

内容に関する質問は
katagiri@cc.u-tokyo.ac.jp
まで

第4回 Hybrid並列化技法 (MPIとOpenMPの応用)

東京大学情報基盤センター 片桐孝洋

講義日程と内容について

- ▶ **2013年度 計算科学技術特論A(1学期:木曜3限)**
 - ▶ 第1回:プログラム高速化の基礎、2013年4月11日
 - ▶ イントロダクション、ループアンローリング、キャッシュブロック化、数値計算ライブラリの利用、その他
 - ▶ 第2回:MPIの基礎、2013年4月18日
 - ▶ 並列処理の基礎、MPIインターフェース、MPI通信の種類、その他
 - ▶ 第3回:OpenMPの基礎、2013年4月25日
 - ▶ OpenMPの基礎、利用方法、その他
 - ▶ **第4回:Hybrid並列化技法(MPIとOpenMPの応用)、2013年5月9日**
 - ▶ 背景、Hybrid並列化の適用事例、利用上の注意、その他
 - ▶ 第5回:プログラム高速化の応用、2013年5月16日
 - ▶ プログラムの性能ボトルネックに関する考えかた(I/O、単体性能(演算機ネック、メモリネック)、並列性能(バランス))、性能プロファイル、その他

実際の並列計算機構成例

東京大学情報基盤センタースパコン

T2Kオープンスパコン(東大版)(HA8000クラスシステム)

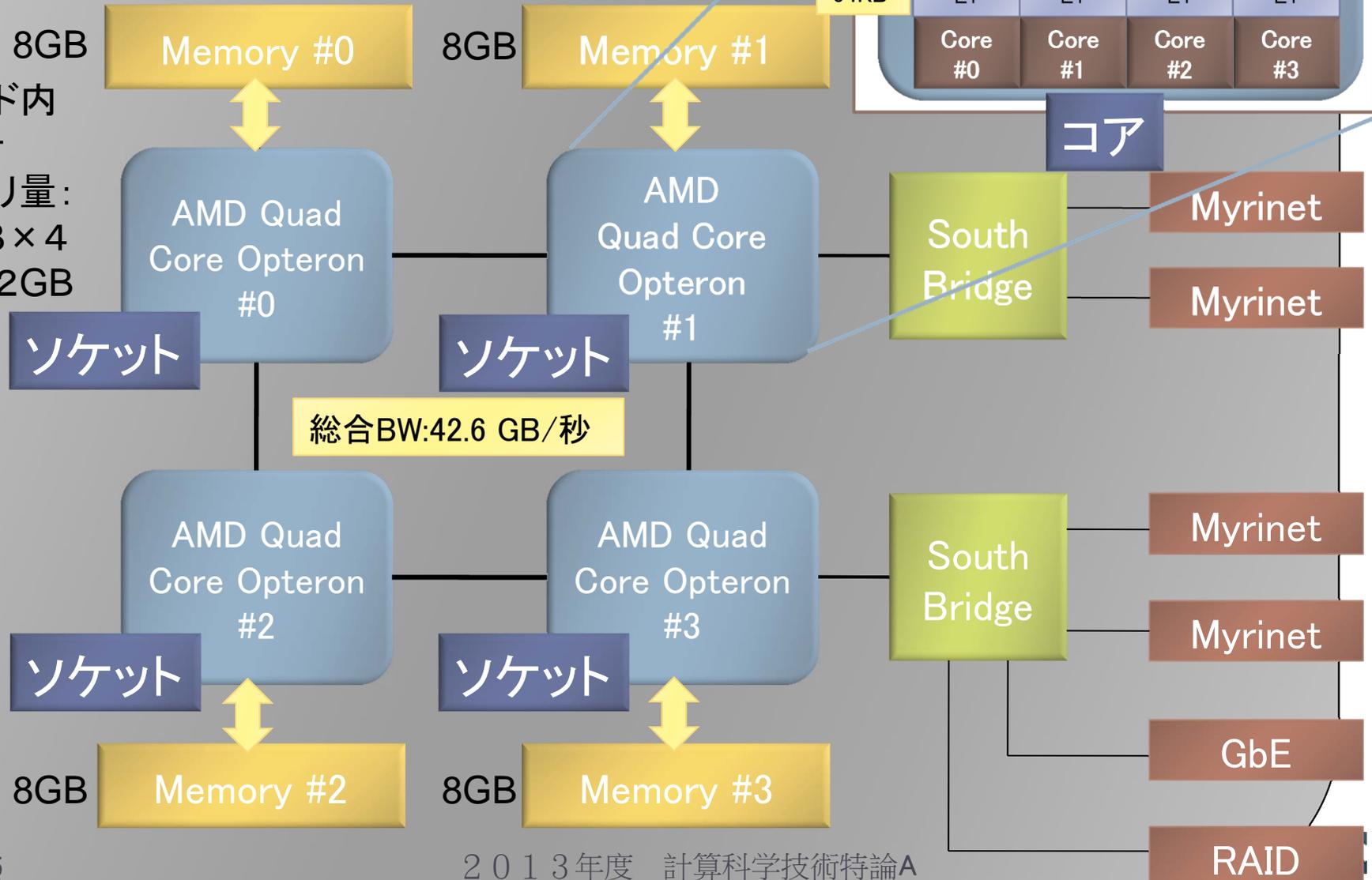
Total Peak performance	: 140 TFLOPS
Total number of nodes	: 952
Total memory	: 32000 GB
Peak performance per node	: 147.2 GFLOPS
Main memory per node	: 32 GB, 128 GB
Disk capacity	: 1 PB
AMD Quad Core Opteron (2.3GHz)	

製品名 : HITACHI HA8000-tc/RS425

T2K東大 ノード構成(タイプA群)

ソケット、ノードとは

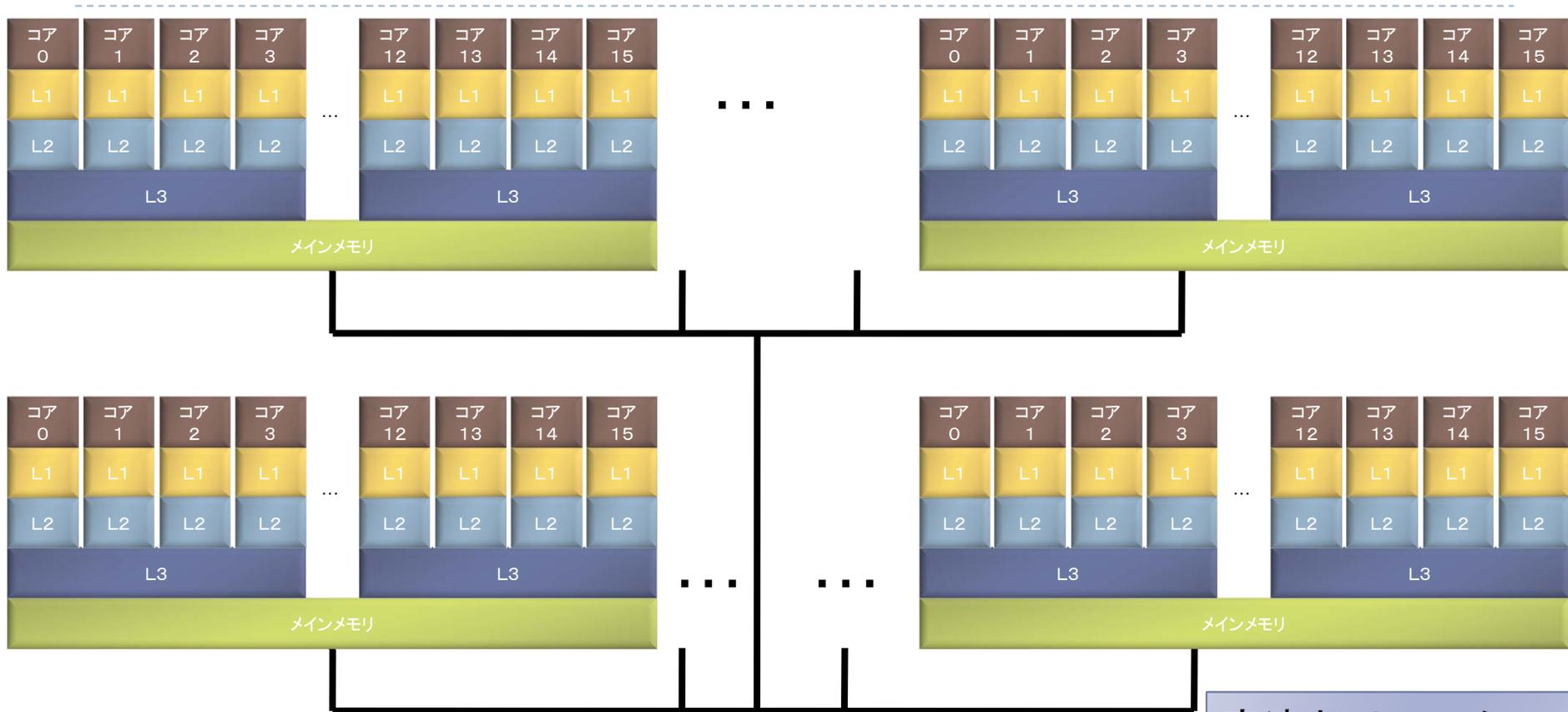
ノード内
合計
メモリ量:
8GB × 4
= 32GB



各CPUの内部構成



T2K (東大) での全体メモリ構成図



メモリが多段に階層化
(L1、L2、L3、分散メモリ)

高速ネットワーク
(5Gバイト/秒
× 双方向)
(タイプA群)

ノード構成 (T2K東大、タイプA群)

ccNUMA構成とは

各CPUの内部構成

L3			
L2	L2	L2	L2
L1	L1	L1	L1
Core #0	Core #1	Core #2	Core #3

アクセス
速い

Memory #0

Memory #1

AMD Quad
Core Opteron
#0

AMD
Quad Core
Opteron
#1

South
Bridge

Myrinet

Myrinet

共有メモリ
でアクセス
時間が
不均一
(ccNUMA)

アクセス
遅い

AMD Quad
Core Opteron
#2

AMD Quad
Core Opteron
#3

South
Bridge

Myrinet

Myrinet

Memory #2

Memory #3

GbE

RAID

東京大学情報基盤センタースパコン FX10スーパーコンピュータシステム

Total Peak performance	: 1.13 PFLOPS
Total number of nodes	: 4,800
Total memory	: 150TB
Peak performance per node	: 236.5 GFLOPS
Main memory per node	: 32 GB
Disk capacity	: 2.1 PB
SPARC64 IXfx (1.848GHz)	

