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



東京大学情報基盤センター
Information Technology Center,The University of Tokyo

# 講義日程と内容について

- 2015年度　CMSI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、2015年4月9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、2015年4月16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、2015年4月23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)、2015年5月7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、2015年5月14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

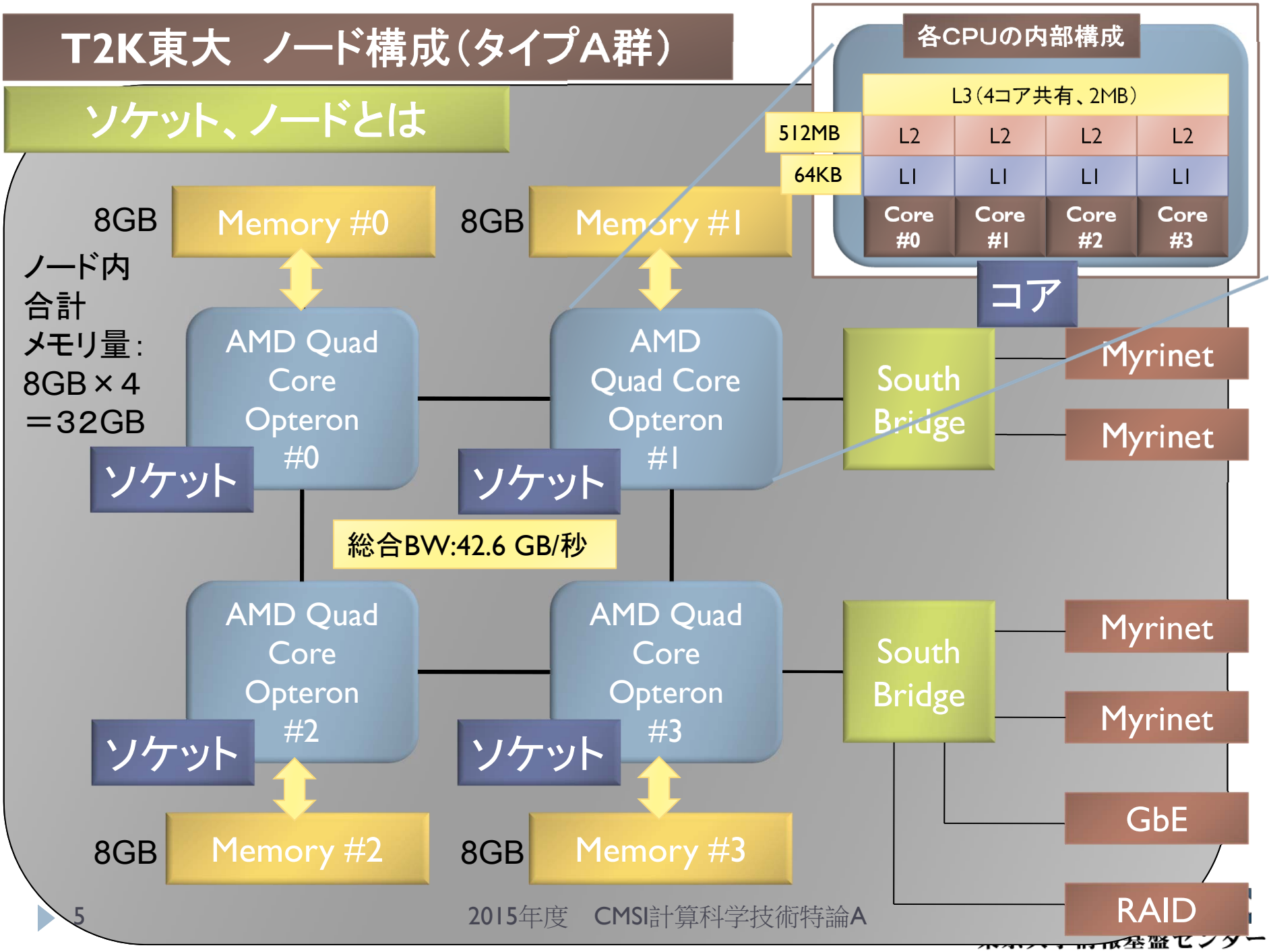
# 東京大学情報基盤センタースパコン

## T2Kオープンスパコン（東大版）（HA8000クラスタシステム）

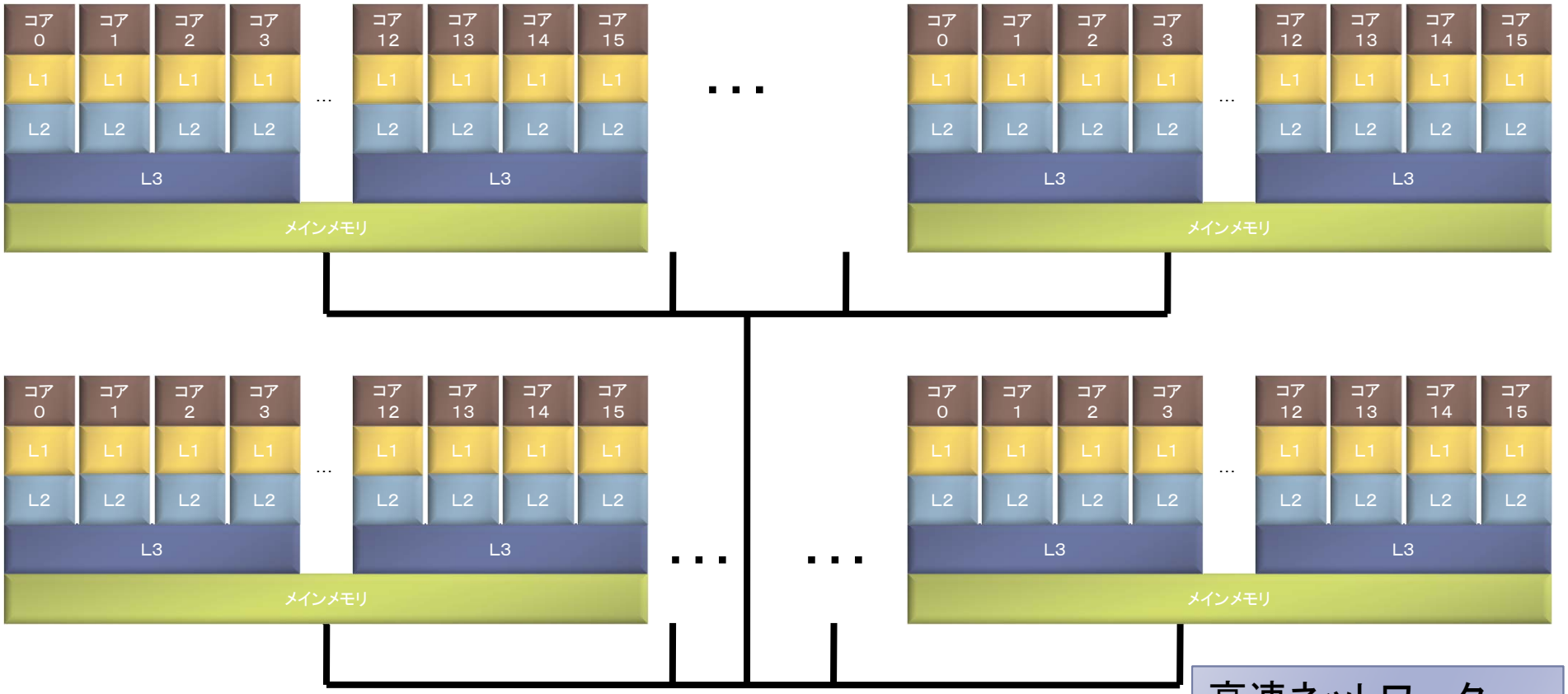
| | |
|---|---|
| Total Peak performance | : 140 TFLOPS |
| Total number of nodes | : 952 |
| Total memory | : 32000 GB |
| Peak performance per node | : 147.2 GFLOPS |
| Main memory per node | : 32 GB, 128 GB |
| Disk capacity | : 1 PB |
| **AMD Quad Core Opteron（2.3GHz）** | |

