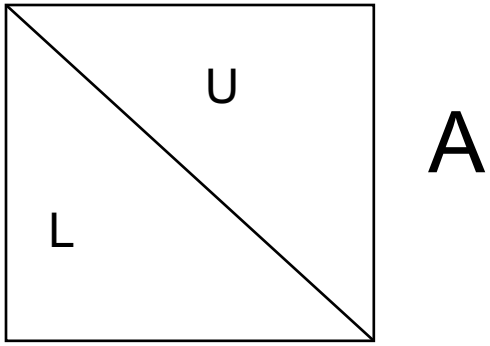
$$l_{ik} = a_{ik} - \sum_{j=1}^{k-1} l_{ij} u_{jk}, \ (i = k, k+1, \ldots, n)$$

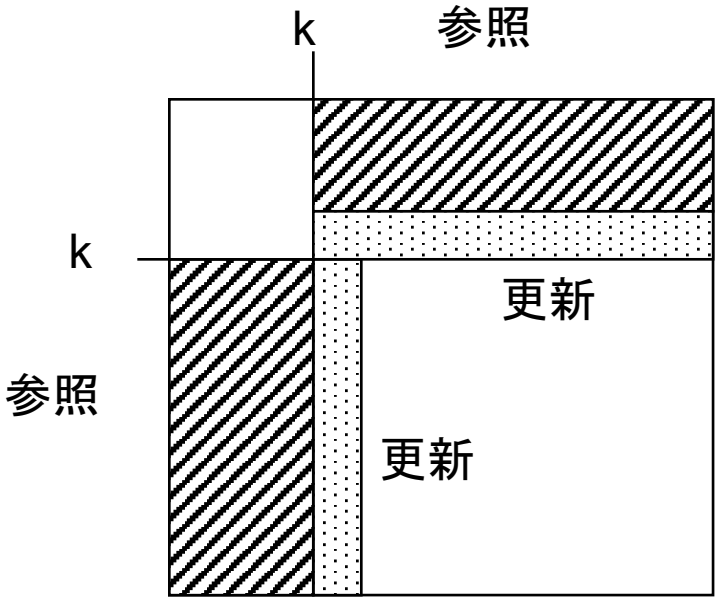
  - Uの第k行を求める場合

$$u_{kj} = (a_{kj} - \sum_{i=1}^{k-1} l_{ki} u_{ij}) / l_{kk}, \ (j = k, k+1, \ldots, n)$$

クラウト法（C言語）

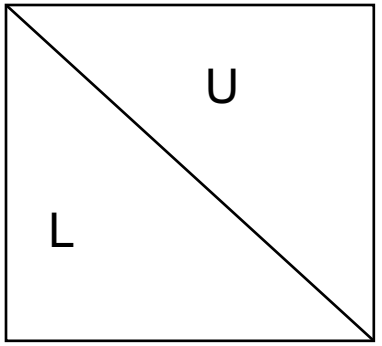
```
A[0][0]=1.0/A[0][0];
for  (j=1;  j<n;  j++) {
   A[0][j]=A[0][j]*A[0][0];  }
for (k=0;  k<n;  k++) {
  for (j=0;  j<k;  j++) {
     dajk=A[j][k];
     for (i=k;  i<n;  i++) {
        A[i][k]=A[i][k]-A[i][j]*dajk;
     }  }
   A[k][k]=1.0/A[k][k];
  for (i=0;  i<k;  i++) {
     daki=A[k][i];
     for (j=k+1;  j<n;  j++) {
        A[k][j]=A[k][j]-daki*A[i][j];
     }  }
     for (j=k+1;  j<n;  j++) {
       A[k][j]=A[k][j]*A[k][k];   }
}
```



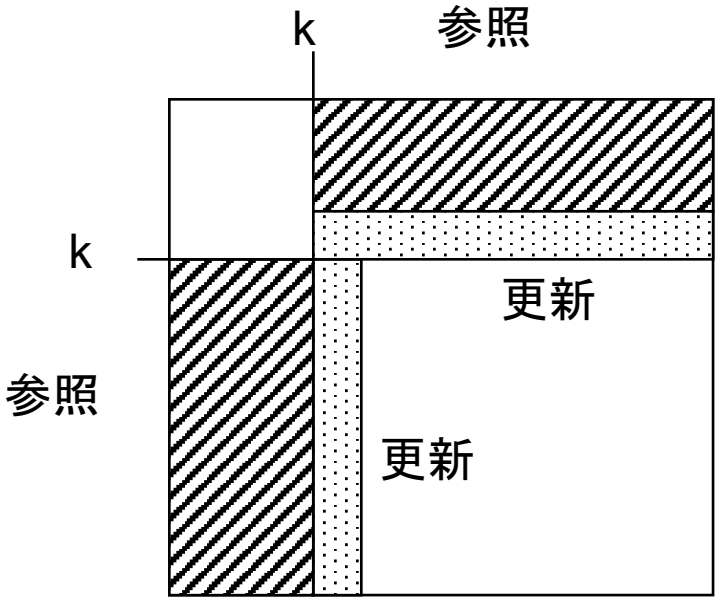


クラウト法（Fortran言語）

```
A(1,1)=1.0d0/A(1,1)
do  j=2,  n
  A(1, j) =A(1, j) * A(1, 1) enddo
do k=1,  n
  do j=1,  k
    dajk=A(j, k)
   do i=k, n
       A(i, k)=A(i, k) - A(i, j) * dajk
    enddo; enddo
  A(k, k) =1.0d0 / A(k, k)
 do i=1, k
   daki=A(k, i)
   do j=k+1, n
      A(k, j)=A(k, j) – daki * A(i, j)
 enddo;  enddo
 do j=k+1, n
    A(k, j)=A(k, j) * A(k, k)  enddo
enddo
```



A



クラウト法

- クラウト法では、最内ループの交換ができる
  - 長さ（１～ｋ－１）のループ、長さ（ｋ－ｎ）のループの内、最も長いループを最内に移動可
    - ベクトル計算機で実行性能が良い
- 分解列および分解行の外側に2つの参照領域
  - 分散メモリ型並列計算機での実装が困難
    ∵どのようにデータ分割しても大量通信発生
- 共有メモリ型並列計算機では並列化可能
  ∵参照領域があれば分解列と分解行は独立に計算可能