製品名 : Fujitsu PRIMEHPC FX10

2012年4月運用開始

FX10計算ノードの構成

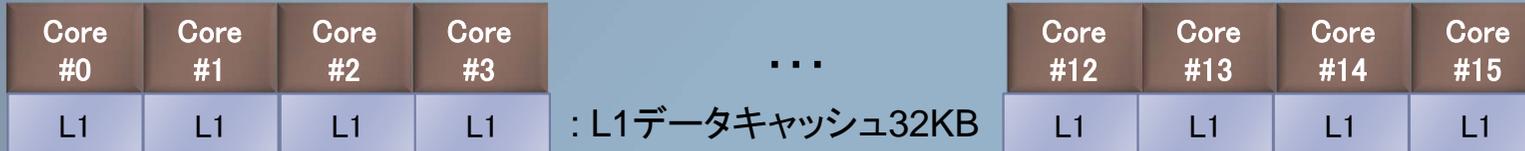
1ソケットのみ

TOFU Network

各CPUの内部構成

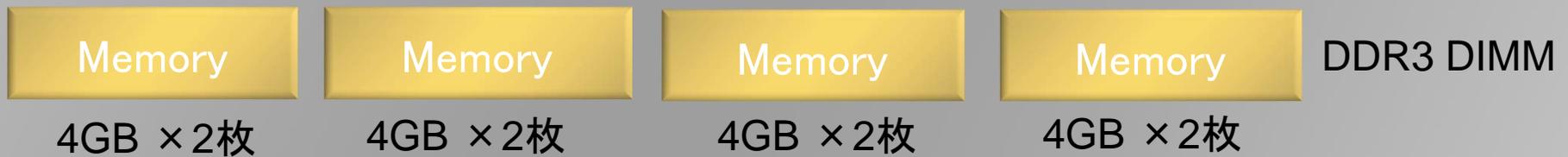
20GB/秒

ICC



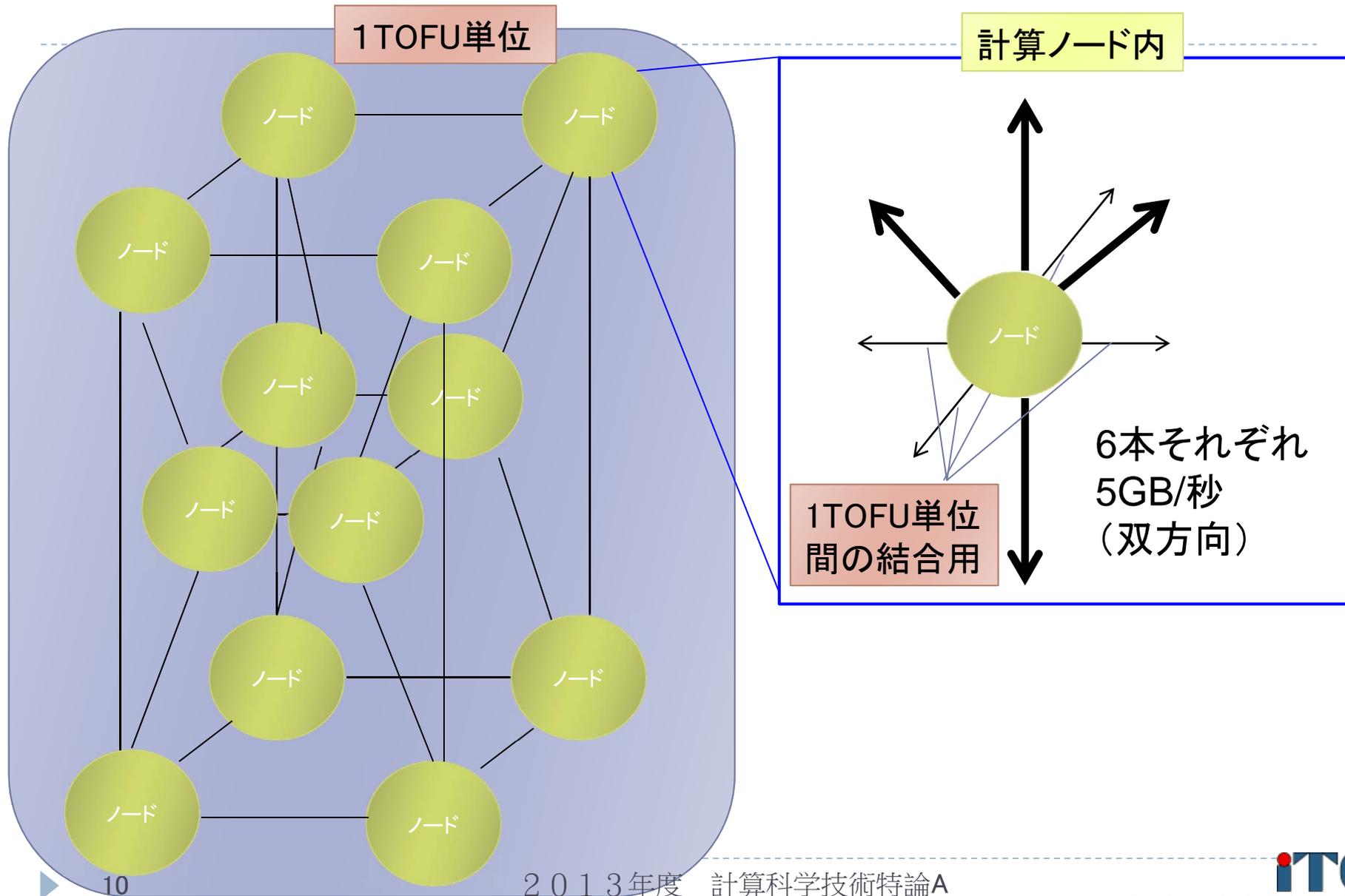
L2 (16コアで共有、12MB)

85GB/秒
=(8Byte × 1333MHz × 8 channel)



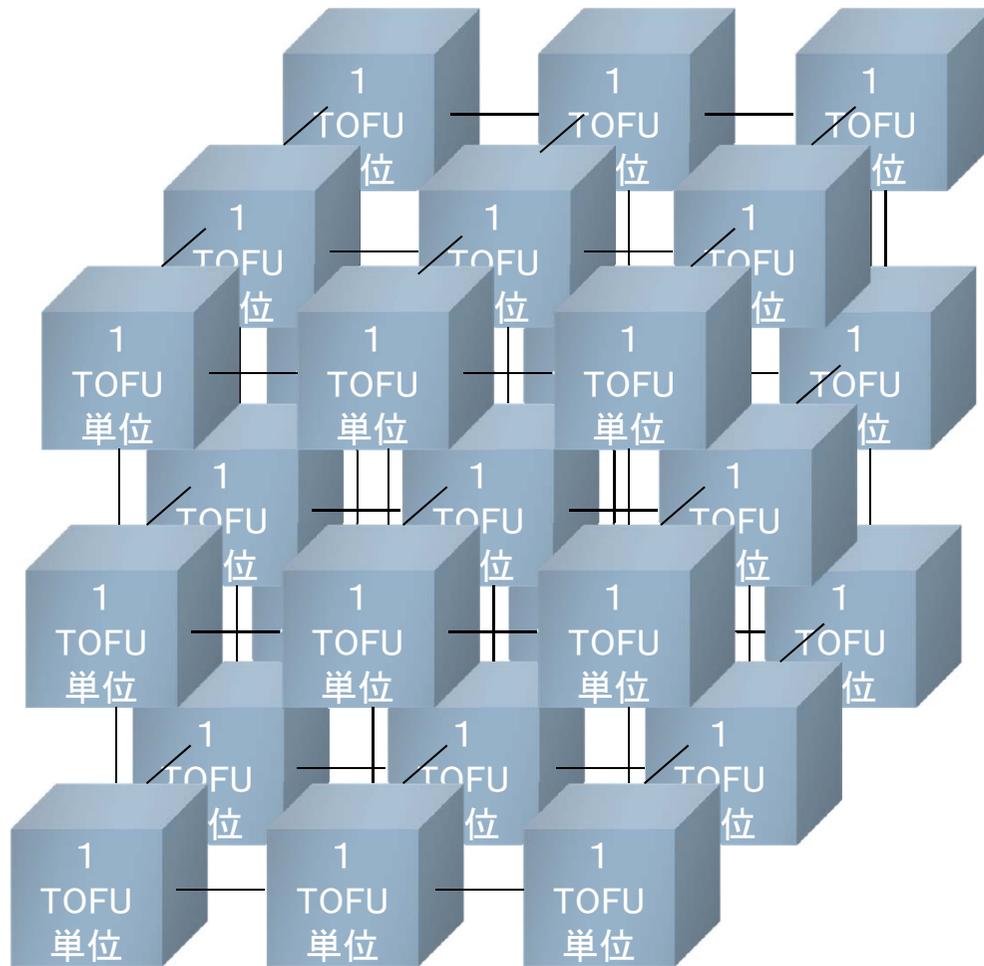
ノード内合計メモリ量 : 8GB × 4 = 32GB

FX10の通信網（1 TOFU単位）



FX10の通信網（1 TOFU単位間の結合）

3次元接続



- ユーザから見ると、
X軸、Y軸、Z軸について、
奥の1TOFUと、手前の
1TOFUは、繋がって見えます
(3次元トーラス接続)
 - ただし物理結線では
 - X軸はトーラス
 - Y軸はメッシュ
 - Z軸はメッシュまたは、
トーラス
- になっています

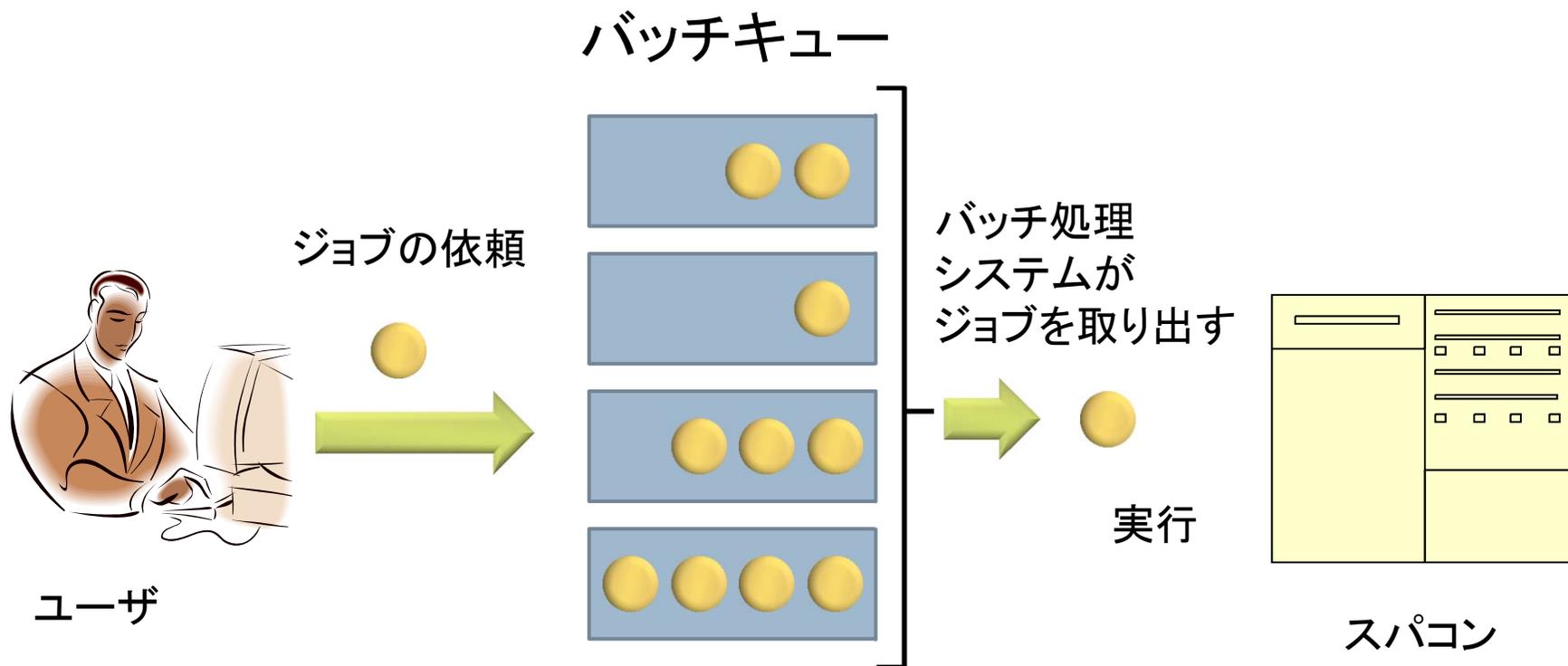
バッチ処理とMPIジョブの投入

FX10スーパーコンピュータシステムでの ジョブ実行形態の例

- ▶ 以下の2通りがあります
- ▶ **インタラクティブジョブ実行**
 - ▶ PCでの実行のように、コマンドを入力して実行する方法
 - ▶ スパコン環境では、あまり一般的でない
 - ▶ デバック用、大規模実行はできない
 - ▶ FX10では、以下に限定(東大基盤センターの運用方針)
 - ▶ 1ノード(16コア)(2時間まで)
 - ▶ 8ノード(128コア)(10分まで)
- ▶ **バッチジョブ実行**
 - ▶ バッチジョブシステムに処理を依頼して実行する方法
 - ▶ スパコン環境で一般的
 - ▶ 大規模実行用
 - ▶ FX10では、最大1440ノード(23,040コア)(6時間)

バッチ処理とは

- ▶ スパコン環境では、通常は、インタラクティブ実行(コマンドラインで実行すること)はできません。
- ▶ ジョブはバッチ処理で実行します。



コンパイラの種類とインタラクティブ実行 およびバッチ実行の例 (FX10)

- ▶ インタラクティブ実行、およびバッチ実行で、利用するコンパイラ (C言語、C++言語、Fortran90言語) の種類が違います
- ▶ インタラクティブ実行では
 - ▶ オウンコンパイラ (そのノードで実行する実行ファイルを生成するコンパイラ) を使います
 - ▶ バッチ実行では
 - ▶ クロスコンパイラ (そのノードでは実行できないが、バッチ実行する時のノードで実行できる実行ファイルを生成するコンパイラ) を使います
 - ▶ それぞれの形式
 - ▶ オウンコンパイラ: <コンパイラの種類名>
 - ▶ クロスコンパイラ: <コンパイラの種類名>px
 - ▶ 例) 富士通Fortran90コンパイラ
 - ▶ オウンコンパイラ: frt
 - ▶ クロスコンパイラ: frtpx

