

**MPI対応の複素対称行列用
ハウスホルダ3重対角化法プログラム
開発報告書**

2012/10/24

(株)日立製作所 中央研究所

1. 計算手順の確認	3
2. ハウスホルダ変換機能の引数案【要相談事項1】	4
3. 係数行列の分散配置方法	5
4. 固有ベクトルの配置【要相談事項2】	6
5. Scalapackにおけるディスクリプタの仕様	7
6. 確認事項まとめ	8
7. 複素対称行列用3重対角化 性能評価結果	9
8. 複素対称行列用3重対角化 加速率	10
9. 複素対称行列用3重対角化 対ピーク性能	13

1. 計算手順の確認

一般固有値問題

$Ax = \lambda Bx$, A : 複素対称, B : 実対称正定値

Step #	処理内容	定義式	演算量 (r8換算)	MPI化	備考
1	コレスキー分解	$B = LL^T$	$1/3N^3$	Scalapack	
2	標準化変換	$C = L^{-1}AL^{-T}$	$2N^3$	(?)	$Ax = \lambda Bx \rightarrow \underline{L^{-1}AL^{-T}}L^Tx = \lambda L^Tx$
3	ハウスホルダ変換	$T = HCH^T$	$16/3N^3$	◎日立	I/F仕様提示(#2の出力に影響) 要相談事項1
4	逆変換	$H = \left(\prod_{k=1}^n H_k \right) I, H_k = (I - \alpha u_k u_k^T)$	$4N^3$	#5依存	要相談事項2
5	Schur分解	$T = QDQ^T, V = QH$	$O(N^2)$	×	逐次実行の場合、 N^2配列確保可まで
6	後退代入	$x = L^{-T}v, v = V_i (i=1,...,n)$	$2N^2$ (1本)	(?)	

2. ハウスホルダ変換機能の引数案【要相談事項1】

Scalapack互換性を考慮した案

CALL **PZSYTRD**(UPLO, N, A, IA, JA, DECSA, D, E, TAU, WORK, LWORK, INFO, **MAJOR**)

引数	型	I/O	意味	注意事項
UPLO	Char	I	‘L’(下三角)のみ指定可	
N,A(*,*)	Int, C*16	I,I/O	全体行列次元数, 部分行列	部分行列の分散方法はScalapack準拠
IA,JA	Int	I	A先頭アドレス。(1,1)のみ指定可	
DECSA(9)	int	I	ディスクリプタ。	(5)(6)のブロック数のみ有効 【付録1】
D(N),E(N)	C*16	O	3重対角行列(対角,副対角)	全プロセスで共有
TAU(N)	C*16	O	鏡像変換係数	全プロセスで共有
WORK(LWORK)	C*16	-	作業領域	
INFO	Int	O	エラーコード	
MAJOR	Char	I	プロセスマップ方向‘C’ or ‘R’	【要相談事項1】

【要相談事項1】

プロセスマップとは行列分散時のMPI rank番号の2Dテンプレート上へのマップ方向。(詳細は【3】行列分散)

‘C’:Column major か ‘R’:Row major かを指定する。

どちらかのみに限定すれば引数から除外することができる。

【特記事項】

本ハウスホルダ変換では、QR法用の固有ベクトルの初期値は作成しない仕様としている。(【4】詳述)

