べき乗法

東京大学情報基盤センター　准教授　塙　敏博

2018年5月22日（火）　10:25-12:10

東京大学情報基盤センター
INFORMATION TECHNOLOGY CENTER, THE UNIVERSITY OF TOKYO

レポートおよびコンテスト課題
（締切：
2018年8月6日（月）24時　厳守

講義日程（工学部共通科目）

1. ~~4月10日(今日): ガイダンス~~
2. ~~4月17日~~
   - ~~並列数値処理の基本演算（座学）~~
3. ~~4月24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1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）（座学）~~
5. ~~5月8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15日~~
   - ~~行列-ベクトル積の並列化~~
7. 5月22日
   - べき乗法の並列化
8. 6月5日
   - 行列-行列積の並列化（1）
9. 6月12日
   - 行列ー行列積の並列化（2）
10. 6月19日
    - LU分解法（1）
    - コンテスト課題発表
11. 7月3日
    - LU分解法（2）
12. 7月10日
    - LU分解法（3）
13. 7月17日
    - RB-Hお試し、非同期通信、研究紹介他

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 $\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_n$ とします。
- 正規直交なベクトルを $x_1, x_2, \cdots, x_n$ 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。

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

べき乗法とは

- Aを左辺に作用させると

$$Au = A(c_1 x_1 + c_2 x_2 + \cdots + c_n x_n)$$

- さらに標準固有値問題の等式を考慮すると

$$Au = c_1\lambda_1 x_1 + c_2\lambda_2 x_2 +,\ldots,+ c_n\lambda_n x_n$$

$$= \lambda_1\left[c_1 x_1 + c_2\frac{\lambda_2}{\lambda_1}x_2 +,\ldots,+ c_n\frac{\lambda_n}{\lambda_1}x_n\right]$$

べき乗法とは

- Auの積を、k回行うと

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

- 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。

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

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

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. λ_0 = 0.0;　　i=1;
3. 　　行列積 y = A x ;
4. 　　近似固有値 λ_i　＝ (y,　y) / (y,　x) を計算;
5. 　　|λ_i - λ_{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

べき乗法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-ofp.tar.gz
- ジョブスクリプトファイルpowm.bash　中のキュー名を
  lecture-flat から
  lecture5-flat　(工学部共通科目)
  に変更し、pjsub　してください。
  - lecture-flat : 実習時間外のキュー
  - lecture5-flat: 実習時間内のキュー
- グループも gt05に変える

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
  $ cd /work/gt05/t05xxx
  $ cp /work/gt05/z30105/PowM-ofp.tar.gz ./
  $ tar xvfz PowM-ofp.tar.gz
  $ 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
- ジョブスクリプトを修正したら
  $ pjsub 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  = 1.209419 [sec.]
Eigenvalue  = 2.000342e+03
Iteration Number: 11
Residual 2-Norm ||A x - lambda x||_2  = 6.288935e-13
N  = 4000
Power Method time  = 1.109105 [sec.]
Eigenvalue  = 2.000342e+03
Iteration Number: 11
Residual 2-Norm ||A x - lambda x||_2  = 6.288935e-13
N  = 4000
Power Method time  = 0.264855 [sec.]
Eigenvalue  = 2.000342e+03
Iteration Number: 11
Residual 2-Norm ||A x - lambda x||_2  = 6.288935e-13
```

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.] =  0.949132919311523
 Eigenvalue =   1999.85535461023
 Iteration Number:            7
 Residual 2-Norm ||A x - lambda x||_2 =  7.495077627870977E-009
 N =        4000
 Power Method time[sec.] =   1.05101490020752
 Eigenvalue =   1999.77828254775
 Iteration Number:            9
 Residual 2-Norm ||A x - lambda x||_2 =  3.636552038660712E-012
 N =        4000
 Power Method time[sec.] =  0.335184812545776
 Eigenvalue =   2000.24938906580
 Iteration Number:           10
 Residual 2-Norm ||A x - lambda x||_2 =  3.146643327947337E-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

- 行列サイズ変数が、NNとなっています。

