

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

---

- ▶ **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)

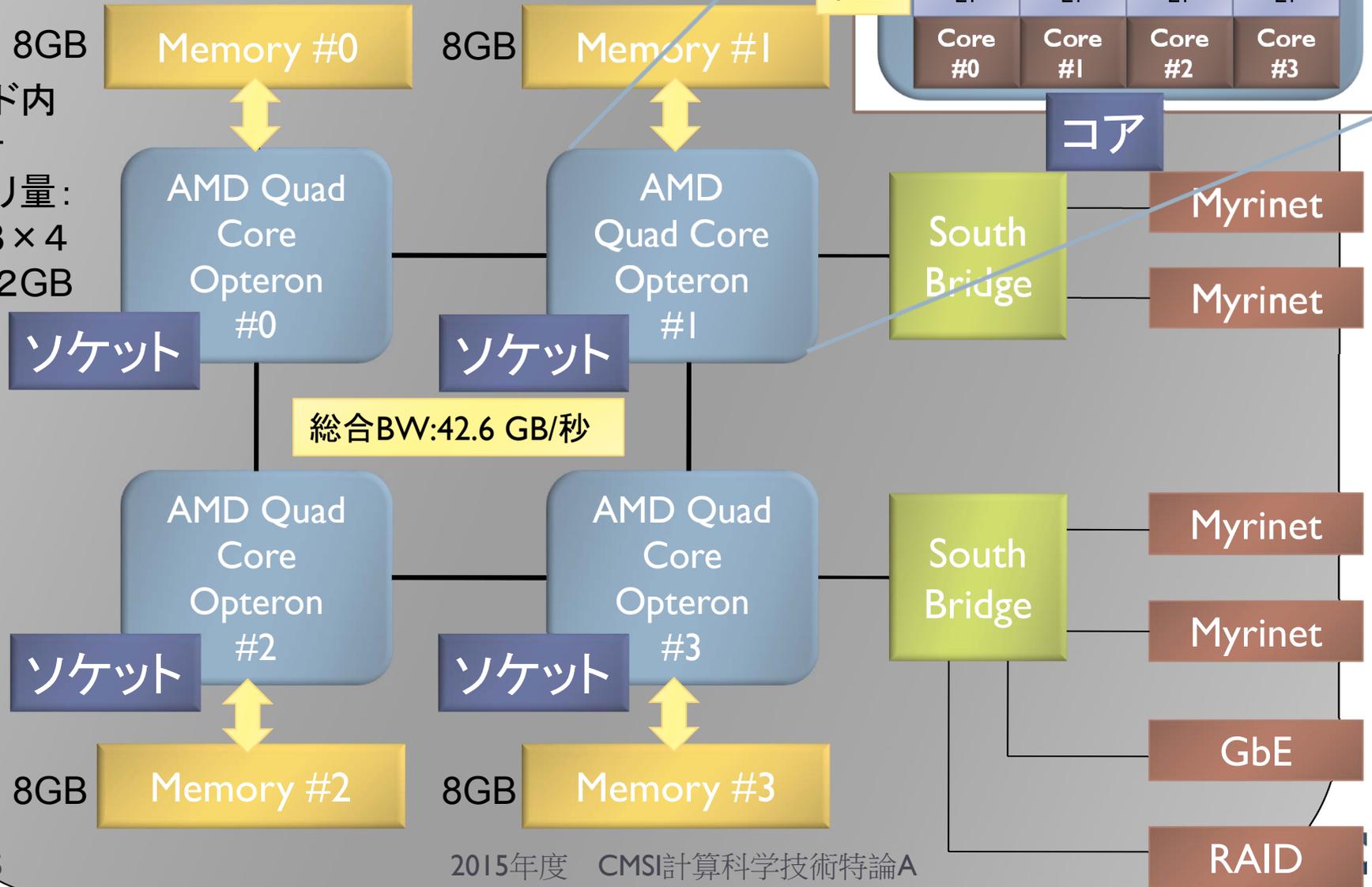
Total Peak performance	: 140 TFLOPS
Total number of nodes	: 952
Total memory	: 32000 GB
Peak performance per node	: 147.2 GFLOPS
Main memory per node	: 32 GB, 128 GB
Disk capacity	: 1 PB
<b>AMD Quad Core Opteron (2.3GHz)</b>	

製品名 : HITACHI HA8000-tc/RS425

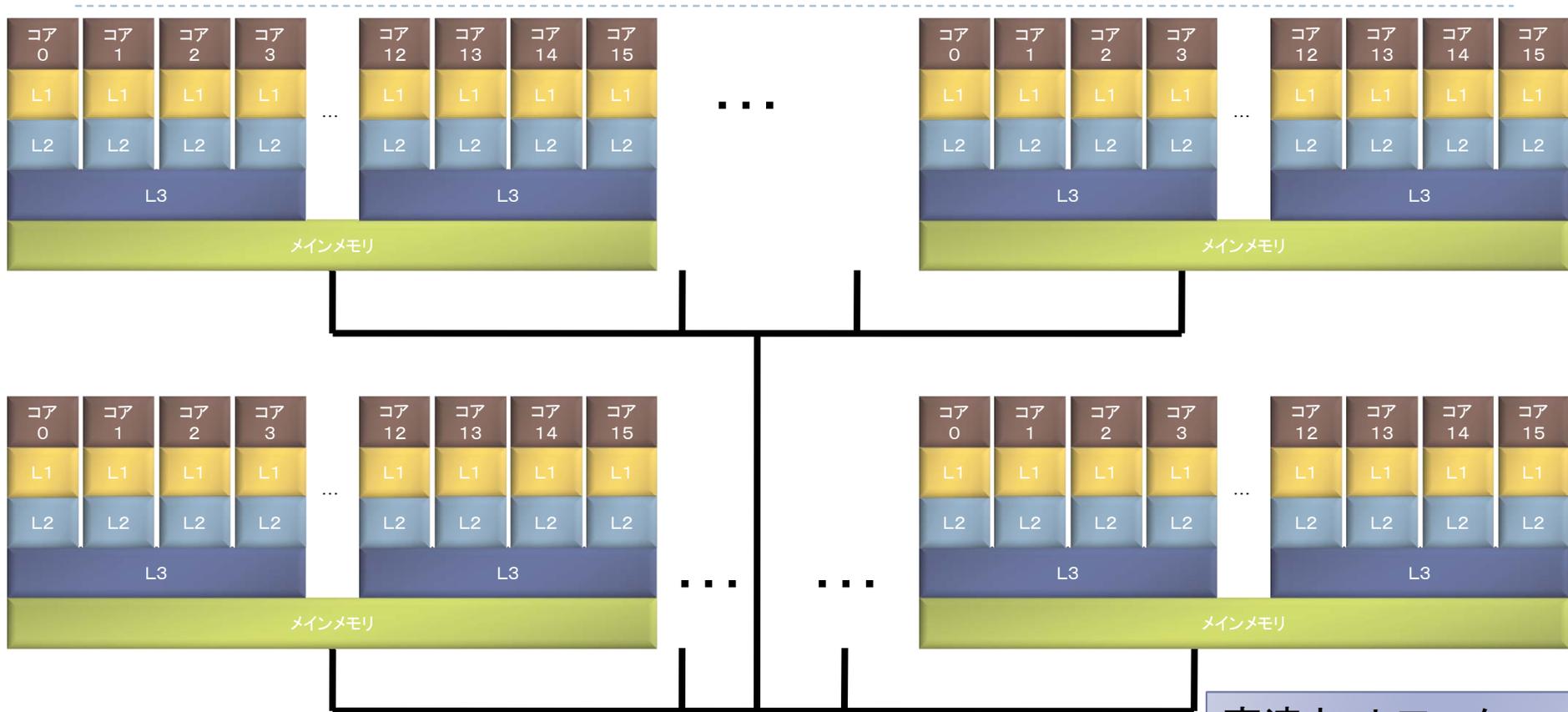
# T2K東大 ノード構成(タイプA群)

