

スカラチューニングと OpenMPによるコードの高速化

松本洋介

千葉大学大学院理学研究院

謝辞

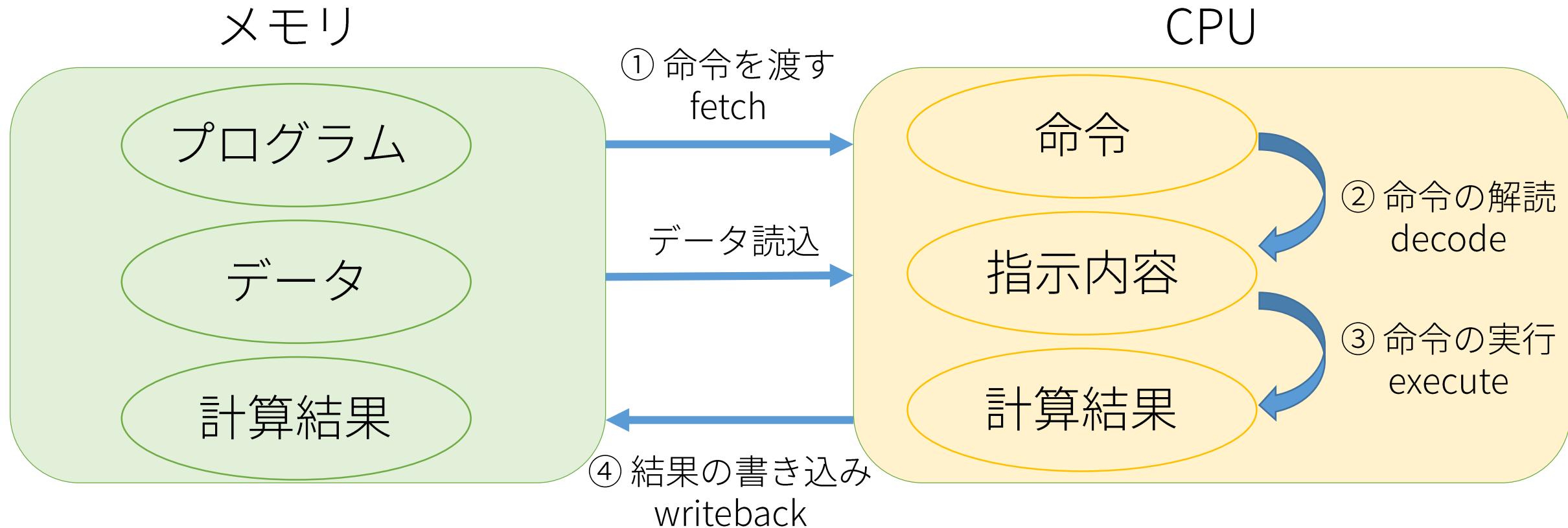
C言語への対応：簗島敬 (JAMSTEC)

内容

1. イントロダクション
2. スカラチューニング
3. OpenMPによる並列化
4. 最近のHPC分野の動向
5. まとめ

イントロダクション

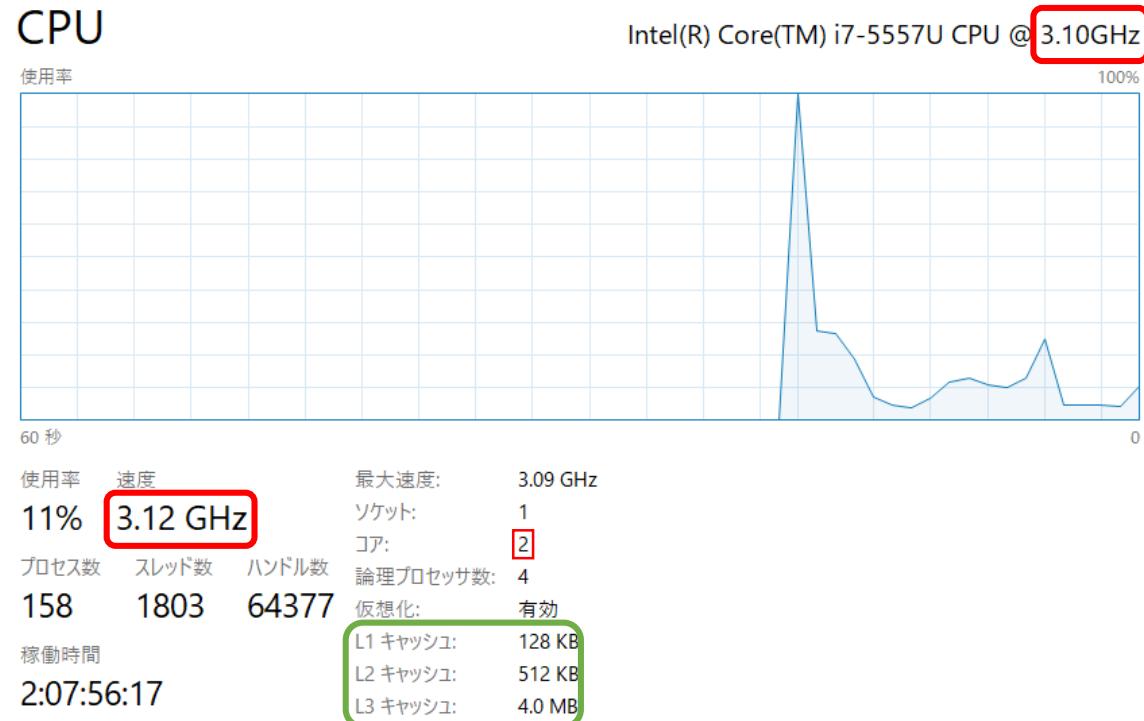
CPUが命令を実行する流れ



計算に時間がかかるところは、

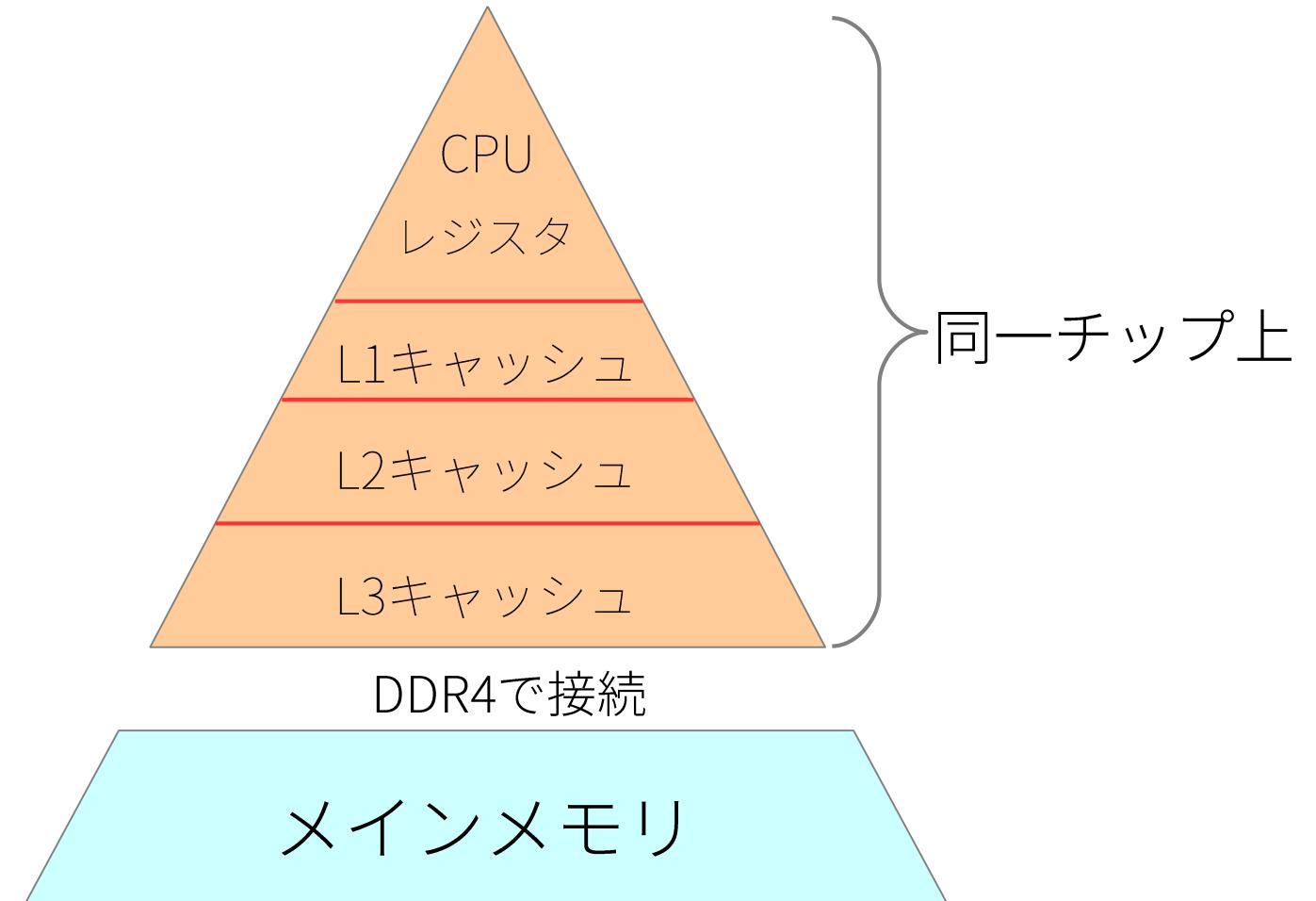
- 1. 命令の実行 (②、③)
- 2. データの読み込み (①、④)

