H26年度
並列コンピュータの高速化技法入門
演習用資料

2015年　1月21日

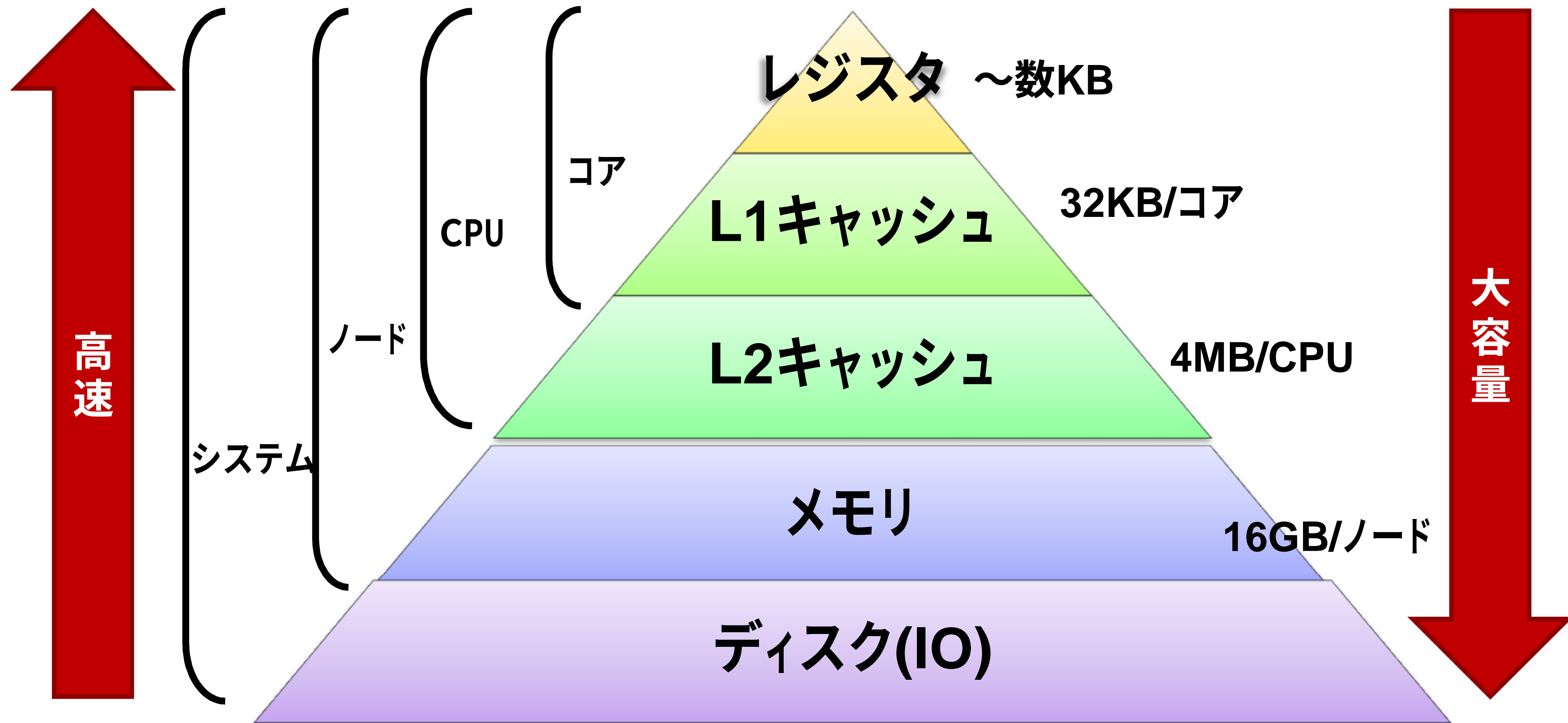
大阪大学サイバーメディアセンター
日本電気株式会社

本資料は，東北大学サイバーサイエンスセンターとＮＥＣの共同により作成され，大阪大学サイバーメディアセンターの環境で実行確認を行い，修正を加えたものです．

無断転載等は，ご遠慮下さい．

1. 階層構造とデータアクセス

階層構造とデータアクセスの特徴



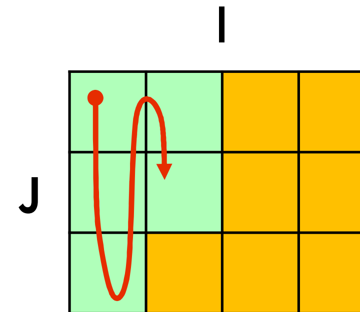
1. FortranとC言語の違い

多次元配列のメモリ配置

- FortranとC言語では多次元配列のメモリ上の連続アクセス方向が違います

Fortran

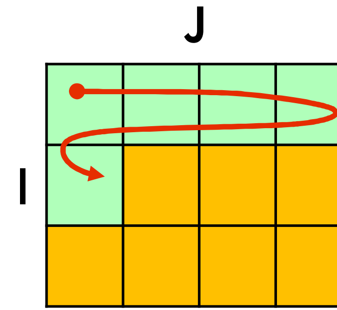
```
do i=1,n
   do j=1,n
      y(i) = y(i)+ x(j)* a(j,i)
   enddo
enddo
```



多次元配列の左側のインデックスがメモリ上で連続に配置されます

C

```
for(i=0; i<n; i++){
   for(j=0; j<n; j++){
      y[i] = y[i]+ x[j]* a[i][j];
   }
}
```



