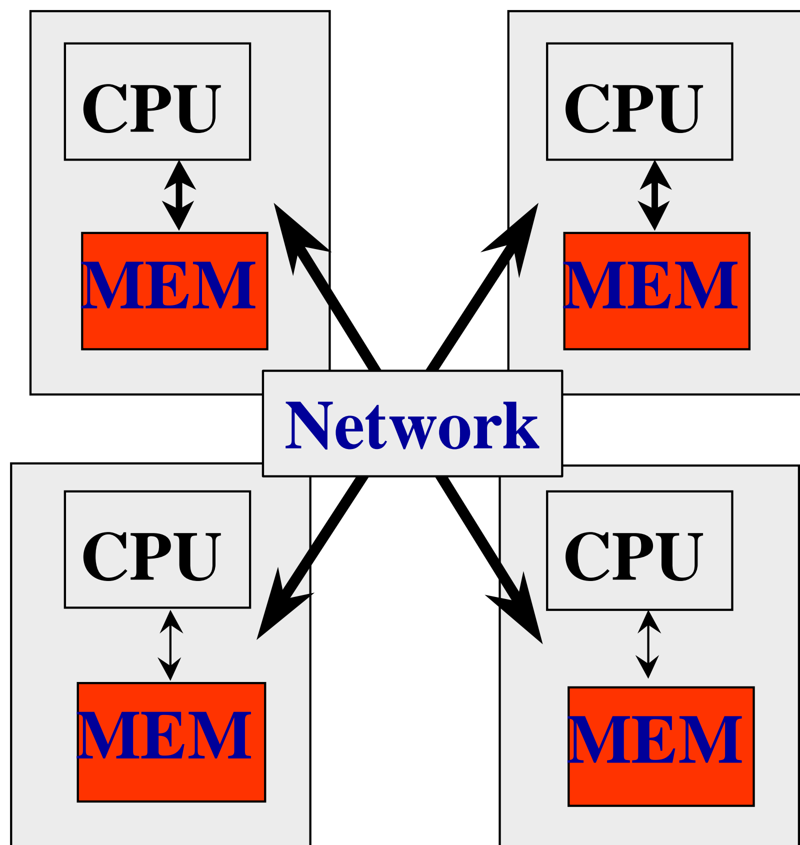
高性能並列プログラミング環境

プログラミング環境特論

2010年1月21日

建部修見

分散メモリ型計算機

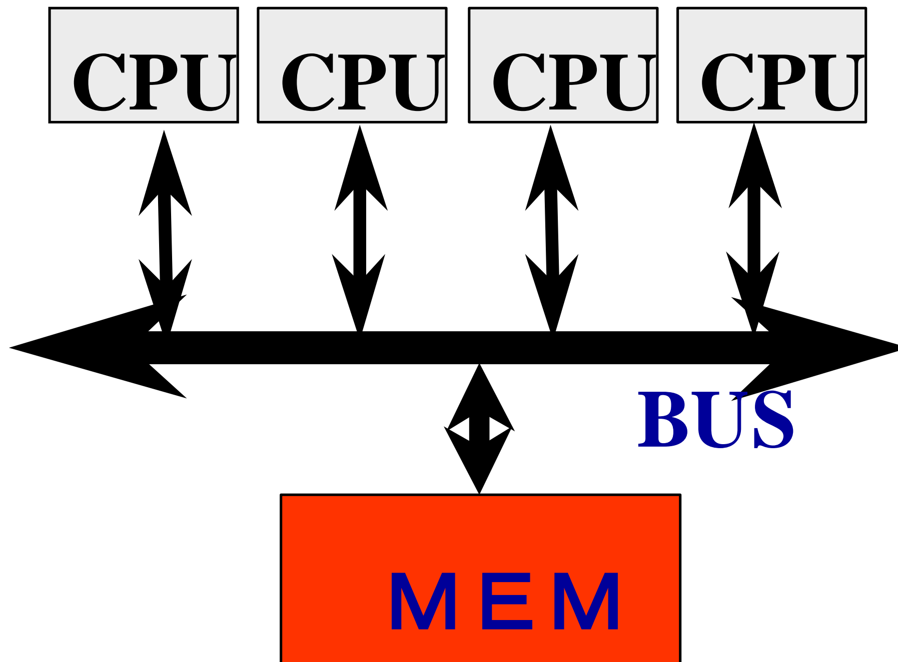


◆CPUとメモリという一つの計算機システムが、ネットワークで結合されているシステム

◆それぞれの計算機で実行されているプログラムはネットワークを通じて、データ（メッセージ）を交換し、動作する

◆超並列（MPP：Massively Parallel Processing)コンピュータ
◆クラスタ計算機

共有メモリ型計算機



◆複数のCPUが一つのメモリにアクセスするシステム

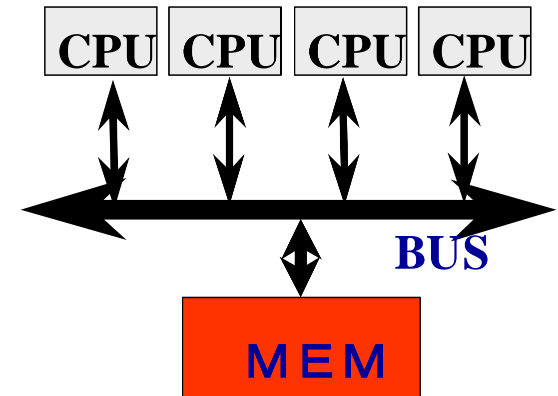
◆それぞれのCPUで実行されているプログラム（スレッド）は、メモリ上のデータにお互いにアクセスすることで、データを交換し、動作する

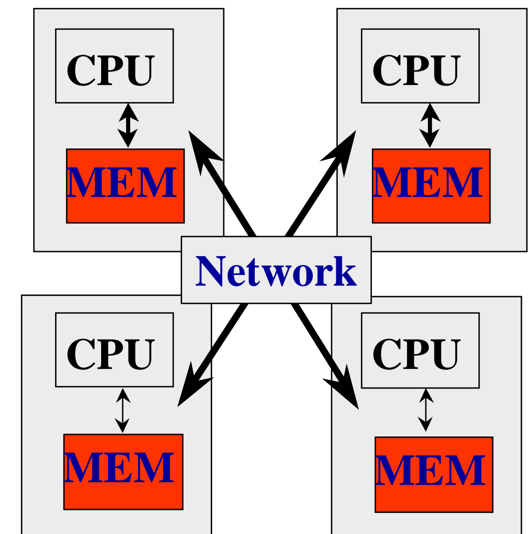
◆大規模サーバ，マルチコア

◆UMAとNUMA

並列処理の利点

- 計算能力が増える
  - １つのCPUよりも多数のCPU
- メモリの読出し能力（バンド幅）が増える
  - それぞれのCPUが個々のメモリを読出すことができる
- ディスク等、入出力のバンド幅が増える
  - それぞれのCPUが並列にディスクを読み出すことができる
- キャッシュメモリが効果的に利用できる
  - 単一のプロセッサではキャッシュにのらないデータでも、処理単位が小さくなることによって、キャッシュを効果的に使うことができる
- 低コスト
  - マイクロプロセッサをつかえば





クラスタ技術

並列プログラミング

- メッセージ通信 (Message Passing)
  - 分散メモリシステム（共有メモリでも可）
  - プログラミングが面倒、難しい
  - プログラマがデータの移動を制御
  - プロセッサ数に対してスケーラブル
- 共有メモリ (shared memory)
  - 共有メモリシステム（DSMシステムon分散メモリ）
  - プログラミングしやすい（逐次プログラムから）
  - システムがデータの移動を行ってくれる
  - プロセッサ数に対してスケーラブルではないことが多い