CPUの命令処理性能



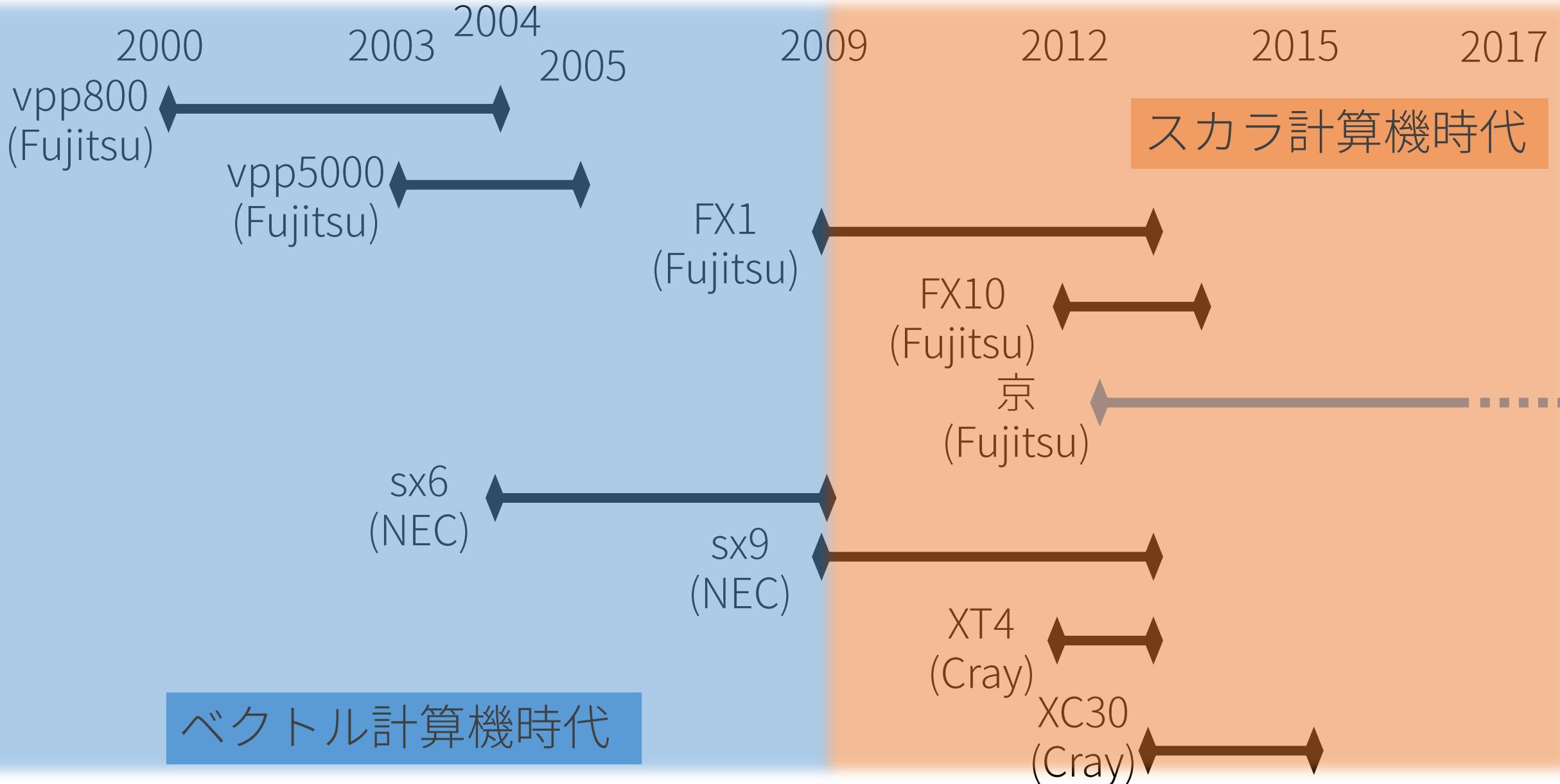
- **3.1 GHz**: 1秒間に 3.1×10^9 回の処理(①, …, ④)を実行できる。処理単位をクロック (サイクル) という
- FLOPS: 1秒間に浮動小数点演算 (足し算、掛け算など) をできる回数
- 最近のIntel CPUは、クロックあたり 16FLOPS
- CPUの性能の指標として、例えば、 $16 \times 3.1\text{GHz} \times 2\text{ core} = 96\text{ GFLOPS}$
- 緑枠はキャッシュの情報 (次ページ)

メモリの階層構造



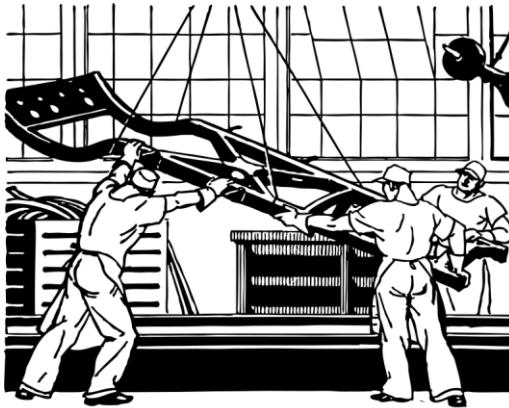
- CPUに近いほど高速低容量
- レジスタ, 32bit / 64bit、1クロック
- L1\$ 数10 kB, 数クロック
- L2\$ ~MB, > 100GB/s
- メモリ数10GB, 数10GB/sec
- CPUが計算をするときは、まず近いところから必要なデータを探す。なければメモリから取り出す。 → キャッシュミス

私のスパコン利用歴



スカラ／ベクトル？

スカラ



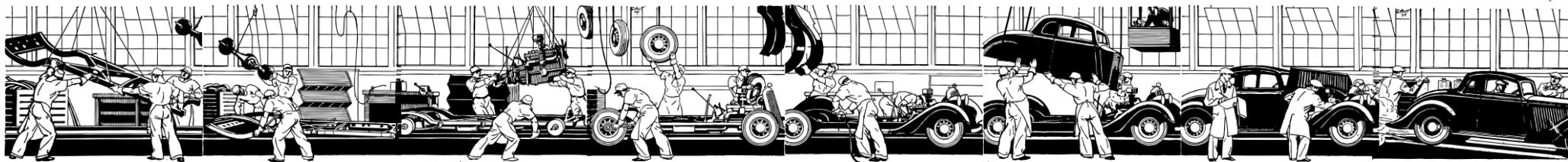
同じ車を何台も作る作業
に例えると…

```
do k=1,100  
do j=1,100  
do i=1,100  
    a(i,j,k) = c*b(i,j,k)+d(i,j,k)  
enddo  
enddo  
enddo
```

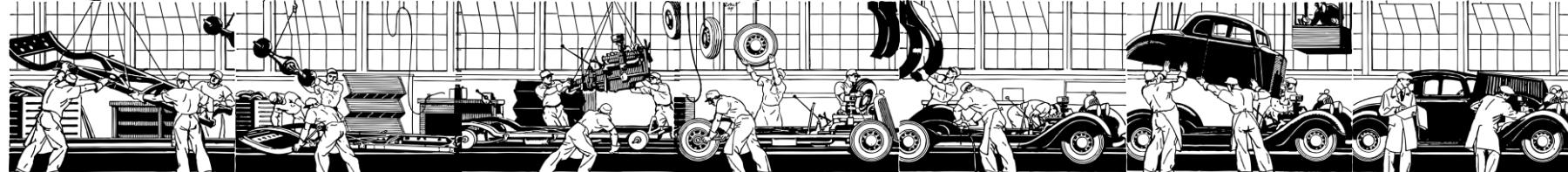
ベクトル（データのパイプライン処理）

時間 →

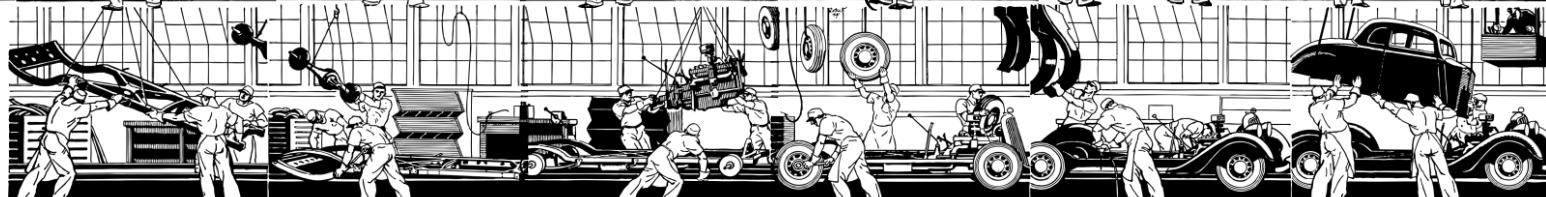
1台目



2台目



3台目



これまでのCPUの演算処理の高速化のしくみ

- サイクル時間（1/周波数）の短縮（→ ~3GHzで頭打ち）
- ベクトル化（複数のデータを同時に同じ計算すること）
 - パイプライン処理
 - SIMD（複数レジスタと演算器）
- メモリ構造の階層化（キャッシュの有効利用）
- 並列化（マルチコア）