バッチキューの設定のしかた (FX10の例)

- ▶ バッチ処理は、富士通社のバッチシステムで管理されている。
- ▶ 以下、主要コマンドを説明します。
 - ▶ ジョブの投入:
`pjsub <ジョブスクリプトファイル名> -g <プロジェクトコード>`
 - ▶ 自分が投入したジョブの状況確認: `pjstat`
 - ▶ 投入ジョブの削除: `pjdel <ジョブID>`
 - ▶ バッチキューの状態を見る: `pjstat --rsc`
 - ▶ バッチキューの詳細構成を見る: `pjstat --rsc -x`
 - ▶ 投げられているジョブ数を見る: `pjstat --rsc -b`
 - ▶ 過去の投入履歴を見る: `pjstat --history`
 - ▶ 同時に投入できる数／実行できる数を見る: `pjstat --limit`

インタラクティブ実行のやり方の例 (FX10スーパーコンピュータシステム)

- ▶ コマンドラインで以下を入力
 - ▶ 1ノード実行用
`$ pjsub --interact`
 - ▶ 8ノード実行用
`$ pjsub --interact -L "node=8"`

※インタラクティブ用のノード総数は50ノードです。
もしユーザにより50ノードすべて使われている場合、
資源が空くまで、ログインできません。

pjstat --rsc の実行画面例

```
$ pjstat --rsc
```

RSCGRP	STATUS	NODE:COORD
lecture	[ENABLE,START]	72:2x3x12
lecture8	[DISABLE,STOP]	72:2x3x12

↑
使える
キュー名
(リソース
グループ)

↑
現在
使えるか

↑
ノードの
物理構成情報

pjstat --rsc -x の実行画面例

```
$ pjstat --rsc -x
```

RSCGRP	STATUS	MIN_NODE	MAX_NODE	ELAPSE	MEM(GB)	PROJECT
lecture	[ENABLE,START]	1	12	00:15:00	28	gt58
lecture8	[DISABLE,STOP]	1	12	00:15:00	28	gt58

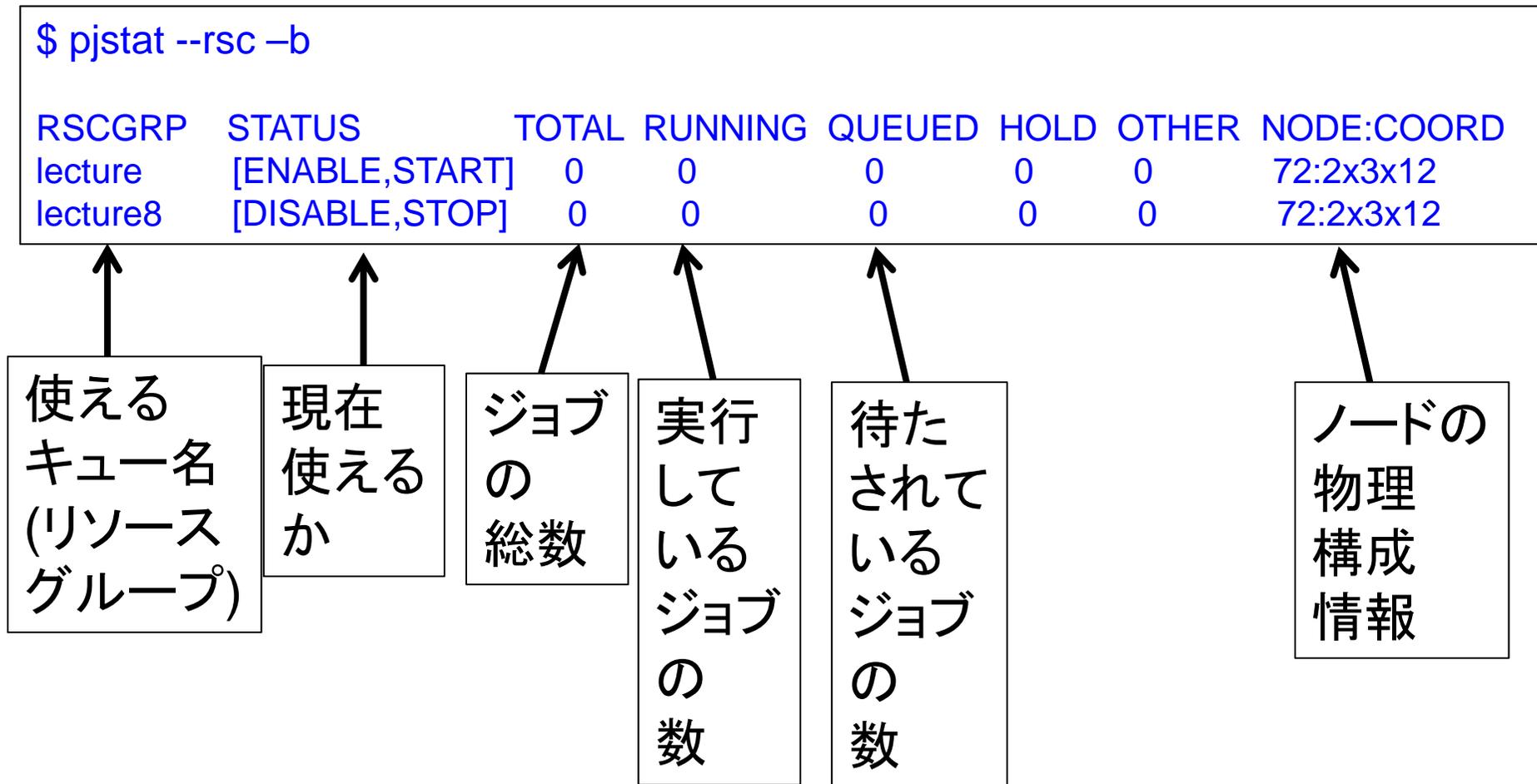
↑
使える
キュー名
(リソース
グループ)

↑
現在
使えるか

↑
ノードの
実行情報

↑
課金情報
(財布)
実習では
1つのみ

pjstat --rsc -b の実行画面例



JOBスクリプトサンプルの説明 (ピュアMPI)

(hello-pure.bash, C言語、Fortran言語共通)

```
#!/bin/bash
#PJM -L "rscgrp=lecture"
#PJM -L "node=12"
#PJM --mpi "proc=192"
#PJM -L "elapse=1:00"
mpirun ./hello
```

リソースグループ名
:lecture

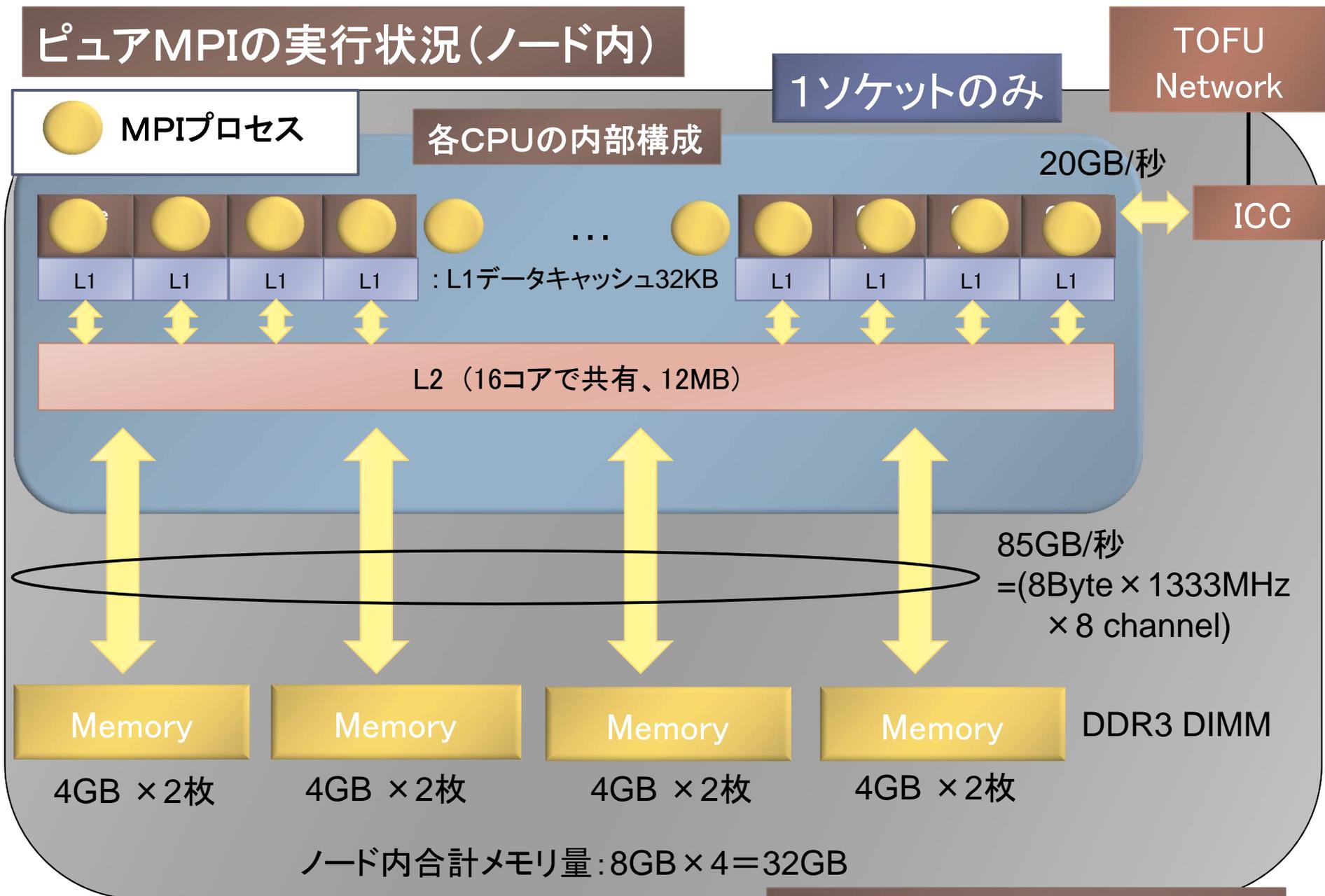
利用ノード数

利用コア数
(MPIプロセス数)

実行時間制限
:1分

MPIジョブを $16 * 12 = 192$ プロセスで実行する。

ピュアMPIの実行状況(ノード内)



FX10計算ノードの構成

並列版Helloプログラムを実行しよう (ピュアMPI)

1. Helloフォルダ中で以下を実行する
`$ pjsub hello-pure.bash`
2. 自分の導入されたジョブを確認する
`$ pjstat`
3. 実行が終了すると、以下のファイルが生成される
`hello-pure.bash.eXXXXXXXX`
`hello-pure.bash.oXXXXXXXX` (XXXXXXXXは数字)
4. 上記の標準出力ファイルの中身を見してみる
`$ cat hello-pure.bash.oXXXXXXXX`
5. “Hello parallel world!”が、
16プロセス*12ノード=192表示されていたら成功。

バッチジョブ実行による標準出力、標準エラー出力

- ▶ バッチジョブの実行が終了すると、標準出力ファイルと標準エラー出力ファイルが、ジョブ投入時のディレクトリに作成されます。
- ▶ 標準出力ファイルにはジョブ実行中の標準出力、標準エラー出力ファイルにはジョブ実行中のエラーメッセージが出力されます。

ジョブ名.oXXXXXX --- 標準出力ファイル

ジョブ名.eXXXXXX --- 標準エラー出力ファイル

(XXXXXX はジョブ投入時に表示されるジョブのジョブID)

並列版Helloプログラムを実行しよう (ハイブリッドMPI)

1. Helloフォルダ中で以下を実行する
`$ pjsub hello-hy16.bash`
2. 自分の導入されたジョブを確認する
`$ pjstat`
3. 実行が終了すると、以下のファイルが生成される
`hello-hy16.bash.eXXXXXX`
`hello-hy16.bash.oXXXXXX` (XXXXXXは数字)
4. 上記標準出力ファイルの中身を見してみる
`$ cat hello-hy16.bash.oXXXXXX`
5. “Hello parallel world!”が、
1プロセス*12ノード=12 個表示されていたら成功。