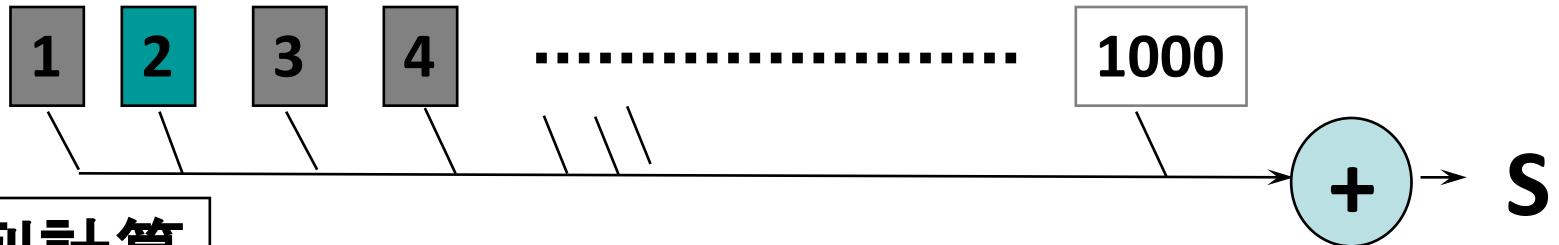
並列プログラミング

- メッセージ通信プログラミング
  - MPI, PVM
- 共有メモリプログラミング
  - マルチスレッドプログラミング
    - Pthread, Solaris thread, NT thread
  - OpenMP
    - 指示文によるannotation
    - thread制御など共有メモリ向け
  - HPF
    - 指示文によるannotation
    - 並列構文
    - distributionなど分散メモリ向け
- 自動並列化
  - 逐次プログラムをコンパイラで並列化
    - コンパイラによる解析には制限がある。指示文によるhint
- Fancy parallel programming languages

並列処理の簡単な例

```
for (i = 0; i < 1000; i++)
    S += A[i]
```

逐次計算



並列計算

1 2 …… 250
+
プロセッサ１

251 …… 500
+
プロセッサ２

501 …… 750
+
プロセッサ３

751 …… 1000
+
プロセッサ４

+
S

POSIXスレッドによるプログラミング

- スレッドの生成

Pthread, Solaris thread

```
for (t = 1; t < n_thd; t++){
  r = pthread_create(thd_main, t)
}
thd_main(0);
for (t = 1; t < n_thd; t++)
                pthread_join();
```

- ループの担当部分の分割
- 足し合わせの同期

```
double s;  /* global */
int n_thd; /* number of threads */
int thd_main(int id)
{ int c, b, e, i;  double ss;
  c = 1000 / n_thd;
  b = c * id;
  e = b + c;
  ss = 0.0;
  for (i = b; i < e; i++) ss += a[i];
  pthread_lock();
  s += ss;
  pthread_unlock();
  return (0);
}
```

OpenMPによるプログラミング

これだけで、OK!

```
#pragma omp parallel for reduction(+:s)
  for (i = 0; i < 1000; i++) s += a[i];
```

OpenMPとは

- 共有メモリマルチプロセッサの並列プログラミングのためのプログラミングモデル
  - ベース言語(Fortran/C/C++)をdirective（指示文）で並列プログラミングできるように拡張
- 米国コンパイラ関係のISVを中心に仕様を決定
  - Oct. 1997 Fortran ver.1.0 API
  - Oct. 1998 C/C++ ver.1.0 API
  - 現在、OpenMP 3.0が策定中
- URL
  - http://www.openmp.org/

MPIによるプログラミング

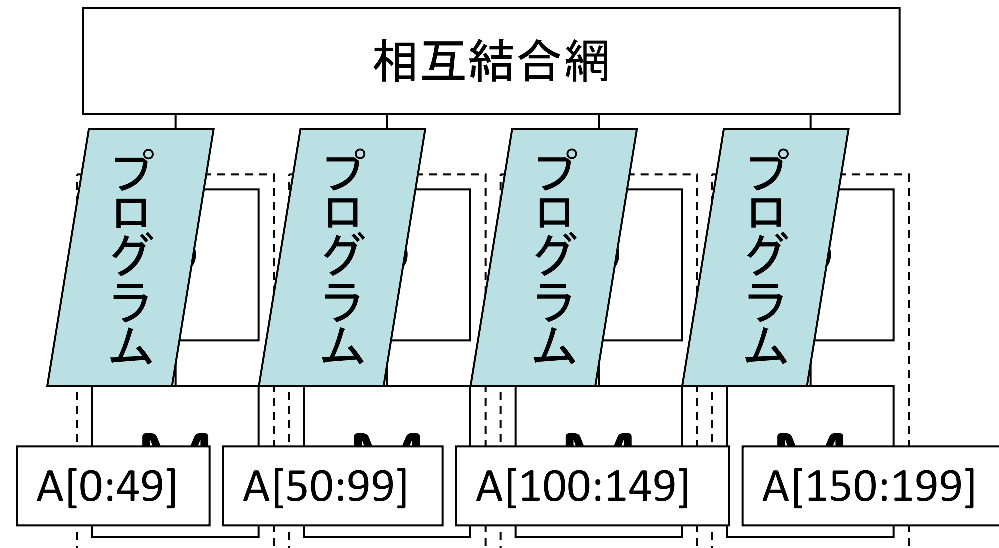
- MPI (Message Passing Interface)
- 現在、分散メモリシステムにおける標準的なプログラミングライブラリ
  - 100ノード以上では必須
  - 面倒だが、性能は出る
    - アセンブラでプログラミングと同じ
- メッセージをやり取りして通信を行う
  - Send/Receive
- コレクティブ通信
  - 総和など

MPI – The Message Passing Interface

- メッセージ通信インターフェースの標準
- 1992年より標準化活動開始
- 1994年，MPI-1.0リリース
  - ポータブルな並列ライブラリ，アプリケーション
  - 8つの通信モード，コレクティブ操作，通信ドメイン，プロセストポロジ
  - 100以上の関数が定義
  - C, C++, Fortran
  - 仕様書 http://www.mpi-forum.org/
    - MPI-2.1が2008年9月にリリース
  - 翻訳 http://phase.hpcc.jp/phase/mpi-j/ml/

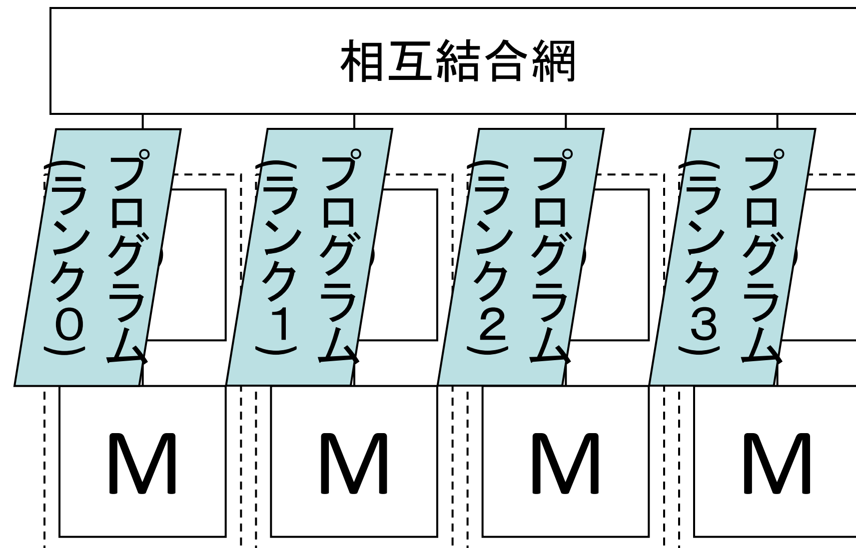
SPMD – Single Program, Multiple Data

- 異なるプロセッサで同一プログラムを独立に実行（cf. SIMD）
- 同一プログラムで異なるデータを処理
- メッセージ通信でプログラム間の相互作用を行う



MPI実行モデル

- (同一の)プロセスを複数のプロセッサで起動
  – プロセス間は(通信がなければ)同期しない
- 各プロセスは固有のプロセス番号をもつ
- MPIによりプロセス間の通信を行う



