# MPIによるプログラム例の紹介

社会人向けスパコン実践セミナー

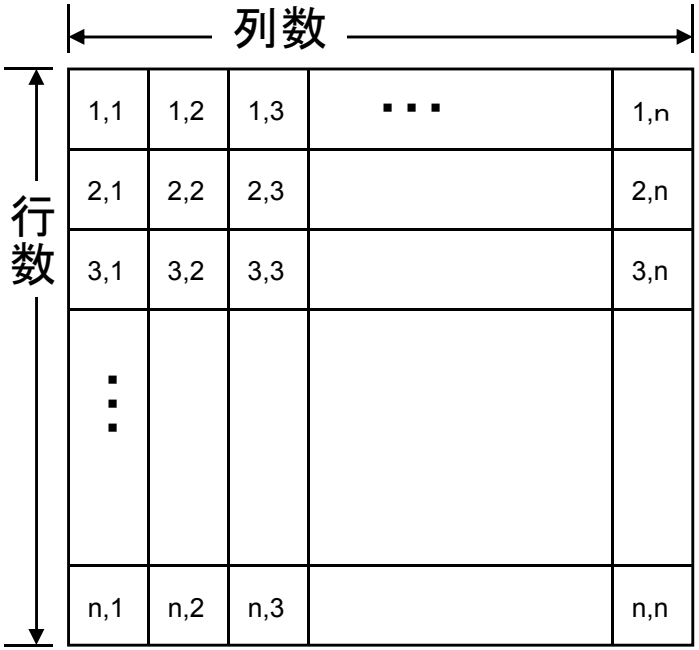
2009年2月18日（水曜）

# シミュレーションプログラム

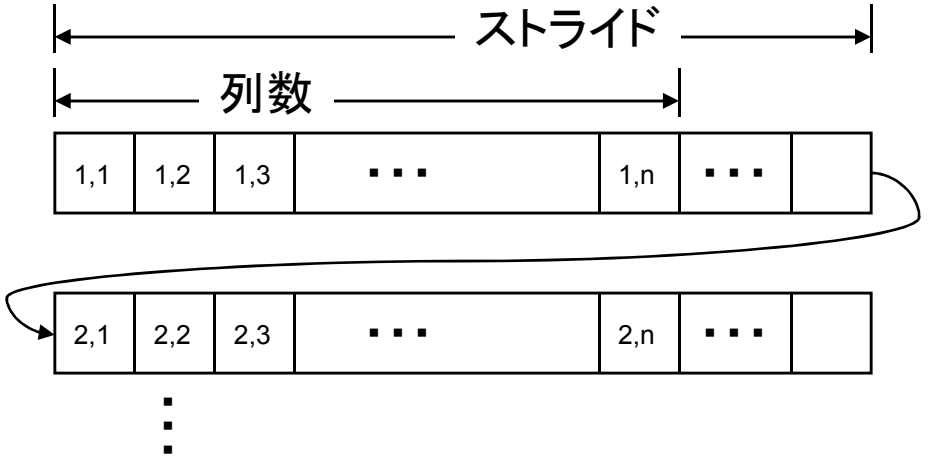
- 世の中で広く行われている複雑なシミュレーションも、基本的な数値計算を組み合わせて作られている。
- 計算機や計算プログラムの総合的な性能を比較するために、実際のシミュレーションプログラムを使う場合があるが、性能の向上方法を研究したり、プログラミングの演習の題材とする場合には、その要素となる個々の計算を対象とするほうがよい。
- シミュレーションプログラムの要素となる基本計算
  - 線形代数（行列の四則演算、固有値、固有ベクトル計算、連立一次方程式）
  - フーリエ変換
  - 積分計算
  - 並べ替え
  - etc.
- ここでは、このうち、線形代数計算の中で比較的単純な、行列積の問題を考えることとする。

# 行列積の計算（1）

- 線形代数演算は、さまざまな数値計算の中で現れ、時には、数万次元×数万次元の行列計算を必要とする場合もある。
- ここでは、その中で比較的簡単な正方行列の積計算を例として、その高速化と並列化を実行する。




i 行 j 列の要素を行列の(i,j)要素と書くこともある。




計算機のメモリー上では、1次元的に並べて配置することが多い（この並べ方は、Cで二次元配列を利用する場合に良く使われる。Fortranの二次元配列では、行と列の並び方が反対となる）。

# 行列積の計算（2）

$\mathbf{A}, \mathbf{B}, \mathbf{C} : n \times n$ 正方行列

行列の積 $\mathbf{AB} = \mathbf{C}$ の計算

成分表示 $\mathbf{A} = (a_{ij})$

$\mathbf{B} = (b_{ij})$

$\mathbf{C} = (c_{ij})$

$$\mathbf{AB} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} & \cdots & b_{1n} \\ b_{21} & b_{22} & \cdots & b_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ b_{n1} & b_{n2} & \cdots & b_{nn} \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} c_{11} & c_{12} & \cdots & c_{1n} \\ c_{21} & c_{22} & \cdots & c_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ c_{n1} & c_{n2} & \cdots & c_{nn} \end{pmatrix} = \mathbf{C}$$