ブロック形式ガウス法

- 行列Aを小行列に分解し、その小行列単位でLU分解する方法。LU分解と行列-行列積で実現できる。
- 具体的には （各小行列を各PEが所有）

$$\begin{bmatrix} \tilde{A}_{11} & \tilde{A}_{12} & \tilde{A}_{13} \\ \tilde{A}_{21} & \tilde{A}_{22} & \tilde{A}_{23} \\ \tilde{A}_{31} & \tilde{A}_{32} & \tilde{A}_{33} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \tilde{L}_{11} & & 0 \\ \tilde{L}_{21} & \tilde{L}_{22} & \\ \tilde{L}_{31} & \tilde{L}_{32} & \tilde{L}_{33} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \tilde{U}_{11} & \tilde{U}_{12} & \tilde{U}_{13} \\ & \tilde{U}_{22} & \tilde{U}_{23} \\ 0 & & \tilde{U}_{33} \end{bmatrix}$$

とすると、右辺は

$$\tilde{A}_{11} = \tilde{L}_{11}\tilde{U}_{11},\ \tilde{A}_{12} = \tilde{L}_{11}\tilde{U}_{12},\ \tilde{A}_{13} = \tilde{L}_{11}\tilde{U}_{13},$$

$$\tilde{A}_{21} = \tilde{L}_{21}\tilde{U}_{11},\ \tilde{A}_{22} = \tilde{L}_{21}\tilde{U}_{12} + \tilde{L}_{22}\tilde{U}_{22},\ \tilde{A}_{23} = \tilde{L}_{21}\tilde{U}_{13} + \tilde{L}_{22}\tilde{U}_{23},$$

$$\tilde{A}_{31} = \tilde{L}_{31}\tilde{U}_{11},\ \tilde{A}_{32} = \tilde{L}_{31}\tilde{U}_{12} + \tilde{L}_{32}\tilde{U}_{22},\ \tilde{A}_{33} = \tilde{L}_{31}\tilde{U}_{13} + \tilde{L}_{32}\tilde{U}_{23} + \tilde{L}_{33}\tilde{U}_{33}$$

ブロック形式ガウス法

- 第1ステップ

LU分解

$$\tilde{A}_{11} = \tilde{L}_{11}\tilde{U}_{11},\ \tilde{A}_{12} = \tilde{L}_{11}\tilde{U}_{12},\ \tilde{A}_{13} = \tilde{L}_{11}\tilde{U}_{13},$$
$$\tilde{A}_{21} = \tilde{L}_{21}\tilde{U}_{11},\ \tilde{A}_{22} = \tilde{L}_{21}\tilde{U}_{12} + \tilde{L}_{22}\tilde{U}_{22},\ \tilde{A}_{23} = \tilde{L}_{21}\tilde{U}_{13} + \tilde{L}_{22}\tilde{U}_{23},$$
$$\tilde{A}_{31} = \tilde{L}_{31}\tilde{U}_{11},\ \tilde{A}_{32} = \tilde{L}_{31}\tilde{U}_{12} + \tilde{L}_{32}\tilde{U}_{22},\ \tilde{A}_{33} = \tilde{L}_{31}\tilde{U}_{13} + \tilde{L}_{32}\tilde{U}_{23} + \tilde{L}_{33}\tilde{U}_{33}$$

- 第2ステップ

L_{11} を転送、U_{1*}を計算

U_{11} を転送、L_{*1}を計算

- 第3ステップ

LU分解

L_{21}を転送

U_{12}を転送

U_{13}を転送

L_{31}を転送

ブロック形式ガウス法

- 対角要素がLU分解して、行方向、列方向に部分的なLU分解を転送する。
- ブロック形式ガウス法の実現法は二通りある
  1. 実際に小行列L、Uの逆行列を求める方法
     例） $L_{21} = A_{21} U_{11}^{-1}$
  2. 逆行列を求めず、LU分解を用いる方法
     例） $A_{21} = L_{21} U_{11}$
- 1の実装の場合、行列-行列積が主演算となる
  - 高効率で実装可能