製品名：HITACHI HA8000-tc/RS425

# T2K東大　ノード構成（タイプA群）



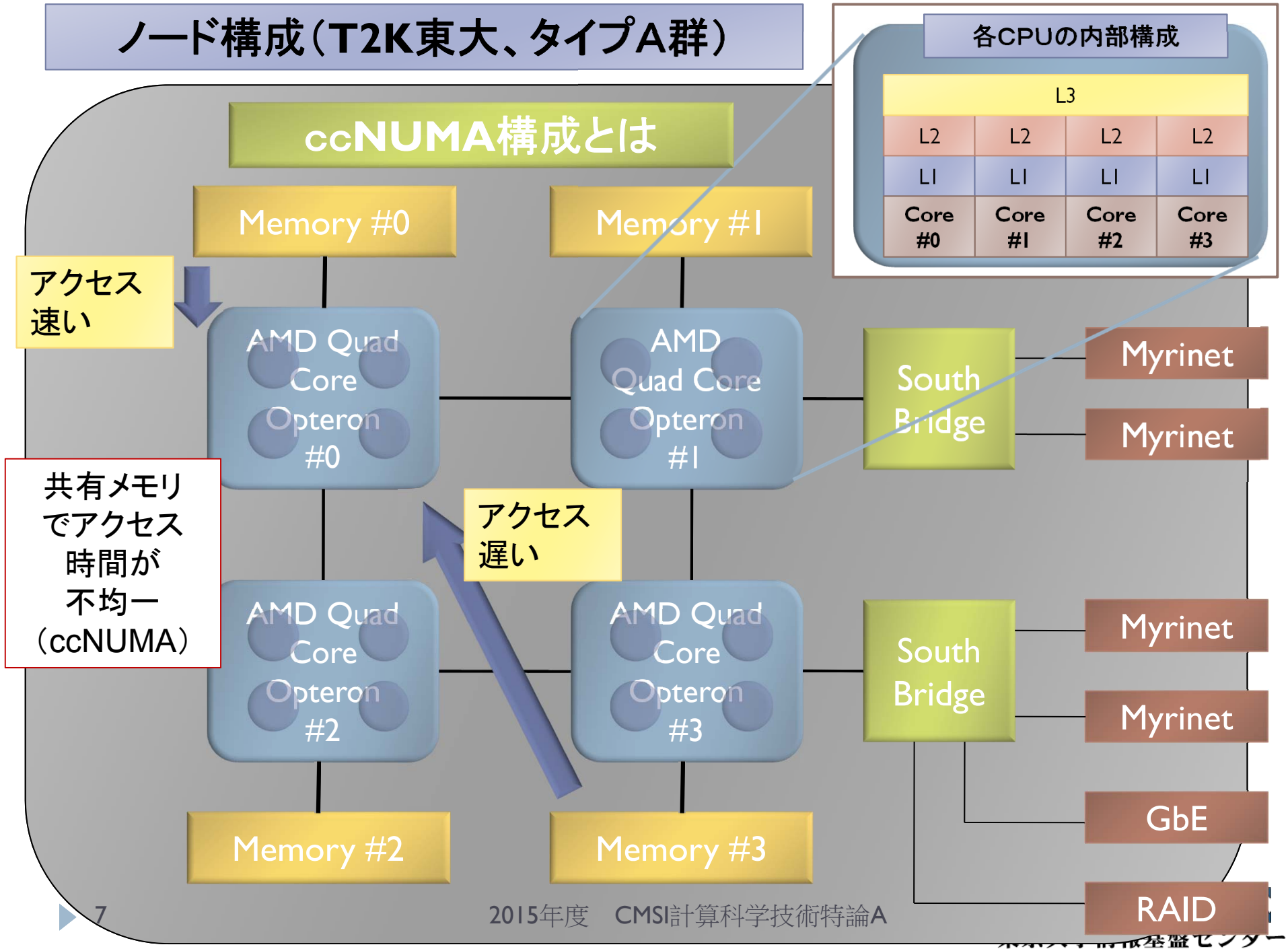
# T2K（東大）での全体メモリ構成図




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）



# 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

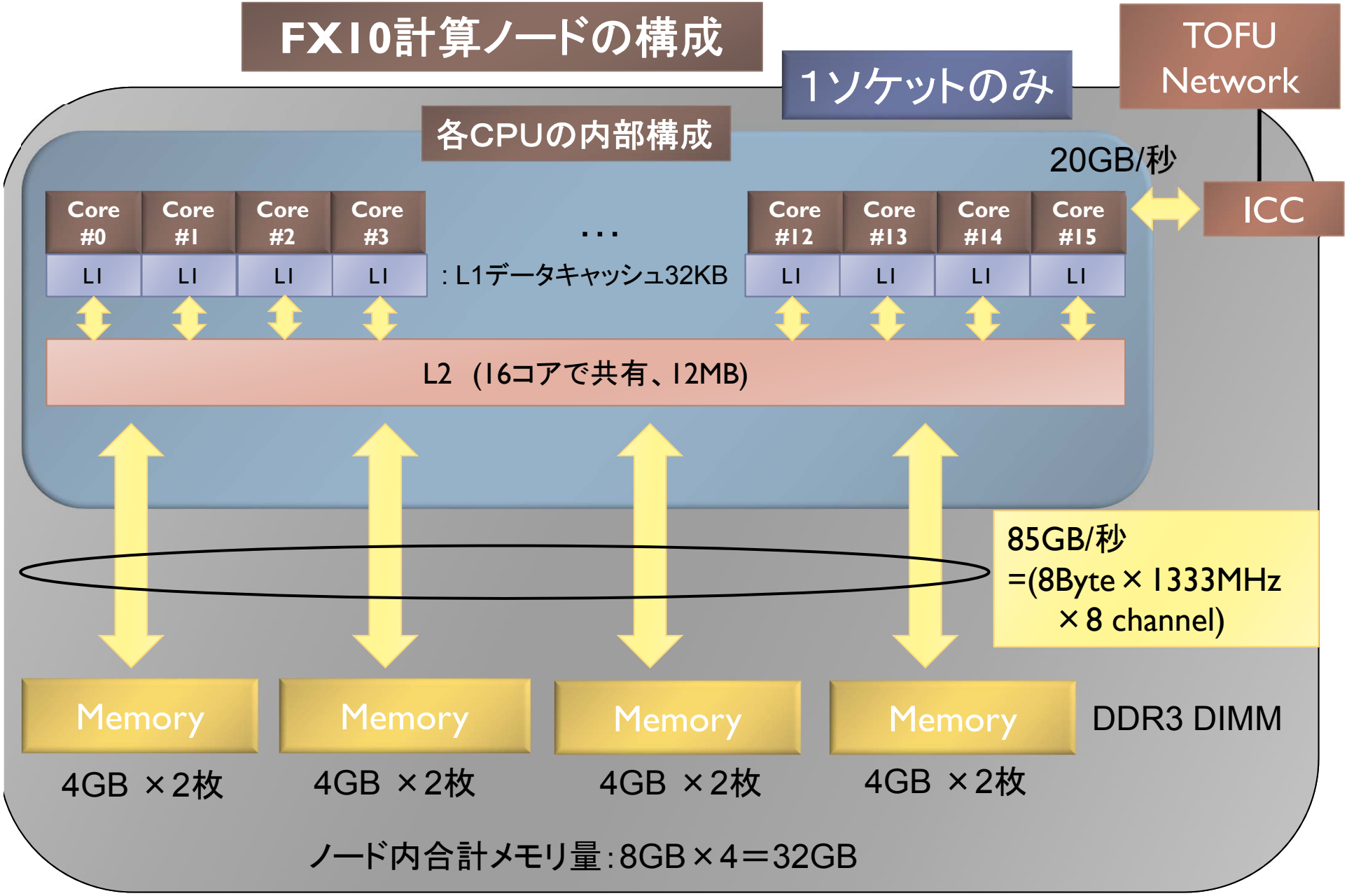
| | |
|---|---|
| Total Peak performance | : 1.13 PFLOPS |
| Total number of nodes | : 4,800 |
| Total memory | : 150TB |
| Peak performance per node | : 236.5 GFLOPS |
| Main memory per node | : 32 GB |
| Disk capacity | : 2.1 PB |

**SPARC64 IXfx （1.848GHz）**

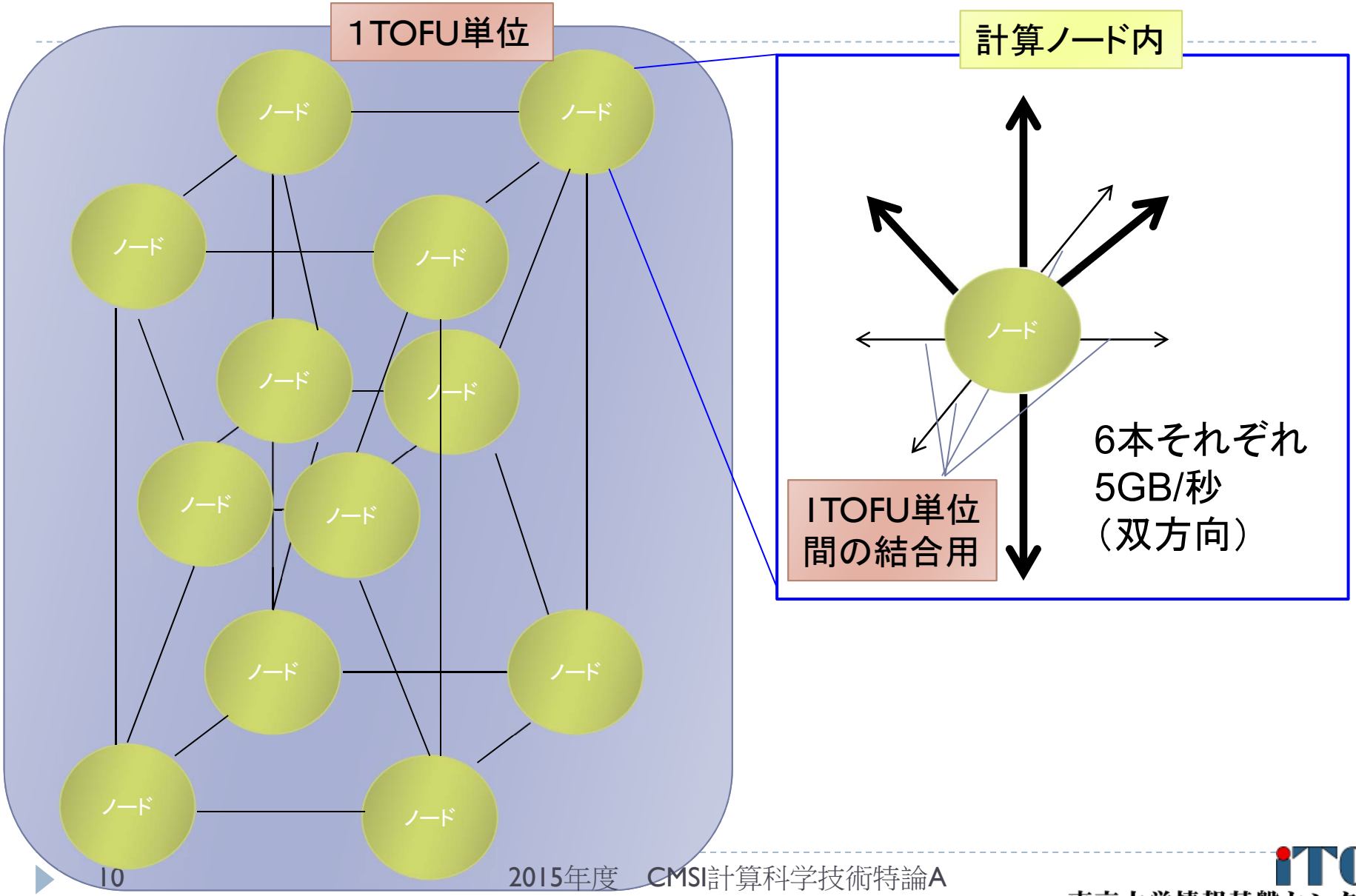
製品名 : Fujitsu PRIMEHPC FX10

2012年4月運用開始

# FX10計算ノードの構成

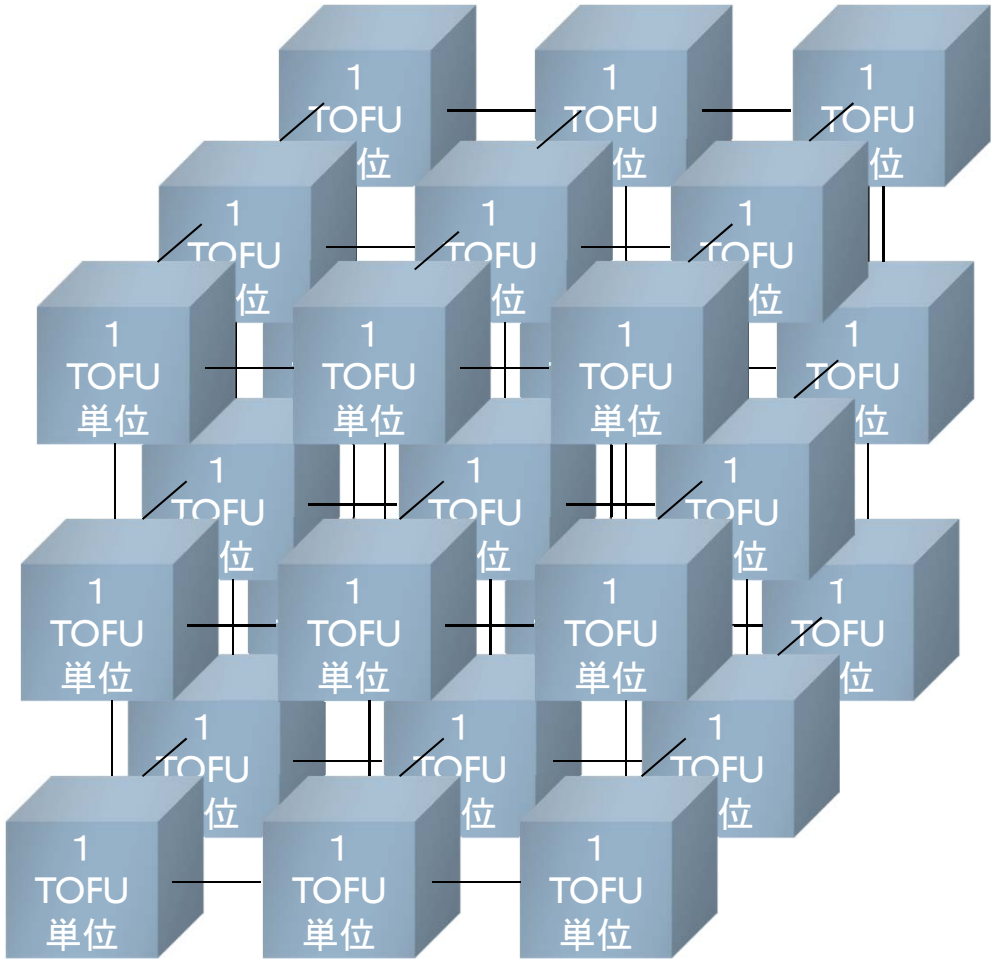


# FX10の通信網（１TOFU単位）



# FX10の通信網（1TOFU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、繋がってみえます
（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

