

小サイズの行列-行列積の高速化 on SR16K

1 依頼内容

縦(横)のサイズが1000より小さい正方行列同士(縦サイズが数10から数100程度)の行列-行列積を高速に計算する方法に教えてください。計算機はSR16000を想定しています。

2 回答

一般的に、行列-行列積の高速化は行列サイズが $O(1000)$ 程度ならば、BLASを用いるのが効率的です。しかし、問題となっている行列のサイズは10-100程度ということなので、その場合には計算機ごとに用意されているルーチンなどを使うことをお勧めします。または、手動で行列積の高速化(ループ展開)をして、どの場合に高速になるかを調べるのも手です。

2.1 行列積ルーチンを使った高速化

SR16Kの場合、行列積を定義式通りに

```
do k=1,n
do j=1,n
do i=1,n
  c(i,j)=c(i,j)+a(i,k)*b(k,j)
end do
end do
end do
```

とコーディングした後、-Oss オプションでコンパイルし、SMT なしで実行すると、メーカー作成の行列積ルーチンが呼び出され、ある程度の性能が得られます。n=289では、(実数型倍精度、複素数型倍精度ともに)、Score までなら約40%、32coreだと約30%の実行効率が出ます。

2.2 手動で展開

手動で行列積を展開して高速化を目指すことも可能です。

```
do j=1,N,jp
do i=1,N,ip
do k=1,N
***
enddo
enddo
enddo
```

ただし、***の部分では、

```
S00=S00+B(k,i)*C(k,j)
S01=S01+B(k,i)*C(k,j+1)
S02=S02+B(k,i)*C(k,j+2)
S03=S03+B(k,i)*C(k,j+3)
.....
```

として行列積をブロックに分けて計算しています。

SR16K では、N は ip,jp で割り切れて、N/ip が 32 の倍数で ip*jp*2 が 24-36 程度がもっとも良く、6*4 (ip=6, jp=4) の最内側ループ 24 個の内積にするのが良い様です。複素数で行列計算する場合には、変数 A,B は最初の実数部, 虚数部に分けて計算し simd 命令が効く様にして、内積演算を行い $c(i,j)=\text{dcmplx}(\text{実数部}, \text{虚数部})$ として実行できます。

数 100 程度の行列サイズの場合、この操作で、80%以上の実行効率を達成することが可能です。(32smp,smt=off)