東京大学 THE UNIVERSITY OF TOKYO

東京大学情報基盤センター INFORMATION TECHNOLOGY CENTER, THE UNIVERSITY OF TOKYO

# 第199回 お試しアカウント付き 並列プログラミング講習会 「Wisteria実践」演習

東京大学情報基盤センター
塙　敏博
三木 洋平

# ユーザアカウント

- 使用システム： Wisteria/BDEC-01 (Wisteria)
  - $ ssh USERNAME@wisteria.cc.u-tokyo.ac.jp
- 本講習会でのユーザ名
  - 利用者番号： tABCDE（ABCDEは，適宜書き換えてください）
  - 利用グループ： gt00
- 利用期限
  - 3/14 9:00まで有効
- 注:本講習会関連の質問はhanawa[at]cc.u-tokyo.ac.jpまで
  - Slackで質問していただくほうがありがたいです
  - （講習会アカウントでは）公式の相談対応システムは使わないでください

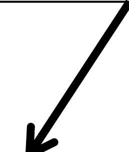
# バッチキューの設定のしかた

- Wisteriaでのバッチ処理は、富士通のバッチシステムで管理されています。
- 以下、主要コマンドを説明します。
  - ジョブの投入：pjsub <ジョブスクリプトファイル名>
  - 自分が投入したジョブの状況確認：pjstat
  - 投入ジョブの削除：pjdel　<ジョブID>
  - バッチキューの状態を見る：pjstat --rsc
  - バッチキューの詳細構成を見る：pjstat --rsc -x
  - 投げられているジョブ数を見る：pjstat -b
  - 過去の投入履歴を見る：pjstat -H
  - 同時に投入できる数／実行できる数を見る：pjstat --limit

# pjstat --rsc の実行画面例

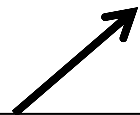
```
$ pjstat --rsc
SYSTEM: Odyssey
RSCGRP                         STATUS             NODE
lecture-o                  [ENABLE,START]           96
tutorial-o                 [ENABLE,START]     2x12x16

SYSTEM: Aquarius
RSCGRP                     STATUS                 NODE   GPU
lecture-a                  [ENABLE,START]            7    56
tutorial-a                 [DISABLE,STOP]            2    16
```

ノードの
利用可能数



使える
キュー名
(リソース
グループ)

現在使えるか



GPUの
利用可能数
(Aquarius)

# pjstat --rsc -x の実行画面例

```
$ pjstat --rsc -x
SYSTEM: Odyssey
RSCGRP            STATUS           MIN_NODE MAX_NODE MAX_ELAPSE REMAIN_ELAPSE MEM(GiB) PROJECT
lecture-o         [ENABLE,START]          1       12   00:15:00      00:15:00       28 gt00
tutorial-o        [DISABLE,STOP]          1       12   00:15:00      --:--:--       28 gt00

SYSTEM: Aquarius
RSCGRP            STATUS           MIN_NODE MAX_NODE AVAIL_GPU MAX_ELAPSE REMAIN_ELAPSE MEM(GiB) PROJECT
lecture-a         [ENABLE,START]          1        1     1,2,4   00:15:00      00:15:00      448 gt00
tutorial-a        [DISABLE,STOP]          1        1     1,2,4   00:15:00      --:--:--      448 gt00
```

使える
キュー名
(リソース
グループ)

現在
使えるか

ノードの
実行情報

課金情報（財布）
実習では１つのみ

# pjstat --rsc -b の実行画面例

```
$ pjstat --rsc -b
SYSTEM: Odyssey
RSCGRP                 STATUS           TOTAL RUNNING QUEUED  HOLD OTHER       NODE
lecture-o              [ENABLE,START]       0       0      0     0     0         96
tutorial-o             [DISABLE,STOP]       0       0      0     0     0    2x12x16

SYSTEM: Aquarius
RSCGRP                 STATUS           TOTAL RUNNING QUEUED  HOLD OTHER       NODE
lecture-a              [ENABLE,START]       0       0      0     0     0          7
tutorial-a             [DISABLE,STOP]       0       0      0     0     0          2
```

使えるキュー名(リソースグループ)

現在使えるか

ジョブの総数

実行しているジョブの数

待たされているジョブの数

ノードの利用可能数

# moduleの指定

- コンパイラ・ライブラリ等の環境をセットアップ
  - Odyssey向け富士通コンパイラ、MPIを使用

```
$ module load odyssey
```

  - Aquarius向けgcc、cuda, OpenMPI(CUDA対応)を使用

```
$ module load aquarius cuda ompi-cuda
$ module load nvidia cuda ompi-cuda
```

- 困った時は

```
$ module purge
```

# moduleの一覧

- 現在利用中の環境に追加できるものを確認

```
$ module avail

---/work/opt/local/modules/modulefiles/LN/aquarius/mpi/gcc/8.3.1/ompi-cuda/4.1.1-11.4 -----
gromacs/2021.2  lammps/29Oct2020
…
```

- 全ての環境を確認

```
$ show_module

ApplicationName         ModuleName          Node          BaseCompiler/MPI
-------------------------------------------------------------------------------
Archiconda              archiconda3/0.2.3   odyssey       -
Arm Forge               forge/21.0.2        aquarius      -
…
GROMACS                 gromacs/2021.2      aquarius      gcc/8.3.1/ompi-cuda/4.1.1-11.2
```

# サンプルプログラムの取得（1/2）

- 実行してもらうコマンドは $ 以降に青字で記載しています
  - ターミナルへの入力が終わったら 「Enter」 キーを押してください

1. Lustreファイルシステムに移動
   $ cd /work/gt00/tABCDE　　　# 下線部は自分のIDに変更
2. /work/gt00/share/Wisteria にあるサンプルファイルをコピー
   $ cp /work/gt00/share/Wisteria/*.gz .
   * と .（ドット）の間に半角スペース
3. サンプルファイルを展開
   $ tar xvfz Samples-wo.tar.gz

# サンプルプログラムの取得（2/2）

4. Samples-wo ディレクトリに入る
   ```
   $ cd Samples-wo
   ```
5. 自分の使いたい言語のディレクトリに入る
   ```
   $ cd C          # C言語を使用する場合
   $ cd F    # Fortranを使用する場合
   ```
6. サンプルプログラムがあることを確認
   ```
   $ ls
   ```

# TIPS（タブ補完）

- ターミナル上では[Tab]キーを入力してタブ補完を効かせながら入力すると良い
  - キー入力数が減るのでお得（自動的にtypoも減る）
  - 自動補完できる部分だけを入力するので，とりあえず[Tab]を入力した上で補っていけば良い
    - Windowsとは違い，候補を順番に表示するようなことはない
- 先ほど入力してもらったコマンド群の場合：
  1. $ cd /wo[Tab]/gt00/tABCDE
  2. $ cp /wo[Tab]/gt00/z30105/W[Tab]/* .
  3. $ tar xvfz S[Tab]
  4. $ cd S[Tab]

