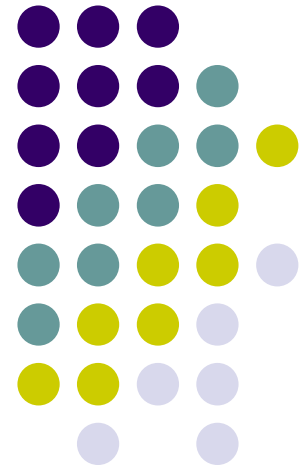


2016年度 実践的並列コンピューティング

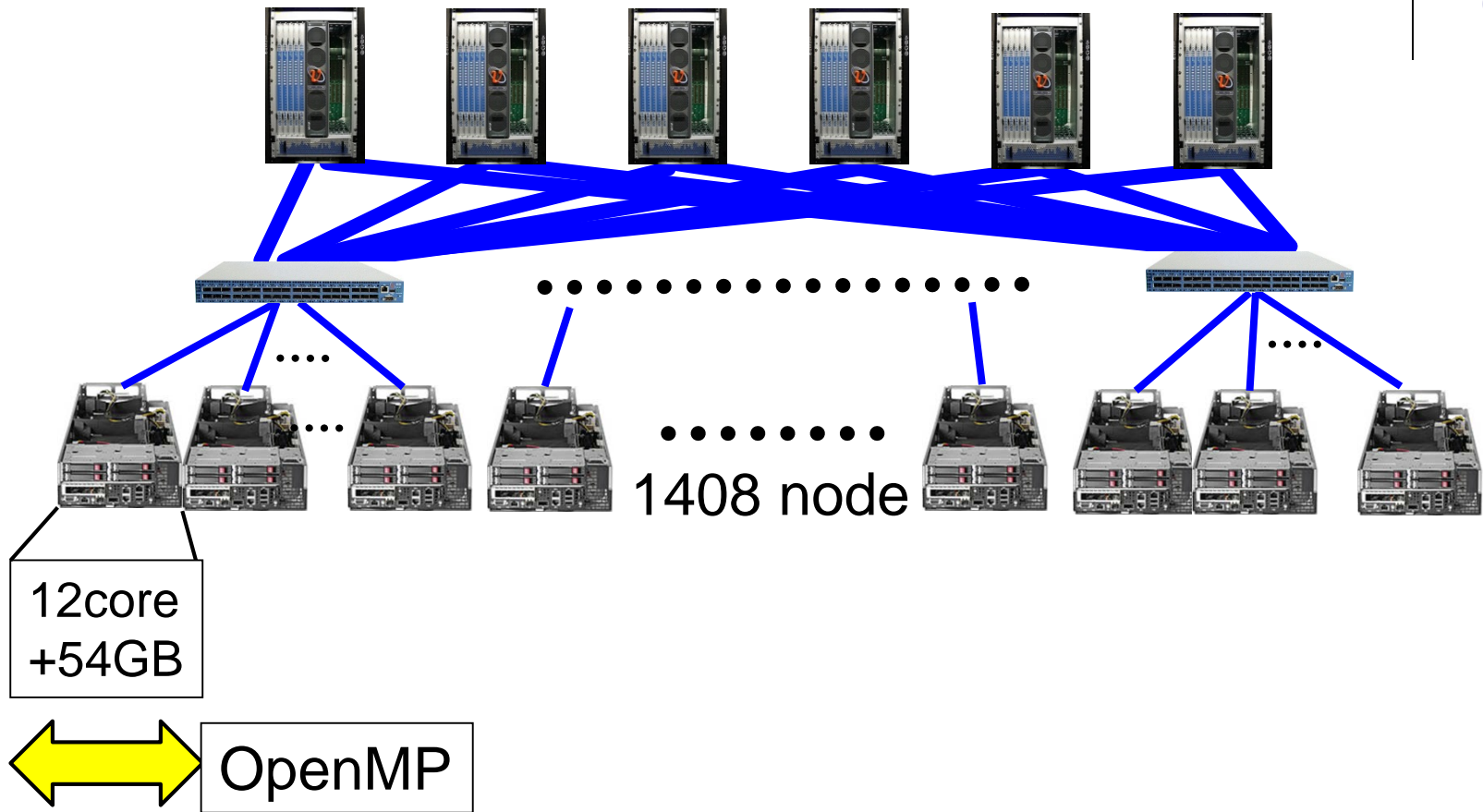
MPIによる
分散メモリ並列プログラミング(1)