JOBスクリプトサンプルの説明 (ハイブリッドMPI)

(hello-hy16.bash, C言語、Fortran言語共通)

```
#!/bin/bash
#PJM -L "rscgrp=lecture"
#PJM -L "node=12"
#PJM --mpi "proc=12"
#PJM -L "elapse=1:00"
export OMP_NUM_THREADS=16
mpirun ./hello
```

リソースグループ名
:lecture

利用ノード数

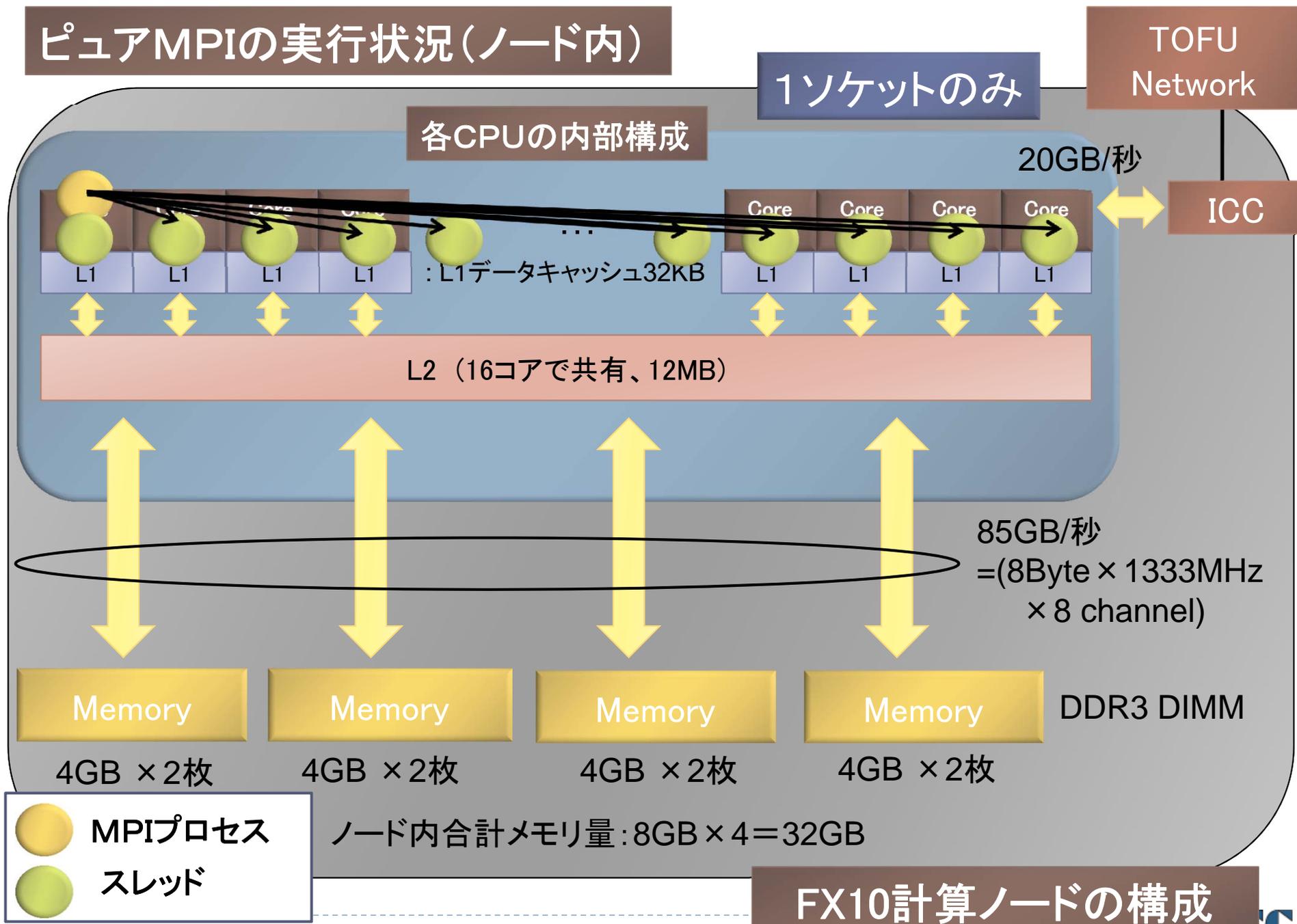
利用コア数
(MPIプロセス数)

実行時間制限: 1分

1 MPIプロセスあたり
16スレッド生成

MPIジョブを $1 * 12 = 12$ プロセスで実行する。

ピュアMPIの実行状況(ノード内)



その他の注意事項（その1）

- ▶ MPI用のコンパイラを使うこと
 - ▶ MPI用のコンパイラを使わないと、MPI関数が未定義というエラーが出て、コンパイルできなくなる
 - ▶ 例えば、以下のコマンド
 - ▶ Fortran90言語: `mpif90`
 - ▶ C言語: `mpicc`
 - ▶ C++言語: `mpixx`, `mpic++`
 - ▶ コンパイラオプションは、逐次コンパイラと同じ

その他の注意事項（その2）

▶ ハイブリッドMPIの実行形態

MPIプロセス数 + OpenMPスレッド数 ≤ 利用コア総数

- ▶ HT (Intel) やSMT (IBM)などの、物理コア数の定数倍のスレッドが実行できるハードの場合
 - ▶ スレッド数(論理スレッド数)が上記の利用コア総数
- ▶ **必ずしも、1ノード内に1MPIプロセス実行が高速とはならない**
 - ▶ 一般に、OpenMPによる台数効果が8スレッドを超えると悪くなるため。
 - 効率の良いハイブリッドMPI実行には、効率の良いOpenMP実装が必須

MPI実行時のリダイレクトについて

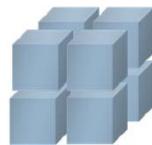
- ▶ 一般に、スーパーコンピュータでは、
MPI実行時の入出力のリダイレクトができません
 - ▶ ×例) `mpirun ./a.out < in.txt > out.txt`
- ▶ 専用のリダイレクト命令が用意されています。
- ▶ FX10でリダイレクトを行う場合、以下のオプションを指定します。
 - ▶ ○例) `mpirun --stdin ./in.txt --ofout out.txt ./a.out`

並列処理の評価指標： 弱スケーリングと強スケーリング

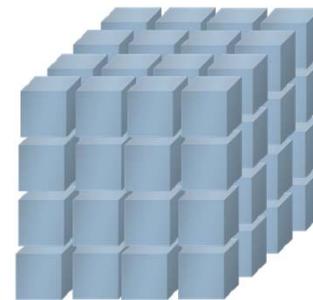
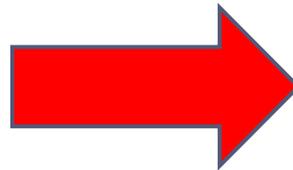
弱スケーリング (Weak Scaling)

- ▶ ノードあたりの問題サイズを固定し、並列処理時の全体の問題サイズを増加することで、性能評価をする方法
- ▶ 問題サイズ N ときの計算量が $O(N)$ である場合、並列処理のノード数が増加しても、**理想的な実行時間は変わらないと期待できる**
 - ▶ 一般的にノード数が増加すると通信時間が増大するため、そうはならない
 - ▶ 該当する処理は
 - ▶ 陽解法のシミュレーション全般
 - ▶ 陰解法で、かつ連立一次方程式の解法に反復解法を用いているシミュレーション

1ノードあたりの
問題サイズ



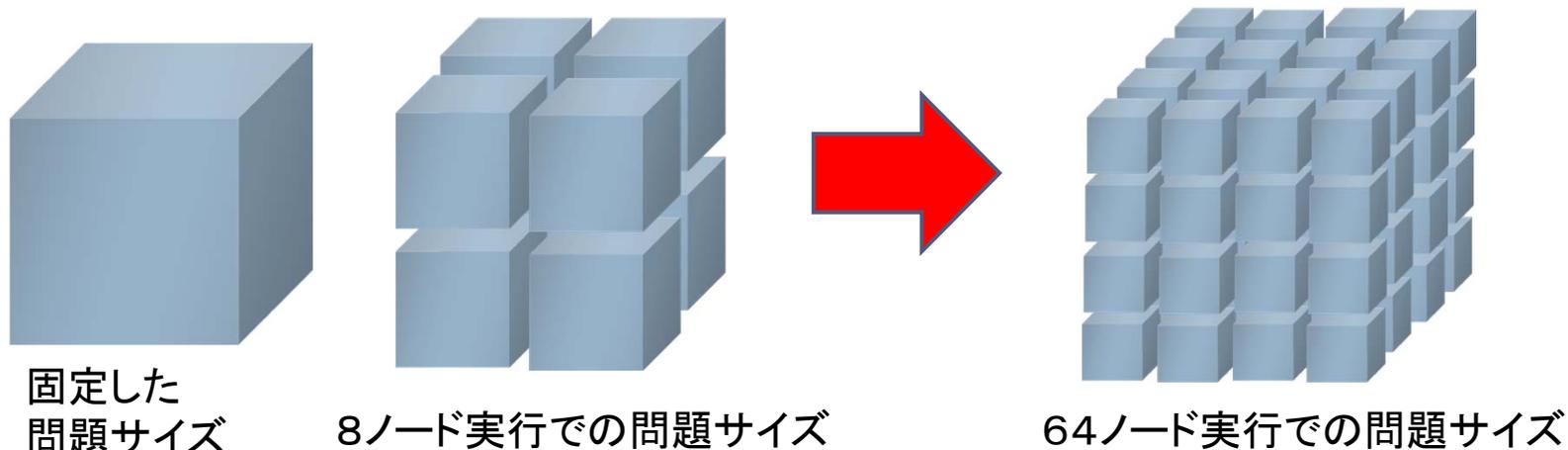
8ノード実行での問題サイズ



64ノード実行での問題サイズ

強スケーリング (Strong Scaling)

- ▶ 全体の問題サイズを固定し、ノード数を増加することで性能評価をする方法
- ▶ 理想的な実行時間は、ノード数に反比例して減少する。
 - ▶ 一般的にノード数が増加すると1ノードあたりの問題サイズが減少し、通信時間の占める割合が増大するため、理想的な実行時間の減少は限定
 - ▶ 該当する処理は
 - ▶ 計算量が膨大なアプリケーション
 - ▶ 例えば、連立一次方程式の解法。データ量 $O(N^2)$ に対して、計算量は $O(N^3)$



弱スケーリングと強スケーリング 適用アプリの特徴

- ▶ 弱スケーリングが適用できるアプリケーションは、原理的に通信が少ないアプリケーション
 - ▶ 領域分割法などにより、並列化できるアプリケーション
 - ▶ 主な通信は、隣接するプロセスしかない
 - ▶ ノード数を増すことで、実行時間の面で容易に問題サイズを大規模化
 - ▶ 通信時間の占める割合は超並列実行でも少ないアプリケーション
- ▶ 強スケーリングを適用しないといけないアプリケーションは、計算量が膨大になるアプリケーション
 - ▶ 全体の問題サイズは、実行時間の制約から大規模化できない
 - ▶ そのため、1ノードあたりの問題サイズは、ノード数が多い状況で小さくなる
 - ▶ その結果、通信処理の占める時間がほとんどになる
 - ▶ 超並列実行時で通信処理の最適化が重要になるアプリケーション

強スケールアプリケーションの問題

- ▶ TOP500で採用されているLINPACK
 - ▶ 密行列に対する連立一次方程式の解法のアプリケーション
 - ▶ 2012年11月のTOP500の問題サイズ
 - ▶ (2位) Sequoia、
N=12,681,215、#cores=1,572,864、 $N/\#cores=8.06$
 - ▶ (3位) K-computer、
N=11,870,208、#cores=705,024、 $N/\#cores=16.8$
 - ▶ (6位) SuperMUC、
N=5,201,920、#cores=147,456、 $N/\#cores=35.2$
- ▶ 上位のマシンほど、コア当たりの問題サイズが小さい
←通信時間の占める割合が大きくなりやすい
- ▶ 今後コア数が増加すると、通信時間の削減が問題になる

ピュアMPIプログラム開発 の基礎

MPI並列化の大前提（再確認）

▶ SPMD

- ▶ 対象のメインプログラムは、
 - ▶ **すべてのコア上で、かつ、**
 - ▶ **同時に起動された状態**から処理が始まる。

▶ 分散メモリ型並列計算機

- ▶ 各プロセスは、完全に独立したメモリを持っている。（**共有メモリではない**）

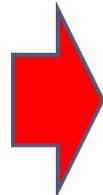
並列化の考え方 (C言語)

