計算科学技術特論B (2018)
第11回

大規模MD並列化の技術2

分子科学研究所 理論・計算分子科学研究領域

安藤 嘉倫

2018/6/21,28

目次

- 分子動力学 (MD) 法
- 分子動力学計算の並列化特性
- 並列化技術 1　データ構造

第一回

- 並列化技術 2　MPI
- 並列化技術 3　OpenMP, SIMD

第二回

並列化技術 2　MPI

MPI 並列化技術の要点
(特に 3 次元トーラスネットワークに最適化)

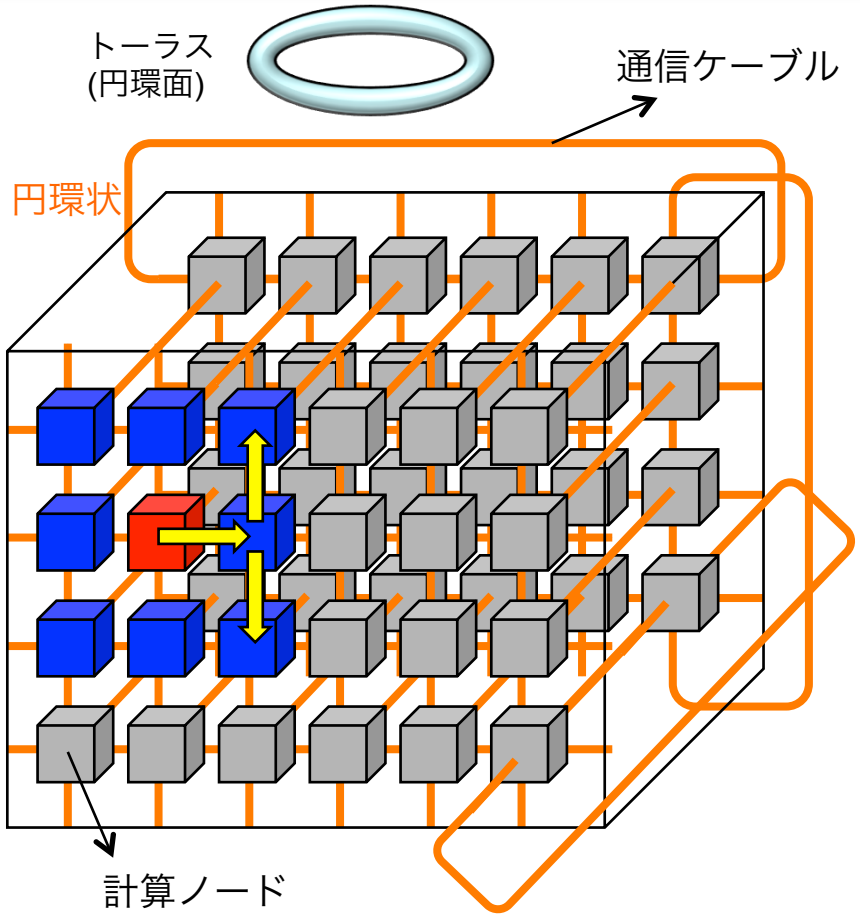
① 通信衝突の回避

② 通信前後での配列間コピーの消去

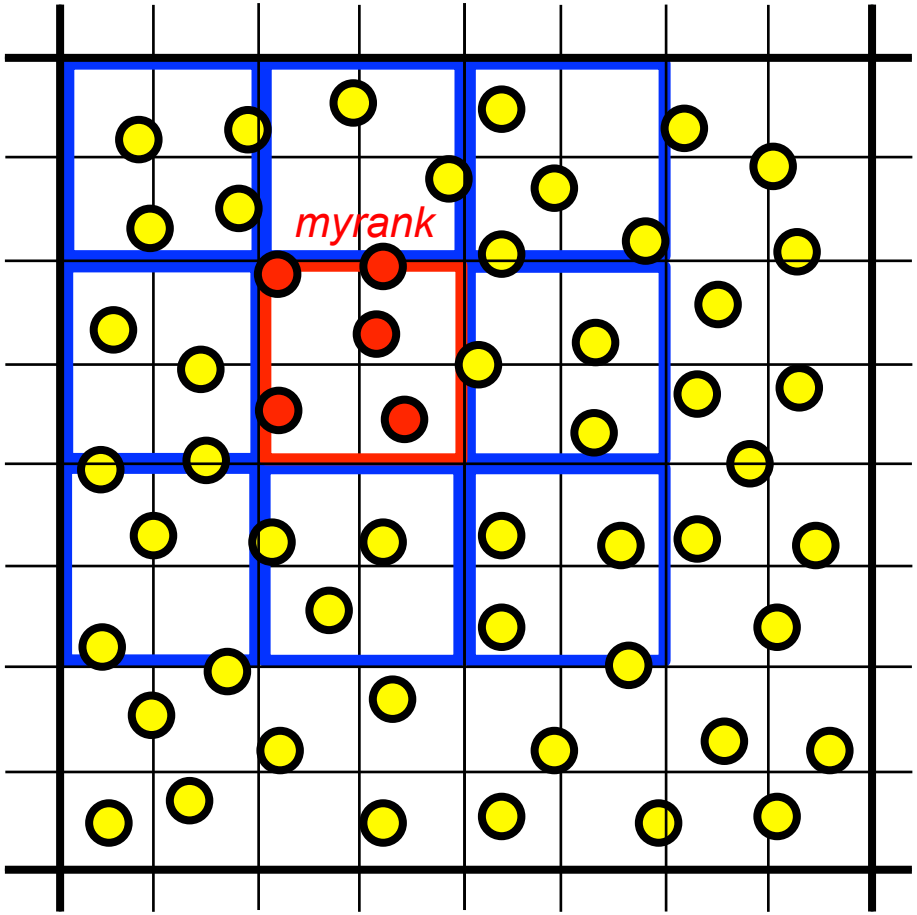
③ 通信の演算による代用

ただし簡単のため, 各項目の説明は主に二次元平面上で行います

3 次元トーラスネットワーク



例) 京, FX10, Blue Gene, Anton



長所 : 空間ドメイン分割によるMPI並列化との相性が良い.

短所 : 斜め方向ノードとの通信が直にできないため通信の回数 (ホップ数) が増加
プロセス間通信の際に衝突が生じやすい.

MPI (message passing interface)

- 分散メモリー型並列化のための規格
- MPICH, OpenMPI などのライブラリーをインストールすることで使用可
- 「**プロセス**」と呼ばれる処理単位に仕事(タスク)が割り振られる
- 各種の MPI 関数をコードに挿入
- 自動並列化という概念はない

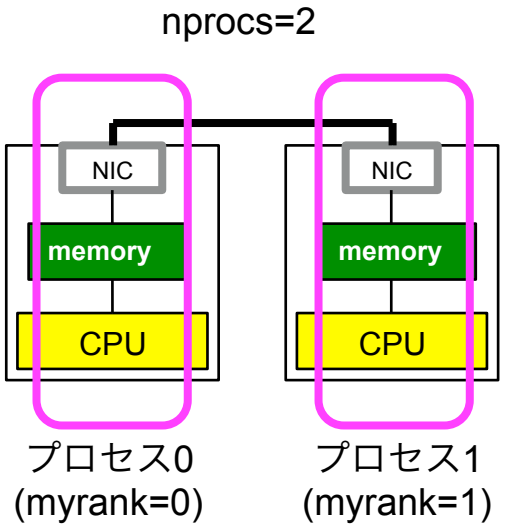


表1　代表的なMPI関数

関数名	意味
mpi_init	MPI を起動. MPI 並列化範囲の先頭に書く.
mpi_finalize	MPI を終了. MPI 並列化範囲の最後に書く.
mpi_comm_size	コミュニケータ内のプロセス数 nprocs の取得.
mpi_comm_rank	コミュニケータ内での自プロセス番号 myrank の取得.
mpi_send, mpi_recv	一対一の同期通信. _send は送信, _recv は受信.
mpi_sendrecv	一対一の同期通信. 送信受信を一度におこなう.
mpi_isend, mpi_irecv	一対一の非同期通信. _send は送信, _recv は受信.
mpi_wait	非同期通信での送受信の完了を待つ.
mpi_bcast	あるプロセスの持つ情報を他のプロセスへ配布する.
mpi_reduce, mpi_allreduce	全てのプロセス間でのリダクション処理 (合計, 最大値計算など)
mpi_gather, mpi_allgather	全てのプロセス間で情報を集約する.
mpi_wtime	時間計測用の関数

MPI (message passing interface)

サンプル hello_mpi.f:

```
include ‘mpif.h’                                  MPI 変数,関数の読み込み

CALL MPI_INIT(ierr)                    MPI 起動
CALL MPI_COMM_SIZE(MPI_COMM_WORLD,nprocs,ierr)
CALL MPI_COMM_RANK(MPI_COMM_WORLD,myrank,ierr)

WRITE(*,*) ‘Hello’, myrank

CALL MPI_FINALIZE(ierr)          MPI 終了

STOP
END
```

プロセス数(nprocs)取得

自プロセス番号(myrank)取得
＊0 始まり

コンパイル
```
> mpif90 hello_mpi.f
```

実行
```
> mpirun –np 4 ./a.out

Hello   0
Hello   1
Hello   2
Hello   3
```

mpi_sendrecv 関数

3Dトーラスネットワークでの通信に適する MPI 関数

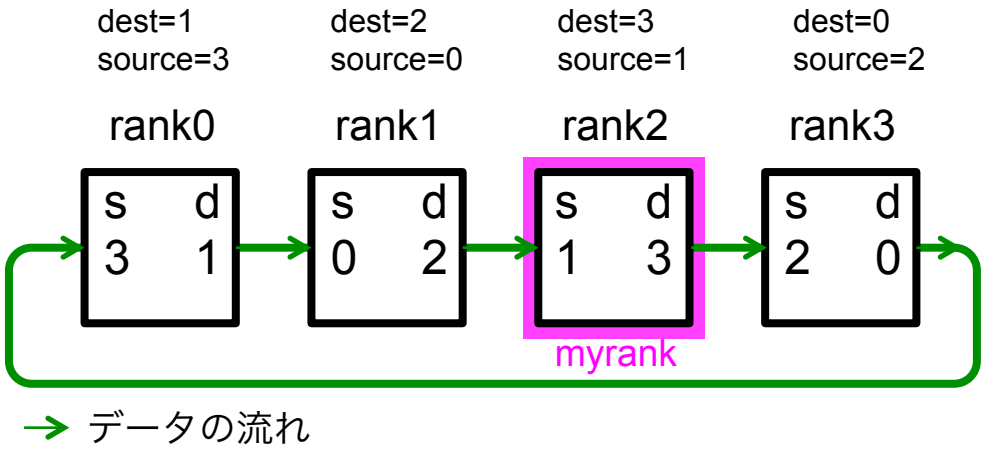
mpi_send + mpi_recv
送信　　受信

call MPI_SENDRECV (
sendbuf,scount,stype,dest,stag,
recvbuf,rcount,rtype,source,rtag,comm,status,ierr)

sendbuf : 送信データ
scount : 送信データ数
stype : 送信データの型
dest : 送信先プロセス番号(rank)
stag : 送信タグ

recvbuf : 受信データ
rcount : 受信データ数
rtype : 受信データの型
source : 受信元プロセス番号
rtag : 受信タグ

comm : コミュニケータ
status : 状態
ierr : 完了コード



destination : 送信先
source : 送信元

commで指定したプロセスグループ内で環状のシフト通信が可能.

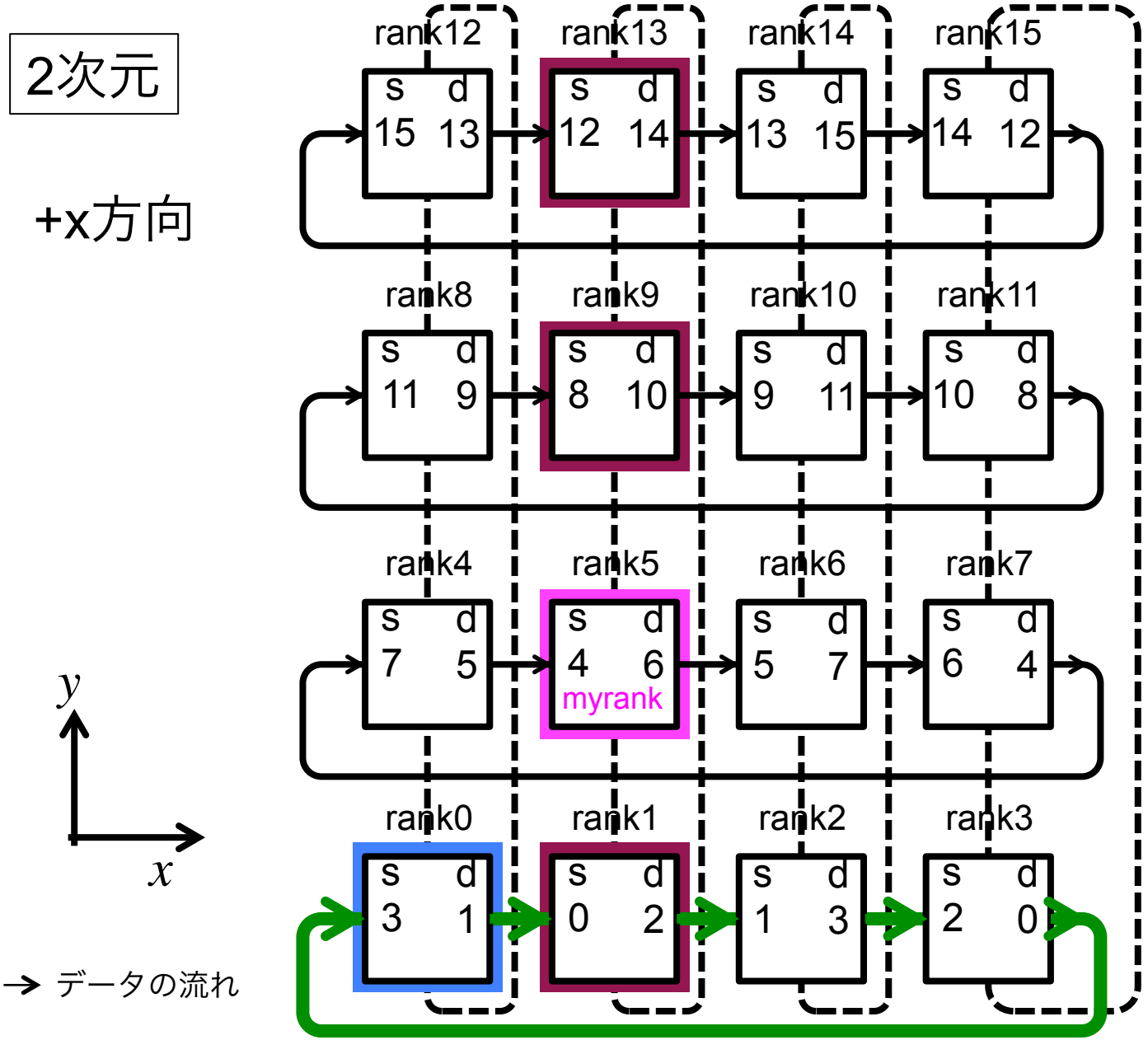
通信相手は両隣のプロセス.