遠藤 敏夫

endo@is.titech.ac.jp

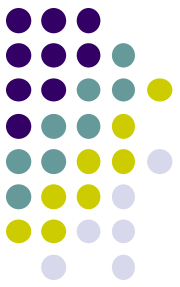


スパコンシステムの多数の計算ノードを活用するには？



OpenMPは1ノードの中のCPUコアだけを使う

多数の計算ノードを活用するには？



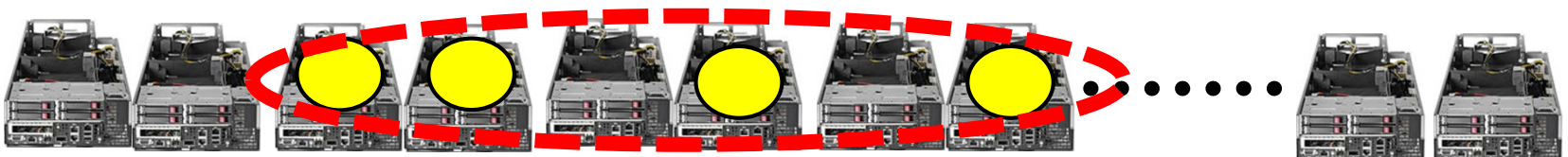
1. (役割のそれぞれ違う)複数ジョブをバッチキューシステムに投入

- パラメータをそれぞれ変えて投入することをパラメータスイープと呼ぶ
- ジョブは独立に動き、原則的に協調しない

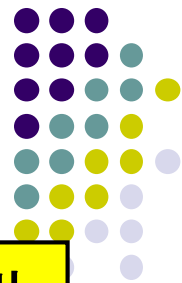


2. 一つのジョブが複数ノードを使いたい時には、分散メモリプログラミングを用いる

- MPIやHadoop
- Hadoopは、プロセス間の協調パターンが、Map-Reduceというパターンに限られる



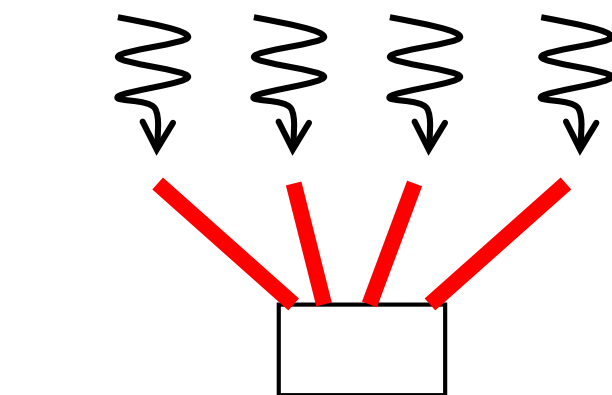
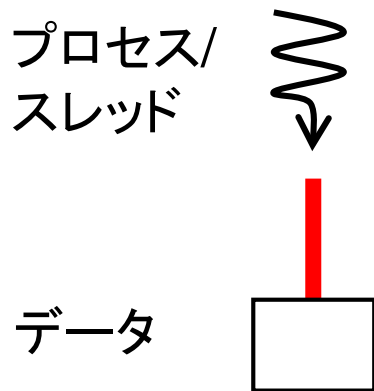
並列プログラミングモデルの、 メモリモデルによる分類



逐次

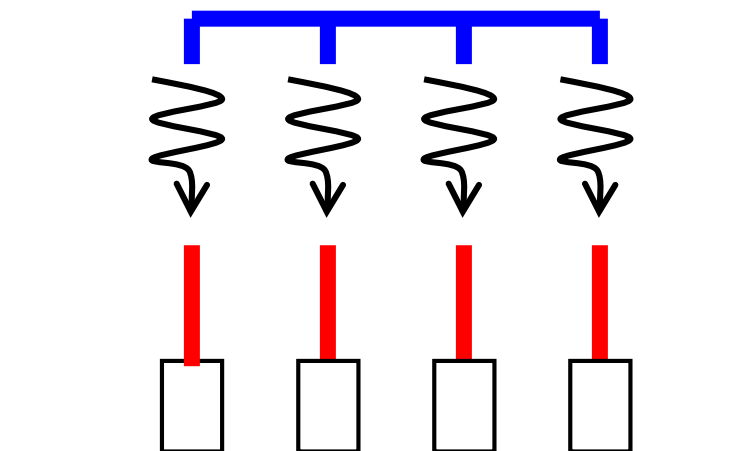
共有メモリモデル

分散メモリモデル



スレッド達が共通の
データにアクセス可能

- OpenMP(言語拡張)
- pthread(ライブラリ)
- CUDA (言語拡張)



プロセス間では通信が必要

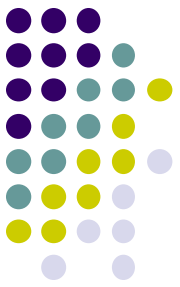
- **MPI** (ライブラリ)
- socket (ライブラリ)
- Hadoop (フレームワーク)
- **UPC, HPF, Chapel, X10**

青字のものは、PGASと呼ばれ⁴、
一部共有メモリの概念あり
(partitioned global address space)

MPI(message-passing interface)とは



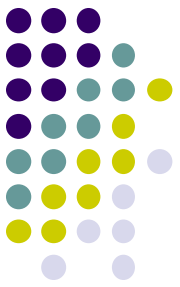
- 分散メモリ並列プログラミングの規格
- C, C++, Fortranに対応
- メッセージパッシングのためのライブラリ
- SPMDモデル. プロセス間の相互作用はメッセージで
 - MPI-2規格では, さらにRMA(remote memory access)が追加



科学技術演算でメジャーなMPI

京スパコン上で稼働中のソフトウェア(一部)

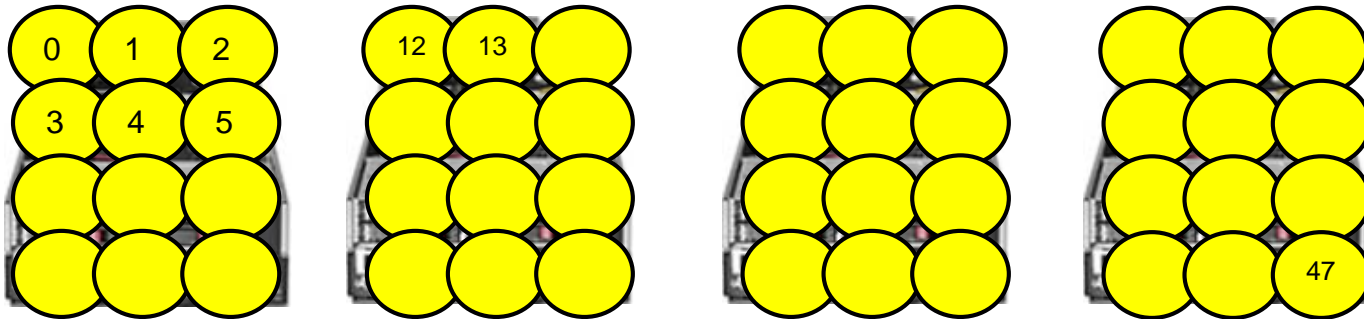
ソフトウェア名	説明	並列化方法
feram	強誘電体MD	OpenMP
STATE	第一原理MD	MPI+OpenMP
FFVC	差分非圧縮熱流体	MPI+OpenMP
GT5D	5次元プラズマ乱流	MPI+OpenMP
FrontFlow/blue	有限要素法非圧縮熱流体	MPI+京並列コンパイラ
OpenFMO	FMO第一原理計算	MPI+OpenMP
pSpatiocyte	細胞内シグナル伝播計算	MPI+OpenMP
NEURON_K+	神経回路シミュレーション	MPI+OpenMP
SiGN-L1	遺伝子ネットワーク推定	MPI+OpenMP
NTChem/RI-MP2	電子相関計算	MPI+OpenMP+並列BLAS
HPL	Linpackベンチマーク	MPI+並列BLAS



