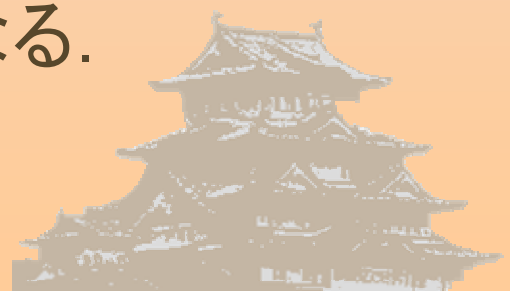
SPEC OMPの HPF化とその性能評価

兵庫県立大　坂上仁志
sakagami@eng.u-hyogo.ac.jp

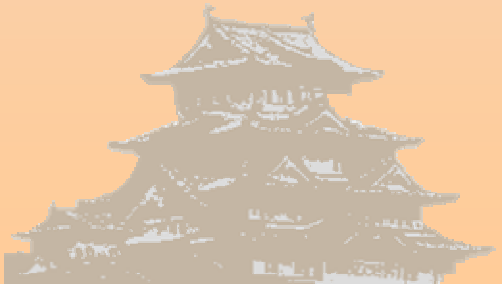
SPEC OMP2001

- SPECによって開発されたOpenMPによる共有メモリ型並列計算機システムの性能評価を行うベンチマークプログラムである.
  - OpenMPは，HPFと同様に指示文ベースであるので，両者のプログラミング適応性や並列性能を比較することは，興味深い.
  - 単なるベンチマークコードではなく，実用的なコードである.
  - FORTRANコード8本とCコード2本からなる.



目的

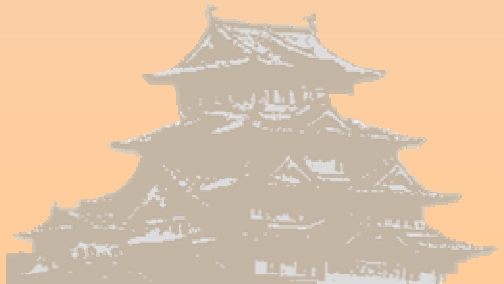
- HPFの可用性と並列性能を検証する.
  - 多くの作業なしにOpenMPプログラムをHPFプログラムに変換できるか？
  - 変換されたHPFプログラムでOpenMPと同様な並列性能が得られるか？
  - HPFプログラムの並列性能が低い場合，簡単な方法でその並列性能を改善できるか？
- HPFプログラム作成のノウハウを蓄積する.
- SPEC HPFの開発を目指す.



OpenMPの並列化

- 基本ルールとしてOpenMPの並列領域をHPFで並列化することとする.
  - PARALLEL,END PARALLEL指示文
  - DO指示文

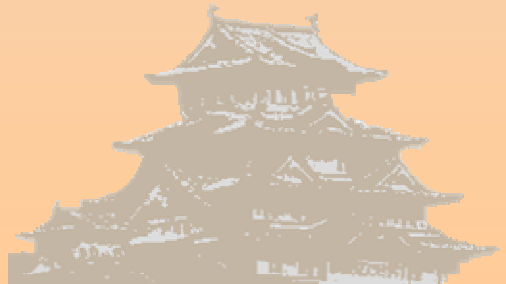
```
    ...
!$OMP PARALLEL
!$OMP DO
    do j = 1, n
     do i = 1, m
      u(i,j) = p(i,j)
      v(i,j) = p(i,j+1)
     end do
    end do
!$OMP END DO
!$OMP END PARALLEL
    ...
```



HPFによる並列化(1)

- データ分散と処理分割
  - PROCESSORS指示文
  - DISTRIBUTE指示文
  - INDEPENDENT指示文

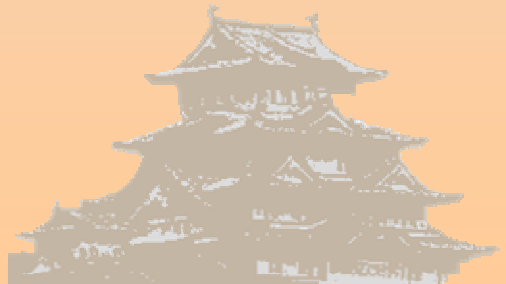
```
    …
!HPF$ PROCESSORS proc(NPROC)
!HPF$ DISTRIBUTE (*,BLOCK) ONTO proc :: u,v,p
    …
!HPF$ INDEPENDENT
    do j = 1, n
      do i = 1, m
        u(i,j) = p(i,j)
        v(i,j) = p(i,j+1)
      end do
    end do
    …
```



HPFによる並列化(2)

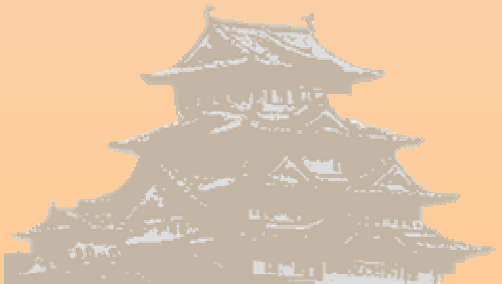
- 明示的な指示による通信効率の向上
  - SHADOW，REFLECT指示文
  - ON-HOME-LOCAL指示文

```
    …
!HPF$ SHADOW (0,0:1) ::p
    …
!HPF$ REFLECT p
!HPF$ INDEPENDENT
    do j = 1, n
!HPF$ ON HOME(u(i,j)), LOCAL BEGIN
      do i = 1, m
       u(i,j) = p(i,j)
       v(i,j) = p(i,j+1)
      end do
!HPF$ END ON
    end do
    …
```



