

べき乗法

東京大学情報基盤センター 准教授 埴 敏博

2017年5月31日(水) 10:25-12:10

レポートおよびコンテスト課題
(締切:
2017年8月7日(月)24時 厳守

講義日程(工学部共通科目)

- ~~1. 4月5日: ガイダンス~~
- ~~2. 4月19日~~
 - ~~● 並列数値処理の基本演算(座学)~~
- ~~3. 4月26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1限~~
 - ~~● 行列・ベクトル積の並列化~~
7. 5月31日2限
 - べき乗法の並列化
8. 6月7日
 - 行列-行列積の並列化(1)
9. 6月14日
 - 行列-行列積の並列化(2)
10. 6月28日
 - LU分解法(1)
 - コンテスト課題発表
11. 7月5日
 - LU分解法(2)
12. 7月12日
 - LU分解法(3)
13. 7月18 (補講日) or 19日
 - 新しいスパコンの紹介・お試し、他

講義の流れ

1. べき乗法とは
2. べき乗法のサンプルプログラムの実行
3. サンプルプログラムの説明
4. 並列化実習
5. レポート課題

べき乗法とは

簡単な数値アルゴリズム

べき乗法とは

- べき乗法は、標準固有値問題の〈最大固有値〉と、それに付随する〈固有ベクトル〉を計算できます。
 - 標準固有値問題: $Ax = \lambda x$
 - 固有値: λ 固有ベクトル: x
- いま、行列Aを $n \times n$ の正方行列とします。
- 行列Aの固有値を、絶対値の大きい方から整列し、かつ重複していないものを $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$ とします。
- 正規直交なベクトルを x_1, x_2, \dots, x_n とします。
- このとき、任意のベクトルは、以下の線形結合で表わされます。

$$u = c_1 x_1 + c_2 x_2 + \dots + c_n x_n$$

べき乗法とは

- Aを左辺に作用させると

$$Au = A(c_1x_1 + c_2x_2 + \cdots + c_nx_n)$$

- さらに標準固有値問題の等式を考慮すると

$$Au = c_1\lambda_1x_1 + c_2\lambda_2x_2 + \cdots + c_n\lambda_nx_n$$

$$= \lambda_1 \left[c_1x_1 + c_2 \frac{\lambda_2}{\lambda_1} x_2 + \cdots + c_n \frac{\lambda_n}{\lambda_1} x_n \right]$$

べき乗法とは

- Au の積を、 n 回行くと

$$A^k u = \lambda_1^k \left[c_1 x_1 + c_2 \left[\frac{\lambda_2}{\lambda_1} \right]^k x_2 + \dots + c_n \left[\frac{\lambda_n}{\lambda_1} \right]^k x_n \right]$$

- すなわち、 k が増えていくと、段々 x_1 以外のベクトルの係数が小さくなっていく。
→ 最大固有値、および、それに付随する固有ベクトルに収束する

べき乗法とは

- 内積を (x, y) と記載する。このとき、以下の計算を考える。

$$\frac{(A^{k+1}u, A^{k+1}u)}{(A^{k+1}u, A^k u)} = \frac{\sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n c_i c_j \lambda_i^{k+1} \lambda_j^{k+1} (x_i, x_j)}{\sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n c_i c_j \lambda_i^{k+1} \lambda_j^k (x_i, x_j)}$$

$$= \frac{\lambda_1^{2k+2} \left[c_1^2 |x_1|^2 + \sum_{i=2}^n c_i^2 \left[\frac{\lambda_i}{\lambda_1} \right]^{2k+2} |x_i|^2 \right]}{\lambda_1^{2k+1} \left[c_1^2 |x_1|^2 + \sum_{i=2}^n c_i^2 \left[\frac{\lambda_i}{\lambda_1} \right]^{2k+1} |x_i|^2 \right]} \approx \lambda_1 \quad (k \rightarrow \infty)$$

