独立行政法人理化学研究所
計算科学研究機構
RIKEN Advanced Institute for Computational Science

XcalableMP

「Xcalable MP」並列プログラミング言語入門

1

村井 均（AICS）

はじめに

- 大規模シミュレーションなどの計算を行うためには、クラスタのような分散メモリシステムの利用が一般的
- 並列プログラミングの現状
  - 大半はMPI (Message Passing Interface)を利用
  - MPIはプログラミングコストが大きい
- 目標
  - 高性能と高生産性を兼ね備えた並列プログラミング言語の開発

並列プログラミング言語 XcalableMP

- 次世代並列プログラミング言語検討委員会 / PCクラスタコンソーシアムXcalableMP規格部会で検討中。
- MPIに代わる並列プログラミングモデル
- 目標:
  - Performance
  - Expressiveness
  - Optimizability
  - Education cost

www.xcalablemp.org

HPC Challenge Awards Competition (class 2)

- 4～5個のベンチマークにより、プログラミング言語の高性能と高生産性を競う。
  - Global HPL
  - Global RandomAccess
  - EP STREAM (Triad) per system
  - Global FFT
- 2013年はXcalableMPが受賞。

XcalableMPの特徴（１）

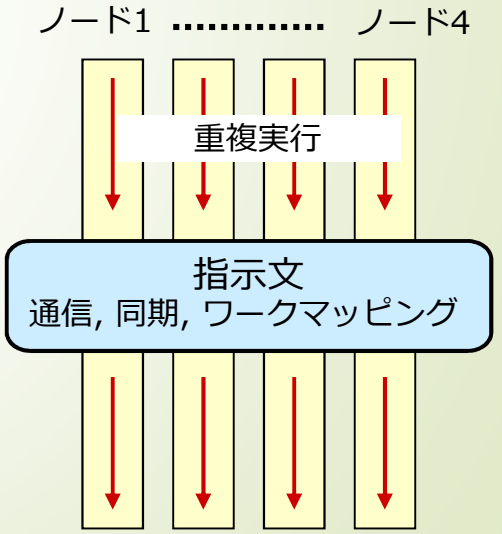
- Fortran/Cの拡張 （指示文ベース）
  → 逐次プログラムからの移行が容易
- SPMDモデル
  - 各ノード（並列実行の主体）が独立に（重複して）実行を開始する。

XcalableMPの特徴（２）

- 明示的な並列化と通信
  - ワークマッピング（並列処理）、通信、および同期は「集団的」な指示文によって明示される。
  - → チューニングが容易
- 2つのプログラミングモデル
  - グローバルビュー
  - ローカルビュー

XMPの実行モデル（SPMD）

- 各ノードは、同一のコードを独立に（重複して）実行する。
- 指示文の箇所では、全ノードが協調して動作する（集団実行）。
  - 通信・同期
  - ワークマッピング（並列処理）



メモリモデル

- 各ノードは、自身のローカルメモリ上のデータ（ローカルデータ）のみをアクセスできる。
- 他のノード上のデータ（リモートデータ）にアクセスする場合は、特殊な記法による明示的な指定が必要。
  - 通信指示文
  - coarray
- 「分散」されないデータは、全ノードに重複して配置される。

プログラム例（MPIとの比較）

XMP/Cプログラム

```
int array[MAX];
#pragma xmp nodes p(*)
#pragma xmp template t(0:MAX-1)
#pragma xmp distribute t(block) onto p
#pragma xmp align array[i] with t(i)

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

シンプル

MPIプログラム

```
int array[MAX];

main(int argc, char **argv){
    MPI_Init(&argc, &argv);
    MPI_Comm_rank(MPI_COMM_WORLD, &rank);
    MPI_Comm_size(MPI_COMM_WORLD, &size);

    dx = MAX/size;
    llimit = rank * dx;
    if (rank != (size -1)) ulimit = llimit + dx;
    else ulimit = MAX;
    temp_res = 0;

