行列-ベクトル積

東京大学情報基盤センター　准教授　片桐孝洋

2015年10月27日（火）16:50－18:35

講義日程（全学ゼミ）

レポートおよびコンテスト課題
（締切：
2016年1月12日（火）24時）厳守

- ~~9月15日：ガイダンス~~

1. ~~9月22日　※休日の講義日~~
   - ~~並列数値処理の基本演算（座学）~~
2. ~~9月29日~~
   - ~~非同期通信、ソフトウェア自動チューニング~~
3. ~~10月6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13日~~
   - ~~高性能演算技法1（ループアンローリング）~~
5. ~~10月20日~~
   - ~~高性能演算技法2（キャッシュブロック化）~~
5. 10月27日
   - 行列-ベクトル積の並列化
6. 11月3日　※休日の講義日
   - べき乗法の並列化
7. 11月10日
   - 行列-行列積の並列化（1）
8. 12月1日　※日程指定日
   - 行列ー行列積の並列化（2）
9. 12月8日
   - LU分解法（1）
10. 12月15日
    - LU分解法（2）

講義の流れ

1. 行列-ベクトル積のサンプルプログラムの実行
2. 並列化の注意点
3. 並列化実習
4. レポート課題

サンプルプログラムの実行（行列-ベクトル積）

はじめての基本演算

EMACSコマンドの再確認

- C- : Control キーを押しながら
- M- : Esc キーを押しながら
- C-x C-s : データセーブ
- C-x C-c : 終了
- C-g : わからなくなったとき
- C-k : 1行消去してバッファにコピー
  （連続して入力すると複数行消去可）
- C-y : 上記のバッファをカーソル位置にコピー
- C-s : 文字列を検索し、その場所に移動。以降 C-s で次の候補に移動する。移動したい関数名を入れて利用する。
- M-x goto-line : 行きたい行に飛ぶ。入力後、行の番号を聞いてくる。

行列-ベクトル積のサンプルプログラムの注意点

- C言語／Fortran言語版のファイル名

  Mat-vec-fx.tar

- ジョブスクリプトファイルmat-vec.bash　中のキュー名を lecture から

  lecture3　(全学ゼミ)

  に変更し、pjsub　してください。
  - lecture : 実習時間外のキュー
  - lecture3: 実習時間内のキュー

行列－ベクトル積のサンプルプログラムの実行（C言語）

- 以下のコマンドを実行する

```
$ cp /home/z30082/Mat-vec-fx.tar ./
$ tar xvf Mat-vec-fx.tar
$ cd Mat-vec
```

- 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-vec.bash
```

- 実行が終了したら、以下を実行する

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

実行結果（C言語）

- 以下のような結果が出ればOK。

```
N  = 10000
Mat-Vec time  = 0.171097 [sec.]
 1168.927027 [MFLOPS]
OK!
```

実行結果（Fortran言語）

- 以下のような結果が出ればOK。

N = 10000
Mat-Vec time[sec.] = 0.16659261297900 23
MFLOPS = 1200.533420532020
OK!

サンプルプログラムの説明（C言語）

- #define N 10000
  数字を変更すると、行列サイズが変更できます

- #define DEBUG 1
  「1」としてコンパイルすると、演算結果が正しいことがチェックできます。
- 再コンパイルは、以下のように入力します。
  % make clean
  % make

Fortran言語のサンプルプログラムの注意

- 行列サイズNNの宣言は、以下のファイルにあります。

  mat-vec.inc

- 行列サイズ変数が、NNとなっています。

