高生産・高性能プログラミングのための並列言語

XcalableMP

佐藤　三久

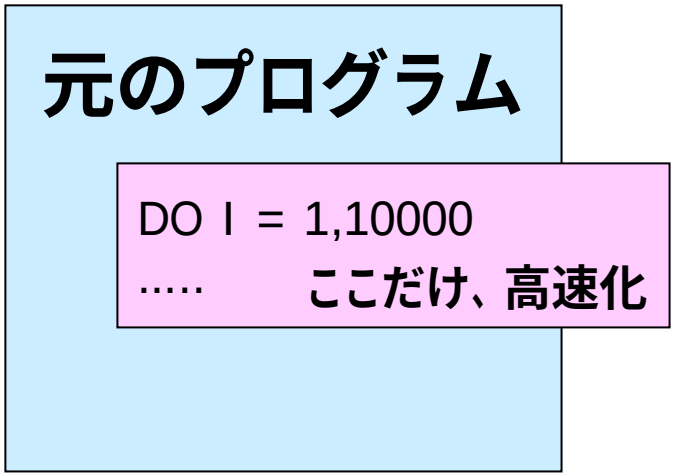
筑波大学　計算科学研究センター

もくじ

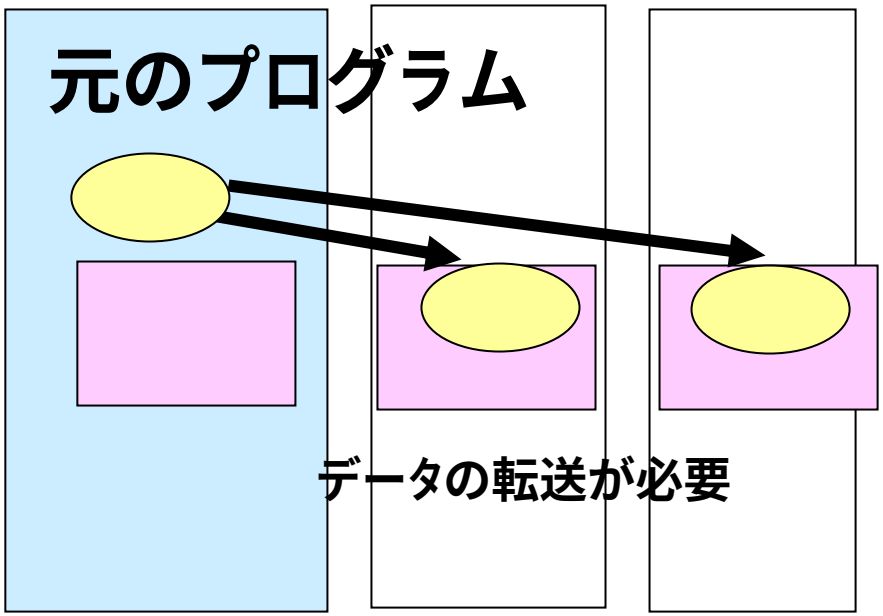
- なぜ、並列化は必要なのか
- XcalableMPプロジェクト について
- XcalableMPの仕様
  - グローバルビューとローカルビュー
  - directives
  - プログラミング例
- HPCC ベンチマークの性能
- まとめ

並列処理の問題点：並列化はなぜ大変か

- ベクトルプロセッサ
  - あるループを依存関係がなくなるように記述
  - ローカルですむ
  - 高速化は数倍



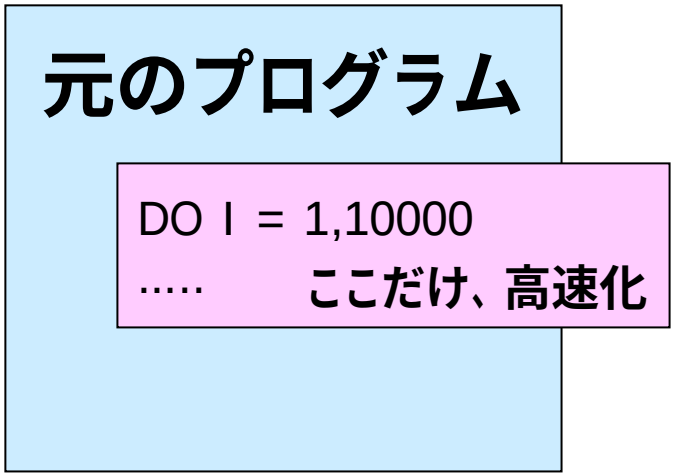
- 並列化
  - 計算の分割だけでなく、通信（データの配置）が本質的
  - データの移動が少なくなるようにプログラムを配置
  - ライブラリ的なアプローチが取りにくい
  - 高速化は数千倍ー数万



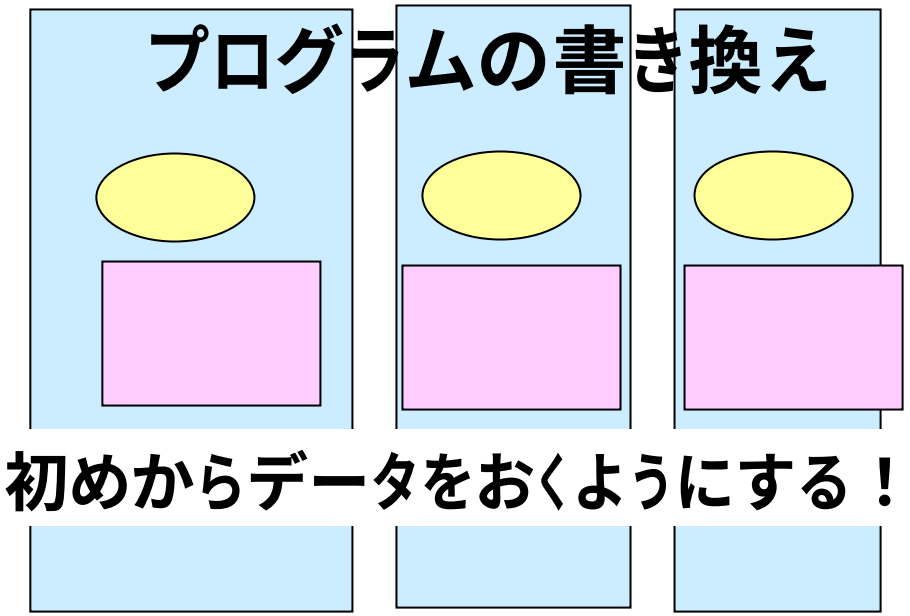
並列処理の問題点：並列化はなぜ大変か

XcalableMP

- ベクトルプロセッサ
  - あるループを依存関係がなくなるように記述
  - ローカルですむ
  - 高速化は数倍

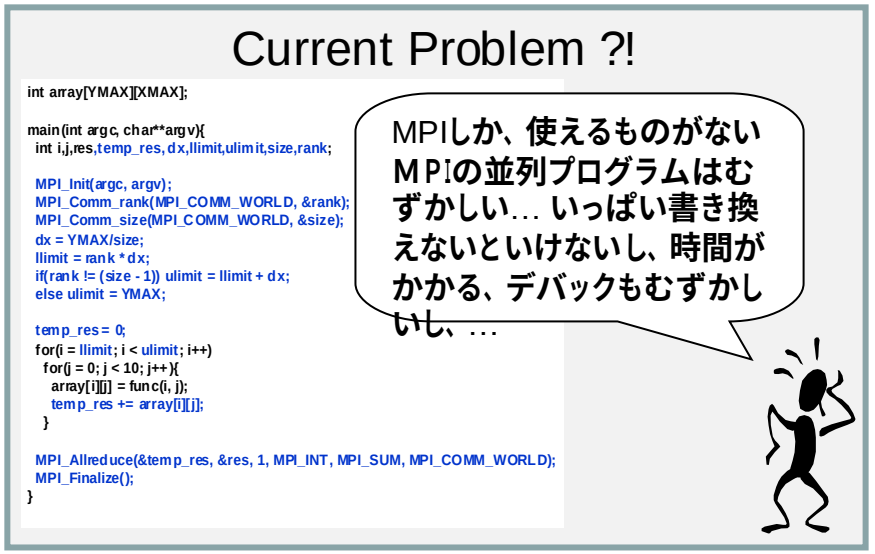


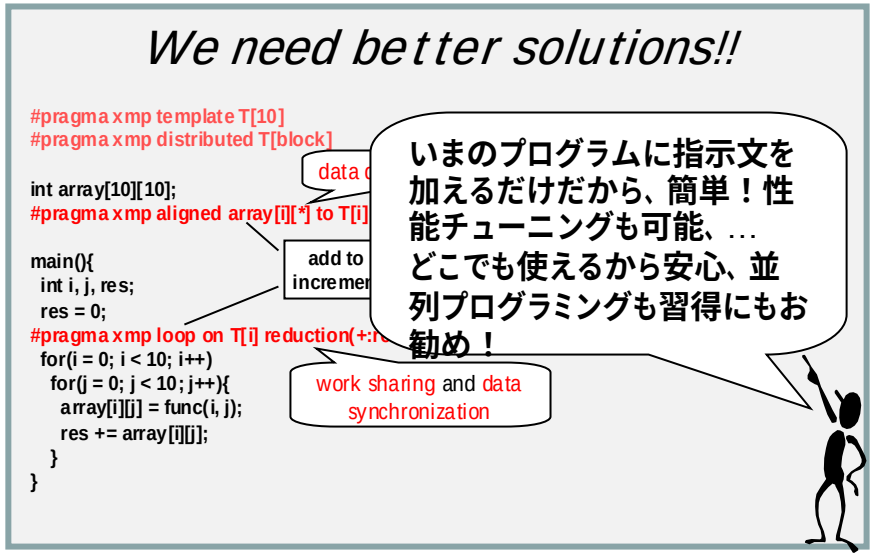
- 並列化
  - 計算の分割だけでなく、通信（データの配置）が本質的
  - データの移動が少なくなるようにプログラムを配置
  - ライブラリ的なアプローチが取りにくい
  - 高速化は数千倍ー数万