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

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

    MPI_Finalize( );
}
```

XMPのグローバルビュー・プログラミング

- 解くべき問題全体を記述し、それをN個のノードが分担する方法を示す。
  - 「問題1～100を4人で分担して解け」
- 分かりやすい（基本的に指示文を挿入するだけ）。
- 「分担」を指定する方法
  - データマッピング
  - ワークマッピング
  - 通信・同期

XcalableMP指示文の記法

- XMPの指示文は、「#pragma xmp」または「!$xmp」から始まる。

例

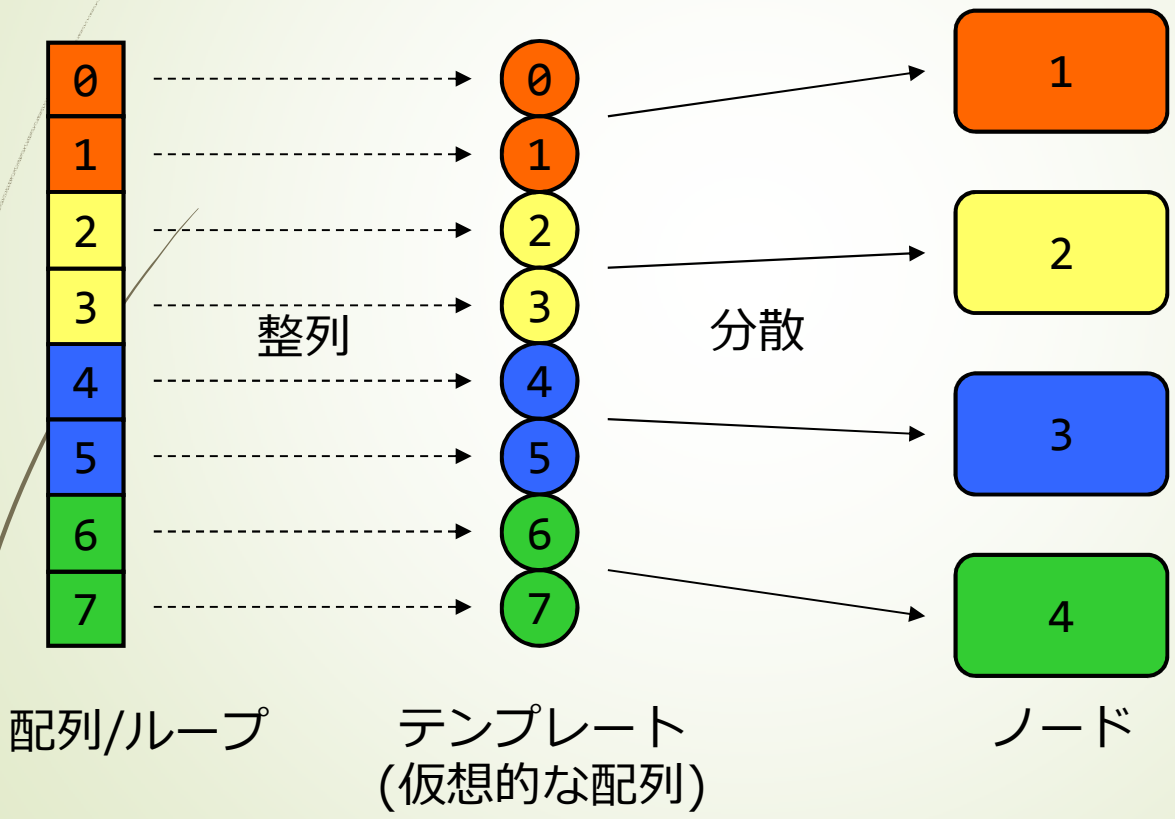
[C]
```
#pragma xmp align a[i] with t(i)
```

[F]
```
!$xmp align a(i) with t(i)
```

※ Cでも、既定値では丸カッコは1～N（Fortran式）

XMPのデータマッピング

- 整列 + 分散による2段階の処理



- 配列はテンプレートに整列され、
- テンプレートはノードに分散される。

データマッピング指示文（１）nodes指示文

- XMPプログラムの実行者である「ノード」のサイズと形状を宣言する。
  - データやワークを割り当てる対象。
  - プロセッサ（マルチコア可）とローカルメモリから成る。

[C]
```
#pragma xmp nodes p(4,4)
```

[F]
```
!$xmp nodes p(4,4)
```

データマッピング指示文（２）template指示文

- XMPプログラムの並列処理の基準である「テンプレート」のサイズと形状を宣言する。
  - データやワークの整列の対象。

[C]
```
#pragma xmp template t(64,64)
```

[F]
```
!$xmp template t(64,64)
```

データマッピング指示文（3）distribute指示文

- ノード集合pに、テンプレートtを分散する。

[C]
```
#pragma xmp distribute t(block) onto p
```

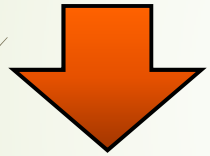
[F]
```
!$xmp distribute t(block) onto p
```

- 分散形式として、ブロック、サイクリック、ブロックサイクリック、不均等ブロックを指定できる。

データマッピングの例

例1: ブロック分散

```
#pragma xmp nodes p(4)
#pragma xmp template t(0:19)
#pragma xmp distribute t(block) onto p
```



ノード	インデックス
p(1)	0, 1, 2, 3, 4
p(2)	5, 6, 7, 8, 9
p(3)	10, 11, 12, 13, 14
p(4)	15, 16, 17, 18, 19

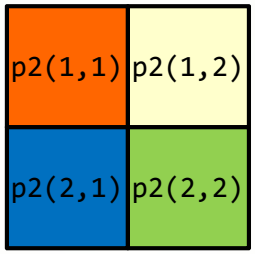
例2: サイクリック分散