myrank からみると, call mpi_sendrecv() の結果下流の rank のデータが受信される.

mpi_sendrecv 関数

2次元

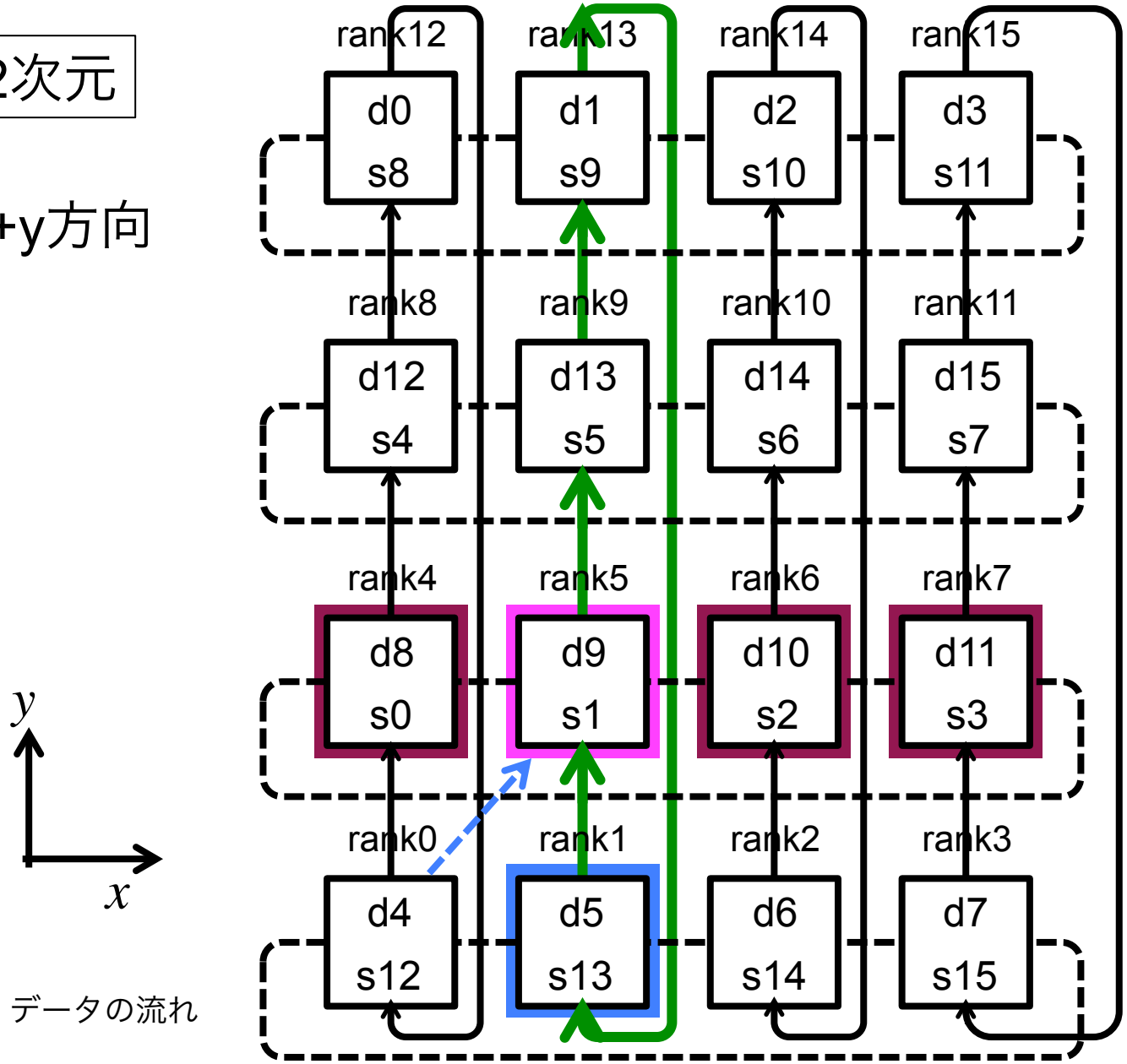
+x方向



mpi_sendrecv 関数

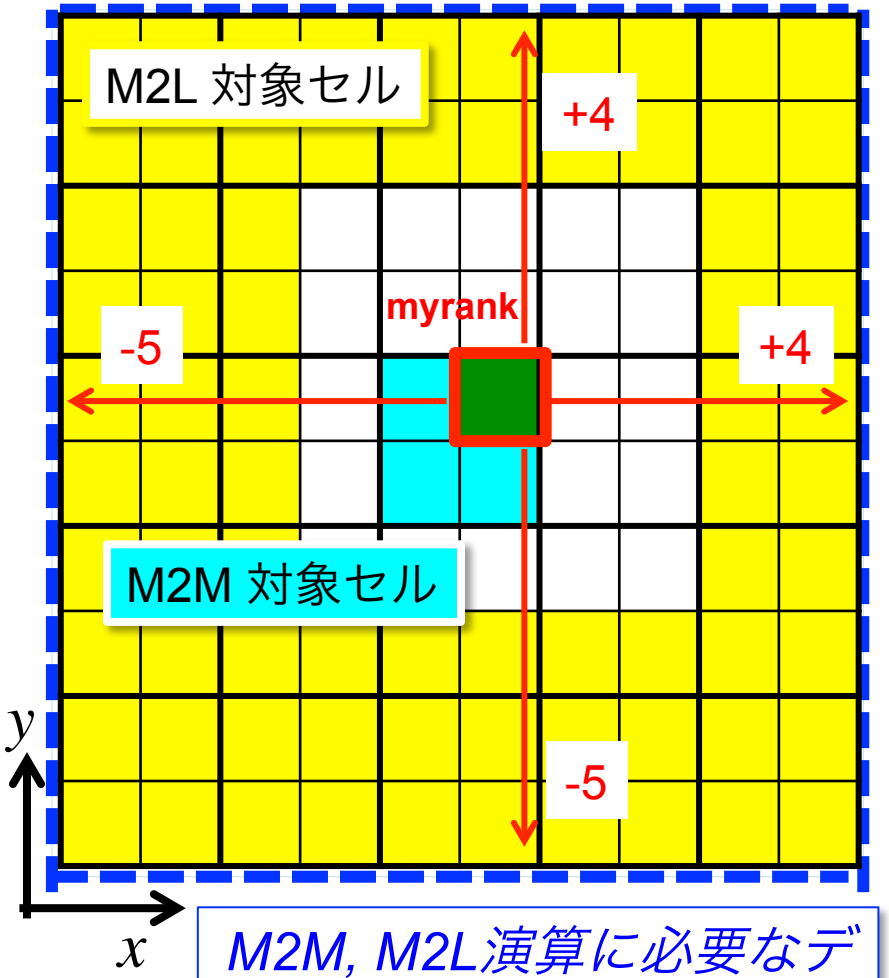
2次元

+y方向



MPI 並列化技術①: 通信衝突の回避

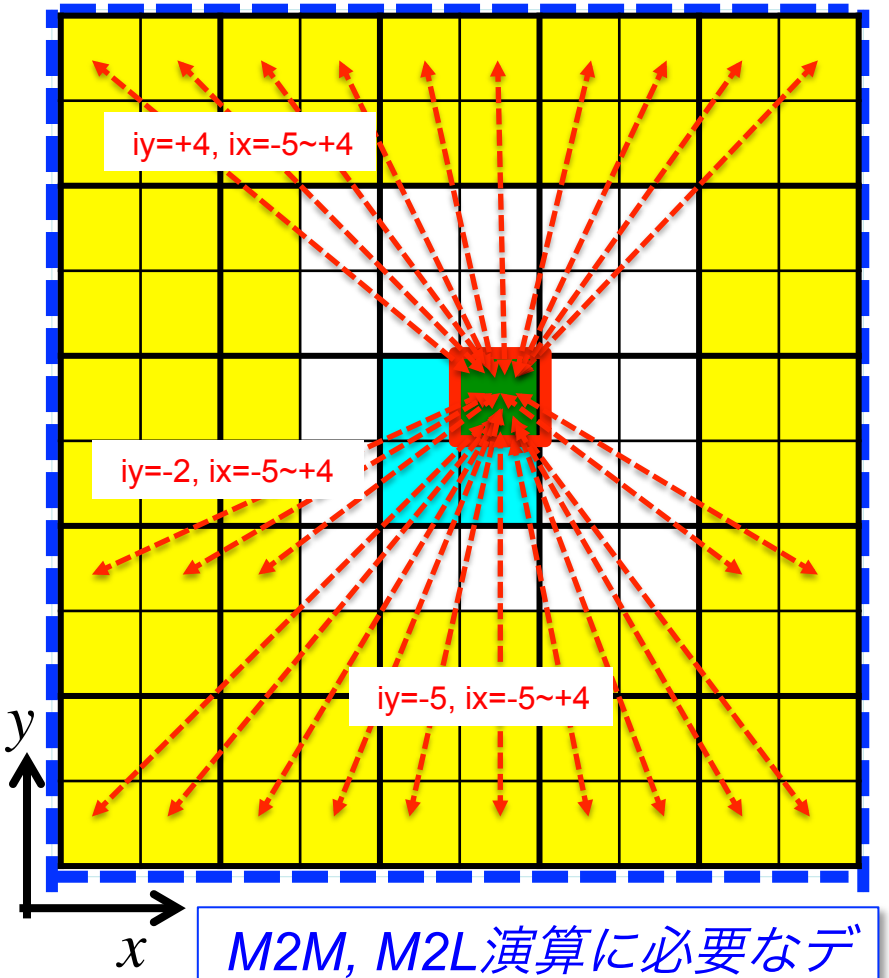
例) 多極子の通信 (1スーパーセル/プロセス)



M2M, M2L演算に必要なデータ範囲
(白抜き部分は除く)

MPI 並列化技術①: 通信衝突の回避

例) 多極子の通信 (1スーパーセル/プロセス)



M2M, M2L演算に必要なデータ範囲
(白抜き部分は除く)

古い通信コード

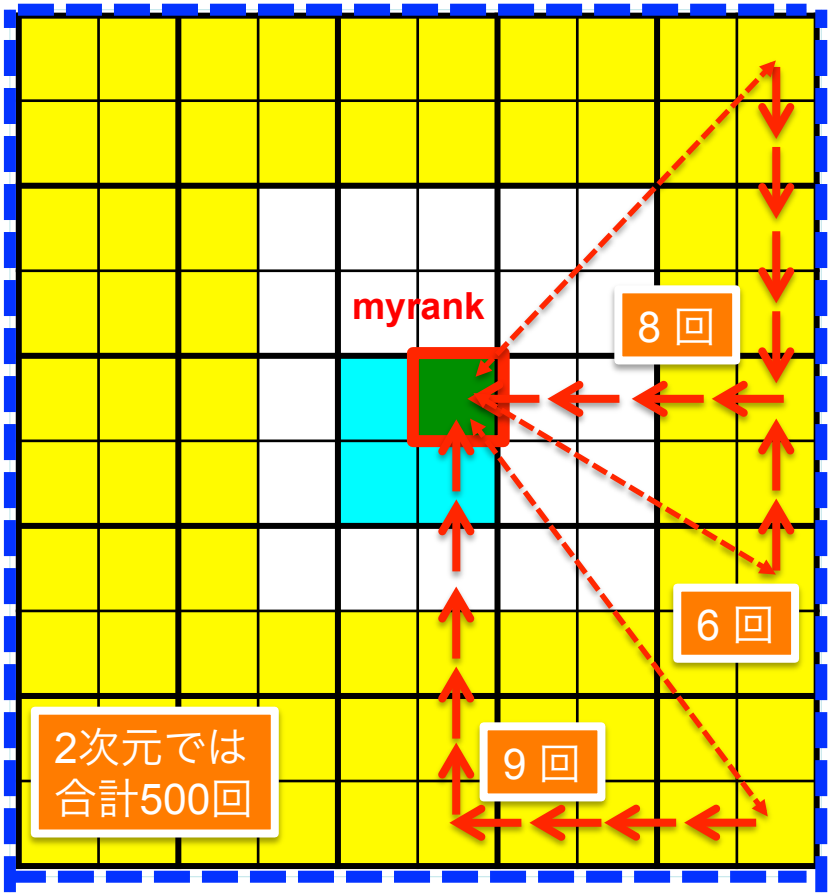
コーディングイメージ

```
do iy=-5,+4
do ix=-5,+4
   ip_dest   =送信先プロセス番号
   ip_src    =受信元プロセス番号
   IF( (ix, iy) が白抜き部分 ) cycle
   call mpi_sendrecv(..,ip_dest,..,ip_src,..)
enddo
enddo
```

このままだと$(10^3-5^3)+(2^3-1)$ =882 回のプロセス間通信 **[3次元]**

MPI 並列化技術①: 通信衝突の回避

例) 多極子の通信 (1スーパーセル/プロセス)



古い通信コード

コーディングイメージ

```
do iy=-5,+4
do ix=-5,+4
   ip_dest   =送信先プロセス番号
   ip_src    =受信元プロセス番号
   IF( (ix, iy) が白抜き部分 ) cycle
   call mpi_sendrecv(..,ip_dest,..,ip_src,..)
enddo
enddo
```