HPF/OpenMPの実行環境

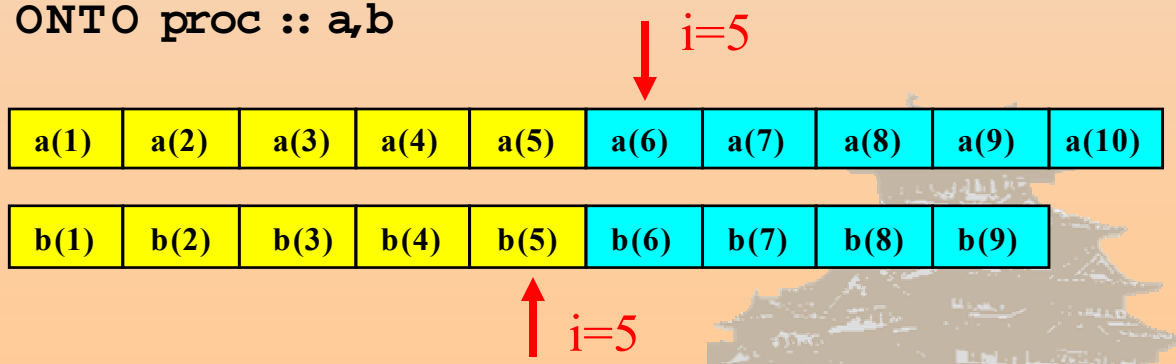
- NEC SX-5/128M8
  - 大阪大学サイバーメディアセンター
  - ノード当り16プロセッサ
  - ノード当り160GFLOPS, 128GB
- OpenMP
  - FORTRAN90/SX Version 2.0 for SX-5 Rev.280
- HPF
  - HPF/SX V2 Rev.1.9.2
  - -Mnoentry
    - エラー処理コードの生成を抑制する.



SWIMの並列化

- 浅水方程式による海水のシミュレーションプログラムである.
- 同一のDOループ内で結果を格納する配列の添字が異なる場合に並列性能が悪い.
  - Owner Computes Ruleとの矛盾

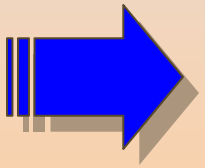
```
      dimension a(10),b(9)
!HPF$ PROCESSORS proc(2)
!HPF$ DISTRIBUTE (BLOCK) ONTO proc :: a,b
      do i = 1, 9
        a(i+1) = ...
        b(i)   = ...
      end do
```



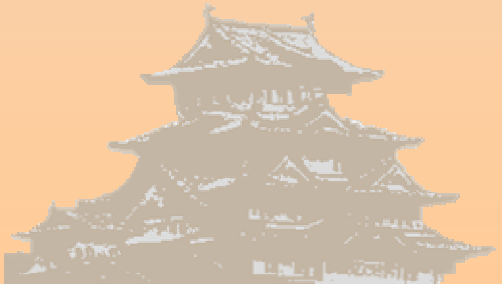
並列性能低下の原因

- OCRと矛盾する場合は，一時変数を動的に確保して計算後，本来の変数にコピーする．
  - 並列化はできるが，大きなオーバーヘッド

```
do i = 1, 9
 a(i+1) = ...
 b(i)   = ...
end do
```



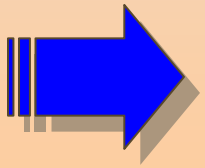
```
allocate(atemp)
do i = 1, 9
 atemp(i) = ...
 b(i)     = ...
end do
do i = 1, 9
 a(i+1) = atemp(i)
end do
deallocate(atemp)
```



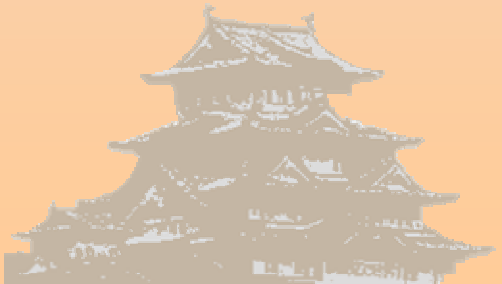
問題の解決方法(1)

- 添字が異なる配列の処理を別々のDOループに分ける.
  - ソースを修正する必要があるが，容易に並列性能を改善できる.
  - ベクトル処理の効率が低下する場合がある.

```
do i = 1, 9
 a(i+1) = ...
 b(i)   = ...
end do
```



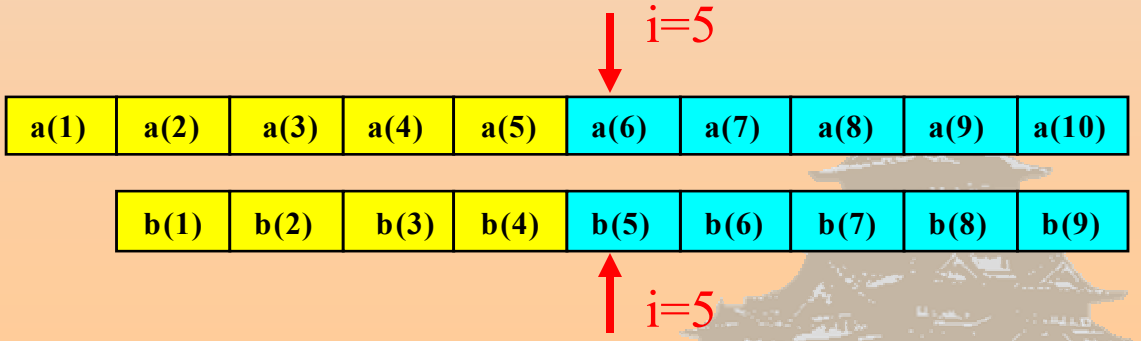
```
do i = 1, 9
 a(i+1) = ...
 end do
 do i = 1, 9
 b(i)   = ...
end do
```