```
#pragma xmp nodes p(4)
#pragma xmp template t(0:19)
#pragma xmp distribute t(cyclic) onto p
```

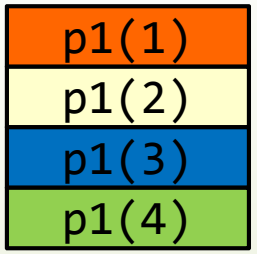
ノード	インデックス
p(1)	0, 4, 8, 12, 16
p(2)	1, 5, 9, 13, 17
p(3)	2, 6, 10, 14, 18
p(4)	3, 7, 11, 15, 19

多次元テンプレートの分散

```
#pragma xmp nodes p2(2,2)
#pragma xmp distribute t(block,block) onto p2
```




```
#pragma xmp nodes p1(4)
#pragma xmp distribute t(block,*) onto p1
```



「*」は非分散を意味する。

データマッピング指示文（４）align指示文（１）

- 配列aの要素iを、テンプレートtの要素i-1に整列させる。

[C]
```
#pragma xmp align a[i] with t(i-1)
```

[F]
```
!$xmp align a(i) with t(i-1)
```

- 多次元配列も整列可能。

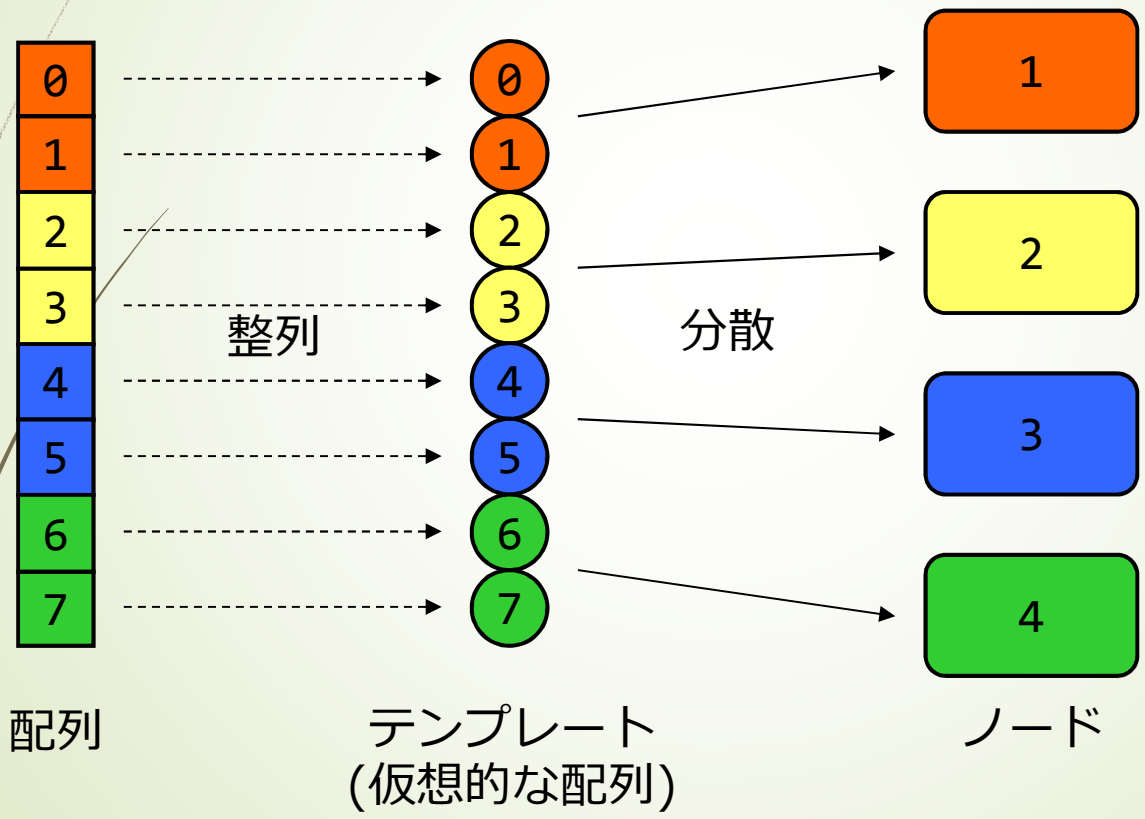
[C]
```
#pragma xmp align a[i][j] with t(i-1,j)
```

[F]
```
!$xmp align a(i,j) with t(i-1,j)
```

データマ

- 整列 + 分散による

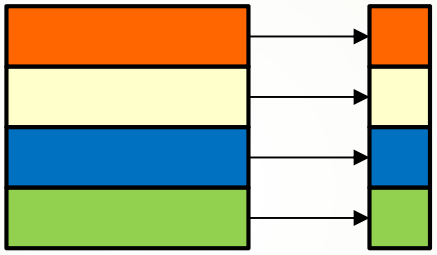
```
#pragma xmp nodes p(4)
#pragma xmp template t(0:7)
#pragma xmp distribute t(block) onto p
float a[8];
#pragma xmp align a[i] with t(i)
```



特殊な整列

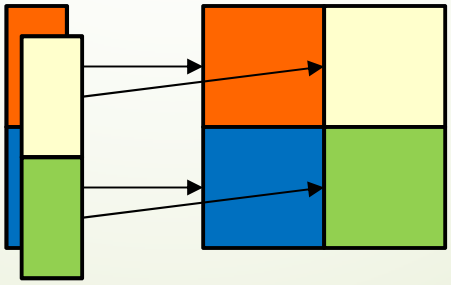
- 縮退