近年の計算機では、SIMD化、キャッシュヒット率の向上、マルチコアによる並列化が高速化のポイント

スカラチューニング

対象

- 宇宙磁気流体プラズマシミュレーションにかかること
- すなわち、
 - 差分法：磁気流体（MHD）・ブラソフシミュレーション
 - 粒子法：電磁粒子（PIC）シミュレーション
- 行列の演算（例：LU分解など）は対象外
- Fortran, C

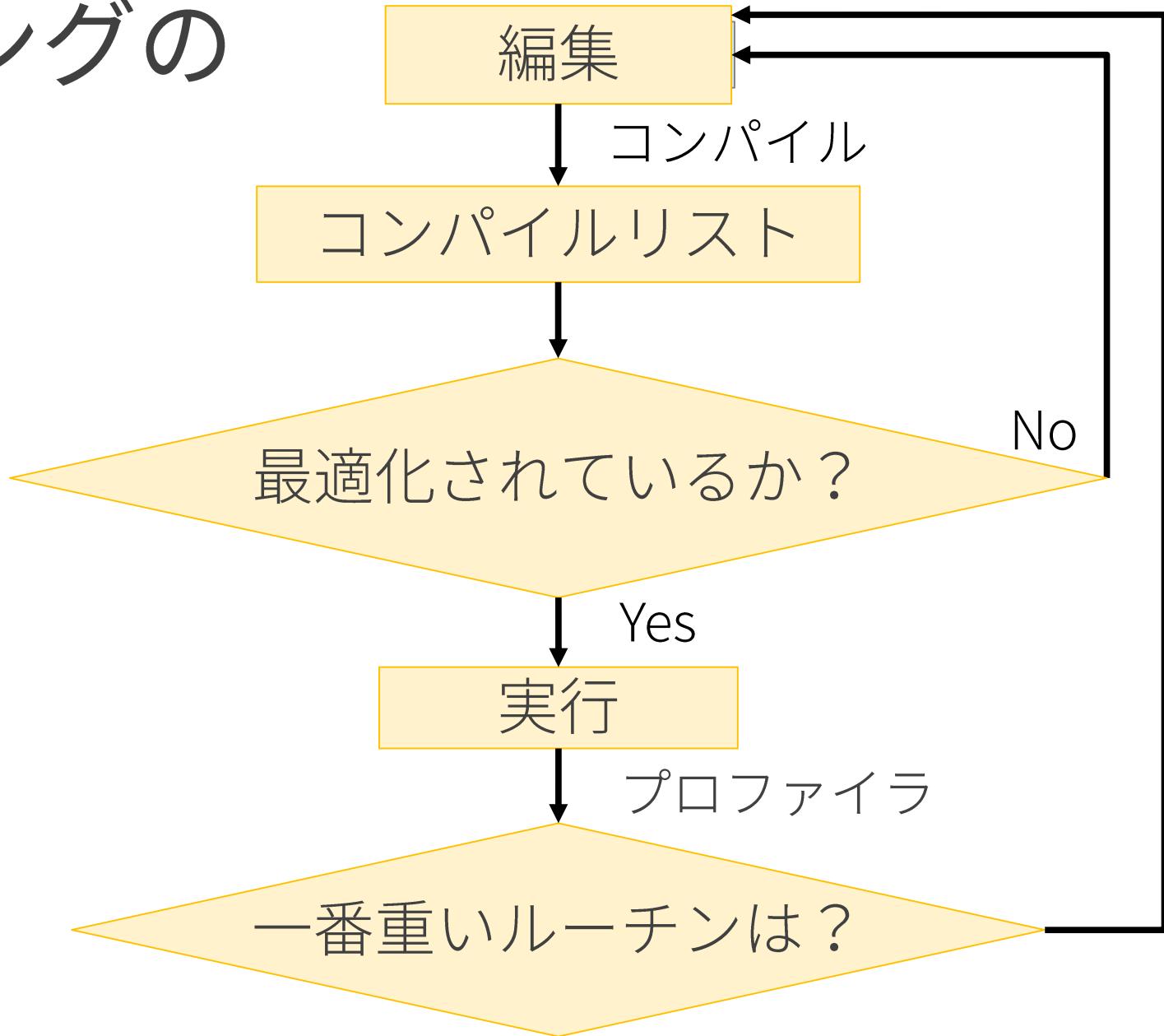
注意

一般に、チューニングすると可読性が損なわれます。まずは読みやすいコードを書き、充分テストしてバグを除去してからチューニングを行いましょう。

チューニングが必要？

- 無理にしなくて良いです。 (好きでもしんどい)
- 最先端 (大規模) シミュレーション研究では必須。なぜなら、、、
- 1ランで数週間→2倍の速度向上で10日単位の短縮
- スーパーコンピュータ「京」などの大規模計算申請書類では、実行効率・並列化率などの情報が求められる。
- 実行効率15%以上あれば、計算機資源の獲得において、他分野との競争力になる。

チューニングの手順



コンパイルリスト

- 最適化情報の詳細を出力
 - インライン展開等の最適化
 - SIMD化
 - 並列化
- コンパイルオプション
 - gcc/gfortran: N/A
 - icc/ifort: -qopt-report-phase={all, vec, par,openmp}

プロファイルの利用

- 各サブルーチンの経過時間を計測
- ホットスポット（一番処理が重いサブルーチン）から最適化
- 商用コンパイラ (intel, PGI, スパコン等) では、詳細情報（キャッシュミス率、FLOPS）が得られる

- GNUでは、gprof

- gprofの使い方

```
$ gfortran (gcc) -pg test.f90
```

```
$ ifort (icc) -p test.f90
```

```
$ ./a.out
```

```
$ gprof ./a.out gmon.out > output.txt
```

Flat profile:

	Each sample counts as 0.01 seconds.					
	% cumulative	self	self	total		
time	seconds	seconds	calls	s/call	s/call	name
53.24	507.03	507.03	2048	0.25	0.25	_particle_MOD_particle_solv
33.32	824.40	317.37	2048	0.15	0.15	_field_MOD_ele_cur
6.81	889.23	64.83	2048	0.03	0.19	_field_MOD_field_fdtd_i
6.37	949.94	60.71	2048	0.03	0.03	_boundary_MOD_boundary_particle
0.24	952.20	2.26	2048	0.00	0.00	_field_MOD_cgm
0.02	952.37	0.17	3	0.06	0.06	_fio_MOD_fio_energy
0.01	952.51	0.14	4096000	0.00	0.00	_random_gen_MOD_random_gen_bm
0.00	952.55	0.04	1	0.04	0.18	_init_MOD_init_loading
0.00	952.56	0.01	57344	0.00	0.00	_boundary_MOD_boundary_phi

output.txtの中身

スカラチューニングのポイント

- コンパイラ (=人) にやさしいプログラム構造
 - ループ内で分岐は使わない (if文の代わりにmin, max, sign で、goto文は不可)
 - ループ内処理を単純にする (SIMD化促進)
 - 外部関数のインライン展開
- データの局所化を高める
 - 繰り返し使用するデータはなるべくひとまとめにして、キャッシュに乗るようにする。
 - 一時変数の再利用
 - 連續アクセス
 - ポインタは使わない (Fortran)

基本的なtips

- 割り算を掛け算に

➤ $a(i) = b(i)/c \rightarrow c = 1.0/c ; a(i) = b(i)*c$

- べき乗表記はなるべく使わない

➤ $a(i) = b(i)^{**}2 \rightarrow a(i) = b(i)*b(i)$

➤ $a(i) = b(i)^{**}0.5 \rightarrow a(i) = \sqrt{b(i)}$

- 因数分解をして演算数を削減

➤ $y=a*x*x*x*x+b*x*x*x+c*x*x+d*x \rightarrow y=x*(d+x*(c+x*(b+x*(a))))$

➤ 演算回数13 → 7

- 一時変数は出来る限り再利用 (なるべくCPUの近くにデータを置く)

分岐処理の回避例

例 1

```
do i=1,nx  
  if(a /= 0.0)then  
    b(i) = c(i)/a  
  else  
    b(i) = c(i)  
  endif  
enddo
```

例 2

```
do i=1,nx  
  if(a(i)*b(i) < 0.0)then  
    c(i) = 0  
  else  
    c(i) = sign(1.0,a(i)) &  
          *min(abs(a(i)),abs(b(i)))  
  endif  
enddo
```

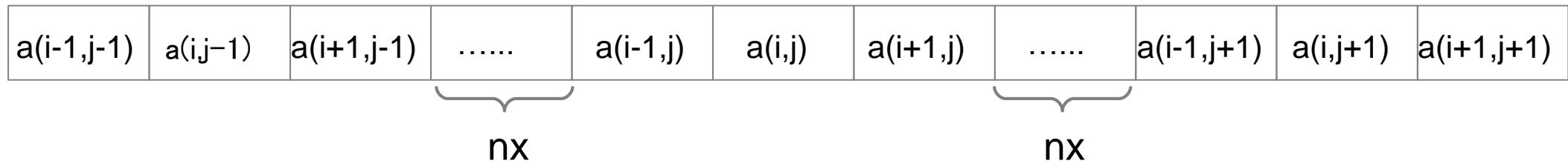
```
if(a == 0.0) a=1.0  
a = 1.0/a  
do i=1,nx  
  b(i) = c(i)*a  
enddo
```

```
do i=1,nx  
  c(i) = sign(1.0,a(i)) &  
        *max(0.0,  
              min(abs(a(i)),  
                  sign(1.0,a(i))*b(i))) &  
              )  
enddo
```