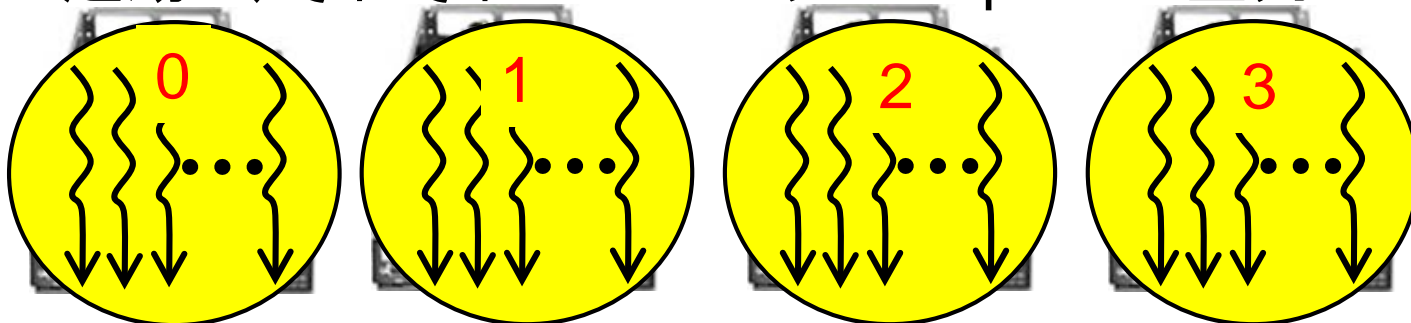
MPI+OpenMPとは？

- TSUBAMEでは1ノード12コア、京では1ノード8コアある。それを有効利用するには？

1. MPIのみ使う。図では48プロセス起動



2. MPI+OpenMP(ハイブリッド並列)。図では4プロセス起動し、それぞれが12スレッドのOpenMP並列



※ 8プロセス×3スレッドなどもあり

※ 1.より性能高い傾向にあるがプログラミング大変

OpenMPとMPI



- OpenMP
 - 共有メモリモデル
 - スレッド間のデータ移動は共有変数で
 - 排他制御によりrace conditionを防ぐ
 - 利用可能な並列度はノード内(TSUBAME2では12CPUコア)
 - #pragmaを無視すると逐次プログラムとして動作する場合が多い
- MPI
 - 分散メモリモデル
 - プロセス間のデータ移動はメッセージで
 - Critical sectionの代わりにメッセージで同期
 - 利用可能な並列度はノードを超える(TSUBAME2では10000CPUコア以上)
 - 逐次プログラムを基にする場合、全体の構造への大幅な変更が必要になりがち



MPIプログラムの概要

```
#include <stdio.h>
```

```
#include <mpi.h>
```

```
int main(int argc, char *argv[])
```

```
{
```

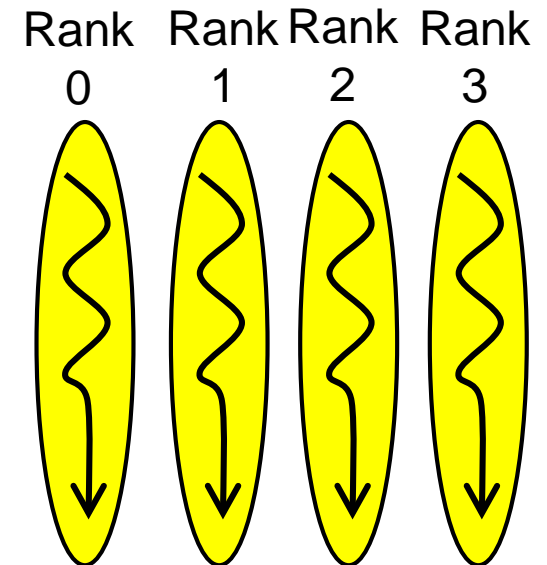
```
    MPI_Init(&argc, &argv); ← MPIの初期化
```

```
        (計算・通信)
```

```
    MPI_Finalize();
```

```
}
```

← MPIの終了





MPIプロセスとメモリ

- 複数のプロセスが同一プログラムを実行(SPMDモデル)
- プロセスごとに別のメモリ空間 → 全ての変数(大域変数・局所変数)は各プロセスで別々
- プロセスには, 0, 1, 2...という番号(rank)がつく
 - `MPI_Comm_rank(MPI_COMM_WORLD, &rank);` ランク取得
 - `MPI_Comm_size(MPI_COMM_WORLD, &size);` 全プロセス数取得
 - $0 \leq \text{rank} < \text{size}$
 - `MPI_COMM_WORLD`は, 「全プロセスを含むプロセス集団(=コミュニケーター)」
 - メッセージの送信先, 受信元としてrankを利用

TSUBAME2上でのMPIプログラムのコンパイル



- mpiccというコマンドが使えることを確認する
 - デフォルトではOpenMPIというMPI処理系が設定されているはず
 - MVAPICHという別処理系も使える → 詳細はTSUBAME2.5利用の手引き 5.1.4章
- コンパイル:
 - **mpicc**でコンパイル. オプションは一般のコンパイラと同じ
 - サンプルプログラムは, [~endo-t-ac/ppcomp/16/](https://endo-t-ac.github.io/ppcomp/16/) 以下の [mpitest1](#), [pi-mpi](#), [mm-mpi](#) ディレクトリ
 - サンプルプログラムのコンパイルはmakeコマンドでok

TSUBAME2上でのMPIプログラムの実行 (1)



- インタラクティブノードでプログラムを実行する場合
 - `mpirun -np [プロセス数] [プログラム名] [オプション]`
 - プロセス数は4まで. かつ, 実行時間は数分以内にとどめること
 - もっと大きいのはバッチキューでおねがいします

TSUBAME2上でのMPIプログラムのコンパイル, 実行 (2)



- バッチキューを用い、myprogというMPIプログラムを、ノードあたり12プロセス×4ノード = 48プロセスで実行する場合

(1) スクリプトファイルの作成 (たとえばjob.shというファイル名):

```
#!/bin/sh  
cd $PBS_O_WORKDIR  
mpirun -np 48 -hostfile $PBS_NODEFILE ./myprog
```

全プロセス数。(2)とつじつまを合わせることに

(1-2) `chmod 755 job.sh` コマンドで、「実行可能ファイル」にしておく

(2) t2subコマンドでジョブ投入 本授業の場合

```
t2sub -q S -W group_list=t2g-ppcomp  
-l select=4:mpiprocs=12 -l place=scatter ./job.sh
```

