

# MAGMAとGPUを用いた線型常微分方程式の解析解計算

～GPUベンチマークテストの一環として～

幸谷 智紀

静岡理科大学 総合情報学部 <http://cs-tklab.na-net.jp/>

## 1. 目的

- ①CUDAが普及したとはいえ、GPUプログラミングは煩雑で習得が難しい(という人が多い)。
- ②倍精度線型計算はLAPACK/BLAS互換の高性能ライブラリの使用がスタンダードに。

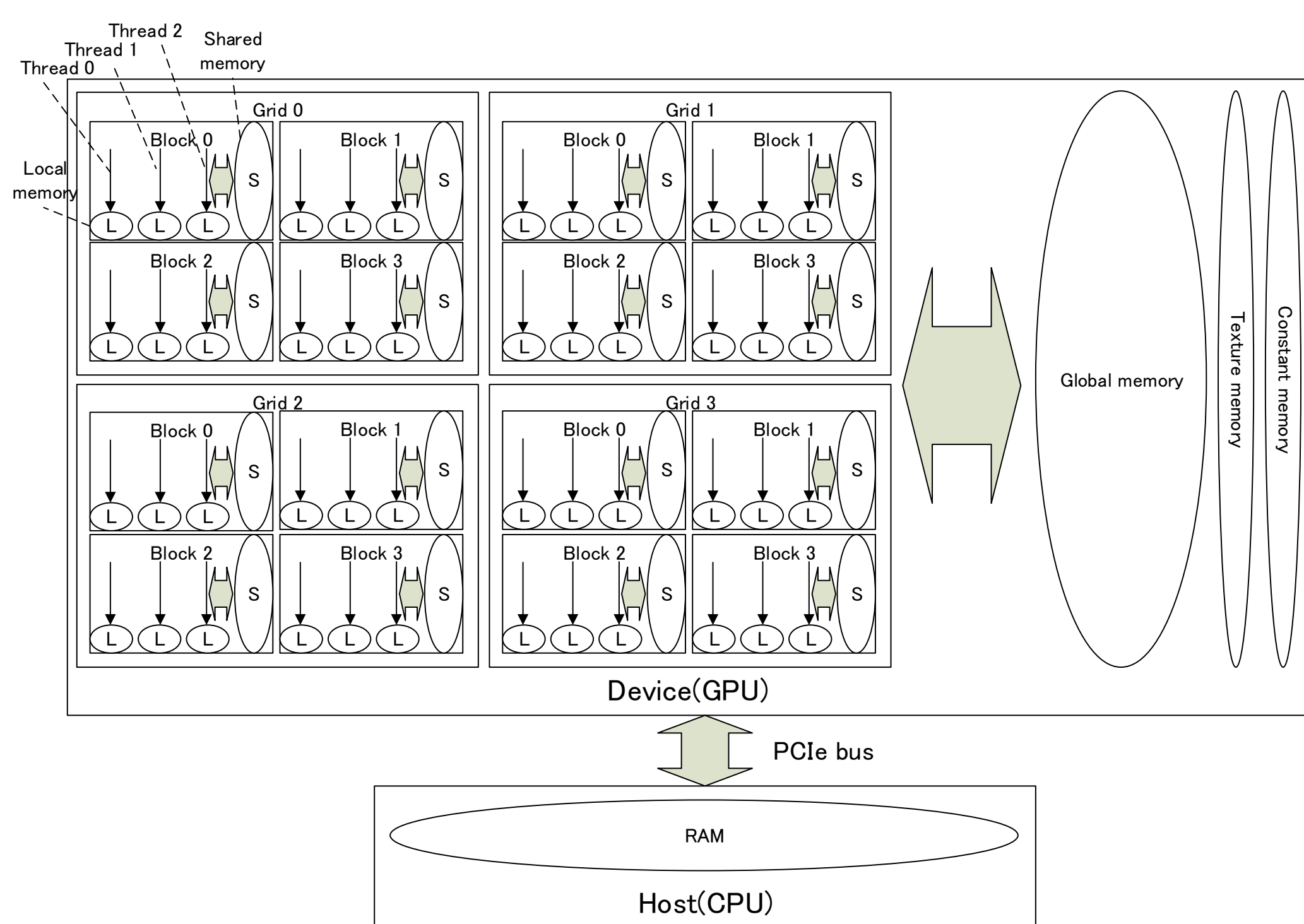
○LAPACK互換のMAGMA(Matrix Algebra on GPU and Multicore Architectures)を使ったベンチマークテストを行い、教育用コンテンツとして使いたい。