3. 係数行列の分散配置方法

プロセスマップ

0	4	8	12
1	5	9	13
2	6	10	14
3	7	11	15

MPI rank#

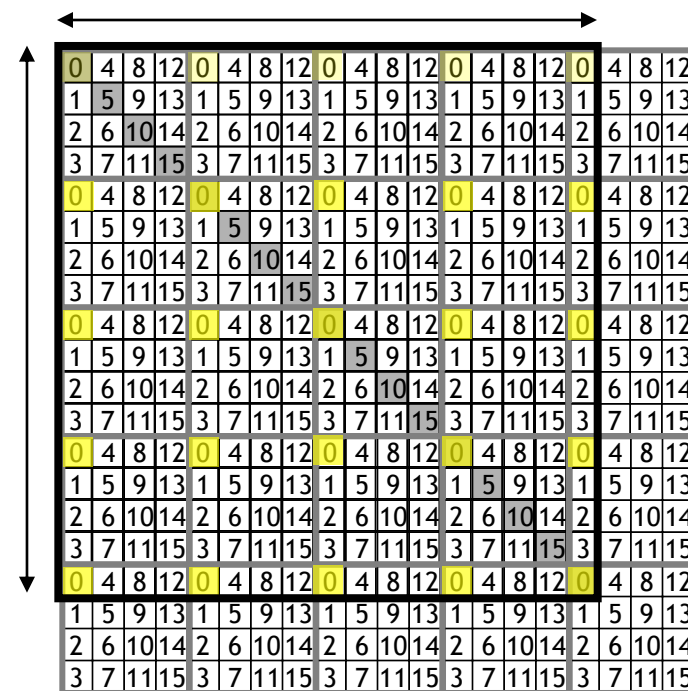
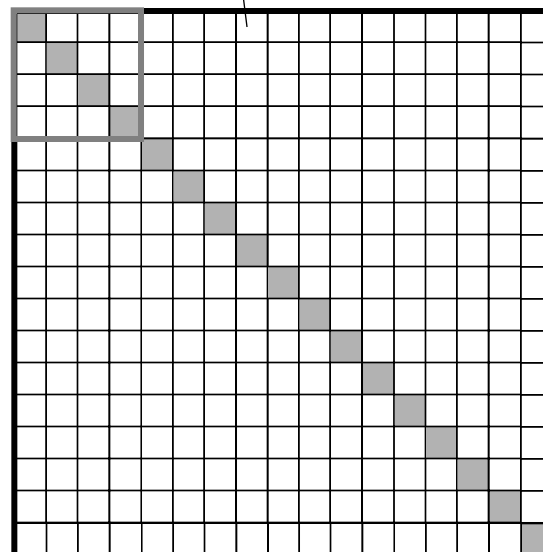
Column major

0	1	2	3
4	5	6	7
8	9	10	11
12	13	14	15

Row major

係数行列

NB × NBの小行列
: 分割の最小単位



プロセスマップ
を決定する

係数行列をブロック分割し、
プロセスマップに従い2D cyclicに分散

rank 0
部分行列

0	0	0	0	0
0	0	0	0	0
0	0	0	0	0
0	0	0	0	0
0	0	0	0	0

【MPI制約1】
正方かつ1辺2ベキ

【行列制約1】
ブロック数NBは8以上偶数
かつ縦横共通

【行列制約2】
係数行列は下三角部分に格納

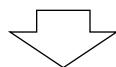
4. 固有ベクトルの配置【要相談事項2】

- ①【1】表の#5は3重対角行列のSchur分解で演算量 $O(N^2)$ だが全固有ベクトル必要
⇒ $N=50,000$ とすると固有ベクトルの配列は $16N^2 = 40\text{Gbyte}$ 必要。
- ②現逐次コードでは、ハウスホルダ変換内部でQR法の初期Schurベクトルを生成
⇒右からの逆変換はメモリ参照連続性の点で効率が悪い。

$$V_{init} = I(H_1 H_2 \cdots H_n), H_k = (I - \alpha u_k u_k^T) \quad \text{現逐次コード}$$

$$V_{init} = (H_1 H_2 \cdots H_n) I, H_k = (I - \alpha u_k u_k^T) \quad \text{ご提案コード 左からの変換でVは連続参照}$$

- ③固有ベクトル V は列ベクトルの集合 $V=\{v_1, v_2, \dots, v_n\}$ とすれば、上記逆変換は V の列単位の並列性を有する。⇒ V を列単位に分散配置すればMPI並列化効果大。



- ④Schur分解の並列化は効果が小さいが、データ分散化することで①のメモリネックは解消できる。

⇒ 固有ベクトル V の配置は 1プロセス上とするか分散配置とするか

5. Scalapackにおけるディスクリプタの仕様

Scalapackでは行列の分散配置に関する情報をディスクリプタと呼ぶ配列にて管理している。
今回の実装では分散配置に関する制約からハウスホルダ変換内部で使用するのはブロック長のみとなる。

DESCA(9) : int array : Scalapack統一仕様

(1) : block_cyclic_2D	: 未使用
(2) : CTXT	: 未使用
(3) : M	: 未使用
(4) : N	: 未使用
(5) : MB	: MB=NB
(6) : NB	: MB=NB
(7) : RSRC	: 未使用
(8) : CSRC	: 未使用
(9) : LLD	: 未使用