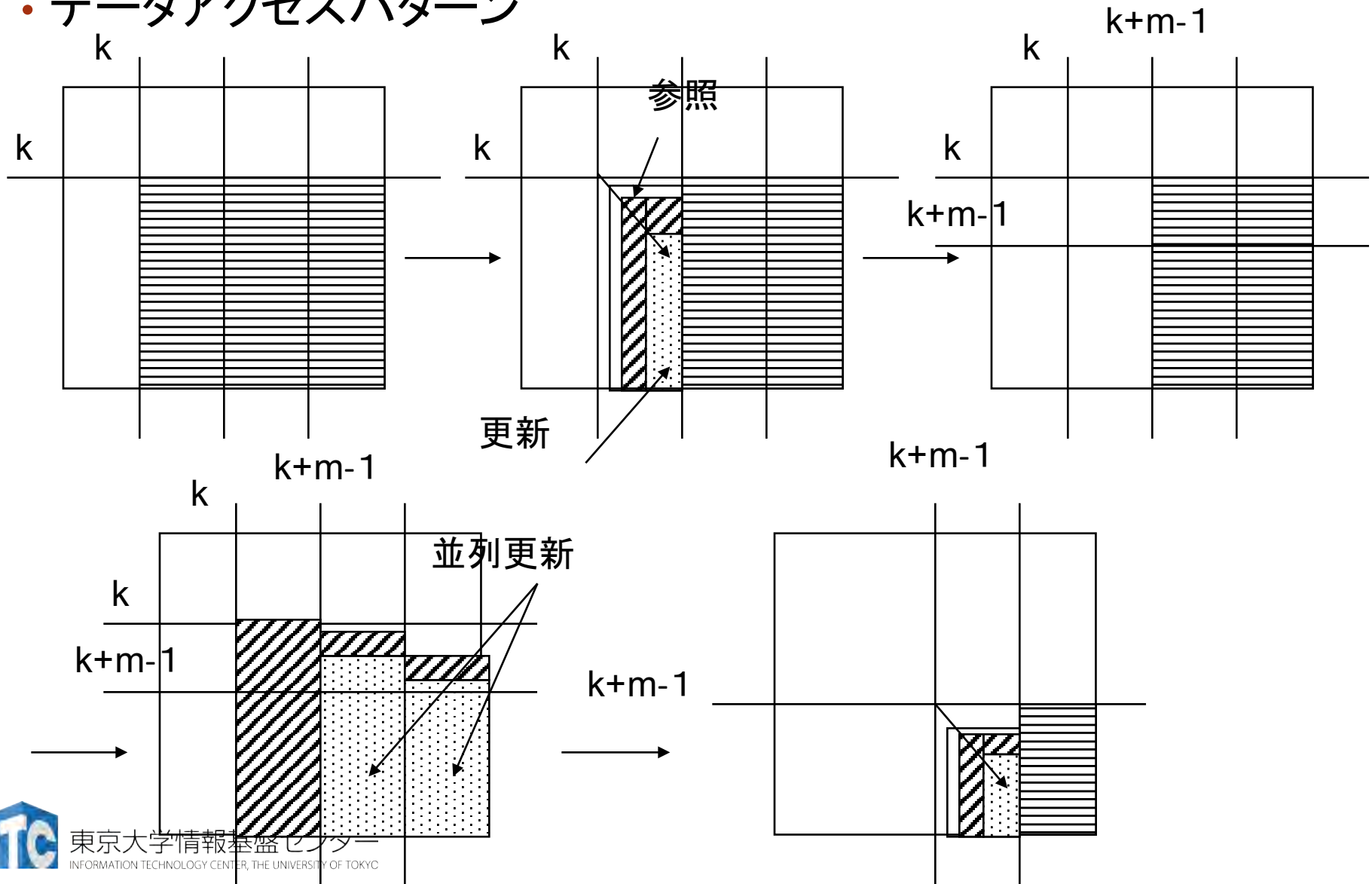
縦ブロックガウス法

- 縦ブロックガウス法は、列方向のみデータを分割する方法（cf. ブロック形式ガウス法）
- 並列化した場合、PE内に列データを全て所有しているため、ピボッティング処理が実装しやすい
  - ブロック形式ガウス法は実装が難しい
- 外積形式ガウス法の並列化に比べ
  1. 通信回数の削減
  2. ループアンローリングによる性能向上

  が期待できる

縦ブロックガウス法

- データアクセスパターン



縦ブロックガウス法

- 縦ブロックガウス法は、ある幅ごとにLU分解を行う
  - この幅のことを*ブロック幅*とよぶ
  - ブロック幅を用いて設計されたアルゴリズムを一般的に*ブロック化アルゴリズム*とよぶ
- ブロック化をすることで、演算カーネルが２重ループ（レベル2　BLAS）から、３重ループ（レベル3　BLAS）になる
  - 実装による性能向上が得られやすい

縦ブロックガウス法（C言語）

- 実際のカーネル部分

```
for (jm=k;  jm<k+m;  jm++)  {
    for (j=k+m;  j<n;  j++)  {
        dakj = A[jm][j];
        for (i=jm+1;   i<n;   i++)  {
            A[i][j]=A[i][j] - A[i][jm]*dakj;
        }
    }
}
```

- ループ jm，j，i についてループの展開（ループアンローリング）可能

縦ブロックガウス法（C言語）

- jmについて2段のアンローリング

```
for (jm=k;  jm<k+m; km+=2) {
    for (j=k+m;  j<n;  j++) {
        dakj0 = A[jm    ][j];
        dakj1 = A[jm+1][j];
        for (i=jm+1; i<n;  i++) {
            A[i][j]=A[i][j] - A[i][jm    ]*dakj0
                            - A[i][jm+1]*dakj1;
        }
    }
}
```

縦ブロックガウス法（C言語）

- さらにjについても、2段のアンローリング

```
for (jm=k;  jm<k+m;  km+=2) {
   for (j=k+m;  j<n;  j+=2) {
      dakj00 = A[jm   ][j  ];
      dakj10 = A[jm+1][j  ];
      dakj01 = A[jm   ][j+1];
      dakj11 = A[jm+1][j+1];
      for (i=jm+1;  i<n;  i++) {
         A[i][j   ]=A[i][j   ] -A[i][jm   ]*dakj00
                               - A[i][jm+1]*dakj10;
         A[i][j+1]=A[i][j+1] -A[i][jm   ]*dakj01
                               - A[i][jm+1]*dakj11;
      } } }
```

- この処理は、ループ内で2段2列分の消去を同時にしているとみなせる （*多段多列同時消去法*）

縦ブロックガウス法（Fortran言語）

- 実際のカーネル部分

```
do jm=k, k+m
   do j=k+m+1 ,  n
      dakj = A(jm, j)
      do i=jm +1 ,  n
         A (i, j) = A(i, j) – A(i, jm) * dakj
       enddo
    enddo
 enddo
```

- ループ jm, j, i についてループの展開（ループアンローリング）可能

縦ブロックガウス法（Fortran言語）

- jmについて2段のアンローリング

```
do jm=k, k+m-1 , 2
   do j=k+m,  n
      dakj0 = A(jm     , j)
      dakj1 = A(jm+1 , j)
      do i=jm+1 , n
         A(i, j) = A(i, j) -  A(i, jm    ) * dakj0
 &                         -  A(i, jm+1 ) * dakj1
      enddo
   enddo
  enddo
```

縦ブロックガウス法（Fortran言語）

- さらにjについても、2段のアンローリング

```
do jm=k, k+m-1 , 2
  do j=k+m, n, 2
     dakj00 = A(jm     , j  )
     dakj10 = A(jm+1 , j  )
     dakj01 = A(jm    , j+1 )
     dakj11 = A(jm+1 , j+1 )
     do i=jm+1 , n
        A(i, j    ) =A(i, j    )  - A(i , jm    ) *dakj00
&                                  - A(i , jm+1 ) *dakj10
        A(i, j+1 ) =A(i, j+1 ) - A(i , jm    ) *dakj01
&                                  -A(i , jm+1 ) *dakj11
  enddo; enddo; enddo
```