e-science XcalableMP プロジェクト

- 現状と課題
  - 並列プログラムの大半はMPI通信ライブラリによるプログラミング
    - 生産性が悪く、並列化のためのコストが高い。
  - 並列プログラミングの教育のための簡便で標準的な言語がない (MPIでの教育にとどまっている)
  - 研究室のPCクラスタから、センター、ペタコンまでに到るスケーラブルかつポータブルな並列プログラミング言語が求められている
- 目標
  - 既存言語を指示文により拡張し、これからの大規模並列システム (分散メモリシステムと共有メモリノード) でのプログラミングを助け、生産性を向上させる並列プログラミング言語を設計・開発する。
  - 標準化をすることを前提に、ユーザのわかりやすさを第一にどこでも使えるということを重視し、開発ならびに普及活動を進める。





“Petascale” 並列プログラミング WG

XcalableMP

- **目的**
  - **“標準的な”並列プログラミングのためのペタスケールを目指した並列プログラミング言語の仕様を策定する**
  - **“標準化”を目指して、**“world-wide” community**に提案する。**
- Members
  - Academia: M. Sato, T. Boku (compiler and system, U. Tsukuba), K. Nakajima (app. and programming, U. Tokyo), Nanri (system, Kyusyu U.), Okabe , Yasugi(HPF, Kyoto U.)
  - Research Lab.: Watanabe and Yokokawa (RIKEN), Sakagami (app. and HPF, NIFS), Matsuo (app., JAXA), Uehara (app., JAMSTEC/ES)
  - Industries: Iwashita and Hotta (HPF and XPFortran, Fujitsu), Murai and Seo (HPF, NEC), Anzaki and Negishi (Hitachi)
- 2007**年12月に**kick-off, **現在、**e-science**プロジェクトの並列プログラミング検討委員会に移行**
- **メーカからのコメント・要望 (活動開始時)**
  - **科学技術アプリケーション向けだけでなく、組み込みのマルチコアでも使えるようなものにするべき。**
  - **国内の標準化だけでなく、**world-wide**な標準を目指す戦略を持つべき**
  - **新しいものをつくるのであれば、既存の並列言語 (**HPF **や**XPFortran**など) からの移行パスを考えてほしい**

並列プログラミング言語：何が問題だったのか

XcalableMP

- HPFの教訓 (by 坂上@核融合研、村井@NEC)
  - 並列性とデータ分散を書いて、自動的に生成するという方針は理想的だったが、必ずしも性能は上がらなかった。期待が大きかった分、失望も大きかった。
  - ベース言語としたF90が未熟だった。Fortranだけだった。
  - 必要な情報をユーザで指示文で補ってもらうという方針だったが、どこをどうすれば最適なコードになるかが明らかでなかった。
  - 自動であるがために、通信がどこでおこっているのか、どうやってチューニングすればいいのか、ユーザに手段が与えられていなかった。
  - 完全性を求めるあまり不必要な仕様があり、実装の障害になっていた。
  - レファレンス実装が不在。教育が考慮されていない。

- ９０年代の並列プログラミング言語
  - 多くはプログラミング言語の研究が主で、実際のアプリで使われることが少なかった。
  - 組織的な普及活動、標準化、教育活動がない。

“petascale” システムのプログラミング言語に要請される要素

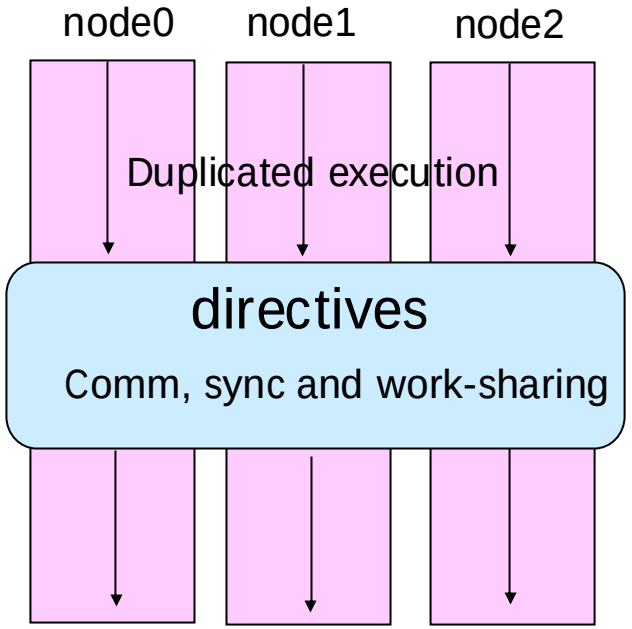
XcalableMP

- Performance
  - **ユーザはMPIと同等の性能を引き出すことができること**
  - **MPIにはない要素も！** – one-sided communication (remote memory copy)
- Expressiveness
  - **ユーザはMPIでのプログラミングと同等のことが、MPIよりも簡単に書けること。**
  - **例えば、**Task parallelism – for multi-physics
- Optimizability
  - **コンパイラの解析や最適化のために構造的な記述を提供すること**
  - **ハードウエアのネットワークトポロジーにマッピングする機能**
- Education cost
  - **ＣＳでないユーザに対して、必ずしも新しくなくてもいいので、実用的な機能を提供すること。**

XcalableMP http://www.xcalablemp.org XcalableMP

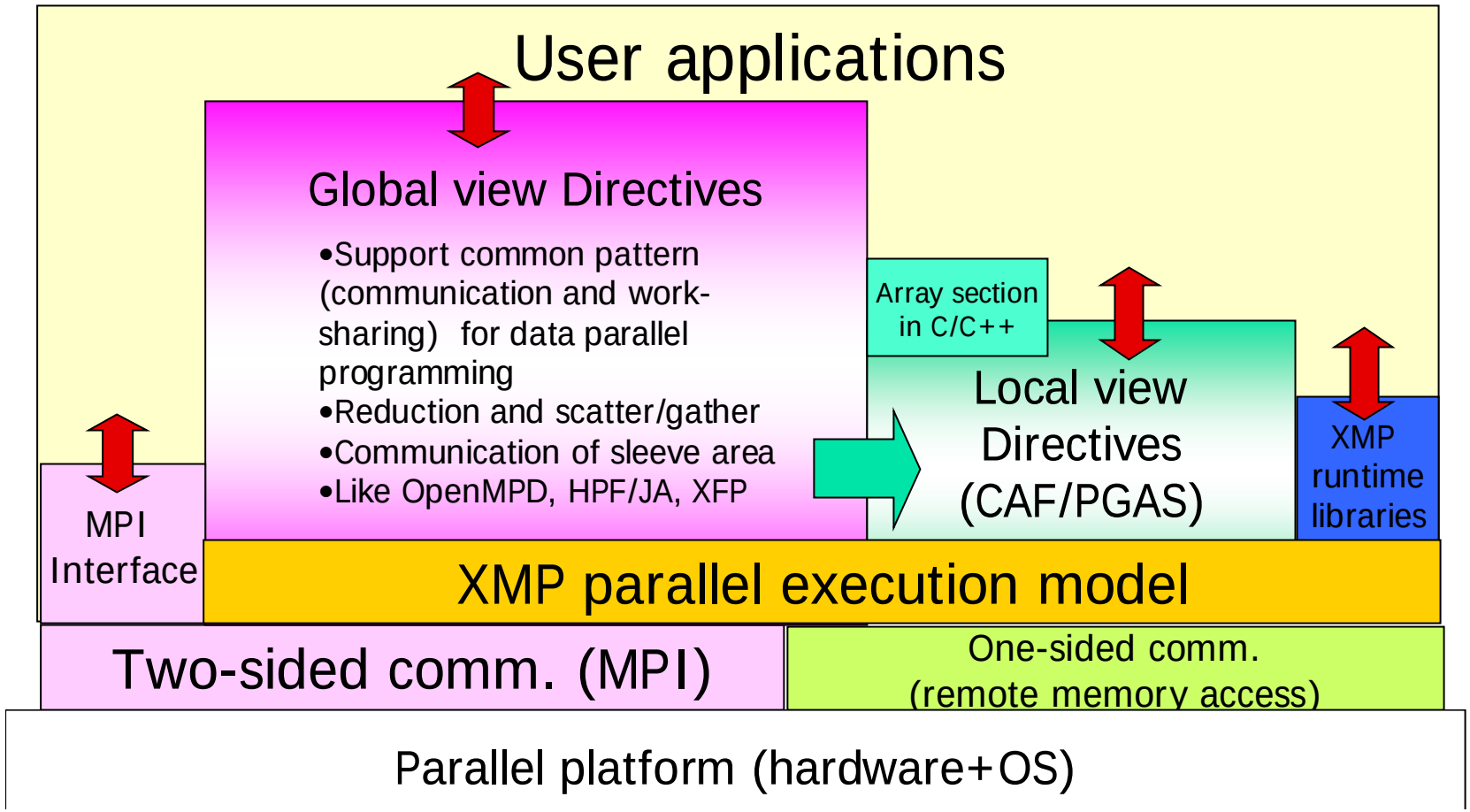
XcalableMP：directive-based language eXtension
for Scalable and performance-tunable Parallel Programming