○線型常微分方程式(LODE)の解析解を固有値計算を用いて解いてみる(倍精度計算で高精度な対角化が可能な行列に限定)。・・・適度に複雑で、(理工系の数学的素養があれば)誰でも分かるものを選択。

## 2. GPUとMAGMA

### ●GPUの特徴と機能

- ・低性能な演算コアを多数備えるので並列処理が得意
- ・グラフィックスカード上のメモリを使用し、CPU(Host)側のRAMとは分離されている。



- ・PCIeバスを通じてのデータ転送が低速

- ・CUDA Toolkitを使用してのプログラミング(特にカーネル関数)が複雑

### ●MAGMAの特徴

- ・オープンソースソフトウェアとして無料で使用できる(<http://icl.cs.utk.edu/magma/>)

|                      |            |        |  |
|----------------------|------------|--------|--|
|                      |            | MAGMA  |  |
| LAPACK               | MAGMA BLAS | CUBLAS |  |
| BLAS Level1, 2 and 3 |            | CUDA   |  |

- ・通常のCPU用プログラミング(ホストプログラム)として作成可能
- ・LAPACKと同様の関数が使用可能→LAPACKベースのホストプログラムのGPU使用対応作業が楽

```
// MAGMA (Column-Major)
magma_dgeev('N', 'V', dim, magma_ma, dim, re_eig, im_eig, NULL,
dim, magma_revec, dim, h_work, (magma_int_t)lwork_num, &info);
```

```
// LAPACK (Row-Major or Column-Major)
info = LAPACKE_dgeev(LAPACK_COL_MAJOR, 'N', 'V', dim, ma, dim,
re_eig, im_eig, NULL, dim, revec, dim);
```

## 3. 線型常微分方程式(ODE)の解析解

$A \in \mathbb{R}^{n \times n}$  に対する行列指数関数  $\exp(A)$  は次のような定係数線型常微分方程式の解析解の表現に利用される。

$$\begin{cases} \frac{dy}{dt} = Ay \\ y(0) = y_0 \in \mathbb{R}^n \end{cases}$$

このとき解析解  $y(t)$  は行列指数関数を用いて

$$y(t) = \exp(tA)y_0$$

と表現できる。

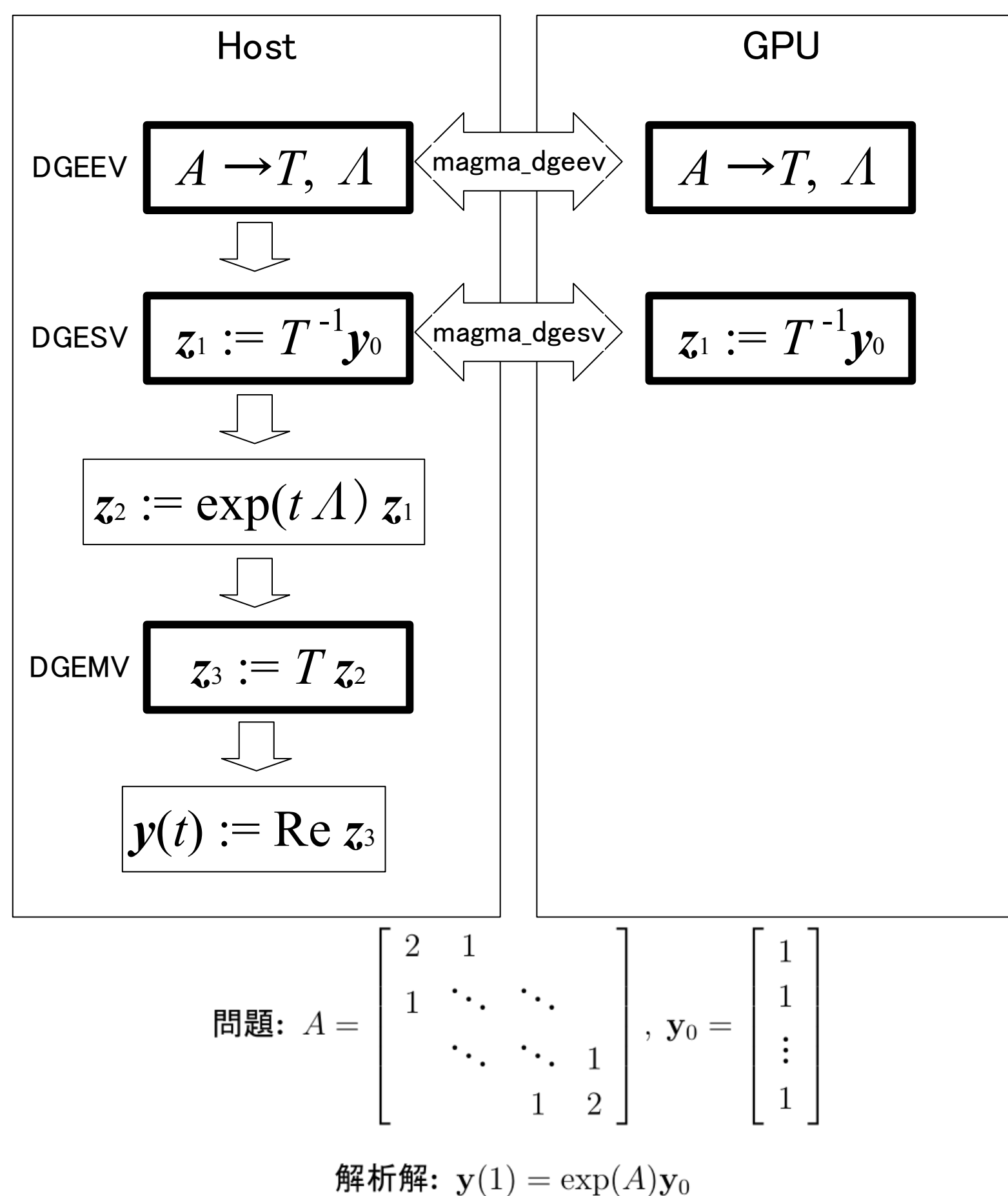
今、行列  $A$  が正則行列  $T \in \mathbb{C}^{n \times n}$  を用いて