【行列制約1】

ブロック数NBは8以上偶数

かつ縦横共通

【行列制約2】

係数行列は下三角部分に格納

6. 確認事項まとめ

#	確認内容	備考
1	【要相談事項1】 ハウスホルダ変換の引数仕様にプロセスマップ方向を入れるかどうか (‘C’:Column major または ‘R’:Row major かを指定する) <補足:どちらかのみに限定すれば引数から除外することができる。>	マニュアル 4.1.PZSYTRD引数 仕様を参照
2	【要相談事項2】(1) ハウスホルダ変換で固有ベクトル初期値作成(逆変換)しない仕様 でよいか。分離した場合, Schur分解前で左からの逆変換を日立の 開発でよいか。	マニュアル5.固有ベク トルのハウスホルダ逆 変換プログラム PZSYGHR参照
3	【要相談事項2】(2) 固有ベクトルの分散配置は行うか。行う場合, 列ベクトルのブロック 分割でよいか。後続のSchur分解はこの固有ベクトル分散配置で MPIするか。	マニュアル3.3.固有 ベクトルデータの分 割と分配規則参照

7. 複素対称行列用3重対角化 性能評価結果

• measurement condition

machine : SR16000 model M1 (Power7 3.83GHz)

Compiler : HITACHI F90

Compile option : -Os -64 -model=M1 -parallel -i,L

Table1. Result of a measurement time-GFLOPS (SR16000/M1)

size N		Original 1SMP		PZSYTRD, PZSYGHR (MAJOR='R', NB=8)							
				1MPI-1SMP		4MPI-1SMP		16MPI-1SMP		64MPI-1SMP	
		CPU [sec]	GFLOPS	CPU [sec]	GFLOPS	CPU [sec]	GFLOPS	CPU [sec]	GFLOPS	CPU [sec]	GFLOPS
1000	Householder	4.6	1.1	0.8	6.3	0.3	18.6	0.2	32.5	0.2	33.5
	Inv-house	5.0	0.8	0.6	6.3	0.2	16.5	0.1	57.6	0.0	107.3
	Total	9.7	-	1.5	-	0.5	-	0.2	-	0.2	-
2000	Householder	50.7	0.8	6.5	6.6	1.9	22.8	0.6	66.3	0.4	102.5
	Inv-house	46.8	0.7	5.0	6.4	1.8	17.3	0.5	62.4	0.2	176.7
	Total	97.5	-	11.5	-	3.7	-	1.2	-	0.6	-
4000	Householder	489.0	0.7	46.2	7.4	12.9	26.4	3.8	89.6	1.5	235.2
	Inv-house	502.9	0.5	40.4	6.3	14.2	18.0	3.7	69.6	1.2	217.2
	Total	991.9	-	86.6	-	27.1	-	7.5	-	2.6	-
8000	Householder	5133.3	0.5	358.9	7.6	89.4	30.5	25.0	109.1	8.5	322.7
	Inv-house	6659.1	0.3	320.8	6.4	111.2	18.4	28.7	71.2	8.1	252.4
	total	11792.4	-	679.6	-	200.6	-	53.8	-	16.6	-

8. 複素対称行列用3重対角化 加速率(1)

• measurement condition

machine : SR16000 model M1 (Power7 3.83GHz)

Compiler : HITACHI F90

Compile option : -Os -64 -model=M1 -parallel -i,L

Table2. Result of a measurement time-acceleration (SR16000/M1)

size N		Original 1SMP		PZSYTRD, PZSYGHR (MAJOR='R', NB=8)							
				1MPI-1SMP		4MPI-1SMP		16MPI-1SMP		64MPI-1SMP	
		CPU [sec]	Accel [times]	CPU [sec]	Accel [times]	CPU [sec]	Accel [times]	CPU [sec]	Accel [times]	CPU [sec]	Accel [times]
1000	Householder	4.6	-	0.8	1.0	0.3	3.0	0.2	5.1	0.2	5.3
	Inv-house	5.0	-	0.6	1.0	0.2	2.6	0.1	9.1	0.0	16.9
	Total	9.7	-	1.5	1.0	0.5	2.8	0.2	6.3	0.2	7.5
2000	Householder	50.7	-	6.5	1.0	1.9	3.5	0.6	10.1	0.4	15.6
	Inv-house	46.8	-	5.0	1.0	1.8	2.7	0.5	9.8	0.2	27.6
	Total	97.5	-	11.5	1.0	3.7	3.1	1.2	10.0	0.6	19.3
4000	Householder	489.0	-	46.2	1.0	12.9	3.6	3.8	12.1	1.5	31.8
	Inv-house	502.9	-	40.4	1.0	14.2	2.8	3.7	11.0	1.2	34.2
	Total	991.9	-	86.6	1.0	27.1	3.2	7.5	11.6	2.6	32.9
8000	Householder	5133.3	-	358.9	1.0	89.4	4.0	25.0	14.3	8.5	42.4
	Inv-house	6659.1	-	320.8	1.0	111.2	2.9	28.7	11.2	8.1	39.5
	total	11792.4	-	679.6	1.0	200.6	3.4	53.8	12.6	16.6	41.0