# ちなみに

- センター教員(zアカウント所有者)がダウンロード&ビルドしたものを以下に置いています。

  /work/share

  - ベンチマーク
  - 自前ビルドしたツール
  - 有用なサンプル
  - コンテナファイル等
- 動作保証、詳しい説明はありませんがご参考まで。

# Streamプログラムをコンパイルしよう(1/2)

1. Samples-wo フォルダに入る
   $ cd Samples-wo
2. C言語　　　　　　：　$ cd C
   Fortran90言語：　$ cd F
3. アプリ名のフォルダに入る
   $ cd stream

# Streamプログラムをコンパイルしよう (2/2)

6. module loadしてmake する
```
$ module load odyssey
$ make
```
7. 実行ファイル(stream)ができていることを確認する
```
$ ls
```

# プログラムを実行しよう

1. streamフォルダ中で以下を実行する
   `$ pjsub  stream.bash`
2. 自分の導入されたジョブを確認する
   `$ pjstat`
3. 実行が終了すると、以下のファイルが生成される
   stream.bash.XXXXXX.err
   stream.bash.XXXXXX.out （XXXXXXは数字）
4. 上記の標準出力ファイルの中身を見てみる
   `$ cat stream.bash.XXXXXX.out`
5. エラー出力は以下のファイルにあるので念のため確認
   `$ cat stream.bash.XXXXXX.err`

# 通信性能
# OSU Micro Benchmarks (Odyssey用)

- オハイオ州立大学 D.K. Pandaのグループが開発, Version 7.0.1
- インストール場所
  /work/share/benchmarks/Odyssey/osu-micro-benchmarks-7.0.1
- 実行ジョブスクリプト
  /work/share/benchmarks/Odyssey/osu-micro-benchmarks-7.0.1/run/*.sh
- 実行の方法
  1. ディレクトリを作り、ジョブスクリプトをコピー
     ```
     $ mkdir omb-7.0.1-odyssey
     $ cd omb-7.0.1-odyssey
     $ cp /work/share/benchmarks/Odyssey/osu-micro-benchmarks-7.0.1/run/*.sh  .
     ```
  2. ジョブ実行(スクリプトの修正)
     ```
     $ pjsub osu_latency.sh
     ```

# Tea Leaf (1/2)

- 熱伝導のベンチマーク
  - manteveoプロジェクトのミニアプリの一つ
  - http://uk-mac.github.io/TeaLeaf/
- 展開

```
$ tar xvfz TeaLeaf-wo.tar.gz
$ cd TeaLeaf_ref-1.3
```

- Wisteria-O向けバイナリのコンパイル

```
$ make COMPILER=FJ MPI_COMPILER=mpifrtpx C_MPI_COMPILER=mpifccpx
```

# Tea Leaf (2/2)

性能は以下の順に高くなるはず

フラットOMP << ハイブリッドMPI

< ハイブリッド+形状指定

OpenMP+MPIハイブリッド
(フラットOMP)

```
$ pjsub tea_leaf.sh
```

OpenMP+MPIハイブリッド

```
$ pjsub tea_leaf2.sh
```

OpenMP+MPIハイブリッド+ノード形状指定

```
$ pjsub tea_leaf3.sh
```

- ノード4x3形状、かつノード内4プロセス ➔ 8x6の並びで実行

- 実行時間を比較：(それぞれに行う)

```
$ grep Wall tea_leaf.sh.XXXXX.err | tail -1
```

# 7点ステンシル

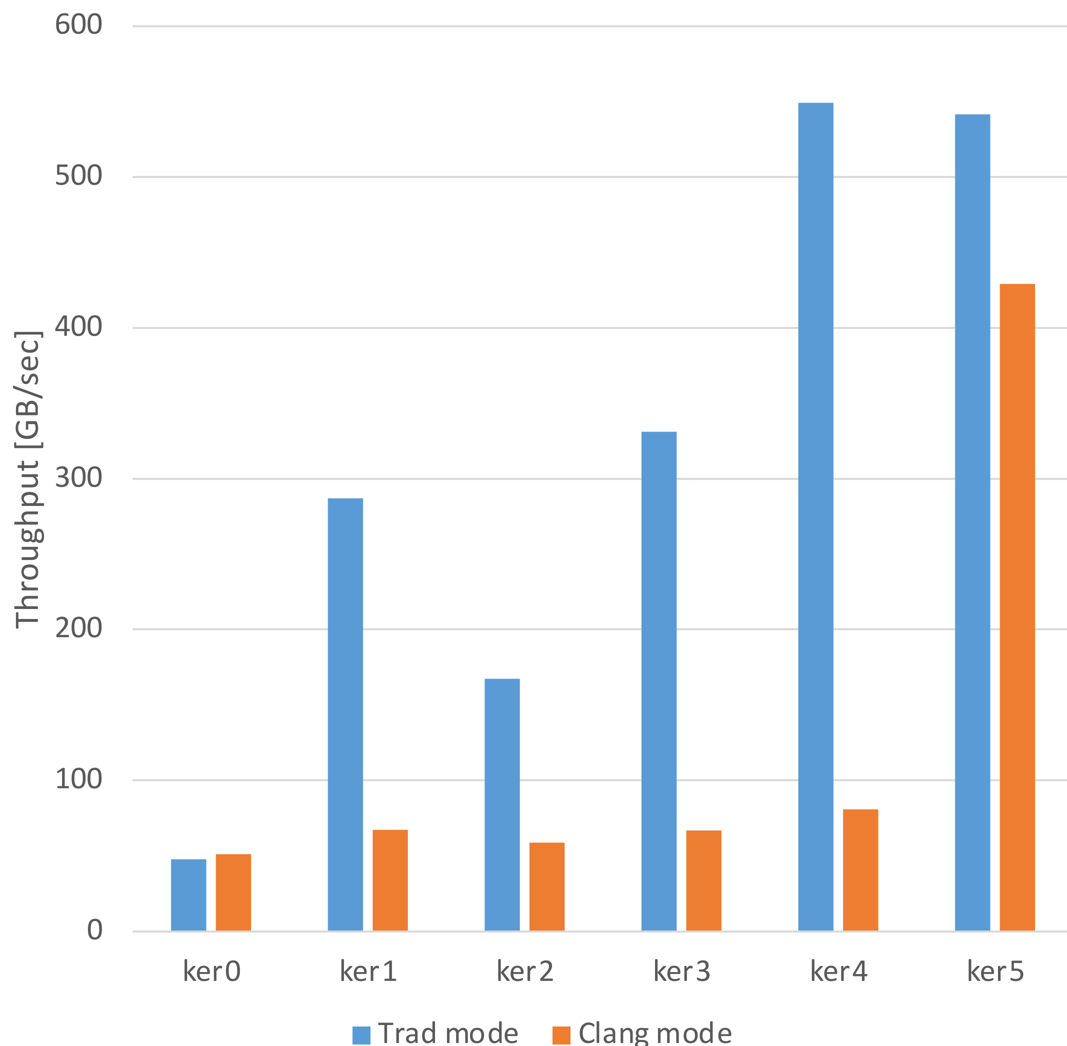
- 拡散方程式のカーネル
  - ✓自身と前後左右上下の7点を参照して値を更新
- ディリクレ境界条件
  - ✓境界では自身の値を参照
- 倍精度
- サイズ：256*384*384
  - ✓A64FXが48コアのため、48*8 = 384
- Byte/Flop = 16/13
  - ✓各ステップで読み込んだデータは全てキャッシュに乗ると仮定して性能評価
- ソースコード
  - ✓ /work/gt00/share/wisteria_trial.tar.gz

```
 1  do {
 2 #pragma omp parallel for
 3    for (int z = 0; z < nz; z++) {
 4      for (int y = 0; y < ny; y++) {
 5        for (int x = 0; x < nx; x++) {
 6          int c =  x + y * nx + z * nx * ny;
 7          int w = (x == 0)    ? c : c - 1;
 8          int e = (x == nx-1) ? c : c + 1;
 9          int n = (y == 0)    ? c : c - nx;
10          int s = (y == ny-1) ? c : c + nx;
11          int b = (z == 0)    ? c : c - nx * ny;
12          int t = (z == nz-1) ? c : c + nx * ny;
13          f2_t[c] = cc * f1_t[c]
14             + cw * f1_t[w] + ce * f1_t[e]
15             + cs * f1_t[s] + cn * f1_t[n]
16             + cb * f1_t[b] + ct * f1_t[t];
17        }
18      }
19    }
20    double *tmp = f1_t;
21    f1_t = f2_t;
22    f2_t = tmp;
23    time += dt;
24  } while (time + 0.5*dt < 0.1);
```