配列の宣言とメモリ空間1 (Fortran)

```
dimension a(nx,ny)
```

配列aのメモリ空間上での配置は、



```
do i=1,nx  
  do j=1,ny  
    a(i,j) = i+j  
  enddo  
enddo
```



```
do j=1,ny  
  do i=1,nx  
    a(i,j) = i+j  
  enddo  
enddo
```

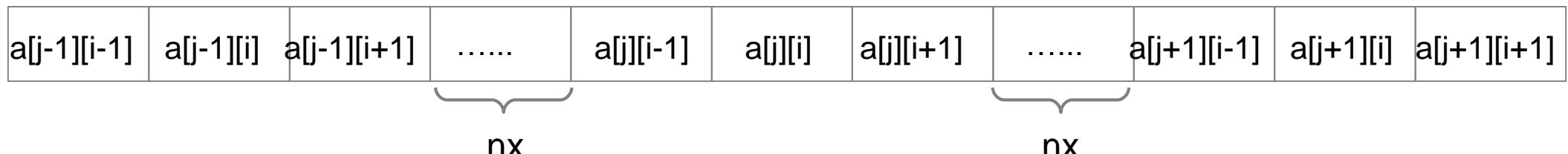
間隔 nx で飛び飛びにアドレスにアクセスすることになるので、メモリへの書き込みが非常に遅い

アドレスに連続アクセスするので、メモリへの書き込みが速い

配列の宣言とメモリ空間1 (C/C++)

```
float a[ny][nx];
```

配列aのメモリ空間上での配置は、



```
for(i=0;i<nx;i++){
    for(j=0;j<ny;j++){
        a[j][i] = i+j;
    }
}
```

```
for(j=0;j<ny;j++){
    for(i=0;i<nx;i++){
        a[j][i] = i+j;
    }
}
```

間隔 nx で飛び飛びにアドレスにアクセスすることになるので、メモリへの書き込みが非常に遅い

アドレスに連続アクセスするので、メモリへの書き込みが速い

配列の宣言とメモリ空間2

連続の式 $\rho^{n+1} = f(\rho^n, V_x^n, V_y^n)$

次のステップに進むためには、自分自身 (ρ) の他に
速度場 (V_x, V_y) が必要

`dimension rho(nx,ny), vx(nx,ny), vy(nx,ny), ...`

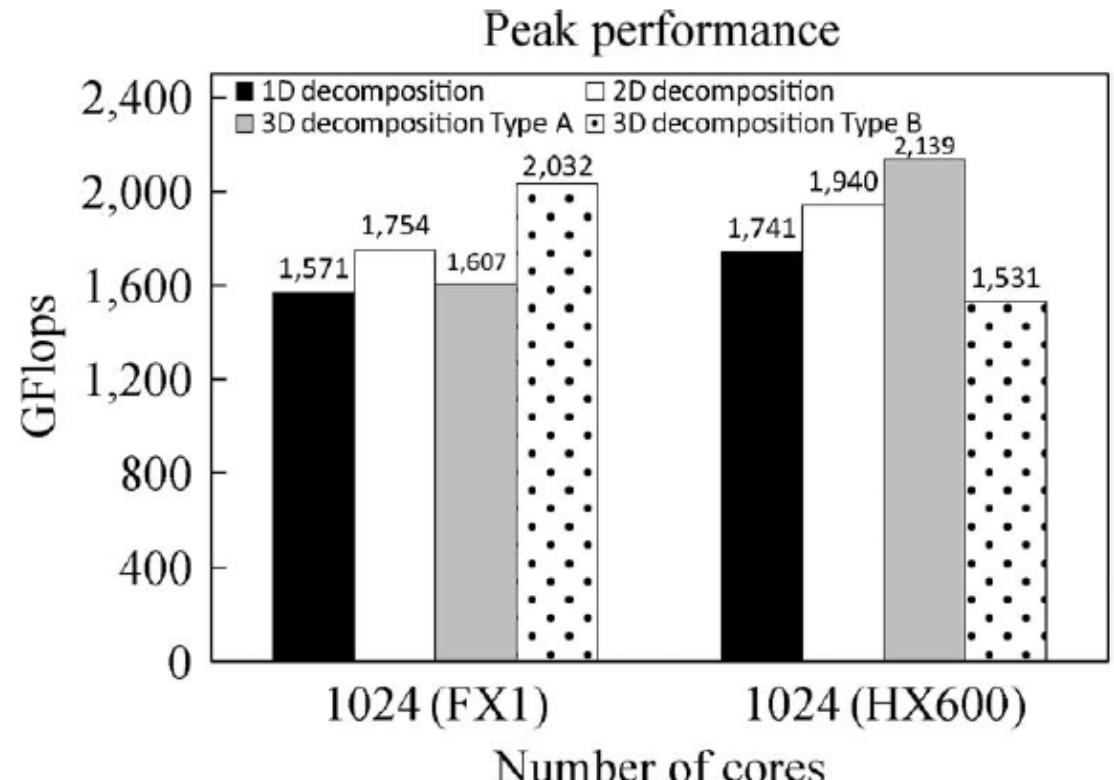
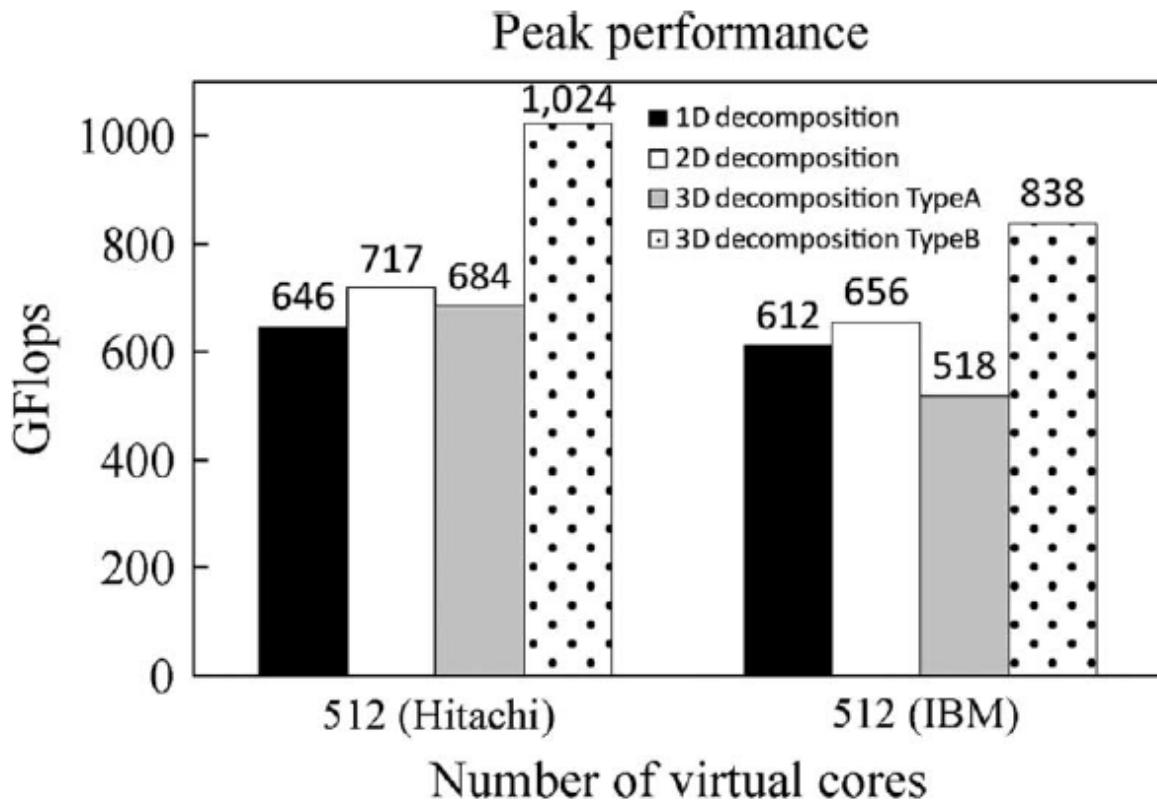
と変数を個別に用意する代わりに、

`dimension f(8,nx,ny) ! 1:rho, 2:p, 3-5:v, 6-8:B`

のように、一つの変数にまとめて配列を用意する。このよ
うにすると、必要となる各物理量がメモリ空間上の近い位
置に配置される（キャッシュラインにのりやすい）。
→システム方程式を解くための工夫

配列の宣言とメモリ空間2 (続き)

TypeA: $f(nx, nx, nz, 8)$ TypeB: $f(8, nx, nx, nz)$



Fukazawa et al., IEEE Trans. Plasma Sci., 2010.