# 行列積の計算（3）

行ベクトル、列ベクトルによる分割表示

$\mathbf{a}_i$ : $\mathbf{A}$の第 $i$ 行目の行ベクトル

$$\mathbf{a}_i = \begin{pmatrix} a_{i1} & a_{i2} & \cdots & a_{in} \end{pmatrix} \qquad \mathbf{A} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{a}_1 \\ \mathbf{a}_2 \\ \vdots \\ \mathbf{a}_n \end{pmatrix}$$

$\mathbf{a}^j$ : $\mathbf{A}$の第 $j$ 列目の列ベクトル

$$\mathbf{a}^j = \begin{pmatrix} a_{1j} \\ a_{2j} \\ \vdots \\ a_{nj} \end{pmatrix} \qquad \mathbf{A} = \left(\begin{array}{c|c|c|c} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{array}\right) = \begin{pmatrix} \mathbf{a}^1 & \mathbf{a}^2 & \cdots & \mathbf{a}^n \end{pmatrix}$$

# 行列積の計算（4）

行列 $\mathbf{C}$ の $i, j$ 成分 $c_{ij}$

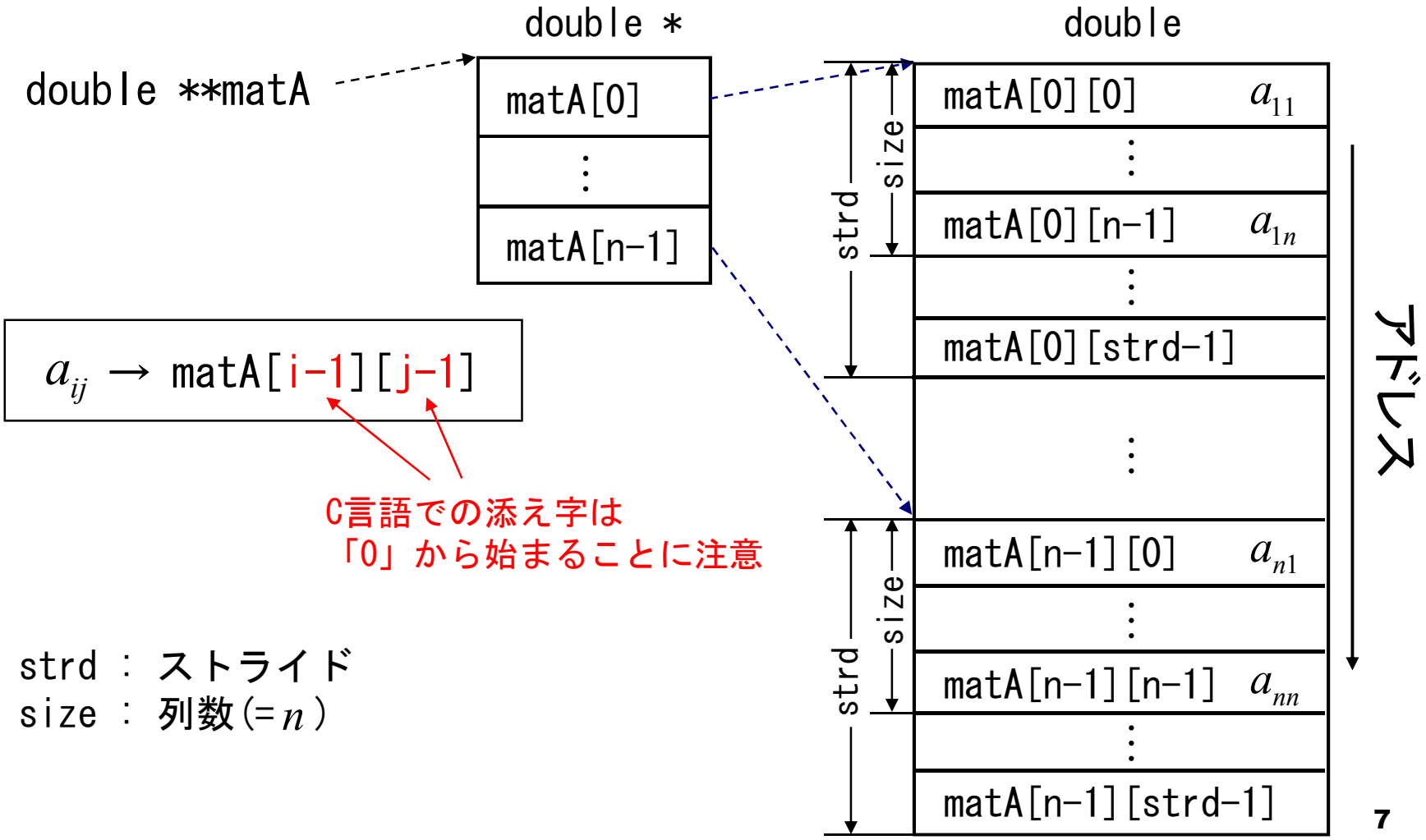
$$c_{ij} = \sum_{k=1}^{n} a_{ik} b_{kj} = \underbrace{a_{i1} b_{1j} + \cdots + a_{in} b_{nj}}_{n\text{回の掛け算と足し算}} = \mathbf{a}_i \mathbf{b}^j$$