```
#pragma xmp distribute t(block) onto p1
#pragma xmp align a[i][*] with t(i)
```



- 複製

```
#pragma xmp distribute t(block,block) onto p2
#pragma xmp align a[i] with t(i,*)
```



a[0]の実体は、p2(1,1)とp2(1,2)に存在する。値の一致は保証されない。

ワークマッピング指示文（１）
loop指示文（１）

- ループの並列化を指示する。
  - t(i,j)を持つノードが、繰り返しi,jにおいてa[i,j]への代入を実行する。

```
#pragma xmp loop (i,j) on t(i,j)
for (i = 0; i < n; i++)
for (j = 0; j < n; j++)
   a[i][j] = ...;
```

loop指示文（２）

- アクセスされるデータが、その繰り返しを実行するノードに割り当てられていなければならない。
  - 下の例では、t(i,j)を持つノードが、a[i][j]を持たなければならない。
  - そうでない場合、事前に通信を行っておく。

```
#pragma xmp loop (i,j) on t(i,j)
for (i = 0; i < n; i++)
for (j = 0; j < n; j++)
   a[i][j] = ...;
```

loop指示文（3）

- reduction節
  - 並列ループの終了時に、各ノードの値を「集計」する。
  - 提供している演算は+, max, minなど。

```
#pragma xmp loop (i) on t(i) reduction(+:sum)
   for (i = 0; i < 20; i++)
      sum += i;
```

各ノード上のsumの値を合計した値で、
各ノード上のsumを更新する。

ワークマッピング指示文（2）
task指示文

- 直後の処理を、指定したノードが実行する。