多次元配列の右側のインデックスがメモリ上で連続に配置されます

本講習会ではループの繰り返し回数を「ループ長」とも呼びます

2. コンパイルコマンド

PCクラスタシステムのコンパイルコマンド

言語	コマンド
Fortran	ifort
C	icc
C++	icpc

Intel Compilerを利用してコンパイルを行います

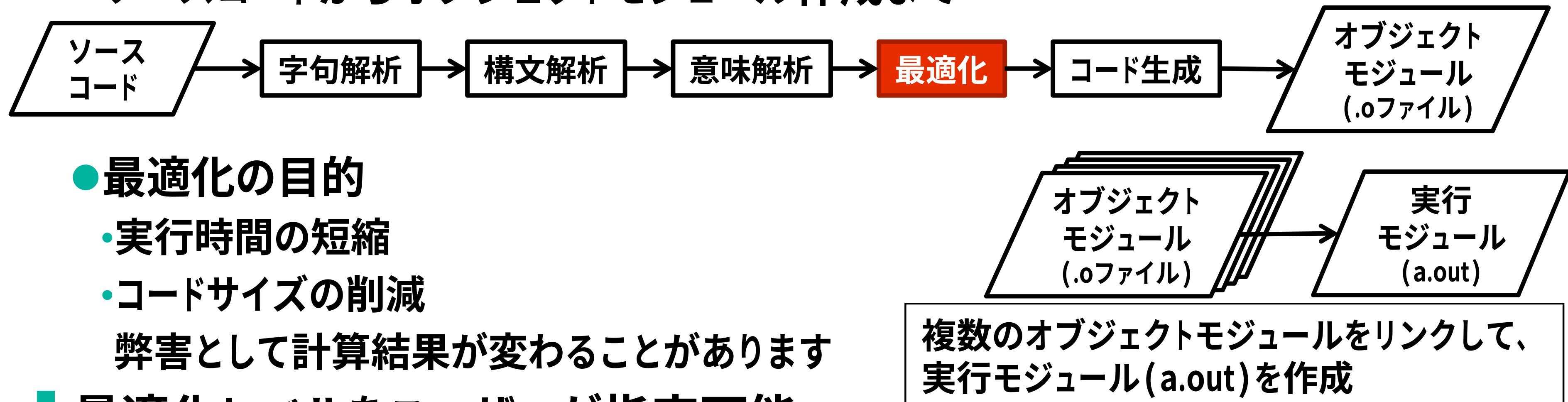
基本的なコンパイラオプション

オプション	概　要
-o　file名	出力ファイル名の指定
-c	コンパイルのみ実施(リンクしない)
-V	コンパイラバージョンの表示

2. コンパイラの最適化について

コンパイラの働き

- ソースコードからオブジェクトモジュール作成まで



- 最適化の目的
  - 実行時間の短縮
  - コードサイズの削減

  弊害として計算結果が変わることがあります

最適化レベルをユーザーが指定可能

- コンパイラオプション、指示行

極端な最適化の例

```
do  i=1,n
  y(i) = x(i)+ y(i)*  ・・・・
enddo
stop
end
```

どんなにnを大きくしても、
演算部分を増やしても一瞬で終わる

⇒ コンパイラによっては、
計算後のyを参照しないため
不要な演算としてループを削除するため

2. コンパイラオプション

最適化コンパイラオプション

	オプション	デフォルト	概 要
最適化レベル	-O0	-O2	全ての最適化を無効にします
	-O1		-O2のうちコードサイズを増大させる最適化は行わない ベクトル化を行わない
	-O2		ベクトル化の有効化、組み込み関数のインライン展開 不要な変数・関数などの削除　ループアンロールなどのコードの最適化
	-O3		プリフェッチ、ループ変換、パディング等を行う (-O2よりも実行速度が遅くなる場合がある) (コンパイル時間が長くなる場合がある)
	-fast	なし	最大限に最適化します 「–xHost–O3 -ipo –no-prec-div –static」と同等です
	-xHost	なし	コンパイラが動作するCPUが使用可能な最上位の命令セットを生成します フロントエンドでは-xSSE4.2が有効になります
浮動小数点関連	-[no-]ftz	なし (-O1以上では有効)	アンダーフローした結果(デノーマル)を0として扱う
	-[no-]prec-div	-prec-div	-noprec-divの指定で除算を乗算へ変更 (精度が落ちる場合があります)
	-[no-]prec-sqrt	-no-prec-sqrt	高速で精度が少し低い平方根計算を使用