近年のキャッシュ重視型のスパコンにおいて効果的

配列の宣言とメモリ空間3 (C言語)

C言語で静的に配列を宣言する場合は、

```
float a[ny][nx];
```

とするが、領域分割の並列計算では動的に (mallocで) 配列を確保する場合が多く、上記の宣言では難しい。2次元配列を1次元配列として宣言する方が、メモリ空間上で連続的に領域を確保できる。

```
double *a;  
a=(double*)malloc(sizeof(double)*nx*ny);  
  
for (j=0;j<ny;j++){  
    for (i=0;i<nx;i++){  
        a[nx*j+i] = i+j;  
    }  
}
```

インライン展開

- 外部（ユーザー定義）関数はプログラムの可読性向上に一役。
しかし、、

```
do i=1,nx  
    a(i) = myfunc(b(i))  
enddo
```

のように、ループ内で繰り返し呼び出す場合、呼び出しのオーバーヘッドが大きい。関数内の手続きが短い場合は、内容をその場所に展開する→インライン展開

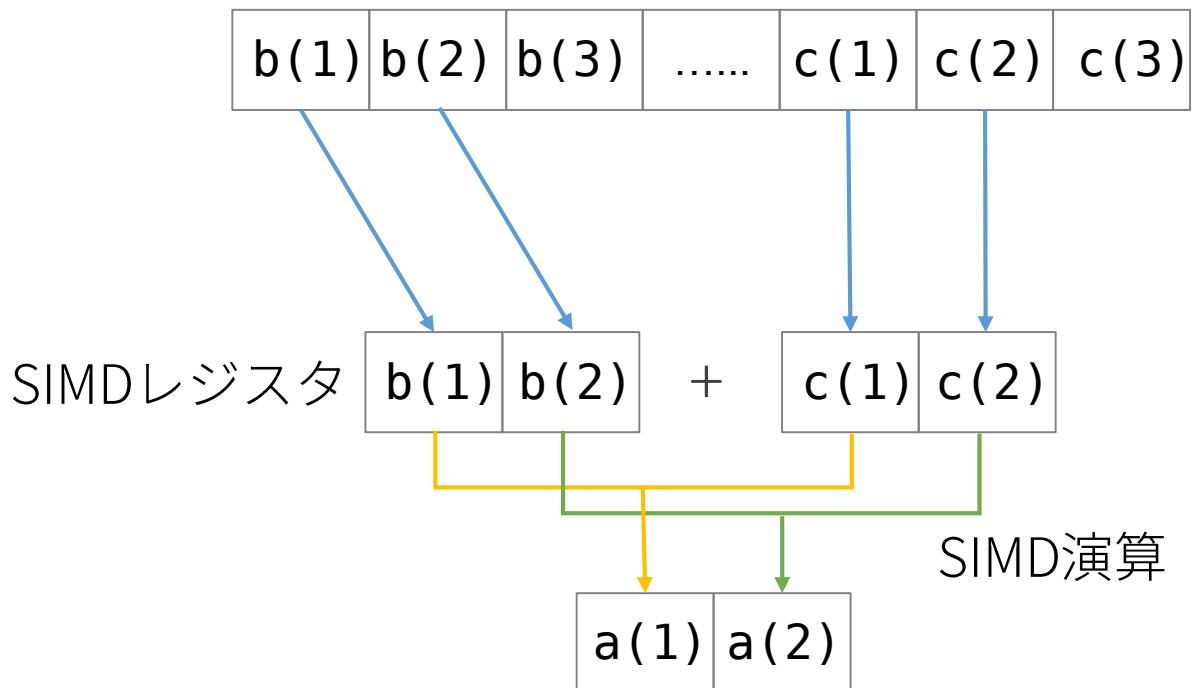
- コンパイル時に指定（同一ファイル内に定義される関数）
 - gcc/gfortran: -O3 もしくは -finline-functions
 - icc: -O{2,3}, ifort: -finline
- コンパイル時に指定（別ファイル内に定義される関数）
 - icc/ifort: -fast もしくは -ipo

SIMD: Single Instruction Multiple Data

- 同じ計算を複数のデータに対して一括して処理する
- ユーザレベルではベクトル化と同じ。ただし、ベクトル長は2~8と、ベクトル計算機のそれ(256)に比べてずっと短い。
- 最内側ループに対してベクトル化
- コンパイルオプションで最適化
 - gcc/gfortran: -m{avx, sse4}
 - icc/ifort: -x{avx, sse4}

```
do i=1,nx  
  a(i) = b(i)+c(i)  
enddo
```

メモリもしくはキャッシュ



SIMD化の阻害例

SIMD化されない

書き方の工夫

SIMD化される

例 1: ループ番号間に依存性がある場合

```
a(1) = dx
do i=2,nx
  a(i) = a(i-1)+dx
enddo
```

```
do i=1,nx
  a(i) = i*dx
enddo
```

例 2: ループ番号によって処理が異なる場合

```
do i=1,nx
  if(a(i) < 0)then
    b(i-1) = c*a(i)
  else
    b(i+1) = c*a(i)
  endif
enddo
```

```
do i=1,nx
  w1 = 0.5*(1.0-sign(1.0,a(i)))
  w2 = 0.5*(1.0+sign(1.0,a(i)))
  b(i-1) = c*w1*a(i)
  b(i+1) = c*w2*a(i)
enddo
```

OpenMPによるコードの並列化

アムダールの法則

全処理=1

並列数=1

逐次処理
(1-p)

並列化可能部分 (p)

並列数=2

p/2

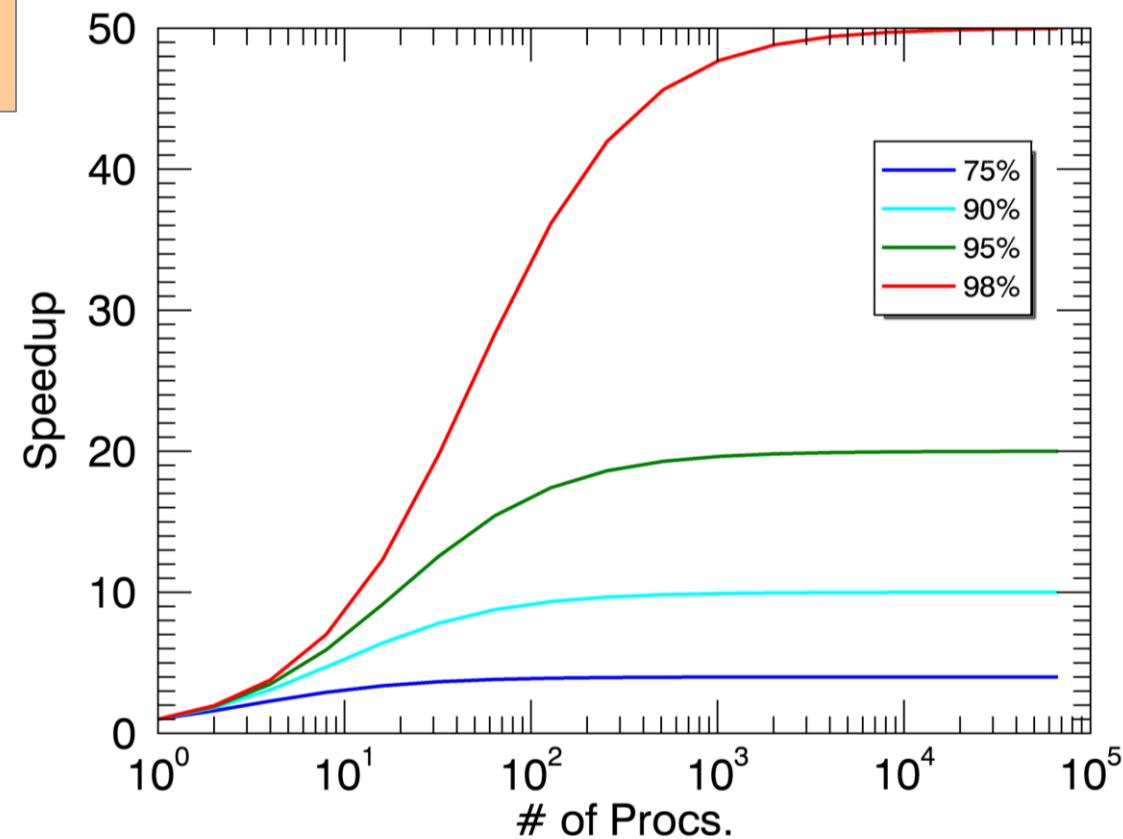
⋮

並列数=n

p/n

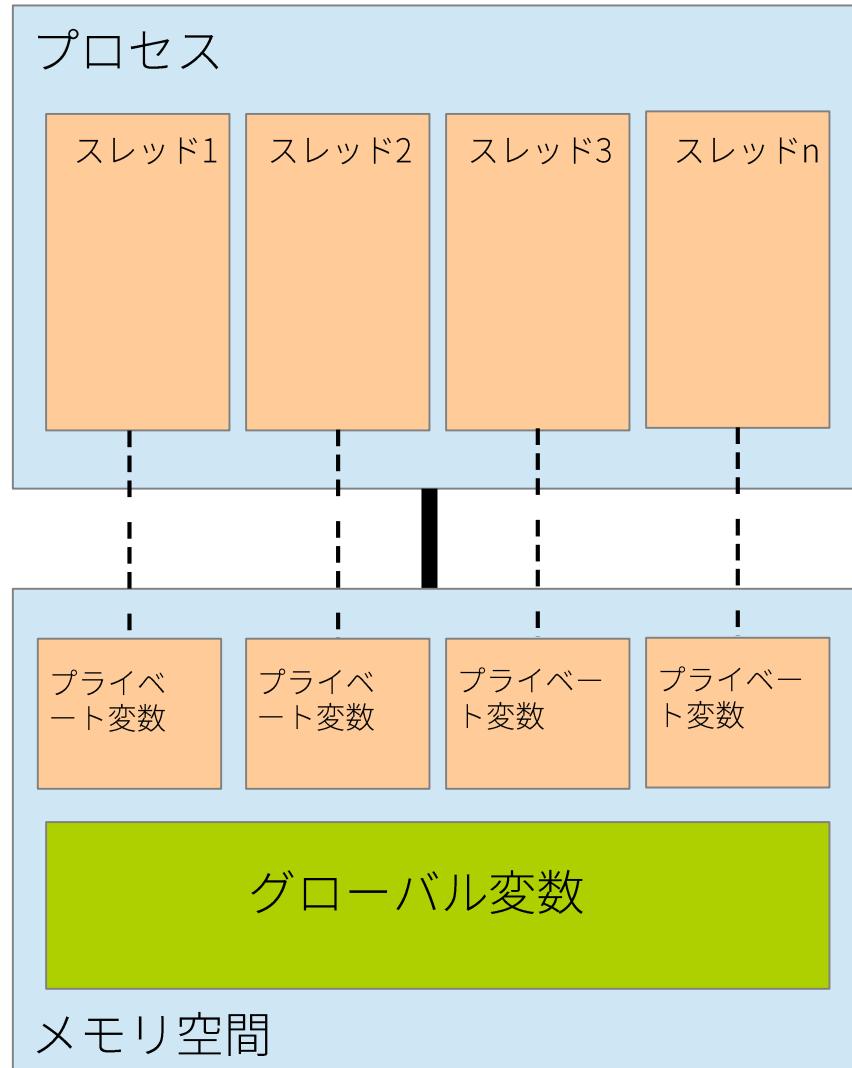
$$\text{性能向上率} = \frac{1}{(1-p) + \frac{p}{n}}$$