▶ SIMDアルゴリズムの考え方(4プロセスの場合)

行列A

各PEで
重複して
所有する

```
for (j=0; j<n; j++)  
{ 内積(j, i) }
```



```
for (j=0; j<n/4; j++) { 内積(j, i) }
```

プロセス0

```
for (j=n/4; j<(n/4)*2; j++) { 内積(j, i) }
```

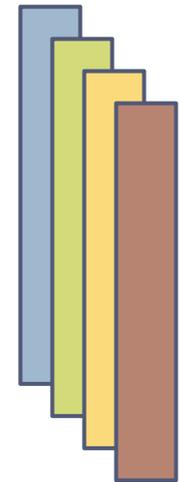
プロセス1

```
for (j=(n/4)*2; j<(n/4)*3; j++) { 内積(j, i) }
```

プロセス2

```
for (j=(n/4)*3; j<n; j++) { 内積(j, i) }
```

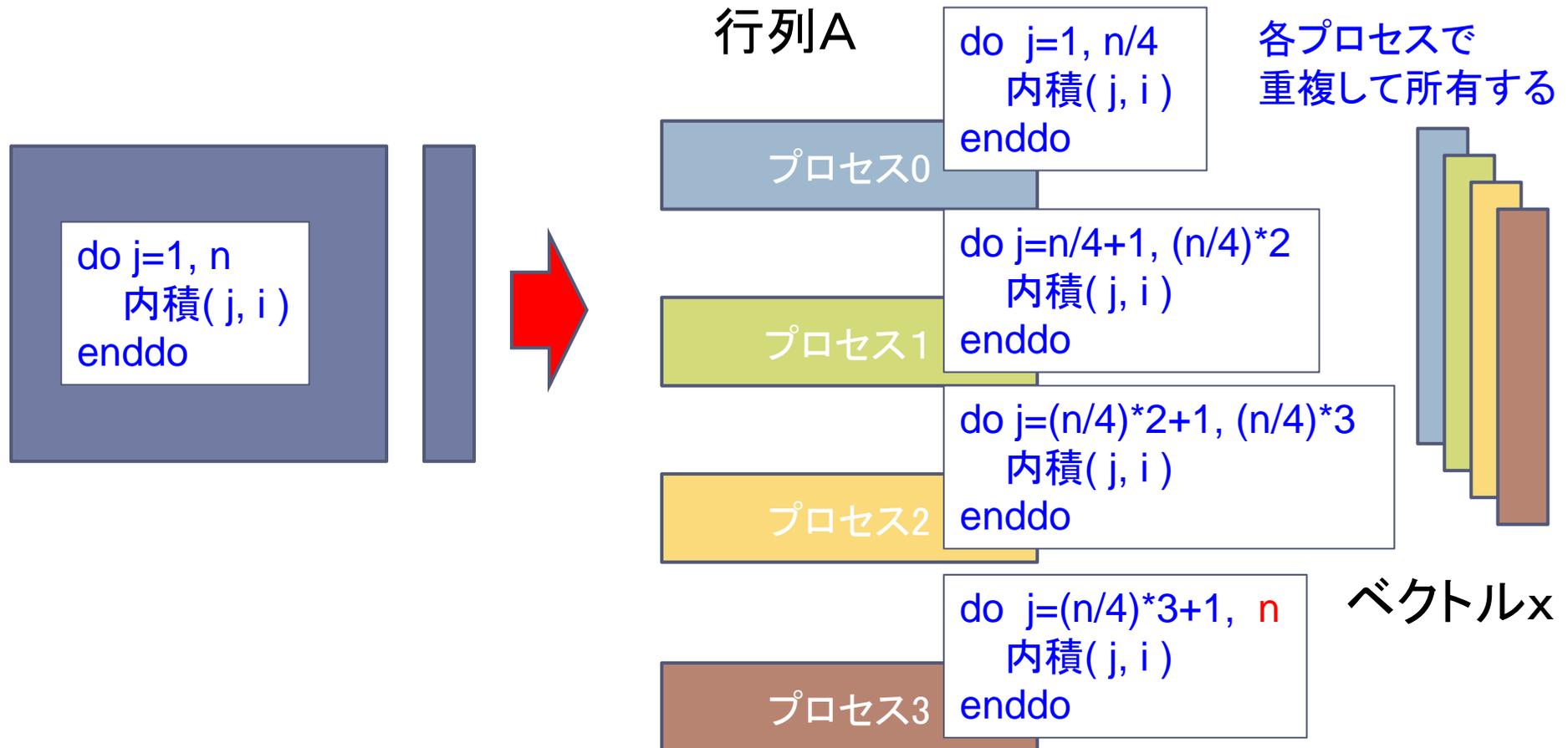
プロセス3



ベクトルx

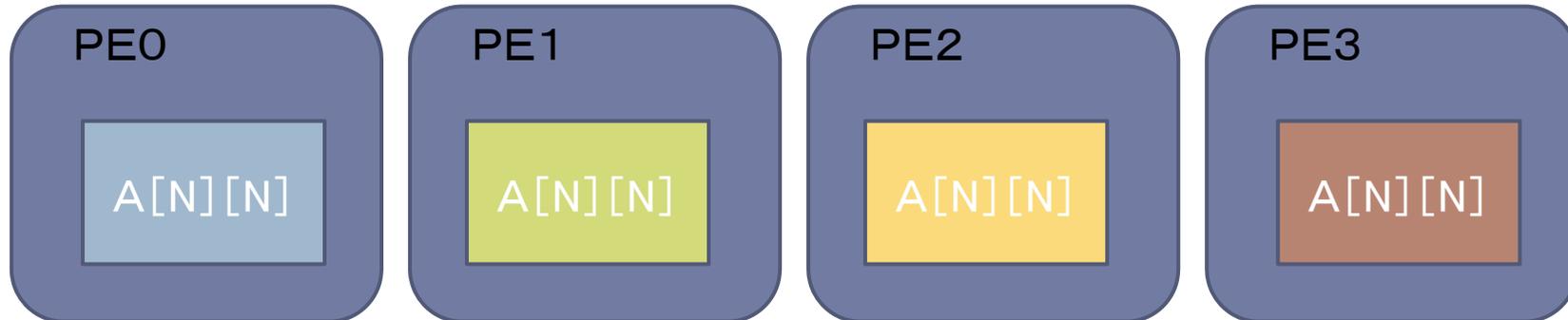
並列化の考え方 (Fortran言語)

▶ SIMDアルゴリズムの考え方(4プロセスの場合)

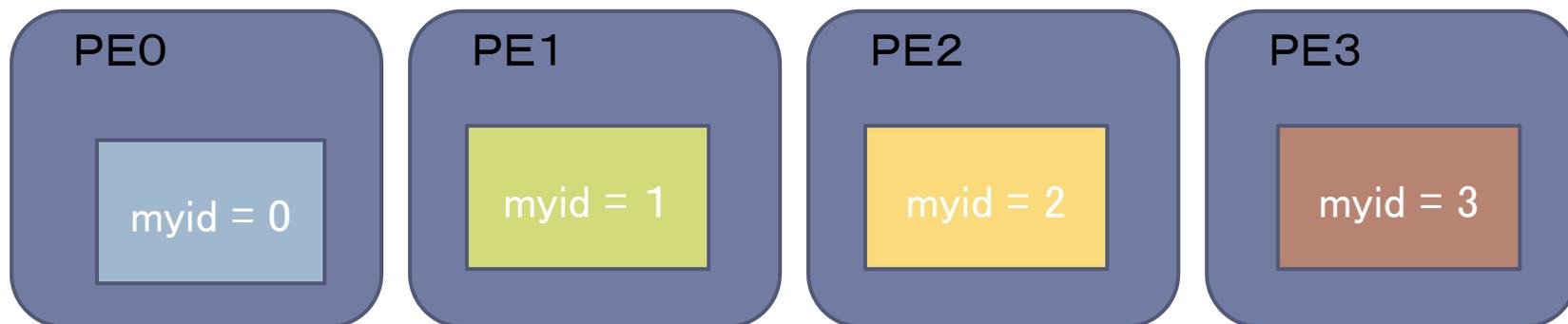


初心者が注意すること

- ▶ 各プロセスでは、**独立した配列が個別に確保**されます。



- ▶ myid変数は、MPI_Init()関数が呼ばれた段階で、**各プロセス固有の値**になっています。



並列プログラム開発の指針

1. 正しく動作する逐次プログラムを作成する
2. 1. のプログラムで、適切なテスト問題を作成する
3. 2. のテスト問題の実行について、適切な処理の単位ごとに、正常動作する計算結果を確認する
4. 1. の逐次プログラムを並列化し、並列プログラミングを行う
5. 2. のテスト問題を実行して動作検証する
6. このとき3. の演算結果と比較し、正常動作をすることを確認する。もし異常であれば、4. に戻りデバックを行う。

数値計算プログラムの特徴を利用し 並列化がなされる

- ▶ 数値計算プログラムの処理単位は、プログラム上の基本ブロック(ループ単位など)ではなく、数値計算上の処理単位(数式レベルで記述できる単位)となる
 - ▶ 離散化(行列作成)部分、LU分解法部分(LU分解部分、前進代入部分、後退代入部分)、など
- ▶ 演算結果は、なんらかの数値解析上の意味において検証
 - ▶ 理論解とどれだけ離れているか、考えられる丸め誤差の範囲内にあるか、など
 - ▶ 計算された物理量(例えば流速など)が物理的に妥当な範囲内にあるか、など
 - ▶ 両者が不明な場合でも、数値的に妥当であると思われる逐次の結果と比べ、並列化した結果の誤差が十分に小さいか、など

並列化の方針の例（C言語）

1. 全プロセスで行列Aを $N \times N$ の大きさ、ベクトル x 、 y を N の大きさ、確保してよいとする。
2. 各プロセスは、担当の範囲のみ計算するように、ループの開始値と終了値を変更する。

- ▶ **ブロック分散方式**では、以下になる。
(n が numprocs で割り切れる場合)

```
ib = n / numprocs;  
for ( j=myid*ib; j<(myid+1)*ib; j++) { ... }
```

3. (2の並列化が完全に終了したら)各プロセスで担当のデータ部分しか行列を確保しないように変更する。

- ▶ 上記のループは、以下のようになる。

```
for ( j=0; j<ib; j++) { ... }
```

並列化の方針の例 (Fortran言語)

1. 全プロセスで行列Aを $N \times N$ の大きさ、ベクトル x 、 y を N の大きさ、確保してよいとする。
2. 各プロセスは、担当の範囲のみ計算するように、ループの開始値と終了値を変更する。

- ▶ **ブロック分散方式**では、以下になる。
(n が `numprocs` で割り切れる場合)

```
ib = n / numprocs
```

```
do j=myid*ib+1, (myid+1)*ib ... enddo
```