このままだと$(10^3-5^3)+(2^3-1)$ =882 回の
プロセス間通信 **[3次元]**

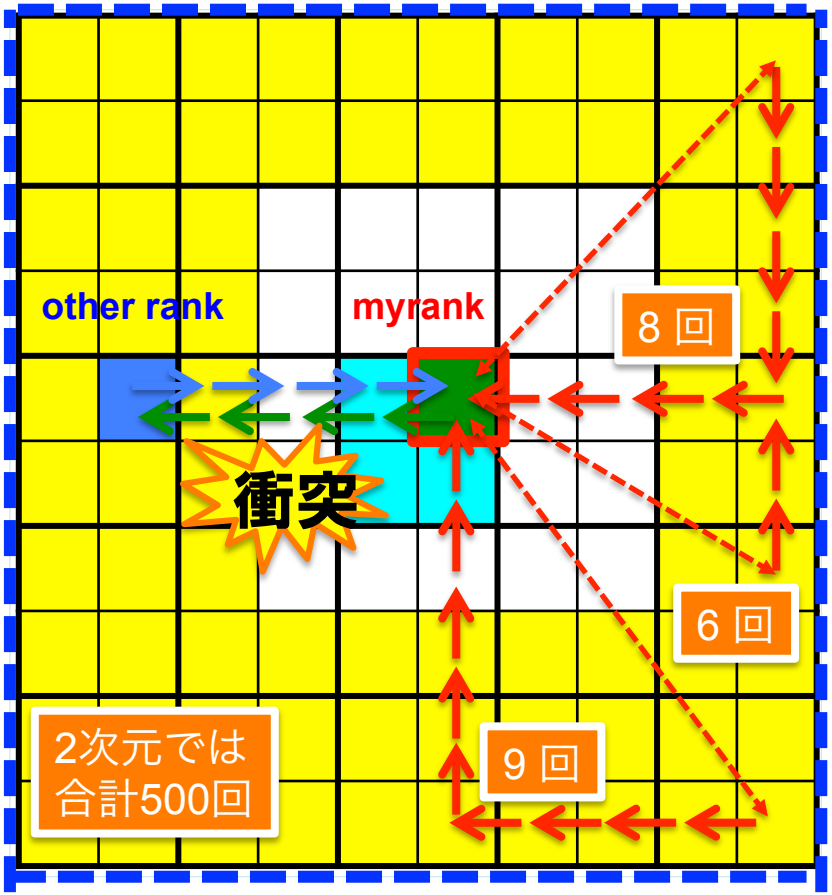
さらに、トーラスネットワークに特有の問題:
(1) 882個の通信先ごと多数のホップ回数

用語の定義：

ホップ:
隣接ノードとの通信

MPI 並列化技術①: 通信衝突の回避

例) 多極子の通信 (1スーパーセル/プロセス)



古い通信コード

コーディングイメージ

```
do iy=-5,+4
do ix=-5,+4
   ip_dest   =送信先プロセス番号
   ip_src    =受信元プロセス番号
   IF( (ix, iy) が白抜き部分 ) cycle
   call mpi_sendrecv(..,ip_dest,..,ip_src,..)
enddo
enddo
```

このままだと$(10^3-5^3)+(2^3-1)$ =882 回の
プロセス間通信 **[3次元]**

さらに、トーラスネットワークに特有の問題:
(1) 882個の通信先ごと多数のホップ回数
(2) 通信の衝突が至る所で発生

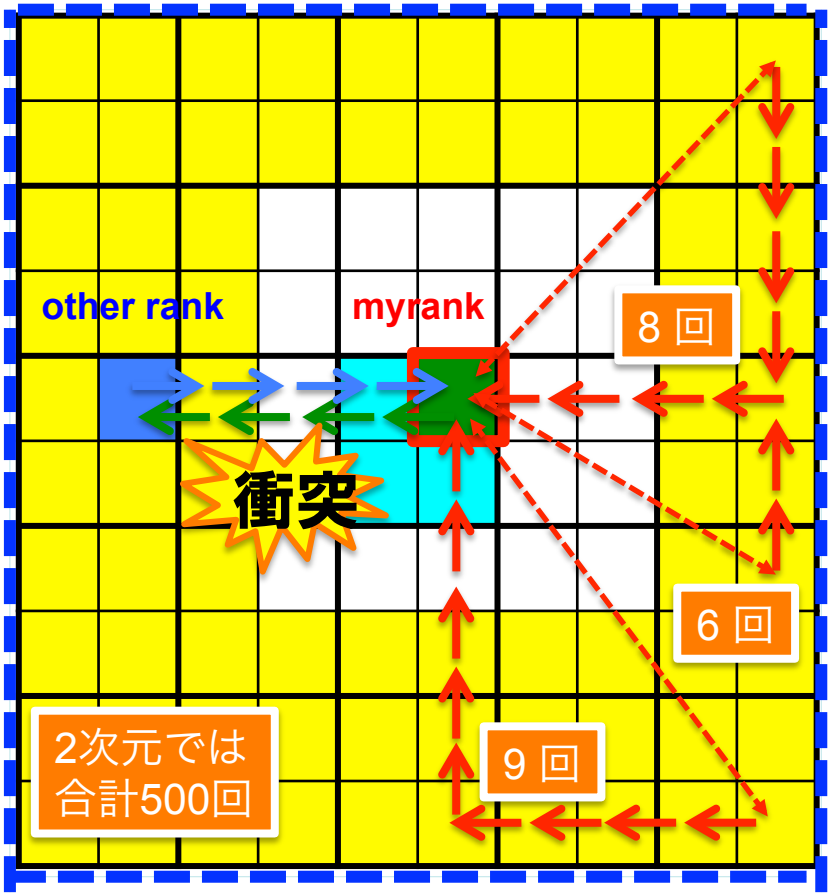
⇒ 通信時間の増加 = 並列性能の低下

用語の定義：

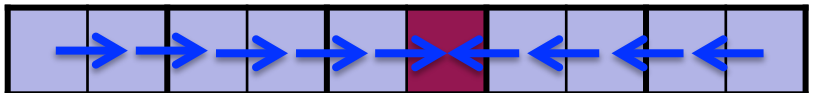
ホップ:
隣接ノードとの通信

MPI 並列化技術①: 通信衝突の回避

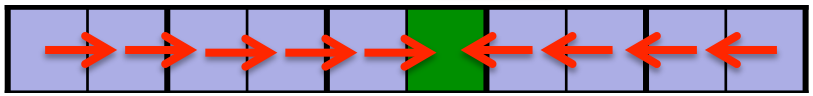
例) 多極子の通信 (1スーパーセル/プロセス)



新しい通信コード

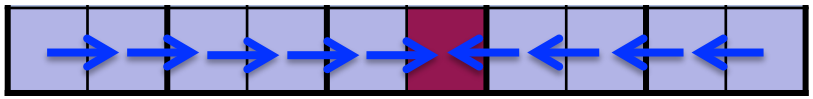


1) ± x 軸方向通信 9 回



全てのプロセスが
・同じタイミング
・同じ方向

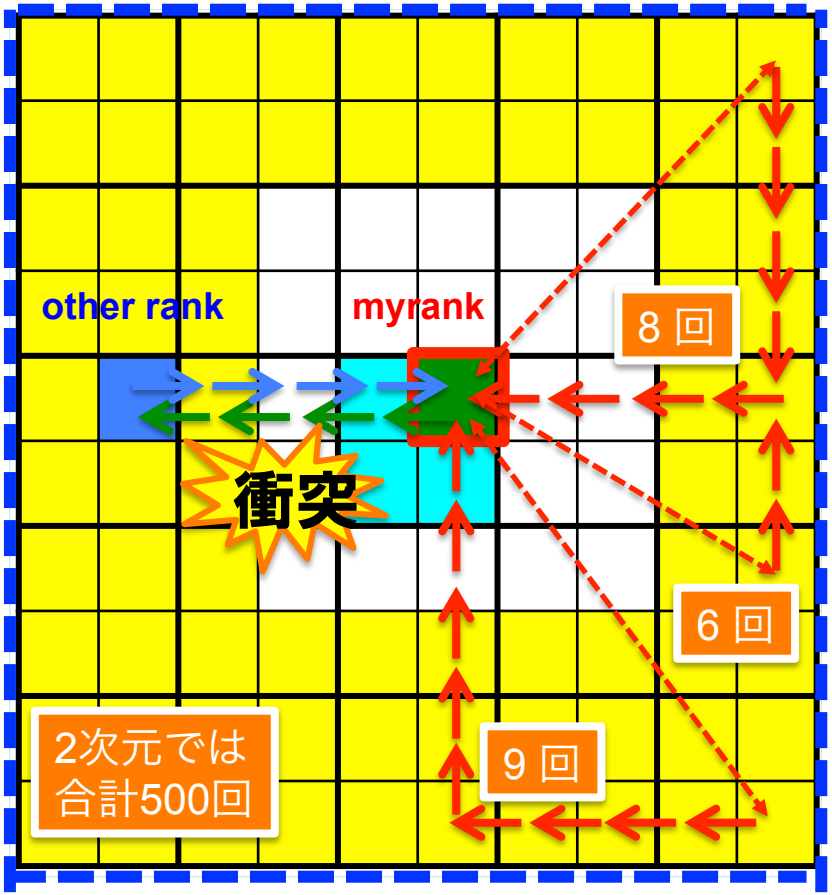
衝突回避



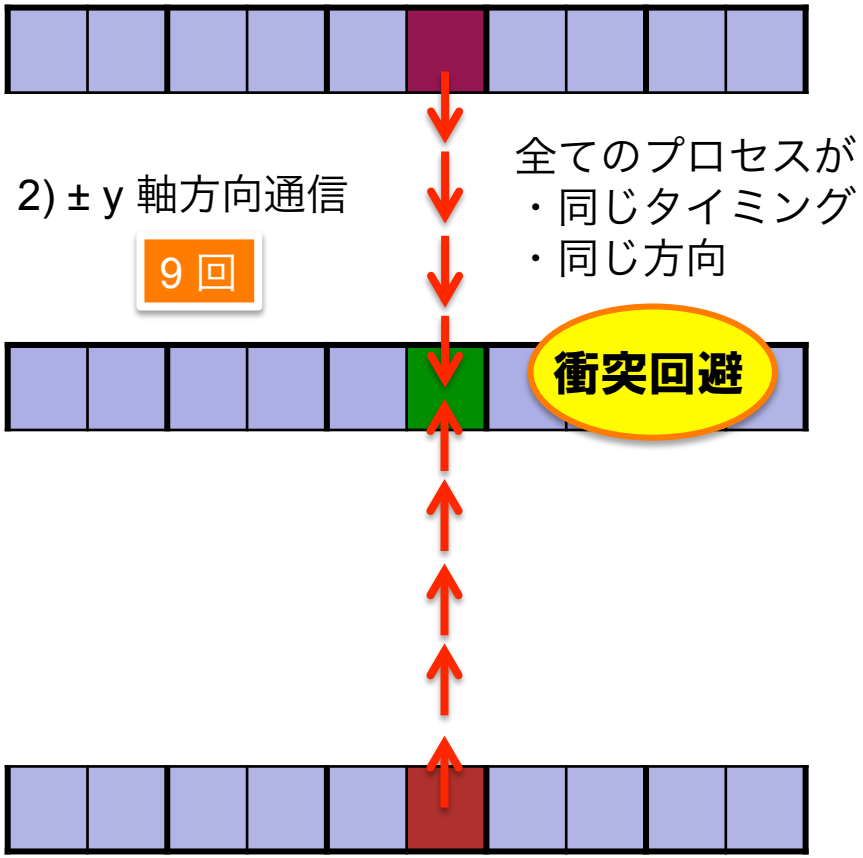
トーラスネットワークに特有の問題:
(1) 882個の通信先ごと多数のホップ回数
(2) 通信の衝突が至る所で発生

MPI 並列化技術①: 通信衝突の回避

例) 多極子の通信 (1スーパーセル/プロセス)