手続き間最適化	-ip	-O2以上で-ip有効 (-O1 以下は-no-ip)	手続き (サブルーチン、関数) 間にまたがる最適化を実施 インライン展開も含む
	-ipo	-no-ipo	複数のファイルに跨る手続き (サブルーチン、関数) 間にまたがる最適化を実施 インライン展開も含む

2. コンパイラオプション

最適化コンパイラオプション(続き)

	オプション	デフォルト	概 要
プロファイル	-prof-gen	-no-prof-gen	プロファイル用のオブジェクトファイルを生成します
	-prof-use	-no-prof-use	最適化にプロファイル情報を使用するようにします
並列化	-parallel		自動並列化を有効にし、マルチスレッドコードを生成します
	-openmp		OpenMPによる並列化を有効にし、マルチスレッドコードを生成します
コンパイラメッセージ	-opt-report [n]	n=2	nに数値を指定する事で、コンパイラが出力する最適化レポートのレベルを指定します n=0,1,2,3で数値が大きくなるほど出力される情報量が多くなります
	-vec-report[n]	n=1	ベクトル化時の診断メッセージレベルを指定します n=0,1,2,3,4,5で指定し、3の情報量が最大となります
	-par-report[n]	n=1	自動並列化時の診断メッセージレベルを指定します n=0,1,2,3で数値が大きくなるほど出力される情報量が多くなります
	-openmp-report[n]	n=1	OpenMP並列化時の診断メッセージレベルを指定します n=0,1,2で数値が大きくなるほど出力される情報量が多くなります

注意: -opt-reportはnの指定にスペースが必要です

-opt-report△3　(△はスペース)
-vec-report=3　or　-vec-report3
-par-report=3　or　-par-report3
-openmp-report=2　or　-openmp-report2

2. コンパイラオプション

デバッグ、その他のコンパイラオプション

	オプション	デフォルト	概 要
デバッグ	-g		デバッグ情報を生成します(最適化オプションを指定しないと -O0となります)
	-traceback		実行時エラーの際、トレースバック情報を出力させます
	-check uninit		初期化されていない変数の実行時チェックを有効にします (実行速度が遅くなります)
	-check bounds		配列添字と次元境界の実行時チェックを有効にします (実行速度が遅くなります)
その他	-fpp		Fortranプリプロセッサを実行します