## ソケット、ノードとは

ノード内  
合計  
メモリ量:  
8GB × 4  
= 32GB



# T2K（東大）での全体メモリ構成図

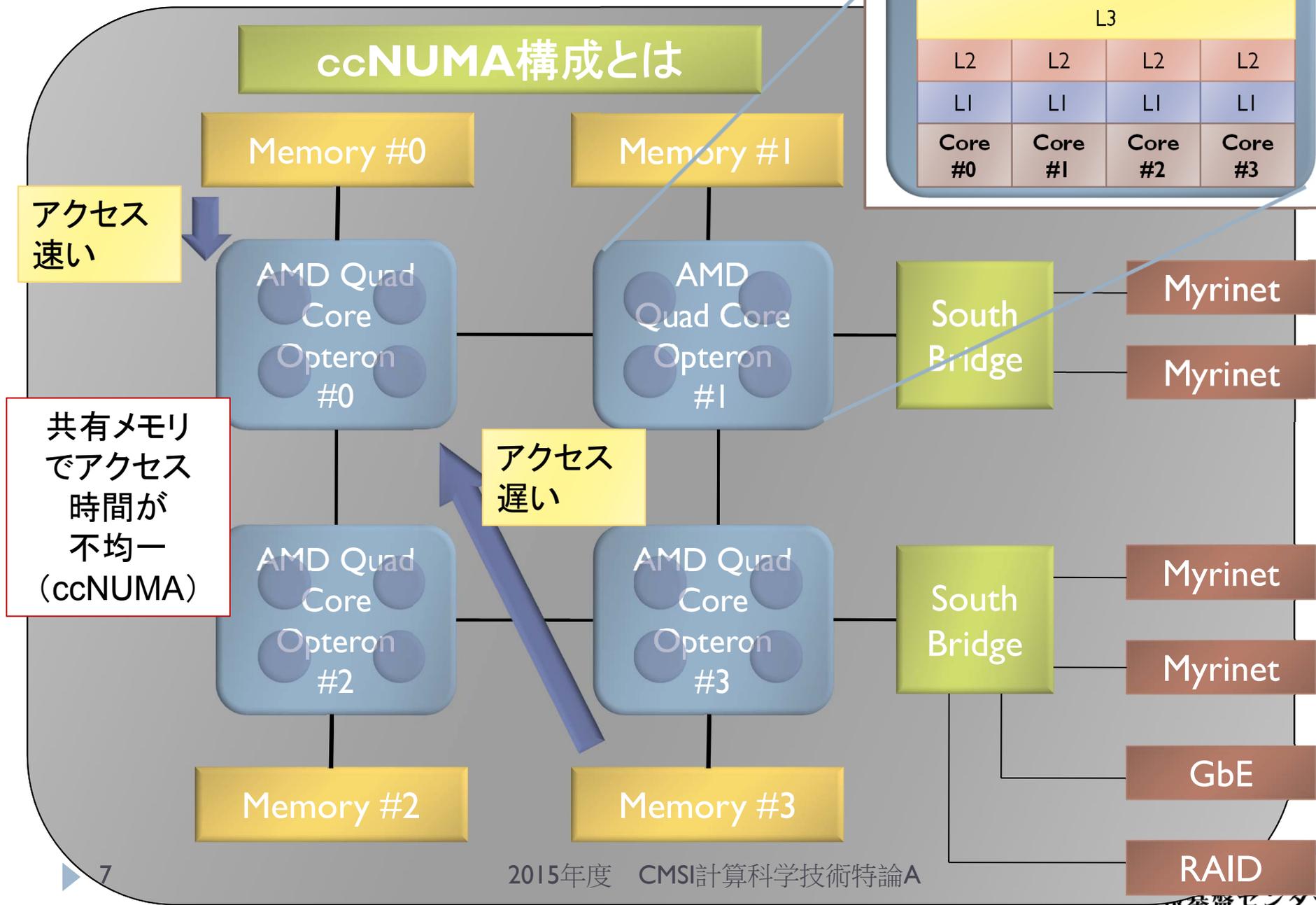


メモリが多段に階層化  
(L1、L2、L3、分散メモリ)

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

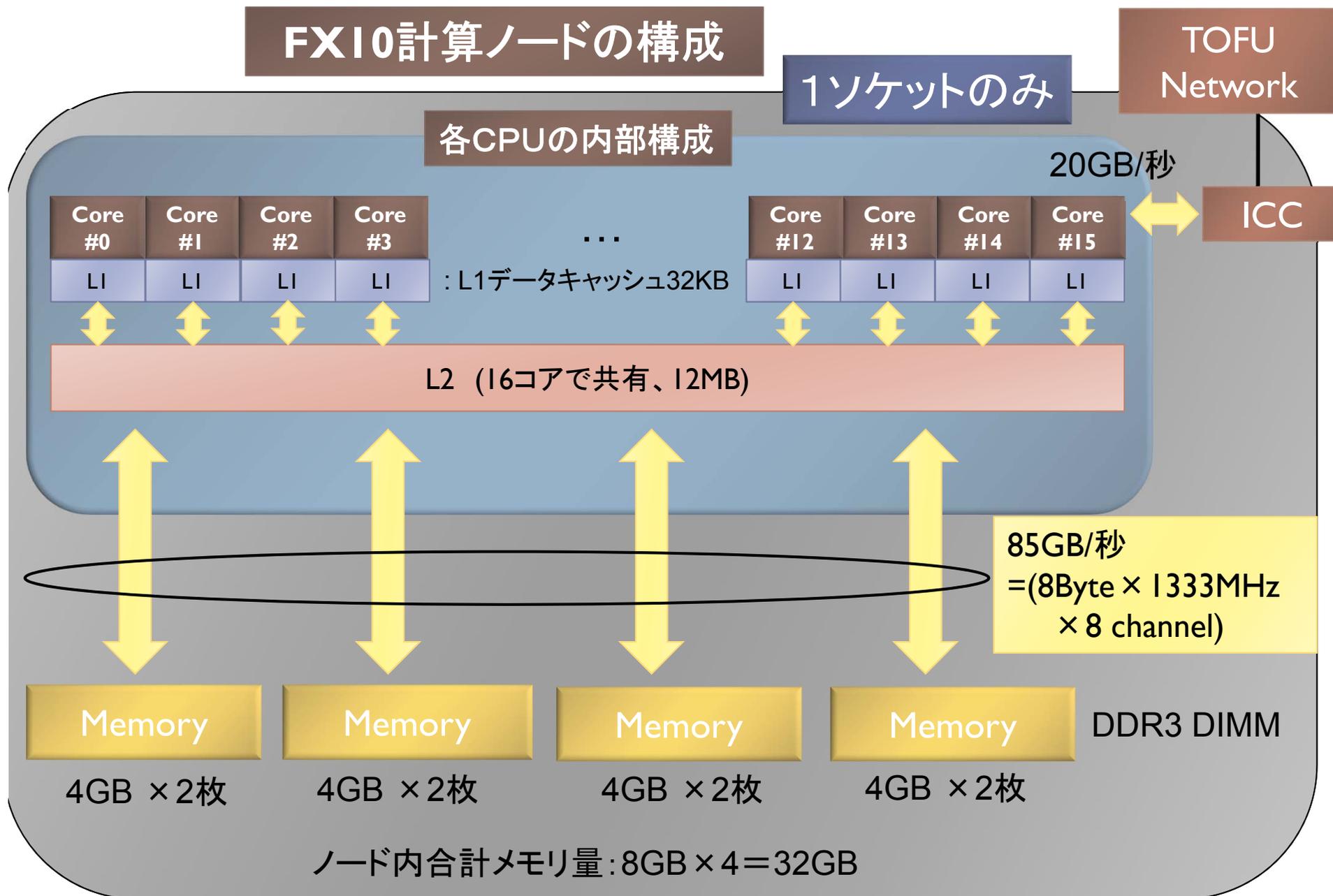
# 東京大学情報基盤センタースパコン FX10スーパーコンピュータシステム

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
<b>SPARC64 IXfx (1.848GHz)</b>	

