行列-行列積（2）

東京大学情報基盤センター　准教授　塙　敏博

2019年12月3日（火） 10:25-12:10

レポートおよびコンテスト課題（締切：2020年2月3日（月）24時　厳守

講義日程（工学部共通科目）

1. ~~9月24日：　ガイダンス~~
2. ~~10月1日~~
   - ~~並列数値処理の基本演算（座学）~~
3. ~~10月8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15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. ~~10月29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. ~~11月5日~~
   - ~~行列-ベクトル積の並列化~~
7. ~~11月12日~~
   - ~~べき乗法の並列化~~
8. ~~11月26日~~
   - ~~行列-行列積の並列化（1）~~
9. 12月3日
   - 行列－行列積の並列化（2）
10. 12月10日
    - LU分解法（1）
    - コンテスト課題発表
11. 12月17日
    - LU分解法（2）
12. 1月7日
    - LU分解法（3）、非同期通信
13. 1月14日
    - RB-Hお試し、研究紹介他

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言語版の共通ファイル名
  Mat-Mat-d-ofp.tar.gz
- ジョブスクリプトファイルmat-mat-d.bash　中のキュー名を
  lecture-flat から
  lecture4-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
  - lecture4-flat :実習時間内のキュー
  - グループ名： gt34

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

```
$ cd /work/gt34/t34XXX
$ cp /work/gt34/z30105/Mat-Mat-d-ofp.tar.gz ./