ここにあげたオプションは主要なものだけです。
詳細なオプションやその説明についてはコンパイラマニュアルを参照してください。

2. おすすめコンパイラオプションと注意点

プログラムを初めて実行する場合

●既定値レベルの最適化(-O2)

まずは、最適化に関しては何も指定しないで
既定値でコンパイル、実行を行う

正常終了し、高速化を行う場合

● -O3 -xHost -ftz

演算結果が -O2と変わらないか、
変わっても許容範囲か確認する

● さらに -noprec-div の追加 (除算の精度が落ちる場合があります)

● プロファイル(prof-gen/prof-use)の利用

デバッグを行う場合

● -g デバッグ情報を生成(デバッグ時の基本)

● -traceback (トレースバック情報の出力)

● -check uninit (実行時に初期化漏れのチェック、実行時間が遅くなります)

● -check bounds (実行時に配列外参照のチェック、実行時間が遅くなります)

注意点

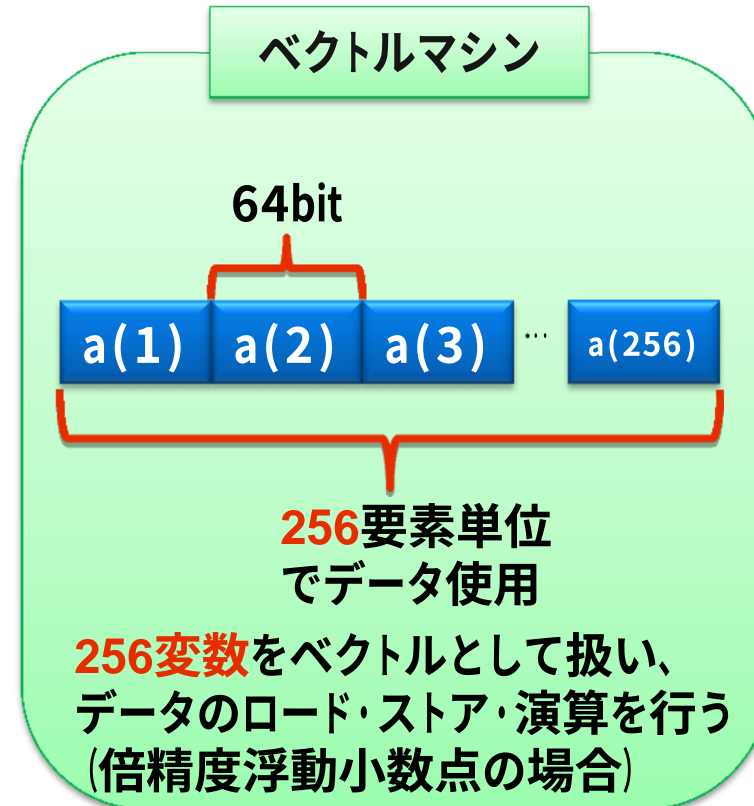
●最適化レベルを高くするとコンパイル時間が長くなる場合があります

●最適化レベルによっては 計算結果が変わる場合があります

2. PCクラスタシステムにおけるベクトル化

ベクトル化について

- スーパーコンピュータ SX-ACEと基本的な概念は同じです
- 大きな違いはベクトル化される単位になります
- SIMD(Single Instruction Multiple Data): 1つの命令で複数データを処理



2. PCクラスタシステムにおけるベクトル演算

ベクトル演算はMMX / SSEという命令セットとして定義されています

- ●MMX　整数演算のベクトル化
- ●SSE　単精度浮動小数点演算のベクトル化
- ●SSE2　倍精度浮動小数点演算のベクトル化
- ●SSE3　データの詰め替え命令や複素数高速化命令の追加
- ●SSE4　積和命令の追加など
- ●AVX　Sandy Bridgeから対応 256bit単位に拡張
- ●AVX2　Haswellから対応 浮動小数点演算のFMAをサポート