- この処理は、ループ内で2段2列分の消去を同時にしているとみなせる （*多段多列同時消去法*）

縦ブロックガウス法

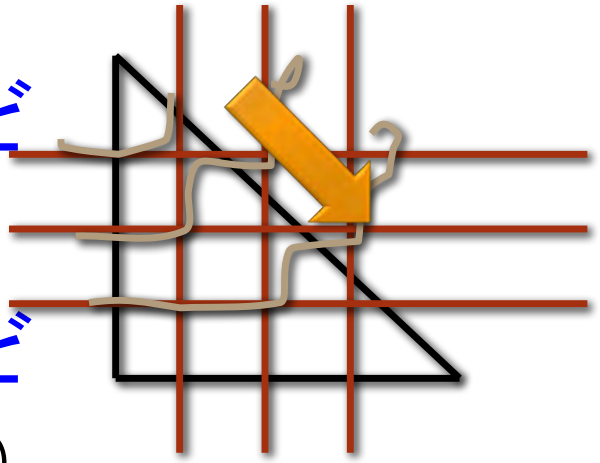
- ブロック化するとできる通信隠蔽
- 縦ブロックガウス法において、データを列方向ブロックサイクリック分散（＊，Cyclic(m)）するだけで実現可能

- LU分解が必要なブロックを所有するPE
  1. 優先してLU分解を行い結果を放送
  2. その他の行列更新を行う
- そのほかのPE
  1. LU分解データ受信待ち
  2. 行列更新

通信と計算のオーバーラップ→通信時間隠蔽

3.4.3 代入計算

- 行列Aを固定、右辺bを変えて計算する場合は前進代入、後退代入を並列化する必要がある
- 結論：データ分散により、処理パターンは異なるが並列化可能
- 列方向分散方式（＊，Block）など
  - ウエーブフロント処理で並列化
- 行方向分散方式（Block，＊）など
  - 列単位で並列性（放送処理が必要）



サンプルプログラムの実行（LU分解法）

LU分解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
  LU-fx.tar
- ジョブスクリプトファイルlu.bash　中の
  キュー名を　lecture から
  lecture8　(工学部共通科目)、

  に変更し、pjsub　してください。
  - lecture :　実習時間外のキュー
  - lecture8:　実習時間内のキュー

LU分解法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 /home/z30105/LU-fx.tar ./
  $ tar xvf LU-fx.tar
  $ cd LU
- 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
  $ pjsub lu.bash
- 実行が終了したら、以下を実行する
  $ cat lu.bash.oXXXXXX

LU分解法のサンプルプログラムの実行（C言語）

- 以下のような結果が見えれば成功

```
N  = 192
LU solve time  = 0.004611 [sec.]
 1051.432427 [MFLOPS]
Pass value: 3.017485e-07
Calculated value: 2.232057e-10
 OK! Test is passed.
```

LU分解法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  =  192
LU solve time[sec.] =
 4.647028981707990E-03
MFLOPS =  1043.219661224964
Pass value:  3.017485141754150E-07
Calculated value:  1.742616051458867E-10
OK! Test is passed.
```

Fortran言語のサンプルプログラムの注意

- 行列サイズN（および、プロセッサ数NPROCS）の宣言は、以下のファイルにあります。

  lu.inc

- 行列サイズ変数が、NNとなっています。