べき乗法のアルゴリズム

- 以下の手順を、収束するまで行う

1. 適当なベクトル x を作り、正規化;
2. $\lambda_0 = 0.0$; $i=1$;
3. 行列積 $y = Ax$;
4. 近似固有値 $\lambda_i = (y, y) / (y, x)$ を計算;
5. $|\lambda_i - \lambda_{i-1}|$ が十分小さいとき:
 - 収束したとみなし終了;
6. そうでないなら:
 - x を正規化して $x = y$;
 - $i = i + 1$; 3.へ戻る;

サンプルプログラムの実行 (べき乗法)

はじめての数値アルゴリズムの並列化

行列-ベクトル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

PowM-rb.tar

- ジョブスクリプトファイル **powm.bash** 中のキュー名を

u-lecture から

u-lecture9 (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-lecture9**: 実習時間内のキュー

べき乗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 /lustre/gt19/z30105/PowM-rb.tar ./
$ tar xvf PowM-rb.tar
$ cd PowM
```
- 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 powm.bash
```
- 実行が終了したら、以下を実行する

```
$ cat powm.bash.oXXXXXX
```

べき乗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 = 4000

Power Method time = 0.302606 [sec.]

Eigenvalue = 2.000342e+03

Iteration Number: 9

Residual 2-Norm $\|Ax - \lambda x\|_2 =$
2.580798e-12

べき乗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

N = 4000

Power Method time[sec.] = 0.463127851486206

Eigenvalue = 1999.74828723792

Iteration Number: 13

Residual 2-Norm $\|Ax - \lambda x\|_2 =$
3.163763521309400E-012

サンプルプログラムの説明

- `#define N 4000`
の、数字を変更すると、行列サイズが変更できます
- **PowM関数の仕様**
 - 戻り値は、最大固有値 (Double型)
 - Double型の配列xに、最大固有値に付随する固有ベクトルが格納される。
 - 引数n_iterに収束するまでの反復回数が入る。
 - “-1”が戻る場合、反復回数の上限MAX_ITERまでに収束しなかったことを意味する。

Fortran言語のサンプルプログラムの注意

- 行列サイズNN、およびMAX_ITERの宣言は、以下のファイルにあります。

`powm.inc`

- 行列サイズ変数が、NNとなっています。

`integer NN`

`parameter (NN=4000)`

サンプルプログラムの概略 (PowM関数内)

```

/* Normization of x */
d_tmp1 = 0.0;
for(i=0; i<n; i++) {
    d_tmp1 += x[i] * x[i];
}
d_tmp1 = 1.0 / sqrt(d_tmp1);
for(i=0; i<n; i++) {
    x[i] = x[i] * d_tmp1;
}

```

ベクトルx
正規化部分

```

/* Main iteration loop ----- */
for(i_loop=1; i_loop<MAX_ITER; i_loop++) {

```

```

/* Matrix Vector Product */
MyMatVec(y, A, x, n);

```

行列-ベクトル積
部分

```

/* inner products */
d_tmp1 = 0.0;
d_tmp2 = 0.0;
for (i=0; i<n; i++) {
    d_tmp1 += y[i] * y[i];
    d_tmp2 += y[i] * x[i];
}

```

行列xとyの
内積部分

```

/* current approximately eigenvalue */
dlambda = d_tmp1 / d_tmp2;

```

```

/* Convergence test*/
if (fabs(d_before-dlambda) < EPS ) {
    *n_iter = i_loop;
    return dlambda;
}

```

```

/* keep current value */
d_before = dlambda;

```

```

/* Normalization and set new x */
d_tmp1 = 1.0 / sqrt(d_tmp1);
for(i=0; i<n; i++)
    x[i] = y[i] * d_tmp1;

```

正規化と
新しいx
設定部分

```

} /* end of i_loop ----- */

```

演習課題

- PowM関数(手続き)を並列化してください。
 - デバック時は、`#define N 288` としてください。
 - 前回演習の並列行列-ベクトル積ルーチンを利用してください。
- サンプルプログラムでは、残差ベクトル $Ax - \lambda x$ の2-ノルムを計算しています。デバックに活用してください。
 - つまり、この値が十分小さくないとバグっています。
 - 固有ベクトル x の分散方式により、残差ベクトル計算部分の並列化が必要になります。注意してください。
- 並列化すると、反復回数(=実行時間)や残差の2ノルム値が変化することがあります。