# 性能評価：Odyssey 1 node

**C言語版**

ソース：wisteria_trial/Odyssey/C



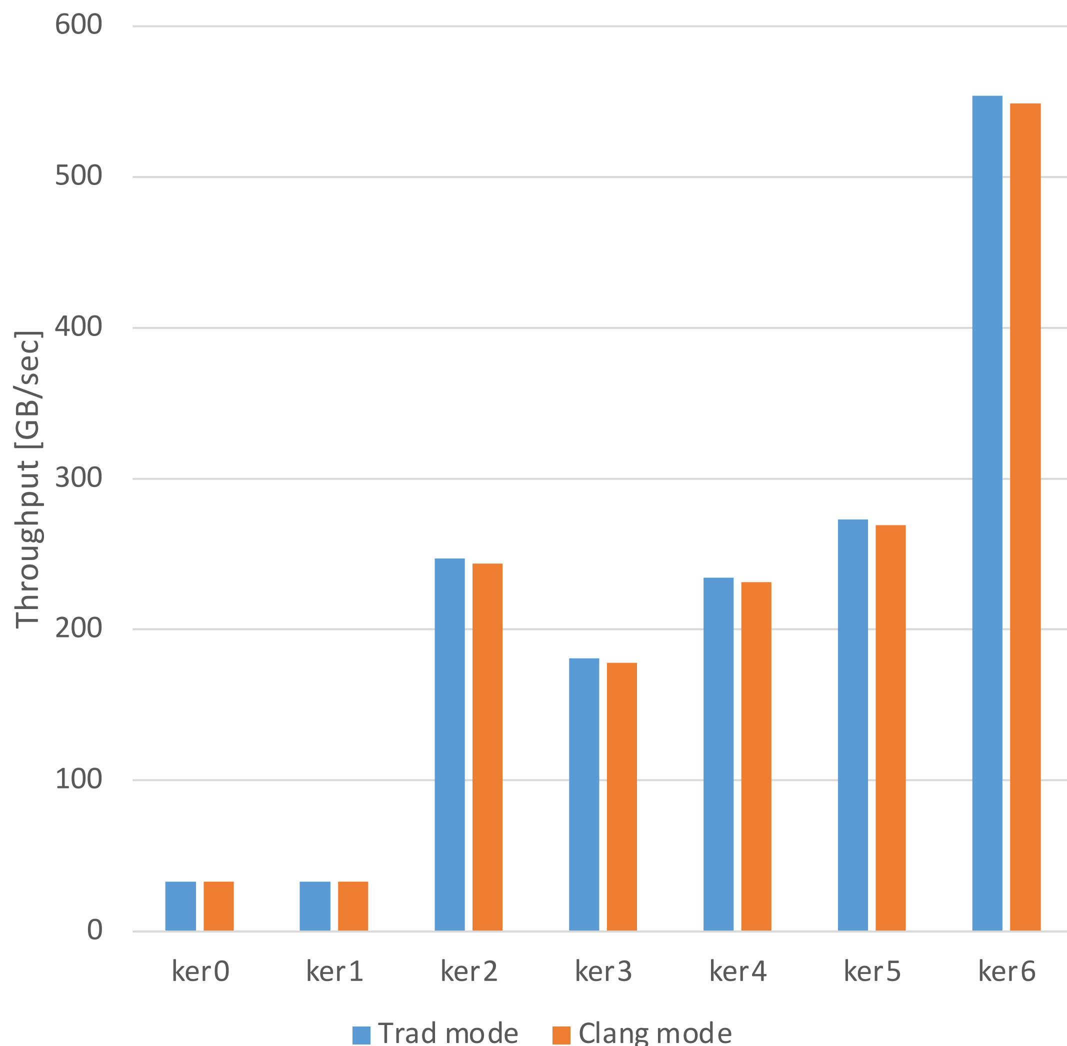

| | 全最適化 | 新規最適化 |
|---|---|---|
| ker0 | naive | ナイーブな実装 |
| ker1 | firstTouch | ファーストタッチ適用 |
| ker2 | firstTouch_yDim | Yループに #pragma omp for nowait を適用 |
| ker3 | firstTouch_yzDim | ZループをCMG分割、YループをCMG内スレッド分割 |
| ker4 | firstTouch_yzDim_peeling | ループピーリング適用 |
| ker5 | firstTouch_yzDim_peeling_intrinsic | intrinsic実装 |

- **この問題では全体的にTrad modeが速い**
- **clang modeでは、Intrinsicsを書くなどの処置をしないとSIMD化されない**
  - ✓ **今後のcompiler updateに期待**