少なくも並列化率p>0.99である必要あり

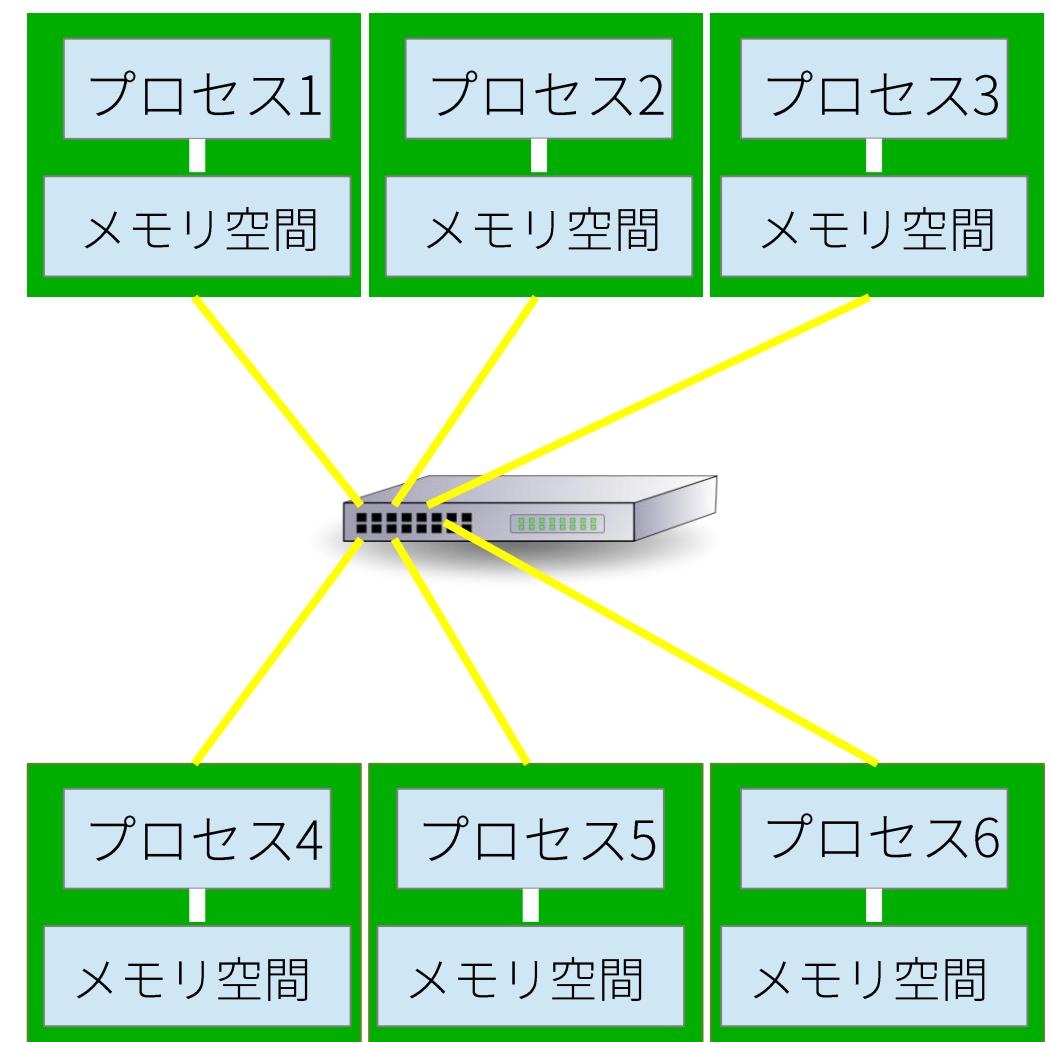


スレッド並列とプロセス並列

スレッド並列

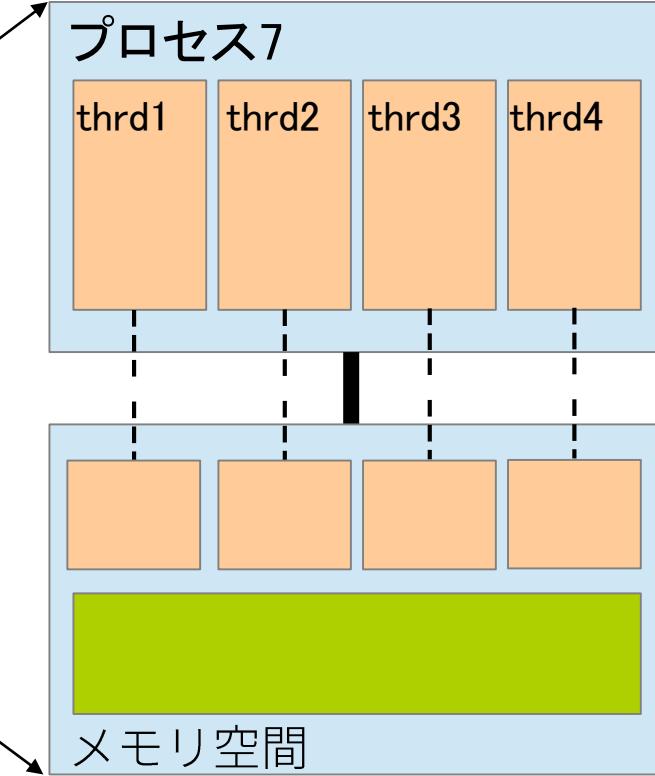
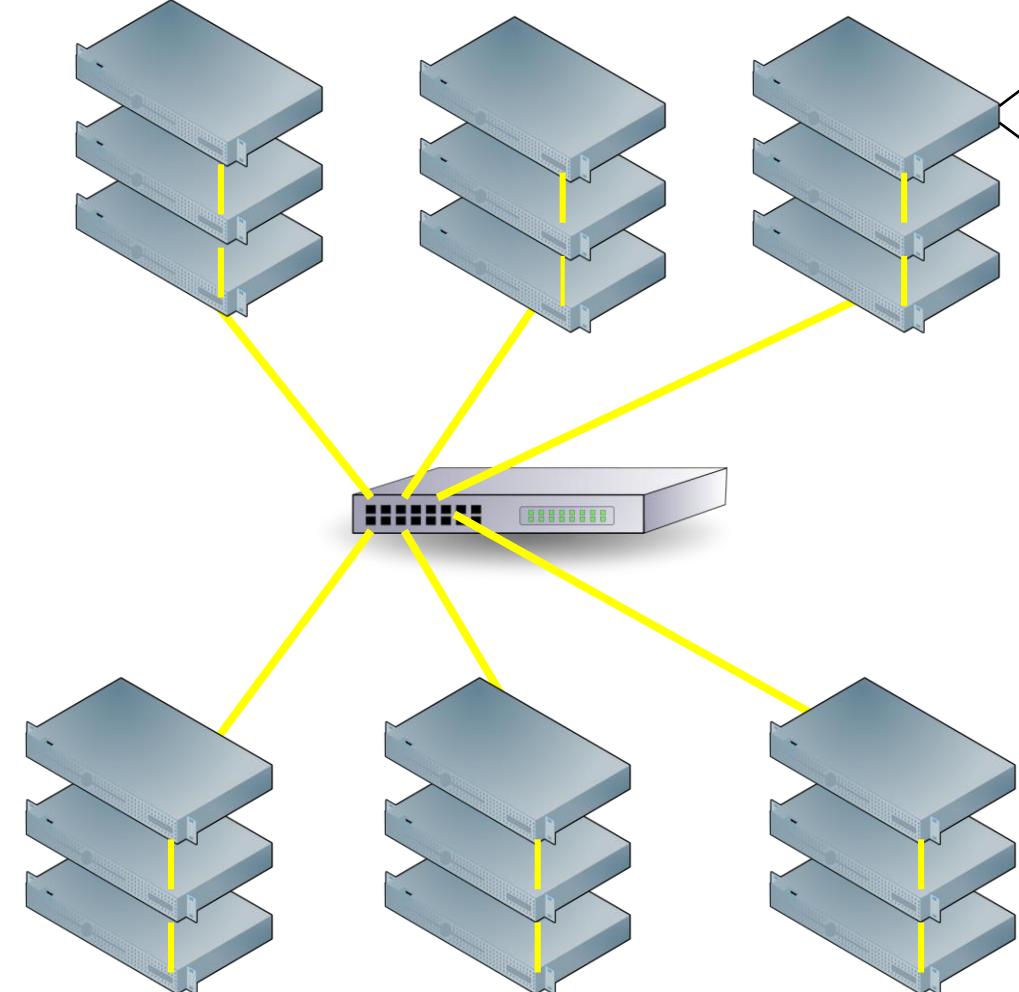