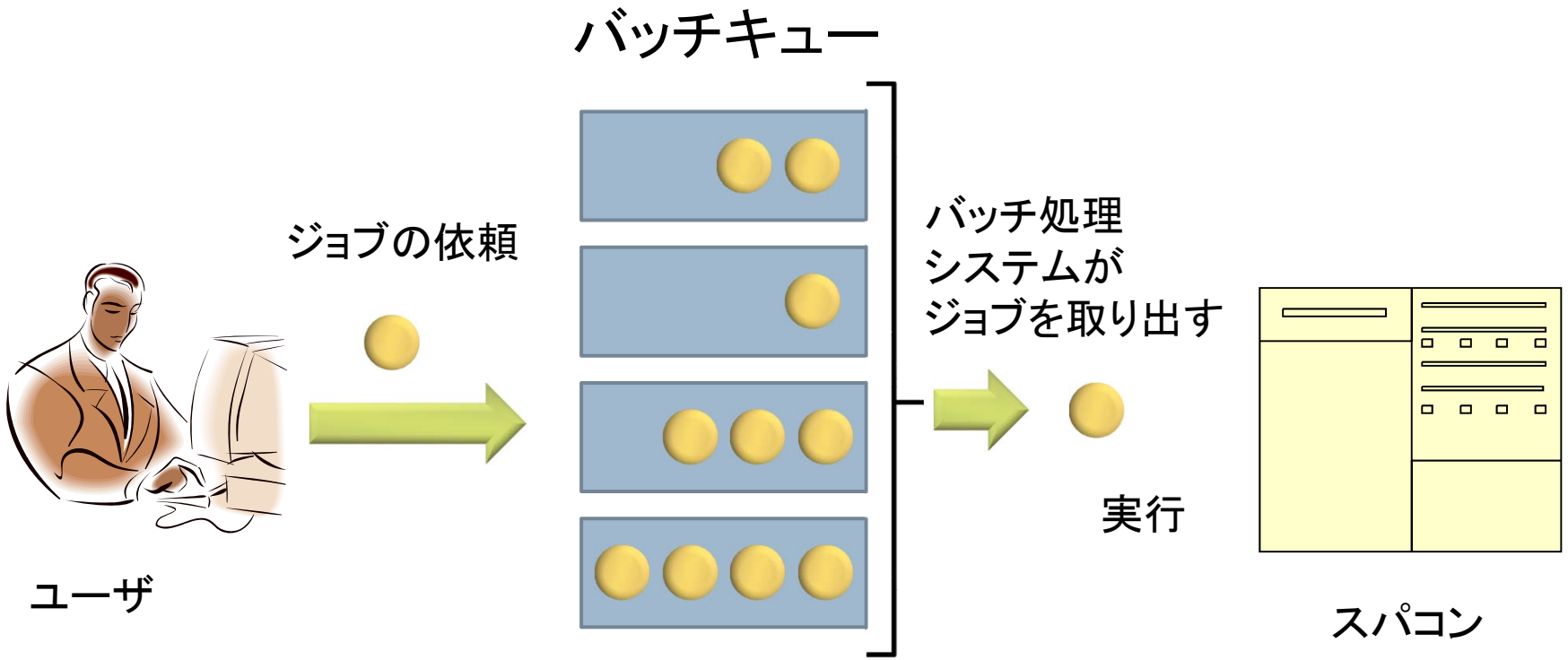
# バッチ処理とMPIジョブの投入

# 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 (Oakleaf-FX)では、最大1440ノード（23,040コア）（24時間）
  - FX10 (Oakbridge-FX)では、最大576ノード（9,216コア）（168時間、7日）

# 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

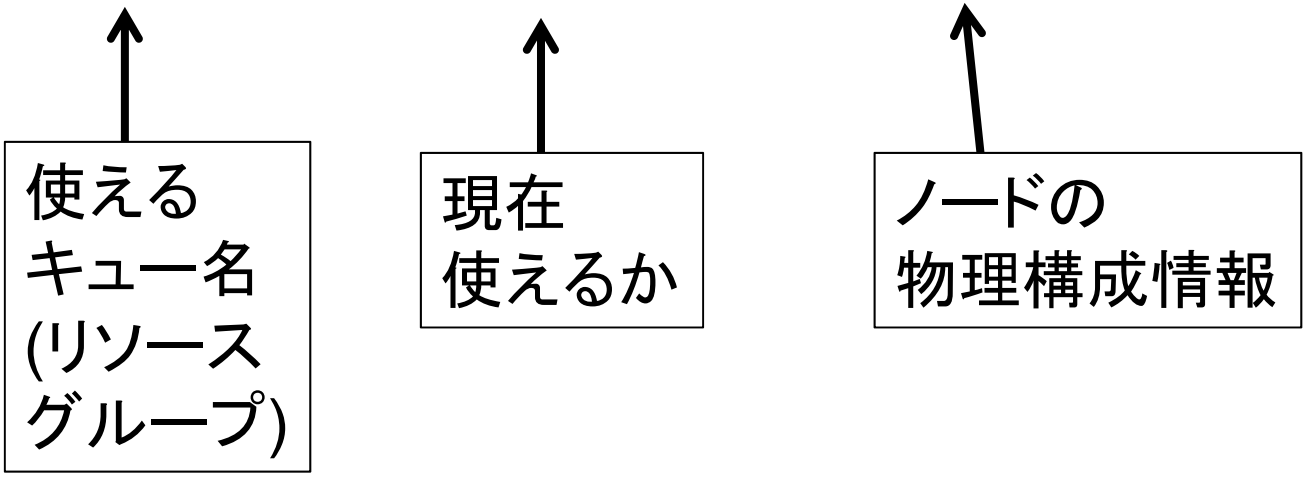
    $ pjsub --interact -L “node=8”

※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
```

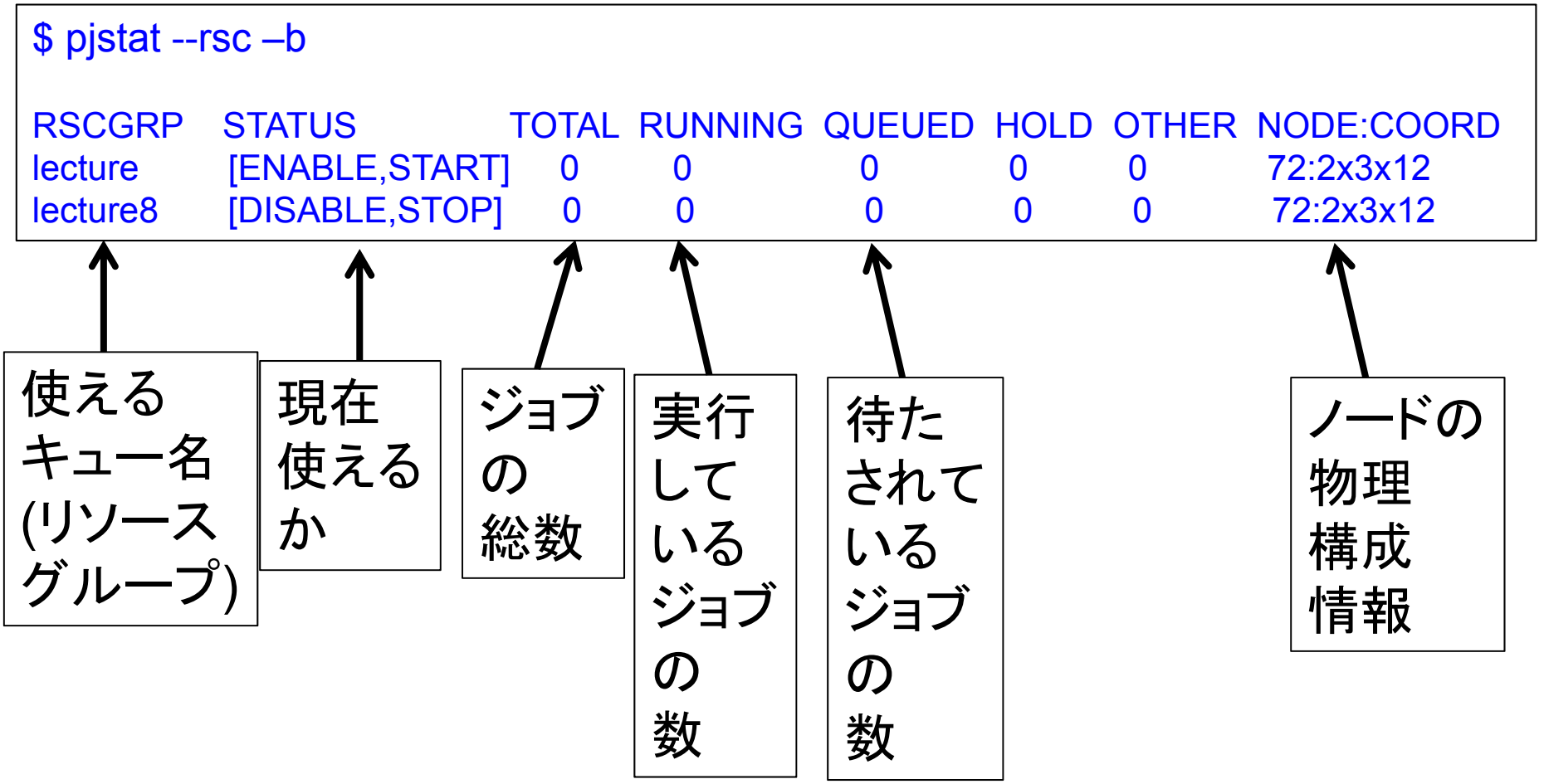


# pjstat --rsc -x の実行画面例

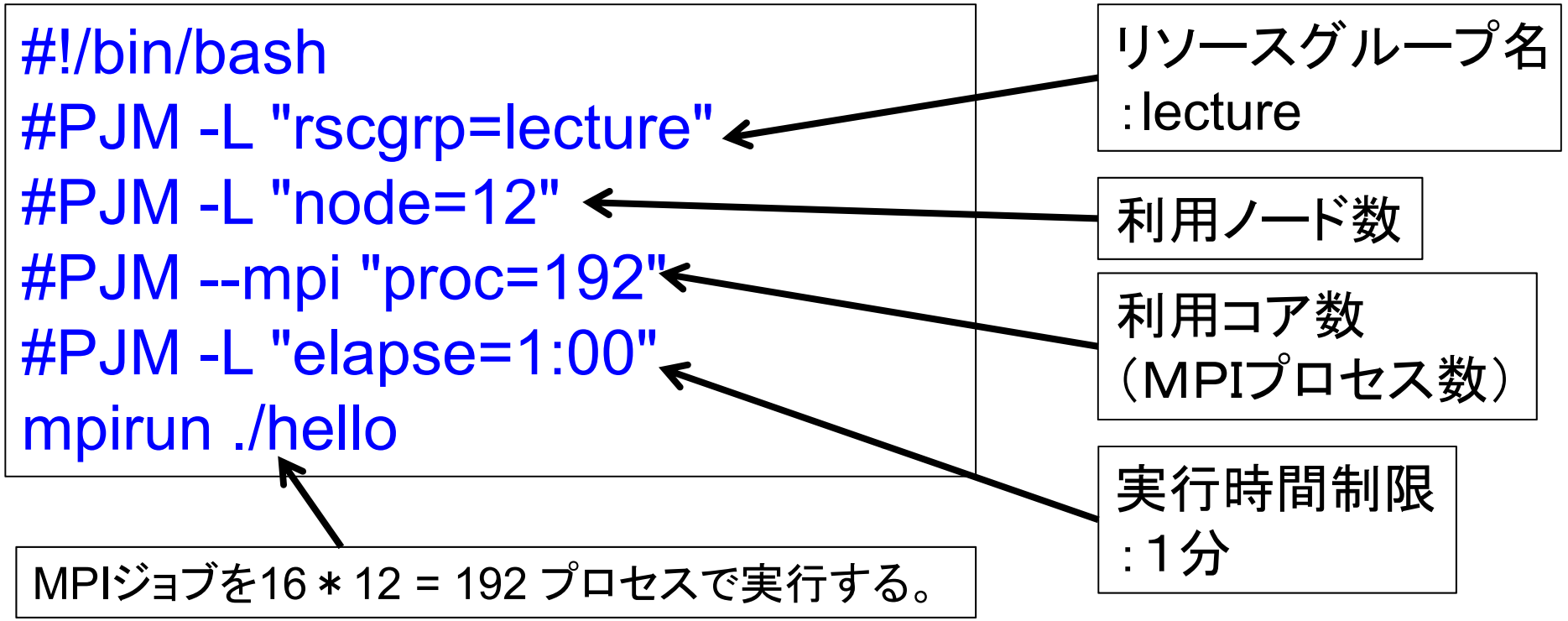
```
$ pjstat --rsc -x