- Directive-based language extensions for familiar languages F90/C/C++
  - **コードの書き換えや教育のコストを抑えること**
- “Scalable” for Distributed Memory Programming
  - SPMD**が基本的な実行モデル。**
  - MPI**のように、各ノードでスレッドが独立に実行を開始する。**
  - **指示文**(directive)**がなければ、重複実行**
  - **タスク並列のための**MIMD**実行も**
- “performance tunable” for explicit communication and synchronization.
  - **指示文を実行するときに、**Work-sharing **や通信･同期がおきる。**
  - **すべての同期･通信操作は、指示文によって起きる。**HPF**と異なり、パフォーマンスのチューニングがわかりやすくなる。**



Overview of XcalableMP

- XMP **は、グローバルビューのデータ並列と**work sharing**によって、典型的な並列化をサポート**
  - **もとの逐次コードは、**OpenMP**のように指示文で並列化ができる。**
- **これに加えて、ローカルビューとして、**CAF-like PGAS (Partitioned Global Address Space) **機能を提供**



Code Example

```
int array[YMAX][XMAX];

#pragma xmp nodes p(4)
#pragma xmp template t(YMAX)
#pragma xmp distribute t(BLOCK) on p
#pragma xmp align array[i][*] to t(i)

main(){
  int i, j, res;
  res = 0;

#pragma xmp loop on t[i]  reduction(+:res)
  for(i = 0; i < 10; i++)
    for(j = 0; j < 10; j++){
      array[i][j] = func(i, j);
      res += array[i][j];
    }
}
```

data distribution

add to the serial code : incremental parallelization

work sharing and data synchronization

The same code written in MPI

```
int array[YMAX][XMAX];

main(int argc, char**argv){
  int i,j,res,temp_res, dx,llimit,ulimit,size,rank;

  MPI_Init(argc, argv);
  MPI_Comm_rank(MPI_COMM_WORLD, &rank);
  MPI_Comm_size(MPI_COMM_WORLD, &size);
  dx = YMAX/size;
  llimit = rank * dx;
  if(rank != (size - 1)) ulimit = llimit + dx;
  else ulimit = YMAX;

  temp_res = 0;
  for(i = llimit; i < ulimit; i++)
    for(j = 0; j < 10; j++){
      array[i][j] = func(i, j);
      temp_res += array[i][j];
    }

  MPI_Allreduce(&temp_res, &res, 1, MPI_INT, MPI_SUM, MPI_COMM_WORLD);
  MPI_Finalize();
}
```

ノード、テンプレート、データとループの分散

- HPFから、取り入れたアイデア
- ノードは、分散メモリ環境のプロセッサ（複数）とメモリのabstraction.

```
#pragma xmp nodes p(32)
```

- テンプレートとは、ノード上に分散配置されたダミー配列

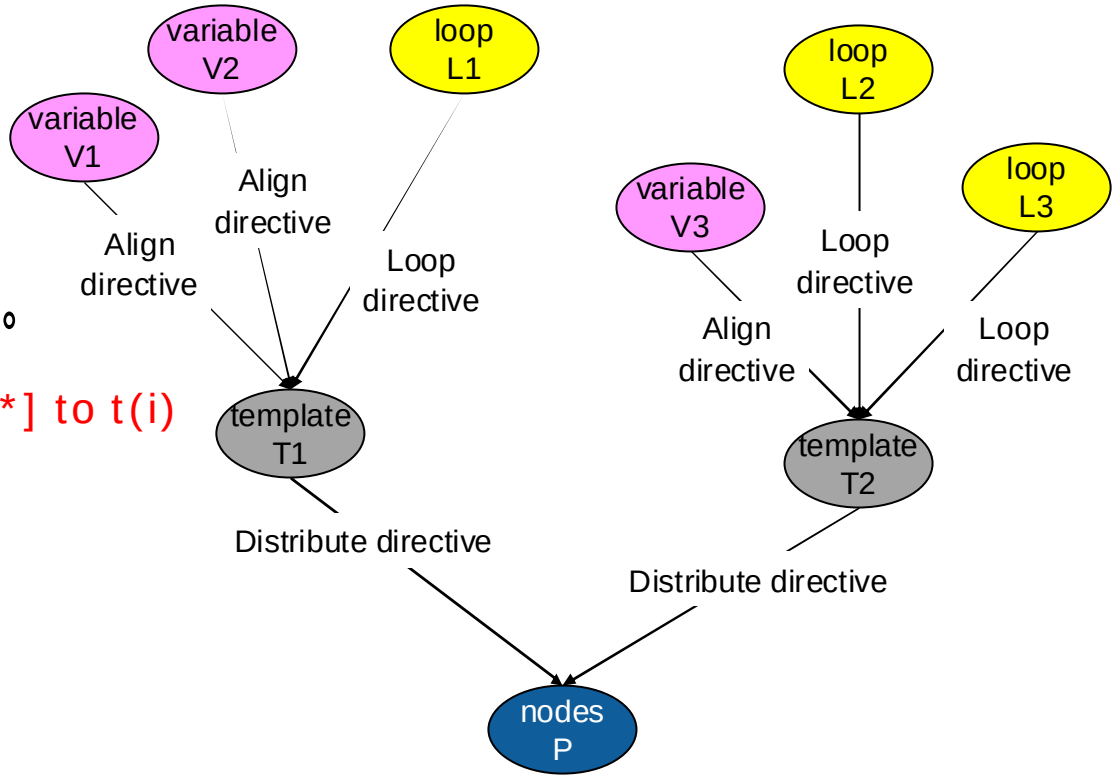
```
#pragma xmp template t(100)
#pragma distribute t(block) on p
```

- 分散されるデータは、テンプレートにalign（整列）する。

```
#pragma xmp distribute array[i][*] to t(i)
```