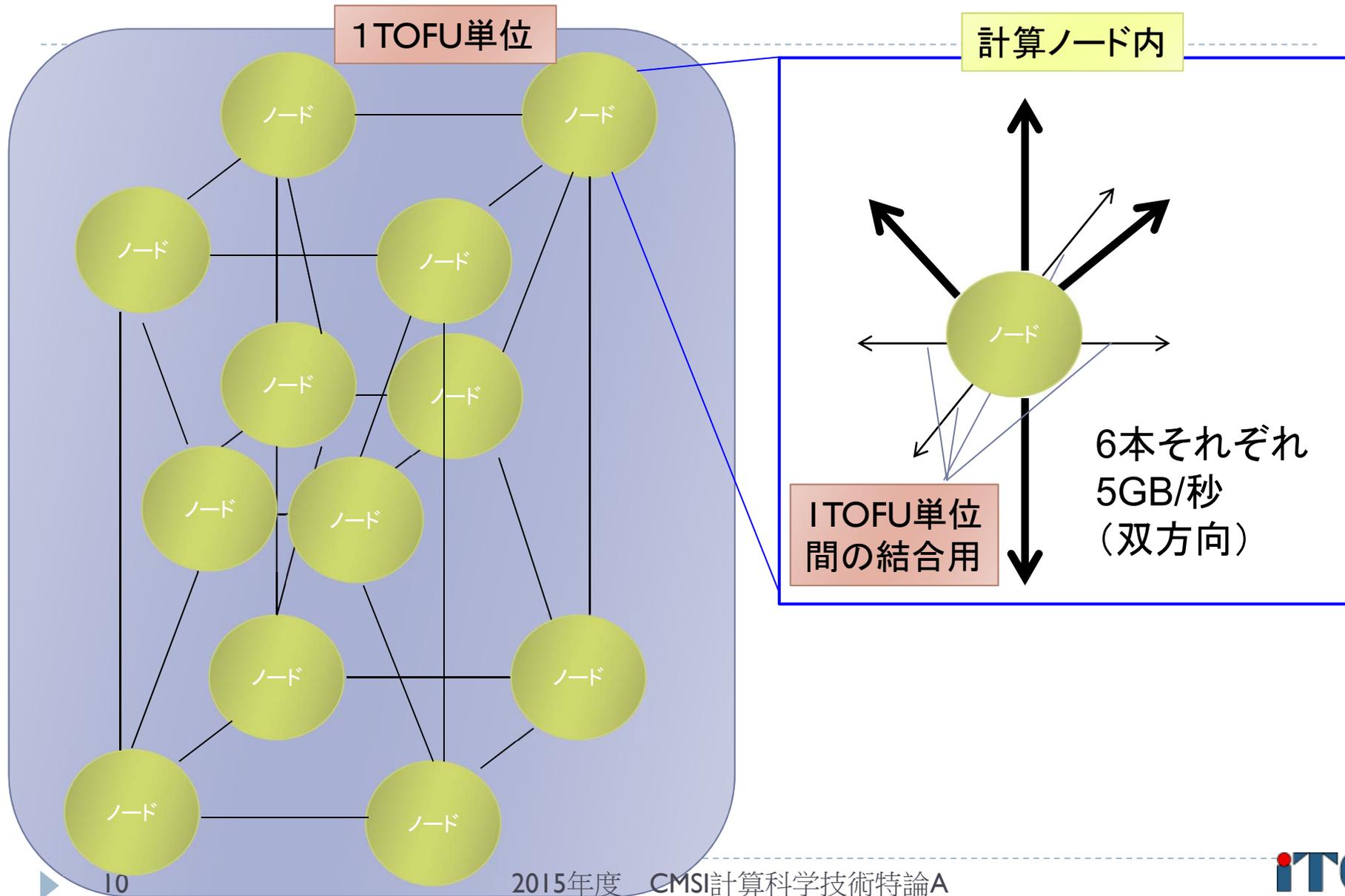
製品名 : Fujitsu PRIMEHPC FX10

2012年4月運用開始

# FX10計算ノードの構成

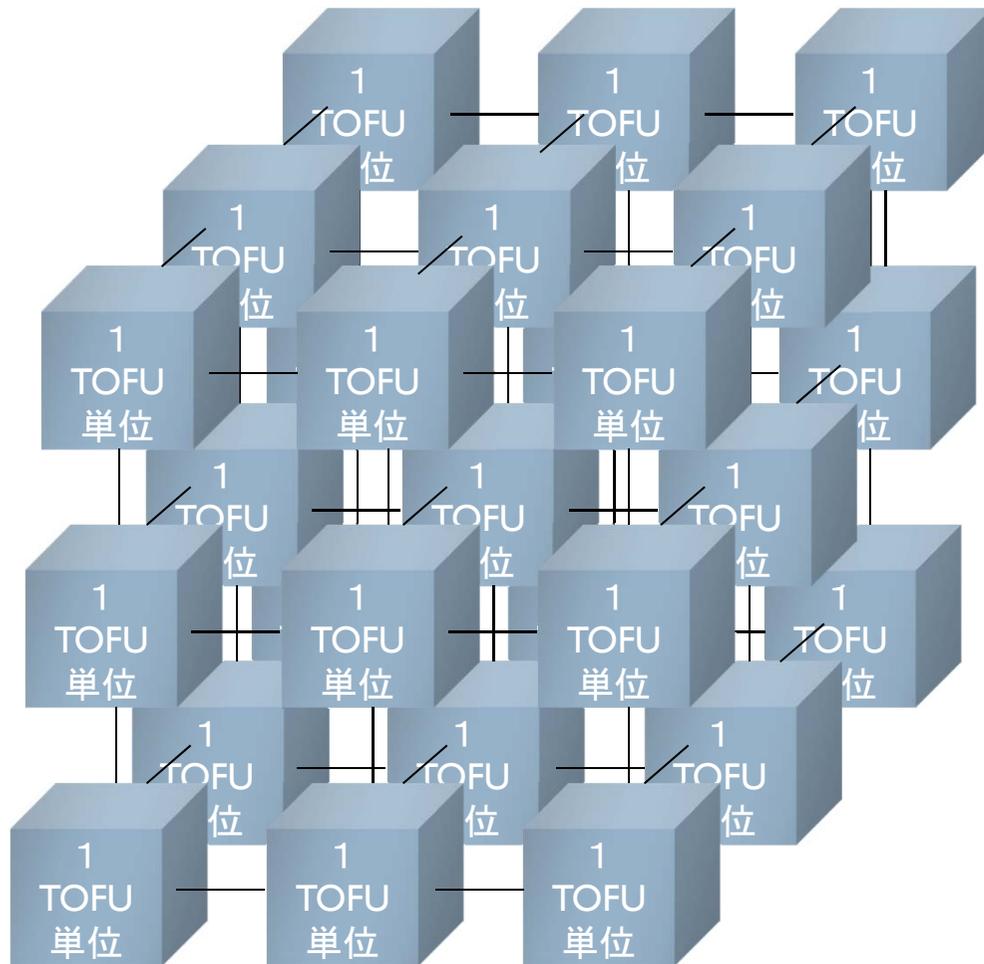


# FX10の通信網（1 TOFU単位）



# 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

---

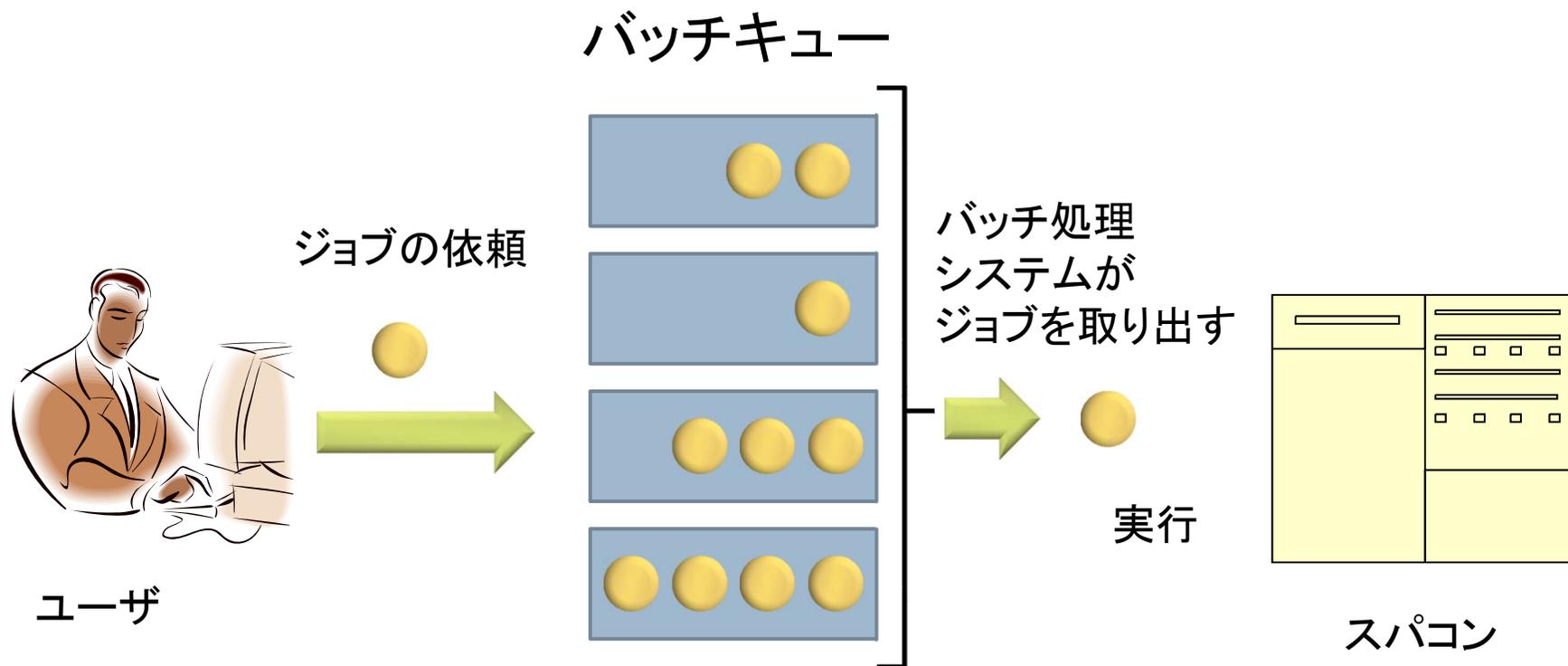
# バッチ処理とMPIジョブの投入

# 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 (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 (富士通社の例)
  - ▶ 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