並列化の注意

- 以下のようなプログラムを書くと、美しくない&コードマネージが大変になる。

同じプログラム

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

- 並列化の対象のループは1つにし、ループ制御変数を工夫し、並列化するように心がける。

並列化のヒント

- 前回示した方針のように、すべてのPEで重複して、行列 A を $N \times N$ 、ベクトル x, y を N のサイズで確保すると、実装が簡単です。
- 以下の分散方式を仮定します。
(先週の行列-ベクトル積の演習と同じ)
 - 行列 A :
1次元行方向ブロック分割方式
 - ベクトル x :
全PEで、 N 次元ベクトルを重複所有
 - ベクトル y :
ブロック分割方式

並列化のヒント(1.「行列-ベクトル積」のみ)

- 以下の2通りの＜並列化方針＞があります
 - 方法1: 「行列-ベクトル積」のみ並列化
 - 方法2: すべてを並列化
- **最も簡単な方法は方法1。**以下はその手順:

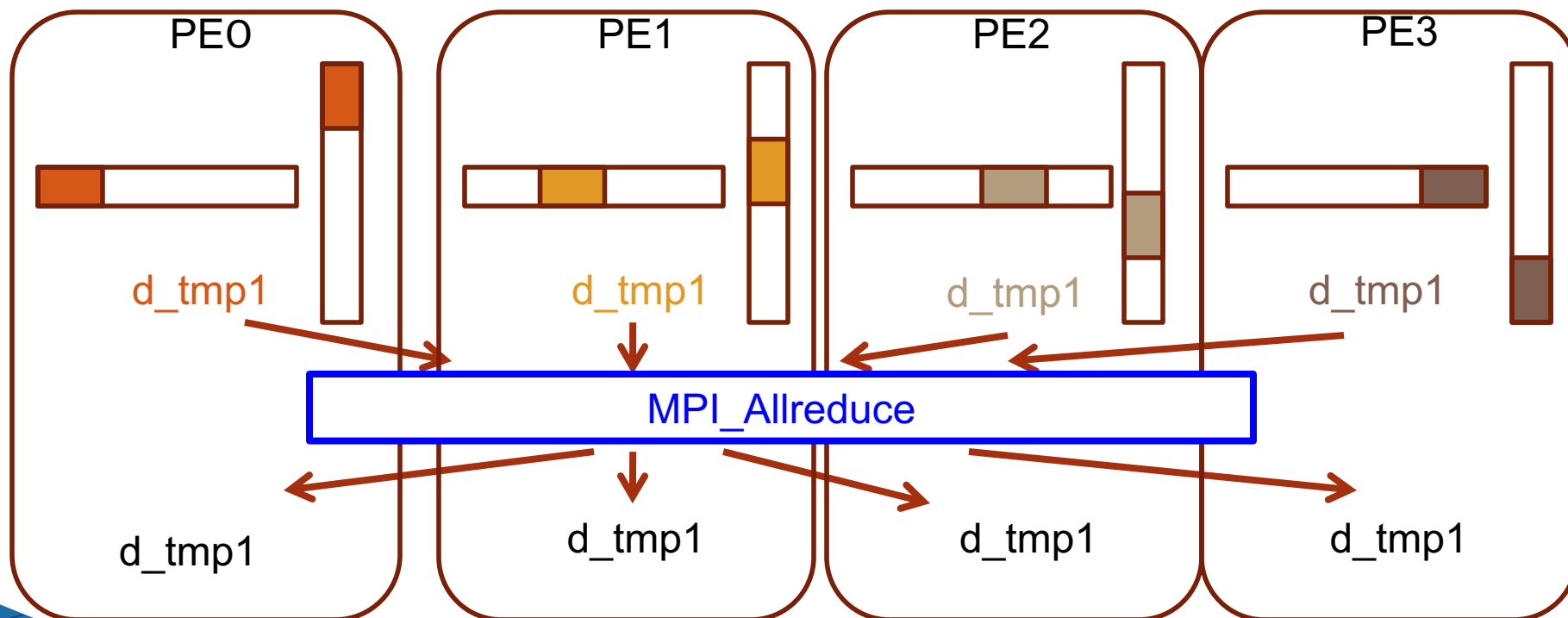
1. 開発した「並列行列-ベクトル積」コードを使う
2. $y = Ax$ の y が分散されて戻るため、以降の計算が逐次の結果と合わない。逐次結果と一致させるため、
 - MPI関数を **PowM関数中の MyMatVec()** が呼ばれる直後に入れて、分散された y の要素すべてを収集する。
 - 最も簡単な実装は、MPI_Allreduce() を用いる実装
3. **MPI_Allreduce()**を利用するため、配列の初期化(ゼロクリア)を実装する。(後述の方式)