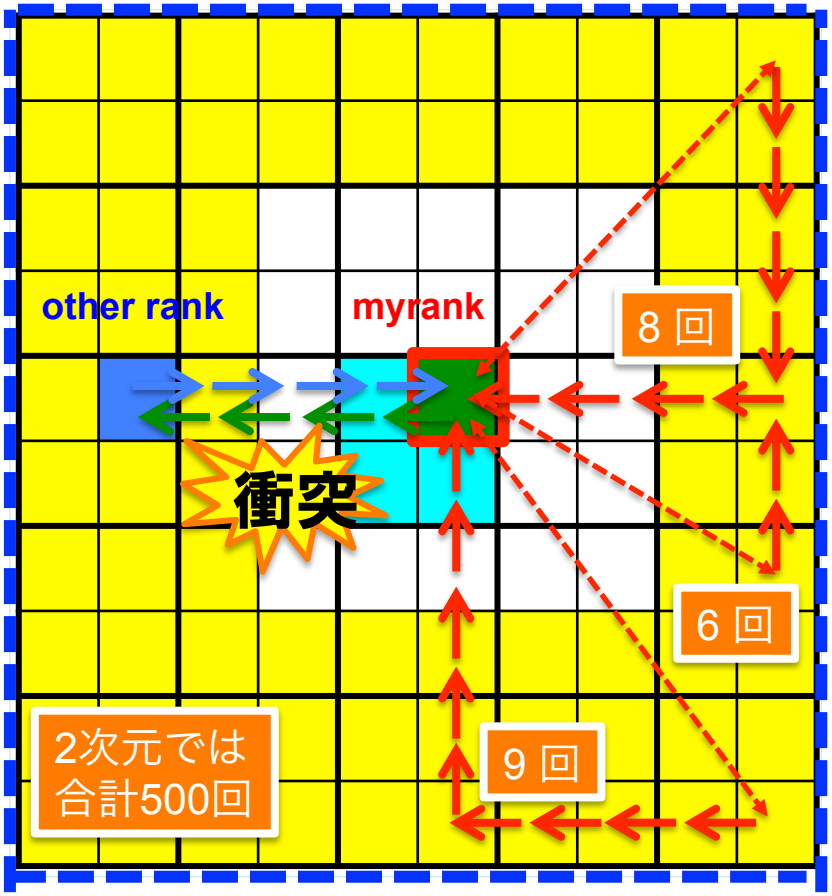
新しい通信コード



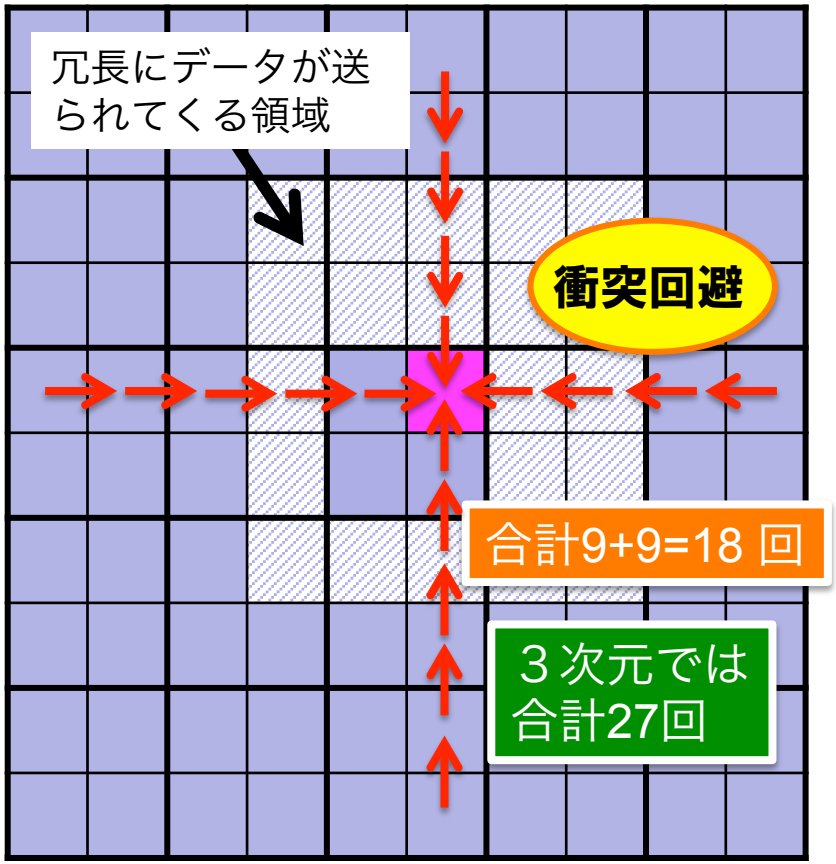
トーラスネットワークに特有の問題:
(1) 882個の通信先ごと多数のホップ回数
(2) 通信の衝突が至る所で発生

MPI 並列化技術①: 通信衝突の回避

例) 多極子の通信 (1スーパーセル/プロセス)



新しい通信コード



トーラスネットワークに特有の問題:

(1) 882個の通信先ごと多数のホップ回数
(2) 通信の衝突が至る所で発生

⇒

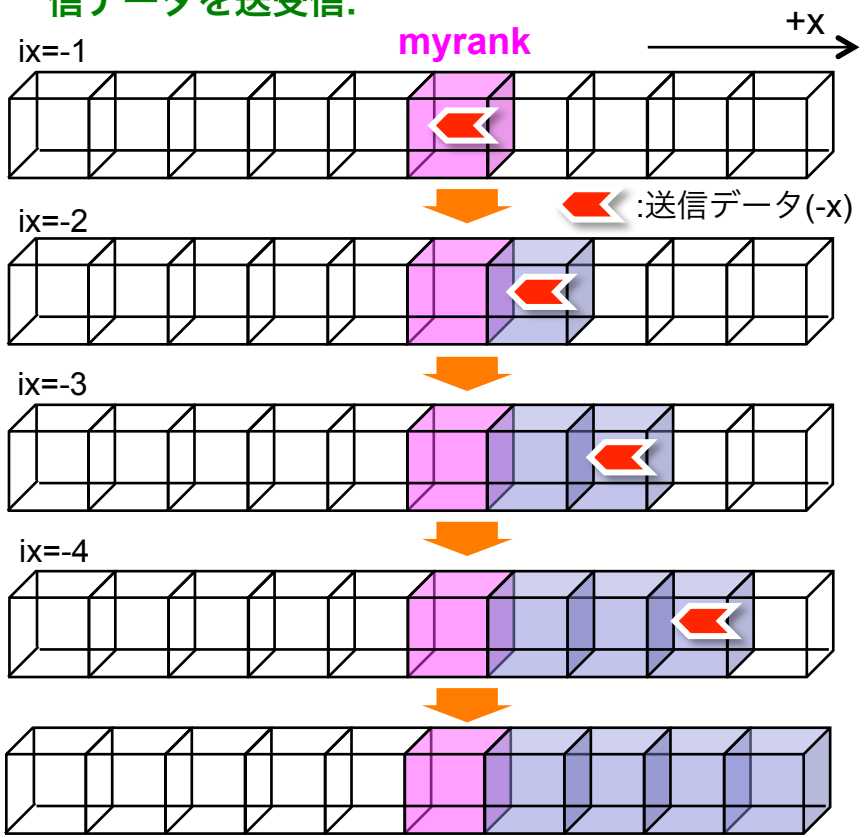
(1) ホップ回数を最小限に抑える
(2) 通信の衝突を回避

MPI 並列化技術①: 通信衝突の回避

x方向通信コーディングイメージ

```
ipx_dest =送信先プロセス番号(-x)
ipx_src   =受信元プロセス番号(-x)
do ix= -1, -4, -1
   call mpi_sendrecv(..,ipx_dest,..,ipx_src,..)
enddo
```

袖部つき局所化されたデータ構造の所定位置に受信データを格納.　次回通信では前回の受信データを送受信.



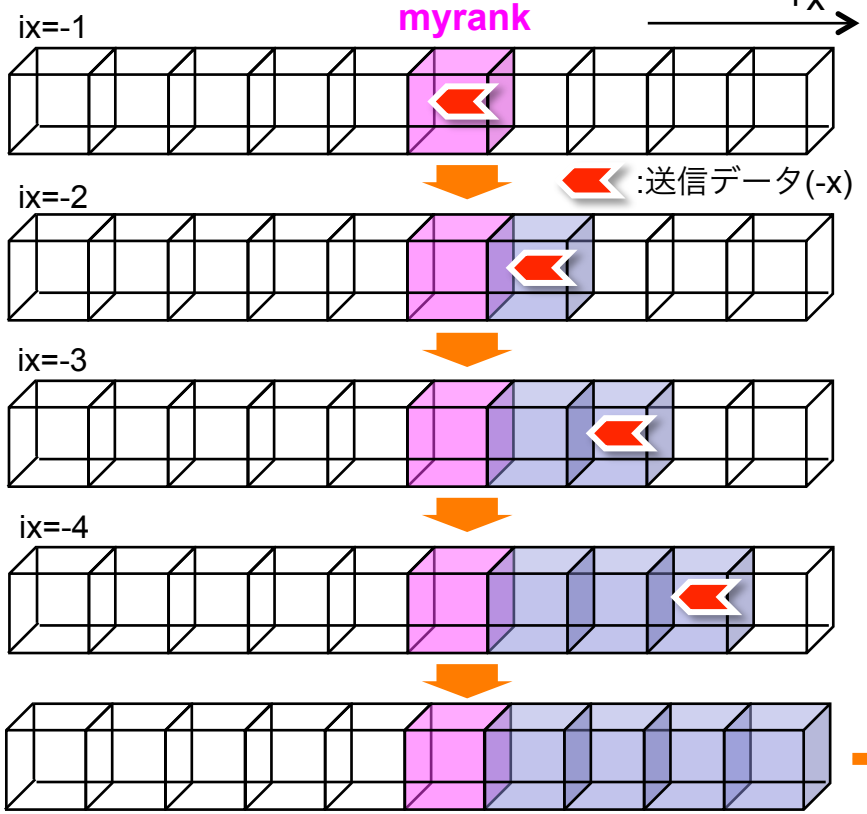
注) call mpi_sendrecv() の結果, myrank からみた -x 方向通信により +x 方向のデータを受信

MPI 並列化技術①: 通信衝突の回避

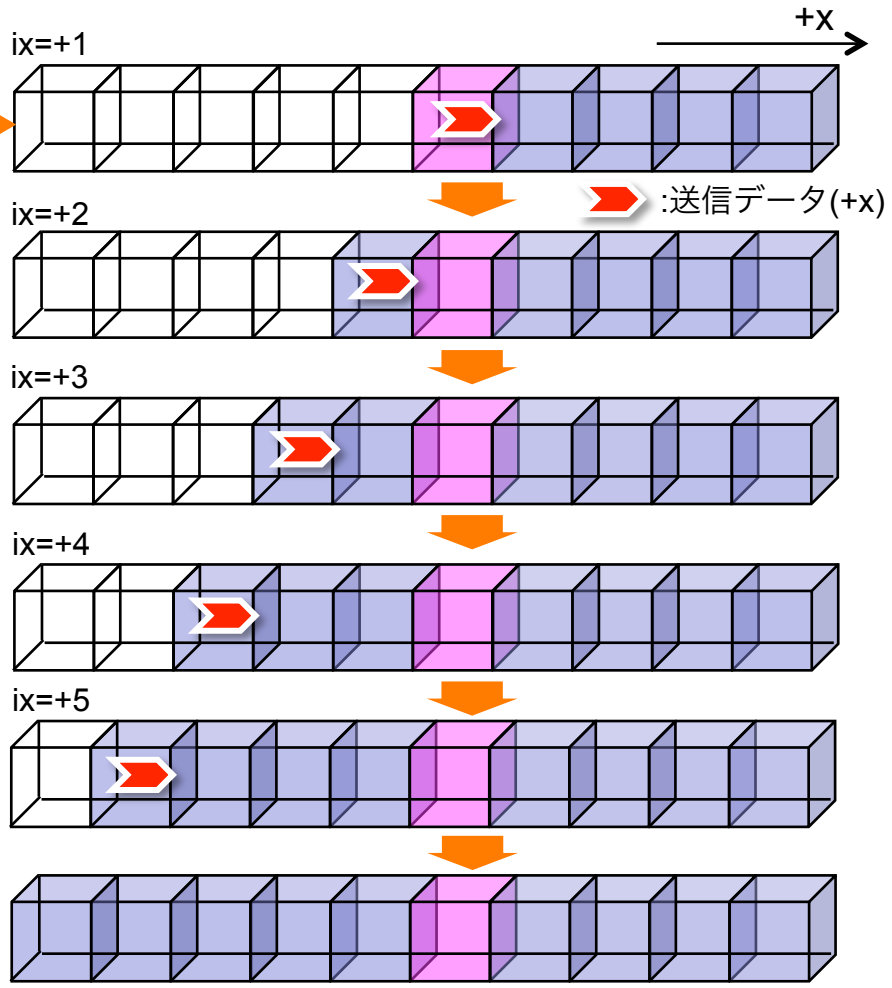
x方向通信コーディングイメージ

```
ipx_dest =送信先プロセス番号(-x)
ipx_src   =受信元プロセス番号(-x)
do ix= -1, -4, -1
   call mpi_sendrecv(..,ipx_dest,..,ipx_src,..)
enddo
```

袖部つき局所化されたデータ構造の所定位置に受信データを格納.　次回通信では前回の受信データを送受信.




```
ipx_dest =送信先プロセス番号(+x)
ipx_src   =受信元プロセス番号(+x)
do ix= +1, +5, +1
   call mpi_sendrecv(..,ipx_dest,..,ipx_src,..)
enddo
```

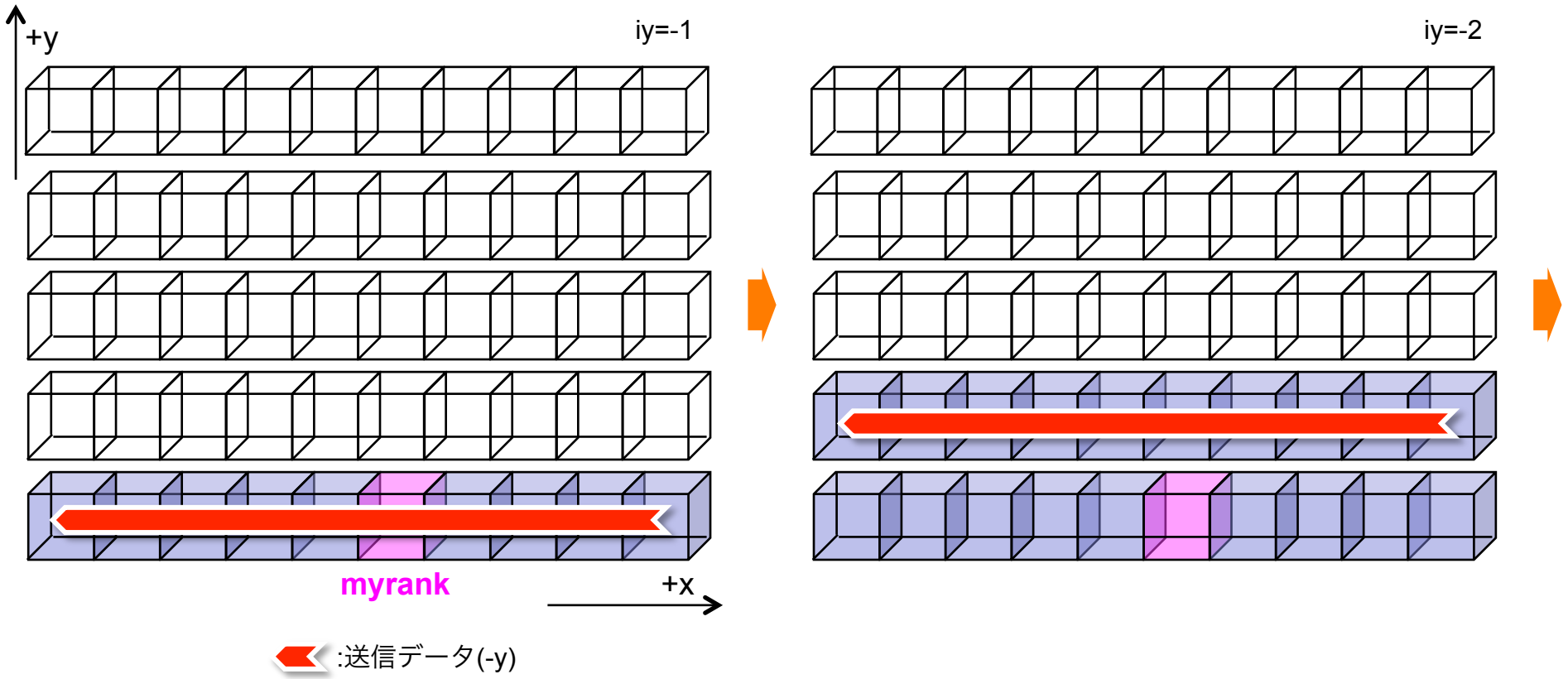


MPI 並列化技術①: 通信衝突の回避

y方向通信コーディングイメージ

```
ipy_dest =送信先プロセス番号(-y)
ipy_src   =受信元プロセス番号(-y)
do iy= -1, -4, -1
   call mpi_sendrecv(..,ipy_dest,..,ipy_src,..)
enddo
```

袖部つき局所化されたデータ構造の所定位置に棒状の受信データを格納．次回通信では前回の棒状の受信データを送受信.

