

MATLAB 版 MuPAT ユーザーガイド

八木武尊

2019 年 4 月 15 日

目次

1	はじめに	2
1.1	システム要件	2
2	MuPAT 起動方法	2
2.1	インストール	2
2.2	起動	2
2.3	注意点	3
3	使用方法	3
3.1	変数の定義	3
3.2	型の変換	4
3.3	入出力	5
3.4	その他の DD, QD 関数	5
3.5	算術演算	5
3.6	関係演算子	6
3.7	論理演算子	7
3.8	配列における要素の代入や抽出	7
3.9	その他の MATLAB 関数	8
3.10	Scilab 版 MuPAT との違い	9
4	並列処理	9
4.1	FMA	9
4.2	AVX2	9
4.3	OpenMP	10
4.4	高速化されている処理	10
	参考文献	10
	付録 1: フォルダ構造	12

1 はじめに

MuPAT[1] は MATLAB 上に実装した擬似 4 倍精度数 (double-double)[2], 擬似 8 倍精度数 (quad-double)[3] が扱える高精度演算環境です. 現在は MacOS のみ提供しています. MuPAT では MATLAB コマンドウィンドウを用いて対話的に, また, 倍精度 (double) のコードを変えることなく, 簡単に上記の高精度演算を扱うことができます. さらに, MuPAT では頻出するベクトル演算と行列演算に FMA, AVX2, OpenMP を用いた並列処理を適用しており, 高速な処理ができます. 並列処理の詳細についてはユーザーガイドの並列処理の項目を参照してください.

1.1 システム要件

MuPAT は以下の環境があればすべての機能が利用可能です.

Mac OS

MATLAB R2017a 以降

CPU は intel では Haswell 以降, AMD は調査中

2 MuPAT 起動方法

2.1 インストール

MuPAT toolbox をホームページ <https://www.ed.tus.ac.jp/1419521/> もしくは, <https://github.com/HotakaYagi/MuPAT> から zip ファイルをダウンロードし, 解凍した後, MATLAB ディレクトリ下など, 作業しやすいディレクトリへ保存してください.

2.2 起動

1. MATLAB を起動

2. MATLAB 上でカレントディレクトリを MuPAT ディレクトリへ移動

3. MATLAB コマンドウィンドウで以下のコマンドを入力する

```
>>startMuPAT(n1, n2, n3)
```

※ MuPAT は入力引数としてスレッド数, AVX2 の on/off, FMA の on/off を選べます. (引数なしはスレッド数 = 1 で FMA, AVX2 はオフです) FMA, AVX2, スレッド数の説明についてはユーザーガイドの並列処理の項目を参照してください.

表 2.1 startMuPAT への入力引数

	スレッド数 (n1)	AVX2 (n2)	FMA (n3)
高速化 ON	$\{n \mid n \in \mathbb{N}, n > 1\}$	1	1
高速化 OFF	1(逐次) or 引数なし	0 or 引数なし	0 or 引数なし

例)

```
>> startMuPAT: スレッド数=1, AVX2 無効, FMA 無効. (逐次計算)
```

```
>> startMuPAT(2,1,1): 2 スレッドで AVX2 有効, FMA 有効.
```

a = DD(1) と MATLAB コマンドウィンドウで入力し, 次の結果が出力されれば MuPAT は正常です.

```
>> a = DD(1)
```

```
a =  
hi: 1  
lo: 0
```

2.3 注意点

問題の要求メモリサイズに気をつけてください。MATLAB の mex 機能は要求メモリサイズが大きいと MATLAB が強制終了してしまうことがあります。使用しているスレッド数によっても変わります。

さらに、並列化を使用した際には計算順序が逐次の時と変わる場合があります、丸め誤差の影響で計算結果が逐次のときと比べて完全に一致はしない場合があります。

3 使用方法

MuPAT では、擬似 4 倍精度数 (double-double, DD) を利用した DD 演算と、擬似 8 倍精度数 (quad-double, QD) を利用した QD 演算を行うことができます。これらの演算は倍精度演算と同様のコマンドでスカラーやベクトル、行列演算などを扱うことができます。MATLAB 上での操作で、普段と異なるのは、DD 型と QD 型の変数の宣言 (3.1 節)(または変換 (3.2 節)) が別途必要という点と、入出力のやり方が異なるという点 (3.3 節)、いくつかの関数の呼び出し方法が異なる点 (3.4 節) です。まず MATLAB と操作が異なる点を述べ、その後 MATLAB と同じ操作で実行可能な点を述べます。