問題の解決方法(2)

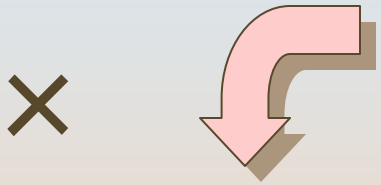
- OCRとDOループ処理が矛盾しないよう配列の分散をALIGN指示文で調整する.
  - 指示文のみで並列性能を改善できる.
  - ただし，異なるDOループで最適なALIGNが異なる場合は，対応できない.

```
!HPF$ ALIGN b(i) WITH a(i+1)
    ...
    do i = 1, 9
     a(i+1) = ...
     b(i)   = ...
    end do
```



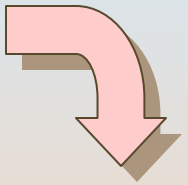
両方の方法の併用

- ベクトル処理の効率を考慮する.



```
do i = 1, 9
 a(i+1) = p(i)*2
 b(i)   = -p(i)/2
end do
...
do i = 1, 9
 a(i) = 0
 b(i) = 1
end do
```

```
   ...
!HPF$ INDEPENDENT
   do i = 1, 9
    a(i+1) = p(i)*2
   end do
!HPF$ INDEPENDENT
   do i = 1, 9
    b(i)   = -p(i)/2
   end do
   ...
!HPF$ INDEPENDENT
   do i = 1, 9
    a(i) = 0
    b(i) = 1
   end do
```



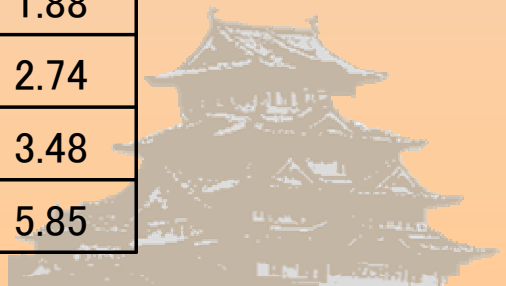
○

```
!HPF$ ALIGN b(i) WITH a(i+1)
   ...
!HPF$ INDEPENDENT
   do i = 1, 9
    a(i+1) = p(i)*2
    b(i)   = -p(i)/2
   end do
   ...
!HPF$ INDEPENDENT
   do i = 1, 9
    a(i) = 0
   end do
!HPF$ INDEPENDENT
   do i = 1, 9
    b(i) = 1
   end do
```

SWIMの性能評価

- OpenMPと同程度の並列性能を得ることができた.
- ただし，OpenMPプログラムはNEC SX-5の1ノード内でしか実行できないが，HPFは複数ノードでも実行できる！

SWIM	Execution Time [s]			Speedup Ratio		
#proc	before	after	OpenMP	before	after	OpenMP
1	505.3	294.7	283.2	1.00	1.00	1.00
2	265.9	153.3	150.4	1.90	1.92	1.88
3	183.7	109.2	103.2	2.75	2.70	2.74
4	144.4	82.3	81.4	3.50	3.58	3.48
8	81.8	51.3	48.4	6.18	5.74	5.85



MGRIDの並列化

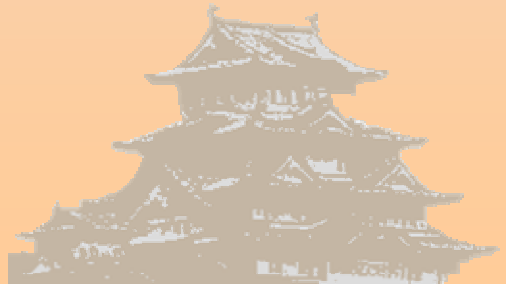
- マルチグリッドにより3次元のポテンシャル場を計算をするプログラムである.
- 主プログラムと副プログラムで引数の次元数が異なるため，そのままでは並列化することができない.

主プログラム

```
dimension big(NALL),is(k),il(k)
●●●
do i = 1, k
  call sub( big(is(i)), il(i) )
end do
●●●
stop
end
```

副プログラム

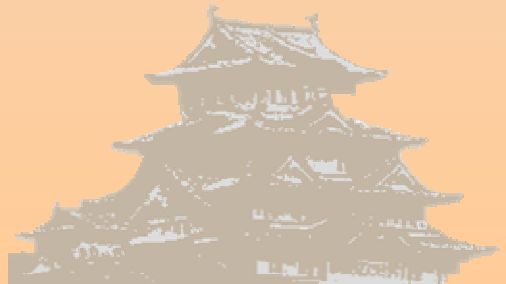
```
subroutine sub( a, m )
dimension a(m, m, m)
●●●
return
end
```



一時配列を用いた問題解決

- 動的に配列を確保／分散し，非分散の仮引数から値を複写して，並列化する．

```
      subroutine sub( aa, m )
      dimension aa(m*m*m)
!HPF$ PROCESSORS proc(NPROC)
!HPF$ DISTRIBUTE (*,*,BLOCK) ONTO proc :: a
      allocatable a(:,:,:)
      allocate(a(m, m, m))
      (copying a  ← aa)
      ...
      ...
      (copying aa ← a)
      deallocate(a)
      return
      end
```