ベクトル化の特長

- ●基本的にコンパイラが自動ベクトル化を行います
- ●ベクトル化されるのは最も内側のループになります
- ●128bitの単位でベクトル化するため、単精度なら4要素、倍精度なら2要素単位
- ●1クロックで128bitのベクトル乗算・ベクトル加算を一つずつ計算可能です
- ●演算命令に加えて、ロードやストアの命令もベクトル化されます

3. 演習環境の説明

演習環境の説明

- ディレクトリ構成

```
Para/
|-- practice_3_1   演習3 コンパイラオプション
|-- practice_3_2   演習3 unroll
|-- practice_4     演習4 ベクトル化
|-- exec.tune_1    チュートリアル1
|-- exec.tune_2    チュートリアル2
`-- exec.tune_3    チュートリアル3
```

```
practiceディレクトリ内の構成
  ○○○.f          ソースコードファイル
  comp.csh        コンパイルシェル
  run.csh         実行シェル
  answer/         解答例ディレクトリ
```

※ exec.tuneディレクトリ内の構成は後ほど説明

- 使用コード

```
行列積コード
do  j=1,n
   do k=1,n
      do  i=1,n
        a(i,j)=a(i,j)+b(i,k)*c(k,j)
      enddo
   enddo
enddo
```

3. 演習問題: コンパイラオプション

目的
- コンパイラオプションによるコンパイル時のメッセージと性能の違いを確認する

手順
- 最適化オプションの変更によるコンパイルとメッセージの確認
- 実行(性能値の確認)

ディレクトリ
- practice_3_1

3. 演習問題: コンパイラオプション（コンパイル）

コンパイラオプション

- コンパイラ バージョン表示（-V）
- ベクトル化診断メッセージ （-vec-report）
- 最適化オプション（-O0、-O1 、-O2、-O3）

```
ifort -V -vec-report -O0 -o tune0_o0.exe mat_tune0.f
```

```
ifort -V -vec-report –O? -o tune0_o?.exe mat_tune0.f
```

コンパイル方法

```
% ./comp.csh
```

3. 演習問題: コンパイラオプション (コンパイル、実行)

ベクトル化診断メッセージ

-O0 ： コンパイラバージョンのみ
-O1 ： 同上
-O2 ： ベクトル化のメッセージが出力
-O3 ： -O2よりも多いベクトル化のメッセージが出力

実行シェル

```
#!/bin/csh
#PBS -q H-single
#PBS -l cpunum_job=1,elapstim_req=0:10:00,memsz_job=1GB
#PBS -j o -N practic_3_1

cd $PBS_O_WORKDIR

time ./a.out
```

NQS II オプション
-q ジョブクラス名を指定
-l 使用CPU数、経過時間、メモリ容量の申告
-j o 標準エラー出力を標準出力と同じファイルへ出力する
-N ジョブ名を指定

実行時オプション
指定なし

ジョブ投入方法
```
% qsub ./run.csh
Request *****.hcc submitted to queue: H-single.
```

*****はジョブ番号

3. 演習問題: コンパイラオプション（実行結果）

性能値

● 結果ファイル practic_3_1.o*****の確認

オプション	性能値
-O0	0.323 (GFlops)
-O1	1.964 (GFlops)
-O2	2.776 (GFlops)
-O3	9.394 (GFlops)

性能値はプログラムが
演算数と経過時間から算出している値

-O0と-O3では約３０倍の性能差となっています
行列積コードはコンパイラによる最適化の効果が非常に大きいコード

● デフォルトコンパイラオプションは -O2

-O3を指定した場合、コンパイル時間が長くなる場合があります

※ 注意
演習環境ではジョブ実行が専有で行われないため、
性能値がばらつく可能性があり、上記の値と大きく違う場合もあります

3. 演習問題: ループアンロール

目的
- アンロールによる高速化を確認する

手順
- ソースコード修正とコンパイル(-O1を使用する)
- 実行(性能値の確認)