# 性能評価：Odyssey 1 node

Fortran版

ソース：wisteria_trial/Odyssey/F



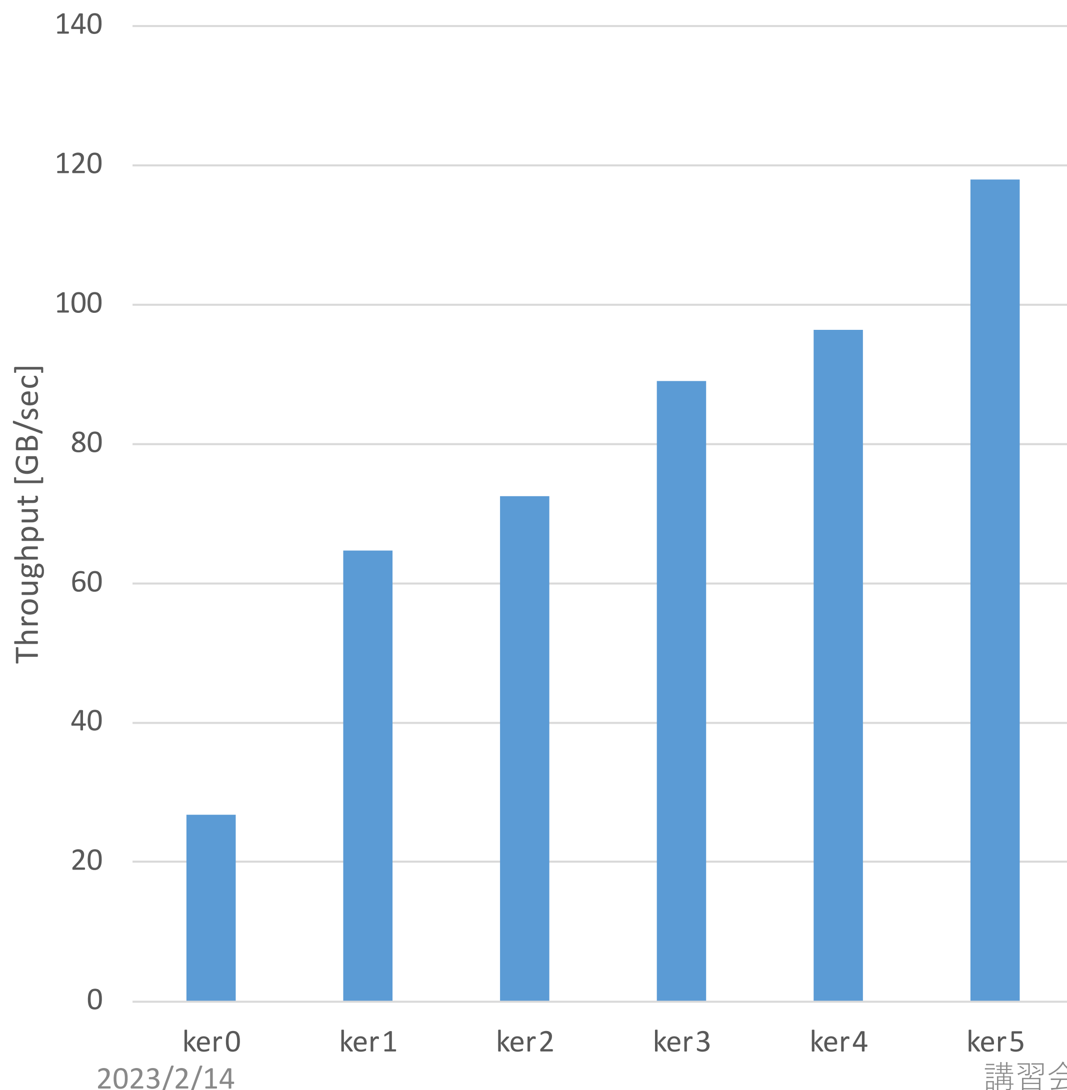

| | 全最適化 | 新規最適化 |
|---|---|---|
| ker0 | naive | ナイーブな実装 |
| ker1 | firstTouch | ファーストタッチ適用 |
| ker2 | firstTouch_noPointer | 並列領域からPointer属性を排除 |
| ker3 | firstTouch_noPointer_yDim | Yループに !$omp do / !$omp end do nowait を適用 |
| ker4 | firstTouch_noPointer_yzDim | ZループをCMG分割、YループをCMG内スレッド分割 |
| ker5 | firstTouch_noPointer_yzDim_peeling | ループピーリング適用 |
| ker6 | firstTouch_noPointer_yzDim_peeling_contiguous | 配列にcontiguous属性を追加 |

- **Fortran版ではTrad mode, Clang modeではほとんど差はない**
- **Pointer属性を使う場合には注意が必要**
  - ✓ **コンパイラの最適化がほとんど効かない**
  - ✓ **左の結果は、FirstTouchの意味が無いわけではなく、Pointerのせいで効果が見えていないだけ**

# 性能評価：Aquarius 1 CPU socket

**C言語版**

ソース：wisteria_trial/Aquarius-CPU/C



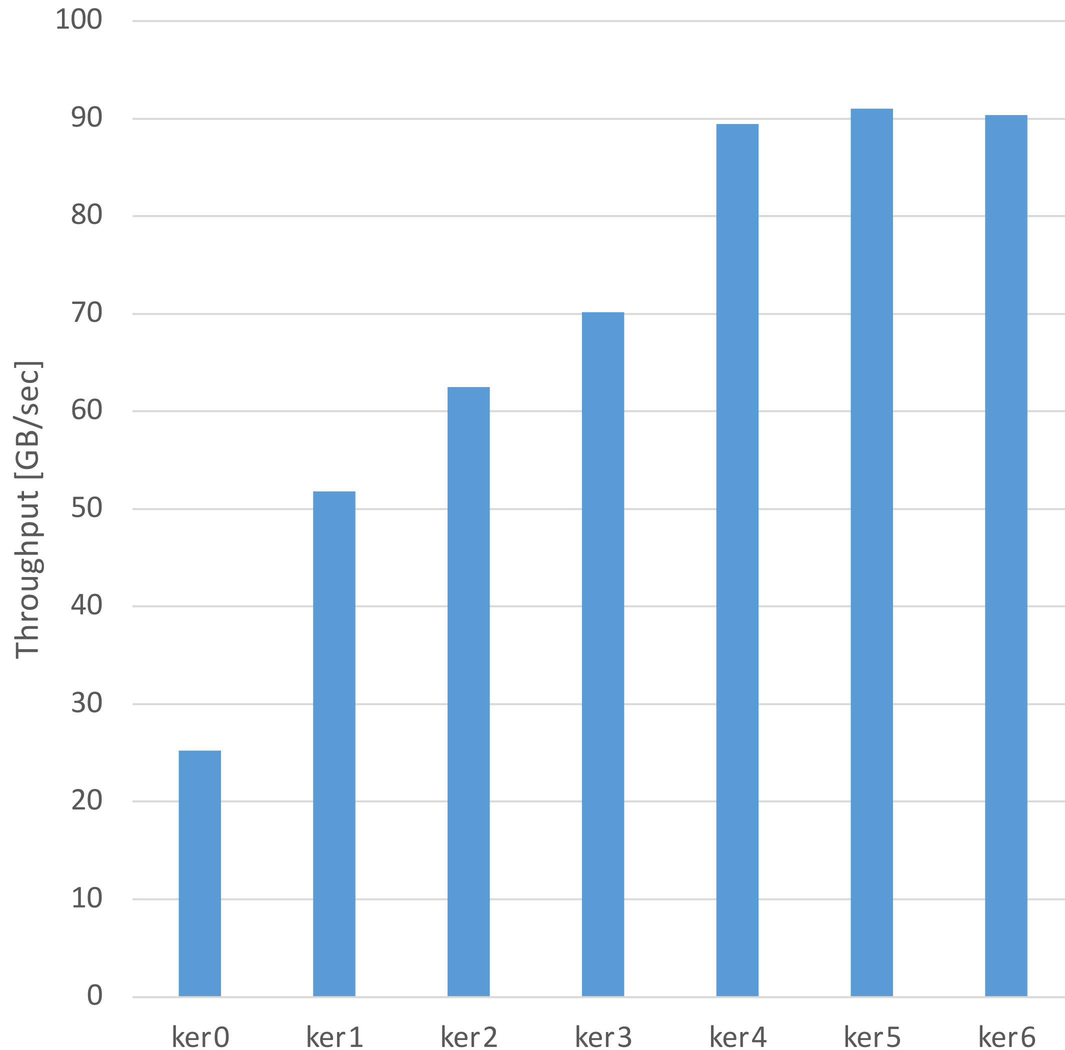

| | 全最適化 | 新規最適化 |
|---|---|---|
| ker0 | naive | ナイーブな実装 |
| ker1 | firstTouch | ファーストタッチ適用 |
| ker2 | firstTouch_yDim | Yループに #pragma omp for nowait を適用 |
| ker3 | firstTouch_yzDim | ZループをCMG分割、YループをCMG内スレッド分割 |
| ker4 | firstTouch_yzDim_peeling | ループピーリング適用 |
| ker5 | firstTouch_yzDim_peeling_intrinsic | intrinsic実装 |