コミュニケータ（1）

- 通信ドメイン
  - プロセスの集合
  - プロセス数，プロセス番号（ランク）
  - プロセストポロジ
    - 一次元リング，二次元メッシュ，トーラス，グラフ
- MPI_COMM_WORLD
  - 全プロセスを含む初期コミュニケータ

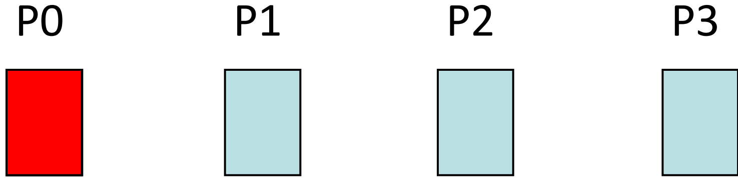
コミュニケータ（2）

- 集団通信の“スコープ”（通信ドメイン）を自由に作成可能
- プロセスの分割
  - 2/3のプロセスで天気予報，1/3のプロセスで次の初期値計算
- イントラコミュニケータとインターコミュニケータ

集団通信

- コミュニケータで指定される全プロセス間でのメッセージ通信
- バリア同期（データ転送なし）
- 大域データ通信
  - 放送（broadcast），ギャザ（gather），スキャタ（scatter），全プロセスへのギャザ（allgather），転置（alltoall）
- 縮約通信（リダクション）
  - 縮約（総和，最大値など），スキャン（プレフィックス計算）

大域データ通信



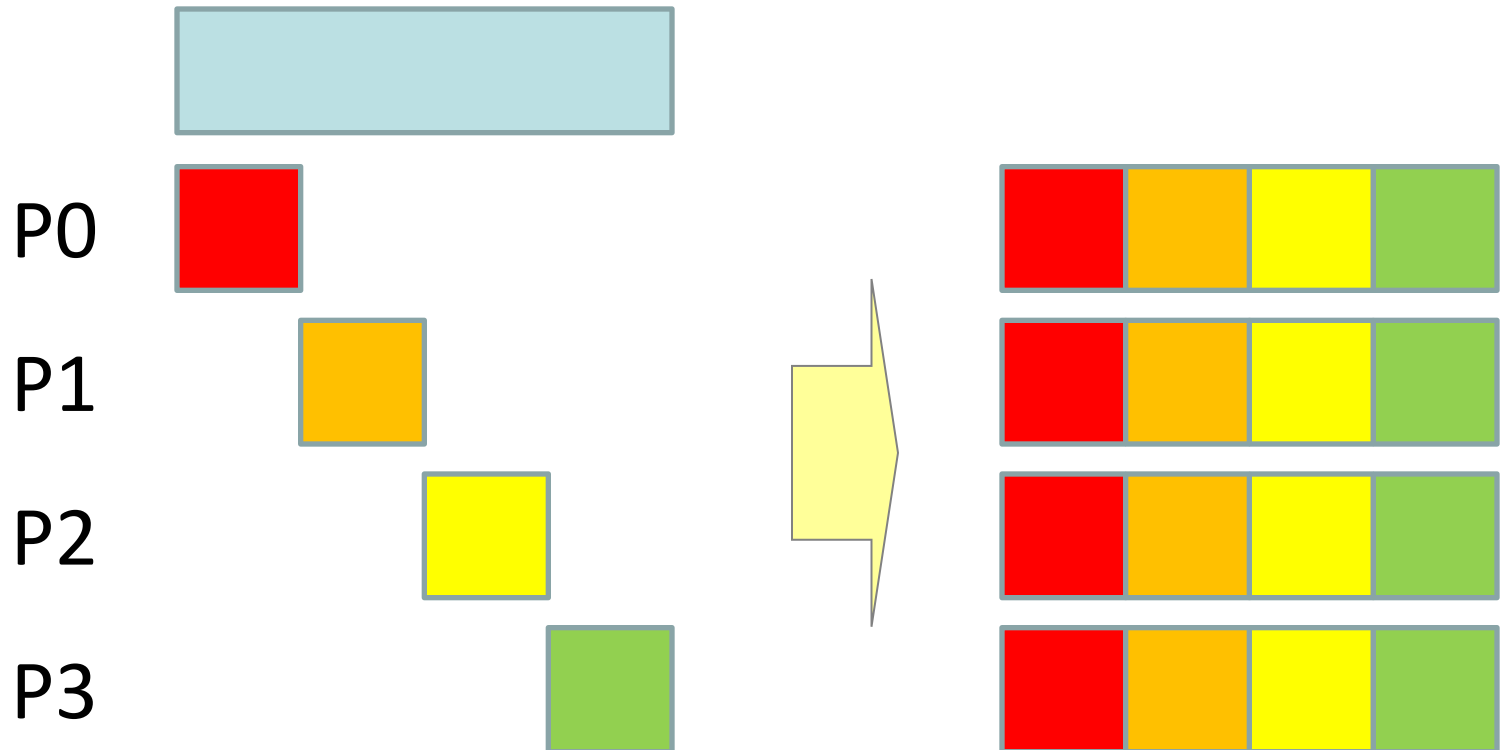
- 放送
  - ルートプロセスのA[*]を全プロセスに転送

- ギャザ
  - プロセス間で分散した部分配列を特定プロセスに集める
  - allgatherは全プロセスに集める

- スキャタ
  - ルートプロセスのA[*]をプロセス間で分散させる
- Alltoall
  - 二次元配列A[分散][*]→A^T[分散][*]