MGRIDの性能評価(1)

- サブルーチンが呼出される度に動的な配列の確保／解放およびデータ複写のオーバーヘッドのため，OpenMP程の並列性能が得られなかった．
  - そのオーバーヘッドを測定すると約80秒

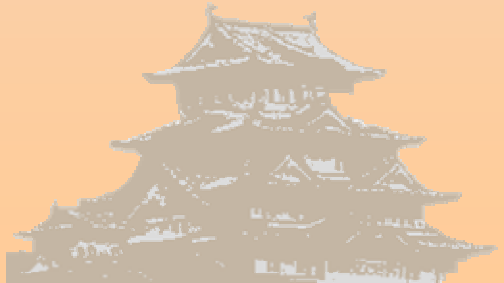
MGRID	Exec. Time [s]		Speedup Ratio	
#proc	HPF	OpenMP	HPF	OpenMP
1	326.0	230.2	1.00	1.00
2	191.4	118.6	1.70	1.94
3	141.3	81.1	2.31	2.84
4	117.2	63.1	2.78	3.65
8	78.4	36.0	4.16	6.39

MGRIDにおける性能改善

- 大きさごとに別々の分散配列を用意して，呼び出し時に振り分ける.
  - 動的な配列の確保／解放およびデータ複写は必要ない.
  - 大幅なソース修正が必要である.

```
allocate(a1(il(1),il(1),il(1))
allocate(a2(il(2),il(2),il(2))
...
allocate(ak(il(k),il(k),il(k))
```

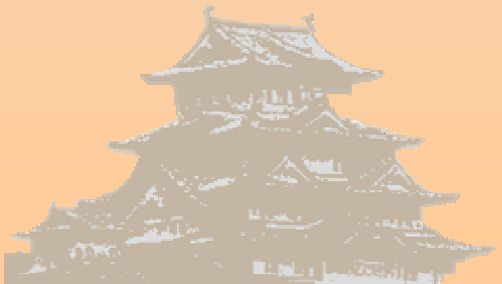
```
do i = 1, k
  if(i .eq. 1 ) then
    call sub( a1, il(i) )
  else if(i .eq. 2 ) then
    call sub( a2, il(i) )
  ...
  else if(i .eq. k ) then
    call sub( ak, il(i) )
  end if
end do
```



ifcの拡張機能による改善

- intel fortran compilerの拡張機能
  - loc：アドレスの取得
  - %val：引数のcall by valueによる結合

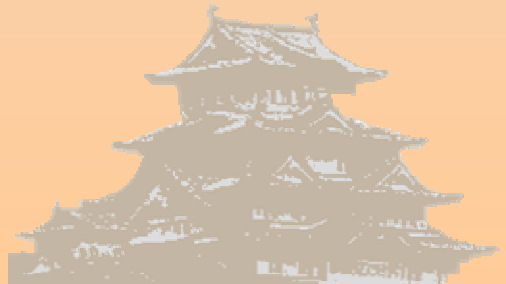
```
allocate(a1(il(1),il(1),il(1))
allocate(a2(il(2),il(2),il(2))
…
allocate(ak(il(k),il(k),il(k))
la(1) = loc( a1 )
la(2) = loc( a2 )
…
la(k) = loc( ak )
…
do i = 1, k
  call sub( %val(la(i)),il(i) )
end do
```



HPFコンパイラの内部仕様

- HPFコンパイラは，分散配列の情報をサブルーチンに引き渡すため，内部で引数を追加している．
  - プリコンパイル後のソースを修正

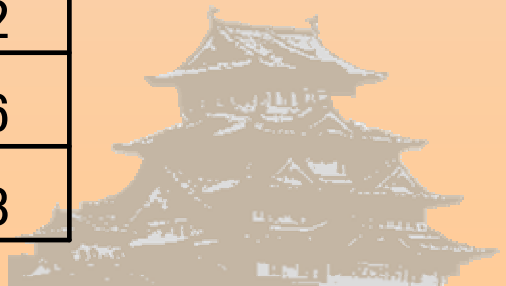
```
la$(1) = loc( a1$sd1 )
la$(2) = loc( a2$sd1 )
...
la$(k) = loc( ak$sd1 )
...
do i = 1, k
  call sub( %val(la(i)),il(i),%val(la$(i)),pghpf_type(25) )
end do
```



MGRIDの性能評価(2)

- 大幅に性能を改善できた.
  - PCクラスタ(地球シミュレータセンター)
  - 計算回数(1/50)
- HPFコンパイラによる対応が必要である.

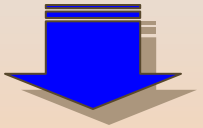
		実行時間 [秒]		高速化率	
		HPF	loc&%val	HPF	loc&%val
プロセッサ数	1	278.0	137.1	1.00	1.00
	2	151.2	84.5	1.84	1.62
	4	82.0	47.9	3.39	2.86
	8	47.3	27.8	5.88	4.93