```
integer  NN
parameter (NN=10000)
```

演習課題

- MyMatVec関数（手続き）の＜中身＞を並列化してください。
  - デバック時には、
    - #define N 192
      にしてください。そうしないと、実行時間が大変かかってしまいます。
    - #define DEBUG 1
      にして、結果を検証してください。

演習課題の注意

- データが各PEに完全に分散された状態から初めてください。
  （データ分散の処理は不要です）
- 以下はデータの中身を気にする人に:
  - 結果を検証する場合、行列とベクトルの初期データはすべて1です。
  - 結果を検証しない場合には、行列とベクトルの初期データに、疑似乱数を使っています。
    - 疑似乱数は、乱数の種を固定しない限り各PEで同じ値になることは保証されません。
    - このサンプルプログラムでは、srand()関数で乱数の種を固定していますので全PEで同じ乱数系列が発生されます。
    - 逐次と同じデータの中身を並列版で保障する場合、自分の担当部分まで乱数を発生させて、不要な場所は発生した乱数を捨てる必要があります。

演習課題の注意

- 本実習では、MPI通信関数は不要です。
- このサンプルプログラムでは、
  演算結果検証部分が並列化されていない

ため、MatVec関数のみを並列化しても、
検証部でエラーとなります。

- 検証部分も、計算されたデータに各PEで対応するように、並列化してください。
- 検証部分においても、行列-ベクトル積と同様のループとなります。

MPI並列化の大前提（再確認）

- SPMD
  - 対象のメインプログラム（mat-vec.c）は、
    - すべてのPEで、かつ、
    - 同時に起動された状態

    から処理が始まる。
- 分散メモリ型並列計算機
  - 各PEは、完全に独立したメモリを持っている。（共有メモリではない）

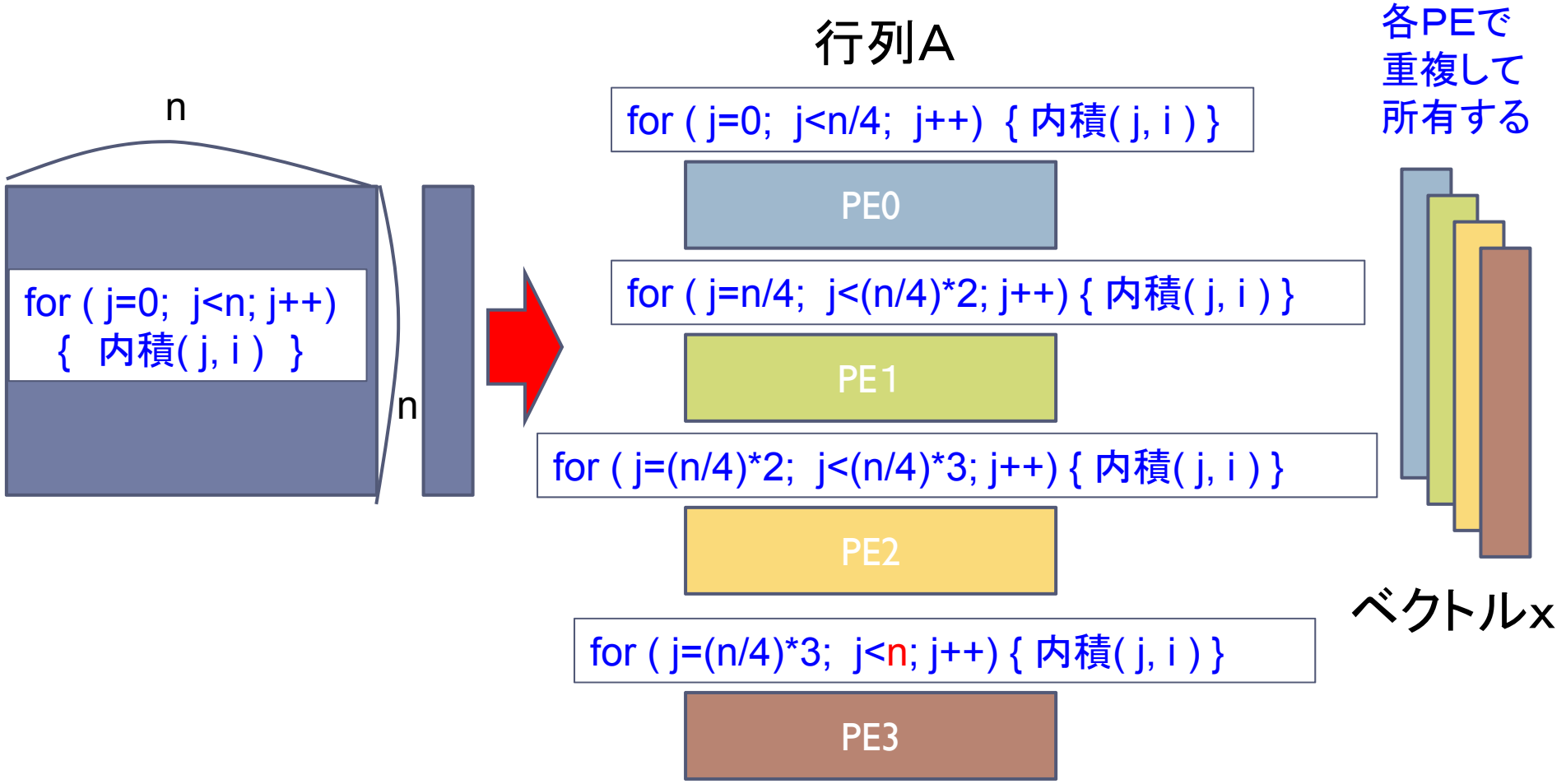
本実習プログラムのTIPS

- myid, numprocs は大域変数です
  - myid (=自分のID)、および、numprocs(=世の中のPE台数)の変数は大域変数です。

    MyMatVec関数内で、引数設定や宣言なしに、参照できます。
- myid, numprocs の変数を使う必要があります