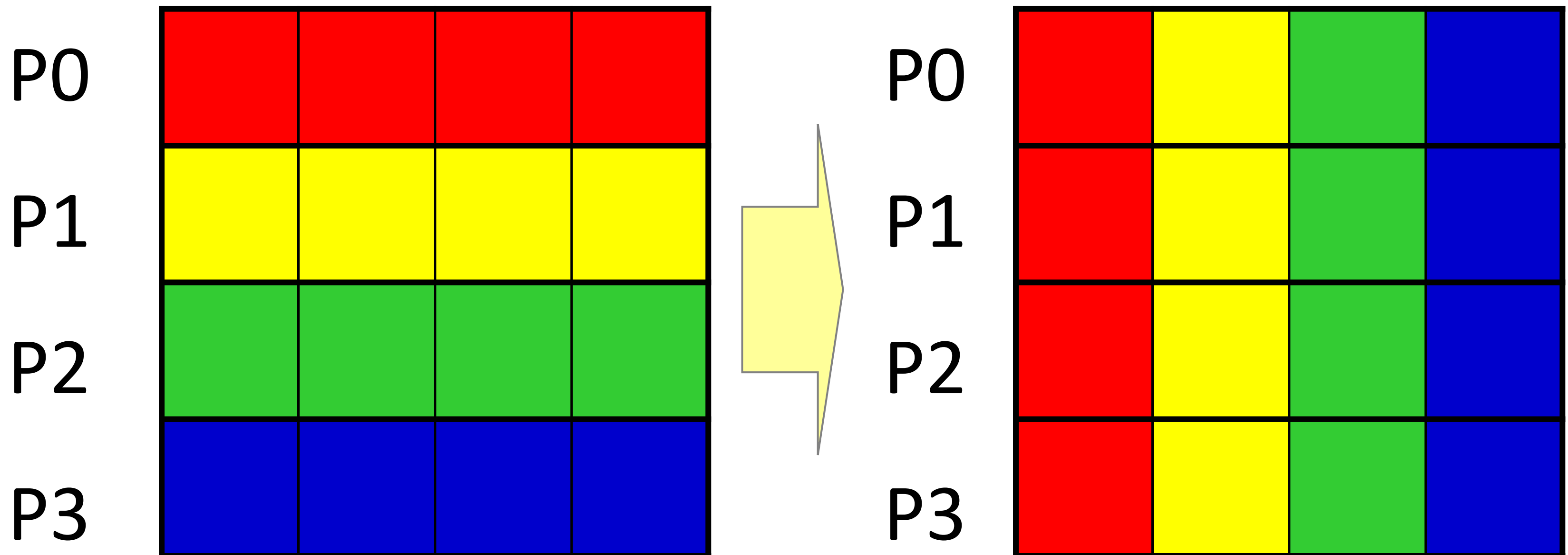
allgather

- 各プロセスの部分配列を集めて全プロセスで全体配列とする



alltoall

- （行方向に）分散した2次元配列を転置する



1対1通信

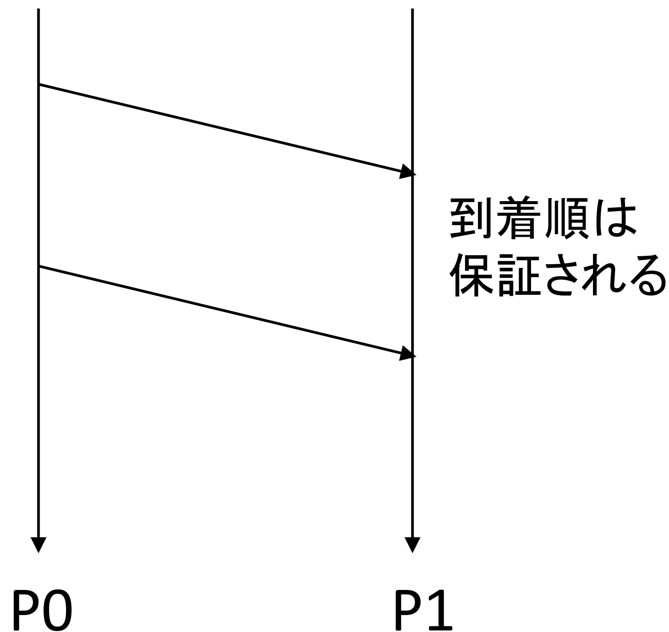
- Point-to-Point通信とも呼ばれる
- プロセスのペア間でのデータ転送
  - プロセスAはプロセスBにデータを送信（send）
  - プロセスBは（プロセスAから）データを受信（recv）
- 型の付いたデータを転送
  - 基本データ型，配列，構造体，ベクタ，ユーザ定義データ型
- コミュニケータ，メッセージタグ，送受信プロセスランクでsendとrecvの対応を決定

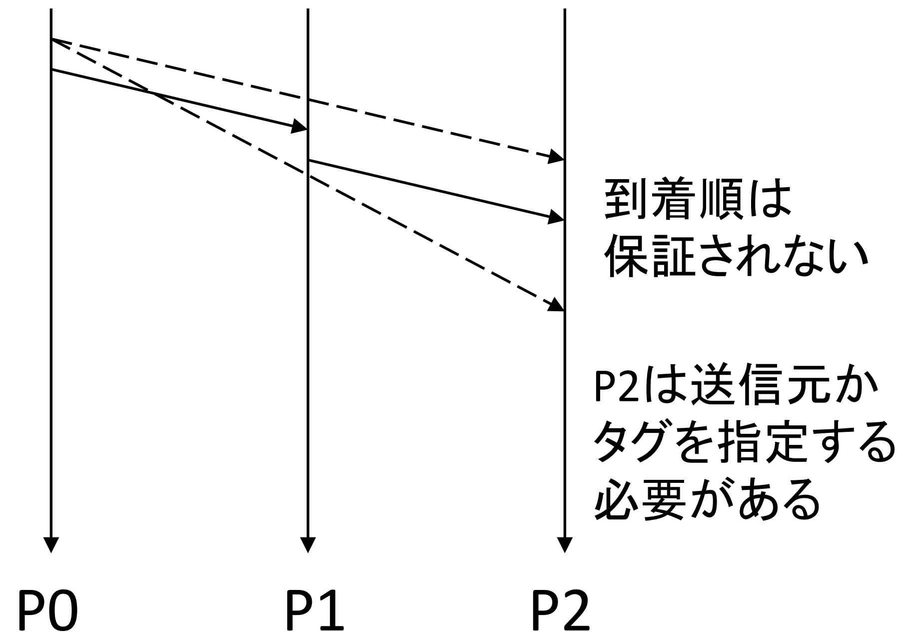
1対1通信（2）

- ブロック型通信
  - 送信バッファが再利用可能となったら送信終了
  - 受信バッファが利用可能となったら受信終了
- MPI_Send(A, . . .)が戻ってきたらAを変更しても良い
  - 同一プロセスの通信用のバッファにコピーされただけかも
  - メッセージの送信は保証されない

1対1通信の注意点（1）

- メッセージ到着順
  - （2者間では）メッセージは追い越されない
  - 3者間以上では追い越される可能性がある





1対1通信の注意点（2）

- 公平性
  - 通信処理において公平性は保証されない
  - P1とP2がP0にメッセージ送信
  - P0は送信元を指定しないで受信を複数発行
    - P0はP2からのメッセージばかり受信し，P1からのメッセージがstarvationを引き起こす可能性がある

非ブロック型1対1通信

- 非ブロック型通信
  - post-send, complete-send
  - post-receive, complete-receive
- Post-{send,recv}で送信受信操作を開始
- Complete-{send,recv}で完了待ち
- 計算と通信のオーバラップを可能に
  - マルチスレッドでも可能だが，しばしばより効率的

1対1通信の通信モード

- ブロック型，非ブロック型通信のそれぞれに以下の通信モードがある
  - 標準モード
    - 実装依存
  - バッファモード
    - 送信メッセージはバッファリングされる
    - 送信はローカルに終了
  - 同期モード
    - ランデブー
  - Readyモード
    - 受信が既に発行されていることが保証されている場合

並列処理の例（1）：ホスト名表示

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

int
main(int argc, char *argv[])
{
        int rank, len;
        char name[MPI_MAX_PROCESSOR_NAME];