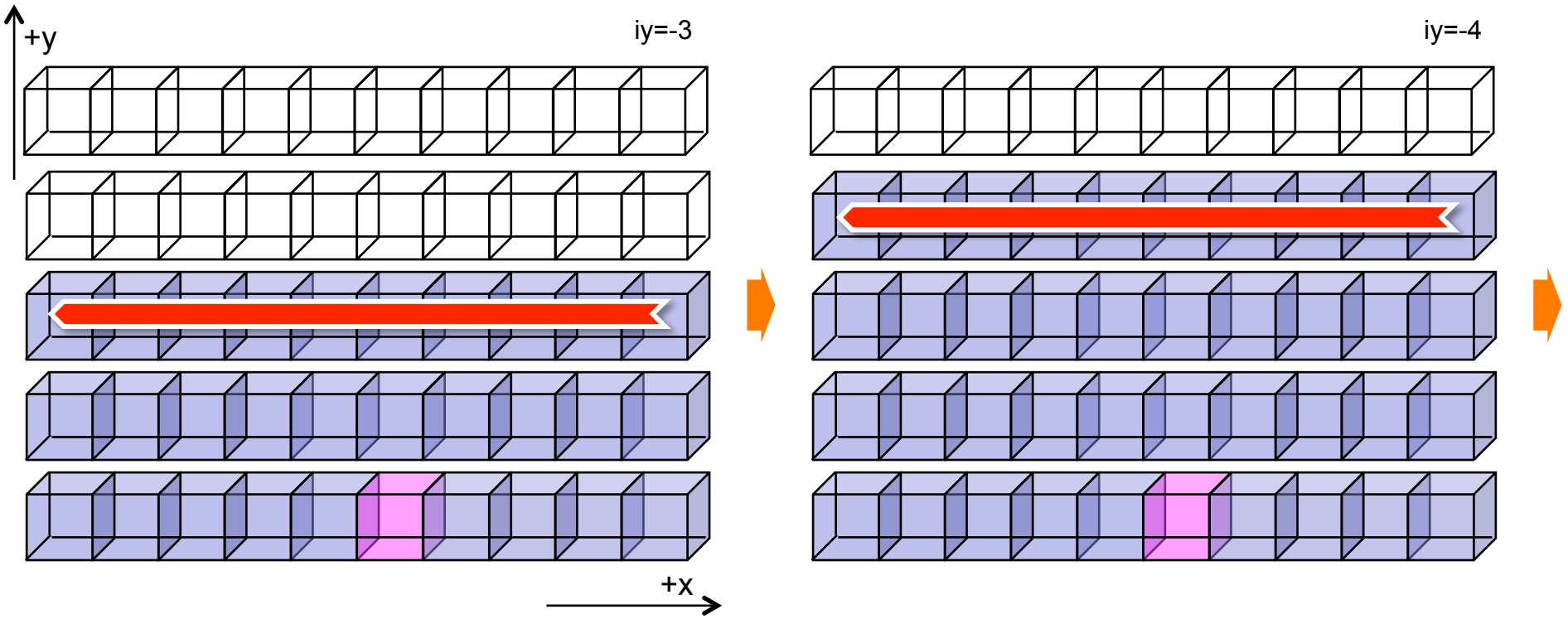


MPI 並列化技術①: 通信衝突の回避

y方向通信コーディングイメージ

```
ipy_dest =送信先プロセス番号(-y)
ipy_src   =受信元プロセス番号(-y)
do iy= -1, -4, -1
   call mpi_sendrecv(..,ipy_dest,..,ipy_src,..)
enddo
```

袖部つき局所化されたデータ構造の所定位置に棒状の受信データを格納．次回通信では前回の棒状の受信データを送受信．

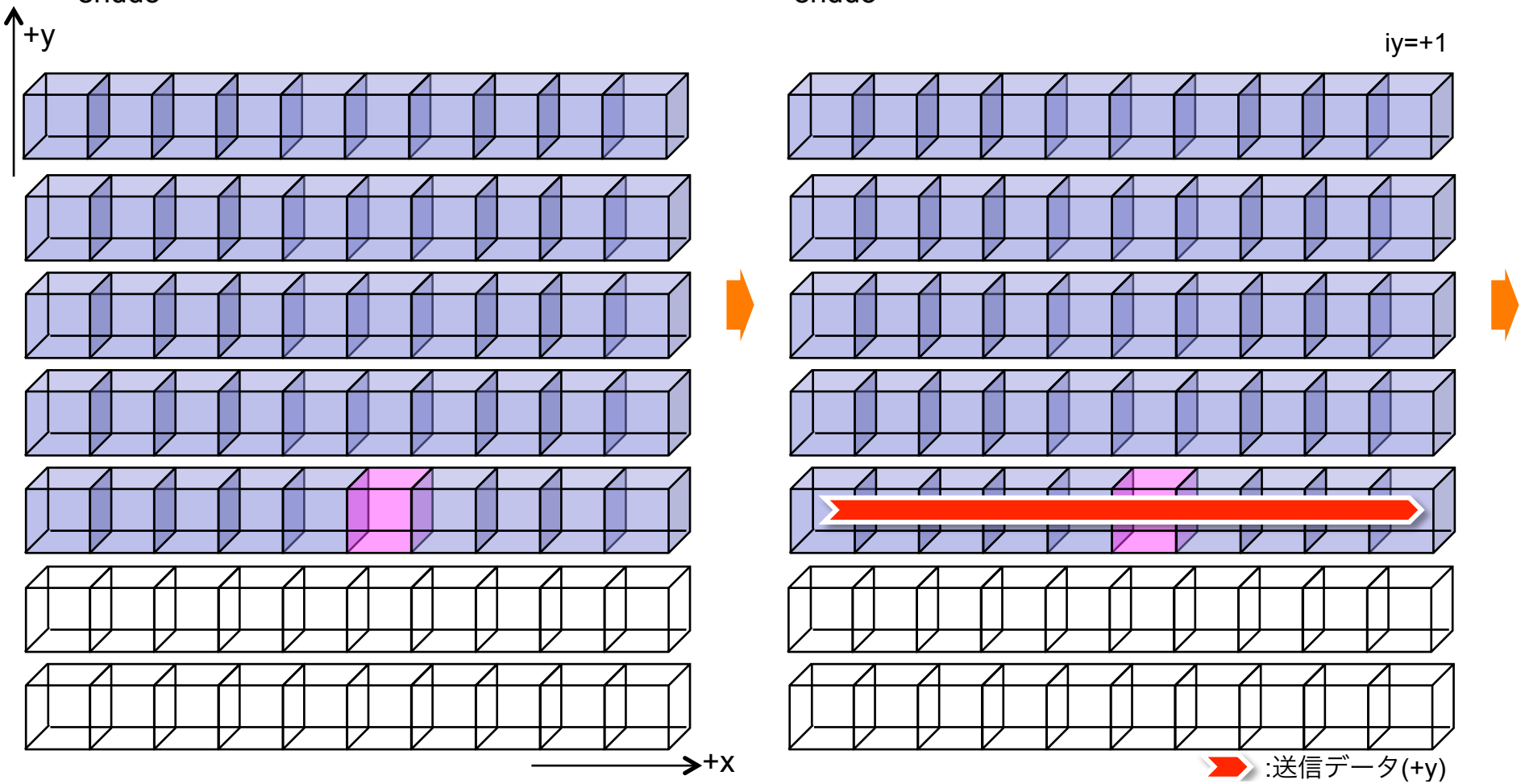


MPI 並列化技術①: 通信衝突の回避

y方向通信コーディングイメージ

```
ipy_dest =送信先プロセス番号(-y)
ipy_src   =受信元プロセス番号(-y)
do iy= -1, -4, -1
   call mpi_sendrecv(..,ipy_dest,..,ipy_src,..)
enddo
```

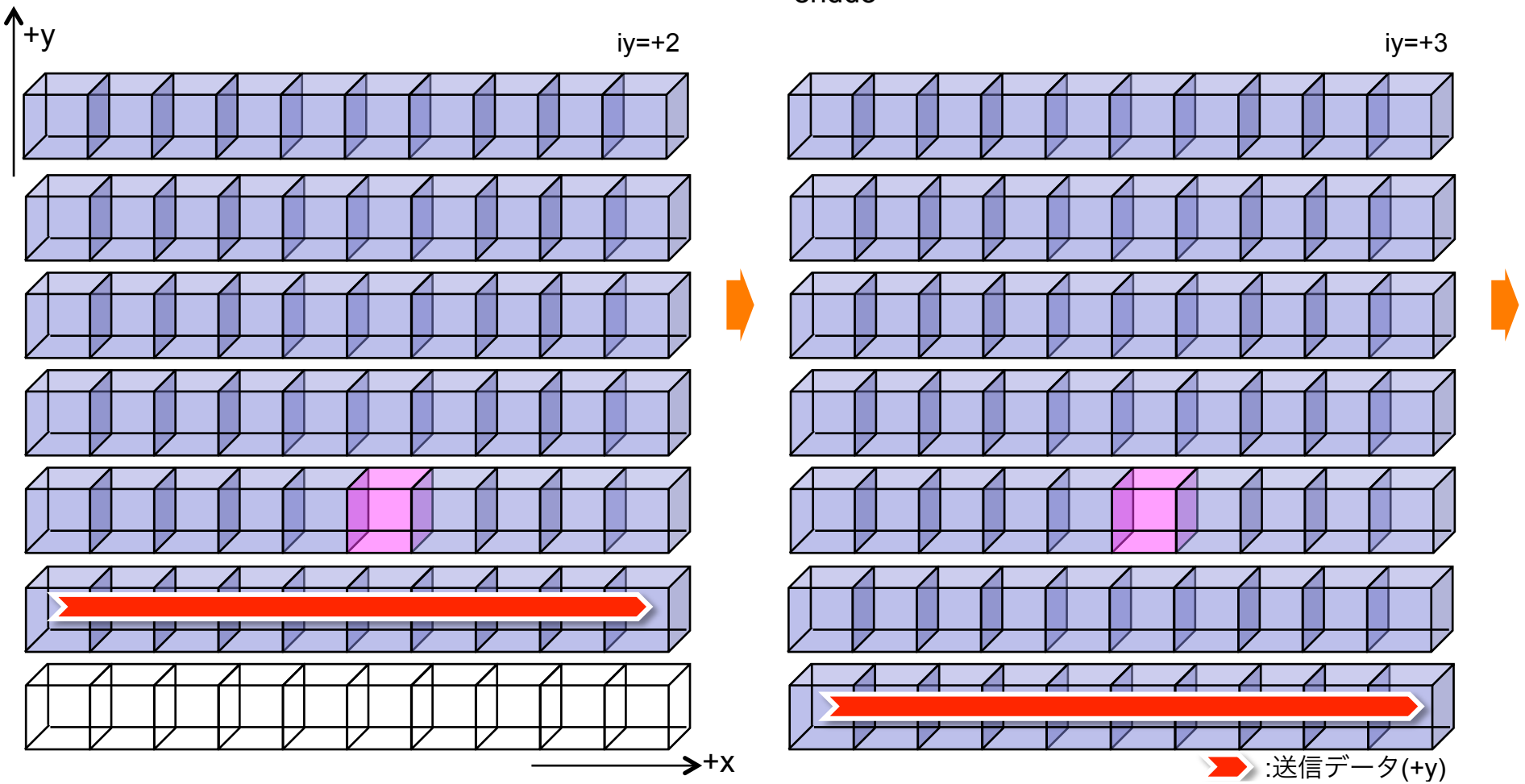
```
ipy_dest =送信先プロセス番号(+y)
ipy_src   =受信元プロセス番号(+y)
do iy= +1, +5, +1
   call mpi_sendrecv(..,ipy_dest,..,ipy_src,..)
enddo
```