```
integer  NN
parameter (NN=192)
```

サンプルプログラムの説明

- #define N 192
  - 数字を変更すると、行列サイズが変更できます
- #define MATRIX 1
  - 生成行列の種類の指定です
  - 「1」にすると、枢軸選択なしでも解ける行列を設定します
  - 「1以外」にすると、乱数で行列を設定します。
    この行列を解くには、枢軸選択処理が必要です。
    （サンプルプログラムでは解けません）
- 解の検査方法
  - 解ベクトルxが1ベクトルとなるように、Ax=bの右辺bを計算して設定しています。
  - 残差ベクトルの2ノルムが、|A|*N より大きくなるとエラーです。

サンプルプログラムの説明

- MyLUSolve関数の仕様
  - double型の密行列Aと、右辺ベクトルbを入力とします。
  - LU分解を用いてAx=bを求解し、解ベクトルxを出力します。
  - LU分解のアルゴリズムは外積形式（right-looking）です。
- その他
  - N=192の時の、LU分解後の行列Aの値、およびベクトルcの値（C言語のもの）が、ファイル luAc.dat にあります。デバックに活用してください。

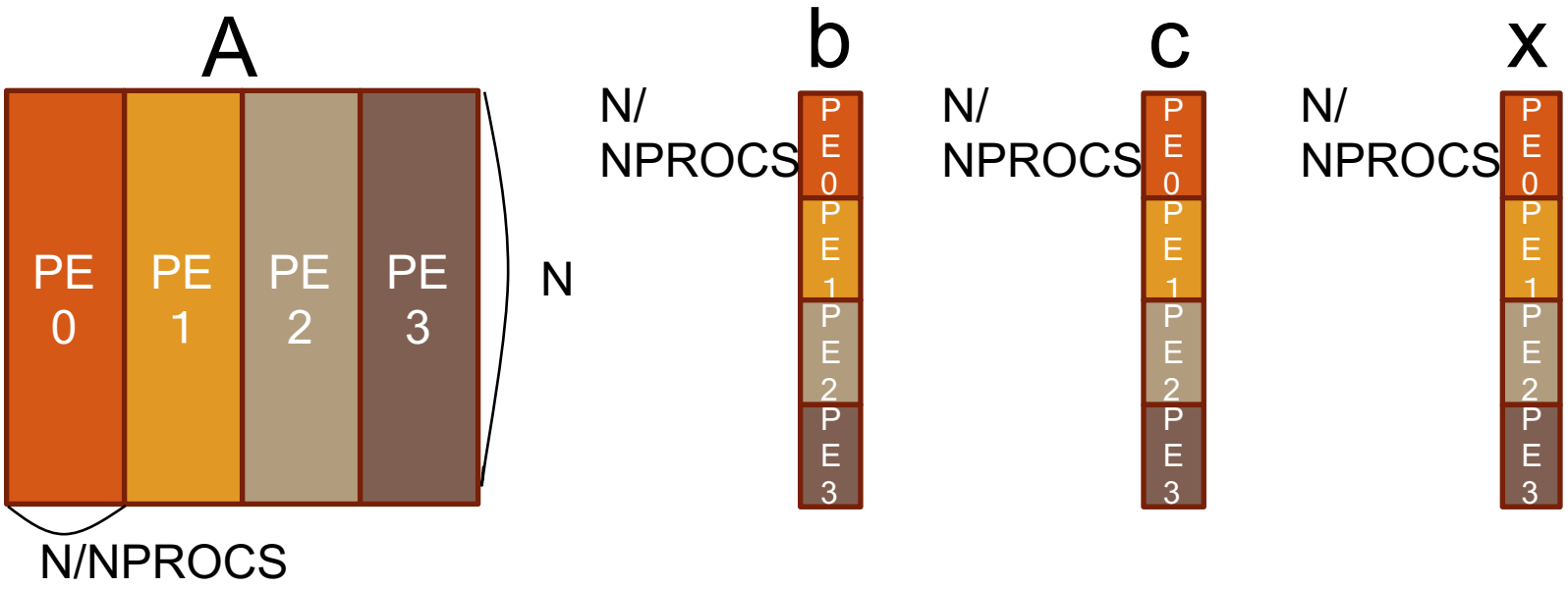
演習課題

- MyLUSolve関数を並列化してください。
  - 中級以上のレベルであり、簡単ではありません。
  - とりあえずN=192で並列化してください。
  - できたらN＝192以上の大きな値にして実行してください。
    - N=192で動いても、N=384で動かなくなることがあります。