プロセス並列



ハイブリッド並列

プロセス1-3 プロセス4-6 プロセス7-9



- この例では全72並列
- プロセス間はMPIによる通信
- 各プロセスに4スレッド
- スレッド数分プロセス数を削減
- MPIによる通信／同期待ちのオーバヘッドを軽減
- 出力ファイル数の削減



- スレッド並列計算を行うためのAPI
- コンパイルオプションで有効
- gcc/gfortran: -fopenmp
- icc/ifort: -qopenmp
- プログラムに指示行を挿入（オプション無効時はコメント行と見なされる、C言語は警告される場合も）
- 自動並列化に比べて柔軟に最適化が可能
- 標準規格なため、マシン／コンパイラーに依らずポータブル
- <http://www.openmp.org>

スレッド数の設定

- 基本的にはシェルの環境変数 \$OMP_NUM_THREADS でスレッド数を指定する
 - tcsh: setenv OMP_NUM_THREADS 8
 - bash: export OMP_NUM_THREADS=8
- 指定しなければ、システムの全コア数
- プログラム内部で関数で設定 (omp_lib/omp.hをインクルードする必要あり)

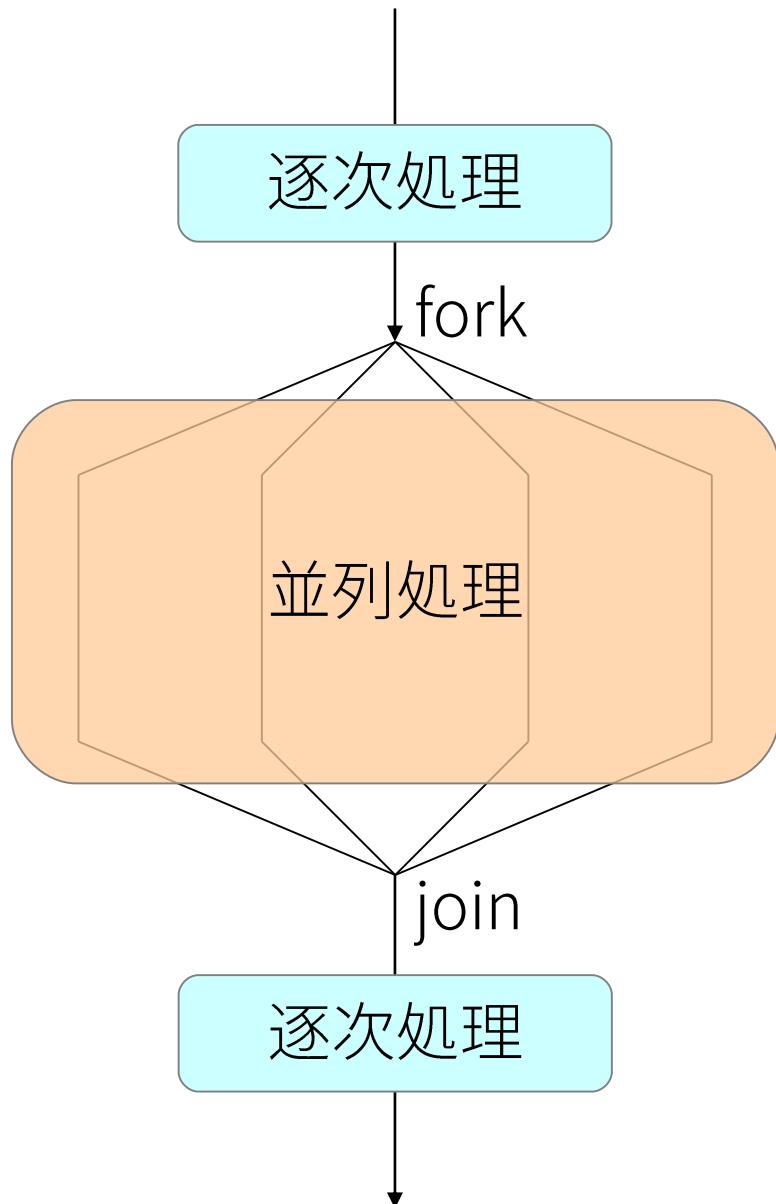
Fortran:

```
!$use omp_lib
integer, parameter :: nthrd = 8
call omp_set_num_threads(nthrd)
```

C:

```
#include <omp.h>
int nthrd=8;
omp_set_num_threads(nthrd);
```

全体の流れ : fork-join モデル



Fortran:

```
program main
write(*,*) 'serial region'

!$OMP PARALLEL
...
...
...
...
...
write(*,*) 'parallel region'
...
...
...
...
!
!$OMP END PARALLEL
write(*,*) 'serial region'
stop
end
```

C:

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

int main(void)
{
    puts("serial region");

#pragma omp parallel
{
    ...
    ...
    ...
    ...
    ...
    puts("parallel region");
    ...
    ...
    ...
    ...
}

    puts("serial region");

    return 0;
}
```

ループの並列化

```
!$OMP PARALLEL DO
do i=1,100
  b(i) = c*a(i)
enddo
!$OMP END PARALLEL DO

call mysub(b)

!$OMP PARALLEL
!$OMP DO
do i=1,100
  d(i) = c*b(i)
enddo
!$OMP END DO
!$OMP DO
do i=1,100
  e(i) = c*d(i)
enddo
!$OMP END DO
!$OMP END PARALLEL
```

*\$OMP_SCHEDULE／SCHEDULE
句で分担方法変更可

i=1-100を各スレッドが均等に分担

スレッドの立ち上げはなるべくまとめて

pragma omp for
の直後のforループ
が並列処理される。
間に”{”を入れては
ならない

```
#pragma omp parallel for
for (i=0;i<100;i++){
  b[i]=c*a[i];
}
```

mysub(b);

```
#pragma omp parallel
{
# pragma omp for
for (i=0;i<100;i++){
  d[i]=c*b[i];
}
```

```
#pragma omp for
for (i=0;i<100;i++){
  e[i]=c*d[i];
}
```

多重ループの並列化

```
do j=1,100  
!$OMP PARALLEL DO  
  do i=1,100  
    b(i,j) = c*a(i,j)  
  enddo  
!$OMP END PARALLEL DO  
enddo
```

スレッドの立ち上げが100回も行われ、オーバーヘッドが大きい

```
!$OMP PARALLEL DO &  
!$OMP PRIVATE(i)  
  do j=1,100  
    do i=1,100  
      b(i,j) = c*a(i,j)  
    enddo  
  enddo  
!$OMP END PARALLEL DO
```

最外ループを並列化内側ループのカウンタ変数iはプライベート宣言が必要。

```
for (j=0;j<100;j++){  
#pragma omp parallel for  
  for (i=0;i<100;i++){  
    b[j][i]=c*a[j][i];  
  }  
}
```

```
#pragma omp parallel  
{  
#pragma omp for private(i)  
  for (j=0;j<100;j++){  
    for (i=0;i<100;i++){  
      b[j][i]=c*a[j][i];  
    }  
  }  
}
```

多重ループの並列化（続き）

- ・多重ループでは最外ループを並列化するのが基本。ループの内側に指示行を入れると、外側ループの回転数分スレッドの fork/join が行われ、スレッド立ち上げのオーバーヘッドが大きくなる。
- ・内側にあるループのカウンタ変数 (i, j, \dots) はスレッド固有の変数とする必要があるため、PRIVATE宣言をする。そうしないと、スレッド間で上書きしてしまう。

グローバル／プライベート変数

```
!$OMP PARALLEL DO  
do i=1,100  
    tmp = myfunc(i)  
    a(i) = tmp  
enddo  
!$OMP END PARALLEL DO
```

スレッド間でtmpを上書きしてしまうので正しい結果が得られない

```
#pragma omp parallel for  
for (i=0;i<100;i++){  
    tmp=myfunc(i);  
    a[i]=tmp;  
}
```

```
!$OMP PARALLEL DO &  
!$OMP PRIVATE(tmp)  
do i=1,100  
    tmp = myfunc(i)  
    a(i) = tmp  
enddo  
!$OMP END PARALLEL DO
```

Cの場合はループ中で変数宣言すれば問題なし

```
#pragma omp parallel{  
#pragma omp for private(tmp)  
for (i=0;i<100;i++){  
    tmp=myfunc(i);  
    a[i]=tmp;  
}
```

```
#pragma omp parallel for  
for (i=0;i<100;i++){  
    double tmp;  
    tmp=myfunc(i);  
    a[i]=tmp;  
}
```

ループ内変数の演算 (REDUCTION)

```
sum = 0.0
!$OMP PARALLEL DO &
!$OMP REDUCTION(+:sum)
do i=1,10
    sum = sum+i
enddo
!$OMP END PARALLEL DO
```

```
sum=1.0;
#pragma omp parallel for reduction(+:sum)
for (i=0;i<10;i++){
    sum+=i;
}
```

総和 (+) 以外には、最大 (max) 、最小 (min) が実用上使われる。

単スレッド処理 (SINGLE)