ノード数

ノードあたりプロセス数

MPIの基本中の基本: メッセージの送信・受信



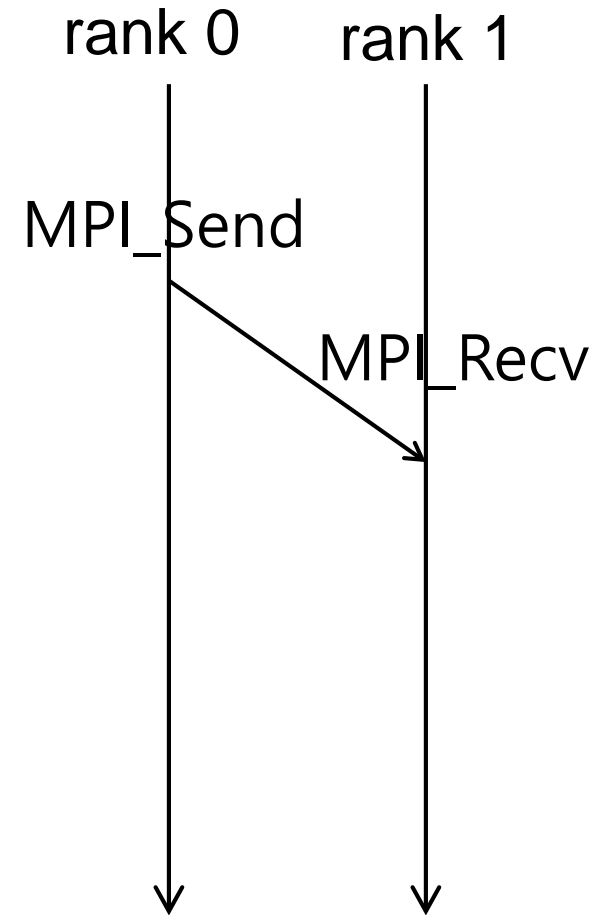
rank 0からrank1へ, int a[16]の中身を送りたい場合

- rank0側で

```
MPI_Send(a, 16, MPI_INT, 1,  
100, MPI_COMM_WORLD);
```

- rank1側で

```
MPI_Recv(b, 16, MPI_INT, 0,  
100, MPI_COMM_WORLD,  
&stat);
```





MPI_Send

MPI_Send(a, 16, MPI_INT, 1, 100, MPI_COMM_WORLD);

- a: メッセージとして送りたいメモリ領域の先頭アドレス
- 16: 送りたいデータ個数
- MPI_INT: 送りたいデータ型
 - 他にはMPI_CHAR, MPI_LONG, MPI_DOUBLE, MPI_BYTE...
- 1: メッセージの宛先プロセスのrank
- 100: メッセージにつけるタグ(整数)
- MPI_COMM_WORLD: コミュニケーター



MPI_Recv

`MPI_Status stat;`

`MPI_Recv(b, 16, MPI_INT, 0, 100, MPI_COMM_WORLD, &stat);`

- b: メッセージを受け取るメモリ領域の先頭アドレス
 - 十分な領域を確保しておくこと
- 16: 受け取るデータ個数
- MPI_INT: 受け取るデータ型
- 0: 受け取りたいメッセージの送信元プロセスのrank
- 100: 受け取りたいメッセージのタグ. ユーザが決める整数
 - MPI_Sendで指定したものと同じなら受け取れる
- MPI_COMM_WORLD: コミュニケータ
- &stat: メッセージに関する補足情報が受け取れる

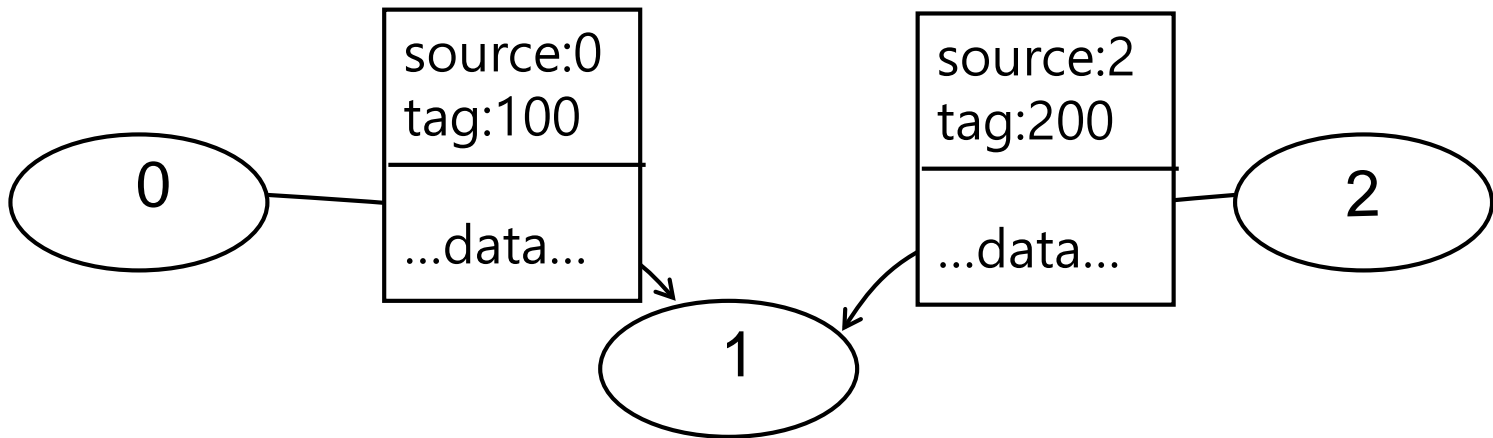
MPI_Recvを呼ぶと、メッセージが到着するまで待たされる (ブロッキング)



MPI_Recvのマッチング処理

受信側には複数メッセージがやってくるかも → 受け取りたい条件を指定する

- 受け取りたい送信元を指定するか, MPI_ANY_SOURCE (誰からでもよい)
- 受け取りたいタグを指定するか, MPI_ANY_TAG(どのタグでもよい)