並列化のヒント(2. すべてを並列化時)

- PowM関数中の処理を、以下の方針で並列化

1. ベクトルxの正規化部分

- ① ブロック分割の内積計算を計算後、MPI_Allreduce関数(下図)を呼ぶ
- ② MPI_Allreduce関数を使って、部分的に計算された計算結果を、全PEが全ベクトル要素を所有するようにする(後述)



並列化のヒント(2.すべてを並列化時)

- 以下のようなプログラムになる

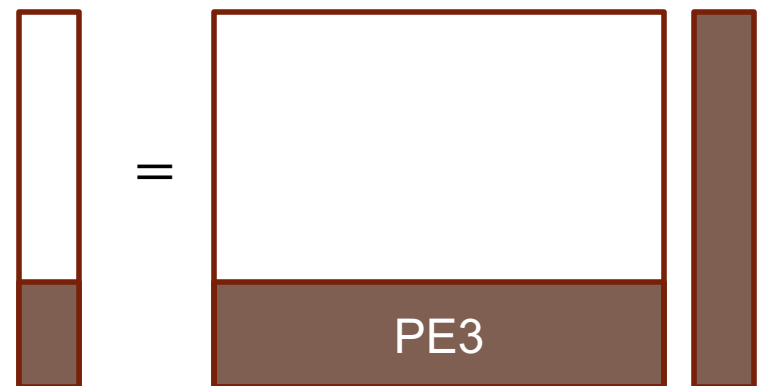
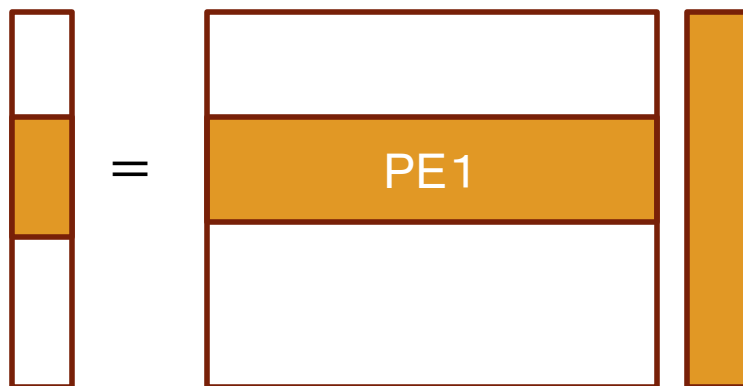
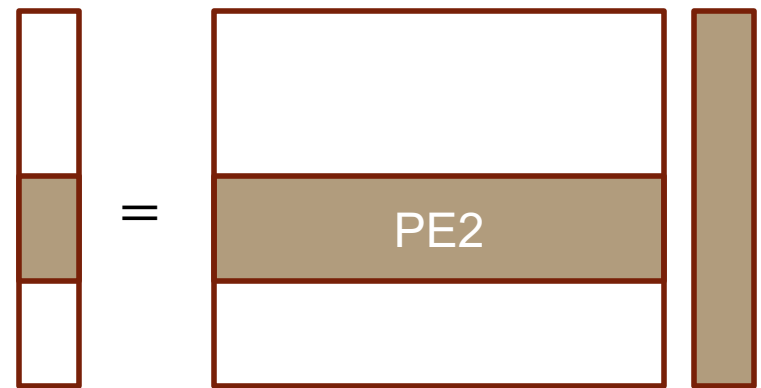
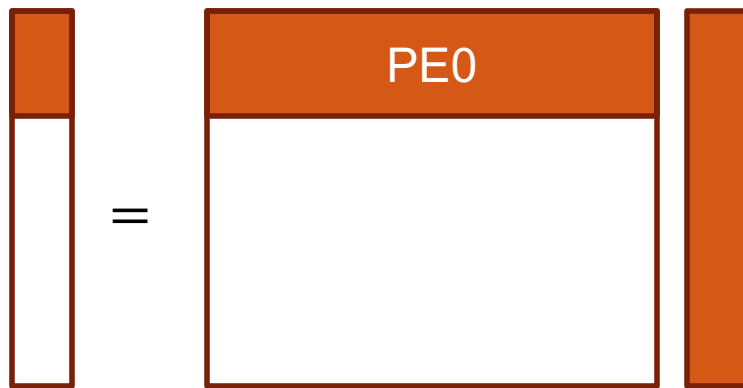
```
/* Normalization of x */
...
d_tmp1_t = 0.0;
for(i=myid*ib; i<i_end; i++) {
    d_tmp1_t += x[i] * x[i];
}
MPI_Allreduce(&d_tmp1_t, &d_tmp1, 1, MPI_DOUBLE,
    MPI_SUM, MPI_COMM_WORLD);

d_tmp1 = 1.0 / sqrt(d_tmp1);
for(i=myid*ib; i<i_end; i++) {
    x_t[i] = x[i] * d_tmp1;
}
(x_t[]は、ゼロに初期化をしているか要確認)
MPI_Allreduce(x_t, x, n, MPI_DOUBLE, MPI_SUM,
    MPI_COMM_WORLD);
....
```