3.1 変数の定義

MATLAB 上での数値はすべて倍精度 (double) で扱われています。MuPAT 上では、擬似 4 倍精度演算の数のために DD 型という新しいデータ型を、擬似 8 倍精度演算の数のために QD 型という新しいデータ型を定義しています。DD は hi(上位パート) と lo(下位パート) の 2 つの double 型変数を、QD は最上位パートから最下位パートまでそれぞれ hh, hl, lh, ll の 4 つの double 型変数を持ちます。DD 変数 A の上位パート hi や下位パート lo の値はそれぞれ A.hi, A.lo と記述することで参照でき、QD 変数 B も最上位から最下位までそれぞれ B.hh, B.hl, B.lh, B.ll と記述すれば値を参照できます。

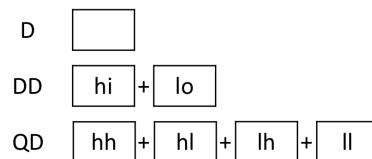


図 3.1 DD 型の数と QD 型の数のイメージ

DD 型を定義するためには以下の DD 関数が必要です。DD 関数は引数を 2 個まで定義できます。入力に関してスカラー・行列は区別しません。

```
>> DD(a, b)
```

- ・DD() のように引数が 0 個なら上位パート hi と下位パート lo には値 0 が割り当てられます。
- ・DD(a) のように引数が 1 個の場合は a が上位パート hi へ割り当てられ、下位パート lo には値 0 が割り当てられます。
- ・引数が 2 個の場合、上位パート hi と下位パート lo に入力した値 a, b が割り当てられます。

QD 型を定義するためには以下の QD 関数が必要です。QD 関数は引数を 4 個まで定義できます。入力に関してスカラー・行列は区別しません。

```
>> QD(a, b, c, d)
```

- ・ QD() のように引数が 0 個なら最上位パート hh から最下位パート ll までそれぞれ値 0 が割り当てられます。
- ・ QD(a) のように引数が 1 個の場合は最上位パート hh 以外、つまり b 以降の値 (hl, lh, ll) には値 0 が割り当てられます。
- ・ QD(a, b) のように引数が 2 個の場合、上 2 つの位 (hh, hl) に a, b が、下 2 つの位 (lh, ll) に値 0 が割り当てられます。
- ・ QD(a, b, c) のように引数が 3 個なら上 3 つの位 (hh, hl, lh) に a, b, c が、最下位パート ll には値 0 が割り当てられます。
- ・ 引数が 4 つの場合は、最上位パート hh から最下位パート ll に入力した値 a, b, c, d が割り当てられます。

例)

```
>> a = DD(1, 0)
```

```
a =
```

```
hi: 1
```

```
lo: 0
```

```
>> b = QD(3.14, 0, 0, 0)
```

```
b =
```

```
hh: 3.1400
```

```
hl: 0
```

```
lh: 0
```

```
ll: 0
```

```
>> A = DD([1, 2, 3; 4, 5, 6])
```

```
A =
```

```
hi: [2x3 double]
```

```
lo: [2x3 double]
```

```
>> A.hi
```

```
ans =
```

```
1 2 3
```

```
4 5 6
```

```
>> A.lo
```

```
ans =
```

```
0 0 0
```

```
0 0 0
```

3.2 型の変換

double 型変数 a, DD 型変数 b, QD 型変数 c のデータの型を変換したいときは以下のようにしてください。

例)

DD 型変数 b を double 型にしたい場合は

```
>> double(b)
```

double 型変数 a を QD 型にしたい場合は

```
>> QD(a)
```

表 3.1 型の変換方法

from\to	D	DD	QD
D		DD(a)	QD(a)
DD	double(b)		QD(b)
QD	double(c)	DD(c)	

3.3 入出力

MuPAT には次の入出力関数があります。この関数はスカラー変数のみ使用できます。

・ddinput(a)

文字で表される数値列を DD 型の数値へ変換します。

・qdinput(a)

文字で表される数値列を QD 型の数値へ変換します。

・ddprint(a)

十進 31 桁で文字列として DD 型の変数を表示します。

・qdprint(a)

十進 63 桁で文字列として QD 型の変数を表示します。

3.4 その他の DD, QD 関数

擬似乱数の作成方法は、例えば DD では上位パート、下位パートそれぞれで MATLAB 関数によって乱数を作り、正規化して 1 つの値としています。QD も同様に最上位から最下位までそれぞれ MATLAB 関数によって乱数を作り、正規化して 1 つの値としています。

・ddrand(m, n)

$m \times n$ 型の DD 型擬似乱数行列を返します。

・qdrand(m, n)

$m \times n$ 型の QD 型擬似乱数行列を返します。

・ddeye(m, n)

$m \times n$ 型の DD 型単位行列を返します。

・qdeye(m, n)

$m \times n$ 型の QD 型単位行列を返します。

3.5 算術演算

3.5.1 四則演算子

DD, QD, 混合精度演算では四則演算子 (+, -, *, /) を使用することができます。除算はスカラーのみ対応しています。型の異なる高精度演算をするときは、計算結果は精度が高い方の型で保存されます。

例 1)

double 型と DD 型を使用して $1 + 10^{-20}$ を計算し、その差を表示します。

```
>> d = 1 + 1.0E-20
```

```
d =
```

```
1
```

```
>> e = DD(1, 1.0E-20)
```



```

ans =
logical
0
>> a < b
ans =
logical
1
>> a ~= c
ans =
logical
1
>> a == b.ii
ans =
logical
1

```

3.7 論理演算子

DD, QD 型でも MATLAB と同じように論理演算子 (&, |, ~) を使用することができます.