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
```

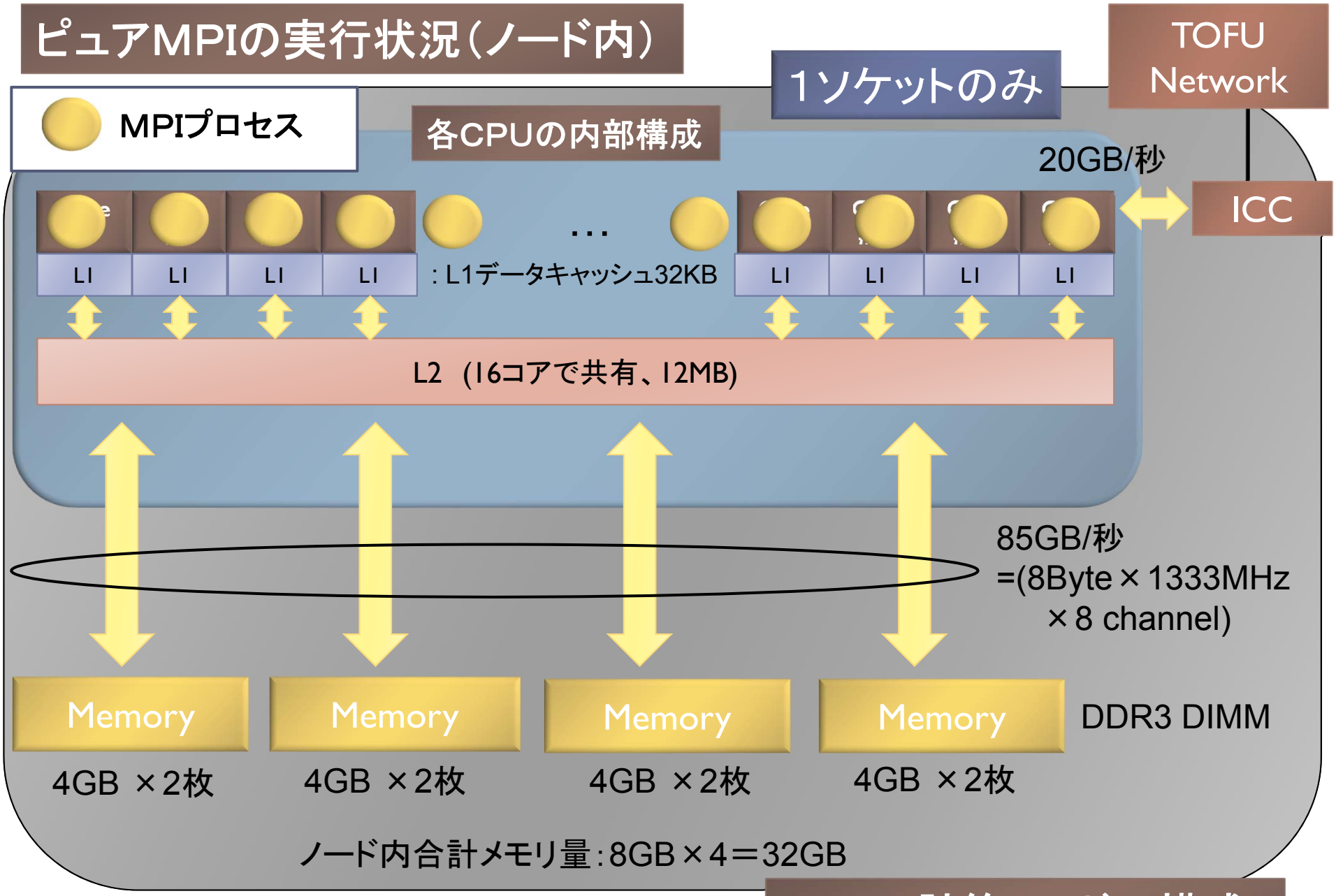
# pjstat --rsc -b の実行画面例



# 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）



# 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.eXXXXXX
   hello-pure.bash.oXXXXXX （XXXXXXは数字）
4. 上記の標準出力ファイルの中身を見てみる
   $ cat hello-pure.bash.oXXXXXX
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

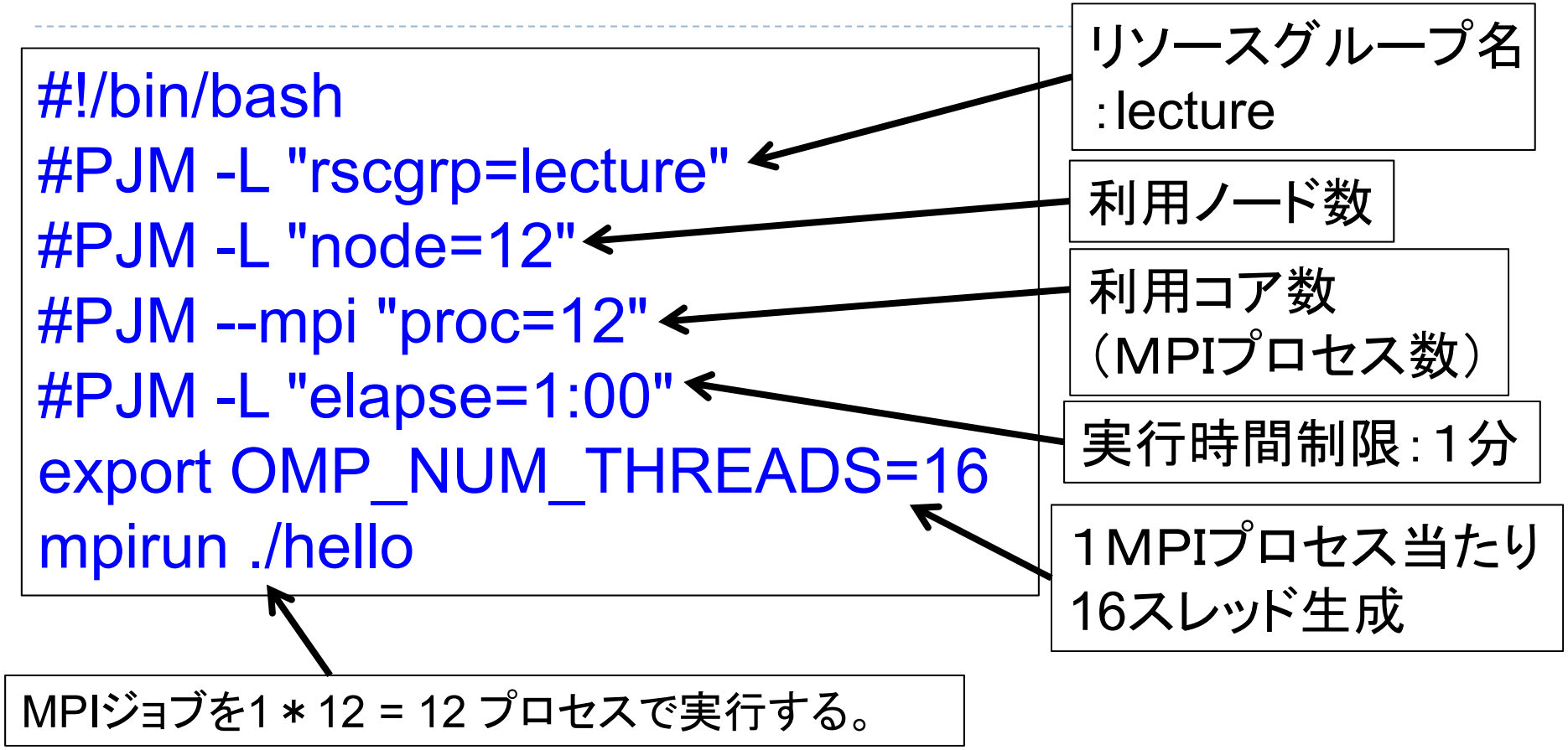
- バッチジョブの実行が終了すると、標準出力ファイルと標準エラー出力ファイルが、ジョブ投入時のディレクトリに作成されます。
- 標準出力ファイルにはジョブ実行中の標準出力、標準エラー出力ファイルにはジョブ実行中のエラーメッセージが出力されます。

ジョブ名.oXXXXX --- 標準出力ファイル
ジョブ名.eXXXXX --- 標準エラー出力ファイル
(XXXXX はジョブ投入時に表示されるジョブのジョブID)

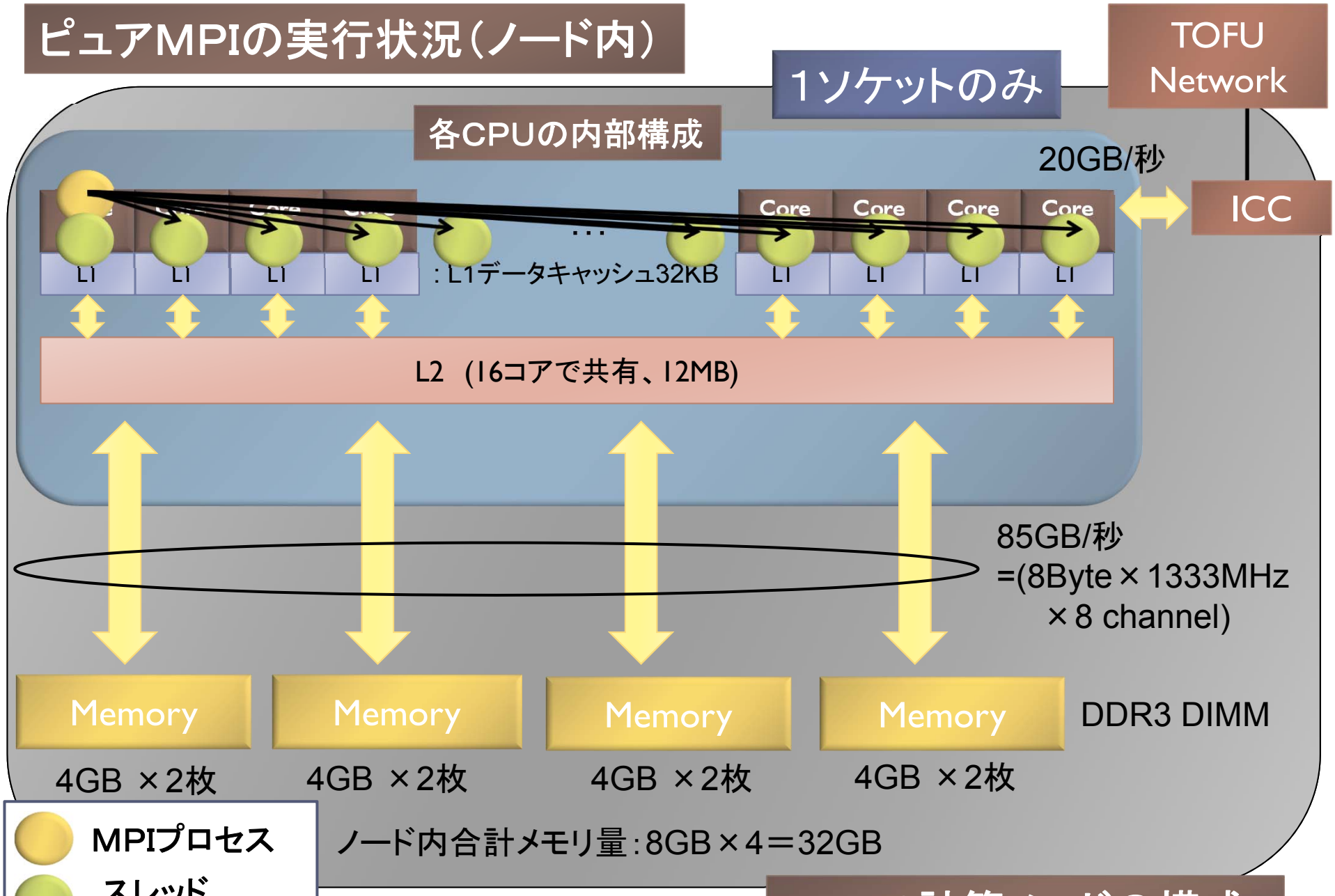
# 並列版Helloプログラムを実行しよう（ハイブリッドMPI）

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）



# ピュアMPIの実行状況（ノード内）




FX10計算ノードの構成

# 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
    - 以上を超えても実行できるはずだが、性能が落ちる
  - 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（経験値、問題、ハードウェア依存）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

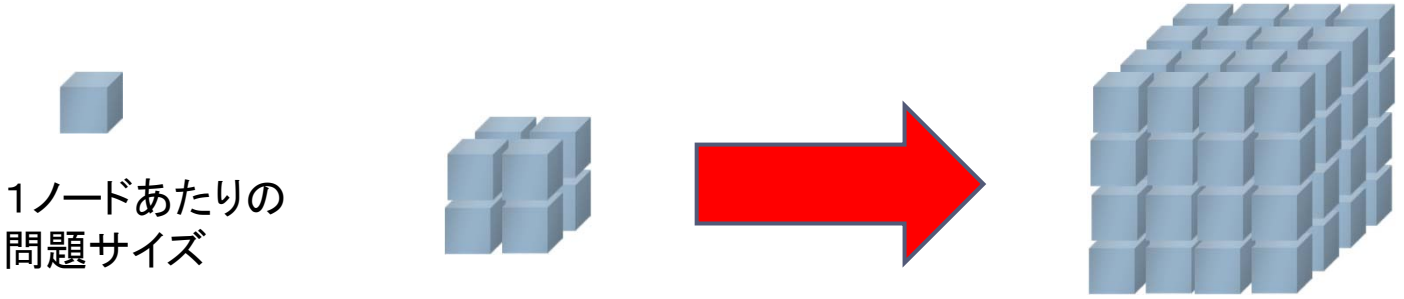
- 一般に、スーパーコンピュータでは、
  MPI実行時の入出力のリダイレクトができません
  - ×例）mpirun ./a.out < in.txt > out.txt

- 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

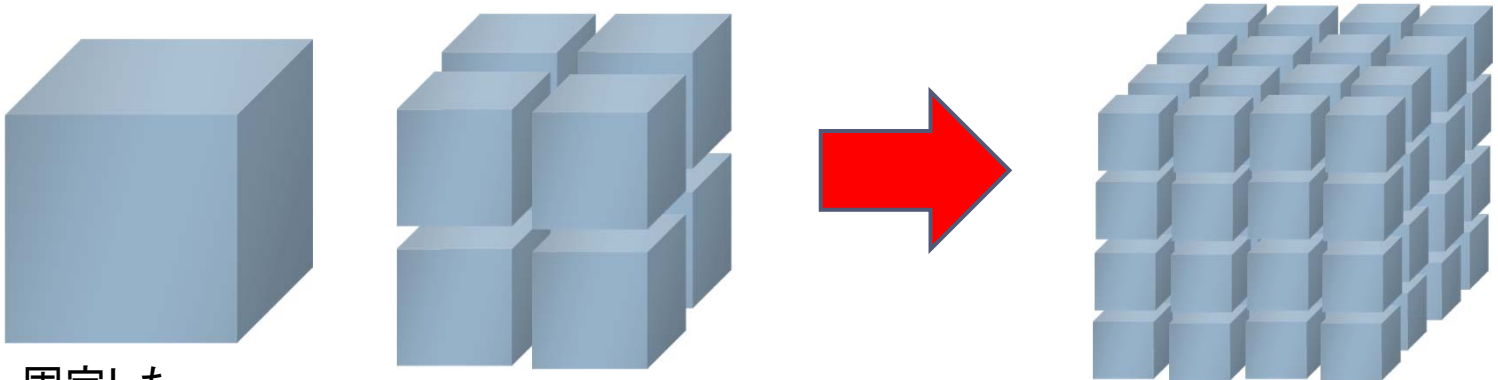