並列化のヒント(方法1および方法2)

2. 行列-ベクトル積部分(MyMatVec関数)

- 前回演習の並列ルーチンを使う



並列化のヒント(方法1および方法2)

3. ベクトル x と y の内積部分

- ブロック分散されているとして計算する
- 正しい内積結果を得るため、`MPI_Allreduce`関数を使うことを忘れずに

並列化のヒント(2.すべてを並列化時)

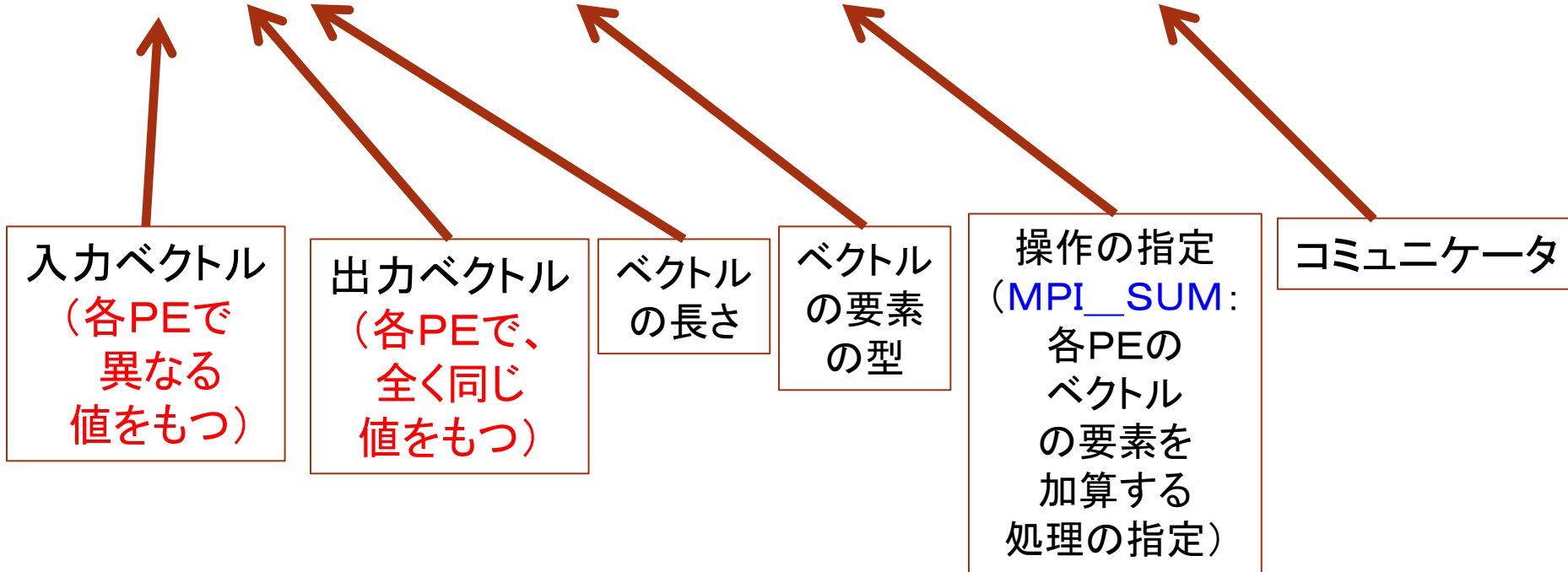
4. 正規化と新しいxの設定部分

- x: 全PEで同じN次元ベクトルを所有; y: ブロック分散
- 正規化はブロック分散部分のみを行い、xに結果を代入
- xは、各PEで計算結果が分散されている。
(xは計算結果がブロック分散)