ディレクトリ
- practice_3_2　2重目kループでのアンロール(4段)

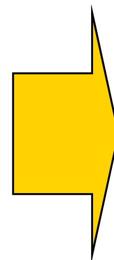
3. 演習問題: ループアンロール （ソースコード修正）

ソースコード修正

●practice_3_2

行列積コード
```
do j=1,n
  do k=1,n
    do i=1,n
     a(i,j)=a(i,j)+b(i,k)*c(k,j)
    enddo
  enddo
enddo
```

演習では余り処理を考慮しません



行列積コード
```
do j=1,n
  do k=1,n,4
    do i=1,n
      a(i,j)=a(i,j)+b(i,k)   *c(k,j)
&         ストア   ロード  +b(i,k+1)*c(k+1,j)
&                          +b(i,k+2)*c(k+2,j)
&                          +b(i,k+3)*c(k+3,j)
      enddo
    enddo
enddo
```

配列aのロード・ストアが1/4になります
メモリアクセスが減ることによる高速化を期待します

コンパイル方法
```
% ./comp.csh
```

ジョブ投入方法
```
% qsub ./run.csh
```

3. 演習問題: ループアンロール （実行結果）

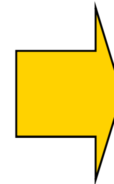
性能値

- practice_3_2

行列積コード

```
do j=1,n
  do k=1,n,4
    do i=1,n
      a(i,j)=a(i,j)+b(i,k)  *c(k,j)
&                 +b(i,k+1)*c(k+1,j)
&                 +b(i,k+2)*c(k+2,j)
&                 +b(i,k+3)*c(k+3,j)
      enddo
   enddo
enddo
```

オリジナルの性能値
（演習問題:コンパイルオプション –O1）
-O1　1.964 (GFlops)



オプション　性能値
-O1　2.547(GFlops)

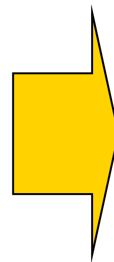
3. 補足: ループアンロール

余り処理を考慮したソースコード修正の例

- practice_3_2

行列積コード

```
do j=1,n
  do k=1,n
    do i=1,n
     a(i,j)=a(i,j)+b(i,k)*c(k,j)
    enddo
  enddo
enddo
```



行列積コード

```
n1= mod(n,4)
do j=1,n
  do k=1,n1
    do i=1,n
      a(i,j)=a(i,j)+b(i,k)  *c(k,j)
    enddo
  enddo

  do k=n1+1,n,4
    do i=1,n
      a(i,j)=a(i,j)+b(i,k)  *c(k,j)
&                  +b(i,k+1)*c(k+1,j)
&                  +b(i,k+2)*c(k+2,j)
&                  +b(i,k+3)*c(k+3,j)
      enddo
   enddo
enddo
```

余りの部分を計算

4段アンロール部分

休憩

10分間休憩

4. 演習問題: ベクトル化 (説明)

「-vec-report=3」を指定した例

- 各ループについてベクトル化が行われたか、
  行われなかった場合はなぜベクトル化しなかったかが出力されます

```
ifort -vec-report=3 -mcmodel=large -shared-intel cg.f90

cg.f90(36): (col. 1) remark: LOOP WAS VECTORIZED.
cg.f90(40): (col. 1) remark: loop was not vectorized: not inner loop.
cg.f90(40): (col. 1) remark: LOOP WAS VECTORIZED.
cg.f90(80): (col. 1) remark: loop was not vectorized: not inner loop.
cg.f90(56): (col. 4) remark: LOOP WAS VECTORIZED.
cg.f90(60): (col. 4) remark: LOOP WAS VECTORIZED.
cg.f90(78): (col. 4) remark: LOOP WAS VECTORIZED.
cg.f90(117):(col. 8) remark: LOOP WAS VECTORIZED.
cg.f90(93): (col. 8) remark: loop was not vectorized: not inner loop.
cg.f90(93): (col.                WAS VECTORIZED.
cg.f90(100): (col.                was not vectorized: not inner loop.
cg.f90(99): (col. 11) remark: loop was not vectorized: existence of vector dependence.
cg.f90(98): (col. 13) remark: vector dependence: assumed ANTI dependence between y line 98 and y line 98.
cg.f90(98): (col. 13) remark: vector dependence: assumed FLOW dependence between y line 98 and y line 98.
cg.f90(98): (col. 13) remark: vector dependence: assumed FLOW dependence between y line 98 and y line 98.
cg.f90(98): (col. 13) remark: vector dependence: assumed ANTI depende
cg.f90(107):(col. 8) remark: loop was not vectorized: not inner loop.
cg.f90(106):(col. 11) remark: loop was not vectorized: vectorization possible but seems inefficient.
```