# 弱スケーリング (Weak Scaling)

- 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（主にシステム的な要因により）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



# 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、理想的に実行時間は減少しない
  - 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$O(N^3)$



固定した問題サイズ　　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

# 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、隣接するプロセス間のみ
  - 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が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
  - 2015年11月のTOP500の、コア当たりの問題サイズ
  - （1位）Tianhe-2、
    N=9,960,000、#cores=3,120,000、N/#cores=3.19
  - （4位）K computer、
    N=11,870,208、#cores=705,024、N/#cores=16.8
  - （6位）Piz Daint、
    N=4,128,768、#cores=115,984、N/#cores=35.5
- 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

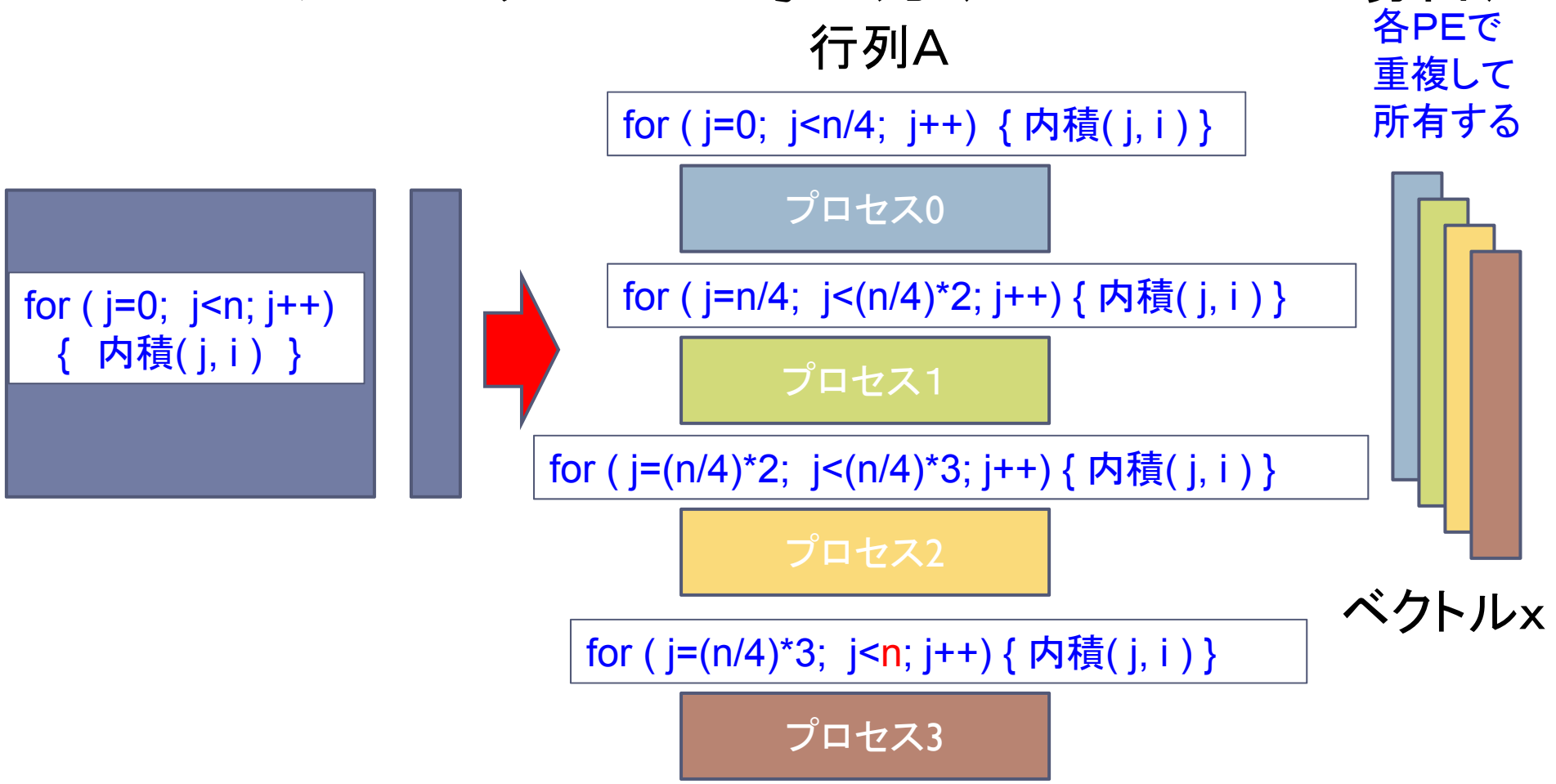
# MPI並列化の大前提（再確認）

- 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）

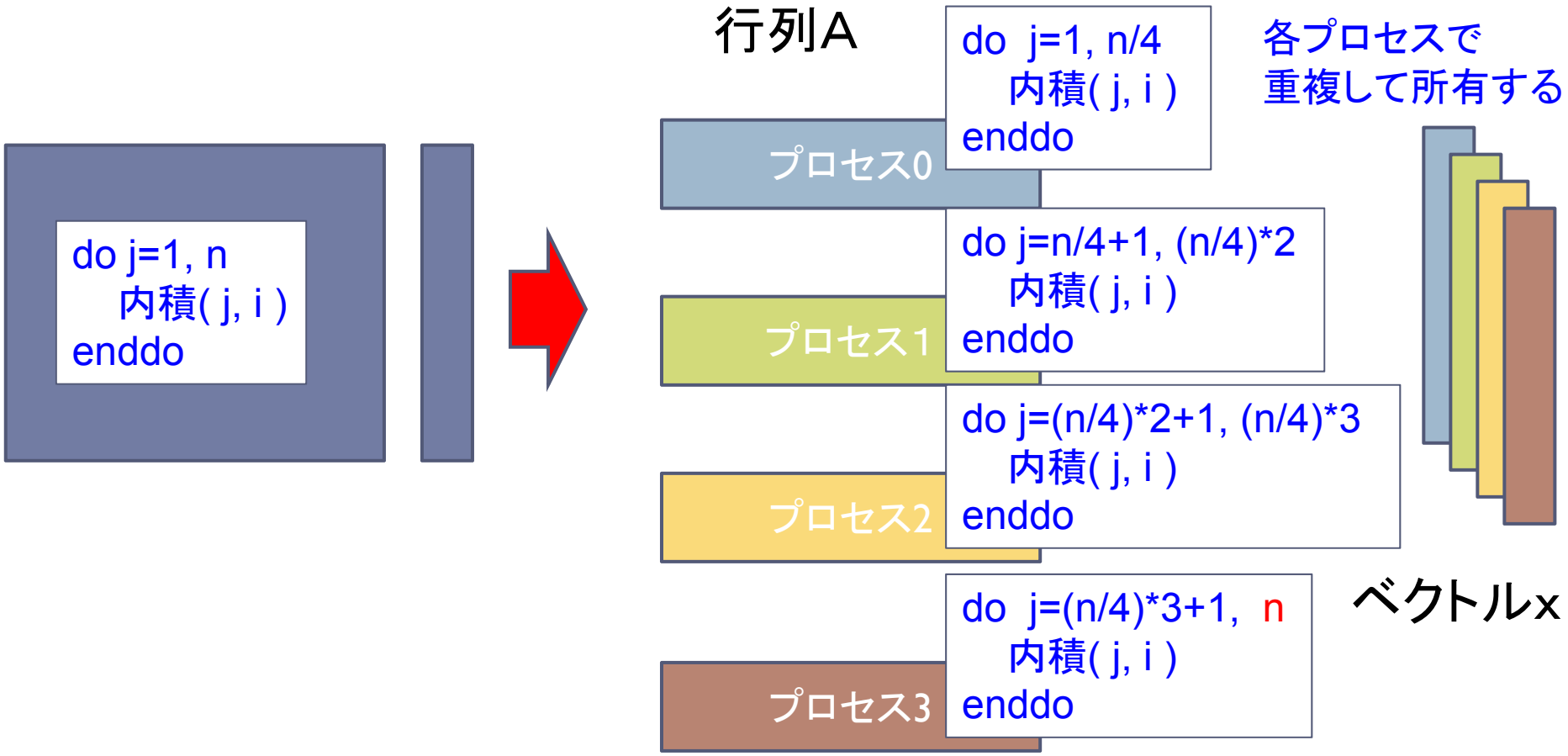
# 並列化の考え方（C言語）

- SIMDアルゴリズムの考え方（4プロセスの場合）



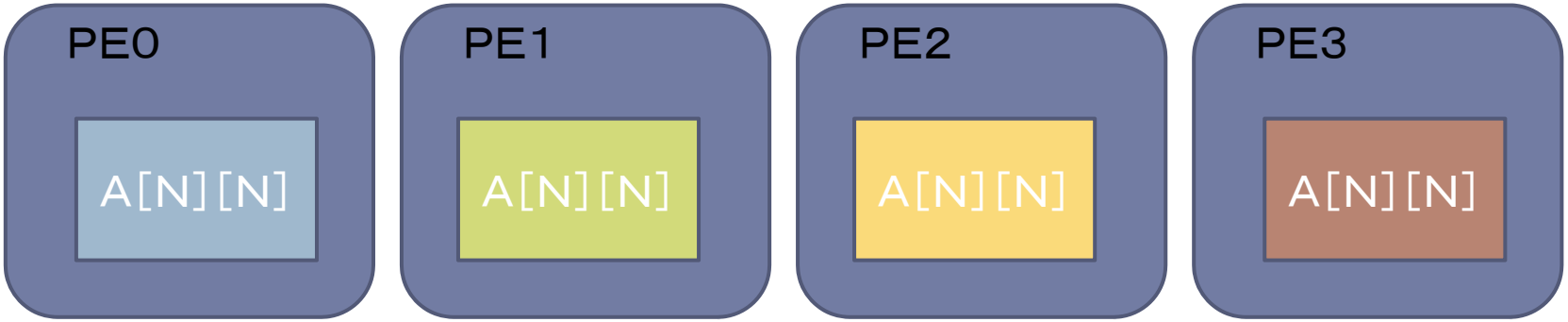
# 並列化の考え方（Fortran言語）

- SIMDアルゴリズムの考え方（4プロセスの場合）

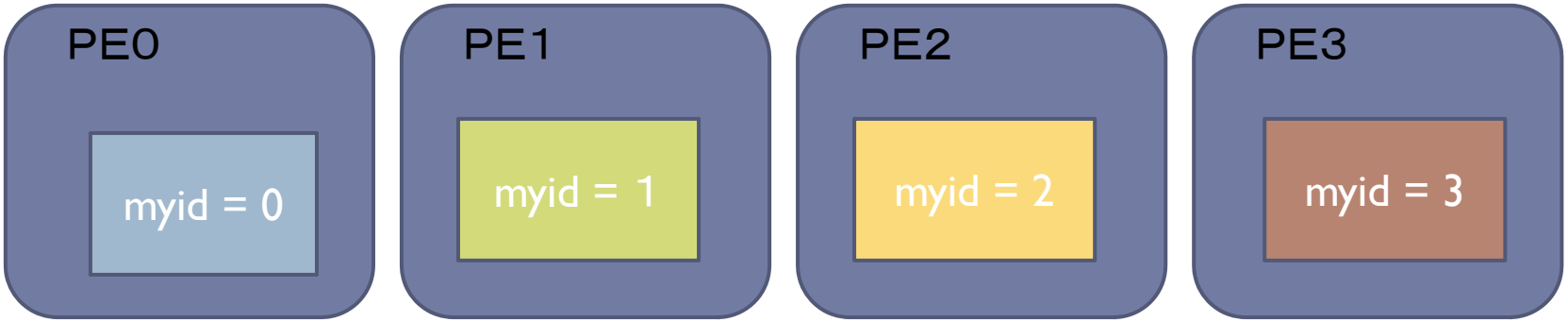


# 初心者が注意すること

- 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て並列化時のデバックをする