例 6) DD での論理演算子

```

>> A = DD([1,0,3; 4,5,0]);
>> B = DD([0,0,3;4,0,6]);
>> A & B
ans =
2x3 logical array
0 0 1
1 0 0
>> A | B
ans =
2x3 logical array
1 0 1
1 1 1
>> ~A
ans =
2x3 logical array
0 1 0
0 0 1

```

3.8 配列における要素の代入や抽出

・ $A(i, j) = b$

配列 A の (i, j) 要素に変数 b の値を代入します. 左辺の精度が右辺よりも高くないと代入は反映されません.

例)

```

>> A = DD([1,2,3; 4,5,6]);
>> A(2, 3)

```



```

ans =
hi: 6
lo: 0
>> A(2, 2) = 10;
>> A.hi
ans =
1 2 3
4 10 6
>> A.lo
ans =
0 0 0
0 0 0
>> A(2, 2) = QD(1); これは A が DD 型配列なため QD 型要素を代入できずにエラー

```

3.9 その他の MATLAB 関数

DD, QD 型でも MATLAB で定義されたいくつかの関数を使用することができます。

3.9.1 サポートしている関数

以下の操作は MATLAB と同様に扱うことができます。

- ・ `A'`
A の転置行列を返します。
- ・ `[A, B]`
A, B を水平方向に連結します。
- ・ `[A; B]`
A, B を垂直方向に連結します。
- ・ `[m, n] = size(a)`
a の行の長さ m と列の長さ n を返します。
- ・ `abs(a)`
a の絶対値を返します。
- ・ `sqrt(a)`
a の平方根を返します。
- ・ `dot(a, b)`
a と b の内積を返します。
- ・ `a^n`
スカラー a を n 乗した値を返します。
- ・ `norm(a,n)`
a の n ノルムを返します。n は 1, 2, inf, fro が想定されます。

3.9.2 サポートしていない関数

3.9.1 節で述べた関数以外の関数，ならびに数値解法や行列の分解などの関数はサポートしていません。もしサポートしていない MATLAB 関数を呼び出すと以下ようになります。

例)

```
>> a=ddrand(5);
```

```
>> qr(a)
Undefined function 'qr' for input arguments of type 'DD'.
```

3.10 Scilab 版 MuPAT との違い

操作に関して、Scilab 版では DD 型, QD 型を宣言する際、小文字で dd, qd と記述していましたが MATLAB 版では大文字で関数を呼び出す必要があります。型を変換する際に Scilab 版では、例えば、倍精度から DD 型にしたいときには d2dd() 関数、倍精度から QD 型にしたいときには d2qd() 関数を呼び出す必要がありましたが、MATLAB 版では変更したい変数を変更したい型へ代入すれば良いです。詳しくはユーザーガイドの型の変換の項目を参照してください。また、DD 型, QD 型の上位パートなどの倍精度要素を取り出す際、Scilab 版では getHi() 関数を呼び出す必要がありましたが、MATLAB 版では DD 型変数 a では a.hi, QD 型変数 b では b.hh などと記述すれば倍精度要素を適宜取り出せます。

機能に関して、Scilab 版でサポートしていた疎行列形式は、現在 MATLAB 版ではサポートしていません。また、MATLAB 版では数値解法や、行列の分解などのアプリケーションはサポートしていません。Scilab 版になかった機能として、MATLAB 版では並列処理を用いてベクトル計算、行列計算を高速化しています。詳しくは並列処理の項目を参照してください。

4 並列処理

FMA, AVX2, OpenMP を有効または無効にする際には、以下のようにコマンドを実行します。

```
>> startMuPAT(n1, n2, n3)
```

として引数 n1 (OpenMP のスレッド数 (off はスレッド数=1 に相当)), n2 (AVX2 の on/off), n3 (FMA の on/off) で指定ください。指定しなかった場合は指定されなかった機能が off となります。

n1 は非負数の入力 that 想定され、n2, n3 は 0 (off) か 1 (on) の入力をしてください。

MuPAT 起動時以外にも、以下のようにして並列処理の on/off を切り替えられます。

```
>> fmaon
>> fmaoff
>> avxon
>> avxoff
>> omp(n1)
```