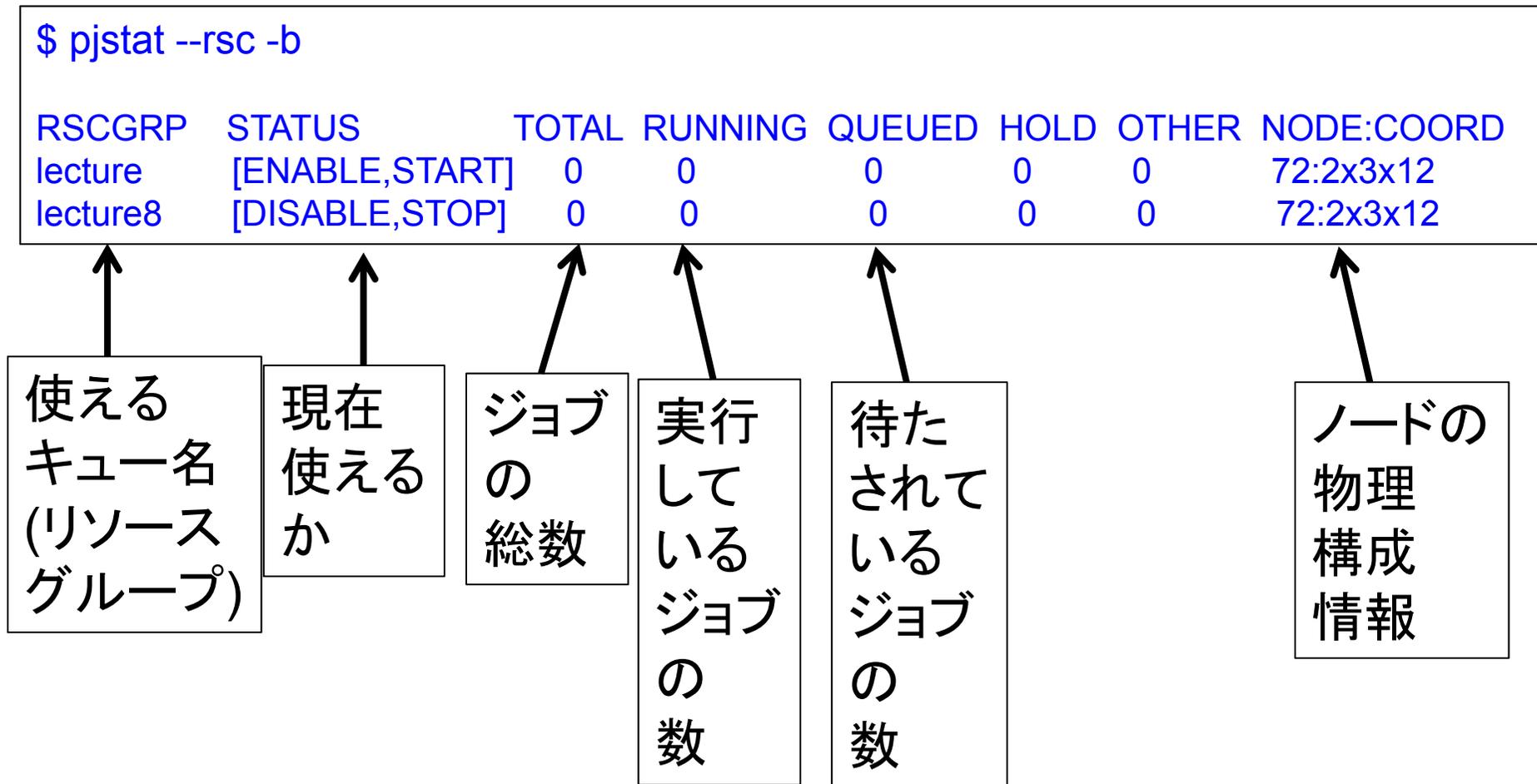
↑  
使える  
キュー名  
(リソース  
グループ)

↑  
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

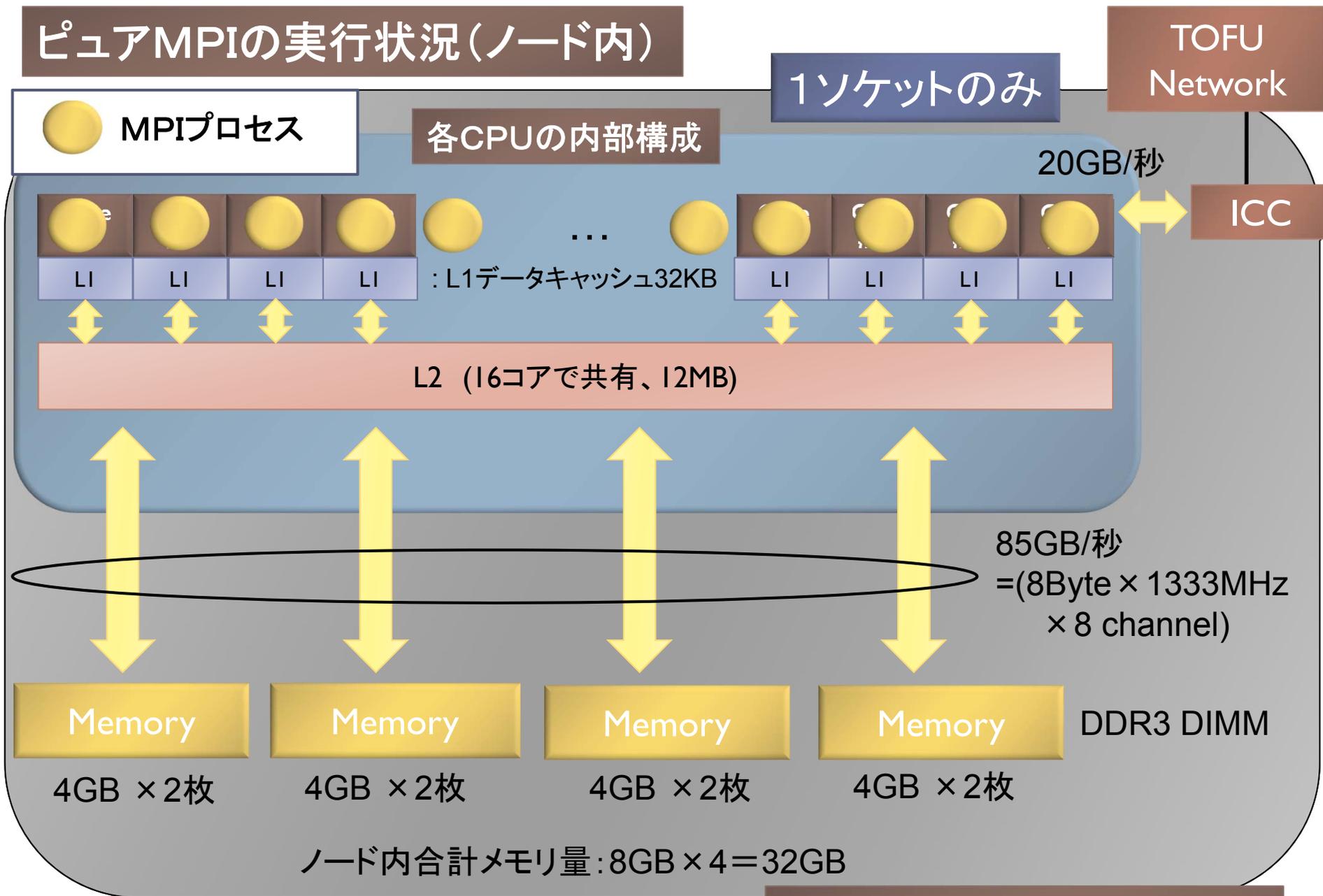
利用ノード数

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.eXXXXXXXX`  
`hello-hy16.bash.oXXXXXXXX` (XXXXXXXX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.oXXXXXXXX`
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

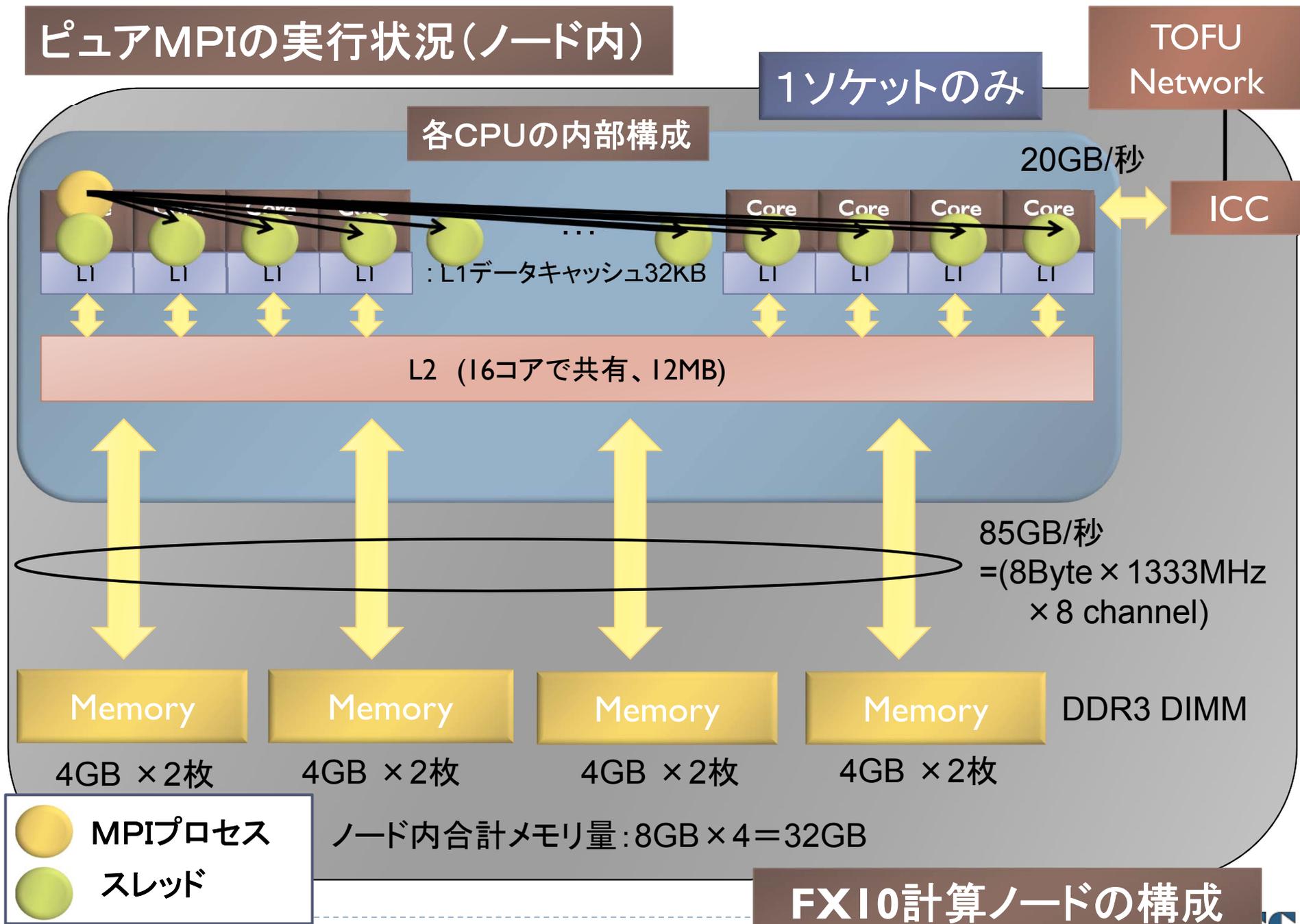
利用コア数  
(MPIプロセス数)