  - MyMatVec関数を並列化するには、myid 、および、numprocs変数を利用しないと、並列化ができません。

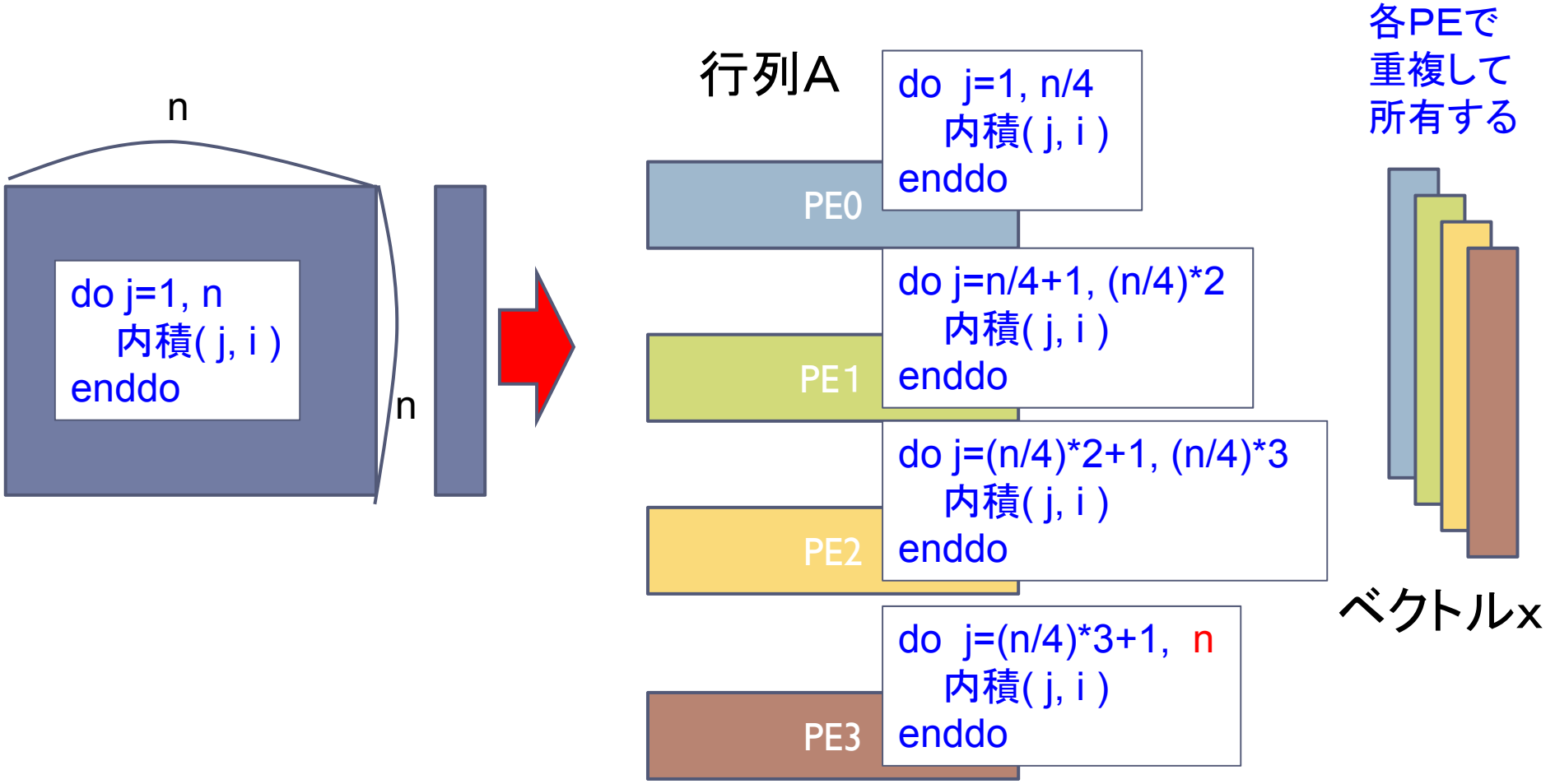
並列化の考え方（C言語）

- SIMDアルゴリズムの考え方（4PEの場合）



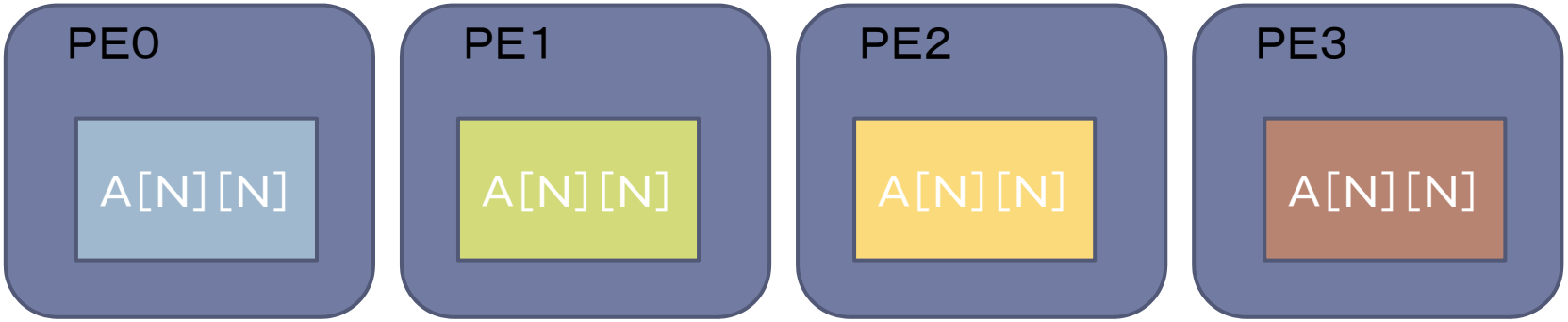
並列化の考え方（Fortran言語）

- SIMDアルゴリズムの考え方（4PEの場合）

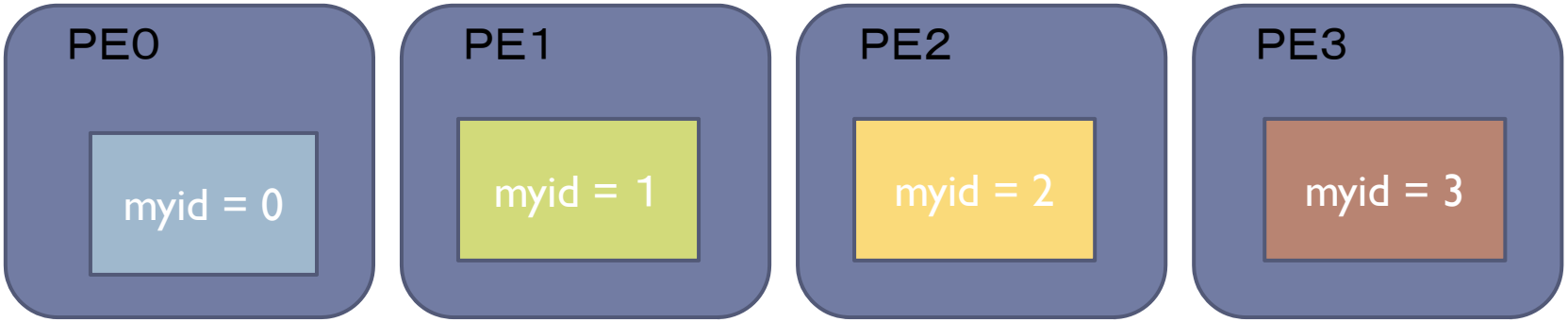


初心者が注意すること

- 各PEでは、独立した配列が個別に確保されます。



- myid変数は、MPI_Comm_rank()関数が呼ばれた段階で、各PE固有の値になっています。



並列化の方針（C言語）

1. 全PEで行列AをN×Nの大きさ、ベクトルx、yをNの大きさ、確保してよいとする。
2. 各PEは、担当の範囲のみ計算するように、ループの開始値と終了値を変更する。
   - ブロック分散方式では、以下になる。
     （n が numprocs で割り切れる場合）