行ベクトル $\mathbf{a}_i$ と列ベクトル $\mathbf{b}^j$ の内積

$n^2$ 個の成分を計算するための演算回数 $2n^3$

# 行列データのアクセス(2次元配列)

配列データのメモリ上の配置



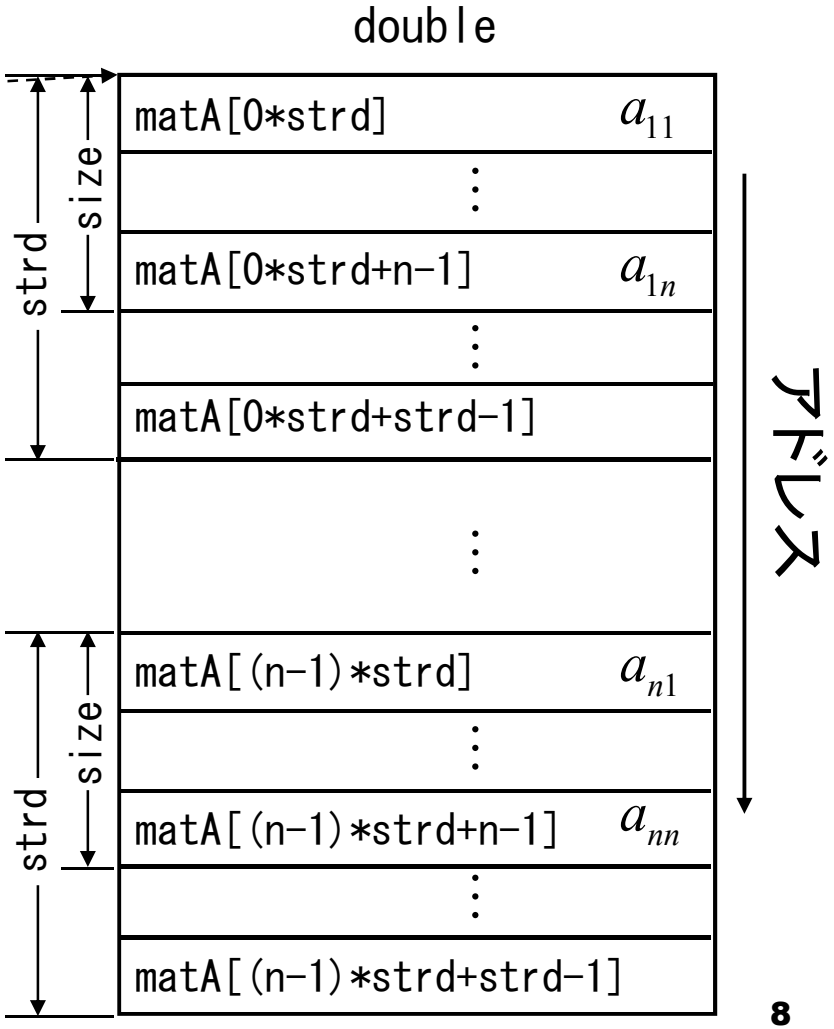
# 行列データのアクセス(1次元配列)

double *matA

$a_{ij}$ → matA[(i-1)*strd+j-1]

strd : ストライド
size : 列数(=$n$)

配列データのメモリ上の配置



# 行列積のプログラム (2次元配列)

以下のように置き換えて考えると

$a_{ik}$ → matA[i-1][k-1]
$b_{kj}$ → matB[k-1][j-1] (i, j, k=1, . . . , size)
$c_{ij}$ → matC[i-1][j-1]

```
for(i=0;i<size;i++)
  for(j=0;j<size;j++)
    matC[i][j]=0.0;
```

$\mathbf{C} = 0$

i, j, kのループは
0から始まっていることに注意

```
for(i=0;i<size;i++)
  for(j=0;j<size;j++)
    for(k=0;k<size;k++)
      matC[i][j] +=
        matA[i][k]*matB[k][j];
```

$$c_{ij} = \sum_{k=1}^{n} a_{ik} b_{kj}$$

# 行列積のプログラム (1次元配列)

1次元配列でのアクセス

```
matA[i][k] → matA[i*strd+k]
matB[k][j] → matB[k*strd+j]
matC[i][j] → matC[i*strd+j]
```

前頁のプログラムは

```
for(i=0;i<size;i++)
  for(j=0;j<size;j++)
    matC[i*strd+j]=0.0;

for(i=0;i<size;i++)
  for(j=0;j<size;j++)
    for(k=0;k<size;k++)
      matC[i*strd+j] += matA[i*strd+k]*matB[k*strd+j];
```

# 単体CPUで動くプログラム(1)

- 二次元配列表現の行列積計算をCで書く。
- (i,j)要素の参照方法 matA[i][j] に注意。

```
/* matMul2d.c: Matrix Multiplication in 2d representation of matrices */

/*
 * Calculate C = A * B
 * A, B, C: 2d-array representation of matrices (size x strd).
 * Thus, the (i,j) element is accessed by A[i][j], etc.
 */
void matMul(double **matA, double **matB, double **matC, int size, int strd)
{
    int i, j, k;

    /* Initialize */
    for (i = 0; i < size; i++)
        for (j = 0; j < size; j++)
            matC[i][j] = 0.0;

    /* Matrix Multiplication */
    for (i = 0; i < size; i++)
        for (j = 0; j < size; j++)
            for (k = 0; k < size; k++)
                matC[i][j] += matA[i][k] * matB[k][j];
}
```