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) × (MPIプロセス当たりの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

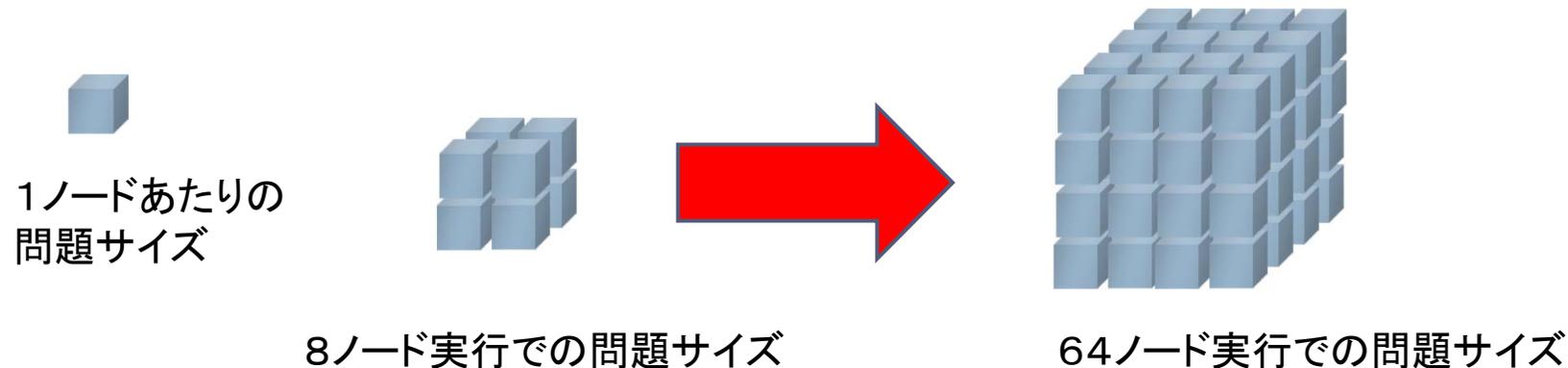
---

- ▶ 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

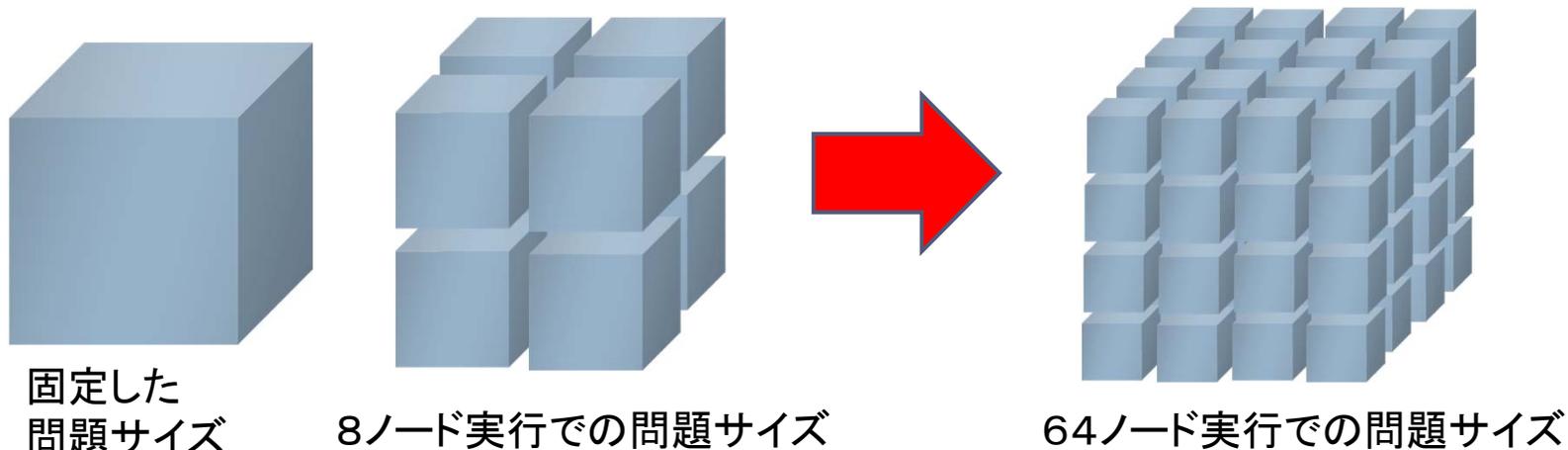
# 弱スケーリング (Weak Scaling)

- ▶ 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(主にシステムの要因により)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ノードあたり的问题サイズが減少し、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  $O(N^3)$



# 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**）

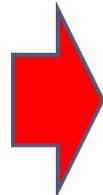
# 並列化の考え方 (C言語)

## ▶ SIMDアルゴリズムの考え方(4プロセスの場合)

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) }
```

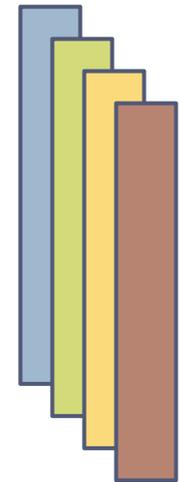
プロセス1