```
ib = n / numprocs;
for ( j=myid*ib;  j<(myid+1)*ib;  j++)    { … }
```

3. （2の並列化が完全に終了したら）各PEで担当のデータ部分しか行列を確保しないように変更する。
   - 上記のループは、以下のようになる。

```
for ( j=0;  j<ib;  j++)  { … }
```

並列化の方針（Fortran言語）

1. 全PEで行列AをN×Nの大きさ、ベクトルx、yをNの大きさ、確保してよいとする。
2. 各PEは、担当の範囲のみ計算するように、ループの開始値と終了値を変更する。
   - ブロック分散方式では、以下になる。
     （n が numprocs で割り切れる場合）

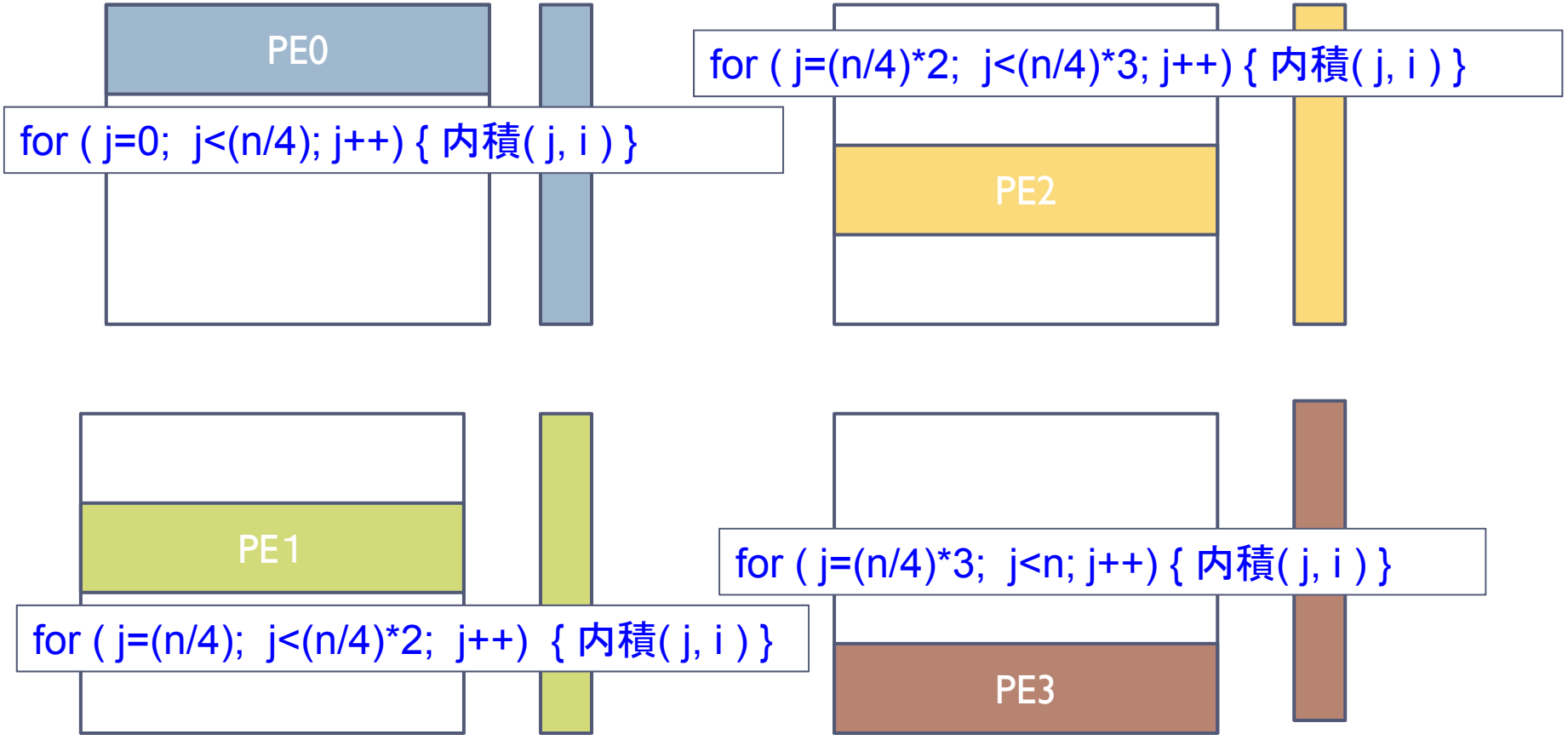
```
ib = n / numprocs
do j=myid*ib+1, (myid+1)*ib   ....   enddo
```

3. （2の並列化が完全に終了したら）各PEで担当のデータ部分しか行列を確保しないように変更する。
   - 上記のループは、以下のようになる。