- ループのiterationも、on節によって、テンプレートにalignする。

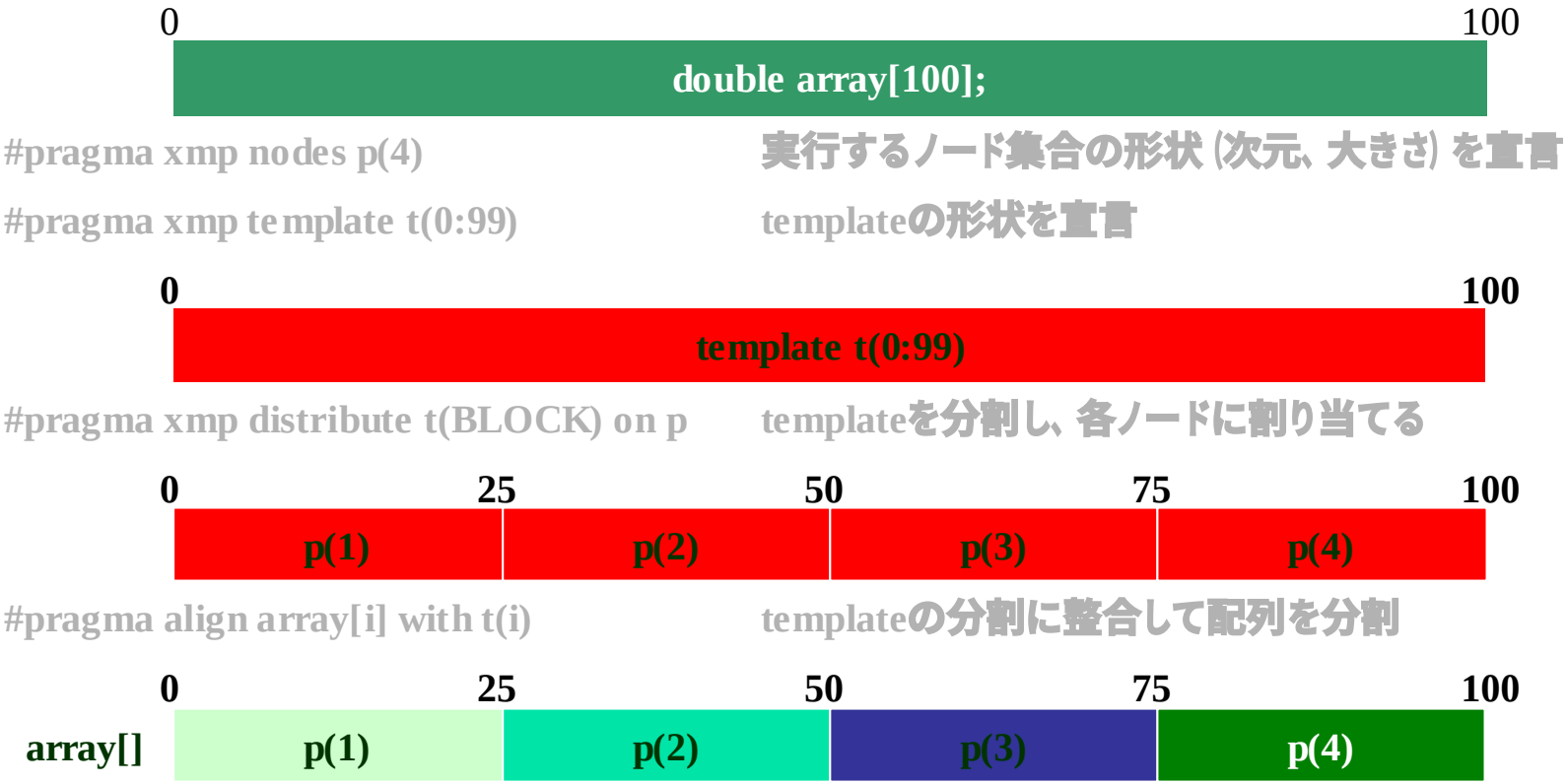
```
#pragma xmp loop on t(i)
```



templateを用いたindex空間の分割

- template
  - index空間を表す仮想的な配列
  - 配列の分割･ループ文の並列実行に用いる

templateを用いた配列の分割

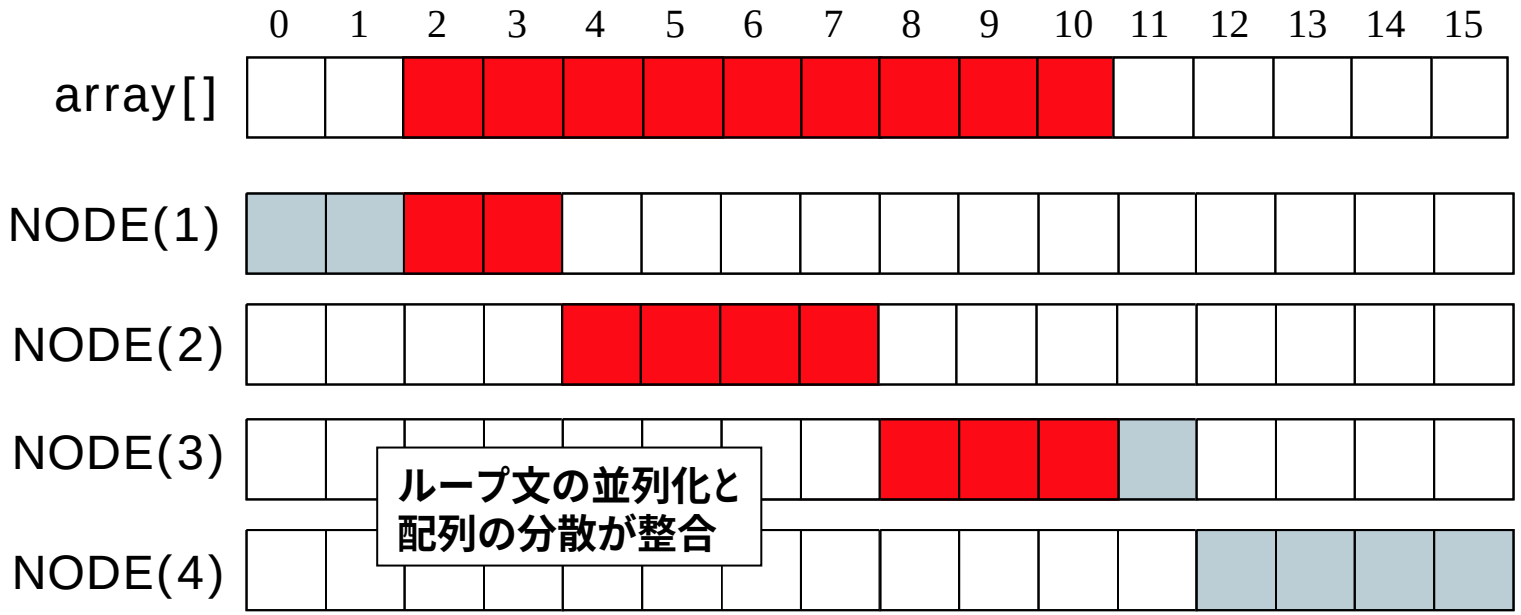


ループ文とタスクの並列実行

- #pragma xmp loop on *template*
  - **ループ文の並列実行をtemplateで指定**
  - **配列の分割と整合しなければならない**

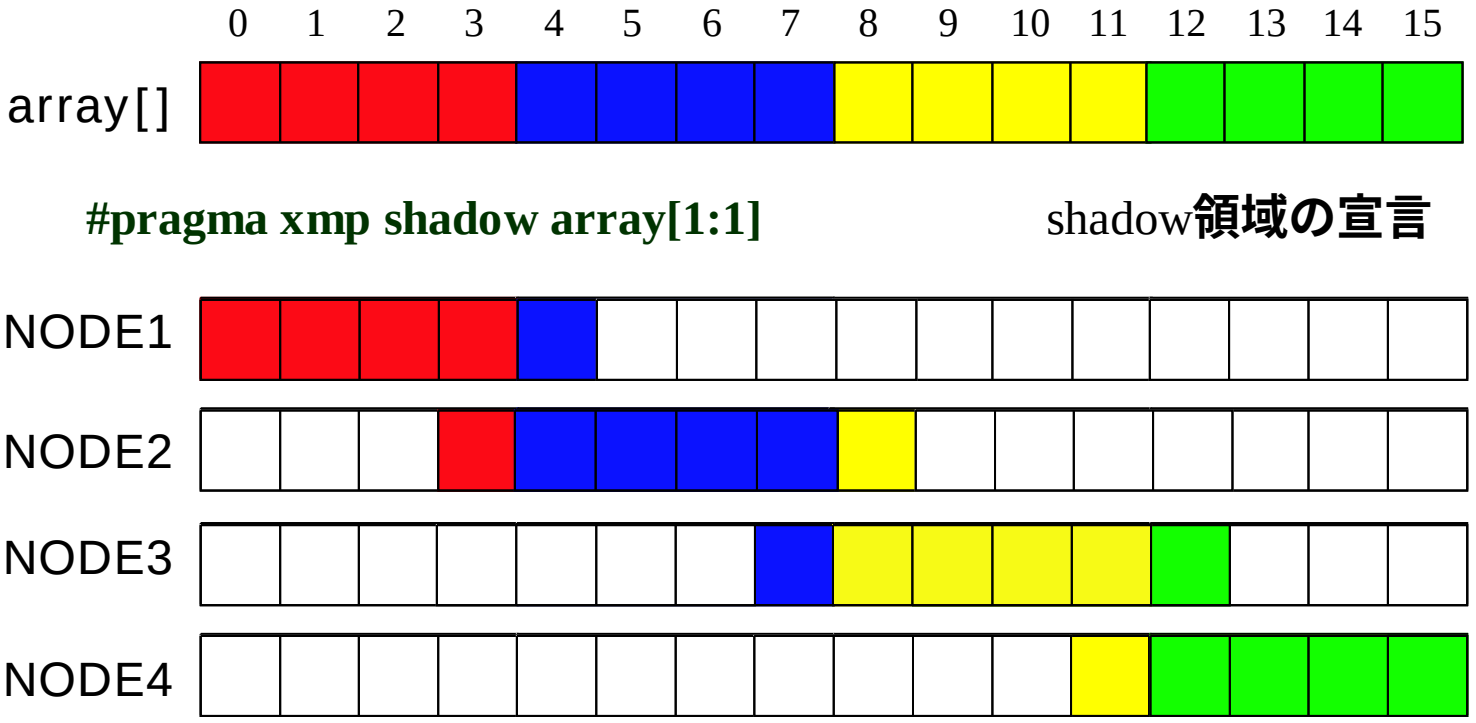
  例) #pragma xmp loop on t(i)

  for(i = 2; i <= 10; i++) array[i] = . . .