MPI 並列化技術①: 通信衝突の回避

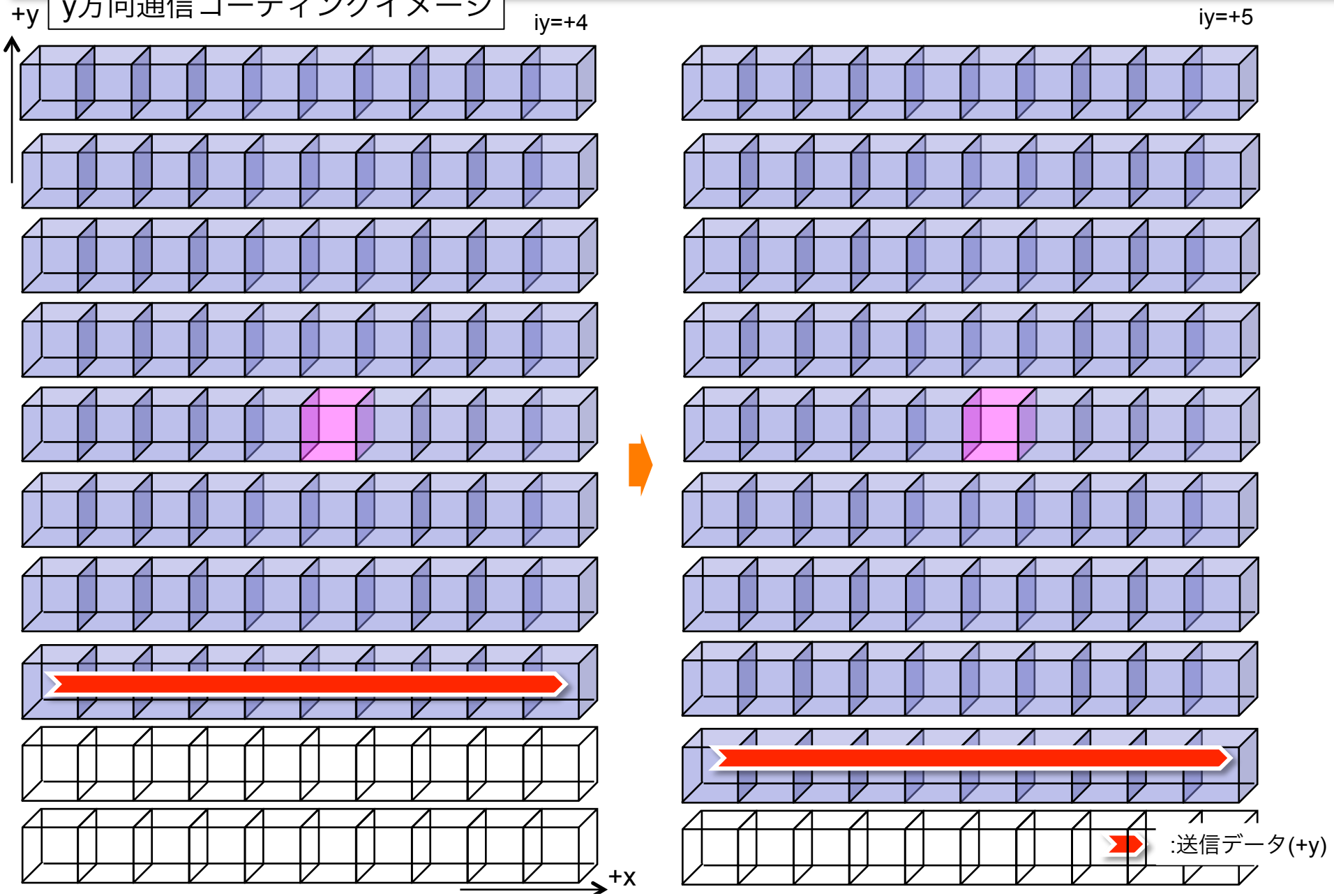
y方向通信コーディングイメージ

```
ipy_dest =送信先プロセス番号(+y)
ipy_src   =受信元プロセス番号(+y)
do iy= +1, +5, +1
   call mpi_sendrecv(..,ipy_dest,..,ipy_src,..)
enddo
```



MPI 並列化技術①: 通信衝突の回避

y方向通信コーディングイメージ



MPI 並列化技術①: 通信衝突の回避

コーディングイメージ

```
ipx_dest =送信先プロセス番号(-x)
ipx_src  =受信元プロセス番号(-x)
do ix= -1, -4, -1
   call mpi_sendrecv(..,ipx_dest,..,ipx_src,..)
enddo
```
固定 → -x

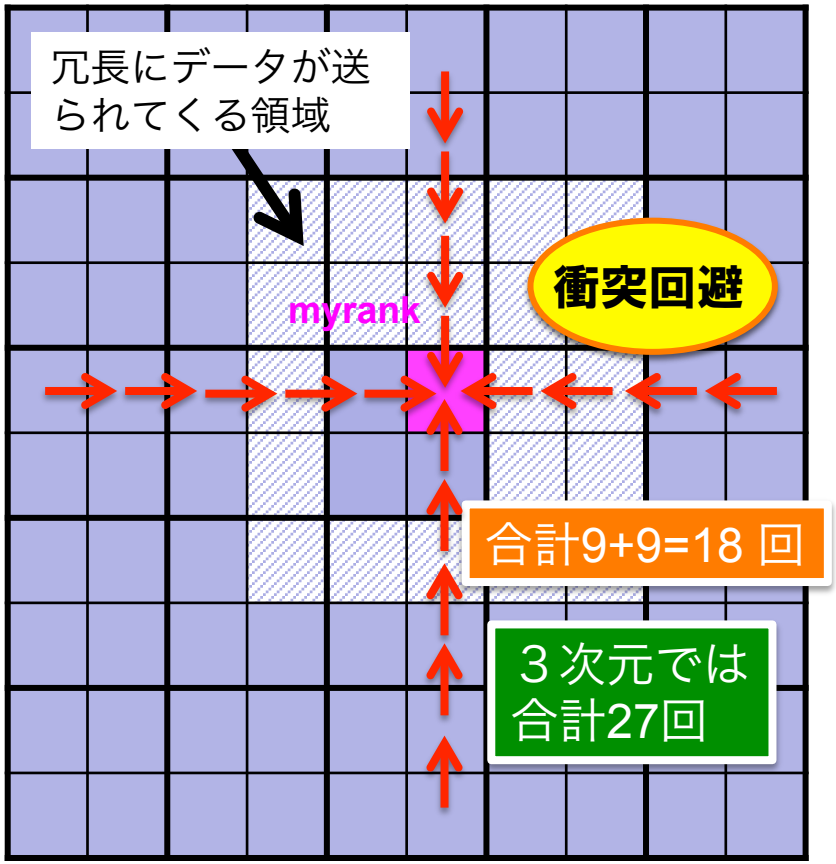
```
ipx_dest =送信先プロセス番号(+x)
ipx_src  =受信元プロセス番号(+x)
do ix= +1, +5, +1
   call mpi_sendrecv(..,ipx_dest,..,ipx_src,..)
enddo
```
固定 → +x

```
ipy_dest =送信先プロセス番号(-y)
ipy_src  =受信元プロセス番号(-y)
do iy=-1, -4, -1
   call mpi_sendrecv(..,ipy_dest,..,ipy_src,..)
enddo
```
固定 → -y

```
ipy_dest =送信先プロセス番号(+y)
ipy_src  =受信元プロセス番号(+y)
do iy=+1, +5, +1
   call mpi_sendrecv(..,ipy_dest,..,ipy_src,..)
enddo
```
固定 → +y

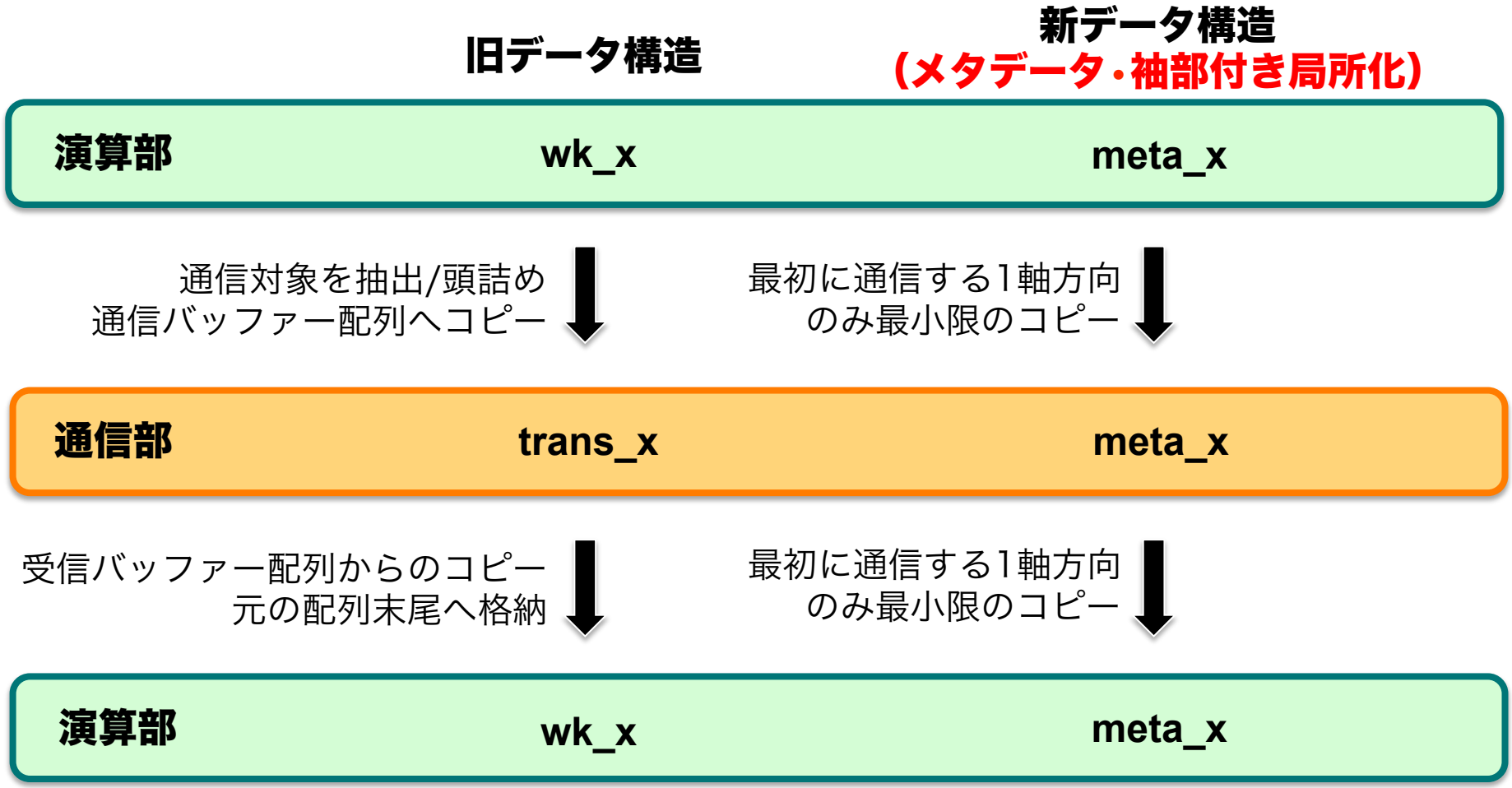
残るz方向も同様 -z +z

新しい通信コード



３軸逐次隣接通信による局所的収集処理

MPI 並列化技術②:通信前後での配列間コピーの消去



MPI 並列化技術②:通信前後での配列間コピーの消去

コーディングイメージ

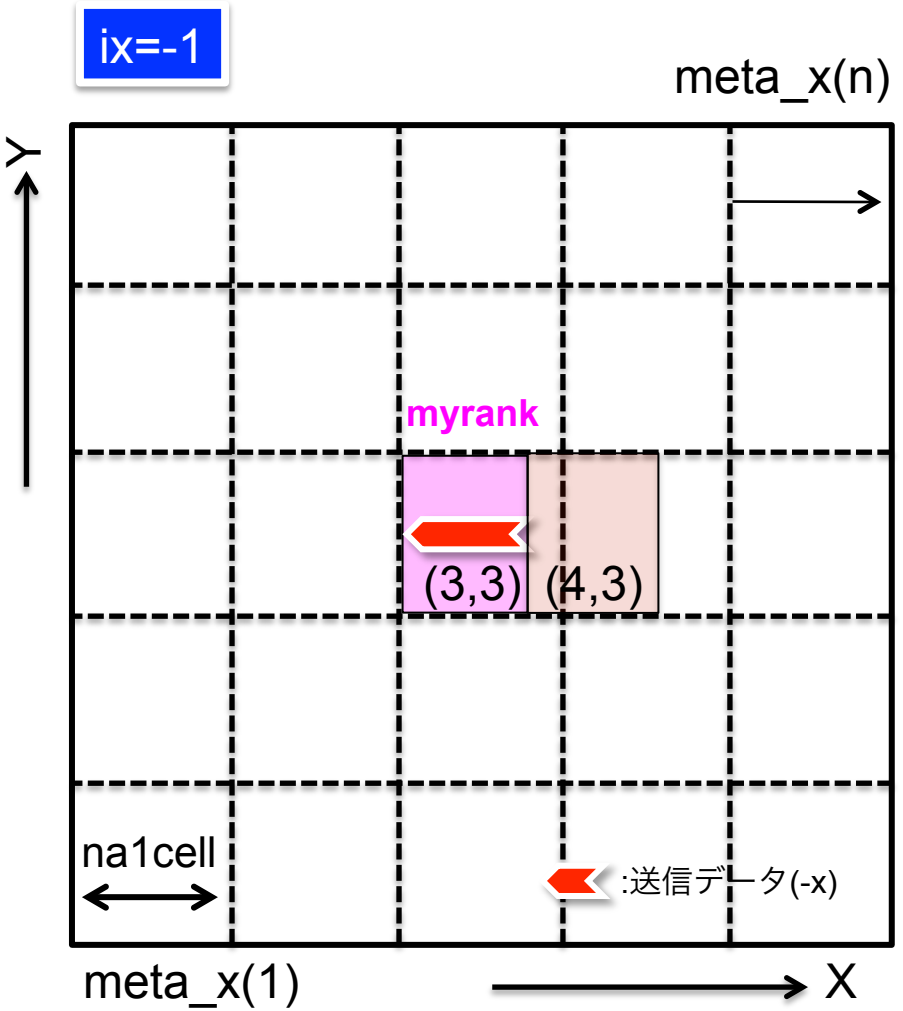
-x 軸方向通信　[**サイズ不定**の**セル単位データ**を送受信]

```
ipx_mdest  =送信先プロセス番号(-x)
ipx_msrc=受信元プロセス番号(-x)
do ix=-1,-2,-1
c 原子数情報の送受信
   icbufm( ) = na_per_cell( 3, 3 )
   call mpi_sendrecv(icbufm, ...,ipx_mdest, ...,
                     ircbufm,..., ipx_msrc, ...)
   na_per_cell( 4, 3 )=ircbufm( )
   受信データのtag(4,3)を作成
c 座標情報の送受信
   buffm( ) = meta_x( )
   call mpi_sendrecv(buffm,..,ipx_mdest,..,
                     rbuffm, ...,ipx_msrc,..)
   meta_x( ) = rbuffm( )
enddo
```