```
!$OMP PARALLEL
!$OMP DO
do i=1,100
  b(i) = c*a(i)
enddo
!$OMP END DO

!$OMP SINGLE
call output(b)
!$OMP END SINGLE

!$OMP DO
do i=1,100
  d(i) = c*b(i)
enddo
!$OMP END DO
!$OMP END PARALLEL
```

スレッドの
立ち上げを
最初の一回
だけ

途中で逐次処理
が入る場合は
SINGLEで対処

スレッドの立ち上げ回数は
なるべく少なく。データ入
出力など、途中で逐次処理
が必要な場合に使う。

```
#pragma omp parallel
{
#pragma omp for
for (i=0;i<100;i++){
  b[i]=c*a[i];
}

#pragma omp single
{
  output(b);
}

#pragma omp for
for (i=0;i<100;i++){
  d[i]=c*b[i];
}
```

バリア同期の回避 (NOWAIT)

```
!$OMP PARALLEL  
!$OMP DO  
  do i=1,100  
    b(i) = c*a(i)  
  enddo  
!$OMP END DO NOWAIT
```

```
!$OMP DO  
  do i=1,100  
    d(i) = c*b(i)  
  enddo  
!$OMP END DO
```

```
!$OMP DO  
  do i=1,200  
    e(i) = c*d(i)  
  enddo  
!$OMP END DO NOWAIT  
!$OMP END PARALLEL
```

ループの終わりで暗黙に行われるスレッド間の同期待ちをNOWAITで回避

次のループではスレッドに対する変数dの割り当て範囲が変わるので、同期が必要（注意）

```
#pragma omp parallel  
{  
#pragma omp for nowait  
for (i=0;i<100;i++){  
  b[i]=c*a[i];  
}
```

```
#pragma omp for  
for (i=0;i<100;i++){  
  d[i]=c*b[i];  
}
```

```
#pragma omp for nowait  
for (i=0;i<100;i+=2){  
  e[i]=c*d[i];  
}
```

OpenMP実装上の注意点

- ユーザが並列処理箇所を明示するため、並列計算に伴う問題発生はプログラマが責任を負う（自動並列化との違い）。
- 並列処理してはいけない箇所でも、明示したら並列化されてしまう
- スレッド内でグローバル/プライベート変数を間違えると結果が不定
- NOWAITで必要な同期を忘れると結果が不定
- 同じプログラムを数回は実行して、結果が変わらないことの確認が必要
- 実装は簡単だけど、デバッグに注意が必要

最近のHPC分野の動向

2017年8月現在



- 中国が初の100PFLOPS到達
- 電力消費は1 - 10MW台
- 東大一筑波のOakforest-PACSが日本一のシステムに
- 「京」は依然8位（2012年供用開始）
- Sunway TaihuLight（神威・太湖之光）のCPUは中国独自自作
- Oakforest-PACSはIntel Xeon Phi KNL

Rank	System	Cores	Rmax (TFlop/s)	Rpeak (TFlop/s)	Power (kW)
1	Sunway TaihuLight - Sunway MPP, Sunway SW26010 260C 1.45GHz, Sunway , NRCPC National Supercomputing Center in Wuxi China	10,649,600	93,014.6	125,435.9	15,371
2	Tianhe-2 (MilkyWay-2) - TH-IVB-FEP Cluster, Intel Xeon E5-2692 12C 2.200GHz, TH Express-2, Intel Xeon Phi 31S1P , NUDT National Super Computer Center in Guangzhou China	3,120,000	33,862.7	54,902.4	17,808
3	Piz Daint - Cray XC50, Xeon E5-2690v3 12C 2.6GHz, Aries interconnect , NVIDIA Tesla P100 , Cray Inc. Swiss National Supercomputing Centre (CSCS) Switzerland	361,760	19,590.0	25,326.3	2,272
4	Titan - Cray XK7, Opteron 6274 16C 2.200GHz, Cray Gemini interconnect, NVIDIA K20x , Cray Inc. DOE/SC/Oak Ridge National Laboratory United States	560,640	17,590.0	27,112.5	8,209
5	Sequoia - BlueGene/Q, Power BQC 16C 1.60 GHz, Custom , IBM DOE/NNSA/LLNL United States	1,572,864	17,173.2	20,132.7	7,890
6	Cori - Cray XC40, Intel Xeon Phi 7250 68C 1.4GHz, Aries interconnect , Cray Inc. DOE/SC/LBNL/NERSC United States	622,336	14,014.7	27,880.7	3,939
7	Oakforest-PACS - PRIMERGY CX1640 M1, Intel Xeon Phi 7250 68C 1.4GHz, Intel Omni-Path , Fujitsu Joint Center for Advanced High Performance Computing Japan	556,104	13,554.6	24,913.5	2,719
8	K computer, SPARC64 VIIIfx 2.0GHz, Tofu interconnect , Fujitsu RIKEN Advanced Institute for Computational Science (AICS) Japan	705,024	10,510.0	11,280.4	12,660
9	Mira - BlueGene/Q, Power BQC 16C 1.60GHz, Custom , IBM DOE/SC/Argonne National Laboratory United States	786,432	8,586.6	10,066.3	3,945
10	Trinity - Cray XC40, Xeon E5-2698v3 16C 2.3GHz, Aries	301,056	8,100.9	11,078.9	4,233



- 最新のGPU（NVIDIA Tesla P100）がTOP10のほとんどを占める。
- 日本のシステムが上位を独占
- 8位のPEZY Computing社によるシステム（暁光）が唯一の非GPU機
- Xeon Phi KNLはTOP10外

TOP500				Rmax	Power	Power Efficiency
Rank	Rank	System	Cores	(TFlop/s)	(kW)	(GFlops/watts)
1	61	TSUBAME3.0 - SGI ICE XA, IP139-SXM2, Xeon E5-2680v4 14C 2.4GHz, Intel Omni-Path, NVIDIA Tesla P100 SXM2 , HPE GSIC Center, Tokyo Institute of Technology Japan	36,288	1,998.0	142	14.110
2	465	kukai - ZettaScaler-1.6 GPGPU system, Xeon E5-2650Lv4 14C 1.7GHz, Infiniband FDR, NVIDIA Tesla P100 , ExaScalar Yahoo Japan Corporation Japan	10,080	460.7	33	14.046
3	148	AIST AI Cloud - NEC 4U-8GPU Server, Xeon E5-2630Lv4 10C 1.8GHz, Infiniband EDR, NVIDIA Tesla P100 SXM2 , NEC National Institute of Advanced Industrial Science and Technology Japan	23,400	961.0	76	12.681
4	305	RAIDEN GPU subsystem - NVIDIA DGX-1, Xeon E5-2698v4 20C 2.2GHz, Infiniband EDR, NVIDIA Tesla P100 , Fujitsu Center for Advanced Intelligence Project, RIKEN Japan	11,712	635.1	60	10.603
5	100	Wilkes-2 - Dell C4130, Xeon E5-2650v4 12C 2.2GHz, Infiniband EDR, NVIDIA Tesla P100 , Dell University of Cambridge United Kingdom	21,240	1,193.0	114	10.428
6	3	Piz Daint - Cray XC50, Xeon E5-2690v3 12C 2.6GHz, Aries interconnect , NVIDIA Tesla P100 , Cray Inc. Swiss National Supercomputing Centre (CSCS) Switzerland	361,760	19,590.0	2,272	10.398
7	69	Gyoukou - ZettaScaler-2.0 HPC system, Xeon D-1571 16C 1.3GHz, Infiniband EDR, PEZY-SC2 , ExaScalar Japan Agency for Marine -Earth Science and Technology	3,176,000	1,677.1	164	10.226

GPGPU vs. MIC vs. PEZY-SC

- NVIDIA TESLA
 - ゲーム用途のGPUをHPCに応用 (GPGPU)
 - CUDA/OpenACCによるプログラミング
 - SIMD
 - PGI Fortranでも可能 (NVIDIAが買収)
- Intel Xeon Phi
 - x86互換のコプロセッサ (68 core)
 - 既存のコードから容易に拡張可能
 - SIMD (512bit)
- PEZY-SC
 - 日本のベンチャー企業PEZY Computing社が設計
 - メニーコアプロセッサ (1024個)
 - MIMD
 - C/C++しかコンパイラがないようです



エクサFLOPS・メガW時代へ

- 電力消費量はこれ以上増やせないので、これから専用CPUと組み合わせたスパコンが国内でも増えてくる
- 汎用／専用CPU構成のヘテロジニアスなシステムへ
- →ユーザのプログラム負担が増える可能性
- シミュレーション研究者の宿命だが、5-10年くらいの周期でスパコンシステムのトレンドに振り回される
 - ベクトル vs. スーパースカラ
 - MPI vs. HPF (High Performance Fortran)
 - 私は2009年に手持ちのコード (MHD/PIC) をスクラッチから再コーディング
- スパコン情勢に注意しつつ、研究を進めましょう

まとめ

- スカラチューニング
 - 高速化のためのCPUの機能 (SIMD) をいかに使い倒すか
 - キャッシュチューニング
- OpenMPによるスレッド並列化
 - 指示行を最外ループの手前にいれるだけ (簡単！)
 - スレッド並列化によりプロセス数を減らし、プロセス間通信のオーバーヘッドを軽減：ハイブリッド並列化
- 今後の展望
 - 次世代のスパコンでは電力消費量問題が顕在化
 - 汎用／専用CPUで構成されるヘテロジニアスシステムに
 - →ハイブリッド並列化はますます必須

参考資料

- プロセッサを支える技術、Hisa Ando著、技術評論社
- 各スパコンマニュアル
- <http://www.nag-j.co.jp/openMP/index.htm>