```
do  j=1, ib  .... enddo
```

並列化の方針（行列-ベクトル積）（C言語）

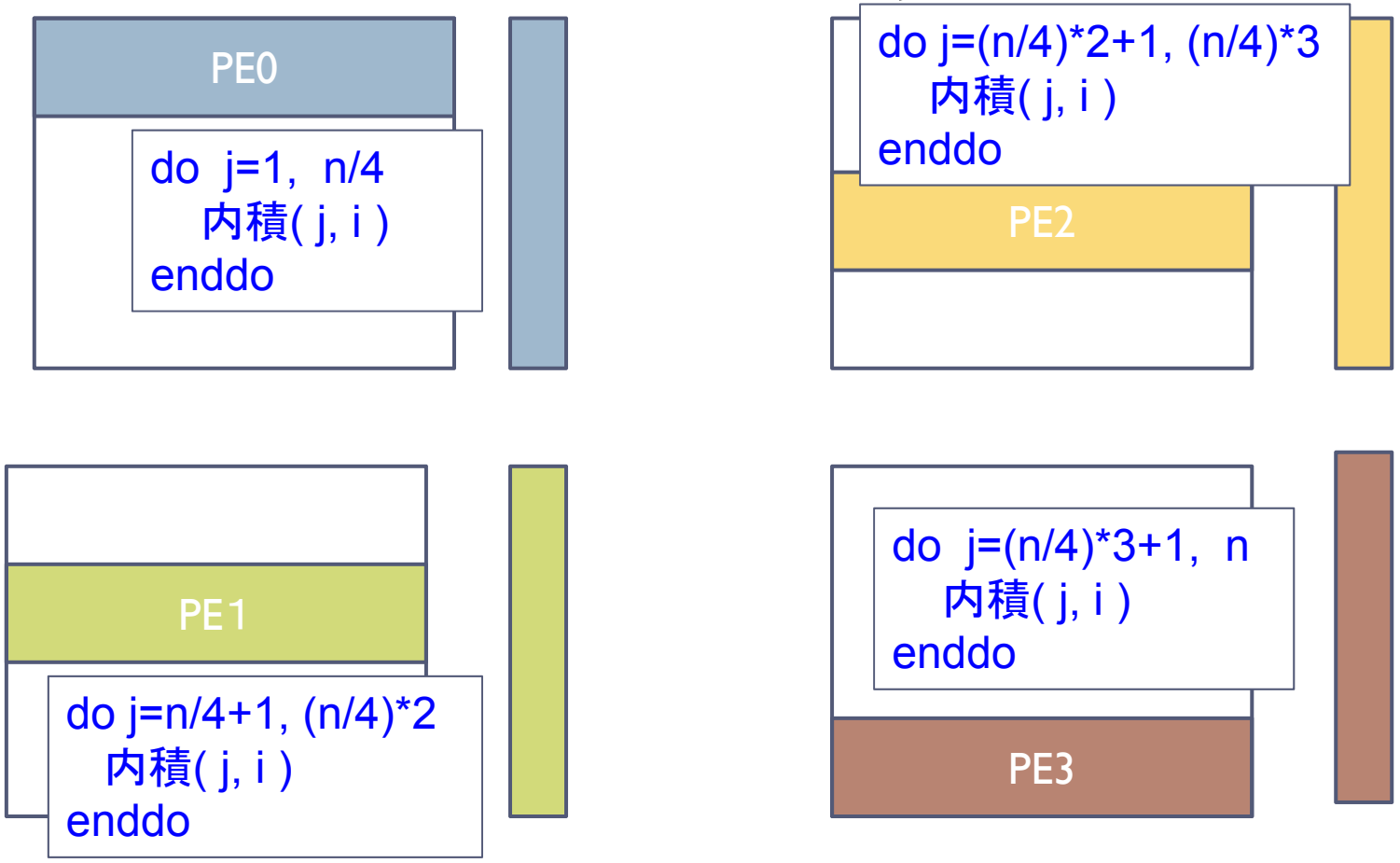
- 全PEでN×N行列を持つ場合



※各PEで使われない領域が出るが、担当範囲指定がしやすいので実装がしやすい。

並列化の方針（行列-ベクトル積）（Fortran 言語）

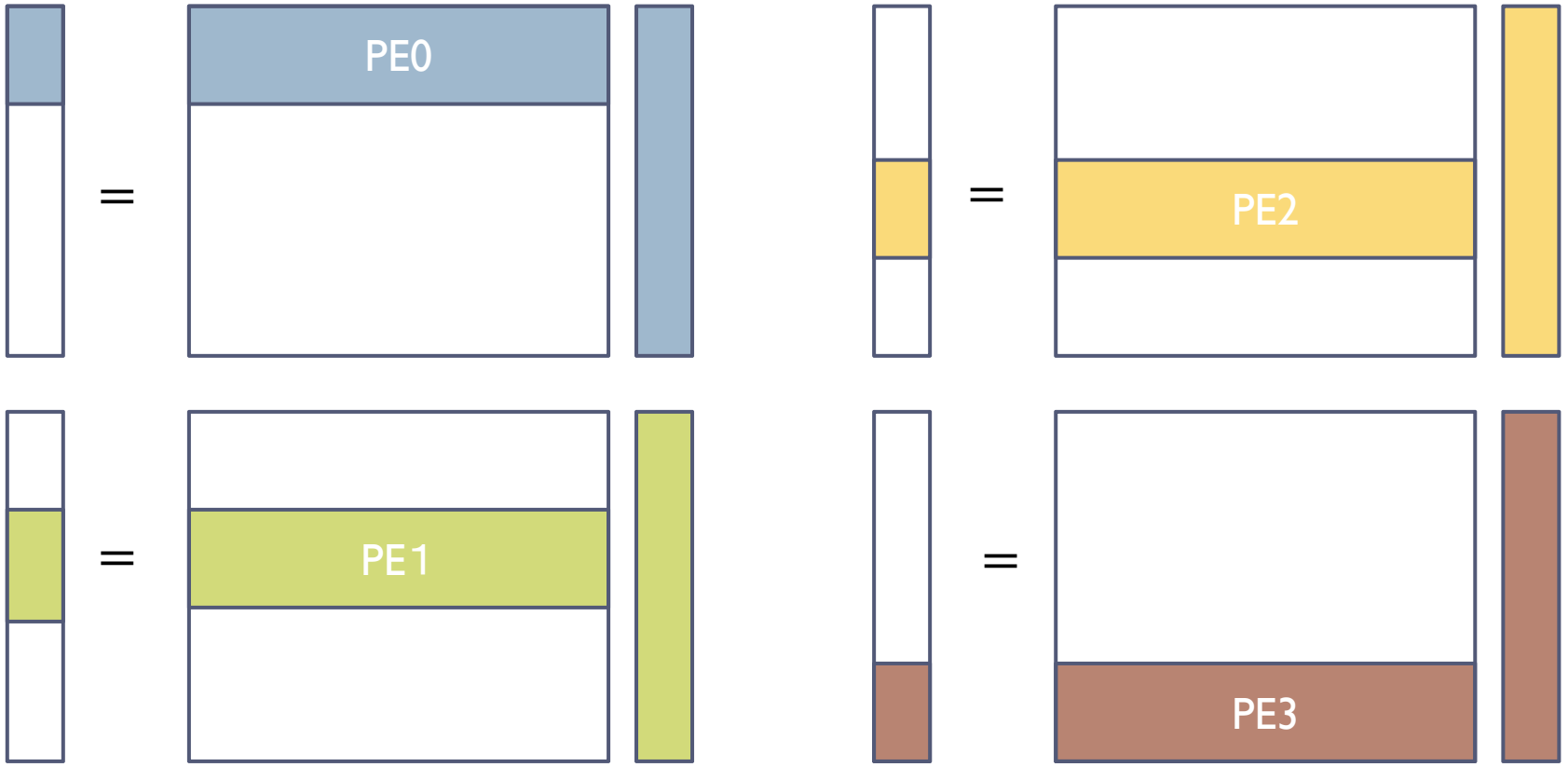
- 全PEでN×N行列を持つ場合



※各PEで使われない領域が出るが、担当範囲指定がしやすいので実装がしやすい。

並列化の方針（行列-ベクトル積）

- この方針では、y＝Axのベクトルyは、以下のように一部分しか計算されないことに注意！



並列化時の注意

- 演習環境は、I92PEです。
- 動作確認には、サンプルプログラムにあるデバック機能を利用しましょう。
  - 並列化は、＜できた＞と思ってもバグっていることが多い！
  - このサンプルでは、PE0がベクトルyの要素すべてを所有することが前提となっています。

出力結果を考慮して検証部分も並列化してください。

  - Nを小さくして、printfで結果（ベクトルy）を目視することも、デバックになります。しかし、Nを目視できないほど大きくする場合にバグることがあります。目視のみデバックは、経験上お勧めしません。
  - 数学ライブラリ開発では、できるだけ数学（線形代数）の知識を利用した方法で、理論的な解と結果を検証することをお勧めします。

発展実装（NがPE数で割切れない時）

- NがPE数の192で割り切れない場合
  - 配列確保： A[N/192+ (N-(N/192)*192)]
  - ループ終了値：PE191のみ終了値がnとなるように実装