8. 複素対称行列用3重対角化 加速率(2)

- measurement condition

machine : SR16000 model M1 (Power7 3.83GHz)

Compiler : HITACHI F90

Compile option : -Os -64 -model=M1 -parallel -i,L

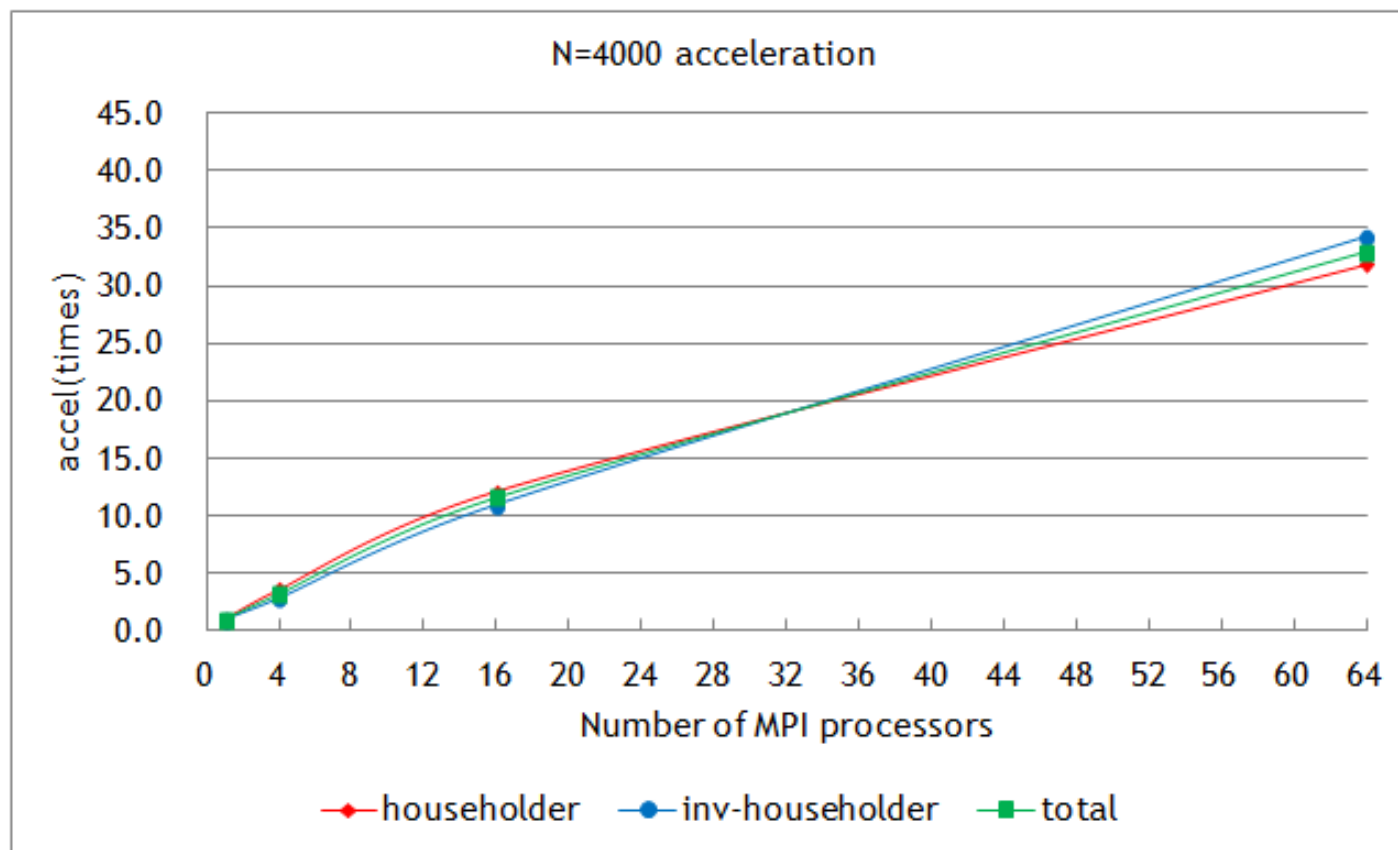


Fig.1 Result of N=4000 acceleration(SR16000/M1)