```
#pragma xmp task on p(1)
{
    func_a();
}

#pragma xmp task on p(2)
{
    func_b();
}
```

p(1)がfunc_aを実行する。

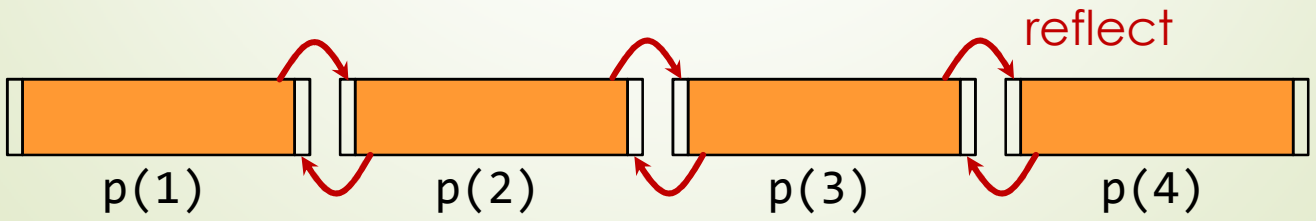
p(2)がfunc_bを実行する。

通信指示文（１）
shadow/reflect指示文

aの上下端に幅1のシャドウを付加する。

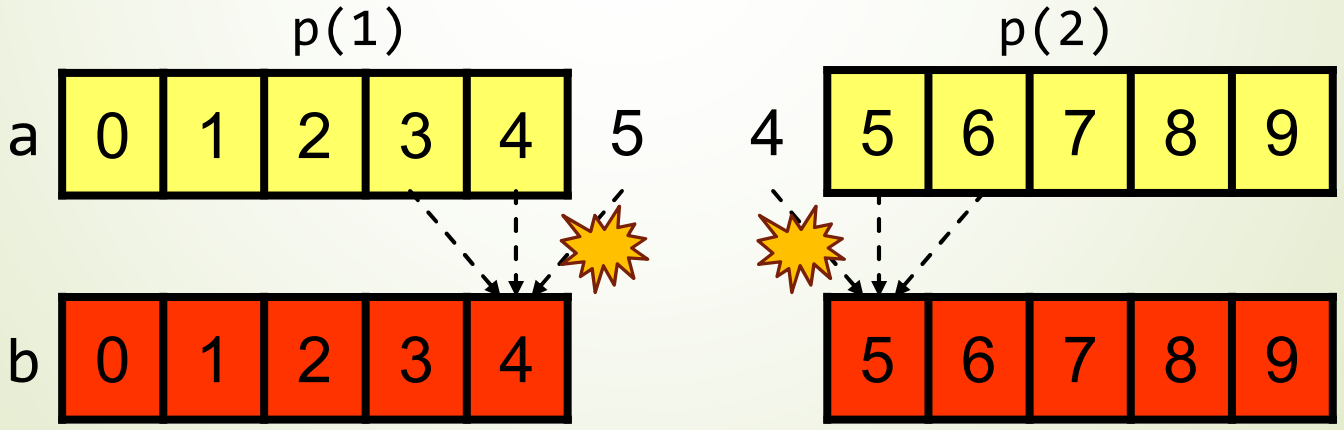
```
#pragma xmp distribute t(block) onto p
#pragma xmp align a[i] with t(i-1)
#pragma xmp shadow a[1:1]
...
#pragma xmp reflect (a)
```

aに対する隣接通信を実行する。



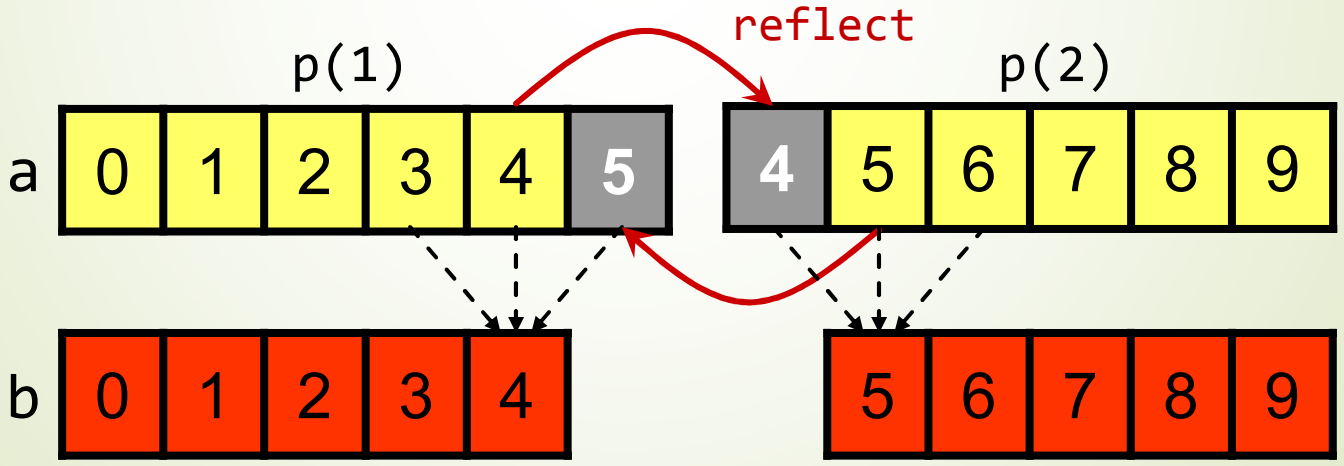
shadow/reflect指示文の例

```
#pragma xmp loop on t(i)
for (i = 1; i < 9; i++)
   b[i] = a[i-1] + a[i] + a[i+1];
```



shadow/reflect指示文の例

```
#pragma xmp shadow a[1:1]

#pragma xmp reflect (a)
#pragma xmp loop on t(i)
for (i = 1; i < 9; i++)
   b[i] = a[i-1] + a[i] + a[i+1];
```

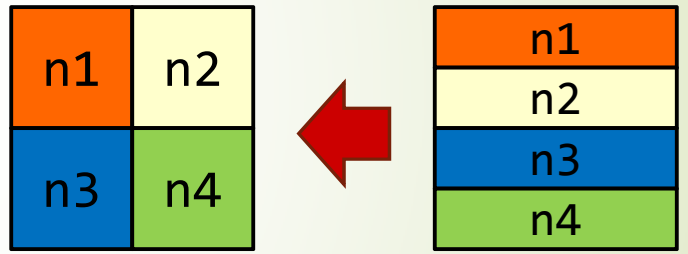


通信指示文（2）
gmove指示文

- 通信を伴う任意の代入文を実行する。

```
#pragma xmp gmove
a[:][:] = b[:][:];
```

※Cで「部分配列」も記述できる。



a[block][block]　　b[block][*]

通信指示文（３）

- bcast指示文
  - 特定のノードが、指定したデータを他のノードへブロードキャストする（ばらまく）。