```
integer, parameter :: NN=4000
```

サンプルプログラムの概略（PowM関数内）

```
/* Normizeation 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

```
     /* innner 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;

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

正規化と
新しいx
設定部分

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 2176 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-λx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×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

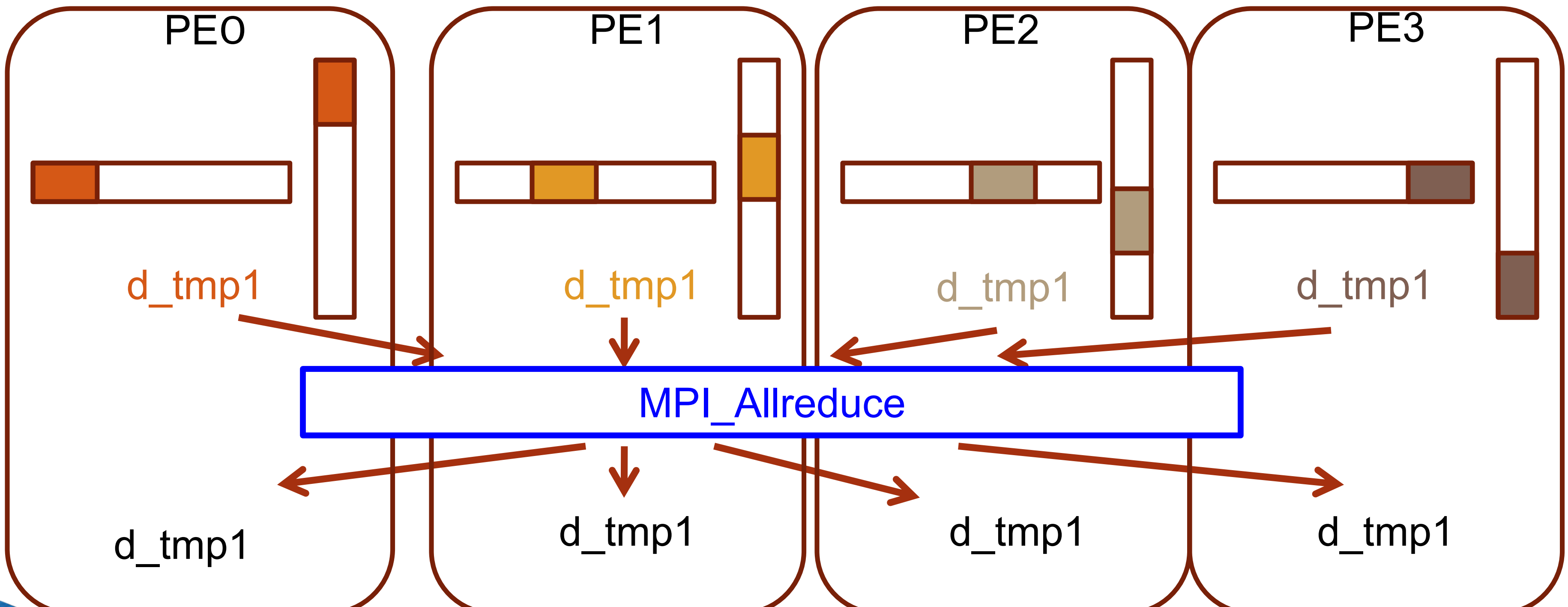
並列化のヒント(1.「行列-ベクトル積」のみ)

- 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）

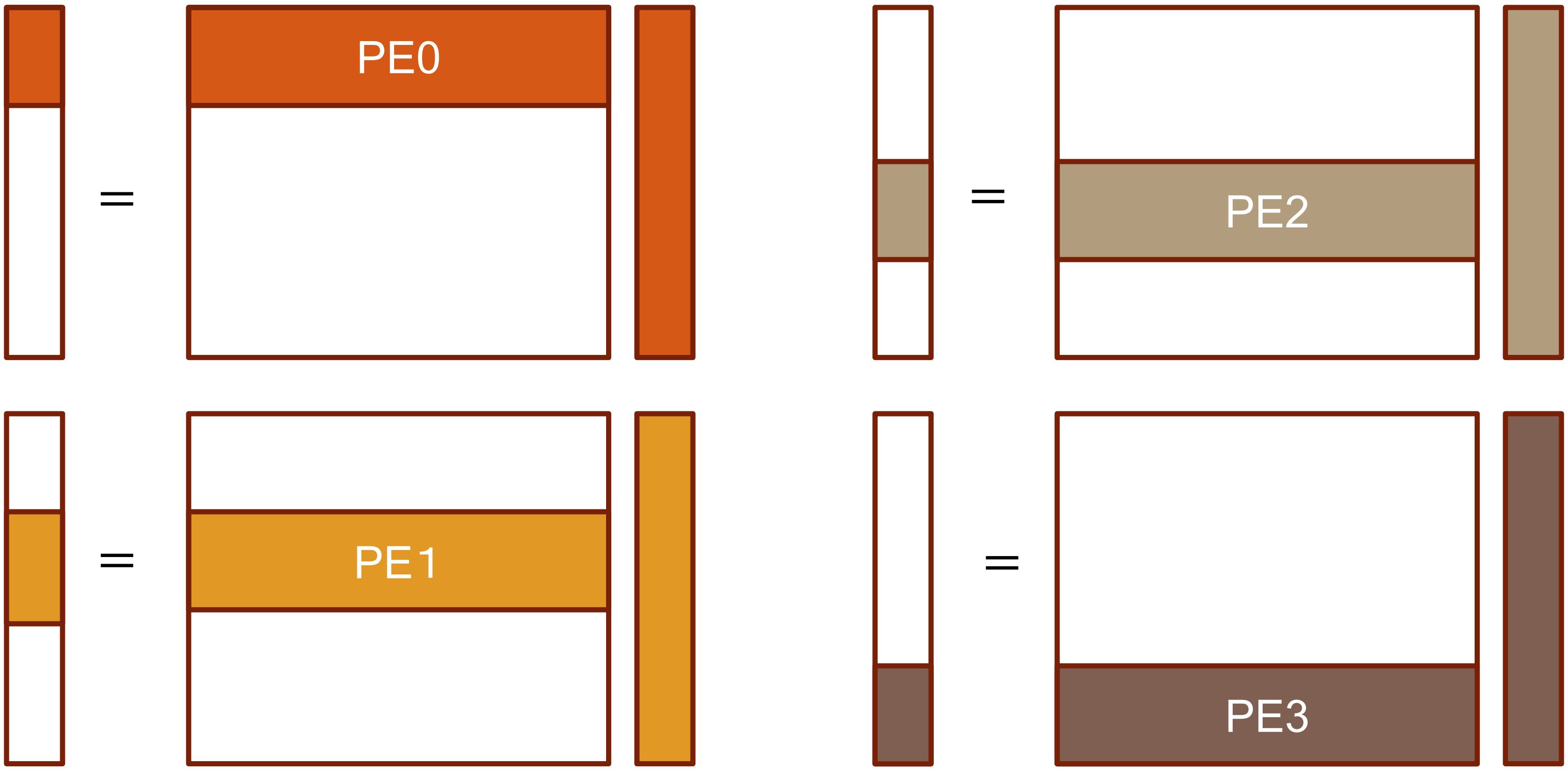
- 以下のようなプログラムになる