- **Intel Xeon Platinum 8360Y (Ice Lake)は、socket内で 2 numa 構成となっているため、A64FX の CMG 向け最適化が同様に有効**
- **numactl --cpubind=0,1 --membind=0,1 ./a.out のように numactl を設定している**
- **講習会で使える lecture-a キューは CPU を共有しているため、遅くなる可能性がある**

# 性能評価：Aquarius 1 CPU socket

**Fortran版**

ソース：wisteria_trial/Aquarius-CPU/F



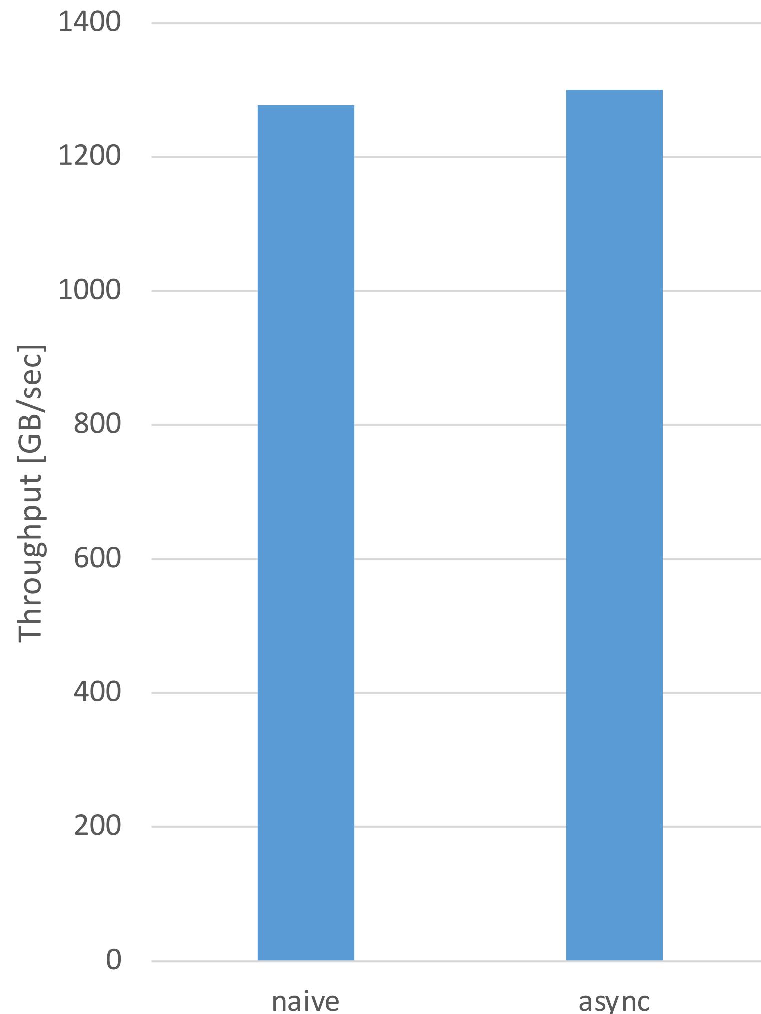

| | 全最適化 | 新規最適化 |
|---|---|---|
| ker0 | naive | ナイーブな実装 |
| ker1 | firstTouch | ファーストタッチ適用 |
| ker2 | firstTouch_noPointer | 並列領域からPointer属性を排除 |
| ker3 | firstTouch_noPointer_yDim | Yループに !$omp do / !$omp end do nowait を適用 |
| ker4 | firstTouch_noPointer_yzDim | ZループをCMG分割、YループをCMG内スレッド分割 |
| ker5 | firstTouch_noPointer_yzDim_peeling | ループピーリング適用 |
| ker6 | firstTouch_noPointer_yzDim_peeling_contiguous | 配列にcontiguous属性を追加 |

- **Odysseyと比較すると、pointer属性の影響は小さい**

# 性能評価：Aquarius 1 GPU

**C言語版**

ソース：wisteria_trial/Aquarius-GPU/C



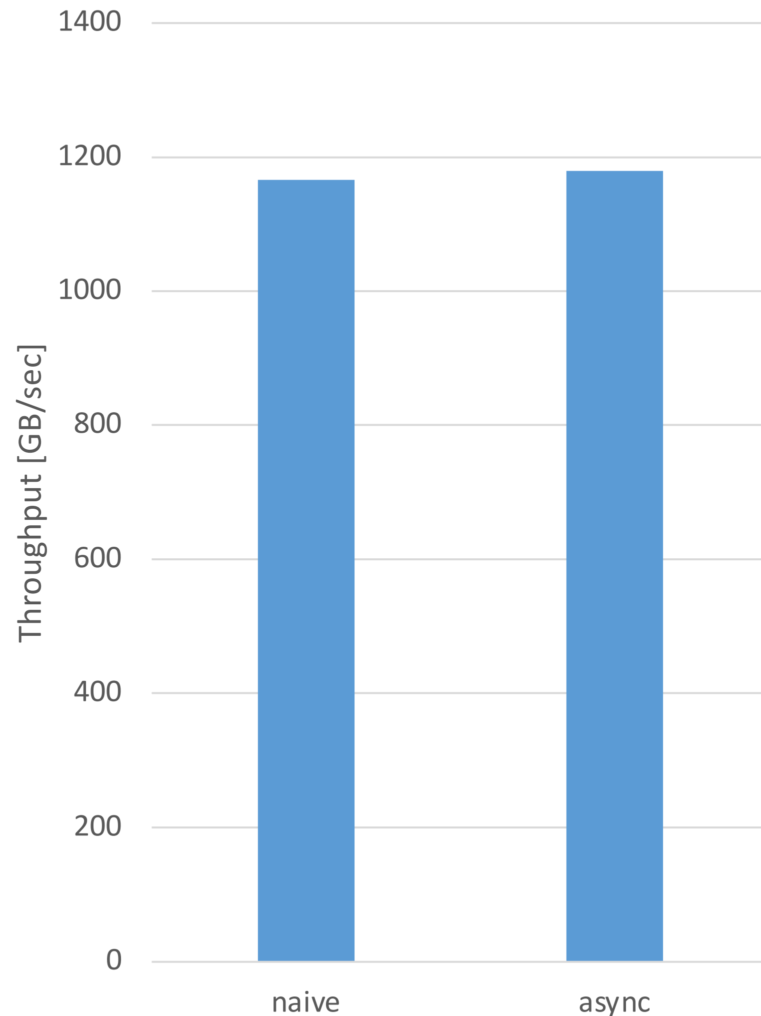

```c
#pragma acc kernels present(f2_t, f1_t) async(0)
#pragma acc loop independent
      for (z = 0; z < nz; z++) {
#pragma acc loop independent
        for (y = 0; y < ny; y++) {
#pragma acc loop independent
          for (x = 0; x < nx; x++) {
            c =  x + y * nx + z * nx * ny;
            w = (x == 0)    ? c : c - 1;
            e = (x == nx-1) ? c : c + 1;
            n = (y == 0)    ? c : c - nx;
            s = (y == ny-1) ? c : c + nx;
            b = (z == 0)    ? c : c - nx * ny;
            t = (z == nz-1) ? c : c + nx * ny;
            f2_t[c] = cc * f1_t[c] + cw * f1_t[w] + ce * f1_t[e]
              + cs * f1_t[s] + cn * f1_t[n] + cb * f1_t[b] + ct * f1_t[t];
          }
        }
      }
```