関数の引き数として渡す時の
二次元配列の作り方は、
tm2d.c の matAlloc() の方法を参照

# 単体CPUで動くプログラム(2)

- 一次元配列表現の行列積計算をCで書く。
- (i,j)要素の参照方法 matA[i*strd+j] に注意。

```
/* matMul.c: Matrix Multiplication */

/*
 * Calculate C = A * B
 * A, B, C: 1d-array representation of matrices (size x strd)
 * Thus, the (i,j) element is accessed by A[i * strd + j], etc.
 */
void matMul(double *matA, double *matB, double *matC, int size, int strd)
{
     int i, j, k;

     /* Initialize */
     for (i = 0; i < size; i++)
          for (j = 0; j < size; j++)
               matC[i * strd + j] = 0.0;

     /* Matrix Multiplication */
     for (i = 0; i < size; i++)
          for (j = 0; j < size; j++)
               for (k = 0; k < size; k++)
                    matC[i * strd + j] += matA[i * strd + k] * matB[k * strd + j];
}
```

# 例題プログラムによる性能評価(1)

- プログラム名: tm (一次元表現)、tm2d (二次元表現)
  - さまざまなサイズの行列積計算で、数値演算の実効性能を測定する。
- プログラムの構造
  - tm.c: 初期設定、時間計測、結果検証
  - matMul.c: 行列計算(高速化の対象)
  - second.c: 経過時間(or CPU時間)計測関数
- コンパイル方法
  - `cp /tmp/matrix.tar.gz .`
  - `tar xvfz matrix.tar.gz`
  - `cd matrix`
  - `make`
  - 詳しくは `Makefile` を参照

# 例題プログラムによる性能評価(2)

- 実行方法、結果の取得方法
  - 基本的にバッチ処理で実行する
  - `cp /tmp/run_s.sh .`
  - `qsub run_s.sh`
  - 実行が終わると、`run_s.sh.o????`(????はジョブの番号)というファイルに結果が出力される
- 行列サイズの種類
  - tm.c

```
int main(int argc, char **argv)
{
    int size[] = { 16, 32, 64, 128, 256, 512, 1024, 2048 };
    int i, Nsize = 1, nmeas;
    double tmres, tmlim, tmeas, err;
```

Nsizeは行列積を計算する行列サイズの種類、Nsize=8まで増やせるが、時間がかかるので、最初はNsize=1か2で試して、その後増やした方がよい

# 例題プログラムによる性能評価(3)

- 実行結果の例、および、各項目の意味
  - 行列のサイズ、計測した時間、行列積の計算回数、実効性能(概数)、数値誤差

```
CPU time is measured.
The time resolution is 0.0009998480 (sec).
Minimum duration for a measurement is 10 (sec).

  size   time(sec) n Calc    G-FLOPS     ERROR
 ----- ---------- ------ ---------- -----------
    16   15.18869  524288      0.283  2.04241e-15
    32   14.65277   65536      0.293  4.16353e-15
    64   15.16170    8192      0.283  1.30492e-14
   128   15.35267    1024      0.280  2.73106e-14
   256   16.55948     128      0.259  8.79056e-14
   512   14.06586       8      0.153  2.56351e-13
  1024   19.22008       1      0.112  5.84971e-13
  2048  162.19834       1      0.106  1.39013e-12
```


上の表は、一次元表現での計測プログラム(tm)をFujitsu PRIMERGY
単体CPUで実行した結果。右のグラフは、このうちGFLOPSの数値をプロットしたもの。

# 性能向上のためのヒント

- コンパイラにもう少しがんばってもらうには？
  - コンパイルオプションの調整による高速化
  - man などにより、情報取得
- 行列積の計算部分は、三重ループになっている
  - ループの順序を変えると、性能に違いが出るか?
- 無駄な計算を省くには?
  - 一次元表現の場合は、プログラム中でインデックス計算 `(i*strd+j)` を行っているが、・・・
- 行列の要素の並べ方を変えると?
  - 例えば `matB` の転置行列を作ると、要素のアクセス順序がどう変わるか?
- BLAS、LAPACKなどの数値演算ライブラリを利用する。
  - 時には、データの格納方法などを変更する必要が生ずる。

# 例題プログラムの行列データ（１）

例題のプログラムでは

$$\mathbf{A} = (a_{ij}) = \left( \sqrt{\frac{2}{n}} \sin\left[ \frac{(i-j)\pi}{n} \right] \right)$$

$$\mathbf{B} = (b_{ij}) = \left( \sqrt{\frac{2}{n}} \cos\left[ \frac{(i-j)\pi}{n} \right] \right)$$

$$c_{ij} = \sum_{k=1}^{n} a_{ik} b_{kj}$$

$$= \frac{2}{n} \sum_{k=1}^{n} \sin\left[ \frac{(i-k)\pi}{n} \right] \cos\left[ \frac{(k-j)\pi}{n} \right]$$

# 例題プログラムの行列データ(2)

三角関数の和の公式

$$\sin\alpha\cos\beta=\frac{1}{2}\sin\left(\alpha+\beta\right)+\frac{1}{2}\sin\left(\alpha-\beta\right)$$

を使うと

$$\sin\left[\frac{\left(i-k\right)\pi}{n}\right]\cos\left[\frac{\left(k-j\right)\pi}{n}\right]$$

$$=\frac{1}{2}\sin\left[\frac{\left(i-j\right)\pi}{n}\right]+\frac{1}{2}\sin\left[\frac{\left(i+j-2k\right)\pi}{n}\right]$$