$$T^{-1}AT = \Lambda = \text{diag}(\lambda_i)$$

と高精度に対角化できるとき、線型常微分方程式の解析解は

$$y(t) = T (\text{diag}(\exp(\lambda_i t))(T^{-1}y_0))$$

として計算できる。



問題:  $A = \begin{bmatrix} 2 & 1 \\ 1 & \dots \\ \dots & \dots \\ 1 & 2 \end{bmatrix}, y_0 = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ \vdots \\ 1 \end{bmatrix}$

解析解:  $y(1) = \exp(A)y_0$

## 4. 行列指数関数 $\exp(A)$

$A \in \mathbb{R}^{n \times n}$  に対する行列指数関数  $\exp(A)$  は

$$\begin{cases} \frac{dY}{dt} = AY \\ Y(0) = Y_0 \in \mathbb{R}^{n \times n} \end{cases}$$

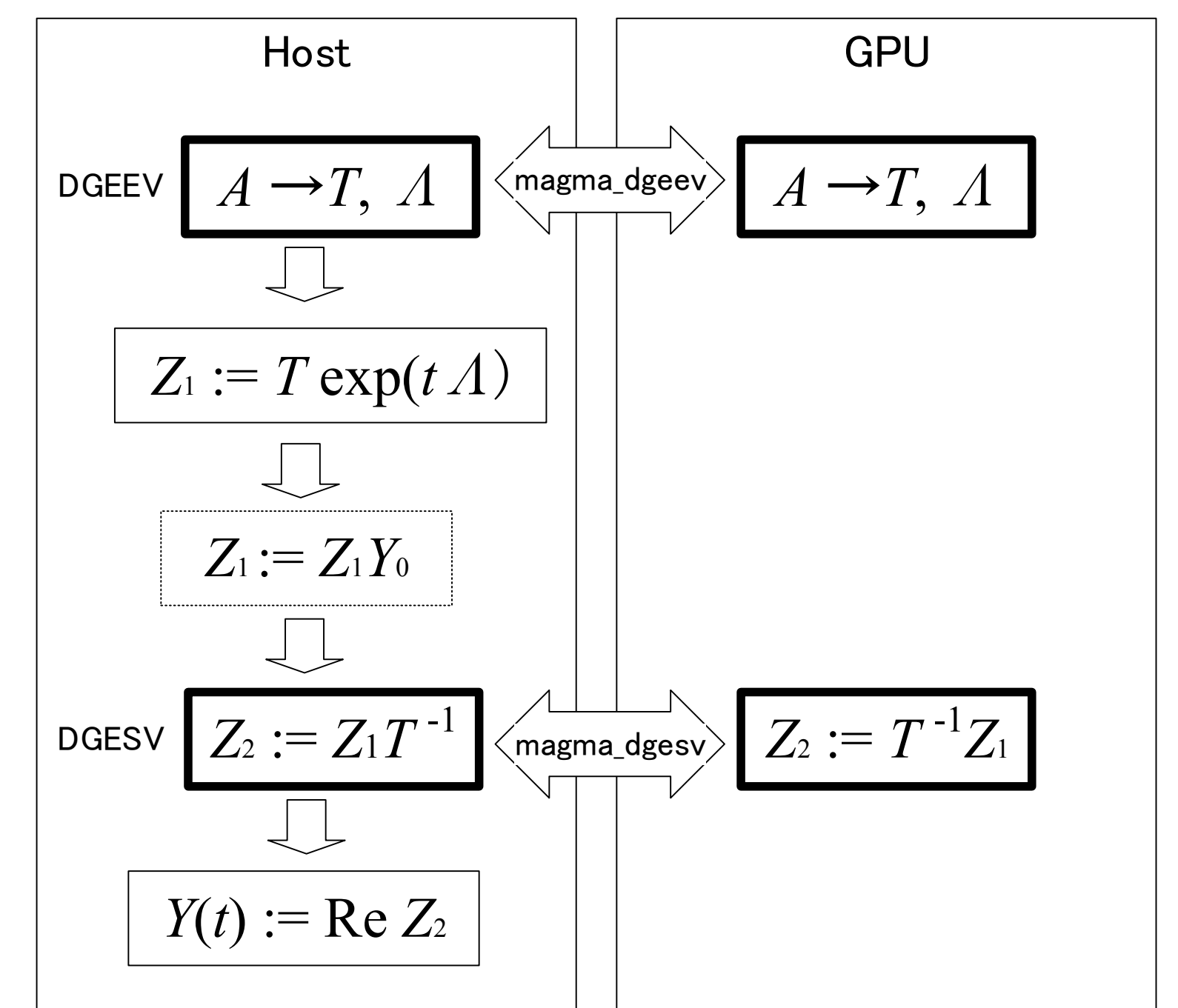
という行列常微分方程式の解析解  $Y(t)$  として

$$Y(t) = \exp(tA)Y_0$$