      これは、おそらく、前進代入か、前進消去部分が間違っています。
    - 何が問題か分からなくなった時は、
      1. LU分解後のAの値を表示、OKなら
      2. ベクトルcの値を表示、OKなら
      3. ベクトルxの値を表示

    というように、段階を経て部分を特定し、地道にデバックしてください。
    これは、並列プログラミングの鉄則です。

並列化のヒント：データ分散方式

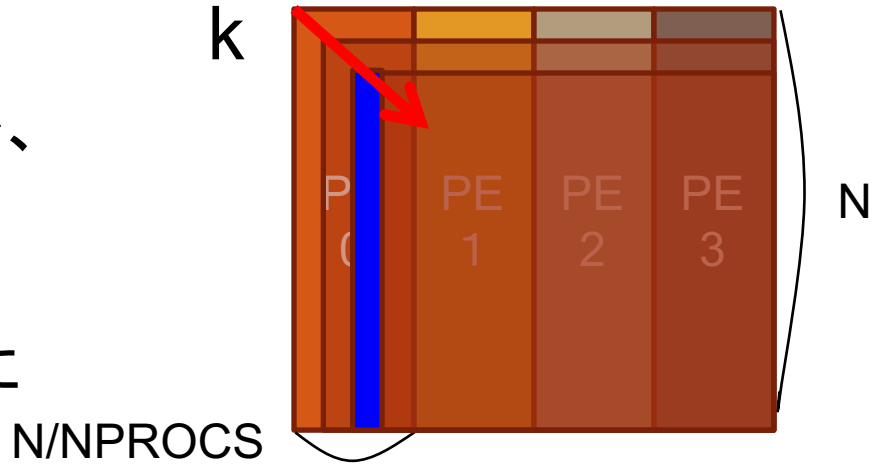
- 行列A、およびベクトルb, c, xの計算担当領域は以下のようにすると簡単です。（それぞれ各PEで重複して持ちます）
  （ただし以下は4PEの場合で、実習環境は192PEです。）



- 1対1通信関数(MPI_Send, MPI_Recv)のみで実装できます。
- 受信用バッファ（buf[N]）が必要です。

並列化のヒント:LU分解部分

- LU分解部分は、行列Aに関して、最外のk-ループが1づつ変動し消去部分が1づつ小さくなっていきます。
- 現在のkにおいて、対角要素から1行(右図の青いベクトル、枢軸ベクトルと呼ぶ)は、消去に必要な情報です。
- 枢軸ベクトルなしでは、並列に消去できません。



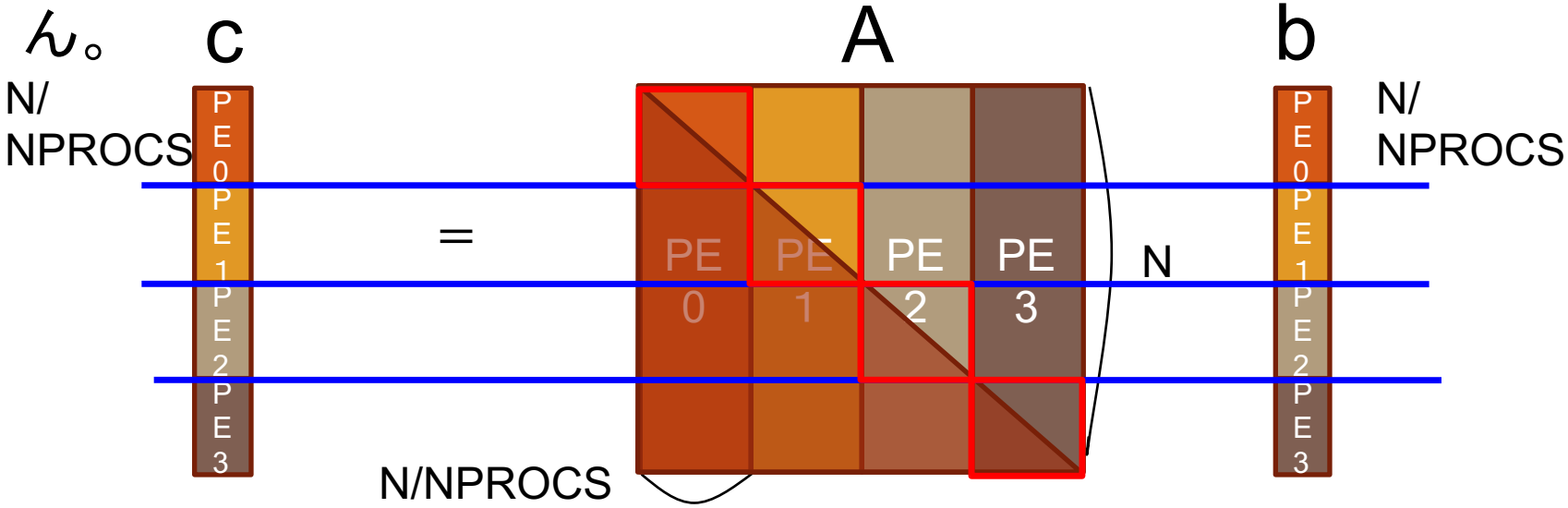
- 以上から、並列化する際、以下を考慮する必要があります。
  1. 対角要素を持っているPE番号をどう計算するか
  2. 対角要素を持っているPEは、担当範囲が1つ小さくなる
  3. 対角要素を持っているPEは、枢軸ベクトルを放送する。(その他のPEは受け取る。)

並列化の道具