- xは、全PEで全要素を重複して所有していないと、次の並列行列-ベクトル積が実行できない。
- 各PEに分散されているベクトルxのデータを集めるため、**MPI_Allreduce** 関数を使って集める (後述)。
 - **MPI_Allreduce**関数を使うため、xの計算結果部分以外に0を代入したバッファx_tを用意。
MPI_Allreduce(x_t, x, n, MPI_DOUBLE, MPI_SUM, MPI_COMM_WORLD);

MPI_Allreduce関数の復習(C言語)

• MPI_Allreduce

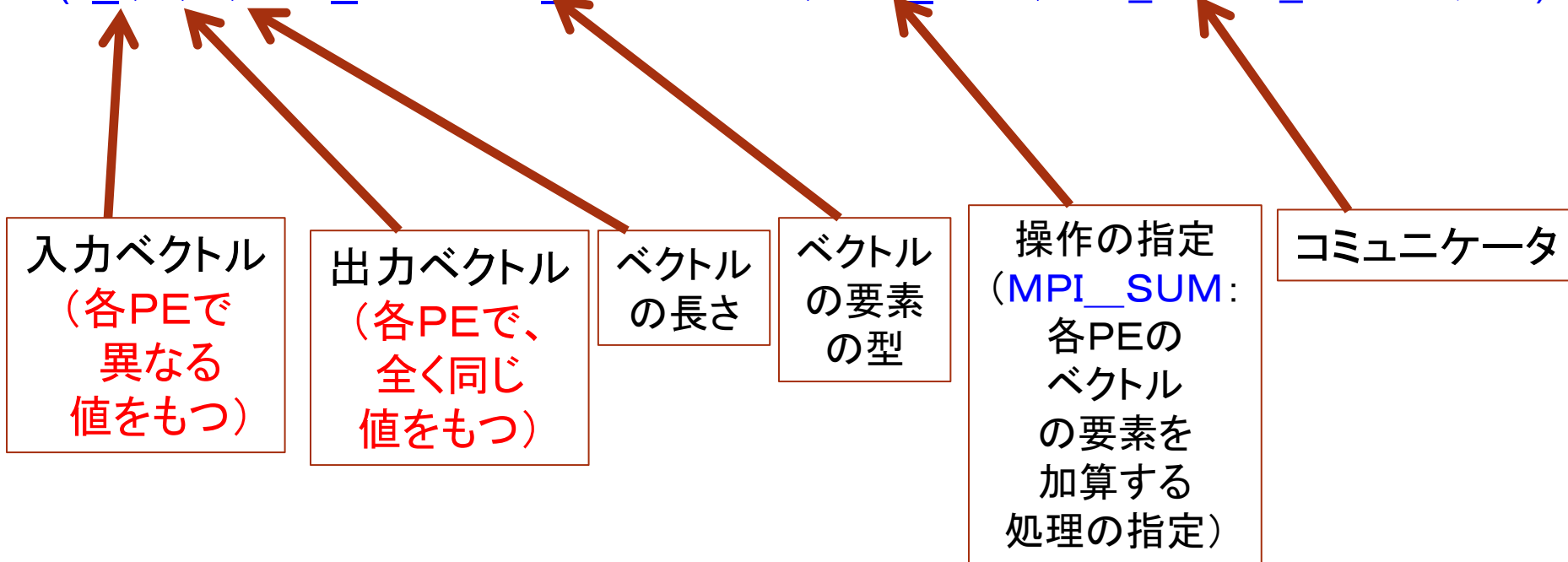
```
(x_t, x, n, MPI_DOUBLE, MPI_SUM, MPI_COMM_WORLD);
```