↑

第二項は $k$ についての和でキャンセル

# 例題プログラムの行列データ(3)

解析的な答え $\tilde{c}_{ij}$ は

$$\tilde{c}_{ij} = \sin\left[\frac{(i-j)\pi}{n}\right]$$

$c_{ij}$ と $\tilde{c}_{ij}$ の差の自乗の和の平方根

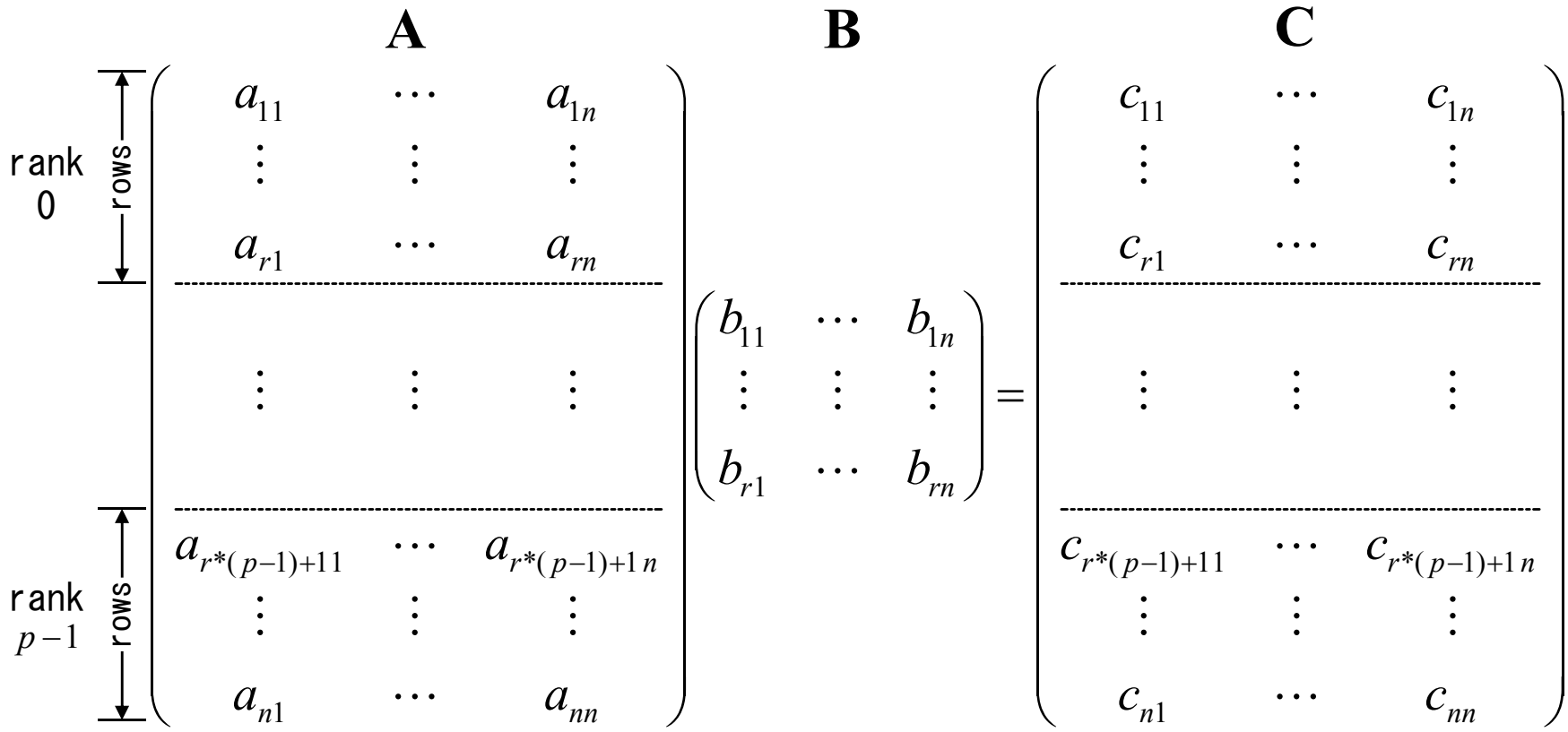
$$R = \sqrt{\sum_{i,j=1}^{n} \left| c_{ij} - \tilde{c}_{ij} \right|^2}$$