- **計測ミスを疑うほど速い**
- 上記 OpenACC 実装の時点でほぼ理想値。これ以上最適化の余地がない。（計測ミスが無ければ）
  - ✓ ミスが見つかったらご連絡ください -> hoshino @ cc.u-tokyo.ac.jp

# 性能評価：Aquarius 1 GPU

**Fortran版**

ソース：wisteria_trial/Aquarius-GPU/F




```fortran
!$acc kernels present(f1,f2) async(0)
!$acc loop independent
do k = 1, nz
   !$acc loop independent
   do j = 1, ny
      !$acc loop independent
      do i = 1, nx

         w = -1; e = 1; n = -1;
         s = 1; b = -1; t = 1;
         if(i == 1)  w = 0
         if(i == nx) e = 0
         if(j == 1)  n = 0
         if(j == ny) s = 0
         if(k == 1)  b = 0
         if(k == nz) t = 0
         f2(i,j,k) = cc * f1(i,j,k) + cw * f1(i+w,j,k) &
              + ce * f1(i+e,j,k) + cs * f1(i,j+s,k) + cn * f1(i,j+n,k) &
              + cb * f1(i,j,k+b) + ct * f1(i,j,k+t)
      end do
   end do
end do
!$acc end kernels
```

- **C言語版程ではないがかなり速い**

# First Touch

- 1プロセスで13スレッド以上(2 CMG以上)使う場合**必須**
  - ✓配列のメモリへの確保は、malloc時ではなくプログラム中最初に触ったタイミングで行われる。0番スレッドのみで初期化する場合、配列はCMG 0番に近いメモリ上に確保されるため、**その他 CMG からアクセスすると遅い**。=> First touchで回避。
  - ✓export XOS_MMM_L_PAGING_POLICY=demand:demand:demand の設定も合わせて**必須**。この環境変数により、自スレッドに一番近いメモリ上に配列が確保される。

**diffusion_ker00.c**

```
void init_ker00(REAL *buff1, const int nx, const int ny, const int nz,
                const REAL kx, const REAL ky, const REAL kz,
                const REAL dx, const REAL dy, const REAL dz,
                const REAL kappa, const REAL time) {

  REAL ax, ay, az;
  int jz, jy, jx;
  ax = exp(-kappa*time*(kx*kx));
  ay = exp(-kappa*time*(ky*ky));
  az = exp(-kappa*time*(kz*kz));
  for (jz = 0; jz < nz; jz++) {
    for (jy = 0; jy < ny; jy++) {
      for (jx = 0; jx < nx; jx++) {
        int j = jz*nx*ny + jy*nx + jx;
```

**diffusion_ker01.c**

```
void init_ker01(REAL *buff1, const int nx, const int ny, const int nz,
                const REAL kx, const REAL ky, const REAL kz,
                const REAL dx, const REAL dy, const REAL dz,
                const REAL kappa, const REAL time) {

  REAL ax, ay, az;
  int jz, jy, jx;
  ax = exp(-kappa*time*(kx*kx));
  ay = exp(-kappa*time*(ky*ky));
  az = exp(-kappa*time*(kz*kz));
#pragma omp parallel for private(jx,jy,jz)
  for (jz = 0; jz < nz; jz++) {
    for (jy = 0; jy < ny; jy++) {
      for (jx = 0; jx < nx; jx++) {
        int j = jz*nx*ny + jy*nx + jx;
```

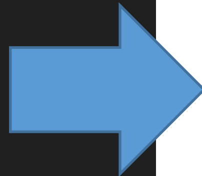
- 並列領域（diffusion関数）で扱う配列に最初に触る箇所（init関数）を**並列領域と同じように**並列化する。

# Pointer 回避 (Fortranのみ)

- 富士通Fortranコンパイラはかなり保守的なようで、**ポインタ配列があるとほとんどの最適化を諦める**。C pointerでもrestrictは付けた方がいい。
- 回避方法例
  - ✓allocatable 配列を使う。
  - ✓関数呼び出しにより、見かけ上pointer属性でない配列を作る。（下図）

**diffusion_ker01.f90**

```
subroutine diffusion_ker01(f1, f2, nx, ny, nz, ce, cw, cn, cs, ct,
  REAL,pointer,contiguous,dimension(:,:,:),intent(inout) :: f1,f2
  REAL,pointer,contiguous,dimension(:,:,:) :: ftmp
      !!!中略!!!
  do while (time + 0.5*dt < 0.1)
     !$omp parallel do private(i,j,k,w,e,n,s,b,t)
     do k = 1, nz
        do j = 1, ny
           do i = 1, nx
              !!!中略!!!
           end do
        end do
     end do
     !$omp end parallel do
     ftmp => f1
     f1 => f2
     f2 => ftmp

     time = time + dt
     count = count + 1
  end do
```



**diffusion_ker02.f90**

```
subroutine diffusion_ker02(f1, f2, nx, ny, nz, ce, cw, cn, cs, ct, cb, cc, dt, time
  REAL,pointer,contiguous,dimension(:,:,:),intent(inout) :: f1,f2
  REAL,pointer,contiguous,dimension(:,:,:) :: ftmp
      !!!中略!!!
  do while (time + 0.5*dt < 0.1)
     call diffusion_ker02_parallel(f1, f2, nx, ny, nz, ce, cw, cn, cs, ct, cb, cc)
     ftmp => f1
     f1 => f2
     f2 => ftmp
```

```
subroutine diffusion_ker02_parallel(f1, f2, nx, ny, nz, ce, cw, cn, cs, ct,
  REAL,dimension(:,:,:),intent(inout) :: f1,f2
      !!!中略!!!
  !$omp parallel do private(i,j,k,w,e,n,s,b,t)
  do k = 1, nz
     do j = 1, ny
        do i = 1, nx
```

- 並列領域を関数化し、**pointer属性を落とす**

# ループ分割手法変更

- 7点ステンシルの計算は、一つ隣のデータにアクセスするため、並列化すると冗長なメモリアクセスが発生する。=> 共有キャッシュの利用で効率化

**diffusion_ker01.c** Z軸分割

```
#pragma omp parallel for private(x,y,z,c,w,e,n,s,b,t)
    for (z = 0; z < nz; z++) {
      for (y = 0; y < ny; y++) {
        for (x = 0; x < nx; x++) {
```