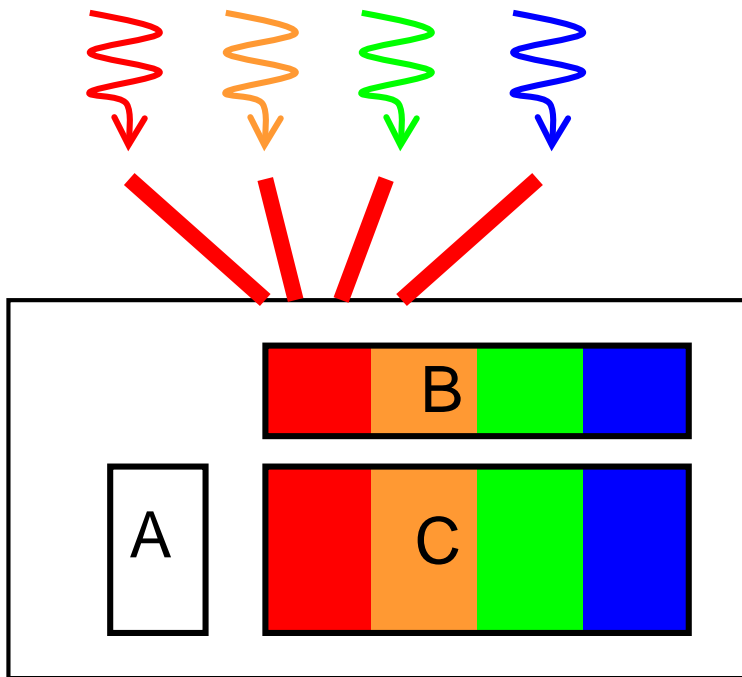


分散メモリと共有メモリの違い

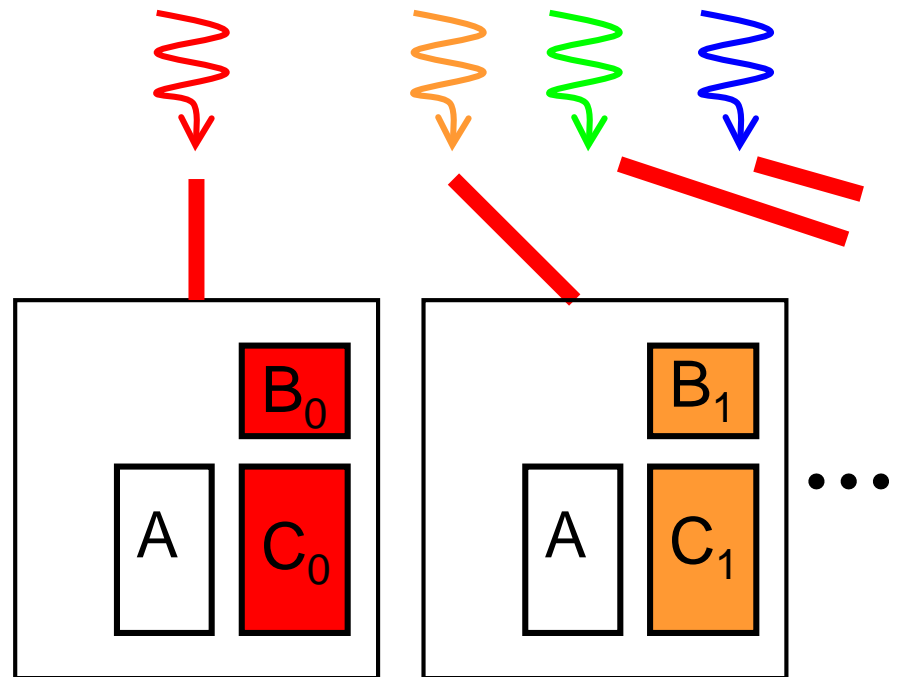
行列積($C=A \times B$)の例



- 共有メモリ: 計算をどうスレッドに分割するか
- 分散メモリ: 計算とデータをどうプロセスに分割するか



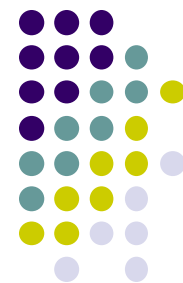
行列Aは全スレッドによってアクセスされる



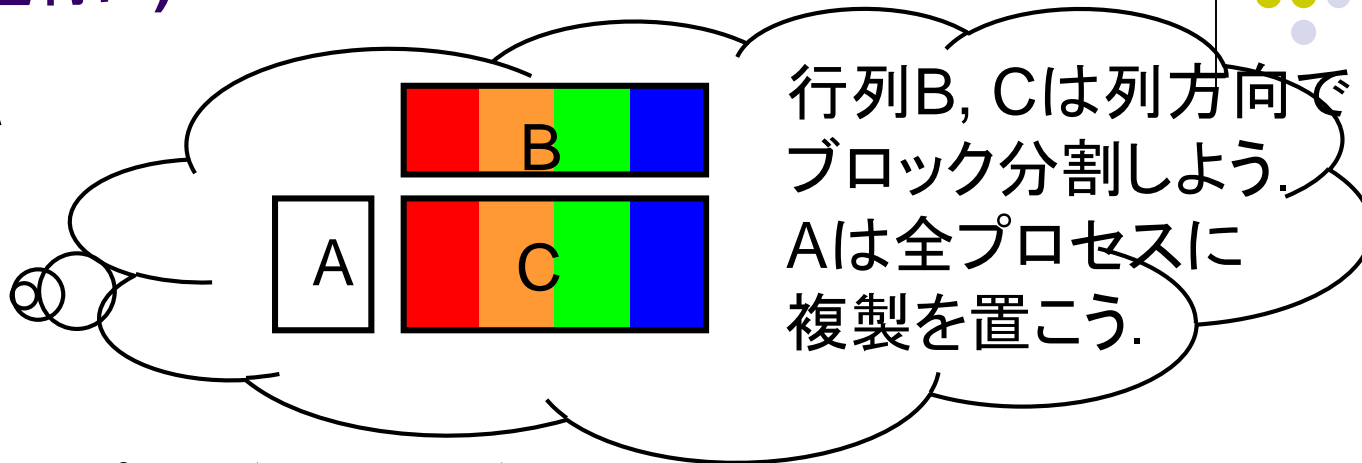
行列Aは全プロセスに置かれる
→ 後に改良案

分散メモリプログラミングとデータ配置

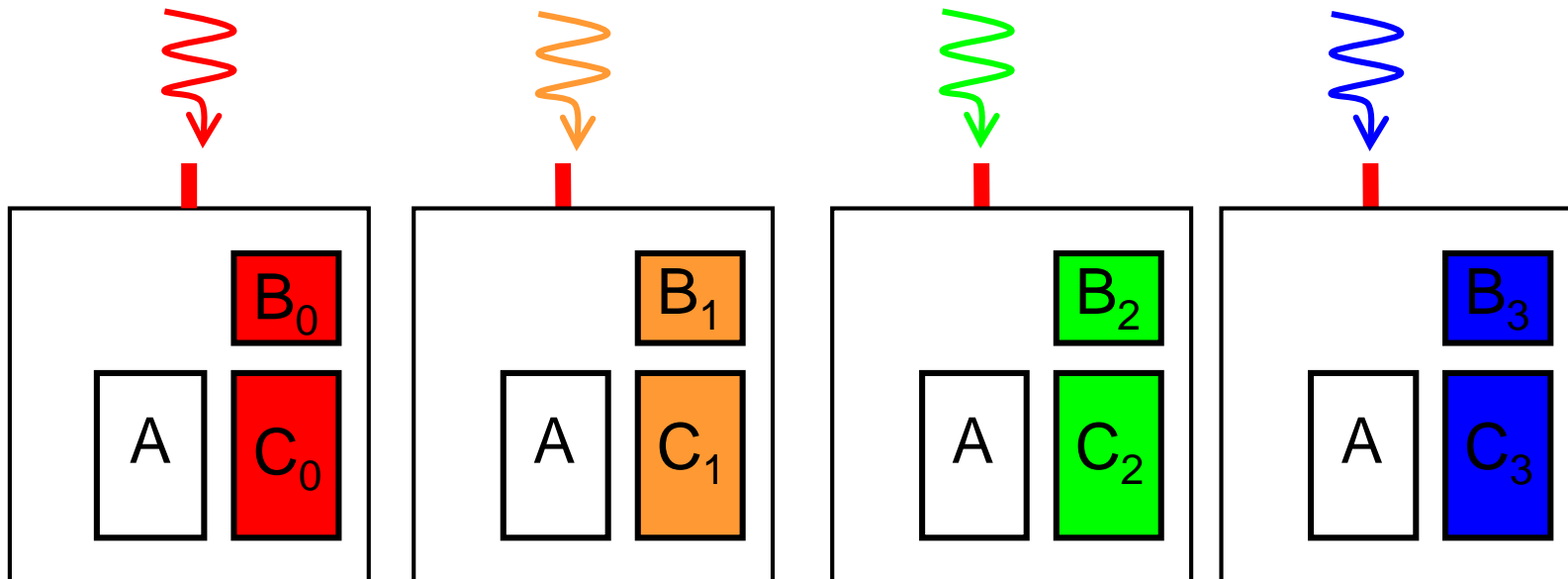
(mm-mpiを題材に)



配置方法を
決める:



実際の配置をプログラミング:

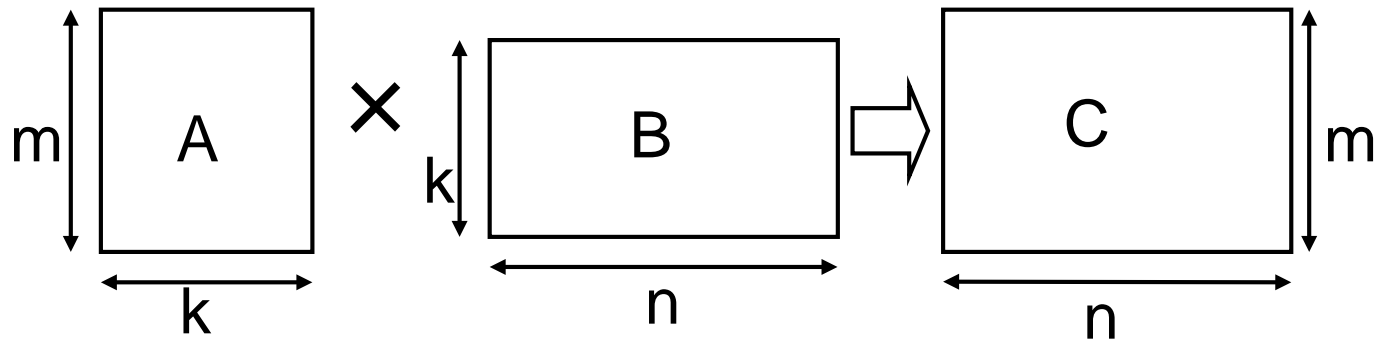