配列の重複宣言と同期

- 他のノードに割り当てられた要素を参照
  - XMPではメモリアクセスで常にローカルメモリを参照
  - 配列の重複宣言と同期：shadow, reflect指示文



#pragma xmp shadow array[1:1]　　shadow領域の宣言

#pragma xmp reflect array　　shadow領域の同期

XcalableMP コード例 (laplace, global view)

```
#pragma xmp nodes p[NPROCS]
#pragma xmp template t[1:N]
#pragma xmp distribute t[block] on p

double u[XSIZE+2][YSIZE+2],
       uu[XSIZE+2][YSIZE+2];
#pragma xmp aligned u[i][*] to t[i]
#pragma xmp aligned uu[i][*] to t[i]
#pragma xmp shadow uu[1:1]

lap_main()
{
 int x,y,k;
 double sum;
    …
```

ノードの形状の定義

Templateの定義と
データ分散を定義

データの分散は、
templateにalign
データの同期のための
shadowを定義、この場
合はshadowは袖領域

Work sharing
ループの分散

データの同期

```
for(k = 0; k < NITER; k++){
         /* old <- new */
#pragma xmp loop on t[x]
         for(x = 1; x <= XSIZE; x++)
           for(y = 1; y <= YSIZE; y++)
             uu[x][y] = u[x][y];
#pragma xmp reflect uu
#pragma xmp loop on t[x]
         for(x = 1; x <= XSIZE; x++)
           for(y = 1; y <= YSIZE; y++)
             u[x][y] = (uu[x-1][y] + uu[x+1][y
                  uu[x][y-1] + uu[x][y+1])/4.0
    }
    /* check sum */
    sum = 0.0;
#pragma xmp loop on t[x] reduction(+:sum)
    for(x = 1; x <= XSIZE; x++)
         for(y = 1; y <= YSIZE; y++)
           sum += (uu[x][y]-u[x][y]);
#pragma xmp block on master
    printf("sum = %g¥n",sum);
}
```

XcalableMP コード例 (NPB CG, global view)

```
#pragma xmp nodes p[NPROCS]
#pragma xmp template t[N]
#pragma xmp distributed t[block] on p
...
#pragma xmp aligned [i] to t[i] :: x,z,p,q,r,w
#pragma xmp shadow [*] :: x,z,p,q,r,w
...
```

ノードの形状の定義

Templateの定義とデータ分散を定義

データの分散は、templateにalignデータの同期のためのshadowを定義、この場合はfull shadow

Work sharing
ループの分散

データの同期

```
/* code fragment from conj_grad in NPB CG */
sum = 0.0;
#pragma xmp loop on t[j] reduction(+:sum)
    for (j = 1; j <= lastcol-firstcol+1; j++) {
        sum = sum + r[j]*r[j];
    }
    rho = sum;
for (cgit = 1; cgit <= cgitmax; cgit++) {
#pragma xmp reflect p
#pragma xmp loop on t[j]
        for (j = 1; j <= lastrow-firstrow+1; j++) {
            sum = 0.0;
            for (k = rowstr[j]; k <= rowstr[j+1]-1; k+-
                sum = sum + a[k]*p[colidx[k]];
            }
            w[j] = sum;
        }
#pragma xmp loop on t[j]
        for (j = 1; j <= lastcol-firstcol+1; j++) {
            q[j] = w[j];
        }
```

通信・同期の操作

以下のような通信を指示文で記述することが可能

- #pragma xmp bcast *var* on *node*
  - データのブロードキャスト
- #pragma xmp barrier
  - バリア同期
- #pragma xmp reduction (*var*:*op*)
  - リダクション操作 (総和、最大値の計算など)
- #pragma xmp gmove
  - 直後の代入文がローカル領域ではなく、データが割り当てられたノードの値を参照するように通信を生成

  例)
  ```
  #pragma xmp gmove
  x = array[100];
  ```
  (array[100]が割り当てられたノードからデータを転送する)

XcalableMP (local view)

- Co-Array Fortran
  - **代入文の形式でノード間通信を記述**

例)

```
real dimension a(100)[*]        (Co-array宣言)
. . .
b(:) = a(:)[1]                  (ノード1からデータを転送)
```

Co-array次元

- XcalableMP**では、何も指示をしなければ単なる**SPMD**のプログラム**
  - Local view**では、ノード内のオペレーションを中心に操作。**PGAS (Partitioned Global Address Space) **機能により、他ノードのデータを参照できるようにして最適化を支援**

- XcalableMP**のローカルビュー**
  - CAF**相当の機能を提供**
  - XMP-Fortran：CAF**互換**

```
int A[10]:
int B[5];

A[4:9] = B[0:4];
```

Array section**の導入**

  - XMP-C：coarray**指示文 ＋ 構文拡張**(array section: **部分配列記述**)

  - **片側通信の記述**
    - remote memory access**機能**
      (one-sided**通信**) **をサポート**
  - **より自由な並列化が可能**

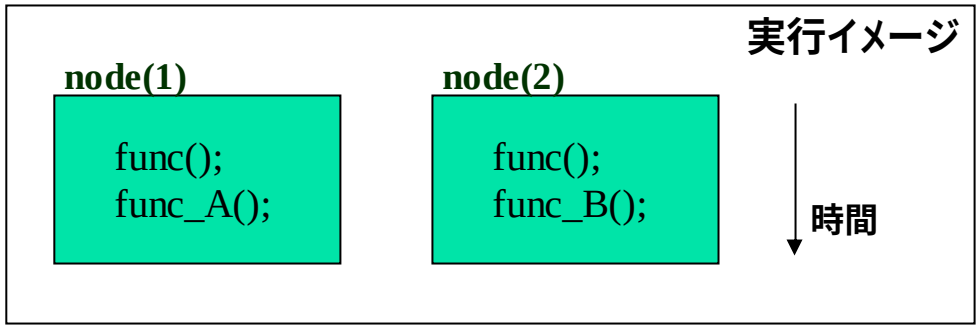
```
int A[10], B[10];
#pragma xmp coarray [*]: A, B
…
A[:] = B[:]:[2];
```

タスクの並列実行

- #pragma xmp task on *node*
  - **直後のブロック文を実行するノードを指定**

例)

```
func();
#pragma xmp tasks
{
#pragma xmp task on node(1)
   func_A();
#pragma xmp task on node(2)
   func_B();
}
```



  - **異なるノードで実行することでタスク並列化を実現**

ハイブリッドな並列化

- グローバルビューとローカルビューの連携
  - 最初はグローバルビュー
  - 性能チューニングのためにローカルビューを導入
    → インクリメンタルな並列化
  - 連携のためのインターフェイス
    - グローバルビューとローカルビューではindexが異なる
    - 同じ配列に対して二つの名前を提供
    - index変換のための組み込み関数の提供

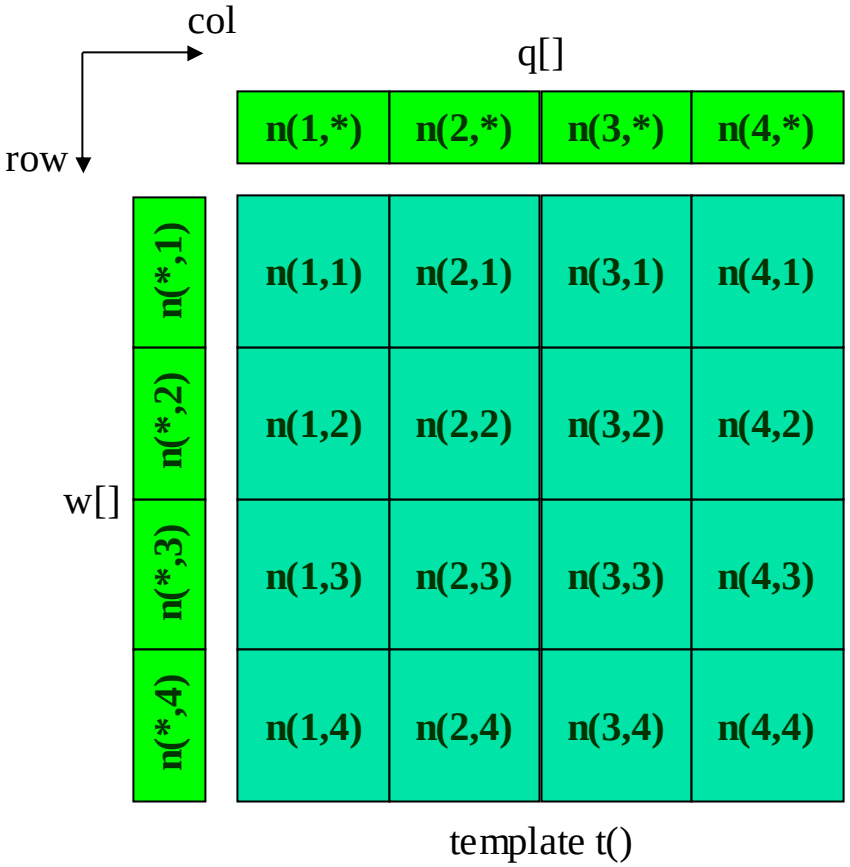
- OpenMP, MPIとの連携
  - 足りない機能を補う
  - 性能のチューニング