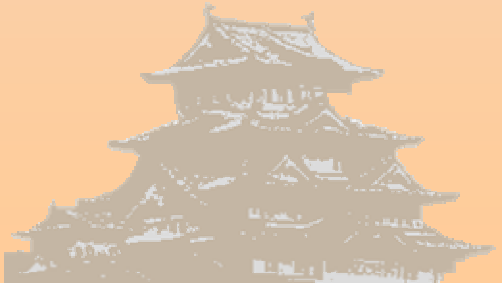
広域並列化による性能改善

- 基本ルールから離れてサブルーチンを並列呼出することで広域的な並列化ができる.

```
...
do i = 1, ndata
 call zero3( u,v,n,n,n )
 call norm2u3( r,n,n,n,rnm2(i),rnmu(i) )
 ...
end do
```



```
...
!HPF$ INDEPENDENT, NEW(u,v,r,...
    do i = 1, ndata
!HPF$ ON HOME(rnm2(i))
     call puresub( u,v,r,n,n,n,rnm2(i),rnmu(i),...)
    end do
     ...
    pure extrinsic('FORTRAN','LOCAL') subroutine
   &        puresub( u,v,r,n,n,n,rnm2,rnmu,...)
     ...
    call zero3( u,v,n,n,n )
    call norm2u3( r,n,n,n,rnm2,rnmu,...)
    ...
```



MGRIDの性能評価(3)

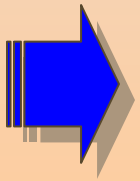
- 広域並列化では，OpenMPに近い並列性能が得られた.
  - 配列はNEW宣言するため各プロセッサ毎に全体を確保するので多くのメモリが必要である.

MGRID	Execution Time [s]			Speedup Ratio		
#proc	local	global	OpenMP	local	global	OpenMP
1	326.0	275.2	230.2	1.00	1.00	1.00
2	191.4	149.7	118.6	1.70	1.84	1.94
3	141.3	105.5	81.1	2.31	2.61	2.84
4	117.2	76.0	63.1	2.78	3.62	3.65
8	78.4	44.2	36.0	4.16	6.23	6.39

APSIの並列化(1)

- 3次元流体方程式を解き，湖環境における汚染物質の拡散をシミュレーションする.
- 実引数と仮引数で次元数が異なる.
  - 変数ごとに別々に宣言するように修正した.

```
allocatable :: work(:)
allocate(work(ntotal))
…
lc=1
lstepc = 1 + nx*ny*nz
…
call run(nx,ny,nz,work(lc),work(lstepc))
…
subroutine run(nx,ny,nz,c,stepc)
dimension c(*),stepc(*)
…
call dctdx(nx,ny,nz,c)
…
```

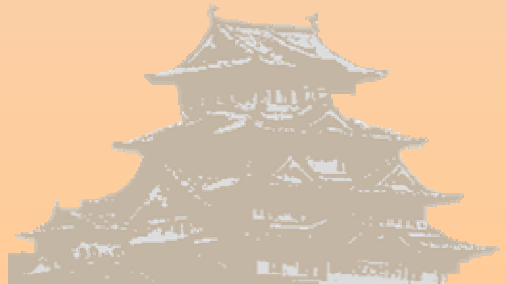


```
allocatable :: c(:,:,:),stepc(:,:,:)
…
allocate(c(nx,ny,nz))
allocate(stepc(nx,ny,nz))
…
call run(nx,ny,nz,c,stepc)
…
subroutine run(nx,ny,nz,c stepc)
dimension c(nx,ny,nz),stepc(nx,ny,nz)
…
call dctdx(nx,ny,nz,c)
…
```

APSIの並列化(2)

- 並列処理を行うべき配列の次元が，場所によって異なっている.
  - サブルーチン呼出し時の再マッピングで分散次元を変更した.

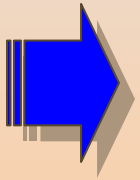
```
      ...
!HPF$ DISTRIBUTE (*,*,BLOCK) ONTO proc :: c
      ...
      ...(並列処理は3次元目）
      ...
      call advc(nx,ny,nz,c)
      ...
c-------------------------------------
      subroutine advc(nx,ny,nz,c)
      ...
!HPF$ DISTRIBUTE (*,BLOCK,*) ONTO proc :: c
      ...
      ...(並列処理は2次元目）
      ...
```



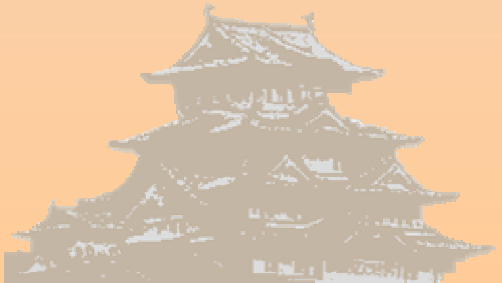
APSIの並列化(3)

- 副プログラムの並列呼び出し時に，分散配列の一部を渡す．
  - 部分配列を用いるように修正した．

```
    dimension c(nx*ny*nz)
    ...
    mlag = 1 - nxny
!$OMP PARALLEL DO
    do i = 1, nz
      mlag = mlag + nxny
     call sub(nx,ny,c(mlag))
    end do
!$OMP END PARALLEL
    ...
    subroutine sub(nx,ny,c)
    dimension c(nx,ny)
    ...
```



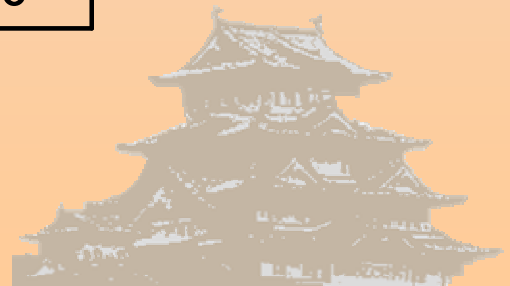
```
    dimension c(nx,ny,nz)
    ...
!HPF$ DISTRIBUTE (*,*,BLOCK) ONTO proc :: c
    interface
      pure extrinsic(fortran_local)
     &  subroutine sub(nx,ny,c)
    ...
    end interface
    ...
!HPF$ INDEPENDENT
    do i = 1, nz
     call sub(nx,ny,c(:,:,i))
    end do
    ...
    subroutine sub(nx,ny,c)
    dimension c(nx,ny)
    ...
```