$ tar xvfz Mat-Mat-d-ofp.tar.gz
$ 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
$ pjsub 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

```
Error! in ( 0 , 2 )-th argument in PE 0
Error! in ( 0 , 2 )-th argument in PE 61
 …
N  = 2176
Mat-Mat time  = 0.000896 [sec.]
 22999044.714267 [MFLOPS]
...
N  = 2176
Mat-Mat time  = 0.000285 [sec.]
 72326702.959176 [MFLOPS]
...
N  = 2176
Mat-Mat time  = 0.000237 [sec.]
 86952122.772853 [MFLOPS]
```

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

```
Error! in ( 1 , 3 )-th argument in PE 0
Error! in ( 1 , 3 )-th argument in PE 1033
...
 NN  =         2176
Mat-Mat time  =   1.497983932495117E-003
 MFLOPS =    13756232.6624224
...
NN  =         2176
Mat-Mat time  =   1.003026962280273E-003
 MFLOPS =    20544428.2904683
...
NN  =         2176
Mat-Mat time  =   1.110076904296875E-003
 MFLOPS =    18563232.3492268
…
```

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 2176
  - 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

- 行列サイズ変数が、NNとなっています。
  integer, parameter :: NN=2176

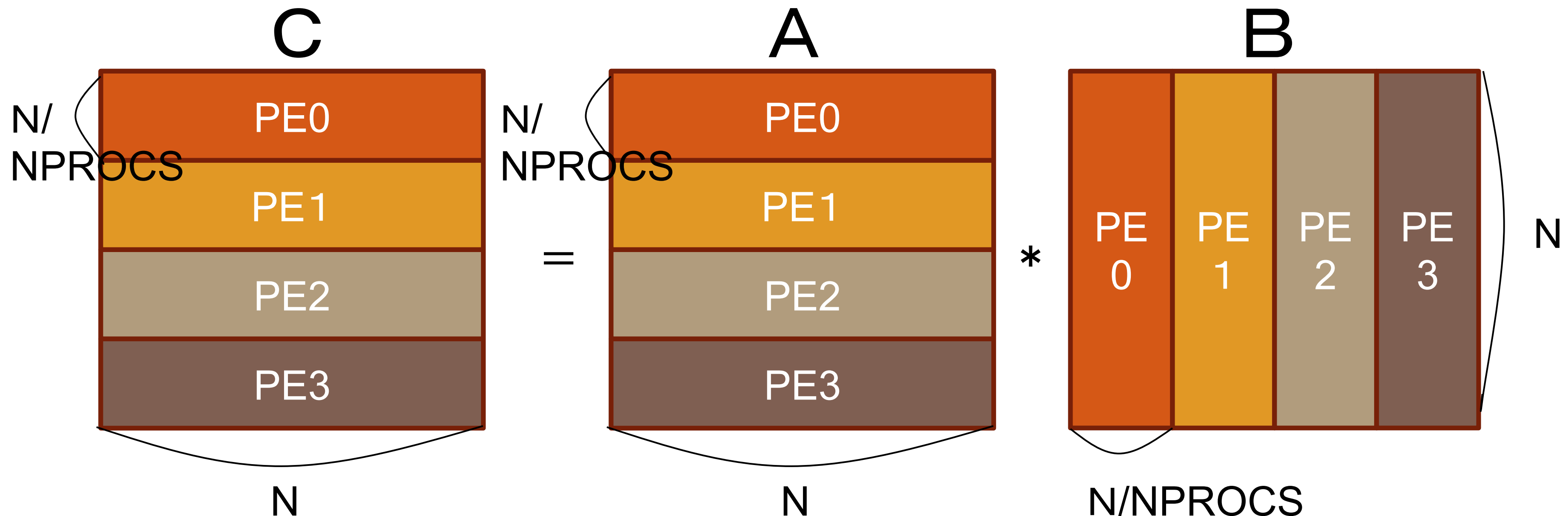
演習課題（1）

- MyMatMat関数（手続き）を並列化してください。
  - デバックの時は
    #define N 2176
    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。

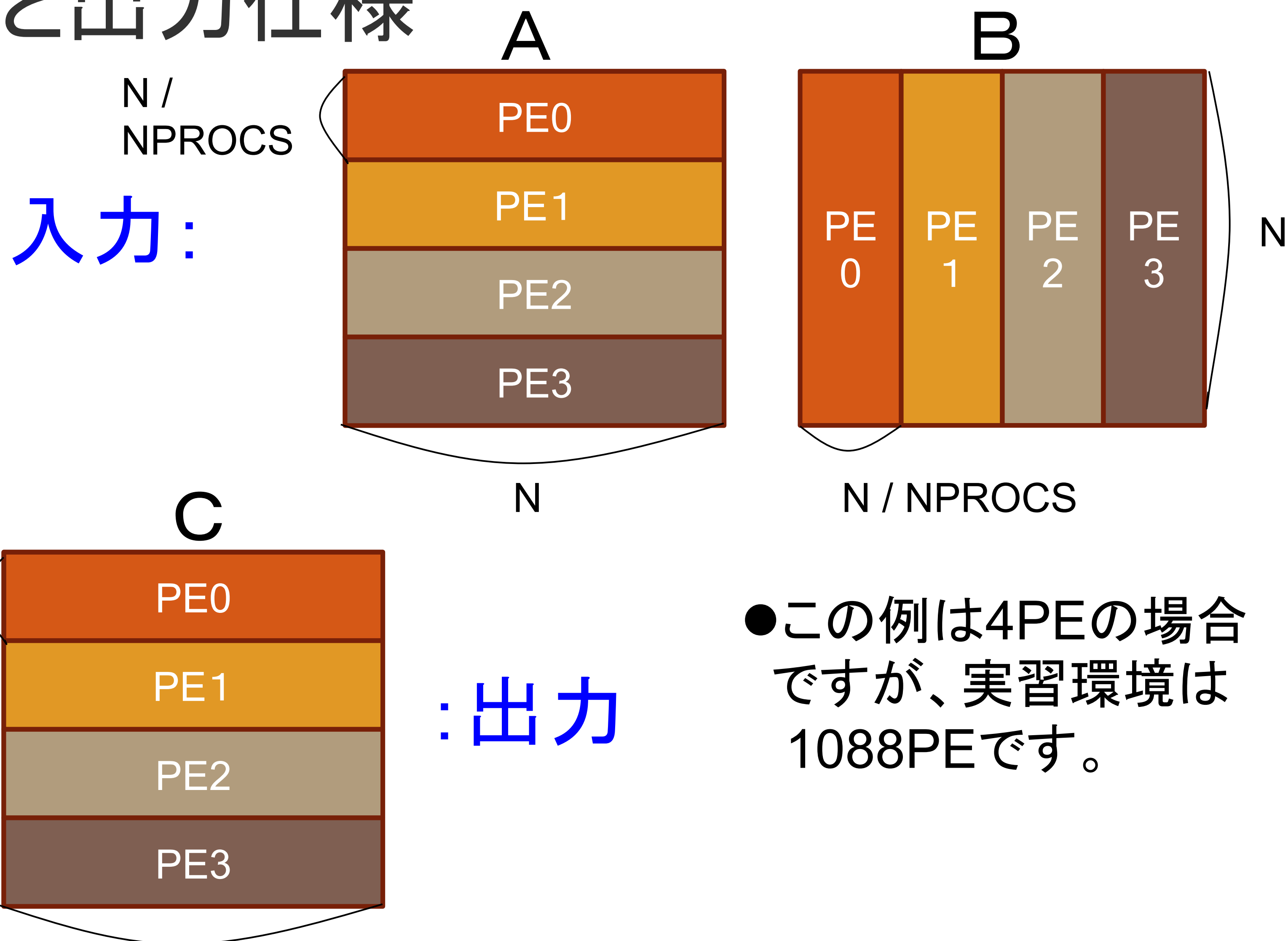
行列A、B、Cの初期配置

- 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1088PE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。

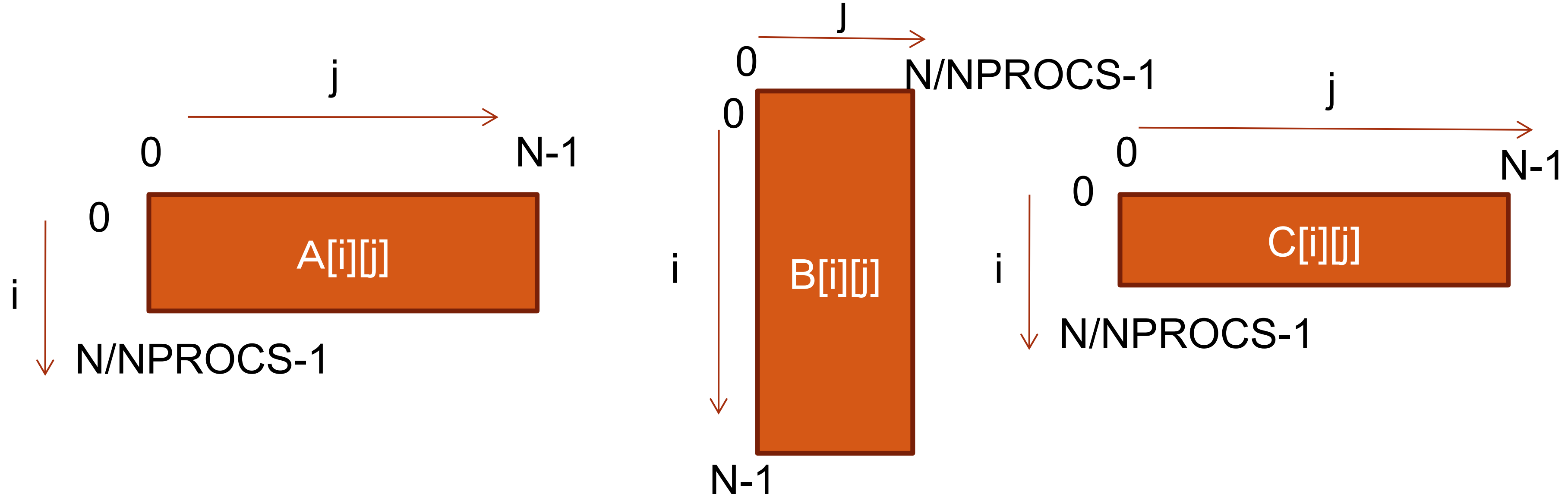
入力と出力仕様



- この例は4PEの場合ですが、実習環境は1088PEです。