3. (2の並列化が完全に終了したら)各プロセスで担当のデータ部分しか行列を確保しないように変更する。

- ▶ 上記のループは、以下のようになる。

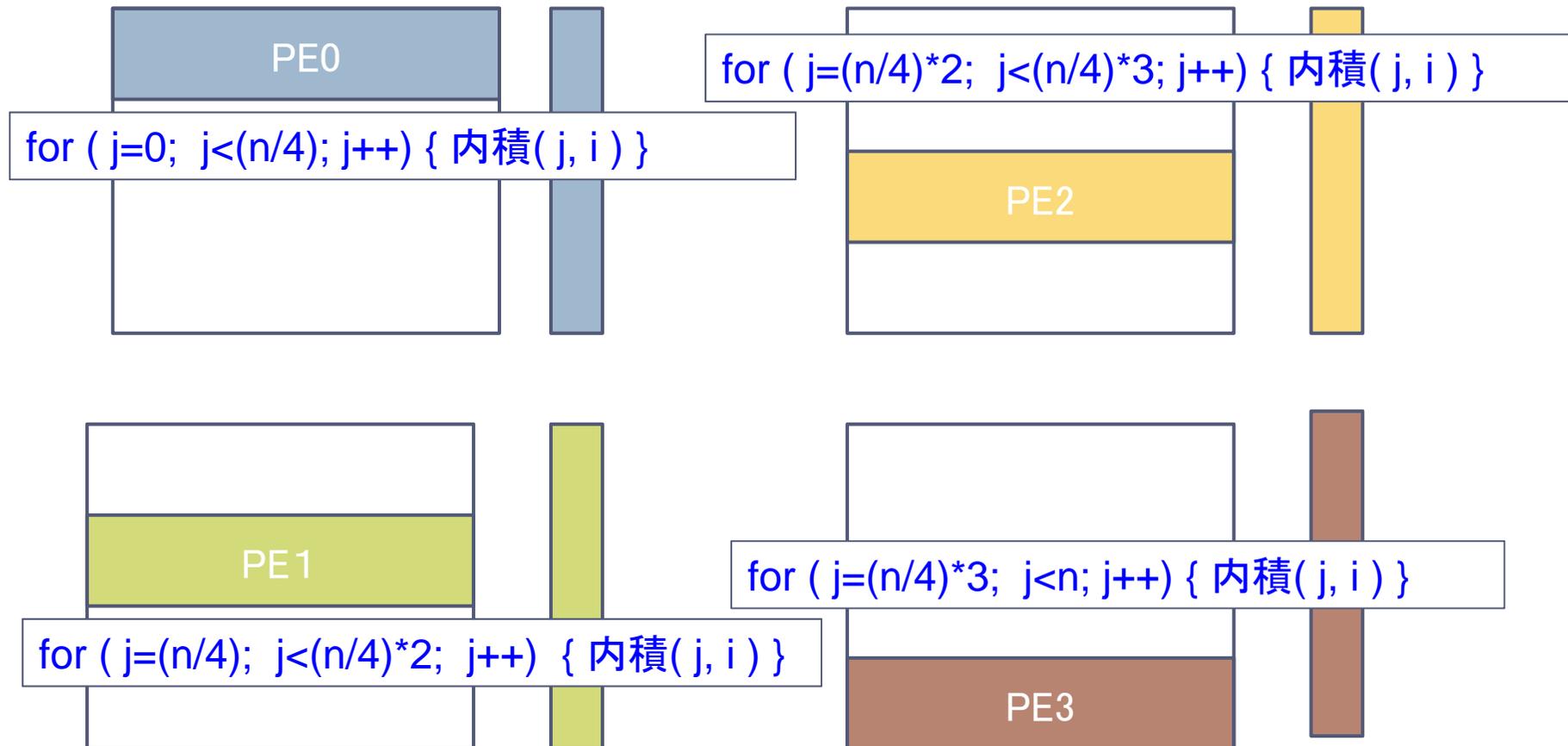
```
do j=1, ib ... enddo
```

データ分散方式に関する注意

- ▶ 負荷分散を考慮し、多彩なデータ分散方式を採用可能
- ▶ **しかし、数学的に単純なデータ分散方式が良い**
 - ▶ ◎: ブロック分散、サイクリック分散 (ブロック幅 = 1)
 - ▶ △~○: ブロック・サイクリック分散 (ブロック幅 = 任意)
 - ▶ 理由:
 - ▶ 複雑な(一般的な)データ分散は、各MPIプロセスが所有するデータ分散情報(インデックスリスト)を必要とするため、メモリ量が余分に必要なる
 - 例: **1万並列では、少なくとも1万次元の整数配列が必要**
 - 数学的に単純なデータ分散の場合は、インデックスリストは不要

並列化の方針（行列-ベクトル積） （C言語）

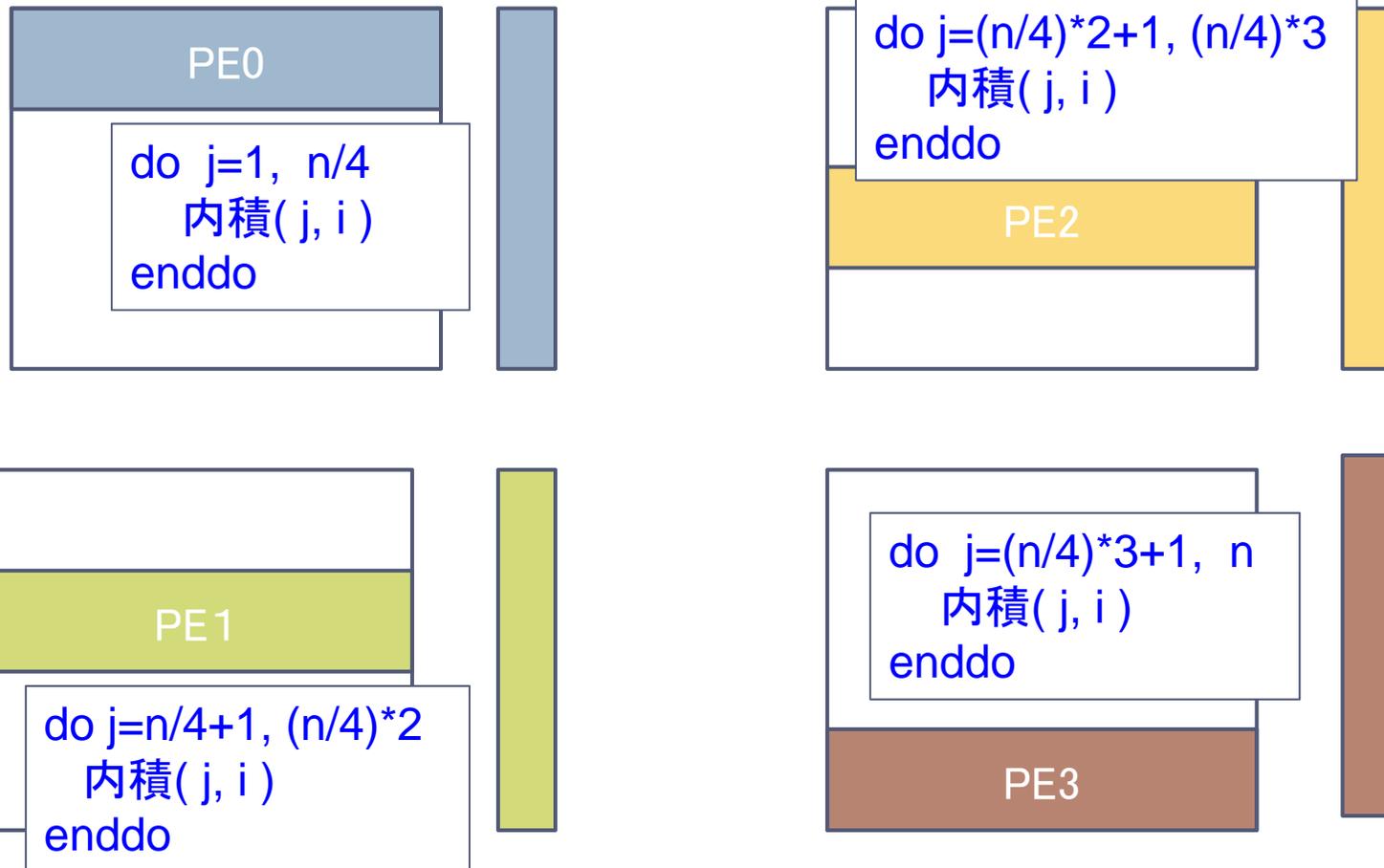
▶ 全PEでN×N行列を持つ場合



※各PEで使われない領域が出るが、担当範囲指定がしやすいので実装がしやすい。

並列化の方針（行列-ベクトル積） （Fortran 言語）

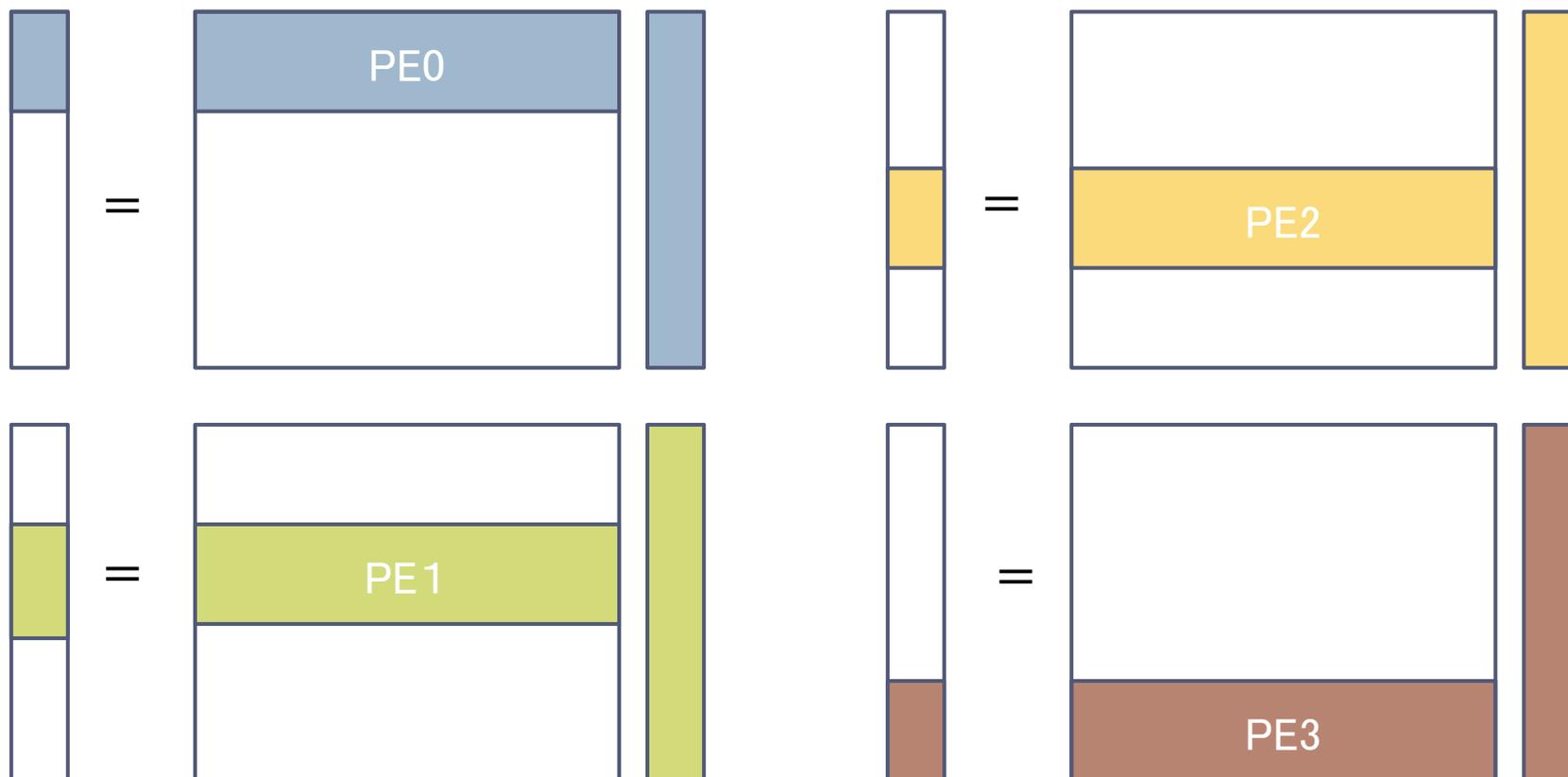
▶ 全PEでN×N行列を持つ場合



※各PEで使われない領域が出るが、担当範囲指定がしやすいので実装がしやすい。

並列化の方針（行列-ベクトル積）

- ▶ この方針では、 $y = Ax$ のベクトル y は、以下のように一部分しか計算されないことに注意！



並列化の方針のまとめ

- ▶ 行列全体 ($A[N][N]$) を各プロセスで確保することで、SIMD の考え方を、逐次プログラムに容易に適用できる
 - ▶ ループの開始値、終了値のみ変更すれば、並列化が完成する
 - ▶ この考え方は、MPI、OpenMP に依存せず、適用できる。
 - ▶ 欠点
 - ▶ 最大実行可能な問題サイズが、利用ノード数によらず、1ノードあたりのメモリ量で制限される (メモリに関するスケーラビリティが無い)
- ▶ ステップ2のデバックの困難性を低減できる
 - ▶ 完全な並列化 (ステップ2) の際、ステップ1での正しい計算結果を参照できる
 - ▶ 数値計算上の処理単位ごとに、ステップごとに完全並列化ができる (モジュールごとに、デバックできる)

行列 - ベクトル積のピュアMPI並列化の例 (C言語)

```
ierr = MPI_Init(&argc, &argv);  
ierr = MPI_Comm_rank(MPI_COMM_WORLD, &myid);  
ierr = MPI_Comm_size(MPI_COMM_WORLD, &numprocs);  
...
```

```
ib = n/numprocs;  
jstart = myid * ib;  
jend = (myid+1) * ib;  
if ( myid == numprocs-1) jend=n;
```