- 対角要素を持っているPE番号は、（＊，BLOCK）分割方式の場合で、かつk-ループ（k行目）の場合、以下のようになる.
  - k / ib,
    ここで，ib = n / numprocs;
- 枢軸ベクトルを放送する相手は、自分のPE番号より大きく、numprocs –1番までのPEである。

並列化のヒント：前進代入部分

- 前進代入部分は、このデータ分散方法では、対角ブロック部分に相当するベクトルcの要素すべて決定し、その後、対角ブロックに相当するベクトルcが各PEで参照されます。
- 対角ブロック部分の値が決定しないと、次の処理に進めません。

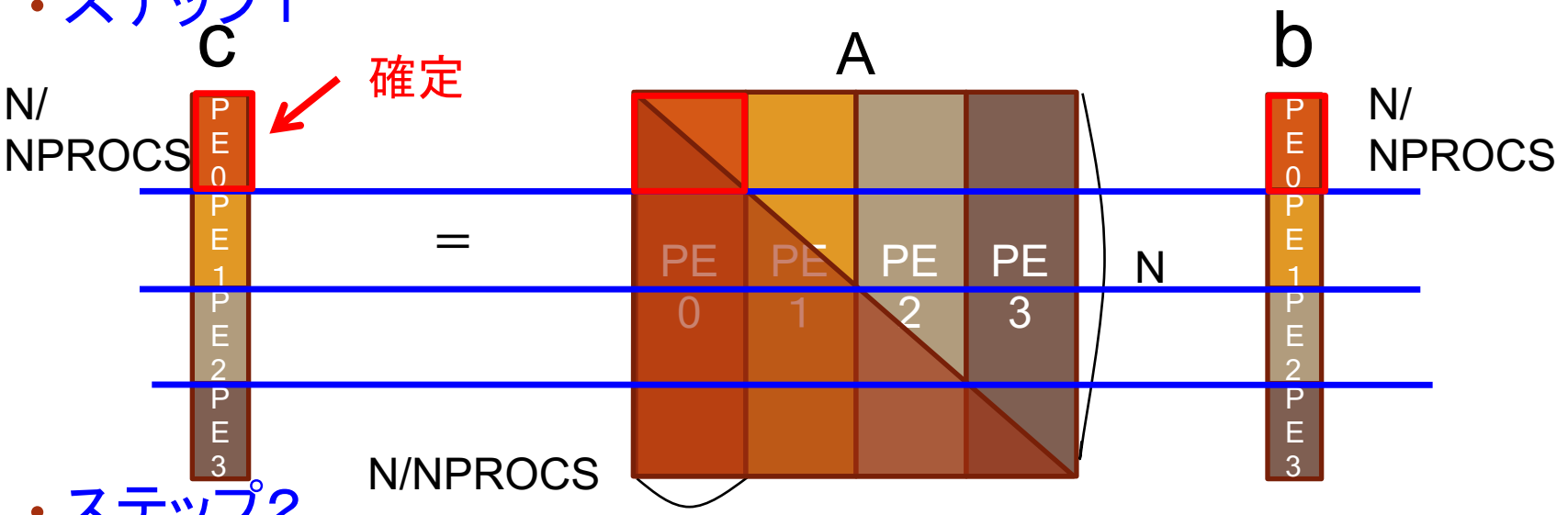


並列化のヒント：前進代入部分

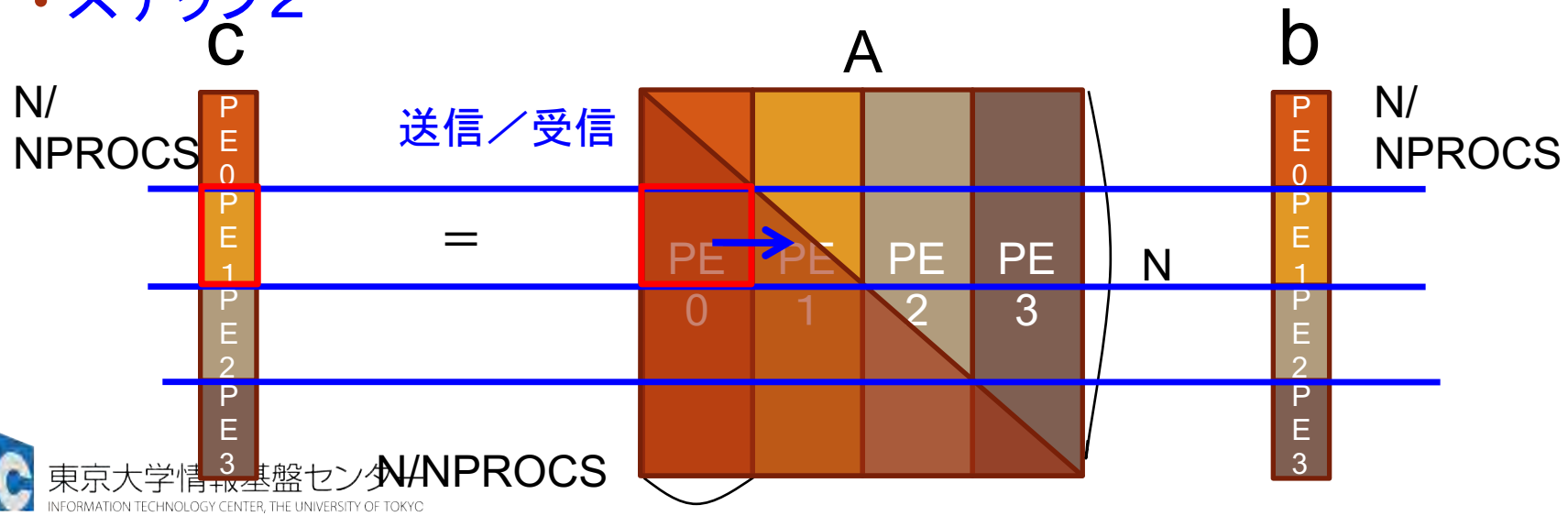
- 以上をまとめると：
  1. 最外ループkは、ブロック幅ibごとに進みます
  2. 対角ブロックを持っているPEは、対角ブロック用の計算（←注意）をして、対応するcの要素を確定します。
     - 対角ブロックを持っているPEの判定方法は、LU分解の場合と同じです。
  3. 対角ブロックをもつPEは、myid－１から計算している
     cの部分を受け取り、計算後、myid+1に結果を送る。
     - PE0は受け取らない、PE　numprocs-1は送らない
  4. 対角ブロック担当PEは、計算結果を送らない。

前進代入部分:処理の流れ

- ステップ1

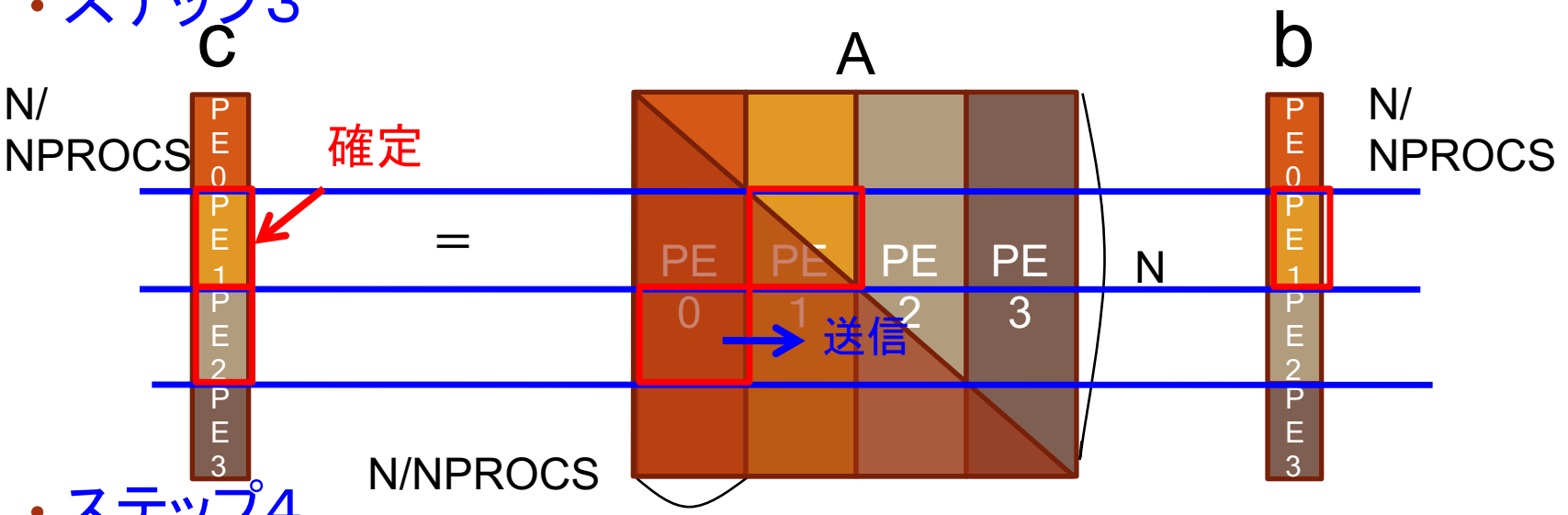


- ステップ2

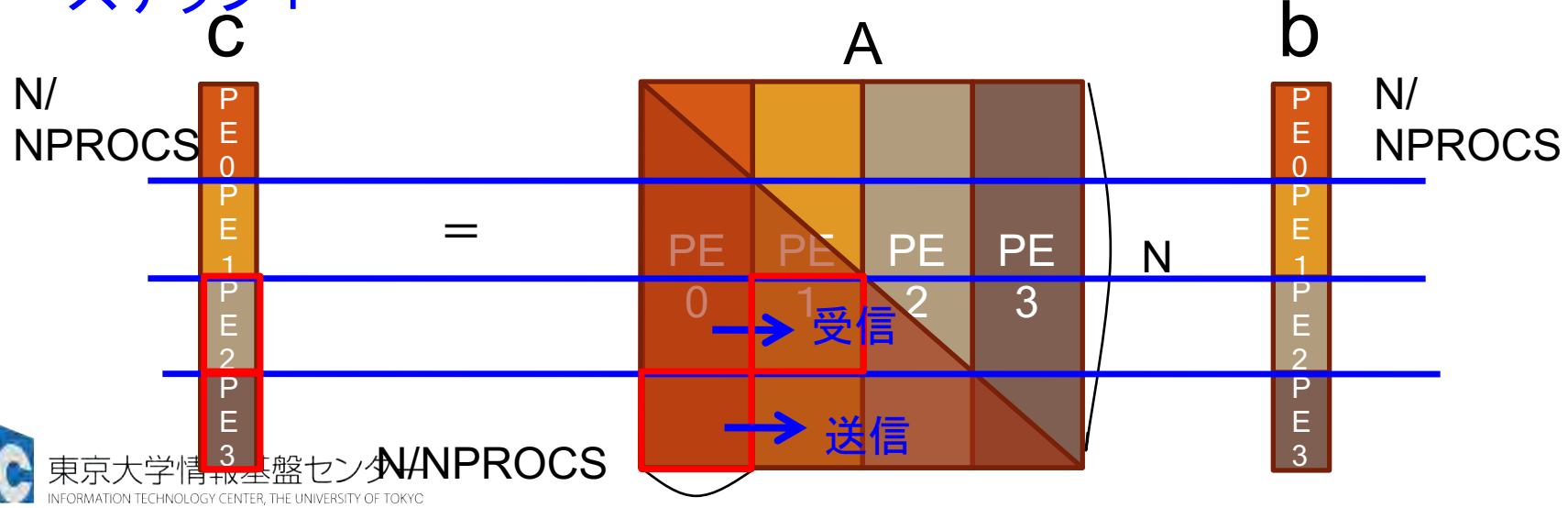