```
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) }
```

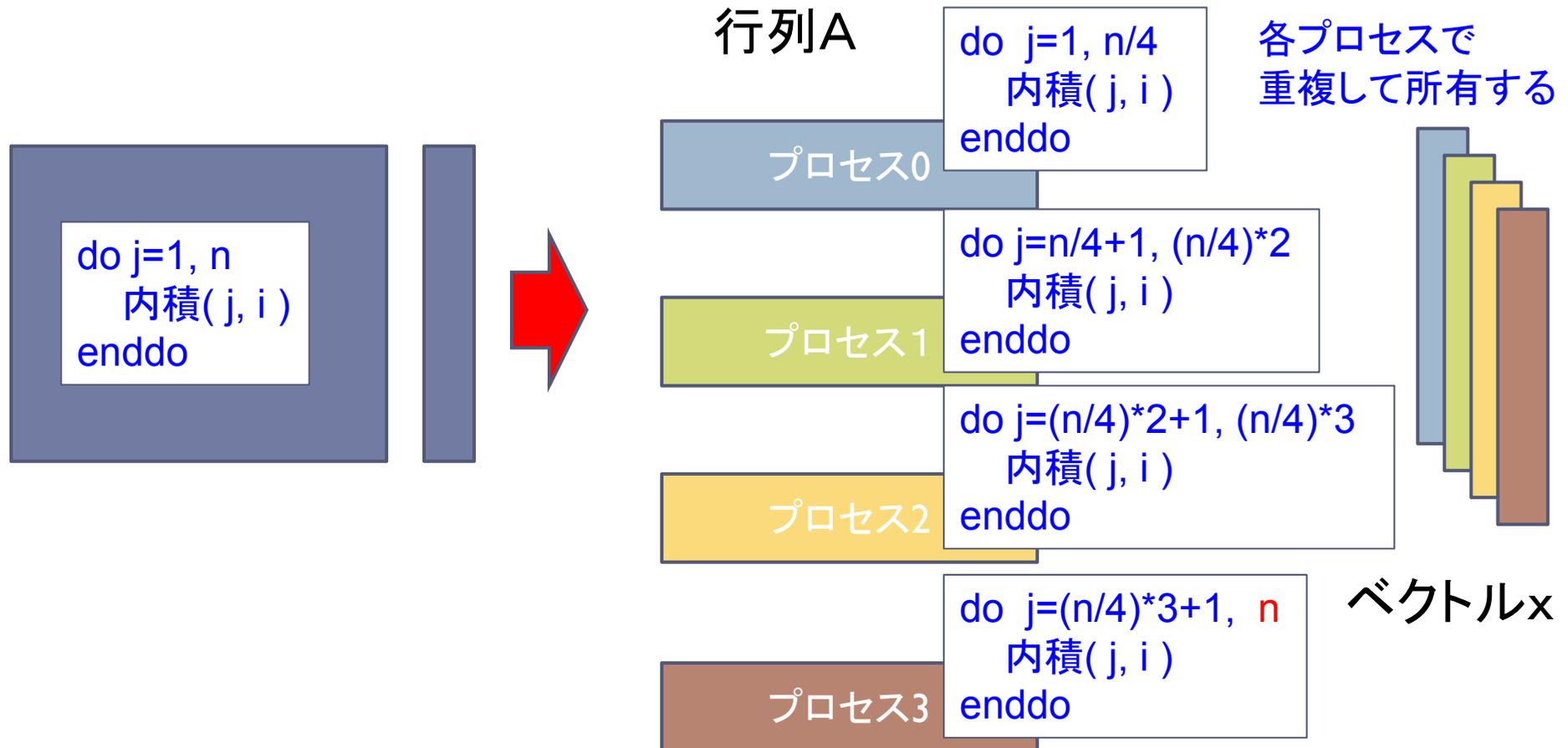
プロセス3



ベクトルx

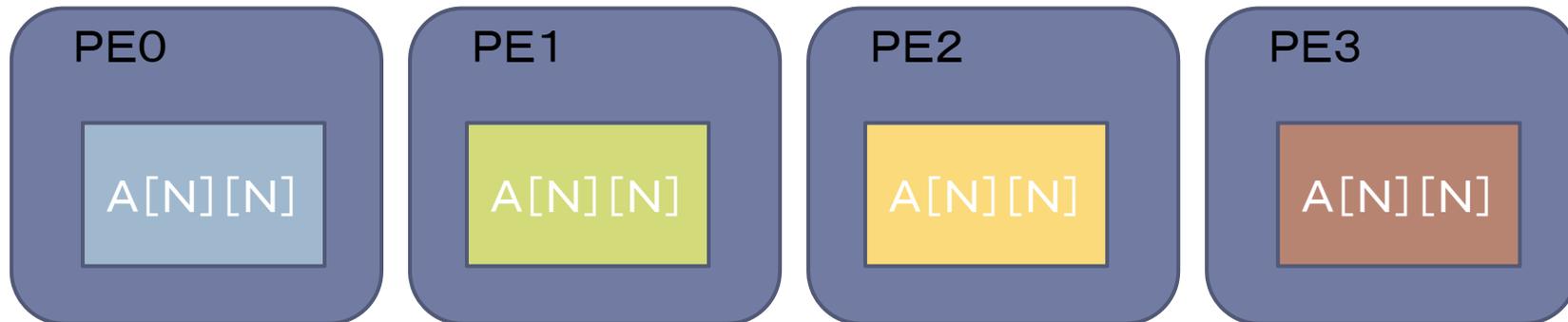
# 並列化の考え方 (Fortran言語)

## ▶ SIMDアルゴリズムの考え方(4プロセスの場合)

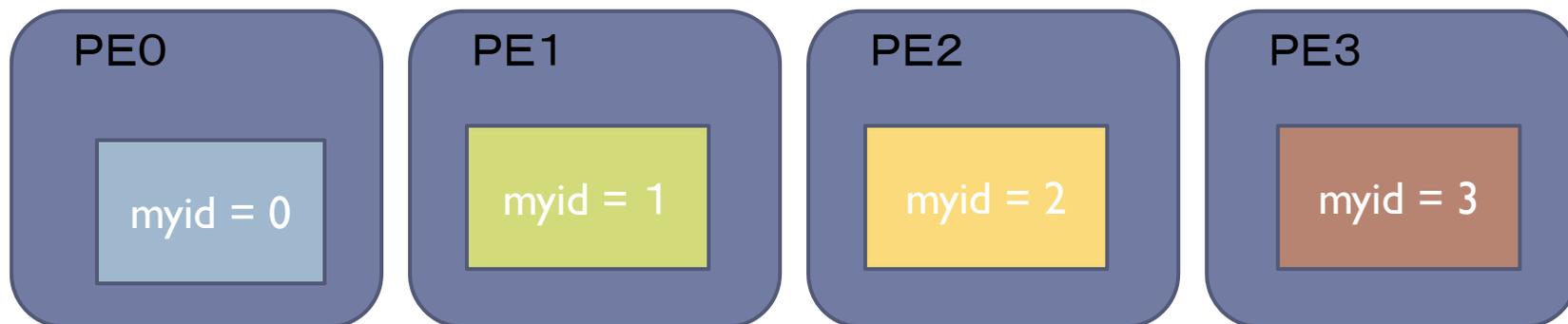


## 初心者が注意すること

- ▶ 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

## (行列-ベクトル積、 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  $\text{numprocs}$  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

## (行列-ベクトル積、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  $\text{numprocs}$  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。

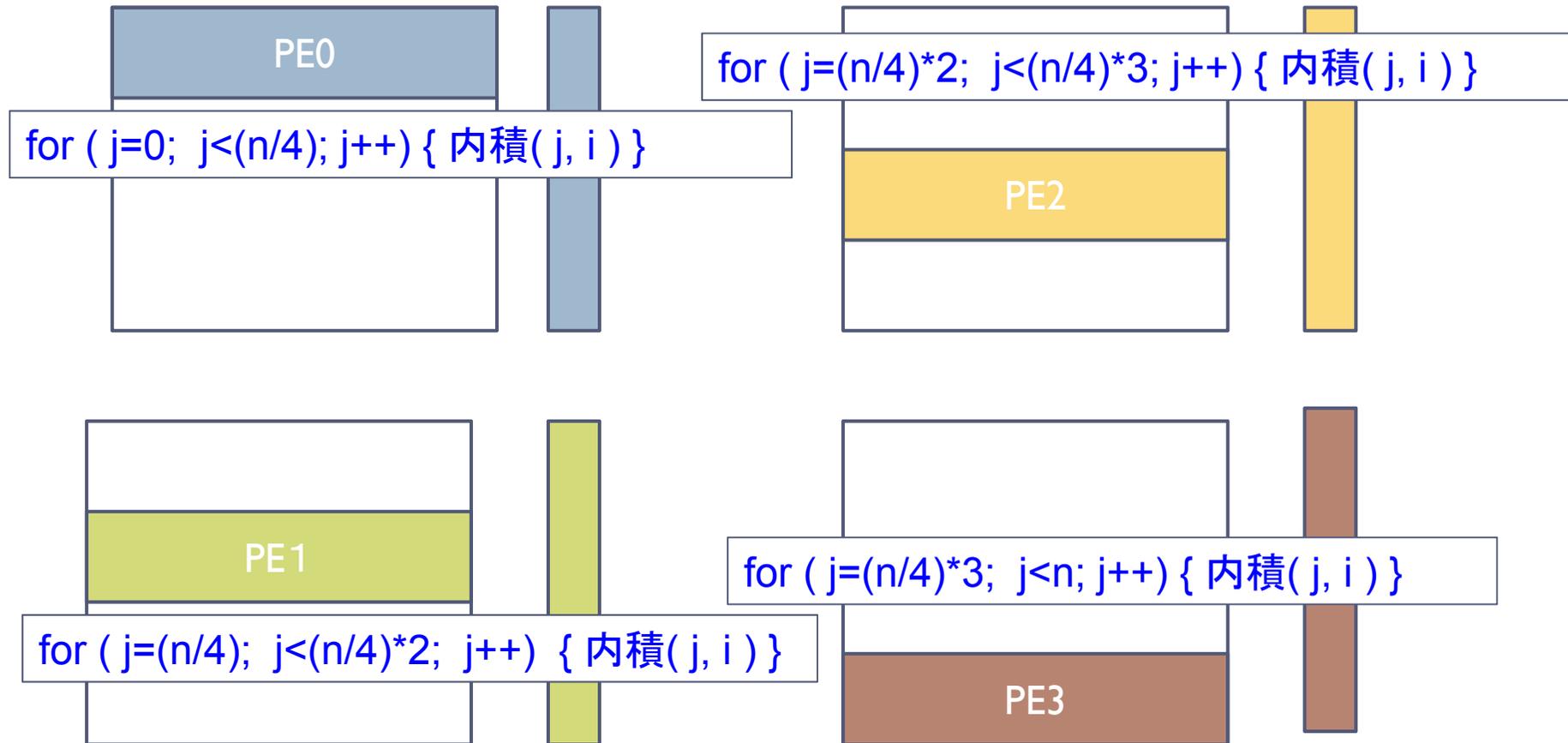
```
do j=1, ib ... enddo
```

# 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)

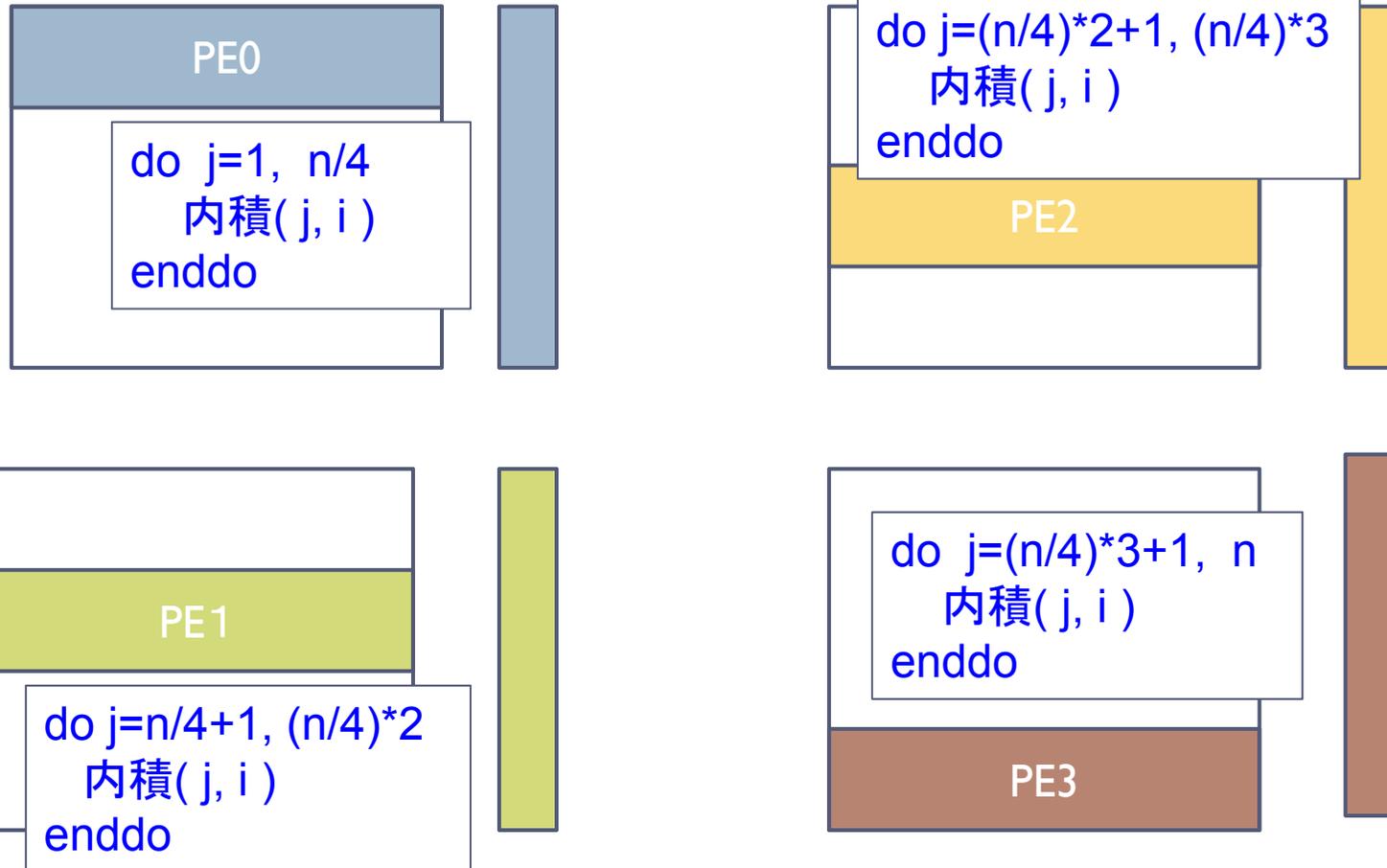
## ▶ 全PEで $N \times N$ 行列を持つ場合



※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）

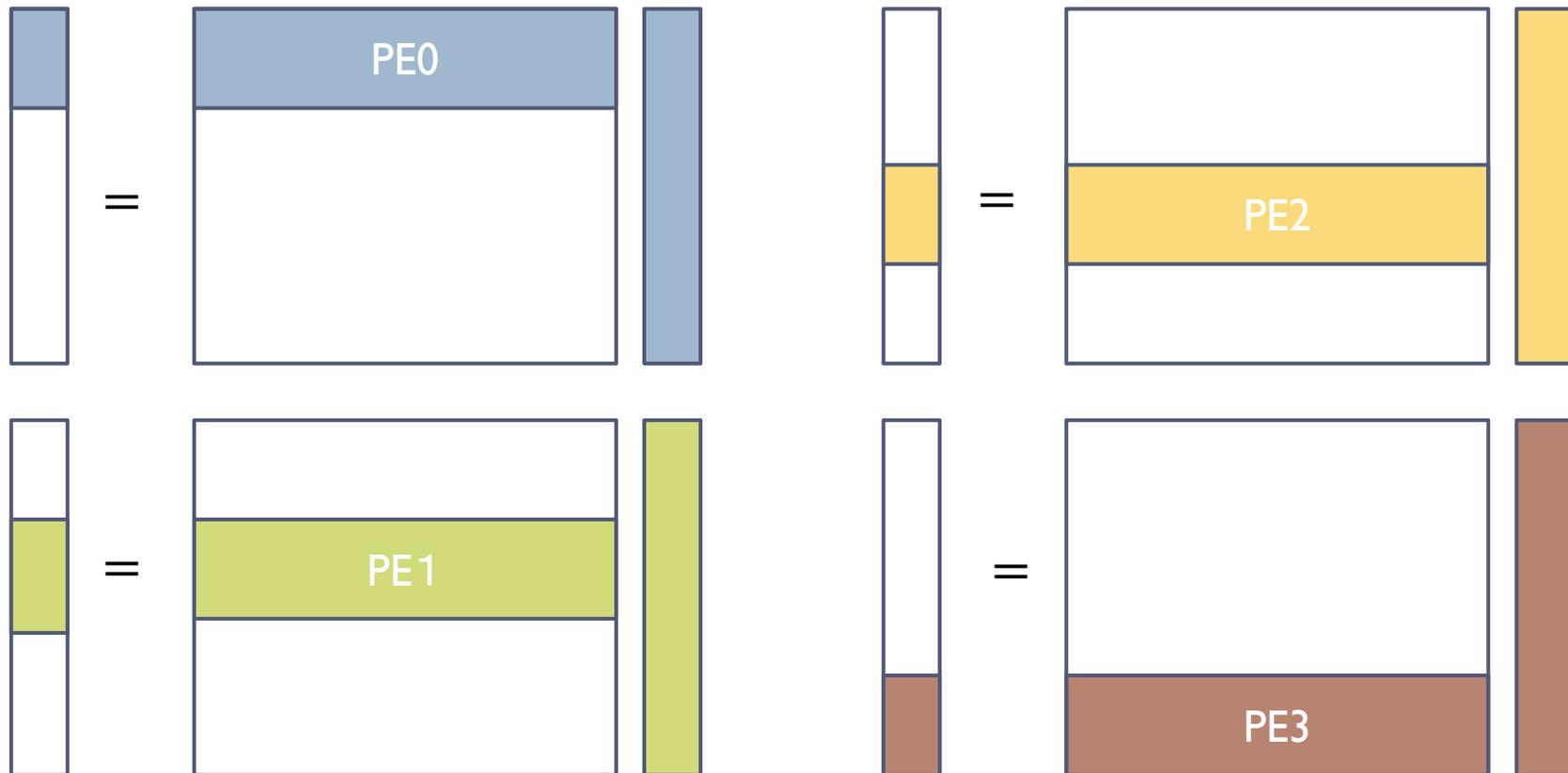
## ▶ 全PEでN×N行列を持つ場合



※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4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4)の際、ステップ2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、個別に並列化ができる(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
```