ベクトル化された

最内ループでないためベクトル化されない

数字は行番号

依存関係があるためベクトル化できない

ベクトル化できるが効果が薄いためベクトル化しない

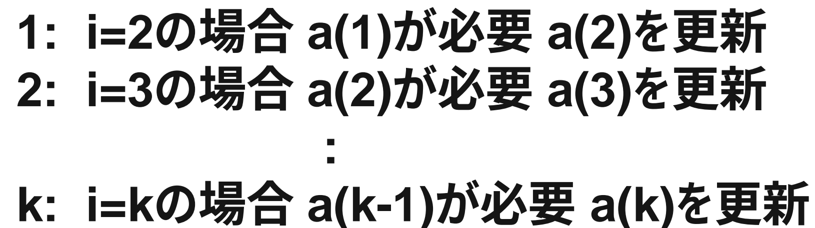
4. 演習問題: ベクトル化 (説明)

ベクトル化を阻害する要因

- データの依存関係
- 関数・サブルーチンの呼び出し
- 構造体へのアクセス
  - 構造体は要素がメモリ上に飛び飛びに配置され、ベクトル化が困難となります
- 条件分岐
  - 複数の条件分岐や、分岐内容で処理が変わる場合は、ベクトル化が困難になります
- ループの終了条件が不明
  - while文など
- ポインタアクセス

データの依存関係の確認

```
do i=2, 1000
      a(i) = a(i-1)
enddo
```



4. 演習問題: 最適化と指示行(説明)

最適化(ベクトル化)

- 最適化としてコンパイラが行います
  - 但し、ベクトル化できると判断してもループサイズが小さいなど、ベクトル化の効果が見込まれないときはベクトル化を行いません

指示行

- 指示行とは
  - コードに埋め込み、コンパイラに最適化のヒントを与えます
  - あるいは強制的な最適化を行わせます
- 指示行形式
  - !DEC$(CDEC$) または !DIR$ (CDIR$) (Fortran)
  - #pragma (C言語)
- ベクトル化に関する指示行
  - !DEC$ IVDEP 「依存関係がない」というヒントをコンパイラに与える
ベクトル化の効果がないと判断した場合はベクトル化は行わない
  - !DEC$ SIMD ベクトル化を行う

※ 注意
ベクトル化に関する指示行は、本来ベクトル化できない依存関係があるループもベクトル化できる(結果が変わる)ため、ユーザ責任で追加する

4. 演習問題: ベクトル化

目的

- 依存関係がある場合の指示行によるベクトル化で、
  結果が変わってしまうことを確認する

手順

- ソースコード修正(指示行)とコンパイル(-O3、-vec-reportを使用する)
- 実行と結果が変わることの確認

ディレクトリ

- practice_4

4. 演習問題: ベクトル化 (指示行追加)

コンパイラオプション

- コンパイラオプション -O3 -vec-report=3

指示行

- ループの直前に指示行SIMDを追加します

```
!DEC$ SIMD
   do ii = 1, len
     idata2(ii) = idata2(idata1(ii))
   enddo
!DEC$ SIMD
   do ii = 1, len
     rdata3(ii) = rdata3(idata1(ii))
   enddo
```