APSIの性能評価

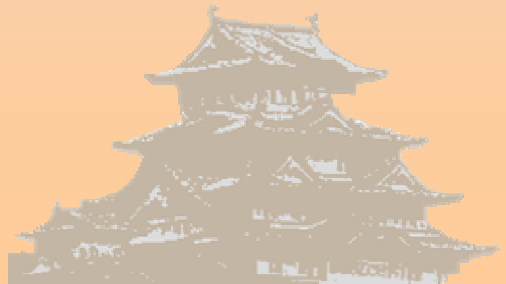
- OpenMPに近い並列性能を得ることができた.

APSI	Exec. Time [s]		Speedup Ratio	
#proc	HPF	OpenMP	HPF	OpenMP
1	1020.5	928.4	1.00	1.00
2	541.6	477.6	1.88	1.94
3	358.9	311.6	2.84	2.98
4	267.4	235.4	3.82	3.94
8	171.2	136.6	5.96	6.80

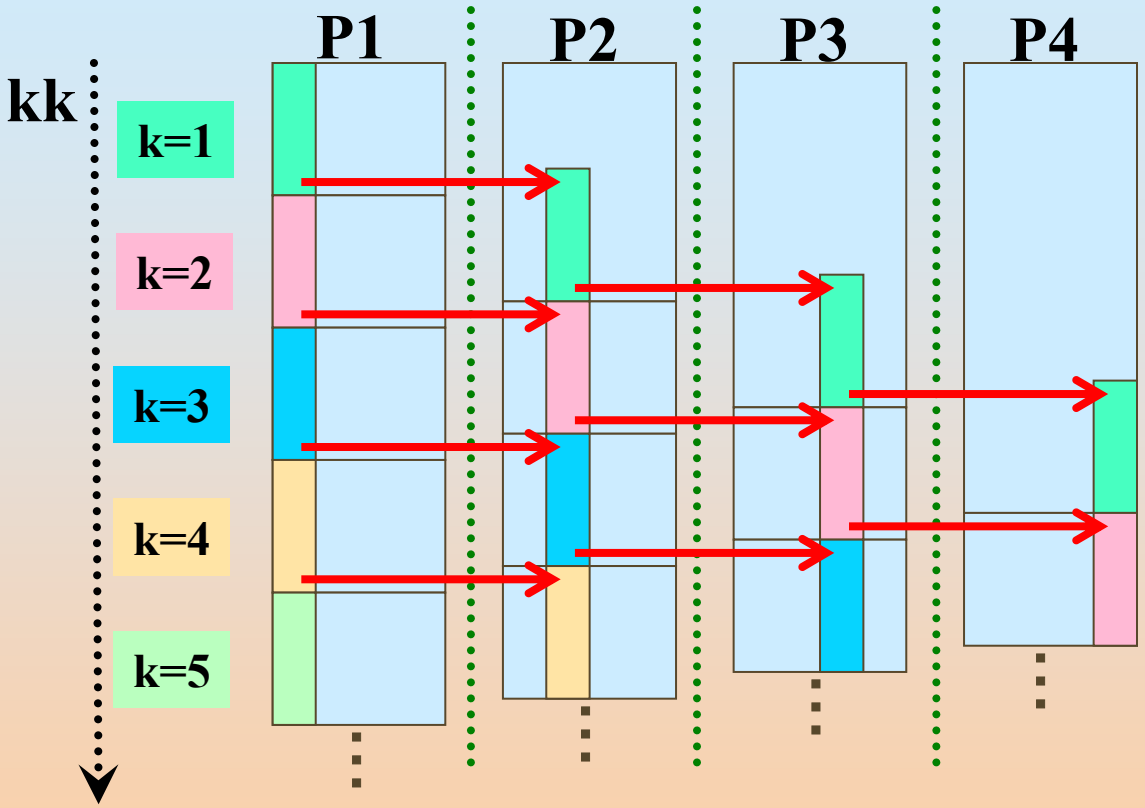


APPLUの並列化

- 非線形ブロックSORを用いている.
- 通常のSORは，回帰参照のためベクトル化も並列化もできない.
  - HPF指示文の挿入だけでは並列化できない.
- そこで，擬ハイパープレーン法を用いる.
  - ソースコードの修正が少なくて済む.
  - 残念ながら，通信はMPIのサブルーチンを直接呼び出すことで実現する.