ブロック分散を仮定した
担当ループ範囲の定義

```
for( j=jstart; j<jend; j++) {  
    y[ j ] = 0.0;  
    for(i=0; i<n; i++) {  
        y[ j ] += A[ j ][ i ] * x[ i ];  
    }  
}
```

MPIプロセスの担当ごとに
縮小したループの構成

行列 - ベクトル積のピュアMPI並列化の例 (Fortran言語)

```
call MPI_INIT(ierr)
call MPI_COMM_RANK(MPI_COMM_WORLD, myid, ierr)
call MPI_COMM_SIZE(MPI_COMM_WORLD, numprocs, ierr)
...
ib = n/numprocs
jstart = 1 + myid * ib
jend = (myid+1) * ib
if ( myid .eq. numprocs-1) jend = n

do j = jstart, jend
  y(j) = 0.0d0
  do i=1, n
    y(j) = y(j) + A(j, i) * x(i)
  enddo
enddo
```

ブロック分散を仮定した
担当ループ範囲の定義

MPIプロセスの担当ごとに
縮小したループの構成

nがMPIプロセス数で割切れない時

- ▶ nがプロセス数のnumprocsで割り切れない場合
 - ▶ 配列確保: $A(N/\text{numprocs} + \text{mod}(N, \text{numprocs}), N)$
 - ▶ ループ終了値: numprocs-1のみ終了値がnとなるように実装

```
ib = n / numprocs;  
if ( myid == (numprocs - 1) ) {  
    i_end = n;  
} else {  
    i_end = (myid+1)*ib;  
}  
for ( i=myid*ib; i<i_end; i++) { ... }
```

余りが多い場合

- ▶ **mod(N, numprocs)が大きいと、負荷バランスが悪化**
 - ▶ 例 : N=10、numprocs=6
 - $\text{int}(10/6)=1$ なので、
プロセス0~5は1個のデータ、プロセス6は4個のデータを持つ
 - ▶ 各プロセスごとの開始値、終了値のリストを持てば改善可能
 - プロセス0: $i_{\text{start}}(0)=1$, $i_{\text{end}}(0)=2$, 2個
 - プロセス1: $i_{\text{start}}(1)=3$, $i_{\text{end}}(1)=4$, 2個
 - プロセス2: $i_{\text{start}}(2)=5$, $i_{\text{end}}(2)=6$, 2個
 - プロセス3: $i_{\text{start}}(3)=7$, $i_{\text{end}}(3)=8$, 2個
 - プロセス4: $i_{\text{start}}(4)=9$, $i_{\text{end}}(4)=9$, 1個
 - プロセス5: $i_{\text{start}}(5)=10$, $i_{\text{end}}(5)=10$, 1個
 - ▶ **欠点: プロセス数が多いと、上記リストのメモリ量が増える**

ハイブリットMPIプログラム開発 の基礎

用語の説明

▶ ピュアMPI実行

- ▶ 並列プログラムでMPIのみ利用
- ▶ MPIプロセスのみ

▶ ハイブリッドMPI実行

- ▶ 並列プログラムでMPIと何か(X(エックス))を利用
- ▶ MPIプロセスと何か(X)の混合
- ▶ 何か(X)は、OpenMPによるスレッド実行が主流

▶ 「MPI+X」の実行形態

- ▶ 上記のハイブリッドMPI実行と同義として使われる
- ▶ Xは、OpenMPや自動並列化によるスレッド実行、CUDAなどのGPU向き実装、OpenACCなどのGPUやメニーコア向き実行、などの組合せがある。今後主流となる形態で変わる。

ハイブリッドMPI実行の目的

- ▶ 同一の資源量(総コア数)の利用に対し
 - ▶ **ピュアMPI実行でのMPIプロセス数に対し、ハイブリッドMPI実行でのMPIプロセス数を減らすことで、通信時間を削減する**

ことが主な目的

- ▶ **例) 東京大学のFX10**
 - ▶ 全系は4,800ノード、76,800コア
 - ▶ **ピュアMPI実行: 76,800プロセス実行**
 - ▶ **ハイブリッドMPI実行(1ノード16スレッド実行)**
: 4,800プロセス
 - ▶ **プロセス数の比は16倍!**

ハイブリッドMPI並列プログラム 開発の指針

1. 正しく動作するピュアMPIプログラムを開発する
2. OpenMPを用いて対象カーネルをスレッド並列化する
3. 2. の性能評価をする
4. 3. の評価結果から性能が不十分な場合、対象カーネルについてOpenMPを用いた性能チューニングを行う。
3. へ戻る。
5. 全体性能を検証し、通信時間に問題がある場合、通信処理のチューニングを行う。

行列 - ベクトル積の ハイブリッドMPI並列化の例 (C言語)

```
ierr = MPI_Init(&argc, &argv);
ierr = MPI_Comm_rank(MPI_COMM_WORLD, &myid);
ierr = MPI_Comm_size(MPI_COMM_WORLD, &numprocs);
...
ib = n/numprocs;
jstart = myid * ib;
jend = (myid+1) * ib;
if ( myid == numprocs-1) jend=n;
#pragma omp parallel for private(i)
for( j=jstart; j<jend; j++) {
    y[ j ] = 0.0;
    for(i=0; i<n; i++) {
        y[ j ] += A[ j ][ i ] * x[ i ];
    }
}
```

ブロック分散を仮定した
担当ループ範囲の定義

この一文を追加するだけ！

MPIプロセスの担当ごとに
縮小したループの構成

行列 - ベクトル積の ハイブリッドMPI並列化の例 (Fortran言語)

```
call MPI_INIT(ierr)
call MPI_COMM_RANK(MPI_COMM_WORLD, myid, ierr)
call MPI_COMM_SIZE(MPI_COMM_WORLD, numprocs, ierr)
...
ib = n/numprocs
jstart = 1 + myid * ib
jend = (myid+1) * ib
if ( myid .eq. numprocs-1) jend = n
!$omp parallel do private(i)
do j = jstart, jend
  y( j ) = 0.0d0
  do i=1, n
    y( j ) = y( j ) + A( j, i ) * x( i )
  enddo
enddo
!$omp end parallel do
```

ブロック分散を仮定した
担当ループ範囲の定義

この文を追加するだけ！

MPIプロセスの担当ごとに
縮小したループの構成

ハイブリッドMPI実行の注意点（その1）

- ▶ ハイブリッドMPI実行では、MPIプロセス数に加えて、スレッド数がチューニングパラメタとなり、複雑化する。

- ▶ 例) 1ノード16コア実行

2MPIプロセス、8スレッド実行



4MPIプロセス、4スレッド実行

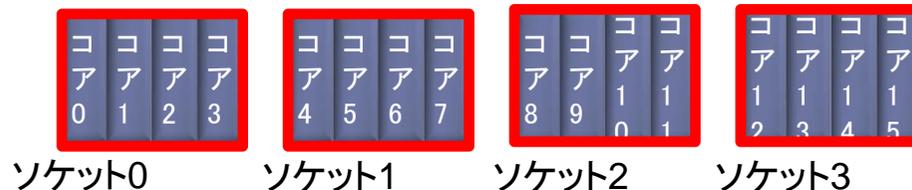


1つのMPIプロセスの割り当て対象

- ▶ ccNUMAの計算機では、ソケット数ごとに1MPIプロセス実行が高速となる可能性がある（ハードウェア的に）

- ▶ 例) T2K (AMD Quad Core Opteron)、4ソケット、16コア

4MPIプロセス、4スレッド実行



ハイブリッドMPI実行の注意点（その2）

- ▶ ハイブリッドMPI実行の実行効率を決める要因
 1. ハイブリッドMPI化による通信時間の削減割合
 2. OpenMP等で実現される演算処理のスレッド実行効率
- ▶ 特に、2は注意が必要。
 - ▶ 単純な実装だと、経験的に8スレッド並列を超えると、スレッド実行時の台数効果が劇的に悪くなる。
 - ▶ 効率の良いスレッド並列化の実装をすると、ハイブリッドMPI実行時に効果がより顕著になる。
 - ▶ 実装の工夫が必要。たとえば
 1. ファーストタッチ(すでに説明済み)の適用
 2. メモリ量や演算量を増加させても、スレッドレベルの並列性を増加させる
 3. アンローリングなどの逐次高速化手法を、スレッド数に特化させる

ハイブリッドMPI実行の注意点（その3）

- ▶ 通信処理の時間に含まれる、データのコピー時間が、通信時間よりも大きいことがある
 - ▶ 問題空間の配列から送信用の配列にコピーする処理（**パッキング**）
 - ▶ 受信用の配列から問題空間の配列へコピーする処理（**アンパッキング**）
 - ▶ 上記のコピー量が多い場合、コピー操作自体もOpenMP化すると高速化される場合がある。
 - ▶ 反面、ハードウェアによっては、OpenMP化すると遅くなる。このときは、逐次処理にしないといけない。
- ▶ **パッキング、アンパッキングをOpenMP化する／しない、もハイブリッドMPI実行では重要なチューニング項目になる**

ハイブリッドMPIの起動方法

- ▶ スパコンごとに異なるが、以下の方法が主流（すでに説明済み）。
 1. バッチジョブシステムを通して、MPIの数を指定
 2. 実行コマンドで、OMP_NUM_THREADS環境変数でスレッド数を指定
- ▶ ccNUMAの場合、MPIプロセスの割り当てを、期待する物理ソケットに割り当てないと、ハイブリッドMPI実行の効果が無くなる
 - ▶ Linuxでは、`numactl`コマンドで実行時に指定する
 - ▶ スパコン環境によっては、プロセスを指定する物理コアに割り当てる方法がある。（各スパコンの利用マニュアルを参考）

数値計算ライブラリとハイブリッドMPI実行

- ▶ 数値計算ライブラリのなかには、ハイブリッドMPI実行をサポートしているものがある
 - ▶ 数値計算ライブラリがスレッド並列化されている場合
 - ▶ 特に、密行列用ライブラリのScaLAPACKは、**通常、ハイブリッドMPI実行をサポート**
 - ▶ ScaLAPACKは、MPI実行をサポート
 - ▶ ScaLAPACKは、逐次のLAPACKをもとに構築
 - ▶ LAPACKは基本数値計算ライブラリBLASをもとに構築
 - ▶ BLASは、スレッド実行をサポート
- ⇒ **BLASレベルのスレッド実行と、ScaLAPACKレベルのMPI実行を基にしたハイブリッドMPI実行が可能**

スレッド並列版BLAS利用の注意

- ▶ BLASライブラリは、スレッド並列化がされている
- ▶ 利用方法は、OpenMPを用いた並列化と同じ
 - ▶ OMP_NUM_THREADSで並列度を指定
- ▶ **BLASで利用するスレッド数が利用可能なコア数を超えると、動かないか、動いたとしても速度が劇的に低下する**
- ▶ BLASを呼び出す先がスレッド並列化をしている場合、BLAS内でスレッド並列化をすると、総合的なスレッド数が、利用可能なコア数を超えることがある。このため、速度が劇的に低下する。
- ▶ **一般的に、逐次実行の演算効率が、スレッド並列の実行効率に比べ良い**
 - ▶ 上位のループをスレッド並列化し、そのループから逐次BLASを呼び出す実装がよい

逐次BLASをスレッド並列化して呼び出す例

▶ 通常のBLASの呼び出し

```
do i=1, Ak  
  call dgemm(...) ←スレッド並列版BLASを呼び出し  
                    (コンパイラオプションで指定)  
enddo
```

▶ 上位のループで並列化したBLASの呼び出し

```
!$omp parallel do  
do i=1, Ak  
  call dgemm(...) ←逐次BLASを呼び出し  
                    (コンパイラオプションで指定)  
enddo  
!$omp end parallel do
```

<スレッド並列版BLAS>と<逐次BLASを上位の ループでスレッド並列呼び出し>する時の性能例

▶ T2Kオープンスパコン(東大版)

- ▶ AMD Quad Core Opteron
- ▶ 1ノード(16コア)を利用
- ▶ 日立製作所によるCコンパイラ(日立最適化C)
- ▶ OpenMP並列化を行った
 - ▶ 最適化オプション: “-Os -omp”
- ▶ BLAS
 - ▶ GOTO BLAS ver.1.26
(スレッド並列版, および逐次版の双方)