前進代入部分：処理の流れ

- ステップ3



- ステップ4

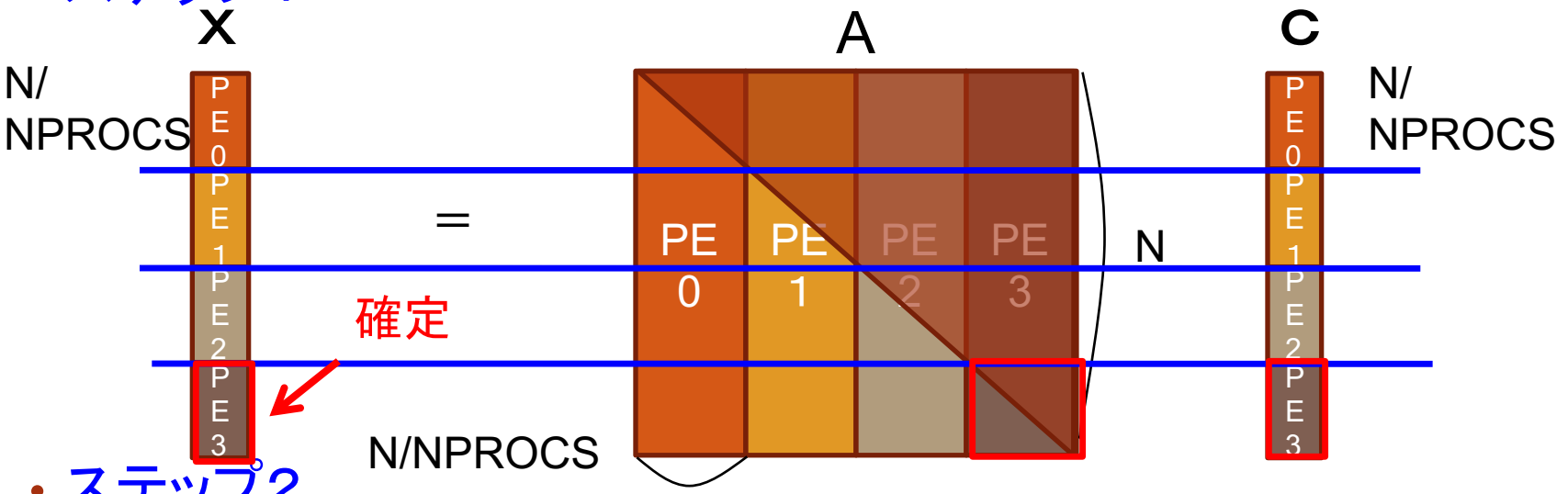


後退代入部分

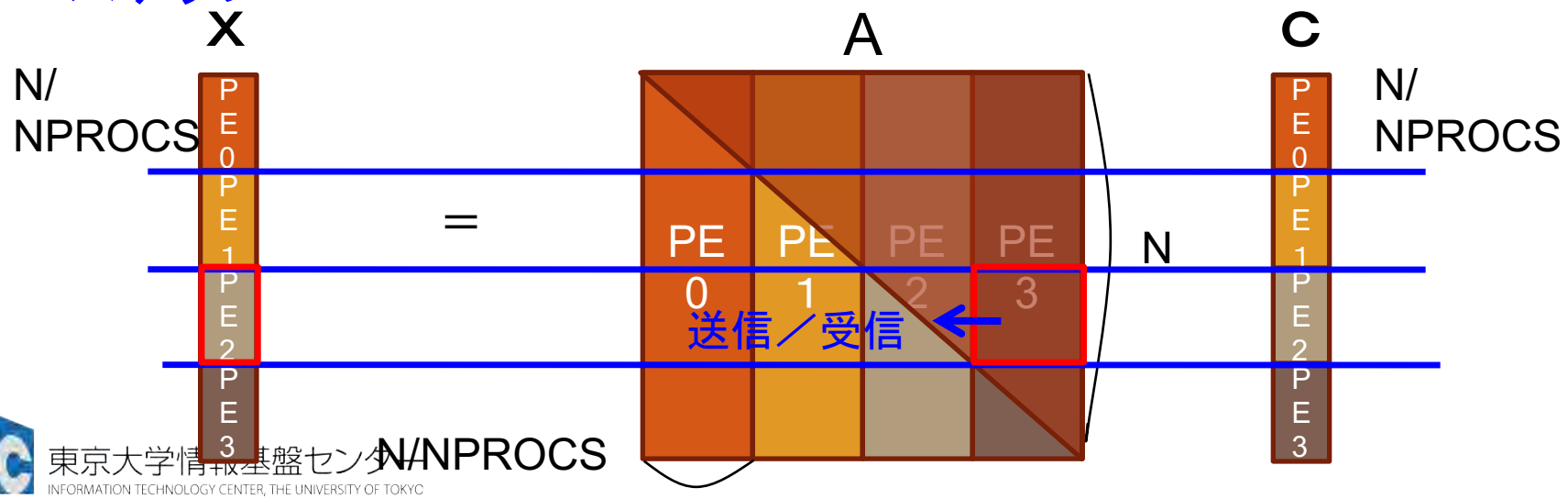
- 前進代入と同様な処理をします。
  - ただし後退代入は前進代入に比べ、以下の違いがあります。
    1. 後ろから処理が始まります
    2. 対角ブロックでの、行列Aの対角要素の割り算が必要です

後退代入部分

- ステップ1



- ステップ2



レポート課題

1. [L20] MyLUSolve関数を並列化せよ。各PEで行列Aについて、すべての範囲を確保してよい。
2. [L25] MyLUSolve関数を並列化せよ。各PEで行列Aについて、最低限の範囲を確保せよ。
3. [L30] MyLUSolve関数を並列化せよ。枢軸選択処理を実装せよ。

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. [L30]　MyLUSolve関数を、同時多段多列消去法を用いて並列化せよ。また、同時多段多列の個数（ブロック幅）をチューニングして、性能を評価せよ。
5. [L35]　4.　に加え、各ループにアンローリングを施し、性能をチューニングせよ。
6. [L40]　5. に加え、ノンブロッキング通信を用いて通信処理を高速化せよ. LU分解、前進代入、後退代入処理において、通信と計算がオーバラップするようなアルゴリズムを採用せよ。ここで前進代入、後退代入処理においては、ウエーブフロント処理を考慮すること。

来週へつづく

LU分解法（2）