送信バッファーへコピー

データを左づめにしつつ元配列にコピー

注) myrank からみると -x 方向通信により +x 方向の座標情報を受信



MPI 並列化技術②:通信前後での配列間コピーの消去

コーディングイメージ

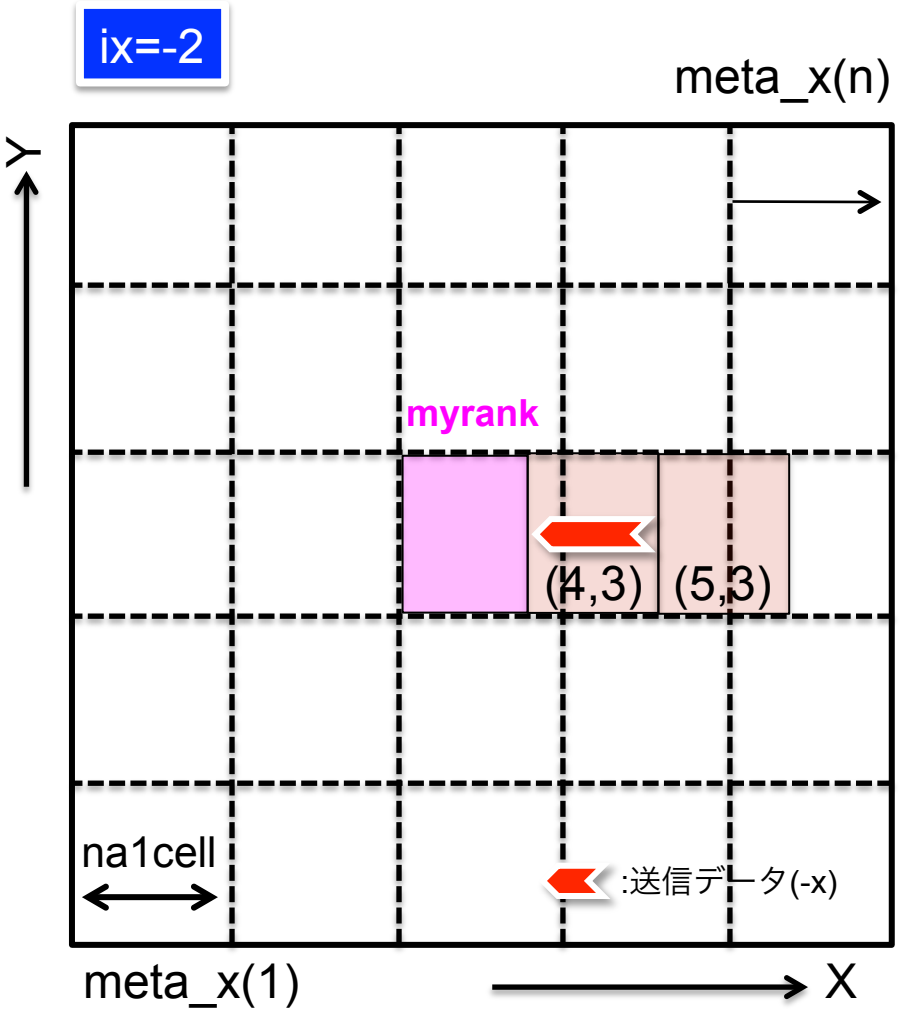
-x 軸方向通信　[**サイズ不定**の**セル単位データ**を送受信]

```
ipx_mdest  =送信先プロセス番号(-x)
ipx_msrc=受信元プロセス番号(-x)
do ix=-1,-2,-1
c 原子数情報の送受信
   icbufm( ) = na_per_cell( 4, 3 )
   call mpi_sendrecv(icbufm, ...,ipx_mdest, ...,
                     ircbufm,..., ipx_msrc, ...)
   na_per_cell( 5, 3 )=ircbufm( )
   受信データのtag(5,3)を作成
c 座標情報の送受信
   buffm( ) = meta_x( )
   call mpi_sendrecv(buffm,..,ipx_mdest,..,
                     rbuffm, ...,ipx_msrc,..)
   meta_x( ) = rbuffm( )
enddo
```

送信バッファーへコピー

データを左づめにしつつ元配列にコピー

注) myrank からみると -x 方向通信により +x 方向の座標情報を受信



MPI 並列化技術②:通信前後での配列間コピーの消去

コーディングイメージ

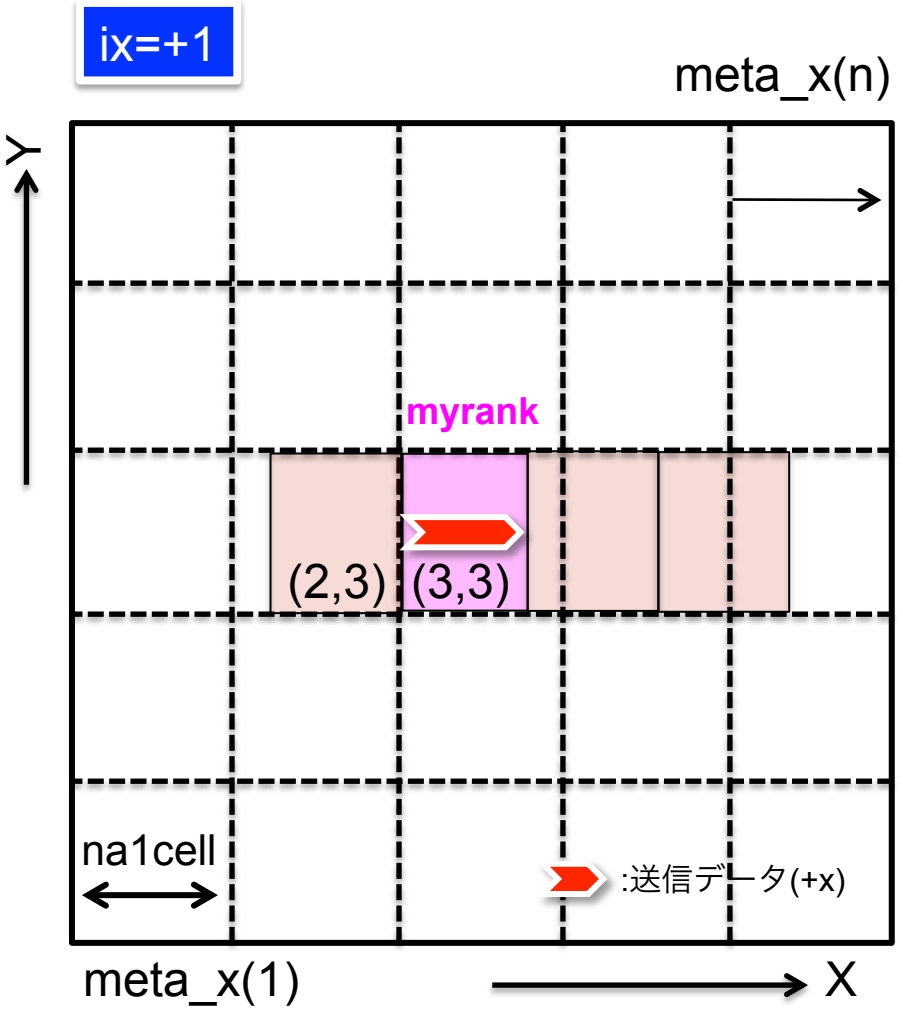
+x 軸方向通信　[**サイズ不定**の**セル単位データ**を送受信]

```
ipx_pdest   =送信先プロセス番号(+x)
ipx_psrc =受信元プロセス番号(+x)
do ix=+1,+2,+1
c 原子数情報の送受信
   icbufp( ) = na_per_cell( 3, 3 )
   call mpi_sendrecv(icbufp, ...,ipx_pdest, ...,
                     ircbufp,..., ipx_psrc, ...)
   na_per_cell( 2, 3 )=ircbufp( )
   受信データのtag(2,3)を作成
c 座標情報の送受信
   buffp( ) = meta_x( )
   call mpi_sendrecv(buffp,..,ipx_pdest,..,
                     rbuffp, ...,ipx_psrc,..)
   meta_x( ) = rbuffp( )
enddo
```

送信バッファーへコピー

データを右づめにしつつ元配列にコピー

注) myrank からみると +x 方向通信により –x 方向の座標情報を受信



MPI 並列化技術②:通信前後での配列間コピーの消去

コーディングイメージ

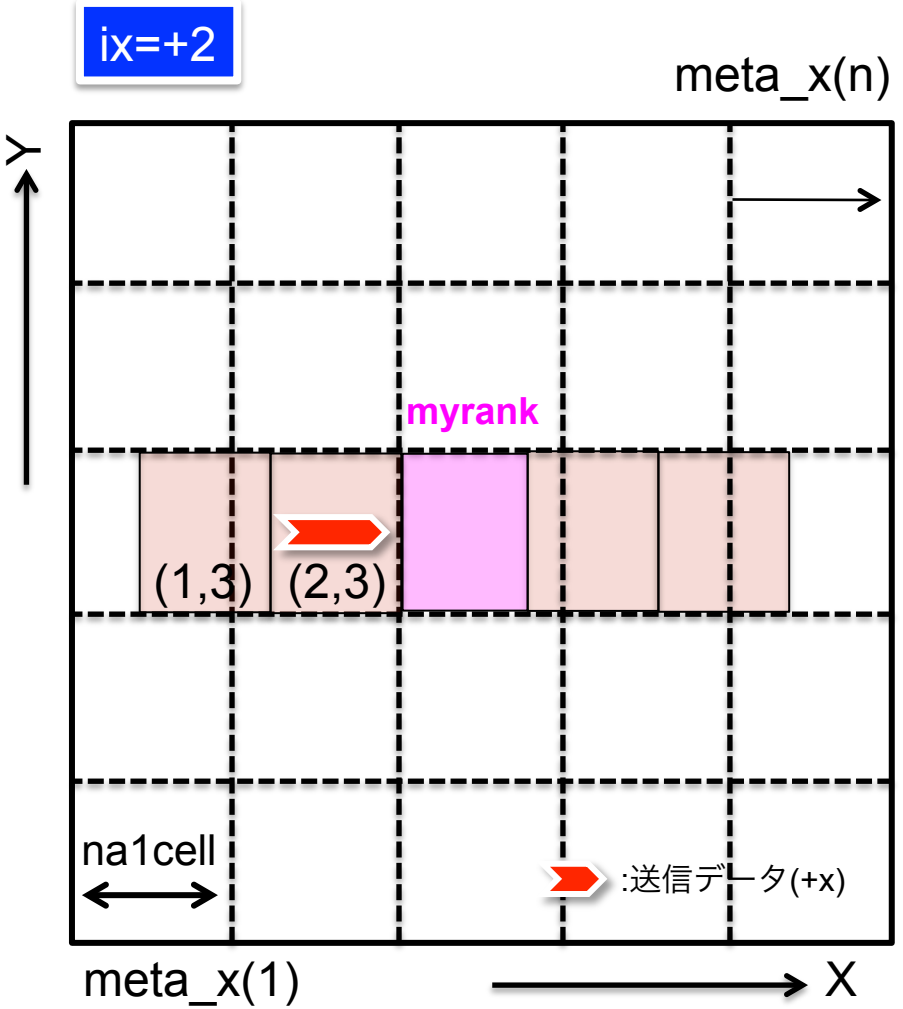
+x 軸方向通信　[**サイズ不定**の**セル単位データ**を送受信]

```
ipx_pdest   =送信先プロセス番号(+x)
ipx_psrc =受信元プロセス番号(+x)
do ix=+1,+2,+1
c 原子数情報の送受信
   icbufp( ) = na_per_cell( 2, 3 )
   call mpi_sendrecv(icbufp, ...,ipx_pdest, ...,
                     ircbufp,..., ipx_psrc, ...)
   na_per_cell( 1, 3 )=ircbufp( )
   受信データのtag(1,3)を作成
c 座標情報の送受信
   buffp( ) = meta_x( )
   call mpi_sendrecv(buffp,..,ipx_pdest,..,
                     rbuffp, ...,ipx_psrc,..)
   meta_x( ) = rbuffp( )
enddo
```

送信バッファーへコピー

データを右づめにしつつ元配列にコピー

注) myrank からみると +x 方向通信により –x 方向の座標情報を受信



MPI 並列化技術②:通信前後での配列間コピーの消去

コーディングイメージ

-y 軸方向通信

[**サイズー定**の**棒状データ**を送受信]