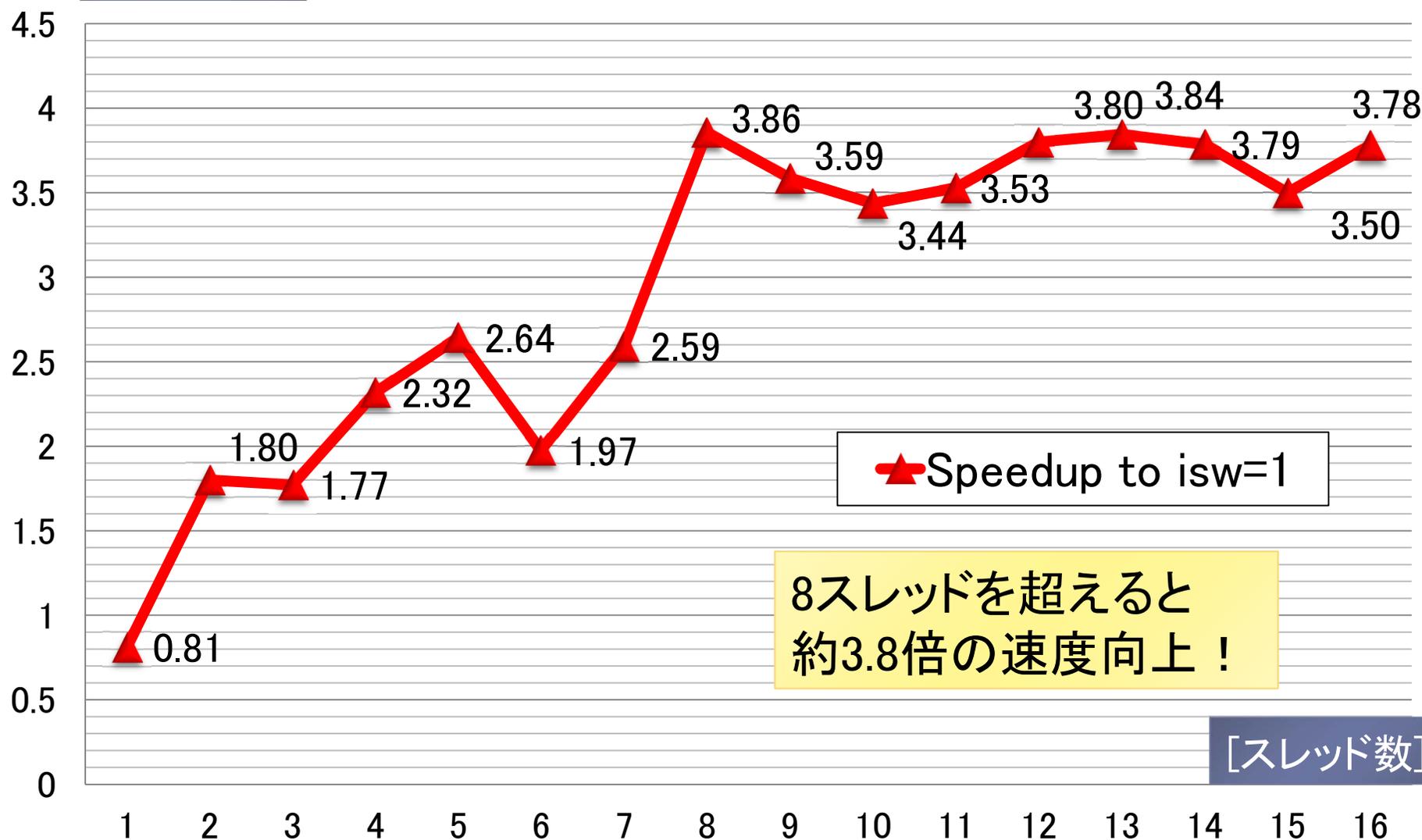
▶ 対象処理

- ▶ 高精度行列-行列積の主計算
- ▶ 複数の行列-行列積(dgemm呼び出し)を行う部分

n=1000での性能 (T2K(1ノード, 16コア))

BLAS内でスレッド並列化する場合に対する速度向上

[速度向上]

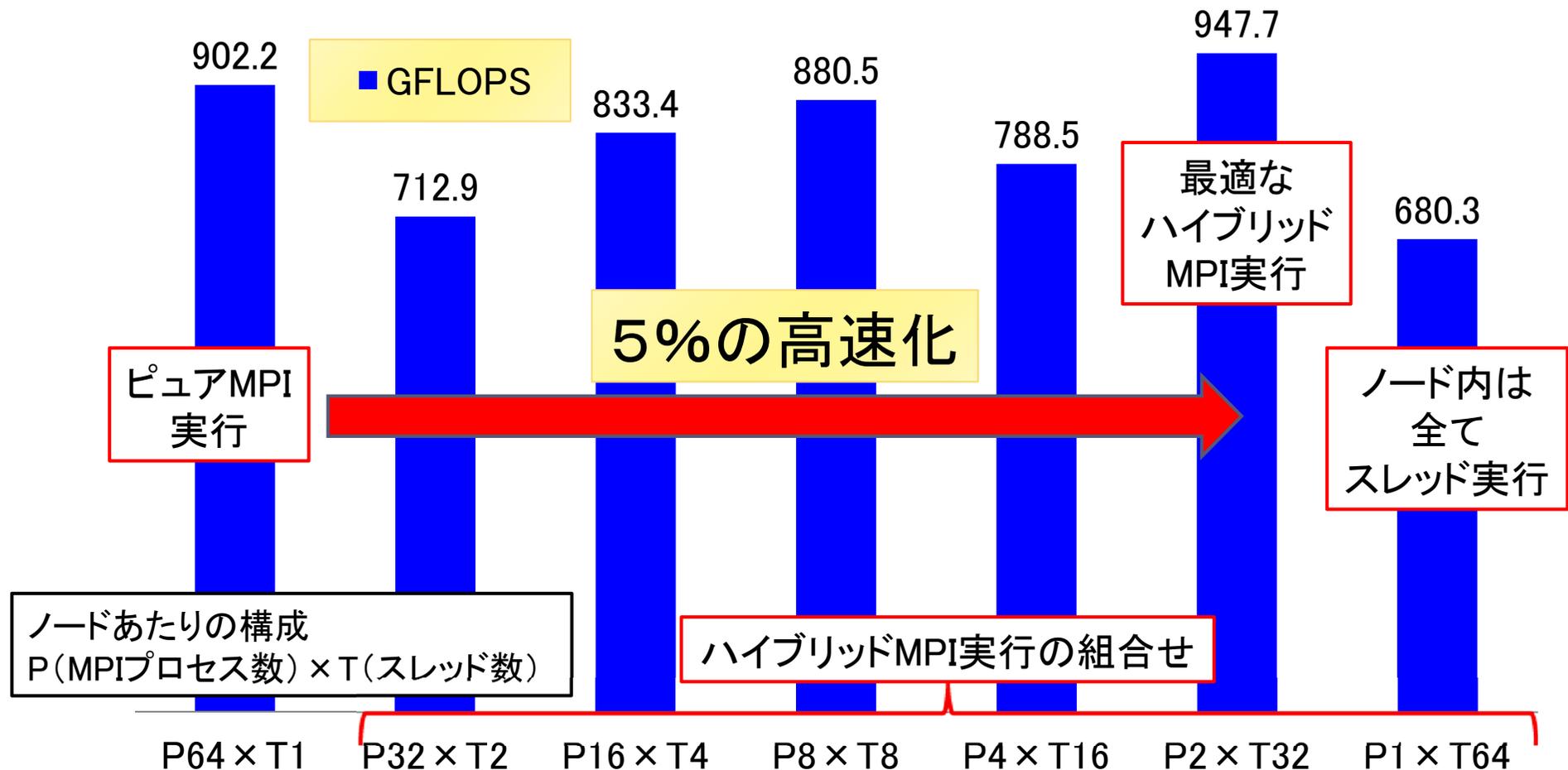


ScaLAPACKにおける ハイブリッドMPI実行の効果の例

- ▶ ScaLAPACKの連立一次方程式解法ルーチン
PDGESV
- ▶ 東京大学情報基盤センターのHITACHI SR16000
 - ▶ IBM Power7 (3.83GHz)
 - ▶ 1ノード4ソケット、1ソケットあたり8コア、合計32コア、
980.48GFLOPS／ノード
 - ▶ SMT利用で、1ノード64論理スレッドまで利用可能
 - ▶ ScaLAPACKは、同環境で提供されているIBM社の
ESSL(Engineering and Scientific Subroutine Library)
ライブラリを利用

ScaLAPACKにおける ハイブリッドMPI実行の効果の例

SR16000の2ノードでの実行 (問題サイズN=32,000)



コンパイラ最適化の影響（その1）

- ▶ MPI化、および、OpenMP化に際して、**ループ構造を逐次から変更**することになる
- ▶ この時、コンパイラに依存し、コード最適化が並列ループに対して、効かない(遅い)コードを生成することがある
- ▶ 上記の場合、逐次実行での効率に対して、並列実行での効率が低下し、**台数効果の向上を制限する**
- ▶ たとえば、**ループ変数に大域変数を記載すると、コンパイラの最適化を阻害することがある**
 - ▶ 特に並列処理制御変数である、**全体のMPIプロセス数を管理する変数、自分のランク番号を管理する変数は、大域変数であることが多いので注意。**

コンパイラ最適化の影響（その2）

- ▶ MPI並列コードで、ループに大域変数を使っている例

C言語の例

```
ib = n/numprocs;
for( j= myid * ib; j<(myid+1) * ib; j++) {
    y[ j ] = 0.0;
    for(i=0; i<n; i++) {
        y[ j ] += A[ j ][ i ] * x[ i ];
    }
}
```

Fortran言語の例

```
ib = n/numprocs
do j = 1 + myid * ib, (myid+1) * ib
    y( j ) = 0.0d0
    do i=1, n
        y( j ) = y( j ) + A( j, i ) * x( i )
    enddo
enddo
```

- ▶ 上記のmyidは大域変数で、自ランク番号を記憶している変数
- ▶ コンパイラがループ特徴を把握できず、最適化を制限
 - ▶ ←逐次コードに対して、演算効率が低下し、台数効果を制限
- ▶ 解決策：局所変数を宣言しmyidを代入。対象を関数化。

ハイブリッドMPIプログラミングのまとめ

- ▶ **ノード数が増えるほど、ピュアMPI実行に対する効果が増加**
 - ▶ 経験的には、1000MPIプロセスを超える実行で、**ハイブリッドMPI実行が有効**となる
 - ▶ 現状での効果はアプリケーションに依存するが、**経験的には数倍(2~3倍)高速化される**
 - ▶ 現在、多くの実例が研究されている
 - ▶ エクサに向けて10万並列を超える実行では、**おそらく数十倍の効果**が期待される
- ▶ **ノードあたりの問題サイズが小さいほど、ハイブリッドMPI実行の効果が増大**
 - ▶ 弱スケーリングより強スケーリングのほうが**ハイブリッドMPI実行の効果**がある

レポート課題（その1）

▶ 問題レベルを以下に設定

問題のレベルに関する記述:

- L00: きわめて簡単な問題。
- L10: ちょっと考えればわかる問題。
- L20: 標準的な問題。
- L30: 数時間程度必要とする問題。
- L40: 数週間程度必要とする問題。複雑な実装を必要とする。
- L50: 数か月程度必要とする問題。未解決問題を含む。

※L40以上は、論文を出版するに値する問題。

▶ 教科書のサンプルプログラムは以下が利用可能

- ▶ Samples-fx.tar
- ▶ Mat-Vec-fx.tar
- ▶ PowM-fx.tar
- ▶ Mat-Mat-fx.tar
- ▶ Mat-Mat-d-fx.tar
- ▶ LU-fx.tar

レポート課題（その2）

1. [L20] 使える並列計算機環境で、教科書のサンプルプログラムを並列化したうえで、
ピュアMPI実行、および、ハイブリッドMPI実行で
性能が異なるか、実験環境（たとえば、12ノード、192コア）
を駆使して、性能評価せよ。
 - ▶ 1ノードあたり、12MPI実行、1MPI+16スレッド実行、2MPI+8スレッド
実行、4MPI+4スレッド実行など、組み合わせが多くある。

レポート課題（その3）

2. [L10] ハイブリッドMPI実行がピュアMPI実行に対して有効となるアプリケーションを、論文等で調べよ。
3. [L20~] 自分が持っている問題に対し、ハイブリッドMPI実行ができるようにプログラムを作成せよ。また、実験環境を用いて、性能評価を行え。