と表現できる。今回は  $Y_0 = I_n$  の場合のみ実装したので

$$Y(t) = \exp(tA) = (T \exp(t\Lambda)) T^{-1}$$

である。

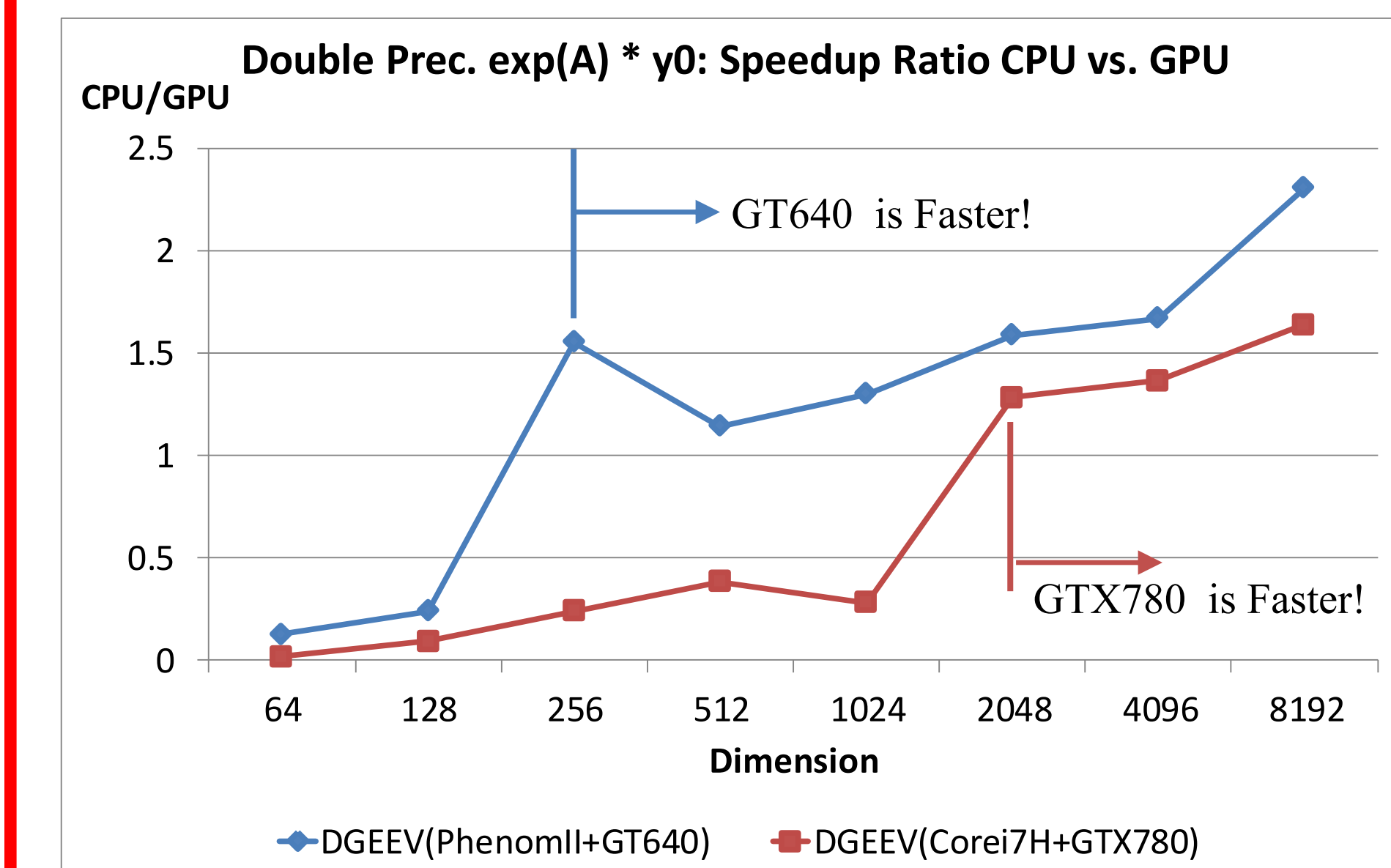


## 5. ベンチマークテスト

[共通Software] CUDA 6.0 x86\_64 + MAGMA 1.4.1 + Intel C Compiler 14.04

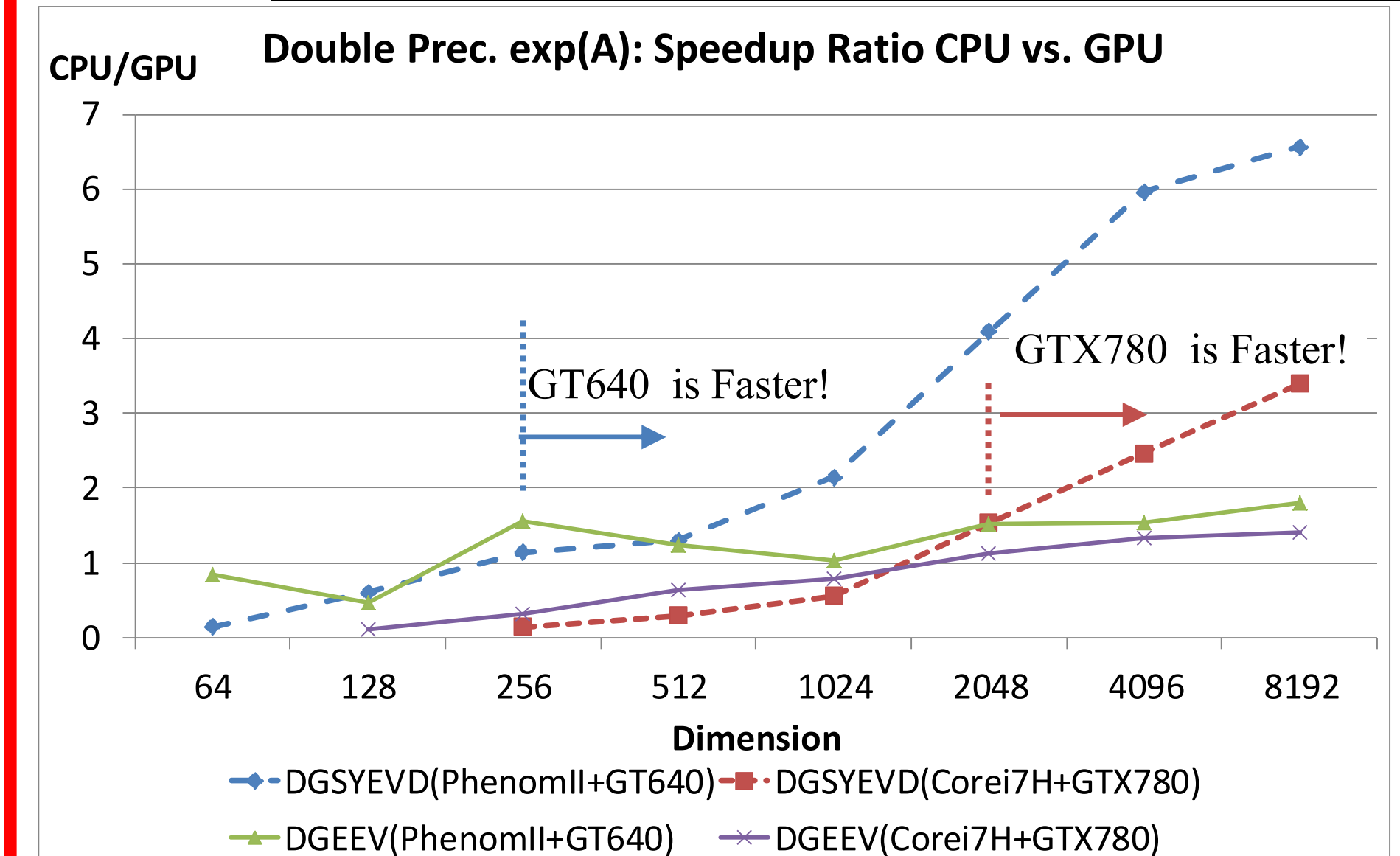
[Corei7H+GTX780] Intel Core i7 4770(3.4GHz) + GTX780 (3GB)