- 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、行列分解部分（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（解析解）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×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×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。

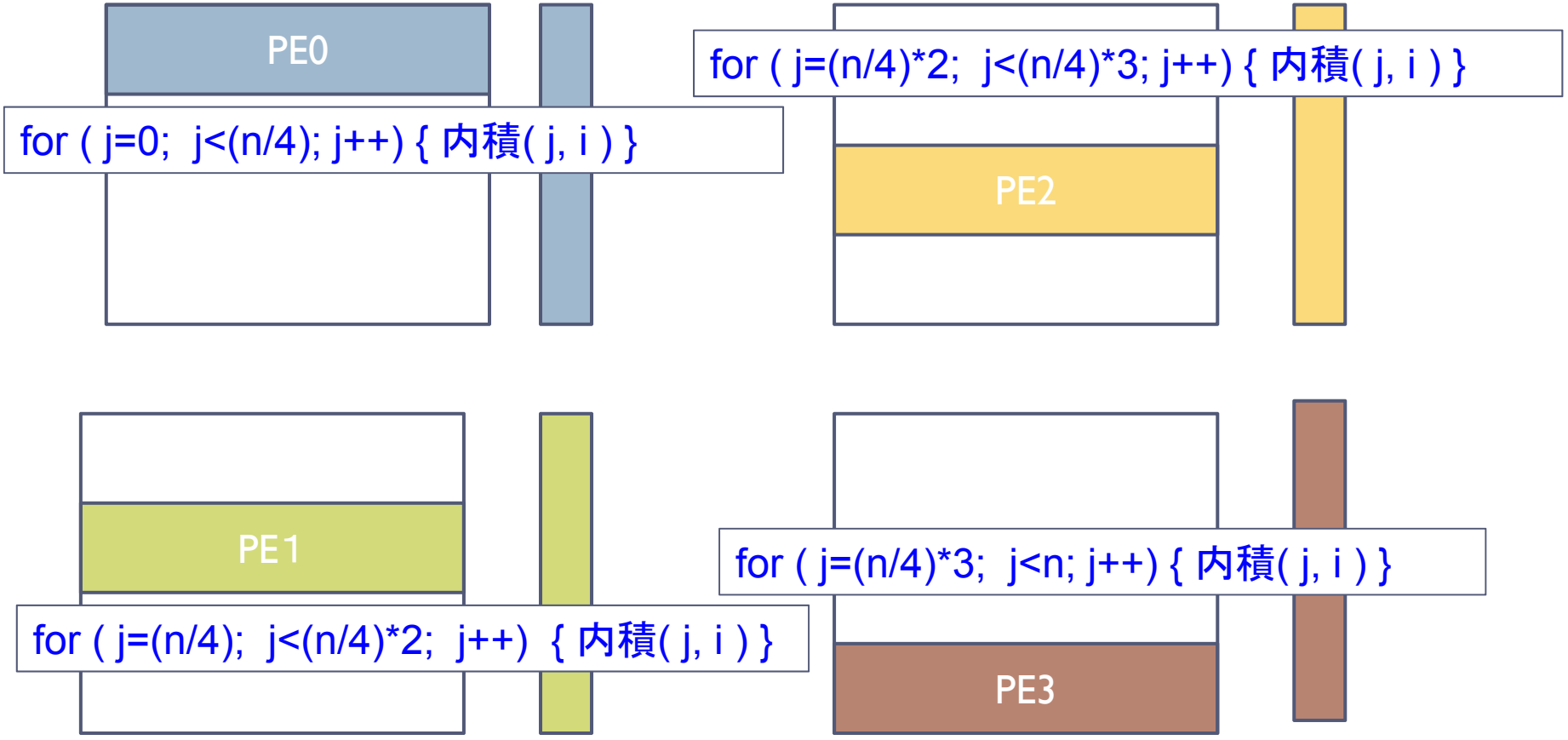
```
do  j=1, ib    …    enddo
```

# データ分散方式に関する注意

- 負荷分散を考慮し、多様なデータ分散方式を採用可能
- 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
        - ローカルインデックス、グローバルインデックスが計算で求まるため

# 並列化の方針（行列-ベクトル積）（C言語）

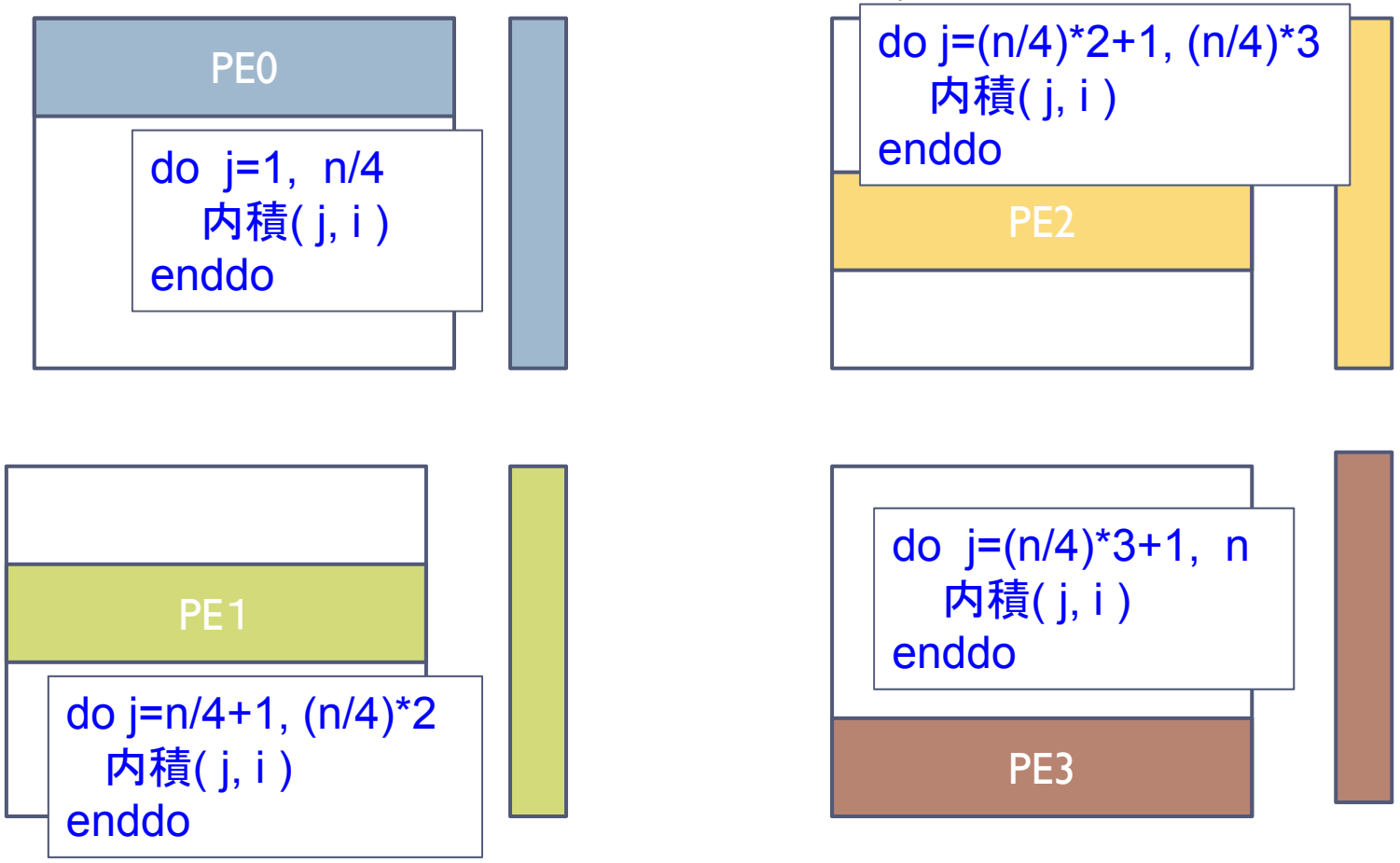
- 全PEでN×N行列を持つ場合




※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）

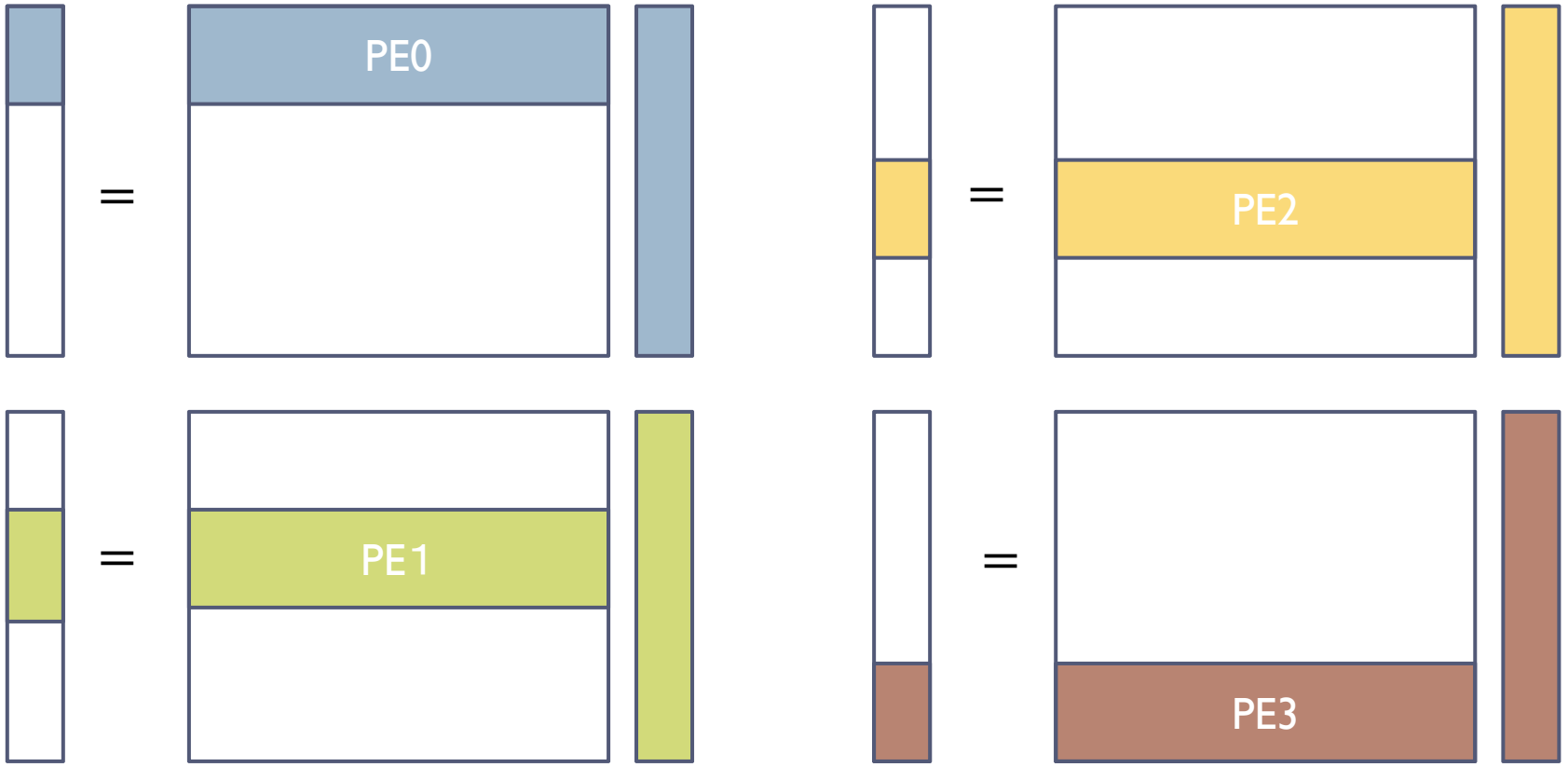
- 全PEでN×N行列を持つ場合




※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;

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

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/numprocs + mod(N, 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
    - 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_start(0)=1, i_end(0)=2, 2個
    - プロセス1： i_start(1)=3, i_end(1)=4, 2個
    - プロセス2： i_start(2)=5, i_end(2)=6, 2個
    - プロセス3： i_start(3)=7, i_end(3)=8, 2個
    - プロセス4： i_start(4)=9, i_end(4)=9, 1個
    - プロセス5： i_start(5)=10, i_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、もしくは、GPU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。主流となる計算機アーキテクチャで変わる。

# 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

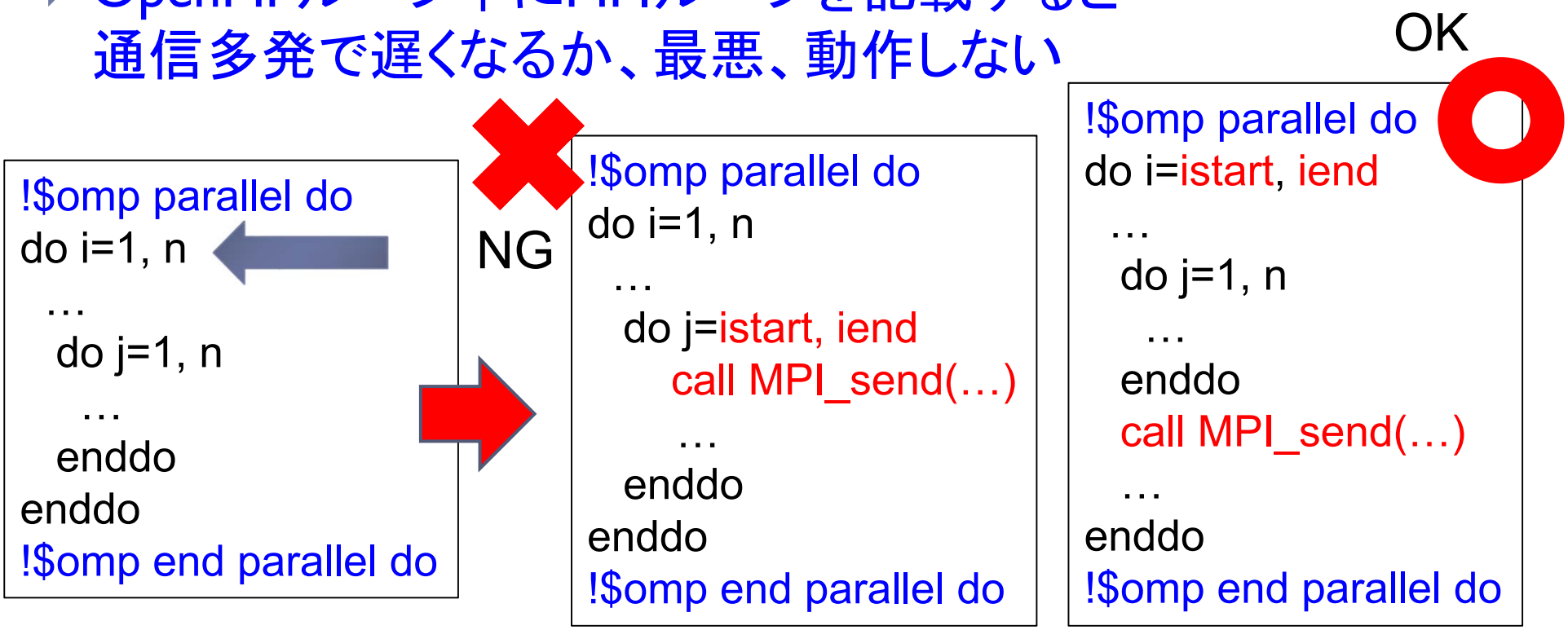