並列化の注意(C言語)

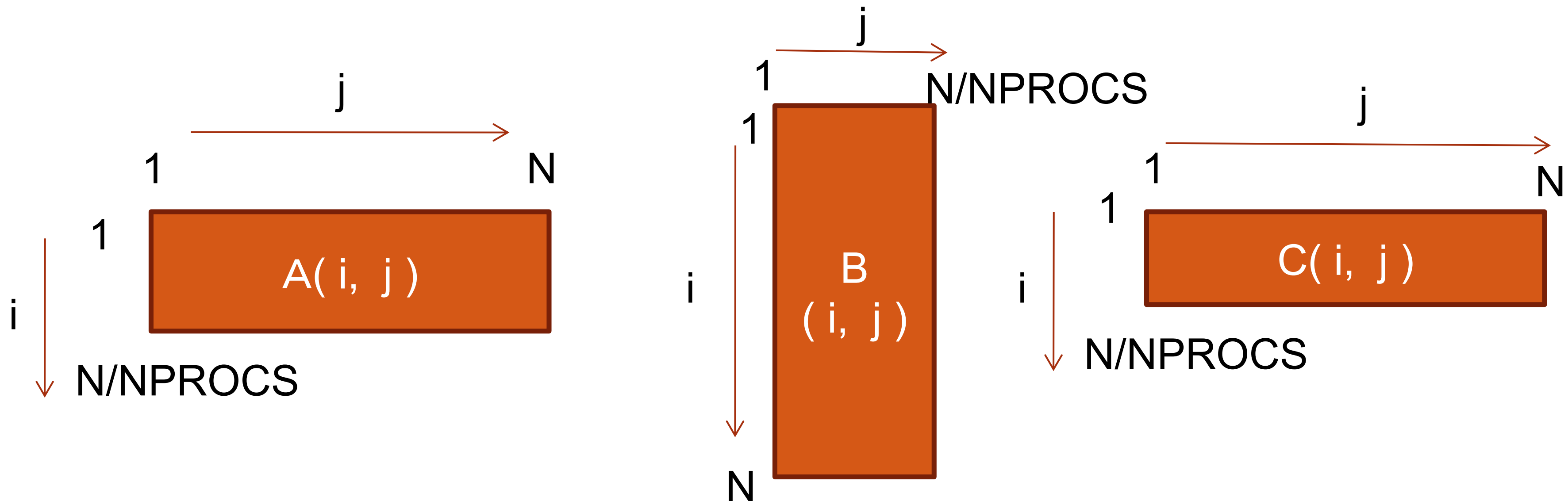
- 各配列は、完全に分散されています。
- 各PEでは、以下のようなインデックスの配列となっています。



- 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）

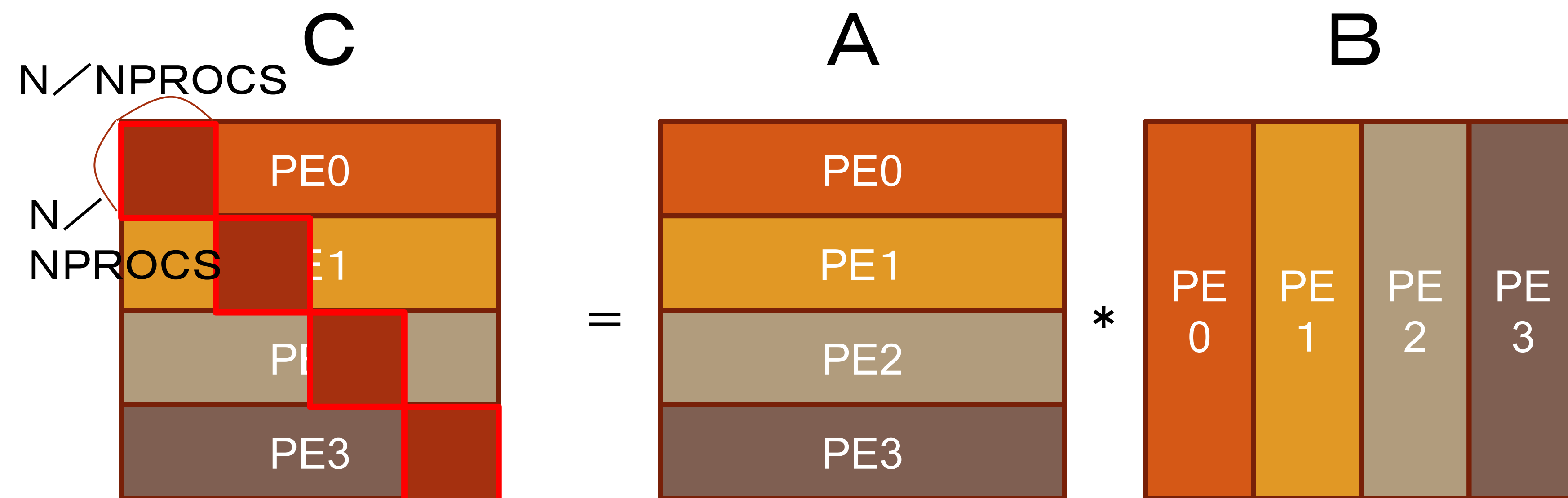
- 各配列は、完全に分散されています。
- 各PEでは、以下のようなインデックスの配列となっています。



- 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

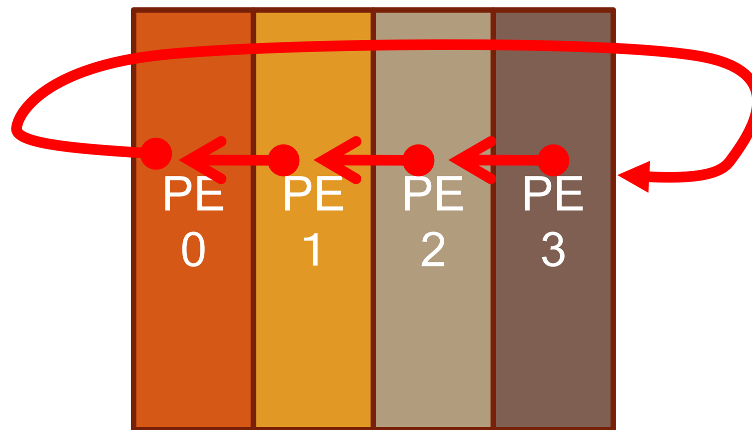
- 行列積を計算するには、各PEで完全な行列Bのデータがないので、行列Bのデータについて通信が必要です。
- たとえば、以下のように計算する方法があります。
- ステップ1



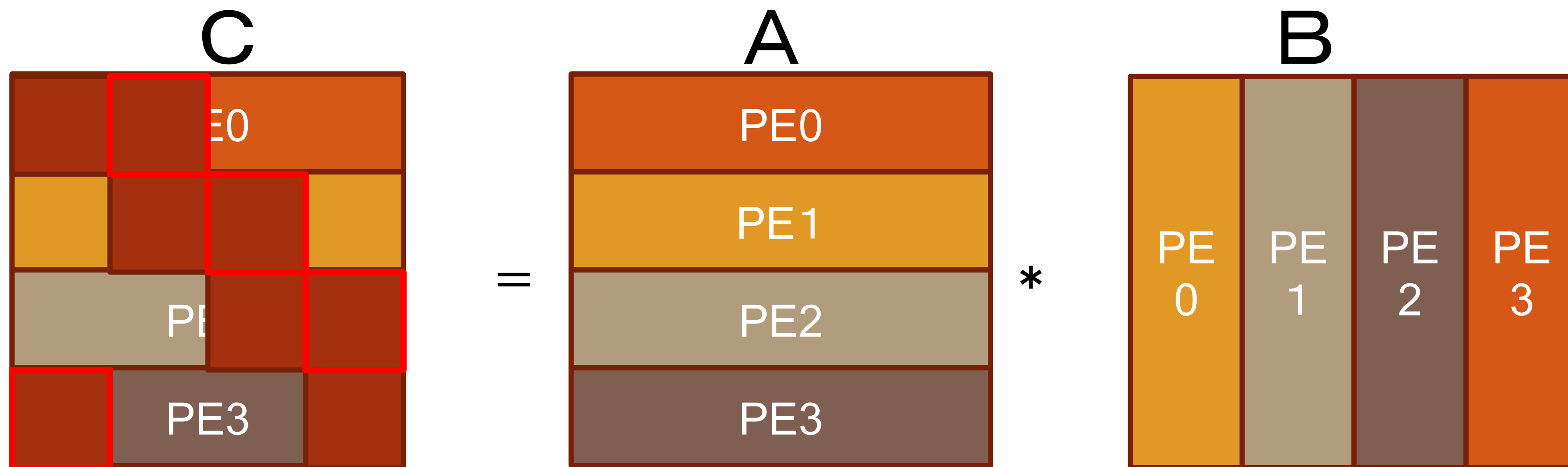