行列積サンプルプログラム (再掲)



($m \times k$)行列と($k \times n$)行列の積

- 三重のforループで記述
- 動的長さ配列. 二次元を一次元で表現 (column-major)
- 実行オプション: `./mm [m] [n] [k]`
- 計算量: $O(m \times n \times k)$





データ配置を考える

1. 初期配置

- 各データは最初から分散しているとしてよいか？
- 初期値はプロセス0が持っているとするか？

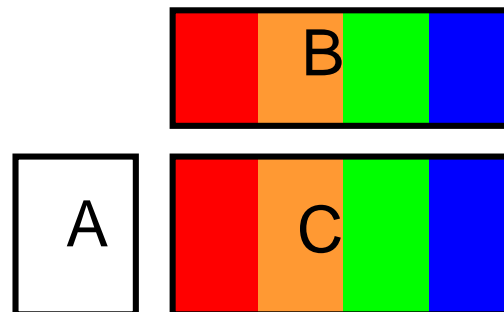
2. 計算中の配置

- プロセス間の通信量が少なくなる配置が望ましい
- メモリ消費とトレードオフの場合も

3. 結果の配置

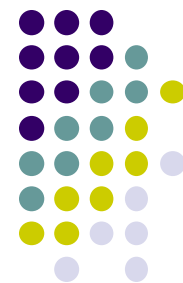
- 結果を(たとえばプロセス0に)集める必要はあるか？

(mm-mpiでは分割したままとした)