MPI_Allreduce関数の復習 (Fortran言語)

• MPI_ALLREDUCE

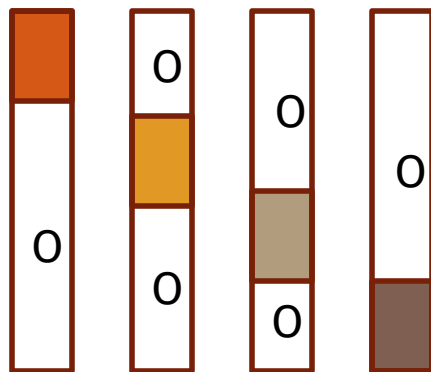
(x_t, x, n, MPI_DOUBLE_PRECISION, MPI_SUM, MPI_COMM_WORLD, ierr)



MPIの技(MPI_Allreduceでベクトル収集)

- `MPI_Allreduce`関数で、各PEに分散されたデータを収集し、全PEに演算結果を<重複して>所有させる方法
 - `iop` に、`MPI_SUM` を指定する
 - 自分が所有するデータ以外の箇所は、0に初期化されている。
 - そのうえで、以下のような処理を考える

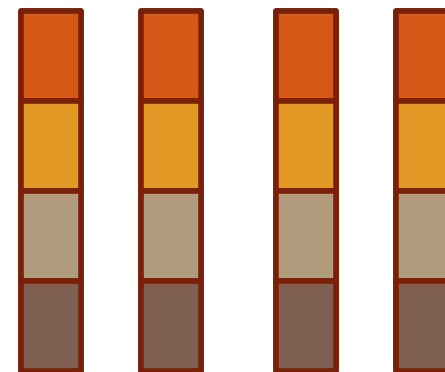
初期状態



PE0 PE1 PE2 PE3

終了状態

`MPI_Allreduce`
`(..,MPI_SUM,..);`



PE0 PE1 PE2 PE3

※`MPI_Gather`関数を使っても実装できます。

実習の手順

- はじめに、簡単な
方法1:「行列-ベクトル積」のみ並列化
を先に行ってください。
- それが終わったら、
方法2:すべてを並列化
を行ってください。

レポート課題

1. [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、yのデータは、全PEで $N \times N$ のサイズを確保してよい。なお、いろいろな問題サイズ(Nの大きさ)について性能評価し、その結果の考察を行え。
2. [L20] サンプルプログラムを並列化し、性能評価と考察を行え。このとき、行列Aおよびベクトルx、y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。また、1と同様な性能評価と考察を行え。特に、
1. と2. で実行時間の違いはあるか評価・考察せよ。

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(続き)

4. [L5] コンパイラによる最適化により、実行時間がどのように変化するか調査せよ。コンパイラの最適化方式により、反復回数が増えることがある。そこで、1反復あたりの実行時間を計算した上で、性能評価を行い考察せよ。
5. [L20] サンプルプログラムの並列化プログラムについて、通信処理をノンブロッキングにするなどの改良して高速化を行え。いろいろな問題サイズについて性能評価を行い、高速化する前のプログラムに対して考察をせよ。
6. [L10~L20] 並列化したプログラムに対し、ピュアMPI実行、および、ハイブリッドMPI実行を行い、演習環境を駆使して、性能評価を行え。(L10)
また、どういう条件でピュアMPI実行が高速になるか、条件を導出し、性能評価結果と検証を行え。(L20)

来週へつづく

行列-行列積の並列化