8. 複素対称行列用3重対角化 加速率(3)

- measurement condition

machine : SR16000 model M1 (Power7 3.83GHz)

Compiler : HITACHI F90

Compile option : -Os -64 -model=M1 -parallel -i,L

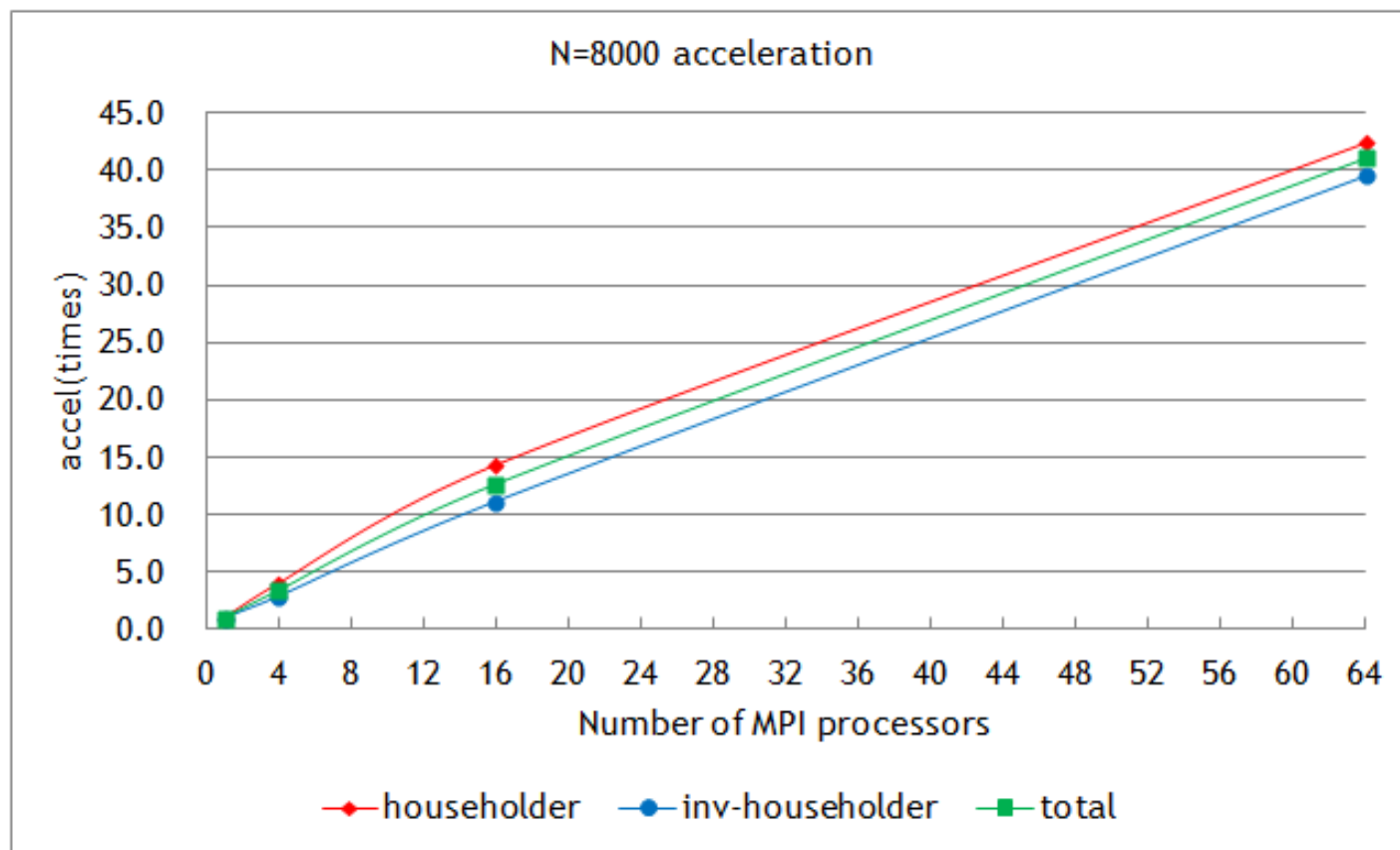


Fig.2 Result of N=8000 acceleration(SR16000/M1)