        MPI_Init(&argc, &argv);
        MPI_Comm_rank(MPI_COMM_WORLD, &rank);
        MPI_Get_processor_name(name, &len);
        printf("%03d %s¥n", rank, name);
        MPI_Finalize();
        return (0);
}
```

解説

- mpi.hをインクルード

- 各プロセスはmainからプログラムが実行
- SPMD (single program, multiple data)
  - 単一のプログラムを各ノードで実行
  - 各プログラムは違うデータ(つまり、実行されているプロセスのデータ)をアクセスする

- 初期化
  - **MPI_Init**

解説（続き）

- プロセスランク番号の取得
  - **MPI_Comm_rank**(MPI_COMM_WORLD, &rank);
  - コミュニケータMPI_COMM_WORLDに対し，自ランクを取得
  - コミュニケータはopaqueオブジェクト，内容は関数でアクセス
- ノード名を取得
  - **MPI_Get_processor_name**(name, &len);
- 最後にexitの前で、全プロセッサで！

  MPI_Finalize();

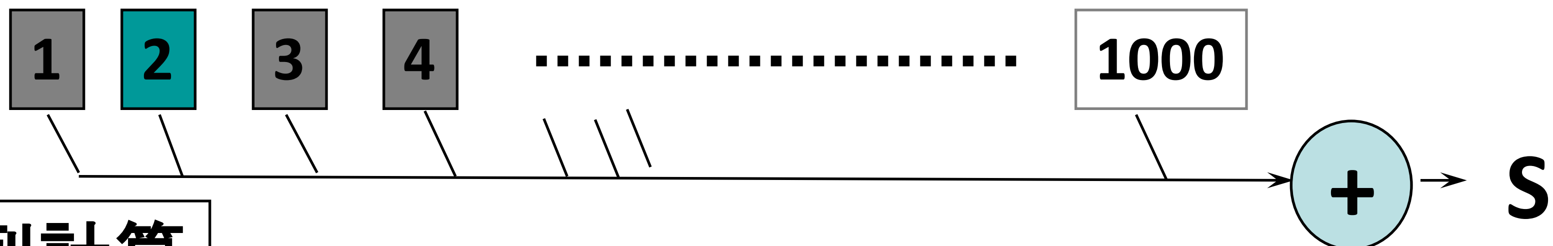
コミュニケータに対する操作

- int **MPI_Comm_size**(MPI_Comm comm, int *size);
- コミュニケータcommのプロセスグループの総数をsizeに返す
- int **MPI_Comm_rank**(MPI_Comm comm, int *rank);
- コミュニケータcommのプロセスグループにおける自プロセスのランク番号をrankに返す

並列処理の例(２)：総和計算

```
for (i = 0; i < 1000; i++)
    S += A[i]
```

逐次計算



並列計算

1 2 250
251 500
501 750
751 1000
+ + + +
プロセッサ１
プロセッサ２
プロセッサ３
プロセッサ４
+
S

```c
#include <mpi.h>

double A[1000 / N_PE];

int main(int argc, char *argv[])
{
   double sum, mysum;

   MPI_Init(&argc,&argv);
   mysum = 0.0;
   for (i = 0; i < 1000 / N_PE; i++)
         mysum += A[i];
   MPI_Reduce(&mysum, &sum, 1, MPI_DOUBLE,
         MPI_SUM, 0, MPI_COMM_WORLD);
   MPI_Finalize();
   return (0);
}
```

解説

- 宣言されたデータは各プロセッサで重複して取られる
  - 1プロセスではプロセス数N_PEで割った分を確保
- 計算・通信
  - 各プロセッサで部分和を計算して、集計
  - コレクティブ通信
  - **MPI_Reduce**(&mysum, &sum, 1, MPI_DOUBLE,
  - MPI_SUM, 0, MPI_COMM_WORLD);
  - コミュニケータはMPI_COMM_WORLDを指定
  - 各プロセスのMPI_DOUBLEの要素数1のmysumに対し
  - リダクションのタイプはMPI_SUM，結果はランク0のsumに

並列処理の例（3）：Cpi

- 積分して、円周率を求めるプログラム
- MPICHのテストプログラム
  - 変数nの値をBcast
  - 最後にreduction
  - 計算は、プロセスごとに飛び飛びにやっている

$$\pi = \int_0^1 \frac{4}{1+t^2}\, dt$$

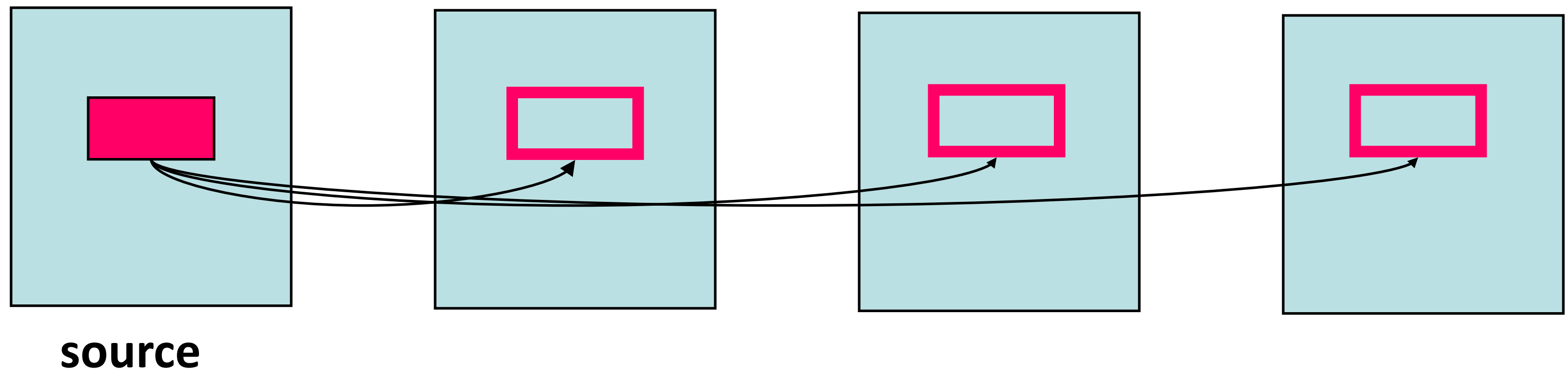
```
…
MPI_Bcast(&n, 1, MPI_INT, 0, MPI_COMM_WORLD);

h = 1.0 / n;
sum = 0.0;
for (i = myid + 1; i <= n; i += numprocs){
      x = h * (i - 0.5);
      sum += f(x);
}
mypi = h * sum;

MPI_Reduce(&mypi, &pi, 1, MPI_DOUBLE,
          MPI_SUM, 0, MPI_COMM_WORLD);
```

集団通信: ブロードキャスト

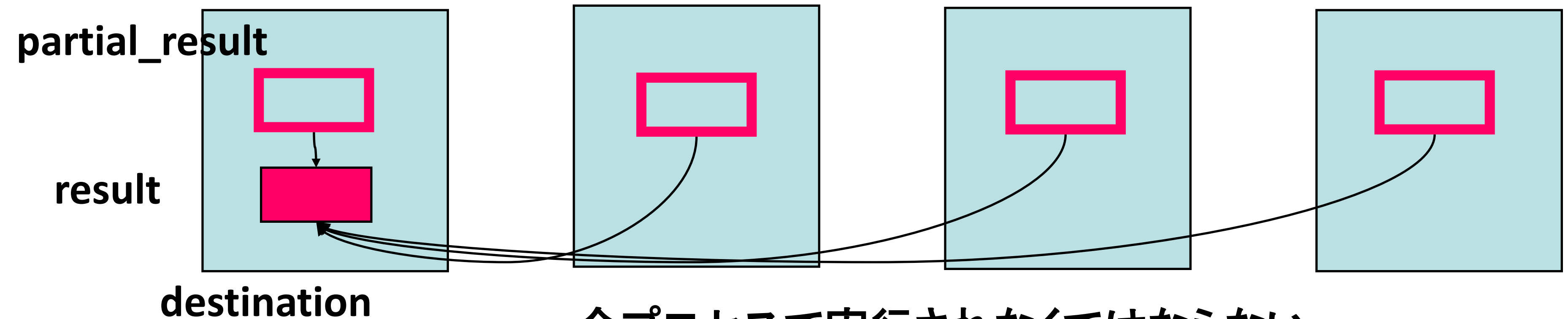
```
MPI_Bcast(
  void         *data_buffer,   // ブロードキャスト用送受信バッファのアドレス
  int          count,          // ブロードキャストデータの個数
  MPI_Datatype data_type,      // ブロードキャストデータの型(*1)
  int          source,         // ブロードキャスト元プロセスのランク
  MPI_Comm     communicator    // 送受信を行うグループ
);
```



全プロセスで実行されなくてはならない

集団通信: リダクション