数値計算の結果 $c_{ij}$ のチェックとして
プログラム内で $R$ の値を表示

# MPIによる並列化(1)

nprocs個の並列プロセスが
それぞれ rows= $n$/nprocs 行づつ計算

$r$ =rows
$p$ =nprocs



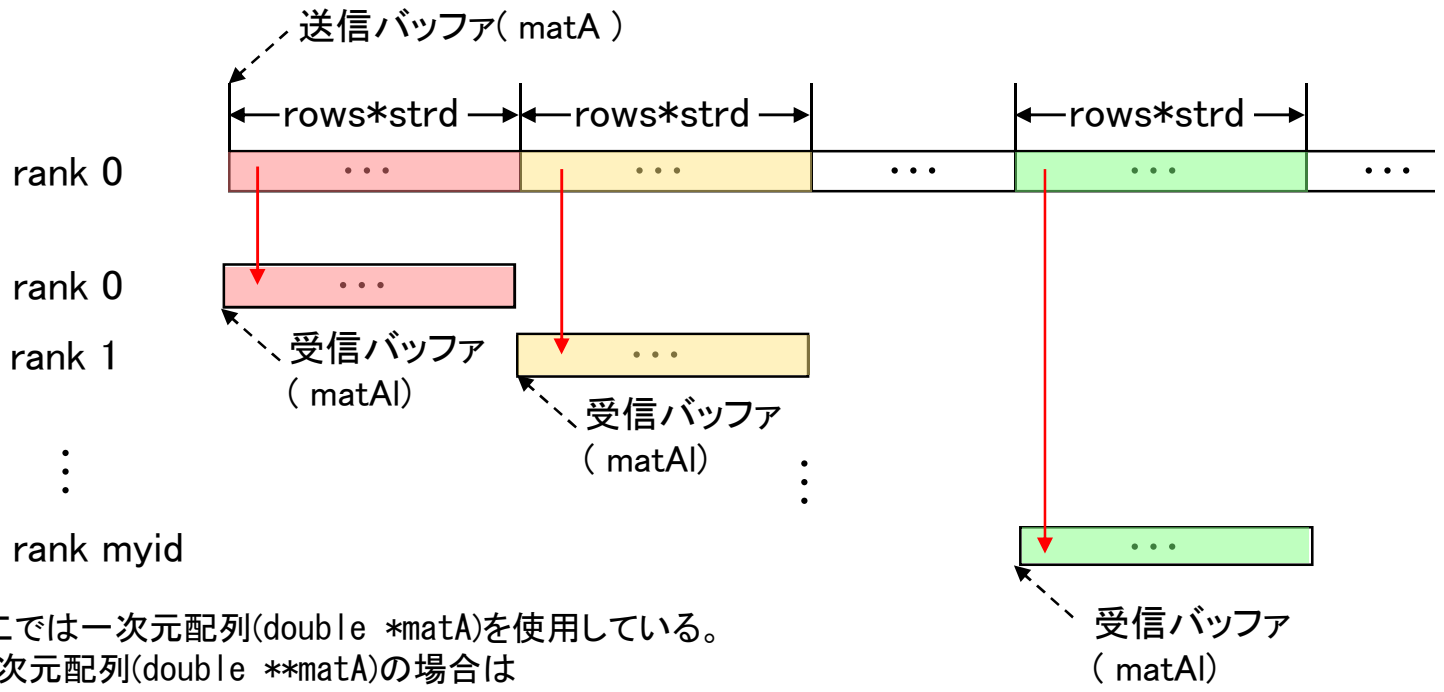

各プロセスは行列積計算のデータとして
**A**は一部(計算を担当する部分の行)、**B** は全体が必要

# MPIによる並列化(2)

並列版例題プログラムの計算手順

1. **A**、**B** の行列要素はrank 0のプロセスで計算
2. rank 0のプロセスから各プロセスへ
   - **A**の必要な行を送信(MPI_Scatter)
   - **B**の全ての行を送信(MPI_Bcast)
3. 各プロセスで担当部分の行列積を計算
4. 各プロセスからrank 0のプロセスへ計算結果を集める(MPI_Gather)