  ことが主な目的
- 例）東京大学のFX10
  - 全系は4,800ノード、76,800コア
  - ピュアMPI実行：76,800プロセス実行
  - ハイブリッドMPI実行（1ノード16スレッド実行）：4,800プロセス
  - MPIプロセス数の比は16倍！

# ハイブリッドMPI/OpenMP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。

# ハイブリッドMPI/OpenMP並列化の方針（OpenMPプログラムがある場合）

- すでに開発済みのOpenMPプログラムを元にMPI化する場合
- OpenMPのparallelループをMPI化すること
- OpenMPループ中にMPIループを記載すると通信多発で遅くなるか、最悪、動作しない



# 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

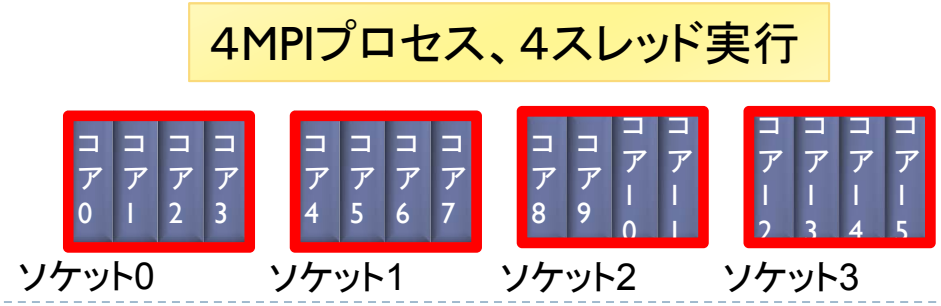
この文を追加するだけ！

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/OpenMP実行の注意点（その1）

- ハイブリッドMPI/OpenMP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


  - 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



# ハイブリッドMPI/OpenMP実行の注意点（その２）

- ハイブリッドMPI/OpenMP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/OpenMP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/OpenMP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。
    - 特に、強スケーリング時
  - 問題サイズや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/OpenMP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ト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、OpenMP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、OpenMPスレッド並列の実行効率に比べて、高い
  - 上位のループをOpenMP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
```