ブロック分散を仮定した  
担当ループ範囲の定義

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

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、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!

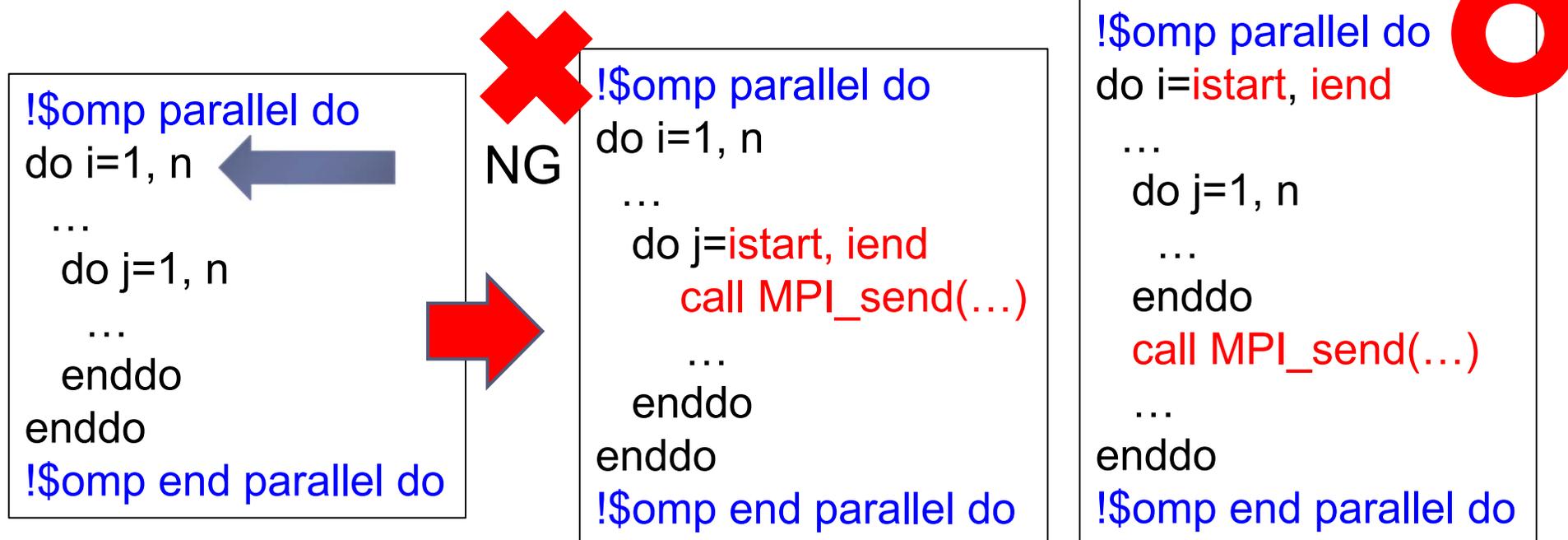
# ハイブリッドMPI/OpenMP並列プログラム 開発の指針

---

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
```

ブロック分散を仮定した  
担当ループ範囲の定義