# 行列Aの分配(MPI_Scatter)

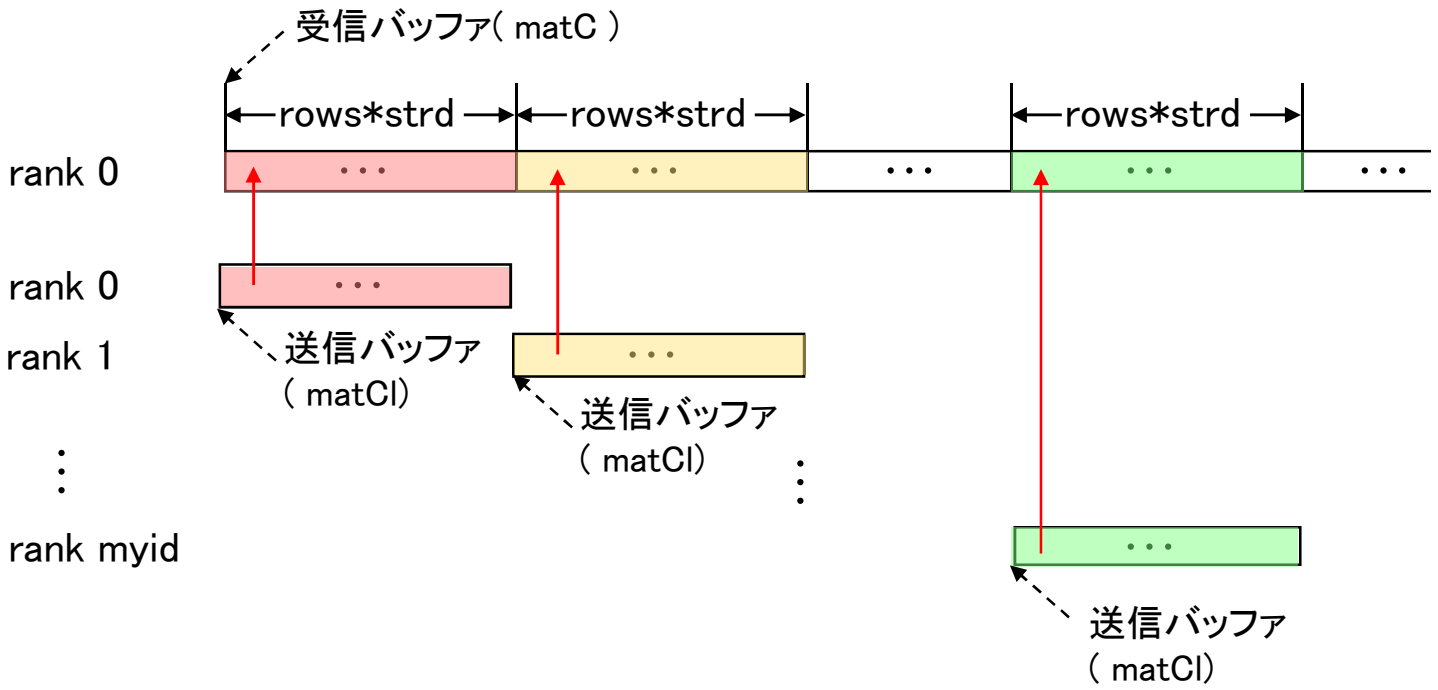



ここでは一次元配列(double *matA)を使用している。
二次元配列(double **matA)の場合は
&matA[0][0]に置き換える

```
MPI_Scatter(matA,
            rows * strd,
            MPI_DOUBLE,
            matAl,
            rows * strd,
            MPI_DOUBLE,
            0,
            MPI_COMM_WORLD);
```

送信バッファのアドレス
各プロセスに送信するデータの個数
送信データのタイプ(doubleのデータ)
受信バッファのアドレス
各プロセスが受信するデータの個数
受信データのタイプ(送信と同じ)
送信元プロセスのランク
全並列プロセスを含むコミュニケータ

# 行列Cの収集(MPI_Gather)




```
MPI_Gather(matCl,
           rows * strd,
           MPI_DOUBLE,
           matC,
           rows * strd,
           MPI_DOUBLE,
           0,
           MPI_COMM_WORLD);
```

送信バッファのアドレス
各プロセスが送信するデータの個数
送信データのタイプ(doubleのデータ)
受信バッファのアドレス
各プロセスから受信するデータの個数
受信データのタイプ(送信と同じ)
受信プロセスのランク
全並列プロセスを含むコミュニケータ

# MPI版の行列積プログラム(1)

- 二次元配列表現のプログラム: matMul2d_mpi.c

```
/* matMul2d.c: Matrix Multiplication in 2d representation of matrices */

#include <mpi.h>

/*
 * Calculate C = A * B
 *      A, B, C: 2d-array representation of matrices (size x strd).
 *      Thus, the (i,j) element is accessed by A[i][j], etc.
 */
void matMul(double **matA, double **matB, double **matC, double **matAl,
             double **matCl, int size, int strd, int myid, int nprocs)
{
    int i, j, k;
    int rows;

    rows = size / nprocs;
    MPI_Scatter(& matA[0][0], rows * strd, MPI_DOUBLE,
                & matAl[0][0], rows * strd, MPI_DOUBLE,
                0, MPI_COMM_WORLD);
    MPI_Bcast(& matB[0][0], size * strd, MPI_DOUBLE, 0, MPI_COMM_WORLD);
    for (i = 0; i < rows; i++)
        for (j = 0; j < size; j++)
            matCl[i][j] = 0.0;
    for (i = 0; i < rows; i++)
        for (j = 0; j < size; j++)
            for (k = 0; k < size; k++)
                matCl[i][j] += matAl[i][k] * matB[k][j];
    MPI_Gather(& matCl[0][0], rows * strd, MPI_DOUBLE,
               & matC[0][0], rows * strd, MPI_DOUBLE, 0, MPI_COMM_WORLD);
}
```

ただし、このプログラムでは、行列の先頭から、一次元的にデータが並んでいることが仮定されている。

詳しくは、`tm2d.c` 中の `matAlloc()` を参照。

# MPI版の行列積プログラム(2)

- 一次元配列表現のプログラム: matMul_mpi.c

```
/* matMul_mpi.c: Matrix Multiplication written with MPI routines */

#include <mpi.h>

/*
 * Calculate C = A * B
 *      A, B, C: 1d-array representation of matrices (size x strd)
 *      Thus, the (i,j) element is accessed by A[i * strd + j], etc.
 */
void matMul(double *matA, double *matB, double *matC, double *matAl,
            double *matCl, int size, int strd, int myid, int nprocs)
{
    int i, j, k;
    int rows;

    rows = size / nprocs;
    MPI_Scatter(matA, rows * strd, MPI_DOUBLE,
                matAl, rows * strd, MPI_DOUBLE,
                0, MPI_COMM_WORLD);
    MPI_Bcast(matB, size * strd, MPI_DOUBLE, 0, MPI_COMM_WORLD);
    for (i = 0; i < rows; i++)
        for (j = 0; j < size; j++)
            matCl[i * strd + j] = 0.0;
    for (i = 0; i < rows; i++)
        for (j = 0; j < size; j++)
            for (k = 0; k < size; k++)
                matCl[i * strd + j] += matAl[i * strd + k] * matB[k * strd + j];
    MPI_Gather(matCl, rows * strd, MPI_DOUBLE,
               matC, rows * strd, MPI_DOUBLE, 0, MPI_COMM_WORLD);
}
```