NPB-CGの並列化（データ分割）

XcalableMP

- ベクトルデータの分割を指示文で宣言

```
#pragma xmp nodes on n(NPCOLS,NPROWS)
#pragma xmp template t(0:na+1,0:na+1)
#pragma xmp distribute t(BLOCK,BLOCK) on n

double    x[na+2], z[na+2], p[na+2],
          q[na+2], r[na+2], w[na+2];

#pragma xmp align [i] with t(i,*):: x,z,p,q,r
#pragma xmp align [i] with t(*,i):: w
```



- 行列データ **a[], rowstr[], colidx[]** の分割は手動で行う
  1. **ローカル配列として宣言**
  2. 行列要素のindexが割り当てられたtemplateの中
  → **ローカル配列a[]に収納し、index情報を記録**
  （MPIと同じ手法）

2次元分割できる！　OpenMPは1次元だけ。

NPB-CGの並列化（ループ並列化と通信の記述）

```
static void conj_grad()
{
   . . .
#pragma xmp loop on t(j,*)
   for(j = 0; j < lastcol-firstcol+1; j++) {
      x[j] = norm_temp12*z[j];                          （ベクトルの計算）
   }

#pragma xmp loop on t(*,j)
   for(j = 0; j < lastrow-firstrow+1; j++) {
      sum = 0.0;
      for(k = rowstr[j]; k <= rowstr[j+1]; k++) {       （手動並列化）
         sum = sum + a[k]*p[colidx[k]];
      }
      w[j] = sum;                                       （逐次コードでは q[j] = sum;）
   }

#pragma xmp reduction(+:sum) on p(*,:)                  （ベクトルのリダクション操作）

#pragma xmp gmove                                       （ベクトル間のtranspose）
   q[:] = w[:];
   …
}
```

```
#pragma xmp nodes on p(NPCOL, NPROW)
#pragma xmp template t(n,n)
#pragma xmp distribute t(BLOCK,BLOCK) on p

double p[n],w[n];
double A[n][n];

#pragma xmp align A[j][i] to t(i,j)
#pragma xmp align p[i] to t(i,*)
#pragma xmp align w[j] to t(*,j)
```

```
conj_grad(...){
  ...
  for(;;){

#pragma xmp loop j on t(:,j)
   for(j=0; j < n; j++){
      sum = 0;
#pragma xmp loop i on t(i,j)
      for(i = 0; i < n; n++)
          sum += a[j][i]*p[i];
     w[j] = sum;
   }
#pragma xmp reduction(+:w) on p(:,*)

#pragma xmp gmove
      p[:] = w[:];
  }
  ....
}
```

HPCCベンチマークのプログラミングと性能

- HPC Challenge Benchmark Class2
  - **新しい並列プログラミング言語での記述性と性能を競うカテゴリ**
    - Class1**はシステム性能**
  - 4**つのベンチマーク**
    - STREAM
    - Random Access
    - HPL
    - FFT
  - **今年は、**Award**は、性能は** IBM(X10 and UPC), **記述性は** Cary (Chapel) **になった**

SC09 HPCC Class2 でFinalist!

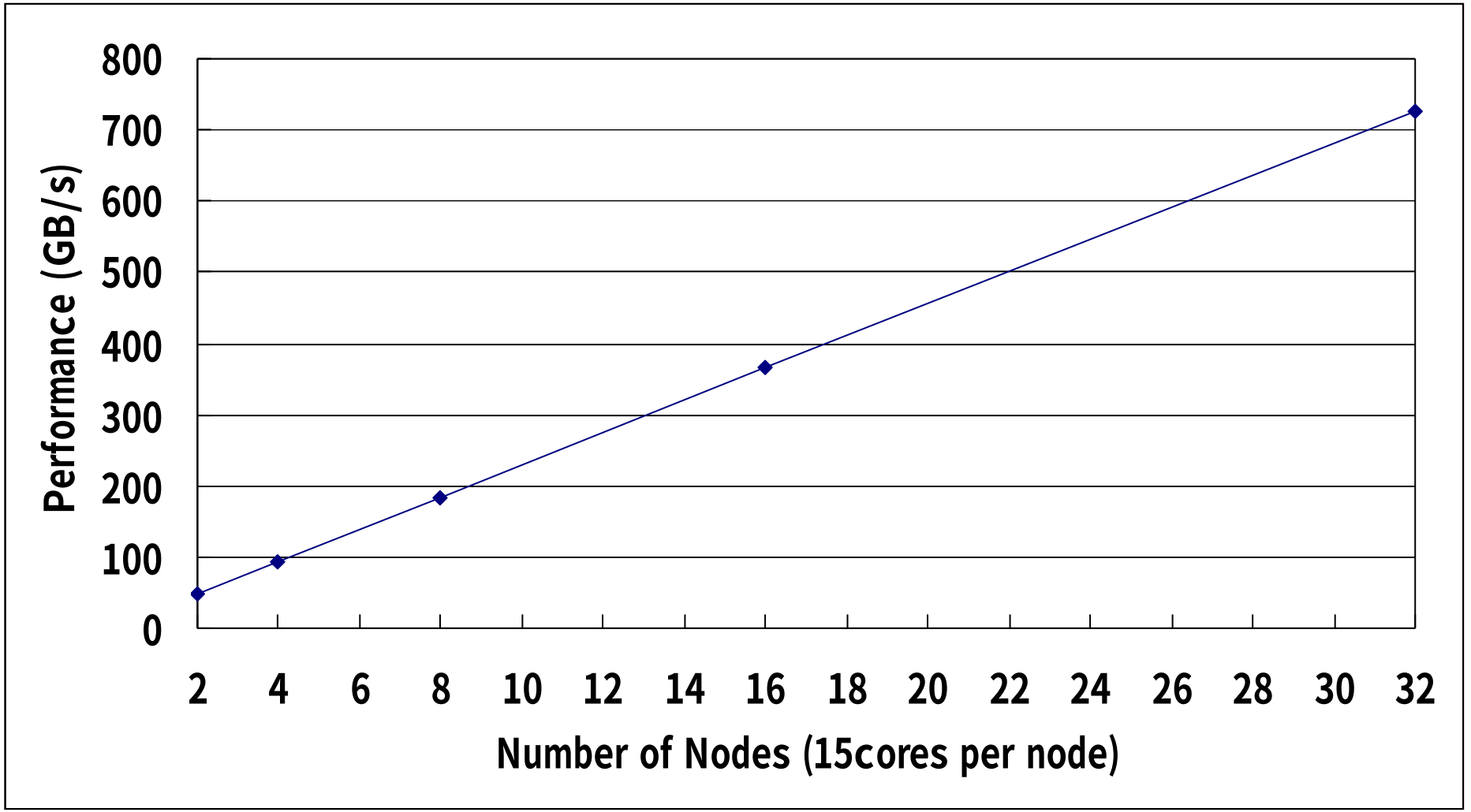
HPCC Benchmark1: STREAM

- Global view programming with directives
  - very straightforward to parallelize by a loop directive

```
double a[SIZE] , b[SIZE] , c[SIZE];
#pragma xmp nodes p(*)
#pragma xmp template t(0:SIZE−1)
#pragma xmp distribute t(block) onto p
#pragma xmp align [j] with t(j) :: a, b, c
. . .
# pragma xmp loop on t(j)
for (j = 0; j < SIZE; j++) a[j] = b[j] + scalar*c[j];
. . .
#pragma xmp reduction(+:triadGBs)
```