```
MPI_Reduce(
  void        *partial_result, // 各ノードの処理結果が格納されているアドレス
  void        *result,          // 集計結果を格納するアドレス
  int          count,            // データの個数
  MPI_Datatype data_type,       // データの型(*1)
  MPI_Op       operator,        // リデュースオペレーションの指定(*2)
  int          destination,     // 集計結果を得るプロセス
  MPI_Comm     communicator     // 送受信を行うグループ
);
```



全プロセスで実行されなくてはならない

Resultを全プロセスで受け取る場合は、MPI_Allreduce

```
/* cpi mpi version */
#include <stdlib.h>
#include <stdio.h>
#include <math.h>
#include <mpi.h>

double
f(double a)
{
	return (4.0 / (1.0 + a * a));
}

int
main(int argc, char *argv[])
{
	int n = 0, myid, numprocs, i;
	double PI25DT = 3.141592653589793238462643;
	double mypi, pi, h, sum, x;
	double startwtime = 0.0, endwtime;
	int namelen;
	char processor_name[MPI_MAX_PROCESSOR_NAME];
```

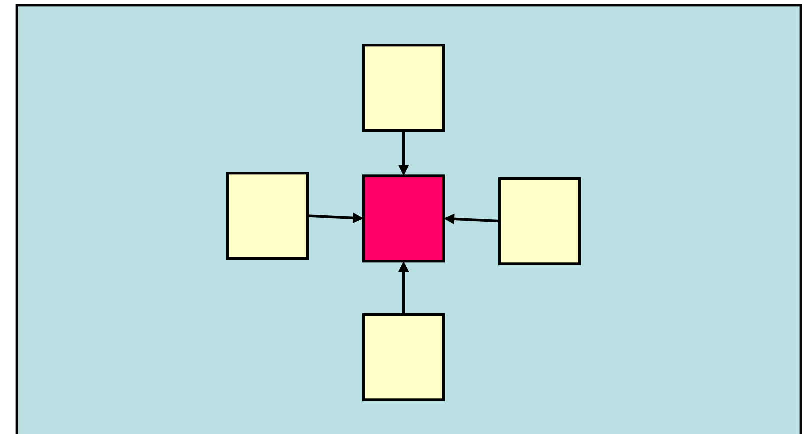
```
MPI_Init(&argc, &argv);
MPI_Comm_size(MPI_COMM_WORLD, &numprocs);
MPI_Comm_rank(MPI_COMM_WORLD, &myid);
MPI_Get_processor_name(processor_name, &namelen);
fprintf(stderr, "Process %d on %s¥n", myid, processor_name);

if (argc > 1)
	n = atoi(argv[1]);
startwtime = MPI_Wtime();
/* broadcast 'n' */
MPI_Bcast(&n, 1, MPI_INT, 0, MPI_COMM_WORLD);
if (n <= 0) {
	fprintf(stderr, "usage: %s #partition¥n", *argv);
	MPI_Abort(MPI_COMM_WORLD, 1);
}
```

```
    /* calculate each part of pi */
    h = 1.0 / n;
    sum = 0.0;
    for (i = myid + 1; i <= n; i += numprocs){
        x = h * (i - 0.5);
        sum += f(x);
    }
    mypi = h * sum;
    /* sum up each part of pi */
    MPI_Reduce(&mypi, &pi, 1, MPI_DOUBLE, MPI_SUM, 0, MPI_COMM_WORLD);
    if (myid == 0) {
        printf("pi is approximately %.16f, Error is %.16f¥n",
            pi, fabs(pi - PI25DT));
        endwtime = MPI_Wtime();
        printf("wall clock time = %f¥n",
            endwtime - startwtime);
    }
    MPI_Finalize();
    return (0);
}
```

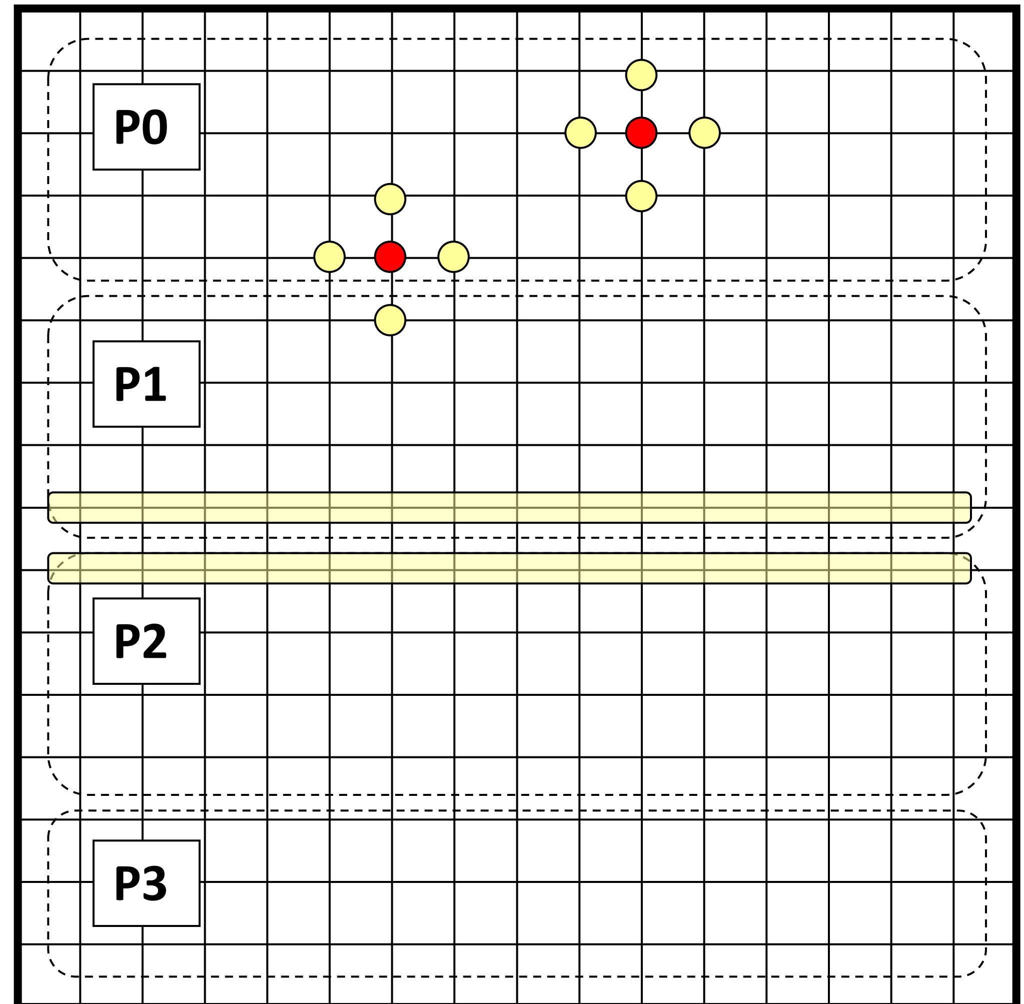
並列処理の例（4）: laplace

- Laplace方程式の陽的解法
  - 上下左右の4点の平均で、updateしていくプログラム
  - Oldとnewを用意して直前の値をコピー
  - 典型的な領域分割
  - 最後に残差をとる



行列分割と隣接通信

- 二次元領域をブロック分割
- 境界の要素は隣のプロセスが更新
- 境界データを隣接プロセスに転送



ブロック型1対1通信

- Send/Receive