[PhenomII+GT640] AMD Phenom II x6 + GT640 (512MB)



- ・計算性能はCPU, GPU 共、Core i7H (+ GTX780)が圧倒的に高い
- ・CPU性能に対するGPU性能向上比はPhenom II x6 + GT640の方が高い

| Dim  | Time(s)  |                 |          | Time(s) |                |          |
|------|----------|-----------------|----------|---------|----------------|----------|
|      | PhenomII | Phenom-II+GT640 | RelDiff  | Corei7H | Corei7H+GTX780 | RelDiff  |
| 64   | 0.1      | 1.0             | 2.58E-15 | 0.01    | 0.59           | 2.58E-15 |
| 128  | 0.3      | 1.4             | 3.20E-14 | 0.06    | 0.65           | 2.02E-14 |
| 256  | 2.8      | 1.8             | 3.24E-15 | 0.4     | 1.67           | 1.49E-13 |
| 512  | 7.9      | 6.9             | 8.41E-15 | 2.15    | 3.29           | 1.61E-13 |
| 1024 | 30.0     | 23.0            | 5.11E-14 | 5.84    | 5.62           | 1.06E-14 |
| 2048 | 172.2    | 108.4           | 6.92E-13 | 26.78   | 20.85          | 8.30E-13 |
| 4096 | 1305.5   | 781.7           | 6.88E-14 | 189.51  | 138.71         | 2.13E-13 |
| 8192 | 6131.5   | 2656.6          | 2.56E-12 | 1499.66 | 913.38         | 1.12E-11 |



- ・計算性能に関してはベクトルのケースと同様の傾向
- ・実対称行列列用の計算はCPU側の処理が少なく、GPUによる性能向上率が高い

| Dim  | Time(s)  |                 |          | Time(s) |                |          |
|------|----------|-----------------|----------|---------|----------------|----------|
|      | PhenomII | Phenom-II+GT640 | RelDiff  | Corei7H | Corei7H+GTX780 | RelDiff  |
| 128  | 0.52     | 0.86            | 1.17E-14 | 0.03    | 0.02           | 2.05E-14 |
| 256  | 1.62     | 1.42            | 0        | 0.08    | 0.56           | 0        |
| 512  | 2.81     | 2.16            | 1.23E-14 | 0.23    | 0.78           | 1.47E-14 |
| 1024 | 9.26     | 4.31            | 2.44E-14 | 1.19    | 2.14           | 5.67E-14 |
| 2048 | 56.6     | 13.81           | 5.32E-14 | 8.98    | 5.87           | 1.64E-14 |
| 4096 | 457.95   | 76.71           | 0        | 74.08   | 30.09          | 1.49E-14 |
| 8192 | 3014.67  | 458.94          | 2.32E-13 | 595.81  | 175.39         | 1.75E-13 |

→今後の課題: 行列ごとに「成功」「失敗」のデータベースを作成