```
#pragma xmp bcast (s) from p(1)
```

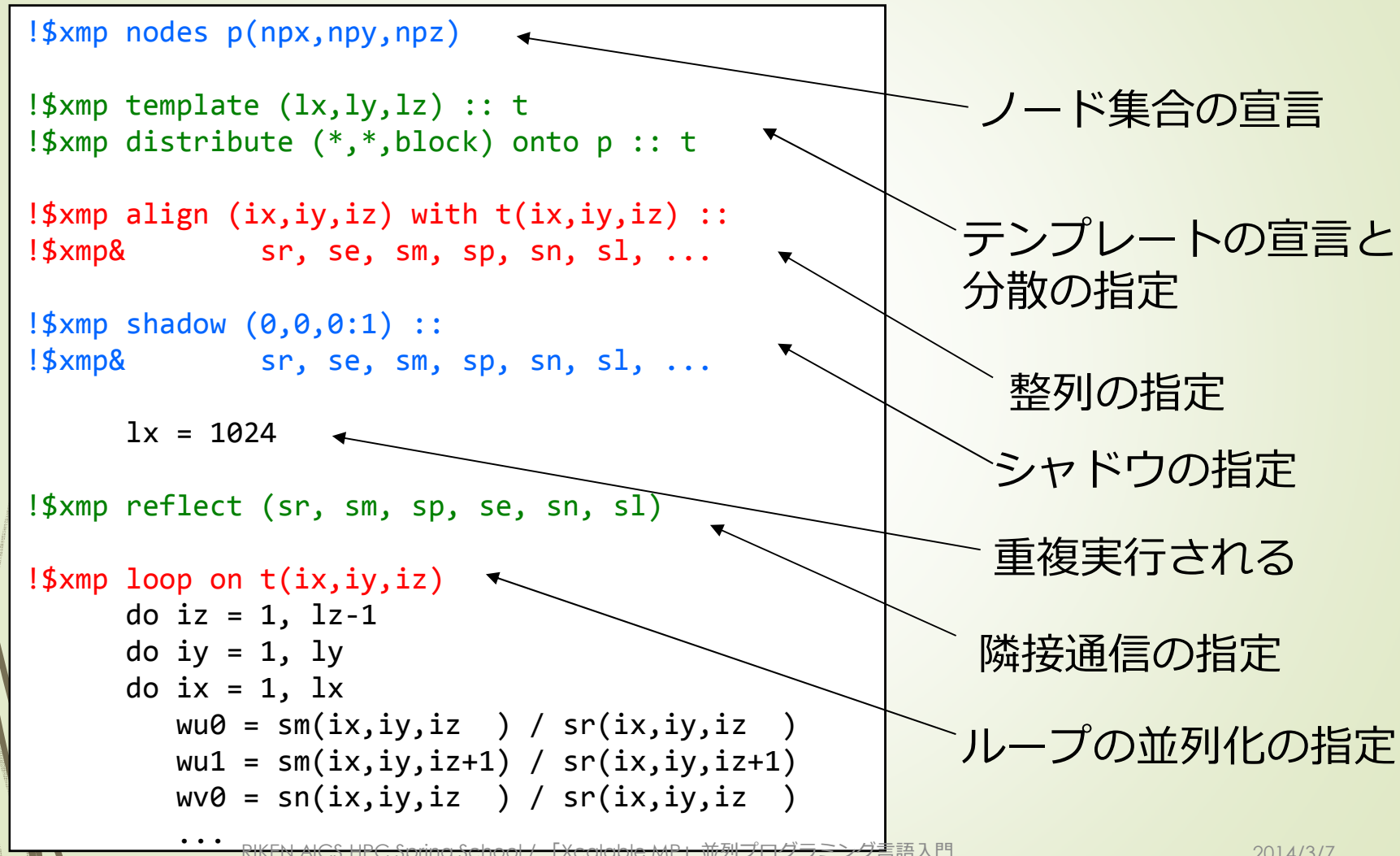
※ from p(1) は省略可

- barrier指示文
  - ノードが互いに待ち合わせる（バリア同期）。

```
#pragma xmp barrier
```

XcalableMPプログラムの例

```
!$xmp nodes p(npx,npy,npz)

!$xmp template (lx,ly,lz) :: t
!$xmp distribute (*,*,block) onto p :: t

!$xmp align (ix,iy,iz) with t(ix,iy,iz) ::
!$xmp&        sr, se, sm, sp, sn, sl, ...