- 最も一般的な分割方法
- コア間のメモリアクセスの距離が遠くなるので、キャッシュ効率は悪い

**diffusion_ker02.c** Y軸分割

```
#pragma omp parallel private(x,y,z,c,w,e,n,s,b,t)
    for (z = 0; z < nz; z++) {
#pragma omp for nowait
      for (y = 0; y < ny; y++) {
        for (x = 0; x < nx; x++) {
```

- nowaitが必須
- キャッシュの利用効率が上がる
- CMG間のデータ共有が発生するため、複数CMGを使う場合には遅くなる

**diffusion_ker03.c** Y-Z軸分割

```
#pragma omp parallel
  {

        !!!中略!!!

    int tid = omp_get_thread_num();
    int nth = omp_get_num_threads();
    int tz = tid/THREAD_BLOCK_SIZE;
    int ty = tid%THREAD_BLOCK_SIZE;
    int ychunk = (ny-1)/THREAD_BLOCK_SIZE + 1;
    int zchunk = nz/((nth-1)/THREAD_BLOCK_SIZE+1);
    do {
      for (z = tz*zchunk; z < MIN((tz+1)*zchunk,nz); z++) {
        for (y = ty*ychunk; y < MIN((ty+1)*ychunk,ny); y++) {
          for (x = 0; x < nx; x++) {
```

- 右図のイメージ
- CMG間のメモリアクセスの距離を離しつつ、CMG内のキャッシュ効率が高まる
- 4 MPI process + 12 OpenMP thread でも良い

```
#pragma omp for  (CMG分割)
for (z = 0; z < nz; z++){
#pragma omp for nowait (Thread分割)
  for(y = 0; y < ny; y++){
```

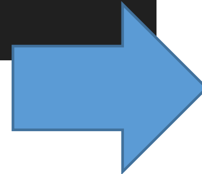
※富士通コンパイラではこのようなOMP指示文の使い方はできません

# ループピーリングによる分岐削減

- 7点ステンシルの計算では、境界部分の計算のために分岐が必要となる
  - ✓ループピーリング（皮むき）により最内ループから分岐を排除する。
  - ✓A64FXは分岐に弱いようなので、効果的。

**diffusion_ker03.c**

```
for (z = tz*zchunk; z < MIN((tz+1)*zchunk, nz); z++) {
  for (y = ty*ychunk; y < MIN((ty+1)*ychunk, ny); y++) {
    for (x = 0; x < nx; x++) {
      c =  x + y * nx + z * nx * ny;
      w = (x == 0)    ? c : c - 1;
      e = (x == nx-1) ? c : c + 1;
      n = (y == 0)    ? c : c - nx;
      s = (y == ny-1) ? c : c + nx;
      b = (z == 0)    ? c : c - nx * ny;
      t = (z == nz-1) ? c : c + nx * ny;
      f2_t[c] = cc * f1_t[c] + cw * f1_t[w] + ce * f1_t[e]
        + cs * f1_t[s] + cn * f1_t[n] + cb * f1_t[b] + ct * f1_t[t];
    }
  }
}
```



**diffusion_ker04.c**

```
for (z = tz*zchunk; z < MIN((tz+1)*zchunk, nz); z++) {
  b = (z == 0)    ? 0 : - nx * ny;
  t = (z == nz-1) ? 0 :   nx * ny;
  for (y = ty*ychunk; y < MIN((ty+1)*ychunk, ny); y++) {
    n = (y == 0)    ? 0 : - nx;
    s = (y == ny-1) ? 0 :   nx;
    c =  y * nx + z * nx * ny;
    f2_t[c] = cc * f1_t[c] + cw * f1_t[c] + ce * f1_t[c+1]
      + cs * f1_t[c+s] + cn * f1_t[c+n] + cb * f1_t[c+b] + ct * f1_t[c+t];
    c++;
    for (x = 1; x < nx-1; x++) {
      f2_t[c] = cc * f1_t[c] + cw * f1_t[c-1] + ce * f1_t[c+1]
        + cs * f1_t[c+s] + cn * f1_t[c+n] + cb * f1_t[c+b] + ct * f1_t[c+t];
      c++;
    }
    f2_t[c] = cc * f1_t[c] + cw * f1_t[c-1] + ce * f1_t[c]
      + cs * f1_t[c+s] + cn * f1_t[c+n] + cb * f1_t[c+b] + ct * f1_t[c+t];
  }
}
```

- $x = 0$, $0 < x < nx-1$, $x = nx-1$ に処理を分けることで、 $0 < x < nx-1$ の区間では分岐処理なく実行可能

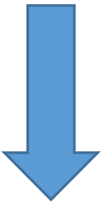
# contiguous属性の付与（Fortranのみ）

diffusion_ker05.f90 のプロファイル結果

- contiguous（メモリ上に連続的に確保されている）かどうかわからない配列へのアクセスでは、**効率の悪いgather命令が使われてしまう。**
  - ✓ contiguous属性の付与により回避可能

diffusion_ker05.f90

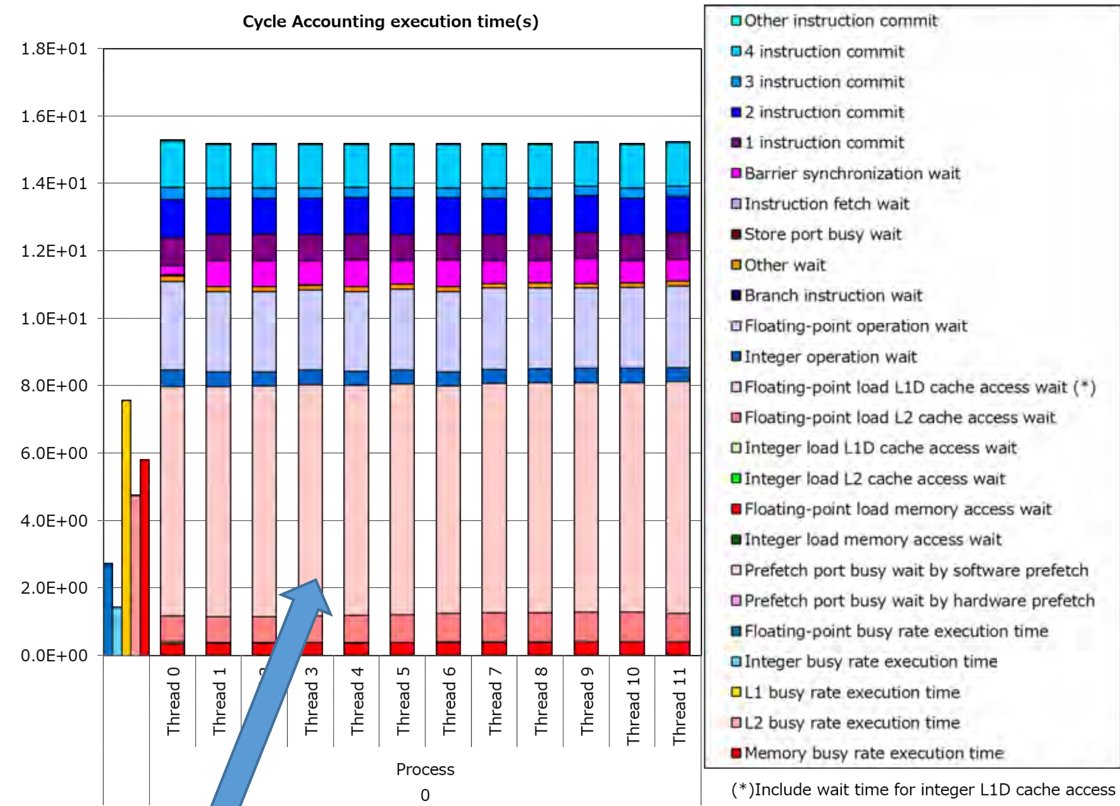
```
subroutine diffusion_ker05_parallel(f1, f2, nx, ny
  REAL, dimension(:, :, :), intent(inout) :: f1, f2
```



diffusion_ker06.f90

```
subroutine diffusion_ker06_parallel(f1, f2, nx, ny, nz, ce, cw
  REAL, dimension(:, :, :), contiguous, intent(inout) :: f1, f2
```