```
!$omp parallel do private(i)
```

この文を追加するだけ！

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

MPIプロセスの担当ごとに  
縮小したループの構成

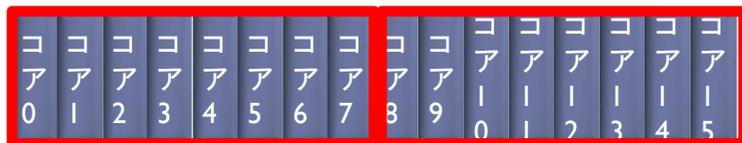
```
!$omp end parallel do
```

# ハイブリッドMPI/OpenMP実行の注意点 (その1)

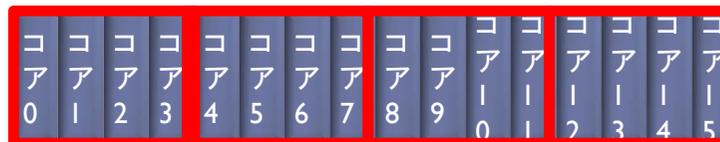
- ▶ ハイブリッドMPI/OpenMP実行では、MPIプロセス数に加えて、スレッド数がチューニングパラメタとなり、複雑化する。

- ▶ 例) 1ノード16コア実行

2MPIプロセス、8スレッド実行



4MPIプロセス、4スレッド実行

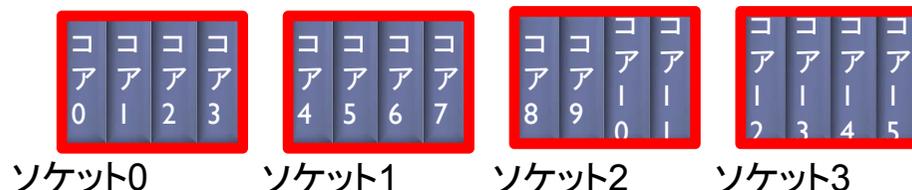


1つのMPI  
プロセス  
の割り当て  
対象

- ▶ 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/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、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)

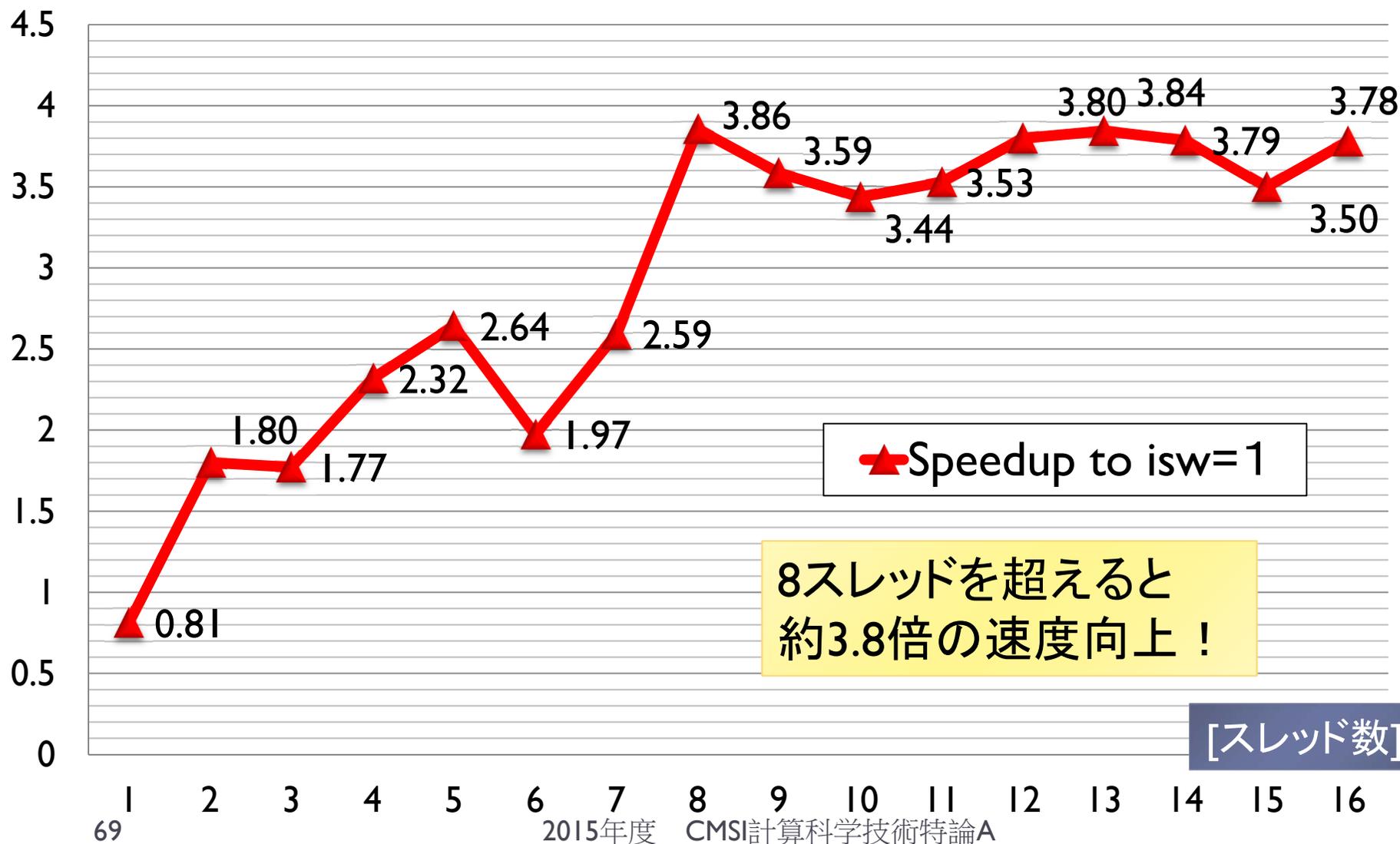
- ▶ AMD Quad Core Opteron
- ▶ 1ノード(16コア)を利用
- ▶ 日立製作所によるCコンパイラ(日立最適化C)
- ▶ OpenMP並列化を行った
  - ▶ 最適化オプション:“-Os -omp”
- ▶ BLAS
  - ▶ GOTO BLAS ver.1.26  
(スレッド並列版, および逐次版の双方)

## ▶ 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

[速度向上]



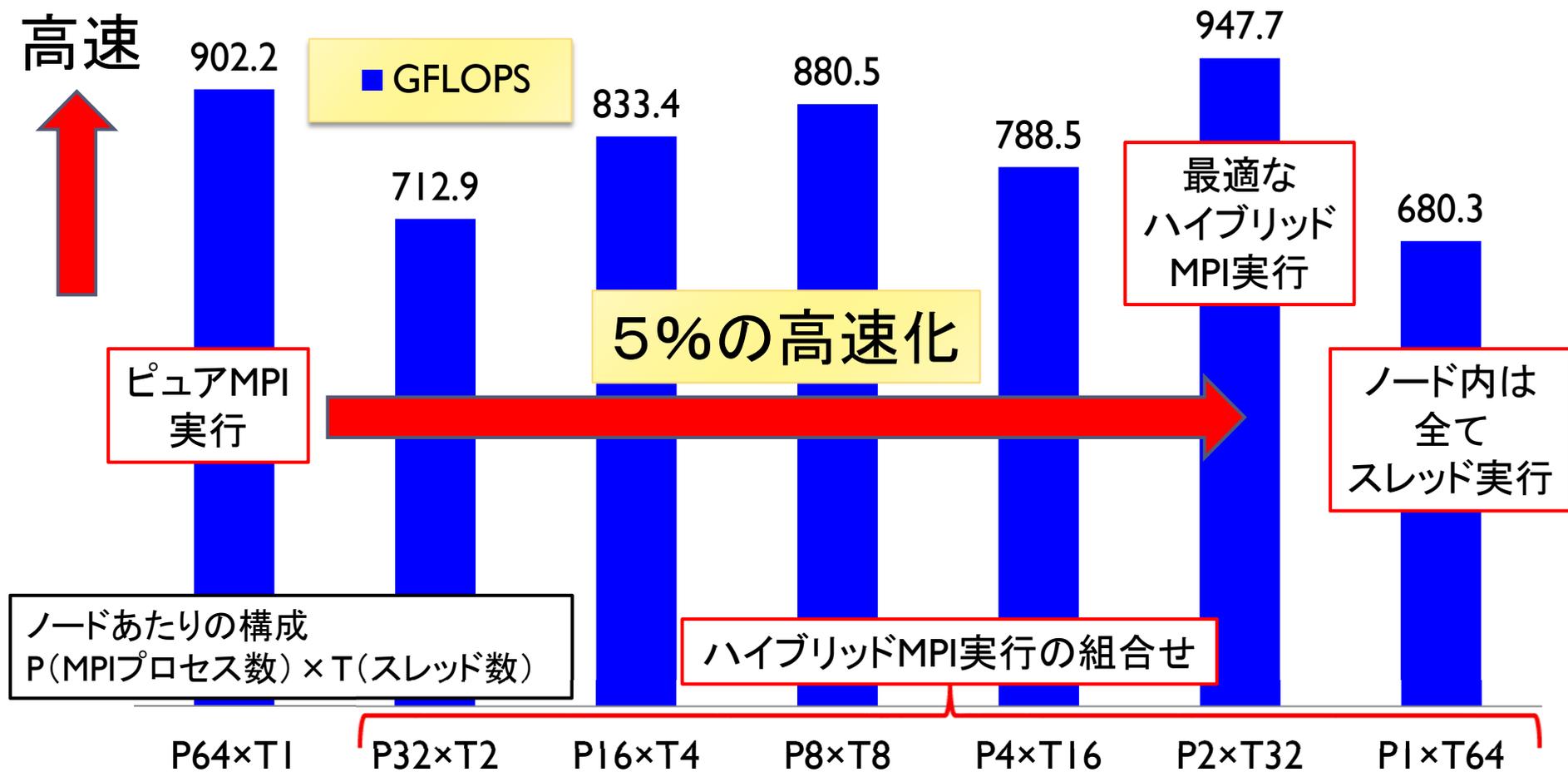
# ScaLAPACKにおける ハイブリッドMPI実行の効果の例

---

- ▶ 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、多くの事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）

---

- I. [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。