擬ハイパープレーン法



HPF_LOCALサブルーチンから呼び出されるMPIサブルーチンによって実現されるシフト型通信

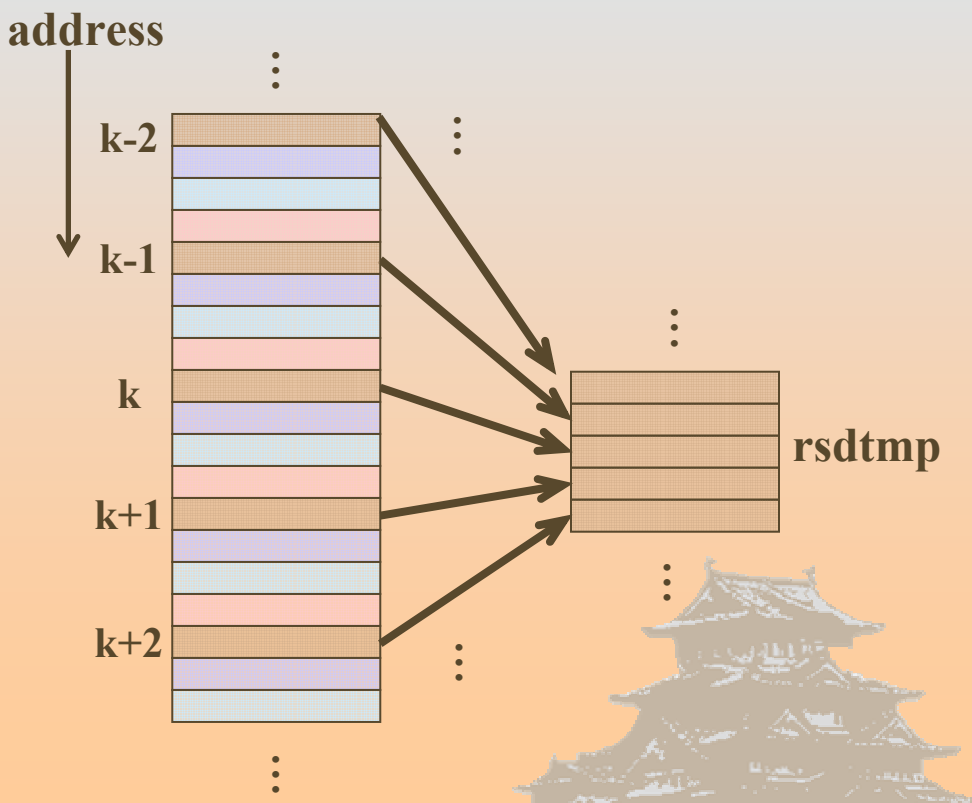
```
do k = 1, nz
  ...
end do
```

```
do kk = 1, nz+nproc-1
  k = kk - myid
  if (k .lt. 1 .or. k .gt. nz) cycle
  ...
end do
```

HPF_LOCALサブルーチンの並列呼出におけるオーバーヘッド

- 最終次元以外で分散された配列を引数にすると内部的に一時配列にコピーするコードが生成される.

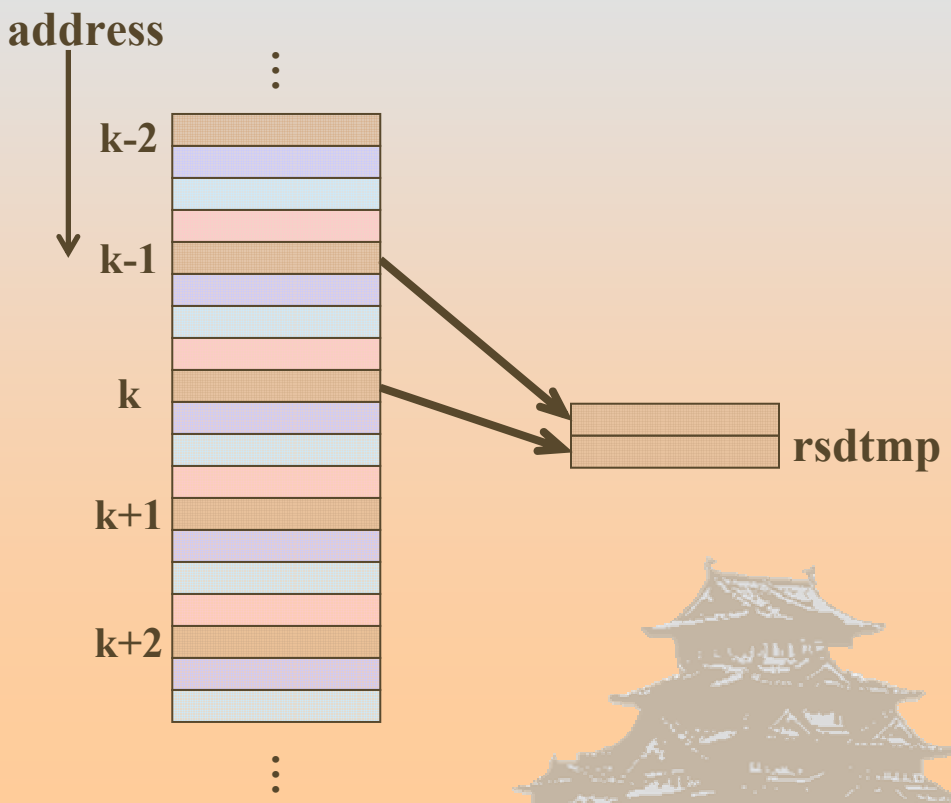
```
!HPF$ DISTRIBUTE (*,*,BLOCK,*) :: rsd
    …
    do kk = 1, nz+nporc-1
     k = kk - myid
     if (k .lt. 1 .or. k .gt. nz) cycle
     call jalcd( …)
     call blts( …, k, rsd, …)
    end do
    …
    extrinsic('HPF','LOCAL')
   &   subroutine blts( …, k,rsd, …)
    dimension rsd(:,:,:,:)
    call MPI_COMM_SIZE(COMM ,nproc,ierr)
    call MPI_COMM_RANK(COMM ,myid,ierr)
    jmax = … myid … nproc
    do j = 1, jmax
     do i = 1, nx
      do m = 1, 5
        … = rsd(m,i,j,k) + rsd(m,i,j,k-1)
      end do
     end do
    end do
    …
```



部分配列を引数にすることによるオーバーヘッド抑制

- kとk-1しか添字として使われていないので，実引数として部分配列を使う.