9. 複素対称行列用3重対角化 対ピーク性能(1)

・SR16000 model M1 RPeak

1CPU : 30.64GFLOPS

4CPU : 122.56GFLOPS

16CPU : 490.24GFLOPS

64CPU : 1960.96GFLOPS

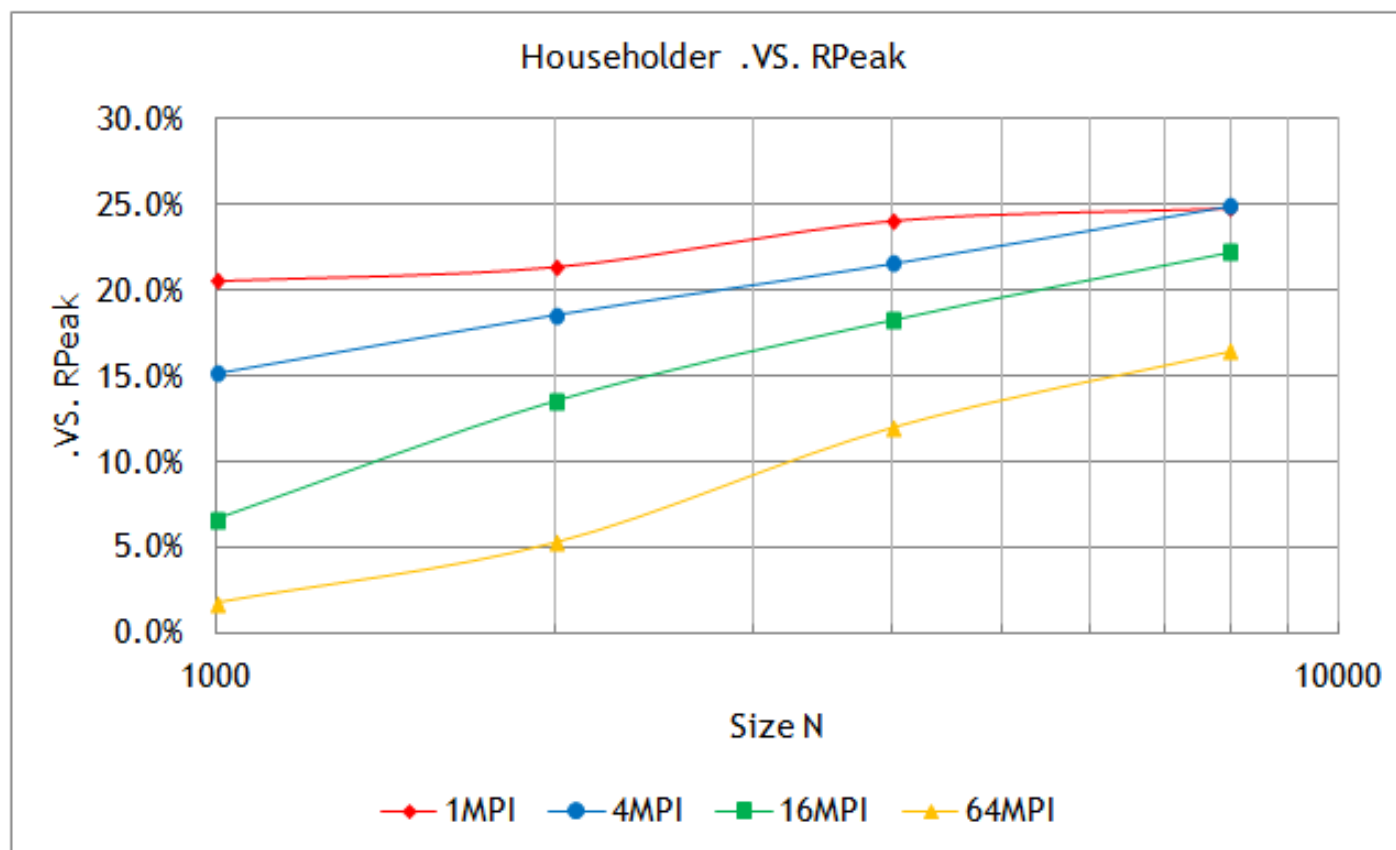


Fig.3 Householder .VS. RPeak (SR16000/M1)