ローカルなデータを使って得られた
行列-行列積結果

並列化のヒントB

- ステップ2



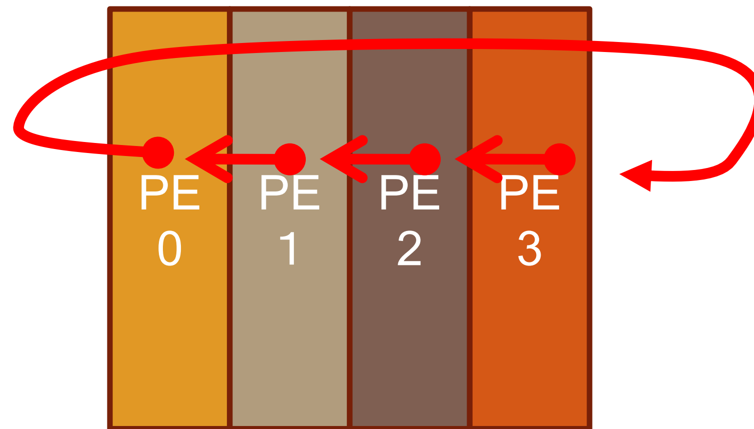
自分の持っているデータを
ひとつ左隣りに転送する
（PE0は、PE3に送る）
【循環左シフト転送】



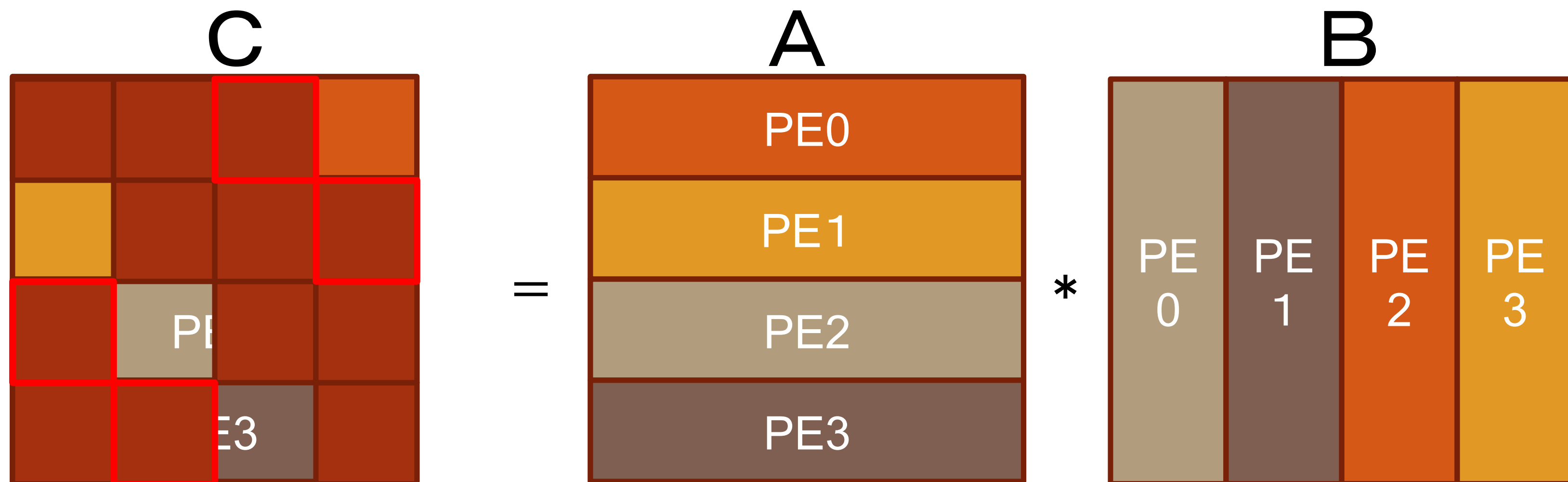
ローカルなデータを使って得られた
行列-行列積結果

並列化のヒントB

- ステップ3



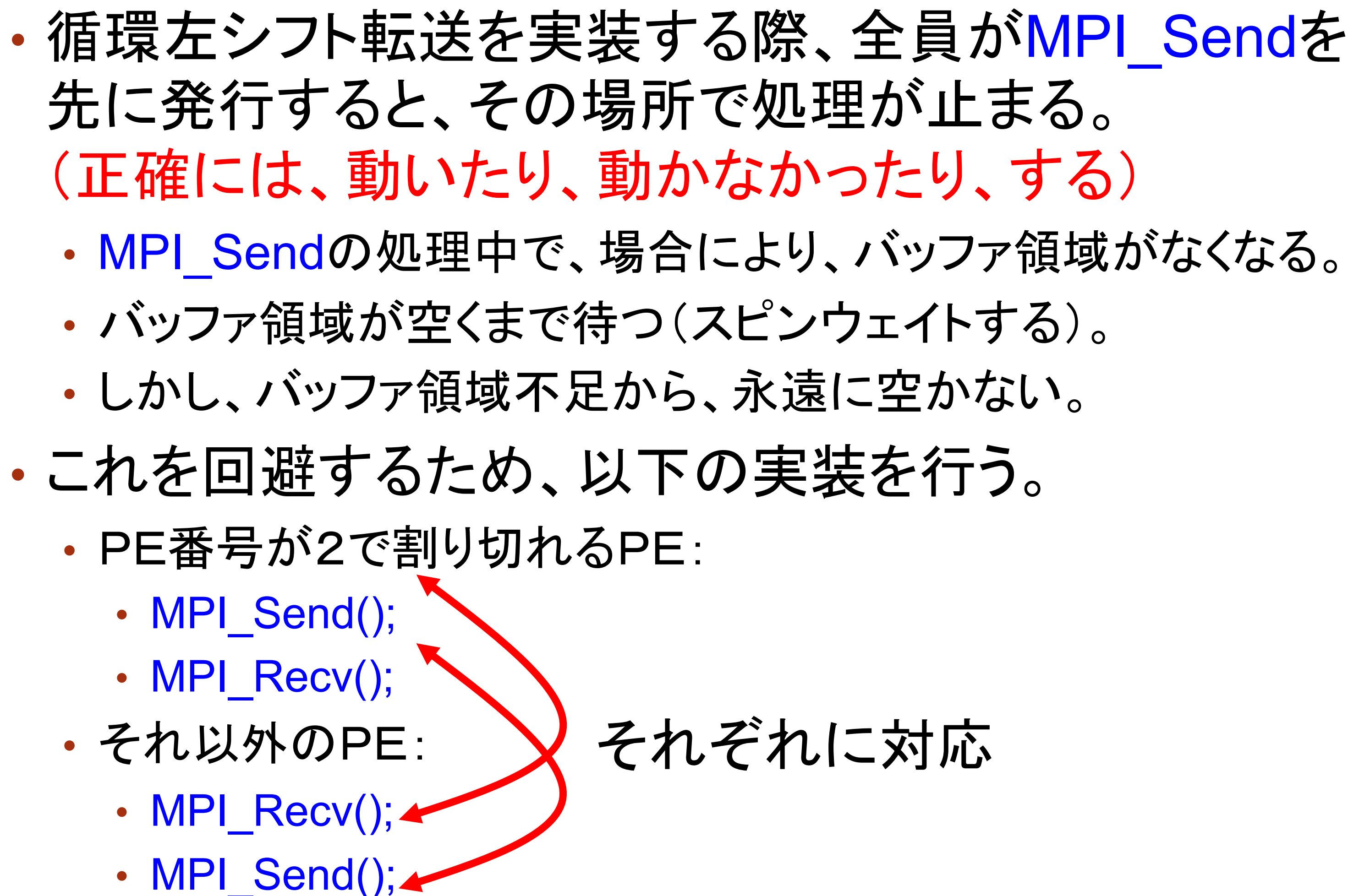
自分の持っているデータをひとつ左隣りに転送する（PE0は、PE3に送る）
【循環左シフト転送】



ローカルなデータを使って得られた行列-行列積結果

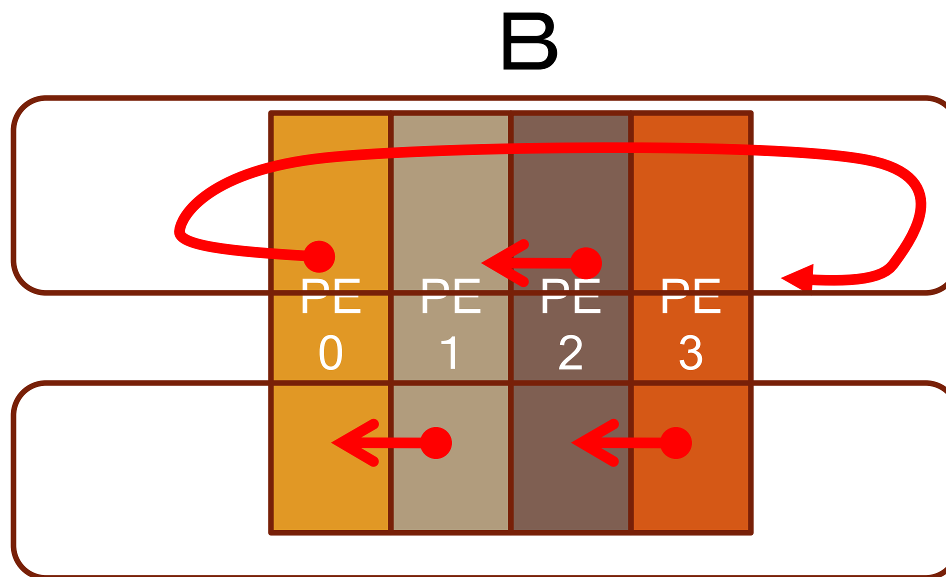
並列化の注意

- 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();



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



フェーズ1：
２で割り切れるPEがデータを送る

フェーズ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。プロセッサー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。
  - **C言語**： **MPI_Status istatus;**
  - **Fortran言語**： **integer istatus(MPI_STATUS_SIZE)**
- 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に戻さなくてはいけない。

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[ ][ ]  へ  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  へ  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）