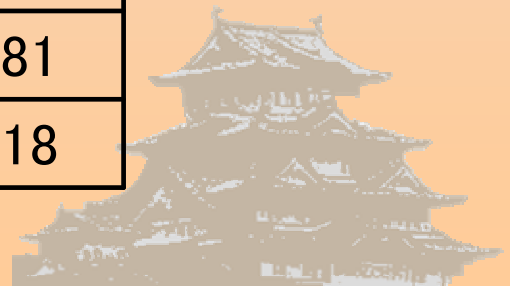
```
!HPF$ DISTRIBUTE (*,*,BLOCK,*) :: rsd
    …
    do kk = 1, nz+nporc-1
     k = kk - myid
     if (k .lt. 1 .or. k .gt. nz) cycle
     call jalcd( …)
     call blts( …, k, rsd(:,:,:,k-1:k), …)
    end do
    …
    extrinsic('HPF','LOCAL')
   &   subroutine blts( …, k,rsd, …)
    dimension rsd(:,:,:,2)
    call MPI_COMM_SIZE(COMM ,nproc,ierr)
    call MPI_COMM_RANK(COMM ,myid,ierr)
    jmax = … myid … nproc
    do j = 1, jmax
     do i = 1, nx
      do m = 1, 5
        … = rsd(m,i,j,2) + rsd(m,i,j,1)
      end do
     end do
    end do
    …
```



APPLUの性能評価

- 擬ハイパープレーン法が非効率なため，そこそこの並列性能しか得られなかった.
  - ループ当り5*224*224*2データについて4*218回一時配列へコピーされる！

APPLU	Exec. Time [s]		Speedup Ratio	
#proc	HPF	OpenMP	HPF	OpenMP
1	3472.6	2526.1	1.00	1.00
2	2139.4	1279.9	1.62	1.97
4	1170.1	663.2	2.97	3.81
8	604.7	351.9	5.74	7.18

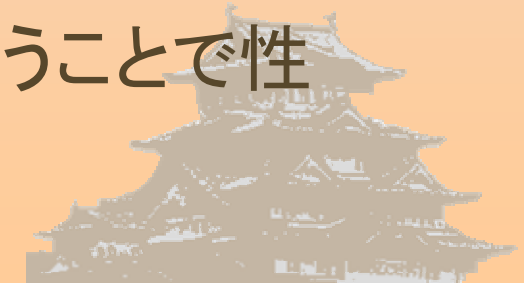


並列化のまとめ(1)

- SWIM
  - ソースを修正して，DOループの処理分割とOCR間の矛盾を解消する必要があった.
- MGRID
  - 実引数と仮引数で配列の次元数が異なるため，動的な配列確保とデータ複写を用いた.
  - 大幅にソースコードを修正して，ifcの拡張機能により効率の良い並列化を行った.
  - 基本ルールから離れると，サブルーチンの並列呼出による広域並列化が可能であった.

並列化のまとめ(2)

- APSI
  - 引数の次元数が異なる問題を解決するため，個々に配列を宣言した.
  - サブルーチンを並列呼出するため，分散配列の部分配列を実引数として使った.
- APPLU
  - MPIサブルーチンを直接呼び出して通信することで擬ハイパープレーン法により並列化した.
  - サブルーチンの実引数に部分配列を使うことで性能を改善した.



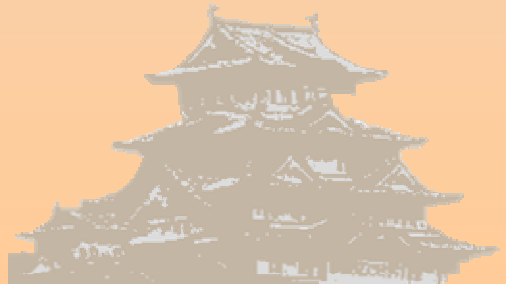
指示文および追加･修正行数

プログラム	オリジナル	OpenMP	HPF	追加･修正
SWIM(改善前)	約300	10	41	0
SWIM(改善後)	約300	10	77	20
MGRID	約400	84	127	208
MGRID(loc&%val)	約400	84	91	103+40
MGRID(広域並列)	約400	84	8	70
APSI	約4300	144	166	約400
APPLU	約3800	93	153	約500

注：HPF指示文の行数は，includeを展開して計数しているので，実際に作業した行数は，もっと少ない．

性能評価のまとめ

- SWIM
  - OpenMPと同等の並列性能が得られた.
- MGRID
  - 動的な配列の確保およびデータ複写のオーバーヘッドが大きく，良い並列性能は得られなかった.
  - しかし，ifcの拡張機能を用いて改善できた.
  - また，広域並列化でも良い並列性能が得られた.
- APSI
  - OpenMPに近い並列性能が得られた.
- APPLU
  - そこそこの並列性能しか得られなかった.



HPF化のまとめ

- 規則的な構造の問題なら，HPFでも十分に並列性能が得られることが多い．
  - プログラムの構造から，できるだけ通信が起こらないデータ分散を考える．
- 並列化できても性能が出ない場合がある．
  - 原因の追及は，やや難しい．
    - コンパイラの詳細メッセージ
  - 原因がわかれば，比較的容易に解決できる場合が多い．
    - HPFPCに相談していただければ，お手伝いできます．