- 関数化された並列領域。**pointer属性を落とした上で、contiguous属性を付与。**




(*)Include wait time for integer L1D cache access

L1キャッシュアクセス待ちが発生している

| Load instruction | | | | |
|---|---|---|---|---|
| SIMD | | | | |
| Single vector contiguous load instruction | Multiple vector contiguous structure load instruction | Non-contiguous gather load instruction | Broadcast load instruction | Floating-point register fill instruction |
| 9.55E+03 | 0.00E+00 | 4.52E+09 | 1.12E+06 | 2.51E+06 |
| 0.00E+00 | [illegible] | 4.51E+09 | 8.89E+04 | 6.40E+01 |
| [illegible] | [illegible] | 4.51E+09 | 8.89E+04 | 6.40E+01 |
| 5.00E+00 | 0.00E+00 | 4.51E+09 | 8.89E+04 | 6.40E+01 |
| 0.00E+00 | 0.00E+00 | 4.51E+09 | 8.89E+04 | 6.40E+01 |
| 5.00E+00 | 0.00E+00 | 4.51E+09 | 8.89E+04 | 6.40E+01 |
| 5.00E+00 | 0.00E+00 | 4.51E+09 | 8.89E+04 | 6.40E+01 |
| 0.00E+00 | 0.00E+00 | 4.51E+09 | 8.89E+04 | 6.40E+01 |

Non-contiguous gather load instruction が大量に発生している

# A64FX必須最適化まとめ

- 並列領域内のFortran Pointer徹底排除(-Knoaliasではダメ)
  - ✓ついでに適用可能な配列にはcontiguous属性を付与する
  - ✓FortranほどではないがCのpointerもrestrictをつけた方が良い
- 自動SIMD化のための最内ループ内の整理
  - ✓自作関数を展開してベタ書き（Fortran組込み関数はOK, コンパイラの機能によるインライン展開はNG）
  - ✓ループ外に出せる分岐処理の全排除
  - ✓サイズ不明でフルアンローリングできない繰り返し処理（配列代入など）の排除
- CMG間通信ペナルティ排除(1 プロセス/nodeのとき)
  - ✓export XOS_MMM_L_PAGING_POLICY=demand:demand:demand
  - ✓First touch
  - ✓スレッドの領域分割方針の変更、4プロセス/nodeへ変更
- メモリ律速なカーネルでは可能な限りのデータ連続配置

# 通信性能
# OSU Micro Benchmarks (Aquarius用)

- オハイオ州立大学 D.K. Pandaのグループが開発, Version 7.0.1
- インストール場所
  /work/share/benchmarks/Aquarius/osu-micro-benchmarks-7.0.1
  /work/share/benchmarks/Aquarius/osu-micro-benchmarks-7.0.1-ompi414
  （自前ビルドOpenMPI-4.1.4: /work/share/openmpi-4.1.4 使用)
- 実行ジョブスクリプト
  /work/share/benchmarks/Aquarius/osu-micro-benchmarks-7.0.1/run/*.sh
  /work/share/benchmarks/Aquarius/osu-micro-benchmarks-7.0.1-ompi414/run/*.sh
- 実行の方法 (osu-micro-benchmarks-7.0.1)
  1. ディレクトリを作り、ジョブスクリプトをコピー
     ```
     $ mkdir omb-7.0.1-aquarius
     $ cd omb-7.0.1-aquarius
     $ cp /work/share/benchmarks/Aquarius/osu-micro-benchmarks-7.0.1/run/*.sh  .
     ```
  2. ジョブ実行
     ```
     $ pjsub osu_latency.sh
     ```

# Tea Leaf CUDA版

- 熱伝導のベンチマークのCUDA版
  - manteveoプロジェクトのミニアプリの一つ
  - http://uk-mac.github.io/TeaLeaf/
- 展開

```
$ tar xvfz TeaLeaf_wa.tar.gz
$ cd TeaLeaf_CUDA-0ecb1a474304c4ea916503fe6ef594f5d3f6703d/
```

- Wisteria-A向けバイナリのコンパイル

```
$ module purge; module load aquarius cuda ompi-cuda
$ make COMPILER=GNU
```

- ジョブ実行

```
$ pjsub tea_leaf.sh
```

# Singularity

- Tensorflowは、ライブラリの依存性が強く、環境構築が困難
  ➔ Singularity経由でDockerイメージを利用
  - ファイルサイズが大きいので、みなさんは実行はしないでください：
    `$ singularity build tf-image.file docker://tensorflow/tensorflow:latest-gpu`
  - https://hub.docker.com/r/tensorflow/tensorflow の latest-gpu タグからダウンロード

- `singularity exec /work/share/tensorflow-2.11.0-cuda11.2.sif python スクリプト名`

  **tensorflow-2.11.0-cuda11.2.sif**内の**python**を使って動作
  - ホストのOSはRedHat 8, コンテナでは Ubuntu 18.04.5
  - ホストのCUDAは11.2, コンテナでは 11.0

  のように違う環境で実行できる

# MNIST学習の実行 (Keras+Tensorflow)

- Tensorflow 2.9.1 (KerasはTensorflowに含まれる)

```
$ module load singularity
$ singularity exec --nv /work/share/tensorflow-2.11.0-cuda11.2.sif
python -c "import tensorflow as tf; print(tf.__version__,
tf.keras.__version__)"
2.11.0 2.11.0
```

(GPUが使える場合は execの後に --nv を追加)

- 以下を実行（コンパイルは不要！）

```
$  pjsub keras-tf-mnist.bash
```

- 実行が終了したら、以下を実行する

```
$  cat  keras-tf-mnist.log.XXXX
```

# MNIST by Keras+Tensorflow

- https://www.tensorflow.org/tutorials/images/cnn?hl=ja
- 結果はこんな感じ
  - Epoch: データセットで学習した回数
  - n/1875: 反復回数 (60000サンプル/32バッチ=1875)
  - Loss: （学習用画像の）正解との誤差
  - Accuracy: テスト画像での正解率

```
… Successfully opened dynamic library libcudart.so.11.0
Epoch 1/5
1875/1875 [======…=======] - 9s 4ms/step - loss: 0.1511 - accuracy: 0.9539
…
Epoch 5/5
1875/1875 [======…=======] - 8s 4ms/step - loss: 0.0219 - accuracy: 0.9935
313/313 - 0s - loss: 0.0316 - accuracy: 0.9914
0.9914000034332275
```