Performance of STREAM

- Lines Of Code: 98



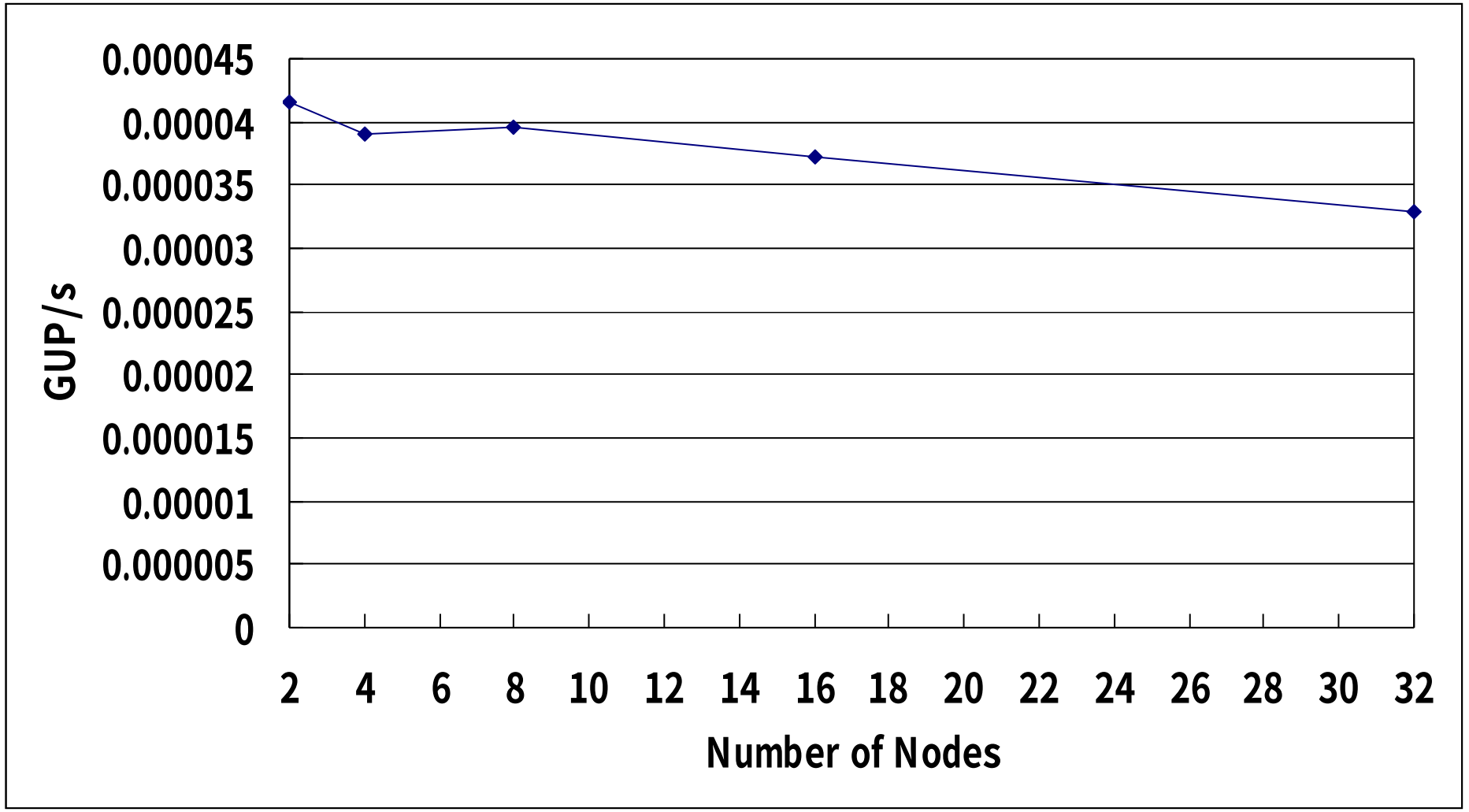
HPCC Benchmark2: Random Access

- Local view programming with co-array

```
#define SIZE TABLE_SIZE/PROCS
u64Int Table[SIZE] ;
#pragma xmp nodes p(PROCS)
#pragma xmp coarray Table [PROCS]
. . .
for (i = 0; i < SIZE; i++) Table[i] = b + i ;
. . .
for (i = 0; i < NUPDATE; i++) {
  temp = (temp << 1) ^ ((s64Int)temp < 0 ? POLY : 0);
  Table[temp%SIZE]:[(temp%TABLE_SIZE)/SIZE] ^= temp;
}
#pragma xmp barrier
```

Performance of Random Access

- Lines Of Code: 77
- complied into MPI2 one-sided functions



HPCC Benchmark3: HPL

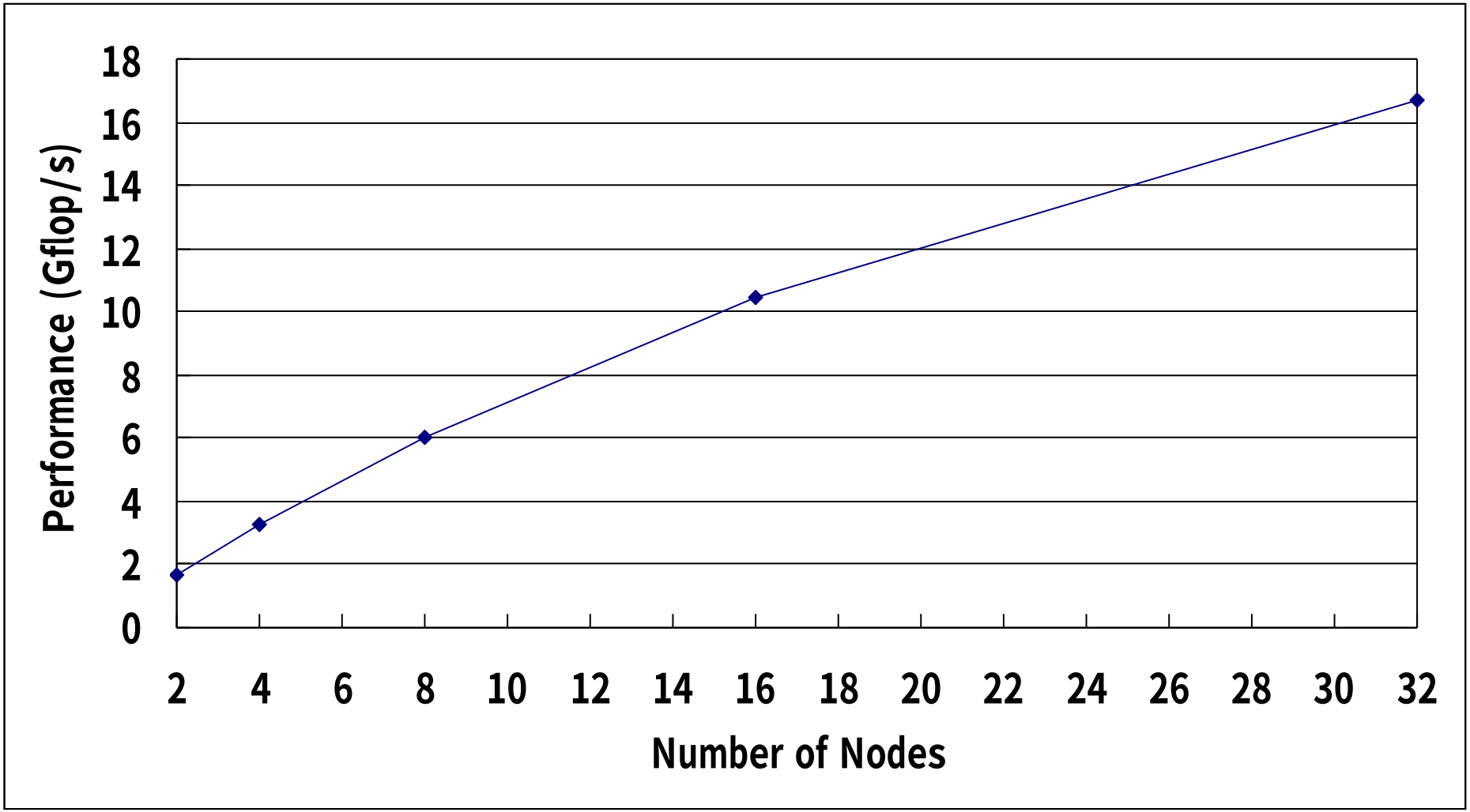
- Parallelized in global view
- Matrix/vectors are distributed in cyclic manner in one dimension.
- Using gmove to exchange columns for pivot exchange

dgefa function:

```
#pragma xmp gmove
    pvt_v[k:n-1] = a[k:n-1][l];

    if (l != k) {
#pragma xmp gmove
      a[k:n-1][l] = a[k:n-1][k];
#pragma xmp gmove
      a[k:n-1][k] = pvt_v[k:n-1];
    }
```