Cを列方向ブロック分割
⇒ Bも列方向の分割
Aは全複製

データ分散とプログラミング



- $m \times n$ 行列を p プロセスで分割する
とはどういうことか？

- データ並びはcolumn-majorとする
- ここでは割り切れる場合を仮定

- 各プロセスが持つのは、 $m \times (n/p)$
の部分行列

- $m \times (n/p) \times \text{sizeof(データ型)}$ のサイズの
領域をmallocすることに

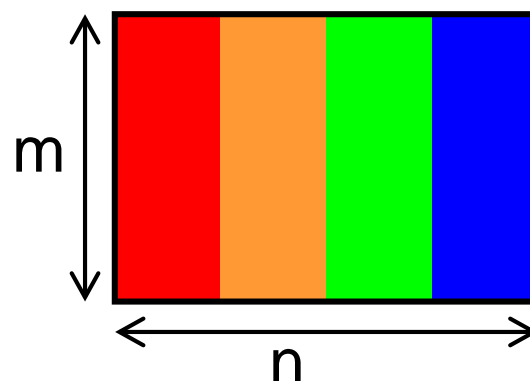
- 部分行列と全体行列の対応を意識
する必要

ローカルインデックス

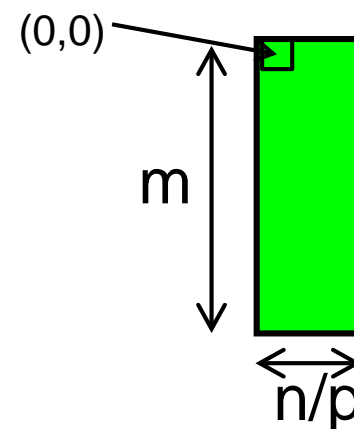
- プロセス r の部分行列の (i, j) 要素 \leftrightarrow
全体行列の $(i, n/p \times r + j)$ 要素に対応

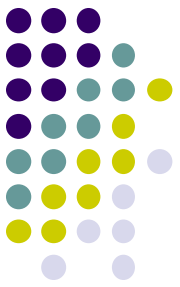
グローバルインデックス

全体のイメージ



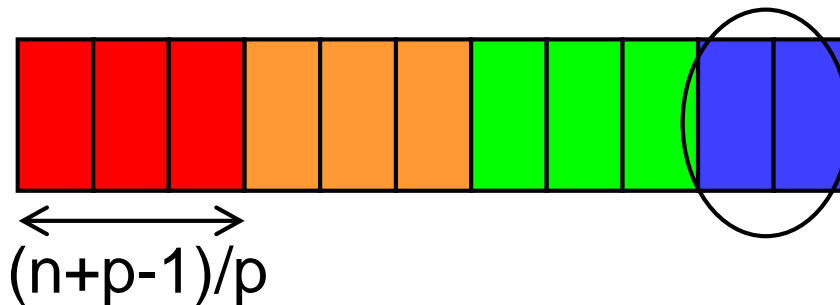
プロセスが持つ領域





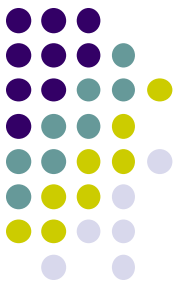
意外とめんどろな端数処理

- データサイズ n が, プロセス数 p で割り切れるとは限らない
- 11個(11列)のデータを4プロセスで分割するには?
 - C言語の整数割り算は切り捨て
 - $n/p = 2$ 個ずつ担当していくとデータが余る → 切り上げの必要
→ $(n+p-1)/p = 3$ 個ずつ担当する.
最後のプロセスは他より仕事が少ない



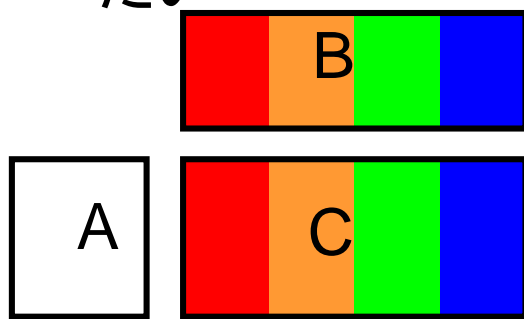
サンプルプログラムの`divide_length()`関数は, 自分の担当場所の始点インデックス s と終点インデックス e を返す.
 s 以上 e 未満の, $(e-s)$ 個(列)のデータを担当することを示す.

データ配置の再検討

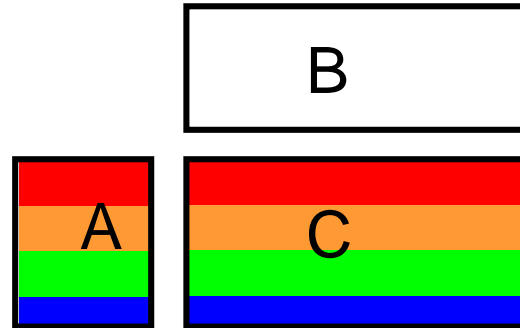


- $C_{i,j}$ の計算には, Aの第i列とBの第j列が必要

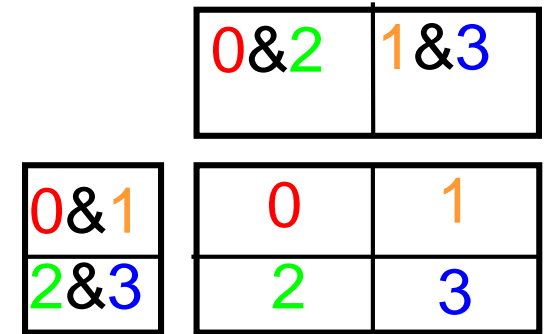
⇒ 単純には、依存するデータをできるだけ同じプロセスに置きたい



Cを列方向ブロック分割
⇒ Bも列方向の分割
Aは全複製
(mm-mpiの方法)
 $O(mkp+nk+mn)$



Cを行方向ブロック分割
⇒ Aも行方向の分割
Bは全複製
 $O(mk+nkp+mn)$

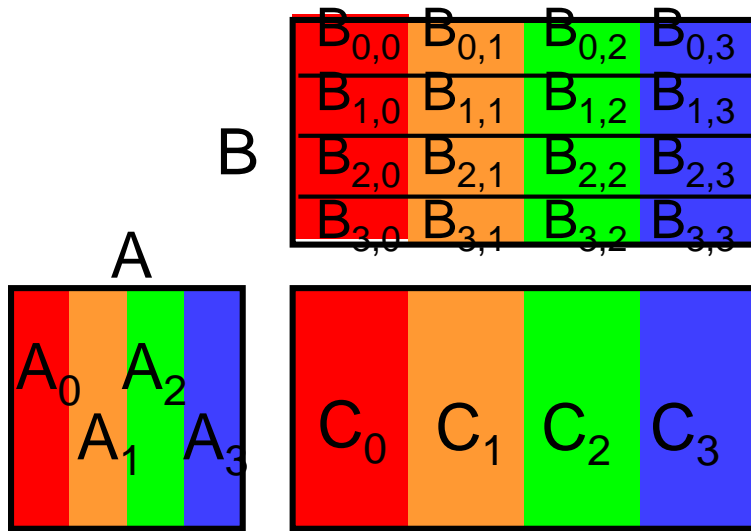


Cを二次元ブロック分割
⇒ A:行方向分割+複製
B:列方向分割+複製
 $O(mkp^{1/2}+nkp^{1/2}+mn)$

↑ メモリ量の全プロセス合計

以上は全て、計算最中の通信は不要だがメモリ利用量が多い
プロセス数・問題サイズが大規模になるとダメ

メモリ利用量を抑えるデータ配置の例



Aもブロック分割
(列方向でなくても可)
⇒ ローカルデータだけでは
 C_i の計算できないので、
通信が必要

第0フェーズ:

プロセス0が A_0 をBcast

各プロセスiは,

$C_i += A_0 \times B_{0,i}$ を計算

第1フェーズ:

プロセス1が A_1 をBcast

各プロセスiは,

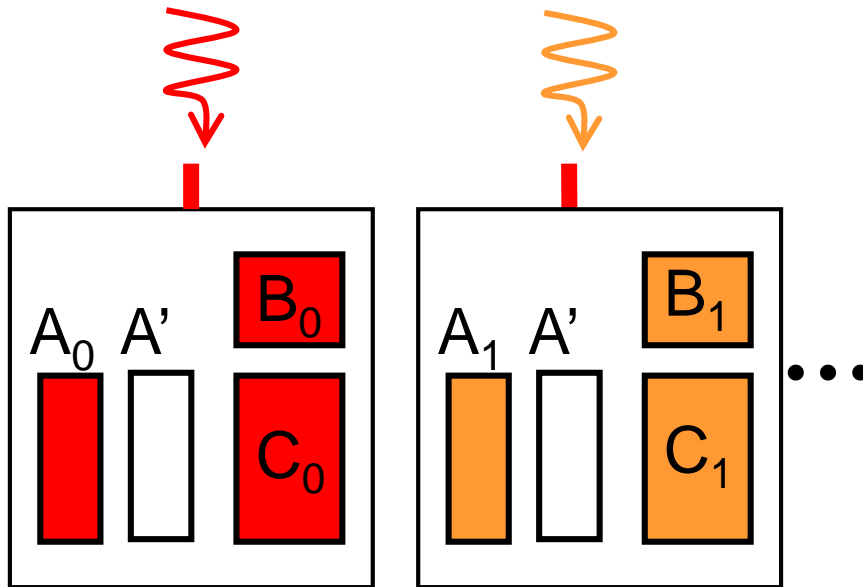
$C_i += A_1 \times B_{1,i}$ を計算

:

以下同様に, 第(p-1)フェーズ
まで行う



実際のメモリ配置はどうなる？



- 各プロセスは、分割されたAに加え、受信バッファ(A')を用意する
- 第rフェーズでは、
 - プロセスrはAからA'へデータコピー（省略する手法もあり）
 - プロセスrをルートとし、領域A'をMPI_Bcast



本授業のレポートについて

- 各パートで課題を出す。2つ以上のパートのレポート提出を必須とする

予定パート:

- OpenMPパート
- MPIパート
- GPUパート



MPIパート課題説明 (1)

以下の[M1]—[M3]のどれか一つについてレポートを提出してください

[M1] diffusionサンプルプログラムを, MPIで並列化してください.

オプション:

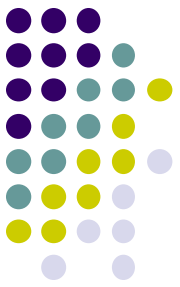
- MPIで一般のサイズ(プロセス数で割り切れないかもしれない)に対応するには端数処理が必要である。本レポートではその対応はオプションとする
- より良いアルゴリズムにしてもよい。ブロック化・計算順序変更でキャッシュミスが減らせるか？
- 二次元分割の効果はあるか？



MPIパート課題説明/Report (2)

[M2] MPIで並列化され、メモリ利用量を抑えた行列積プログラムを実装してください

- mm-mpiサンプルの改造でよい
- データ分割は本授業の通りでもそれ以外でもよい
- スライドのアルゴリズムよりも進化した、 SUMMA (Scalable Universal Matrix Multiplication Algorithm)[Van de Geijn 1997] もok
- 端数処理はあった方が望ましいが、必須ではない

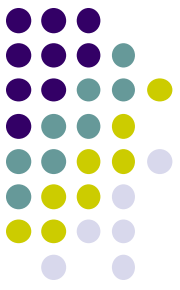


MPIパート課題説明/Report (3)

[M3] 自由課題: 任意のプログラムを, MPI(MPI-2も可)を用いて並列化してください.

- 単純な並列化で済む問題ではないことが望ましい
 - スレッド・プロセス間に依存関係がある
 - 均等分割ではうまくいかない、など
- たとえば, 過去のSuperConの本選問題
<http://www.gsic.titech.ac.jp/supercon/>
たんぱく質類似度(2003), N体問題(2001)・・・
入力データは自分で作る必要あり
- たとえば, 自分が研究している問題

課題の注意



- いずれの課題の場合も、レポートに以下を含むこと
 - 計算・データの割り当て手法の説明
 - TSUBAME2などで実行したときの性能
 - プロセッサ(コア)数を様々に変化させたとき
 - 問題サイズを様々に変化させたとき(可能な問題なら)
 - 「XXコア以上で」「問題サイズXXX以上で」発生する問題に触れているとなお良い
 - 高性能化・機能追加などのための工夫が含まれているとなお良い
 - 「XXXのためにXXXを試みたが高速にならなかった」のような失敗でもgood
 - 作成したプログラムも提出
 - zipなどで圧縮してOCW-ilに提出
 - 困難な場合は、TSUBAME2の自分のホームディレクトリに置き、置き場所を連絡(パーミッションに注意)



課題の提出について

- MPIパート提出期限
 - 6/13 (月)
- OCW-i ウェブページから下記ファイルを提出のこと
- レポート形式
 - レポート本文: PDF, Word, テキストファイルのいずれか
 - プログラム: zip形式に圧縮するのがのぞましい
- OCW-iからの提出が困難な場合、メールでもok
 - 送り先: ppcomp@el.gsic.titech.ac.jp
 - メール題名: ppcomp report

次回:

- MPI (2)
 - diffusionサンプル解説
 - ノンブロッキング通信