9. 複素対称行列用3重対角化 対ピーク性能(2)

・SR16000 model M1 RPeak

1CPU : 30.64GFLOPS

4CPU : 122.56GFLOPS

16CPU : 490.24GFLOPS

64CPU : 1960.96GFLOPS

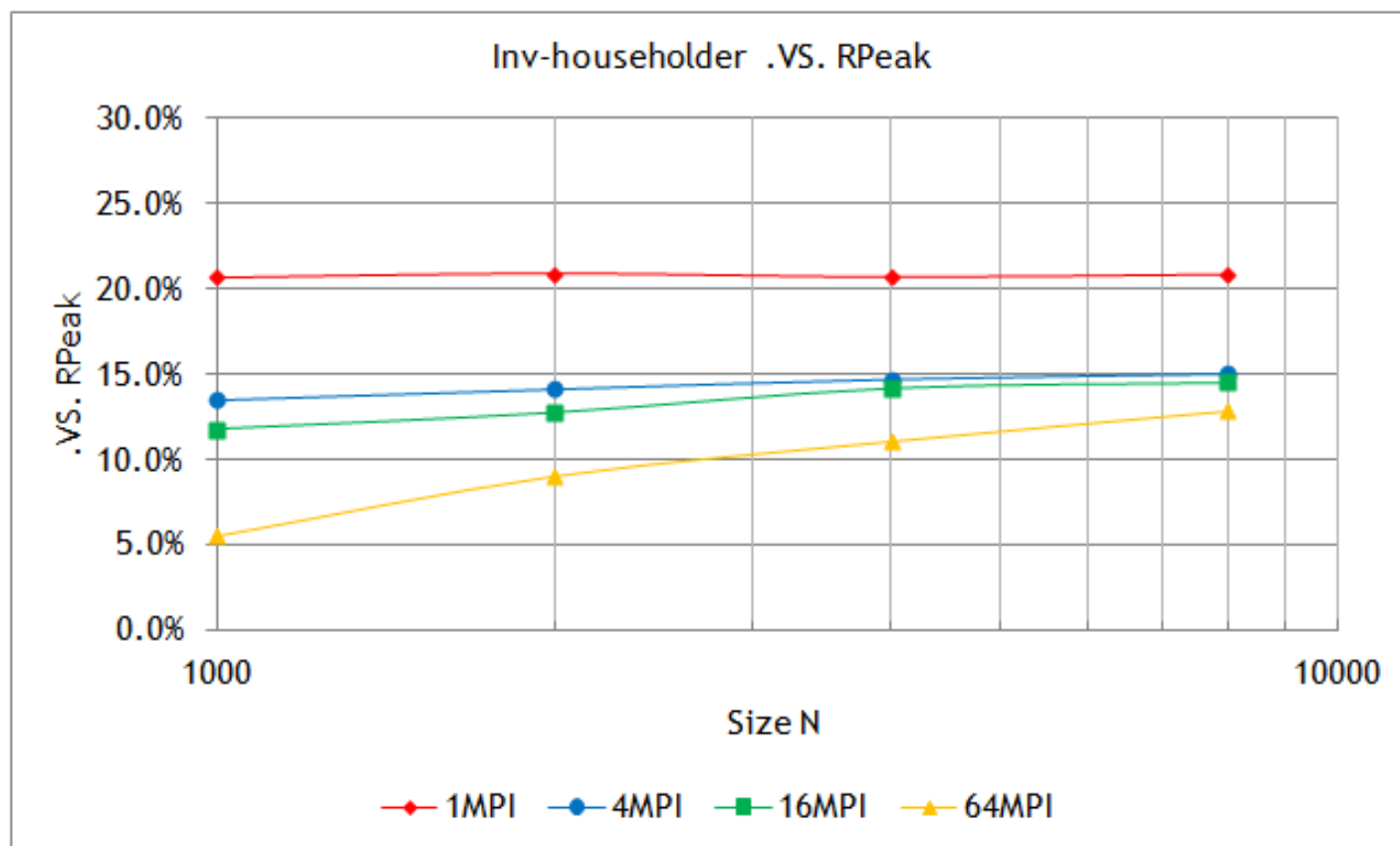


Fig.4 Inv-householder .VS. RPeak (SR16000/M1)