```
MPI_Send(
  void         *send_data_buffer, // 送信データが格納されているメモリのアドレス
  int          count,             // 送信データの個数
  MPI_Datatype data_type,         // 送信データの型(*1)
  int          destination,       // 送信先プロセスのランク
  int          tag,               // 送信データの識別を行うタグ
  MPI_Comm     communicator       // 送受信を行うグループ.
);
```

```
MPI_Recv(
  void         *recv_data_buffer, // 受信データが格納されるメモリのアドレス
  int          count,             // 受信データの個数
  MPI_Datatype data_type,         // 受信データの型(*1)
  int          source,            // 送信元プロセスのランク
  int          tag,               // 受信データの識別を行うためのタグ.
  MPI_Comm     communicator,      // 送受信を行うグループ.
  MPI_Status   *status            // 受信に関する情報を格納する変数のアドレス
);
```

メッセージ通信

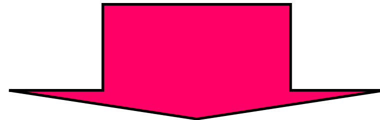
- メッセージはデータアドレスとサイズ
  - 型がある MPI_INT, MPI_DOUBLE, …
  - Binaryの場合は、MPI_BYTEで、サイズにbyte数を指定
- Source/destinationは、プロセス番号（rank）とタグを指定
  - 送信元を指定しない場合はMPI_ANY_SOURCEを指定
  - 同じタグを持っているSendとRecvがマッチ
  - どのようなタグでもRecvしたい場合はMPI_ANY_TAGを指定
- Statusで，実際に受信したメッセージサイズ，タグ，送信元などが分かる

非ブロック型通信

- Send/recvを実行して、後で終了をチェックする通信方法
  - 通信処理が裏で行える場合は計算と通信処理のオーバラップが可能

```
int MPI_Isend( void *buf, int count, MPI_Datatype datatype,
      int dest, int tag,   MPI_Comm comm, MPI_Request *request )
```

```
int MPI_Irecv( void *buf, int count, MPI_Datatype datatype,
 int source, int tag, MPI_Comm comm, MPI_Request *request )
```



```
int MPI_Wait ( MPI_Request *request, MPI_Status *status)
```

プロセストポロジ

- int **MPI_Cart_create**(MPI_Comm comm_old, int ndims, int *dims, int *periods, int reorder, MPI_Comm *comm_cart);
- ndims次元のハイパーキューブのトポロジをもつコミュニケータcomm_cartを作成
- dimsはそれぞれの次元のプロセス数
- periodsはそれぞれの次元が周期的かどうか
- reorderは新旧のコミュニケータでrankの順番を変更するかどうか

シフト通信の相手先

- int **MPI_Cart_shift**(MPI_Comm comm, int direction, int disp, int *rank_source, int *rank_dest);
- directionはシフトする次元
  - ndims次元であれば0～ndims-1
- dispだけシフトしたとき，受け取り先がrank_source，送信先がrank_destに返る
- 周期的ではない場合，境界を超えるとMPI_PROC_NULLが返される

```
/* calculate process ranks for 'down' and 'up' */
MPI_Cart_shift(comm, 0, 1, &down, &up);

/* recv from down */
MPI_Irecv(&uu[x_start-1][1], YSIZE, MPI_DOUBLE, down, TAG_1,
          comm, &req1);
/* recv from up */
MPI_Irecv(&uu[x_end][1], YSIZE, MPI_DOUBLE, up, TAG_2,
          comm, &req2);

/* send to down */
MPI_Send(&u[x_start][1], YSIZE, MPI_DOUBLE, down, TAG_2, comm);
/* send to up */
MPI_Send(&u[x_end-1][1], YSIZE, MPI_DOUBLE, up, TAG_1, comm);

MPI_Wait(&req1, &status1);
MPI_Wait(&req2, &status2);
```

端（0とnumprocs-1)のプロセッサについてはMPI_PROC_NULLが指定され
特別な処理は必要ない

```c
/*
 * Laplace equation with explict method
 */
#include <stdio.h>
#include <stdlib.h>
#include <math.h>
#include <mpi.h>

/* square region */
#define XSIZE 256
#define YSIZE 256
#define PI 3.1415927
#define NITER 10000
double u[XSIZE + 2][YSIZE + 2], uu[XSIZE + 2][YSIZE + 2];
double time1, time2;
void lap_solve(MPI_Comm);
int myid, numprocs;
int namelen;
char processor_name[MPI_MAX_PROCESSOR_NAME];
int xsize;
```

二次元対象領域
uuは更新用配列

```
void
initialize()
{
	int x, y;

	/* 初期値を設定 */
	for (x = 1; x < XSIZE + 1; x++)
		for (y = 1; y < YSIZE + 1; y++)
			u[x][y] = sin((x - 1.0) / XSIZE * PI) +
				cos((y - 1.0) / YSIZE * PI);
	/* 境界をゼロクリア */
	for (x = 0; x < XSIZE + 2; x++) {
		u [x][0] = u [x][YSIZE + 1] = 0.0;
		uu[x][0] = uu[x][YSIZE + 1] = 0.0;
	}
	for (y = 0; y < YSIZE + 2; y++) {
		u [0][y] = u [XSIZE + 1][y] = 0.0;
		uu[0][y] = uu[XSIZE + 1][y] = 0.0;
	}
}
```

```
#define TAG_1 100
#define TAG_2 101

#ifndef FALSE
#define FALSE 0
#endif

void lap_solve(MPI_Comm comm)
{
	int x, y, k;
	double sum;
	double t_sum;
	int x_start, x_end;
	MPI_Request req1, req2;
	MPI_Status status1, status2;
	MPI_Comm comm1d;
	int down, up;
	int periods[1] = { FALSE };
```

```
/*
 * Create one dimensional cartesian topology with
 * nonperiodical boundary
 */
MPI_Cart_create(comm, 1, &numprocs, periods, FALSE, &comm1d);
/* calculate process ranks for 'down' and 'up' */
MPI_Cart_shift(comm1d, 0, 1, &down, &up);

x_start = 1 + xsize * myid;
x_end = 1 + xsize * (myid + 1);
```

- Comm1dを1次元トポロジで作成
  - 境界は周期的ではない
- 上下のプロセス番号をup, downに取得
  - 境界ではMPI_PROC_NULLとなる

```
for (k = 0; k < NITER; k++){
    /* old <- new */
    for (x = x_start; x < x_end; x++)
        for (y = 1; y < YSIZE + 1; y++)
            uu[x][y] = u[x][y];