!$xmp shadow (0,0,0:1) ::
!$xmp&        sr, se, sm, sp, sn, sl, ...

      lx = 1024

!$xmp reflect (sr, sm, sp, se, sn, sl)

!$xmp loop on t(ix,iy,iz)
      do iz = 1, lz-1
      do iy = 1, ly
      do ix = 1, lx
         wu0 = sm(ix,iy,iz  ) / sr(ix,iy,iz  )
         wu1 = sm(ix,iy,iz+1) / sr(ix,iy,iz+1)
         wv0 = sn(ix,iy,iz  ) / sr(ix,iy,iz  )
         ...
```



XMPのローカルビュー・プログラミング

- 各ノードが解くべき問題を個別に示す。
  - 「ノード1は問題1～25を解け。ノード2は……」
- 自由度が高いが、やや難しい。
- ローカルビューのための機能として、Fortran 2008から導入したcoarrayをサポート。

coarray機能

- 「coarray」として宣言されたデータは、他のノードからもアクセスできる。

ノード2が持つb[3:3]のデータをa[0:3]に代入

```
#pragma xmp coarray b

if (xmp_node_num() == 1)
  a[0:3] = b[3:3]:[2];
```

配列bはcoarrayであると宣言

コロンの後の[]はノード番号を表す

base　length 「0からの3要素」

coarrayの宣言

- v.1.0仕様

```
int b[10];
#pragma xmp coarray b:[*]
```

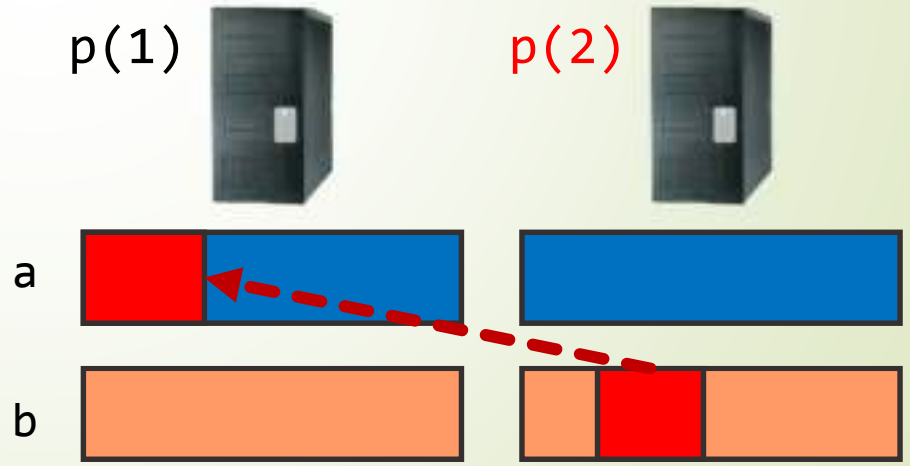
- v.1.1仕様

```
int b[10]:[*]
```

リモートライト（Put）

```
int a[10], b[10];
#pragma xmp coarray a:[*]
:
if (me == 2)
 a[0:3]:[1] = b[3:3]; // Put
```

ノード2は、b[3:3]を、ノード1のa[0:3]へ書き込む。

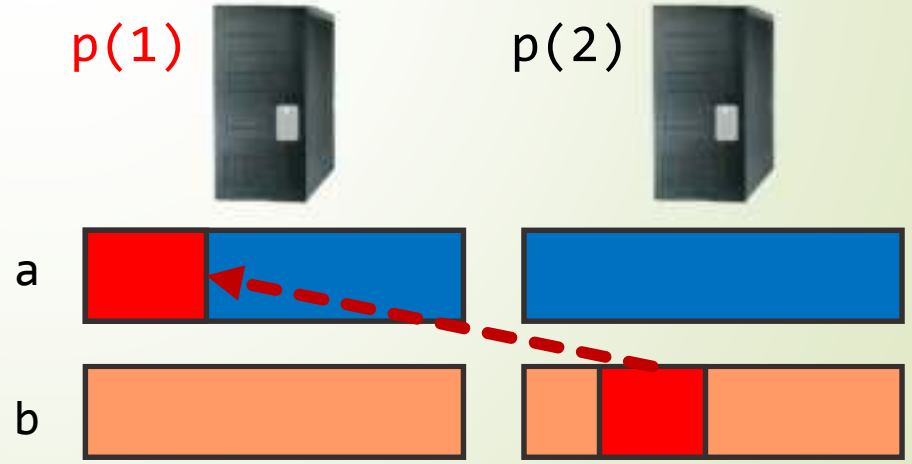


リモートリード（Get）