```
ib = n / numprocs;
if ( myid == (numprocs - 1) ) {
      i_end = n;
} else {
     i_end = (myid+1)*ib;
}
for ( i=myid*ib;  i<i_end;  i++) { … }
```

発展実装（担当データしか持たない時）

- 担当データ分しか所有しない場合
  - 各PEが、ローカルインデックス（0~n/192、もしくは
    0 ~ (n/192+(N-(N/192)*192)))のほかに、各PEが所有する
    データのグローバルインデックス（0～n）を知る必要がある。
    - ベクトルxデータを集めた後、ベクトルxデータにアクセスする際
      A, y:　ローカルインデックスでアクセス
      x: グローバルインデックスでアクセス
  - ブロック分散なら簡単。
  - サイクリック分散だと、ちょっと工夫がいる。
    - モジュロ関数（a%b）を利用する。

レポート課題

1. [L10] 行列-ベクトル積において、列方式、および行方式の性能を比較し、考察せよ。なお、並列化する必要はない。
2. [L10] 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。
3. [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。
   （すなわち、逐次のメモリ量の 1/ 192とすること。ただし、並列化のための作業領域分は除く。）

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. [L20] サンプルプログラムを並列化したうえで、ピュアMPI実行、および、ハイブリッドMPI実行で性能が異なるか、実験環境（12ノード、192コア）を駆使して、性能評価せよ。
   - 1ノードあたり、12MPI実行、1MPI+16スレッド実行、2MPI+8スレッド実行、4MPI+4スレッド実行など、組み合わせが多くある。

来週へつづく

べき乗法