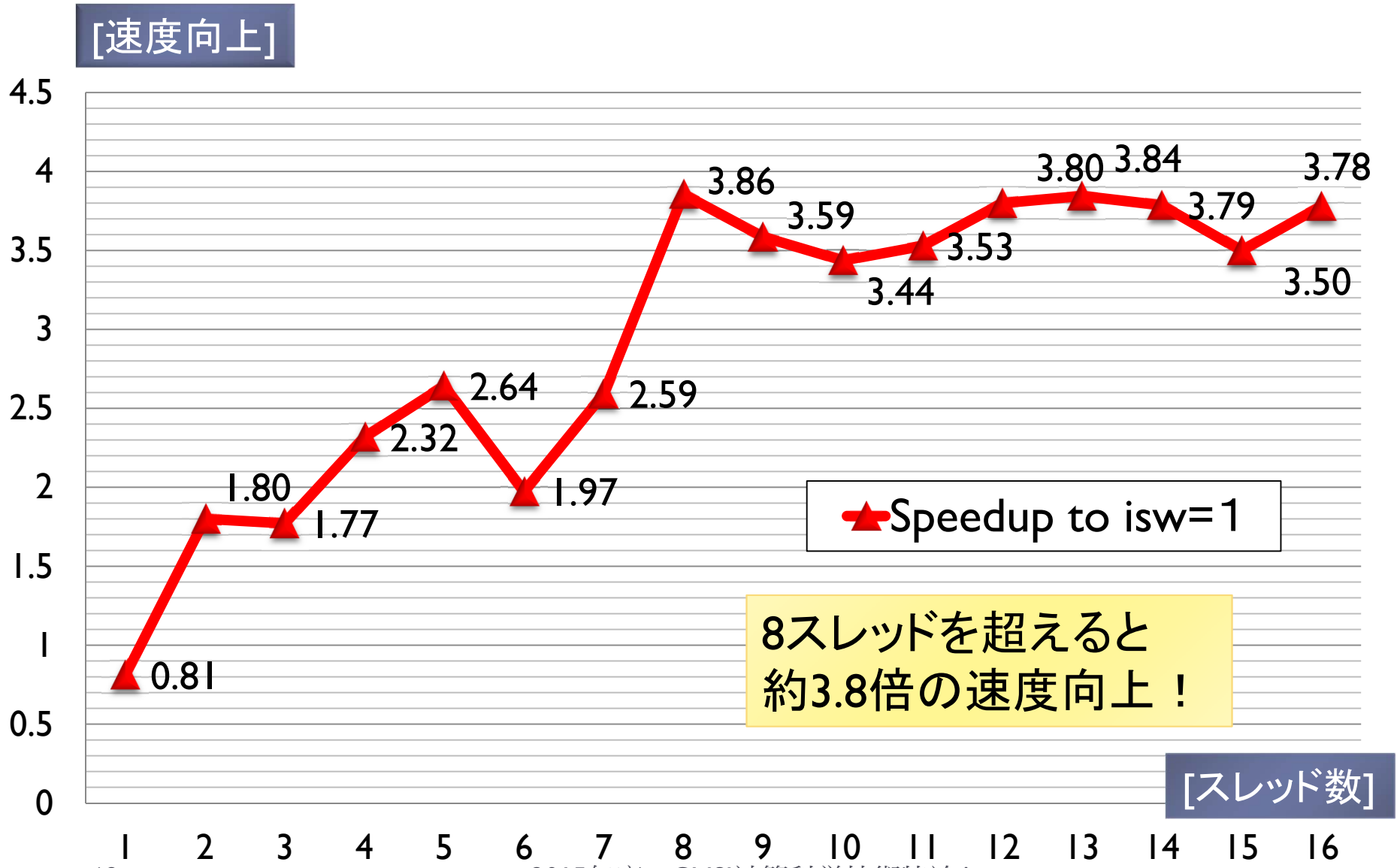
- 上位のループでOpenMP並列化したBLASの呼び出し

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

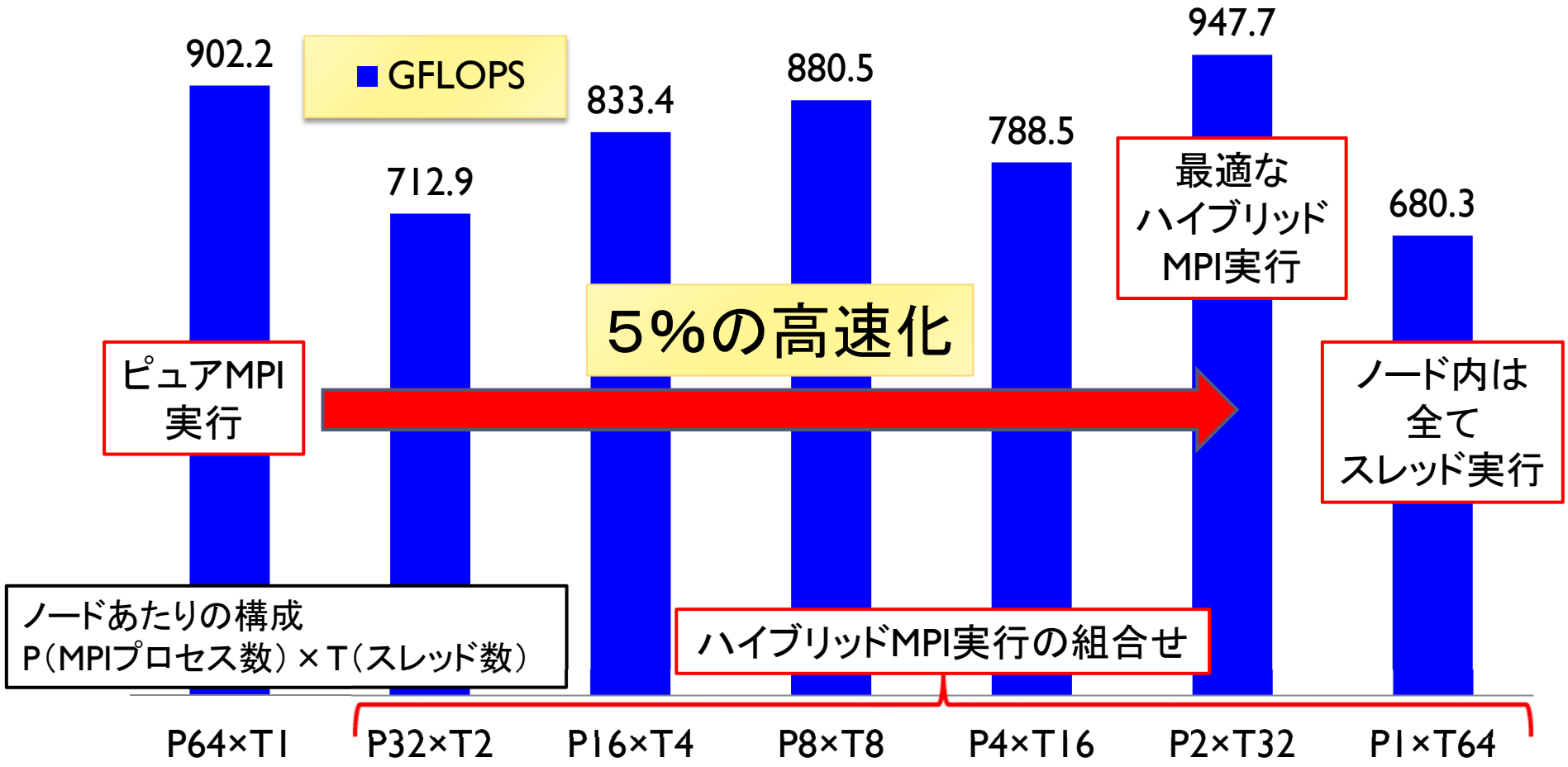


# ScaLAPACKにおける ハイブリッドMPI実行の効果の例

- 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。