Performance of HPL

- Lines Of Code: 243



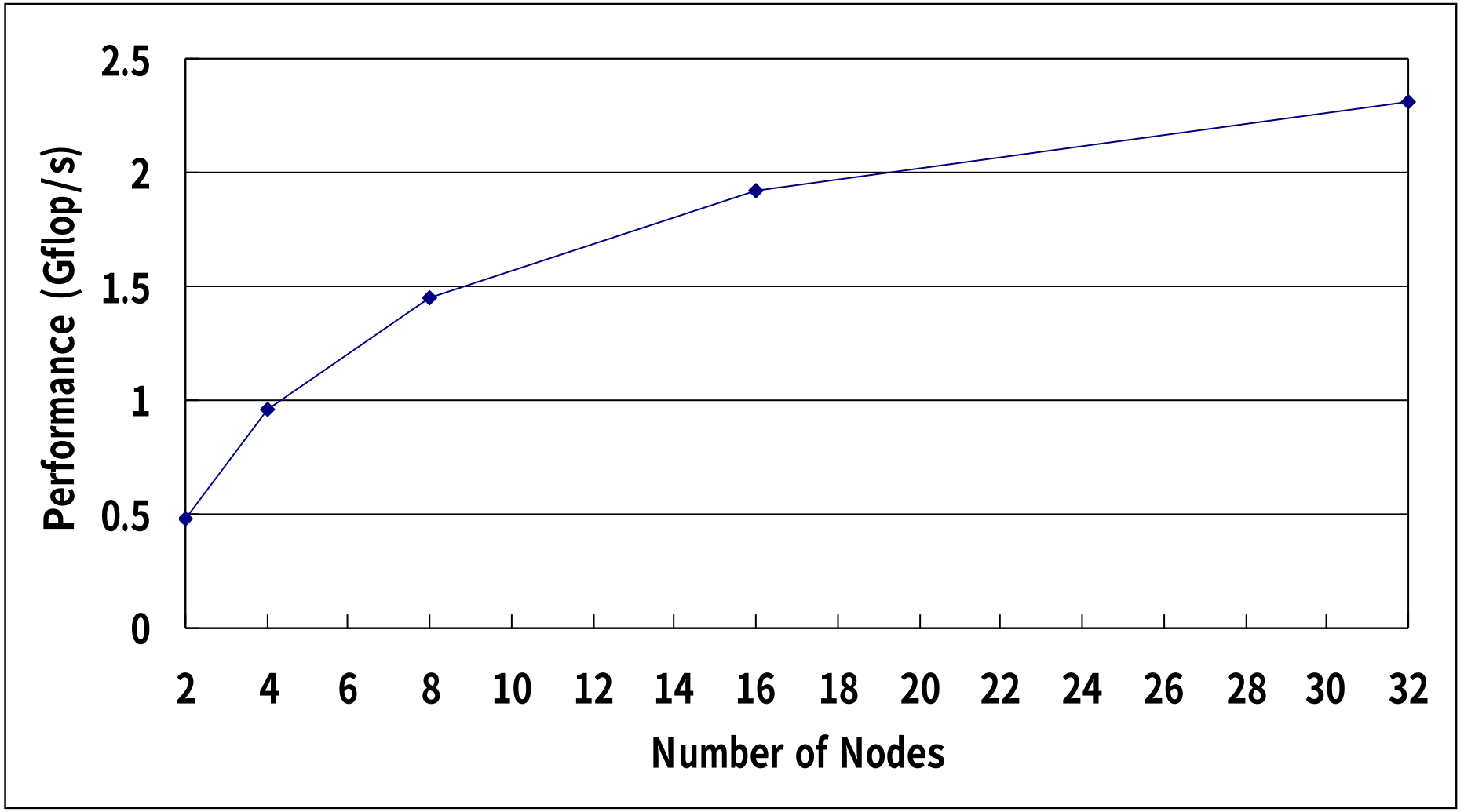
HPCC Benchmark4: FFT

- Parallelized in global view
- Using six-step FFT algorithm
  - Matrix transpose is a key operation.
- Matrix transpose using gmove

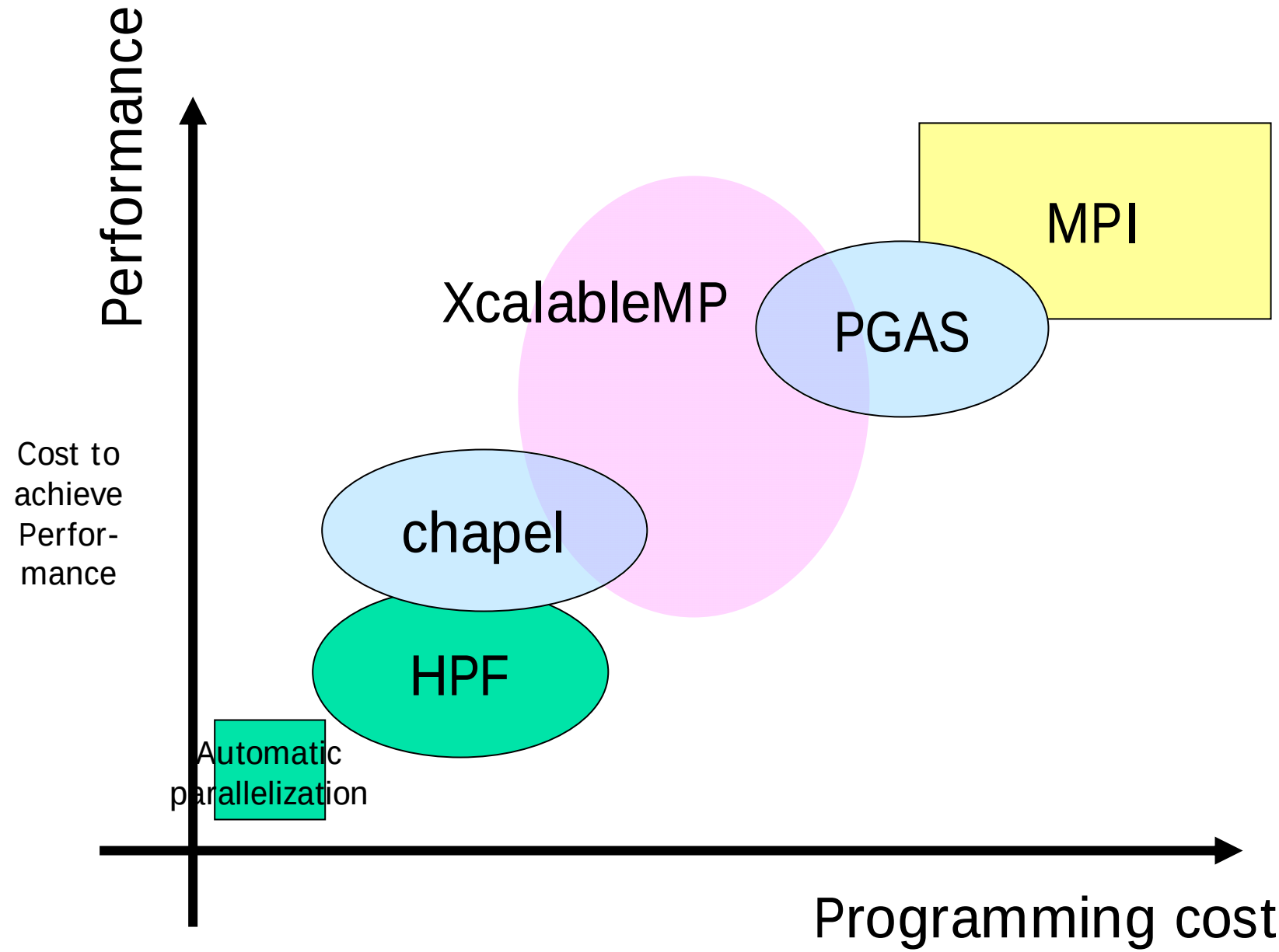
```
#pragma xmp align a_work[*][i] with t1(i)
#pragma xmp align a[i][*] with t2(i)
#pragma xmp align b[i][*] with t1(i)
. . .
#pragma xmp gmove
  a_work[:][:] = a[:][:];                    // all-to-all

#pragma xmp loop on t1(i)
  for(i = 0; i < N1; i++)
    for(j = 0; j < N2; j++)
      c_assgn(b[i][j], a_work[j][i]);
```

Performance of FFT

- Lines Of Code: 217



Position of XcalableMP



おわりに

- XcalableMPの目的・目標
  - 超並列マシンの並列プログラミングにはいろいろな課題はあるが、… 生産性(productivity)をあげることが重要
  - 「MPIよりもましなプログラミング環境を！」
- XcalableMP: これからの計画
  - 現在、XMP Spec は、version 0.9
    - http://www.xcalablemp.org で、公開中
  - C言語版・デモ版βリリースは2010/2Q (4月？)
  - 2010/3QにFortran版 (SC10前)
- 課題
  - マルチコア対応 (SMPノード)
  - ライブラリ、I/O

http://www.xcalablemp.org