    /* recv from down */
    MPI_Irecv(&uu[x_start - 1][1], YSIZE, MPI_DOUBLE,
              down, TAG_1, comm1d, &req1);
    /* recv from up */
    MPI_Irecv(&uu[x_end][1], YSIZE, MPI_DOUBLE,
              up, TAG_2, comm1d, &req2);
    /* send to down */
    MPI_Send(&u[x_start][1], YSIZE, MPI_DOUBLE,
             down, TAG_2, comm1d);
    /* send to up */
    MPI_Send(&u[x_end - 1][1], YSIZE, MPI_DOUBLE,
             up, TAG_1, comm1d);

    MPI_Wait(&req1, &status1);
    MPI_Wait(&req2, &status2);
```

```
        /* update */
        for (x = x_start; x < x_end; x++)
                for (y = 1; y < YSIZE + 1; y++)
                        u[x][y] = .25 * (uu[x - 1][y] + uu[x + 1][y] +
                                        uu[x][y - 1] + uu[x][y + 1]);
    }
    /* check sum */
    sum = 0.0;
    for (x = x_start; x < x_end; x++)
        for (y = 1; y < YSIZE + 1; y++)
                sum += uu[x][y] - u[x][y];
    MPI_Reduce(&sum, &t_sum, 1, MPI_DOUBLE, MPI_SUM, 0, comm1d);
    if (myid == 0)
        printf("sum = %g¥n", t_sum);
    MPI_Comm_free(&comm1d);
}
```

```
int
main(int argc, char *argv[])
{
	MPI_Init(&argc, &argv);
	MPI_Comm_size(MPI_COMM_WORLD, &numprocs);
	MPI_Comm_rank(MPI_COMM_WORLD, &myid);
	MPI_Get_processor_name(processor_name, &namelen);
	fprintf(stderr, "Process %d on %s¥n", myid, processor_name);

	xsize = XSIZE / numprocs;
	if ((XSIZE % numprocs) != 0)
		MPI_Abort(MPI_COMM_WORLD, 1);
	initialize();
	MPI_Barrier(MPI_COMM_WORLD);
	time1 = MPI_Wtime();
	lap_solve(MPI_COMM_WORLD);
	MPI_Barrier(MPI_COMM_WORLD);
	time2 = MPI_Wtime();
	if (myid == 0)
		printf("time = %g¥n", time2 - time1);
	MPI_Finalize();
	return (0);
}
```

改善すべき点

- 配列の一部しか使っていないので、使うところだけにする
  - 配列のindexの計算が面倒になる
  - 大規模計算では本質的な点
- １次元分割だけだが、２次元分割したほうが効率がよい
  - 通信量が減る
  - 多くのプロセッサが使える

MPIとOpenMPの混在プログラミング

- 分散メモリはMPIで、中のSMPはOpenMPで
- MPI+OpenMP
  - はじめにMPIのプログラムを作る
  - 並列にできるループを並列実行指示文を入れる
    - 並列部分はSMP上で並列に実行される。
- OpenMP+MPI
  - OpenMPによるマルチスレッドプログラム
  - single構文・master構文・critical構文内で、メッセージ通信を行う。
    - Thread-safeなMPIが必要
    - いくつかの点で、動作の定義が不明な点がある
      - マルチスレッド環境でのMPI
      - OpenMPのthreadprivate変数の定義？
- SMP内でデータを共用することができるときに効果がある。
  - 必ずしもそうならないことがある（メモリバス容量の問題？）

おわりに

- これからの高速化には、並列化は必須

- １６プロセッサぐらいでよければ、OpenMP
- それ以上になれば、MPIが必須
  - だだし、プログラミングのコストと実行時間のトレードオフか
  - 長期的には、MPIに変わるプログラミング言語が待たれる

- 科学技術計算の並列化はそれほど難しくない
  - 内在する並列性がある
  - 大体のパターンが決まっている
  - 並列プログラムの「デザインパターン」
  - 性能も…

Coins環境における並列処理

- viola0[1-6].coins.tsukuba.ac.jp
  - 8コア/ノード、6ノード
    - 2.93GHz Nehalem×2ソケット
  - 12GBメモリ/ノード
    - 1333MHz 2GB DDR3×3チャネル×2
  - ネットワークバンド幅4GB/s
    - 4x QDR Infiniband
  - ソフトウェア
    - CentOS5.4
    - OpenMPI*、MVAPICH1、MVAPICH2
      - デフォルトはOpenMPI、mpi-selector-menuで切替
    - gcc, gfortran, Sun JDK6
    - BLAS, LAPACK, ScaLAPACK

環境設定

- sshでログイン可能に

```
% ssh-keygen –t rsa
% cat .ssh/id_rsa.pub >> .ssh/authorized_keys
```

- Known hostsの作成（viola01-ib0などIB側のホスト名にも）

```
% echo StrictHostKeyChecking no >> .ssh/config
% ssh viola01-ib0 hostname
viola01.coins.tsukuba.ac.jp
% ssh viola02-ib0 hostname
viola02.coins.tsukuba.ac.jp
…
% ssh viola06-ib0 hostname
viola06.coins.tsukuba.ac.jp
```

MPIの選択

- MPIの選択
  - デフォルトはOpenMPI
  - 選択はmpi-selector-menuコマンドで

```
$ mpi-selector-menu
Current system default: openmpi-1.3.2-gcc-x86_64
Current user default:   <none>

    "u" and "s" modifiers can be added to numeric and "U"
    commands to specify "user" or "system-wide".

1. mvapich-1.1.0-gcc-x86_64
2. mvapich2-1.2-gcc-x86_64
3. openmpi-1.3.2-gcc-i386
4. openmpi-1.3.2-gcc-x86_64
U. Unset default
Q. Quit

Selection (1-4[us], U[us], Q): 2u
```

システムデフォルトはOpenMPI、ユーザデフォルトはなし

MVAPICH2を選択

コンパイル

- MPIプログラムのコンパイル

```
% mpicc –O2 a.c
```

- MPIを選択し直した後は、再コンパイルが必要！！！

OpenMPIでの実行

- ホストファイルの作成

```
% cat hosts-openmpi
viola01-ib0 slots=8
viola02-ib0 slots=8
…
viola06-ib0 slots=8
```

- 実行（OpenMPI）

```
% mpirun –hostfile hosts-openmpi –np 48 a.out
```

MVAPICHでの実行

- ホストファイルの作成

```
% cat hosts
viola01-ib0
viola02-ib0
…
viola06-ib0
% cat hosts hosts hosts hosts hosts hosts hosts hosts >
    hosts-mvapich
```

- 実行

```
% mpirun_rsh –hostfile hosts-mvapich –np 48 a.out
```

  – MVAPICHは実行コマンドがmpirun_rshであることに注意！！

Open Sourceな処理系

OpenMP

- GNU GCC 4.2以降

  % cc -fopenmp . . .

- Omni OpenMP Compiler
  - http://phase.hpcc.jp/Omni/
  - 佐藤（三）先生

MPI

- OpenMPI
  - http://www.open-mpi.org/
- MPICH2
  - http://www-unix.mcs.anl.gov/mpi/mpich2/
- YAMPII
  - http://www.il.is.s.u-tokyo.ac.jp/yampii/

コンパイル・実行の仕方

- コンパイル

  % mpicc … test.c …

  - MPI用のコンパイルコマンドがある
  - 手動で-lmpiをリンクすることもできる

- 実行

  % mpiexec –n #procs a.out …

  - a.outが#procsプロセスで実行される
  - 以前の処理系ではmpirunが利用され，de factoとなっているが，ポータブルではない

  % mpirun –np #procs a.out …

  - 実行されるプロセス群はマシン構成ファイルなどで指定する
  - あらかじめデーモンプロセスを立ち上げる必要があるものも