```
int a[10], b[10];
#pragma xmp coarray a:[*]
:
if(me == 1)
 a[0:3] = b[3:3]:[2]; // Get
```

ノード1は、ノード2のb[3:3]を、a[0:3]へ読み込む。

※ 一般に、Putの方が高速



同期: sync all

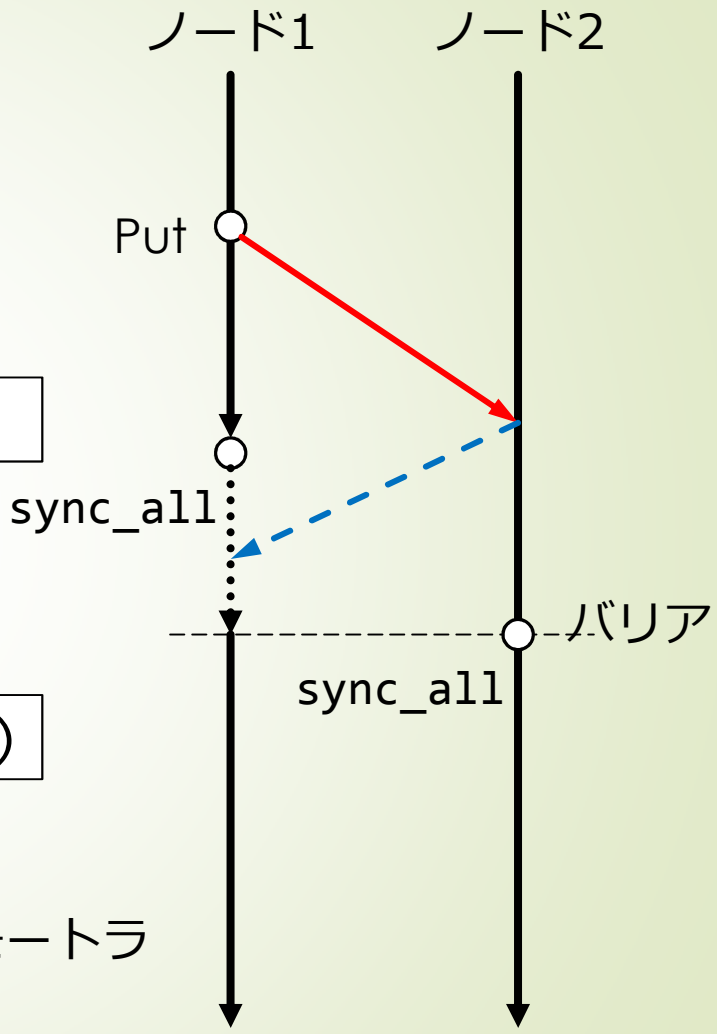
- v.1.0仕様

```
#pragma xmp sync all
```

- v.1.1仕様

```
void xmp_sync_all(int *status)
```

バリア同期を行うとともに、すべてのリモートライト/リードの完了を確認する。



Omni XcalableMP

- 理研AICSと筑波大で開発中のXMP処理系
  - XMP/C
  - XMP/Fortran
- オープンソース
- トランスレータ + ランタイム(MPIベース)
- 対応プラットフォーム
  - Linuxクラスタ、Crayマシン、京コンピュータ、NEC SX、地球シミュレータ
  - その他、MPIが動作している任意のシステム

現況

- プロトタイプ(ver. 0.7.0)を公開中
  - XMPの主要な機能を実装済み
  - 制限事項あり (後述)
- 拡張機能
  - アクセラレータ向け拡張 (XMP-dev)
  - プロファイラ・インタフェース
- 今後の予定
  - ver.0.8.0 (4月), ver.1.0 (11月)

ver. 0.7.0の制限事項（抜粋）

	XMP/C	XMP/F
nodes	○	△
distribute	△ (gblock以外)	△ (gblock以外)
align	○	○
shadow	○	○
loop	○	○
task	△ (実行制御のみ)	△ (実行制御のみ)
shadow	△	○
gmove	△	△
coarray	○	×
組込み手続き	△	△

○ 実装済み。△ 制限あり。× 未実装。

Omni XMPの利用

- ウェブページ
  www.hpcs.cs.tsukuba.ac.jp/omni-compiler/xcalablemp/
  - ソースtarball
  - Debian/Ubuntu/CentOS向けパッケージ
  - チュートリアル
  - サンプルコード
  - サポートML
- 京コンピュータで利用可能
  - /opt/aics/omni にインストール済

XMP講習会

- 2014年度に講習会を予定。
  - 7/16(水), 9/18(木), 12/18(木)
  - 座学（本講義と同内容）および実習
- 計算科学振興財団（FOCUS）のウェブページ（www.j-focus.or.jp）より申込み。

  ※ 現時点では、まだ募集は始まっていない模様。

まとめ

- 高性能と高生産性を兼ね備えた並列プログラミング言語が必要。
- 並列プログラミング言語XcalableMP
  - FortranおよびCに対する拡張（指示文ベース）
  - グローバルビュー＆ローカルビュー
  - PCCC XMP規格部会が提案
- Omni XcalableMP
  - 理研と筑波大が開発中のXMP処理系
  - 無償でダウンロード・利用可能