ここでは、集団通信だけを使って、並列化してみる。

行列Aはブロック分割してscatter、行列Bは全体をbroadcast、そして、結果はブロック分割された内容をgatherする。

# 例題プログラムによる性能評価（1）

- プログラム名： tm_mpi、tm2d_mpi
  - さまざまなサイズの行列積計算で、MPIによる並列化性能を測定
- プログラムの構造
  - tm_mpi.c: 初期設定、時間計測、結果検証
  - matMul_mpi.c: 行列計算（高速化の対象）
- コンパイル方法（例）
  - `cp /tmp/matrix.tar.gz .`
  - `tar xvfz matrix.tar.gz`
  - `cd matrix`
  - `make`
  - 詳しくは `Makefile` を参照

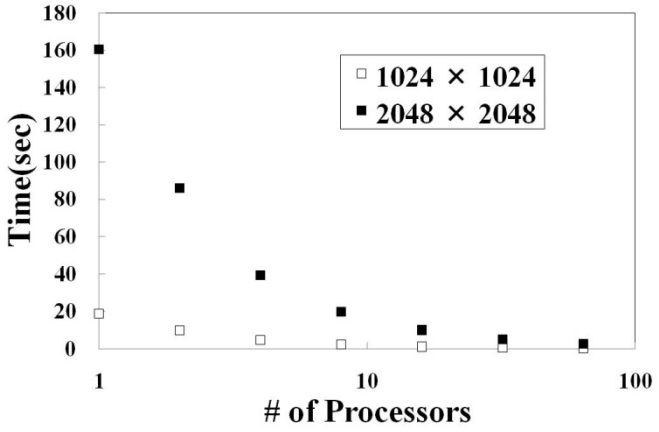
# 例題プログラムによる性能評価(2)

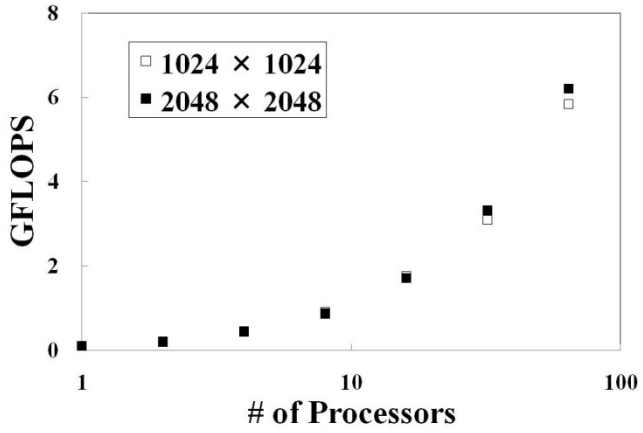
- 実行方法、結果の取得方法
  - バッチ処理で実行する
  - 1プロセス
    - `cp /tmp/run_01.sh .`
    - `qsub run_01.sh`
  - 2プロセス
    - `cp /tmp/run_02.sh .`
    - `qsub run_02.sh`

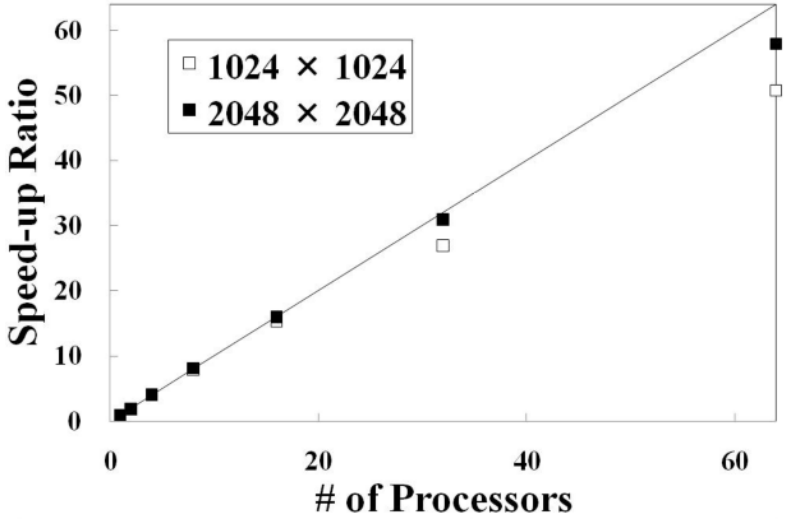
  (途中略)
  - 64プロセス
    - `cp /tmp/run_64.sh .`
    - `qsub run_64.sh`
  - 実行が終わると、`run_xx.sh.o????`(????はジョブの番号)というファイルに結果が出力される

# 例題プログラムによる性能評価(3)

- 実行結果の意味は単体CPU版のものと同じ
- 並列化の効果をグラフで見てみると・・・




上の図は、一次元表現での計測プログラム(tm_mpi)をFujitsu Primergyで実行した結果。

# 並列性能向上のためのヒント

- 単体CPUでの高速化手法のうち、すべてが並列プログラムでも効果的とは限らないが、試してみる価値は十分にある。
- 並列性能向上のための基本は、通信量の削減と負荷分散。しかし、行列積の場合、この部分でさらに効果を上げるのは難しい。
- 各CPUで実行される問題サイズが、ちょうどキャッシュを利用できる大きさの場合、単純に並列数倍(linear speed-up)よりも性能が向上する場合がある。
- 分割方法とアルゴリズムを変えてreduce演算を利用することで、高速化ができる場合がある。