指示行IVDEPでは
「依存関係がない」ヒントを与えるが、
この演習問題ではベクトル化の効果が小さい
と判断されるためベクトル化は行われません

コンパイル

- コンパイル時のベクトル化メッセージを確認します

コンパイル方法
% ./comp.csh

ジョブ投入方法
% qsub ./run.csh

4. 演習問題: ベクトル化 (結果確認)

結果確認

●依存関係があるため、ベクトル化すると結果が変わってしまいます

i		1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
idata1()		3	9	8	6	2	5	2	5	8	8
初 data2/3()		3	9	8	6	2	5	2	5	8	8
更新後	逐次(正)	8	8	5	5	8	8	8	8	8	8
	idata2() int vec	8	8	5	5	8	2	8	2	2	2
	rdata3() real*8 vec	8	8	5	5	8	2	8	8	8	8

i=6に着目

逐次: idata2(data1(6)) → idata2(5)直前(i=5)で更新された結果を参照する(正しい)

int vec: idata2(data1(6)) → idata2(5)i=5～8のまとまり(idata2(2,5,2,5))でロードした値を参照する(i=5で更新される idata2(5)=8ではない)

real vec: rdata3(data1(6))→rdata3(5) i=5～6のまとまり(rdata3(2,5))でロードした値を参照する(i=5で更新される idata2(5)=8ではない)

ベクトル化のまとまり(integer:4つ、real*8:2つ)でロードするため、
依存部分は更新後の値を使わない(間違った結果となる)

5. 演習問題(チュートリアル形式): 行列積チューニング

目的

- ソースコード修正による高速化をチュートリアル形式で学ぶ

手順

- ここまでの演習問題と同じ行列積コードを用います
- 各ディレクトリに元ソースコードを用意してあり、
  各自がソースコード修正、コンパイル、実行を行っていきます
- 解答例(ソースコード修正と実行結果)も別ディレクトリに用意してあるので、
  各自が時間配分の中で参照してください

ディレクトリ

- exec.tune_1からexec.tune_3
- 解答例は各ディレクトリの ./answer 配下

5. 演習問題(チュートリアル形式): 行列積チューニング

チュートリアル1

- 問題と着目点
  - 3重ループの並びを入れ替える
    元はjki パターン　kjiとijkの2通りを試す
  - ループの並びによる配列のアクセスパターンと性能の関係をみる
  - -O1でコンパイル、実行する

- 結果
  - 演習3(practice_3_1ディレクトリ参照)はjkiパターン
    -O1の性能 1.964GFLOPS
  - 最内ループをなるべく連続アクセスとするのがポイント

  - -O2以上ではコンパイラが最適化を行ってループを入れ替えるため、
    本コードでは多重ループの並びによる性能差は表れません

5. 演習問題(チュートリアル形式): 行列積チューニング

チュートリアル2

- 問題と着目点
  - チュートリアル1の結果を改善するため、jkループのunrollを行う
  - kループのunrollは演習3(practice_3_2参照)の結果を用意済みです
  - kループのみのunroll(修正前のソースコード)を-O2でコンパイル、実行する
  - 次に、さらに外側jループを4段unrollとする
  - 修正後のjkループのunrollを-O2でコンパイル、実行する

- 結果
  - kループのみのunrollは演習3(practice_3_2)の
-O1の性能 1.964GFLOPS が -O2により 2.776GFLOPS に向上する
  - jkループのunrollによりさらに2倍以上性能が向上する

5. 演習問題(チュートリアル形式): 行列積チューニング

チュートリアル3

- 問題と着目点
  - チュートリアル2の結果を改善するため、キャッシュブロッキングを行う
  - ブロッキングサイズはkループを256、iループを512とする
  - -O2でコンパイル、実行する

- 結果
  - チュートリアル2の性能に比べて、さらに性能が向上する

キャッシュブロッキング
全体の領域を細かなブロックに再分割する事で、近隣データの再利用性を高め、
キャッシュヒット率を向上させる

6. まとめと質疑応答

まとめと質疑応答

- 演習問題、チュートリアルのソースコード環境はお持ち帰り、
  高速化の参考にしてください