4.1 FMA

FMA(Fused Multiply Add) 演算 [4, 5] は、 $x = a \times b + c$ 形式の積和演算を 1 演算で実行します。これにより、積と和の組で表される演算の回数を半減でき、最大で 2 倍の性能向上が見込めます。積差についても使えます。

FMA を有効にすると FMA 向けの計算アルゴリズム (troprod.fma[3]) が使われます。そのため、FMA を有効にした場合では積演算における内部のアルゴリズムが一部異なります。

4.2 AVX2

Intel AVX2(Advanced Vector Extensions)[4, 5] は、4 つの倍精度浮動小数点数演算を 1 命令で実行できます。最大 4 倍の性能向上が見込めます。

例)

```
>> startMuPAT(1, 0, 0)
>> a = qdrand(500);
>> b = qdrand(500);
>> tic; a * b; toc;
Elapsed time is 8.374103 seconds.
>> avxon
>> tic; a * b; toc;
Elapsed time is 2.227658 seconds.
```

4.3 OpenMP

OpenMP[6]によって並列プログラミングができます。OpenMPではコア数の分だけ高速化が可能です。ここで、スレッド数とは何並列で処理を実行するかを表しており、最大スレッド数はCPUによって異なります。スレッド数=高速化率とは限りませんが、1から最大スレッド数の中から適当に選んで実行してください。通常スレッド数=コア数とすると良いでしょう。

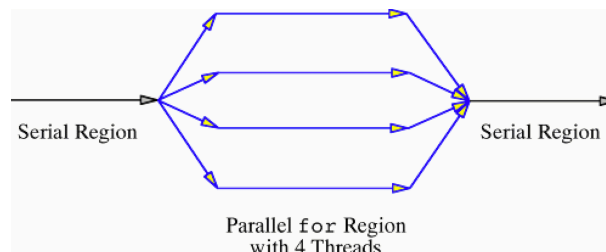


図 4.1 OpenMP によるマルチスレッド処理のイメージ

例)

```
>> startMuPAT(1, 0, 0)
>> a = ddrand(500);
>> b = ddrand(500);
>> tic; a * b; toc;
Elapsed time is 0.814772 seconds.
>> omp(2)
set the number of threads = 2
>> tic; a * b; toc;
Elapsed time is 0.449846 seconds.
```

4.4 高速化されている処理

MuPATでは上記の並列化によって、ある程度大きな処理であれば、例えば4コアマシンでは最大で16倍から17倍程度早く計算ができます。現在、並列化による高速処理が可能な48種類の演算を以下の表に記します。表中で、例えばD-DDという記号は倍精度数xとDD数yで何らかの演算xoyを行うことを意味しており、DD-DはDD数yと倍精度数xで何らかの演算yoxを行うことを意味しています。なお、現在疎行列形式はサポートしていません。

表 4.1 現在高速化をサポートしている関数と呼び出し方法

	D-DD	D-QD	DD-D	DD-DD	DD-QD	QD-D	QD-DD	QD-QD
ベクトル (行列) 和 (差)	x, y: vector or matrix $\rightarrow x + y$ or $x - y$							
スカラー倍	a: scalar, x: vector or matrix $\rightarrow a * x$ or $x * a$							
内積	x, y: vector $\rightarrow \text{dot}(x, y)$ or $x' * y$							
密行列ベクトル積	A: matrix, b: vector $\rightarrow A * b$							
密転置行列ベクトル積	A: matrix, b: vector $\rightarrow \text{tmv}(A, b)$							
密行列積	A, B: matrix $\rightarrow A * B$							

参考文献

- [1] S. Kikkawa, T. Saito, E. Ishiwata and H. Hasegawa, Development and acceleration of multiple precision arithmetic toolbox MuPAT for Scilab, JSIAM Letters, Vol.5, pp.9-12 (2013).
- [2] D. H. Bailey, High-Precision Floating-point arithmetic in scientific computation, Computing in Science and Engineering, Vol.7(3), pp.54-61
- [3] Y. Hida, X. S. Li and D. H. Baily, Quad-double arithmetic: algorithms, implementation and application, Technical Report LBNL-46996, Lawrence Berkeley National Laboratory, Berkeley (2000).
- [4] Intel: Intrinsics Guide, available from <https://software.intel.com/sites/landingpage/IntrinsicsGuide/>
- [5] Intel: 64 and IA-32 Architectures Optimization Reference Manual, <https://www.intel.com/content/dam/www/public/us/en/documents/manuals/64-ia-32-architectures-optimization-manual>
- [6] OpenMP : <http://www.openmp.org/>
- [7] Matlab Documentation: <https://jp.mathworks.com/help/matlab/ref/mex.html>

Appendix

A: フォルダ構造

MuPAT のフォルダ構成を以下に記します.