```
/* 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);

x_t	x	n	MPI_DOUBLE	MPI_SUM	MPI_COMM_WORLD
入力ベクトル（各PEで異なる値をもつ）	出力ベクトル（各PEで、全く同じ値をもつ）	ベクトルの長さ	ベクトルの要素の型	操作の指定（MPI__SUM：各PEのベクトルの要素を加算する処理の指定）	コミュニケータ

MPI_Allreduce関数の復習（Fortran言語）

- MPI_ALLREDUCE
  (x_t, x, n, MPI_DOUBLE_PRECISON, MPI_SUM, MPI_COMM_WORLD, ierr)
- MPI_DOUBLE_PRECISIONの代わりに MPI_REAL8 でもよい

入力ベクトル（各PEで異なる値をもつ）

出力ベクトル（各PEで、全く同じ値をもつ）

ベクトルの長さ

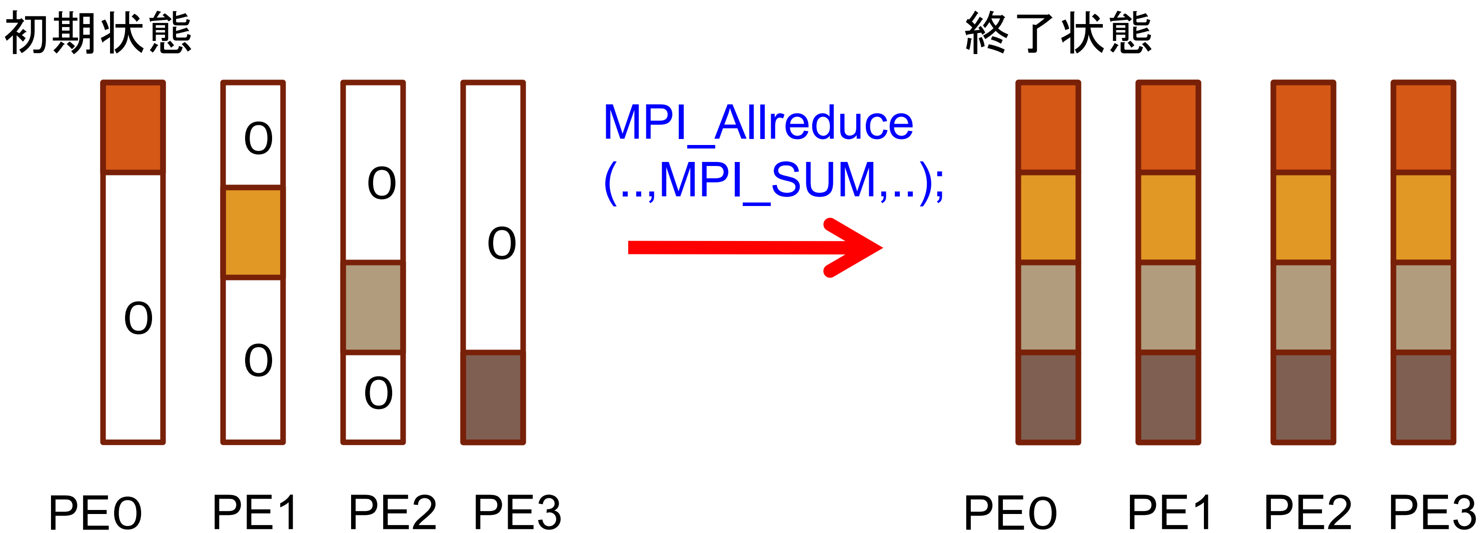
ベクトルの要素の型

操作の指定（MPI__SUM：各PEのベクトルの要素を加算する処理の指定）

コミュニケータ

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



※MPI_Allgather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×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、反復回数が変化することがある。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）

次回へつづく

行列-行列積の並列化