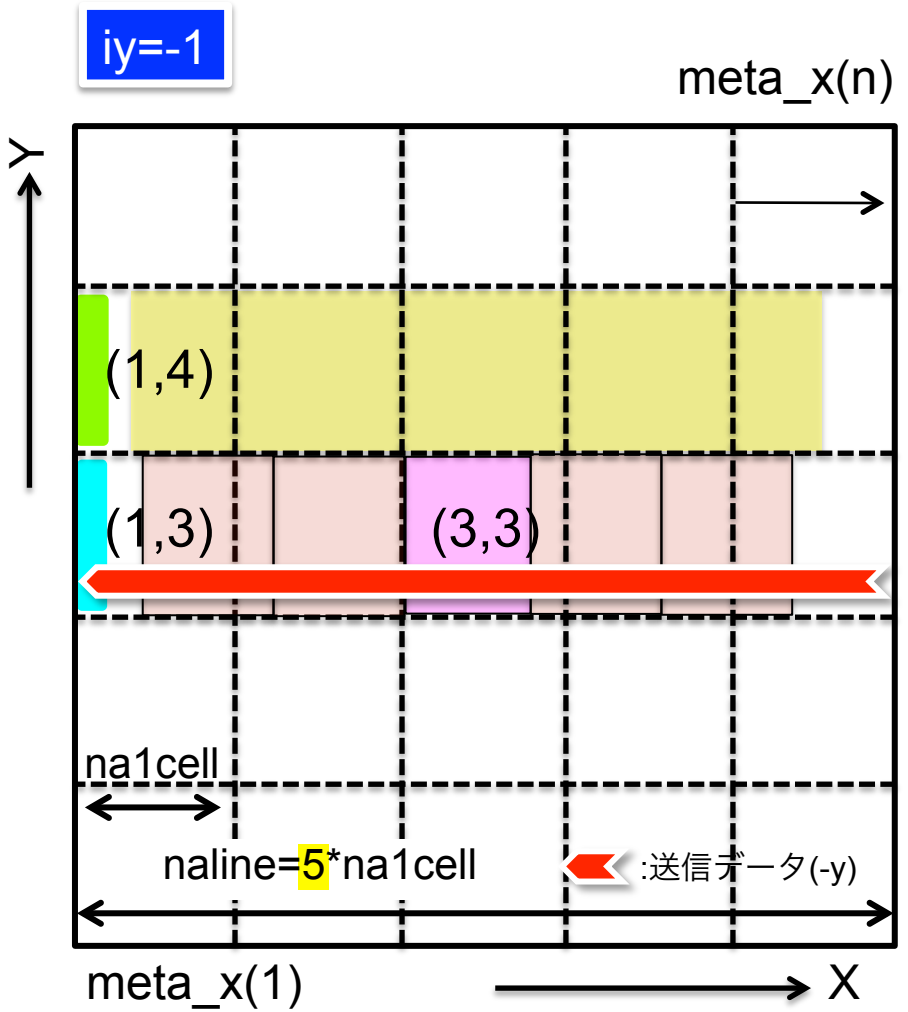
```
ipy_mdest  =送信先プロセス番号(-y)
ipy_msrc=受信元プロセス番号(-y)
do iy=-1,-2,-1
c 原子数情報の送受信
   call mpi_sendrecv(na_per_cell(1,3),5,...,ipy_mdest, ...,
                     na_per_cell(1,4),5,..., ipy_msrc, ...)
   受信データのtag(1:5,4)を作成
c 座標情報の送受信
   call mpi_sendrecv(meta_x(1,naline,..,ipy_mdest,..,
                     meta_x(1,naline,...,ipy_msrc,..)
enddo
```

棒状データを構成する
サブセル数を指定

(1,3)セルの先頭
アドレスを指定

(1,4)セルの先頭
アドレスを指定

注) myrank からみると -y 方向通信により
+y 方向の座標情報を受信



MPI 並列化技術②:通信前後での配列間コピーの消去

コーディングイメージ

-y 軸方向通信

[**サイズー定**の**棒状データ**を送受信]

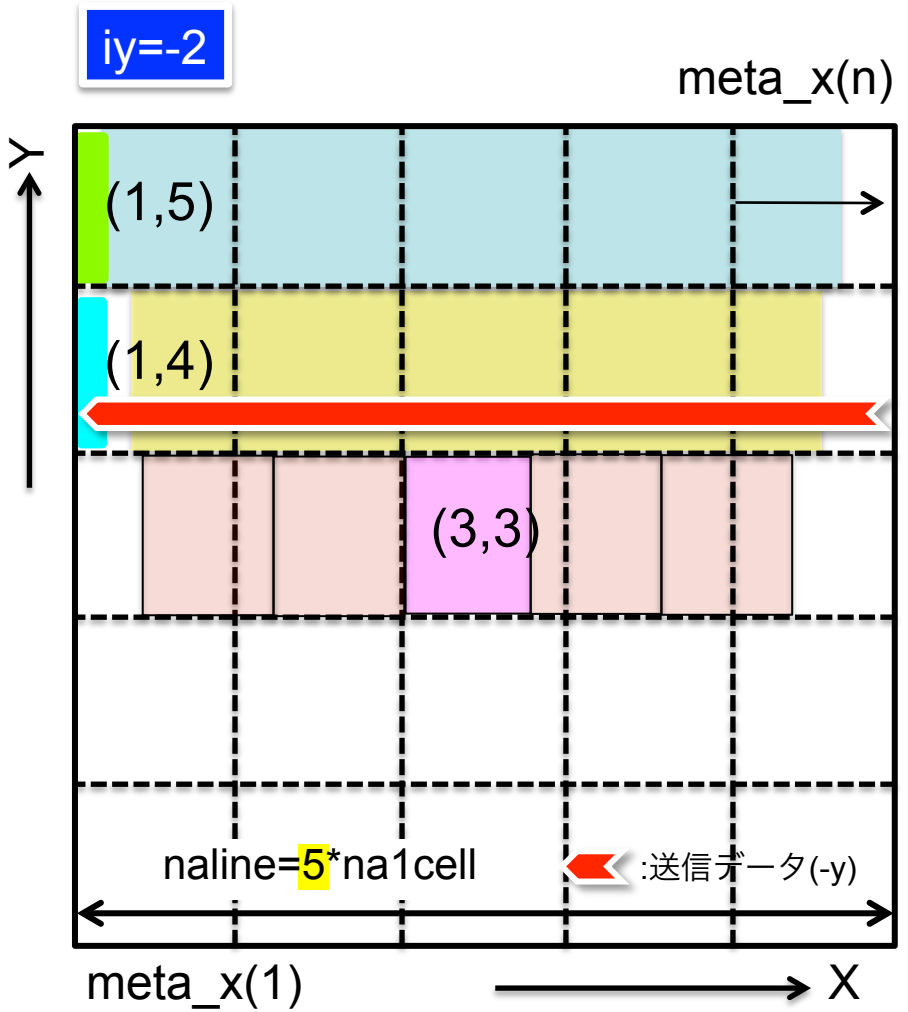
```
ipy_mdest  =送信先プロセス番号(-y)
ipy_msrc=受信元プロセス番号(-y)
do iy=-1,-2,-1
c 原子数情報の送受信
   call mpi_sendrecv(na_per_cell(1,4),5,...,ipy_mdest, ...,
                     na_per_cell(1,5),5,..., ipy_msrc, ...)
   受信データのtag(1:5,5)を作成
c 座標情報の送受信
   call mpi_sendrecv(meta_x(4),naline,..,ipy_mdest,..,
                     meta_x(5),naline,...,ipy_msrc,..)
enddo
```

棒状データを構成する サブセル数を指定

(1,4)セルの先頭 アドレスを指定

(1,5)セルの先頭 アドレスを指定

注) myrank からみると -y 方向通信により
+y 方向の座標情報を受信



MPI 並列化技術②:通信前後での配列間コピーの消去

コーディングイメージ

+y 軸方向通信　　[**サイズ一定**の**棒状データ**を送受信]

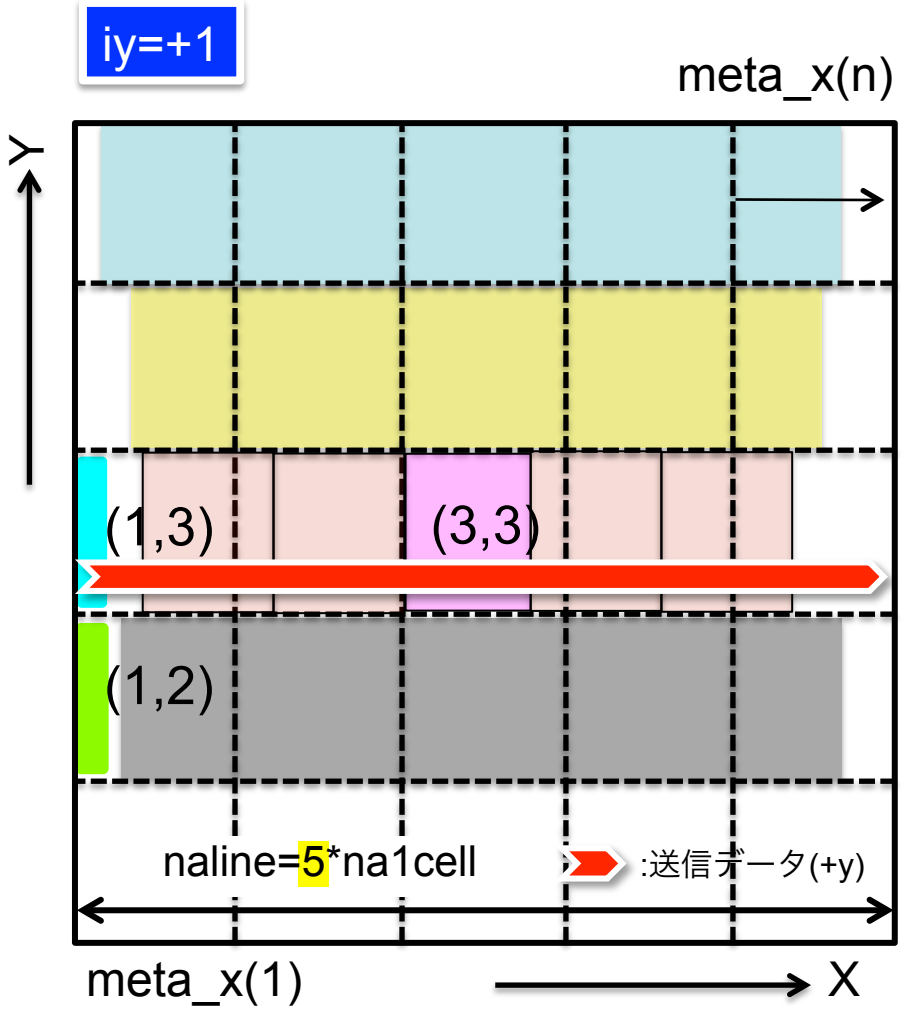
```
ipy_pdest   =送信先プロセス番号(+y)
ipy_psrc =受信元プロセス番号(+y)
do iy=+1,+2,+1
c 原子数情報の送受信
    call mpi_sendrecv(na_per_cell(1,3),5,...,ipy_pdest, ...,
                      na_per_cell(1,2),5,..., ipy_psrc, ...)
    受信データのtag(1:5,2)を作成
c 座標情報の送受信
    call mpi_sendrecv(meta_x(1,3),naline,..,ipy_pdest,..,
                      meta_x(1,2),naline,...,ipy_psrc,..)
enddo
```

棒状データを構成する
サブセル数を指定

(1,3)セルの先頭
アドレスを指定

(1,2)セルの先頭
アドレスを指定

注) myrank からみると +y 方向通信により
-y 方向の座標情報を受信



MPI 並列化技術②:通信前後での配列間コピーの消去

コーディングイメージ

+y 軸方向通信

[**サイズー定**の**棒状データ**を送受信]

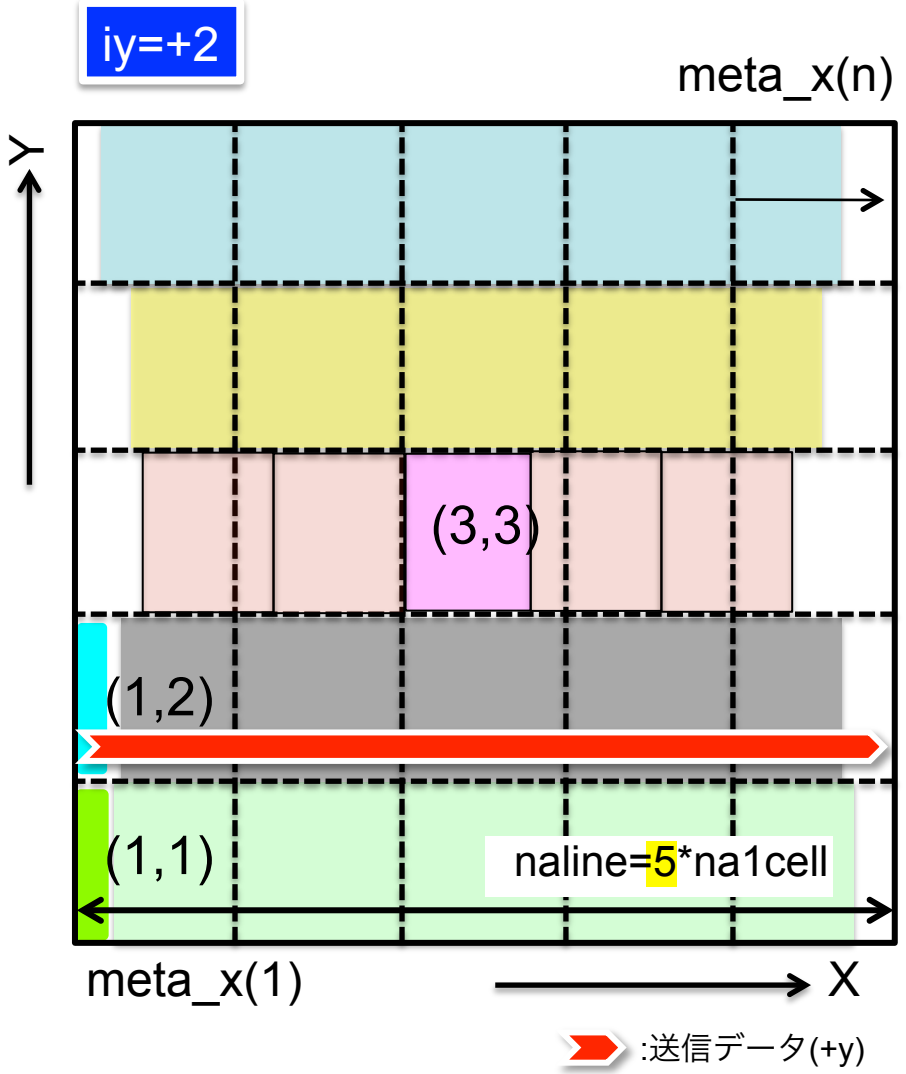
```
ipy_pdest   =送信先プロセス番号(+y)
ipy_psrc =受信元プロセス番号(+y)
do iy=+1,+2,+1
c 原子数情報の送受信
   call mpi_sendrecv(na_per_cell(1,2),5,...,ipy_pdest, ...,
                     na_per_cell(1,1),5,..., ipy_psrc, ...)
   受信データのtag(1:5,1)を作成
c 座標情報の送受信
   call mpi_sendrecv(meta_x(1,naline,..,ipy_pdest,..,
                     meta_x(1,naline,...,ipy_psrc,..)
enddo
```

棒状データを構成する サブセル数を指定

(1,2)セルの先頭 アドレスを指定

(1,1)セルの先頭 アドレスを指定

注) myrank からみると +y 方向通信により
-y 方向の座標情報を受信



MPI 並列化技術②:通信前後での配列間コピーの消去

コーディングイメージ

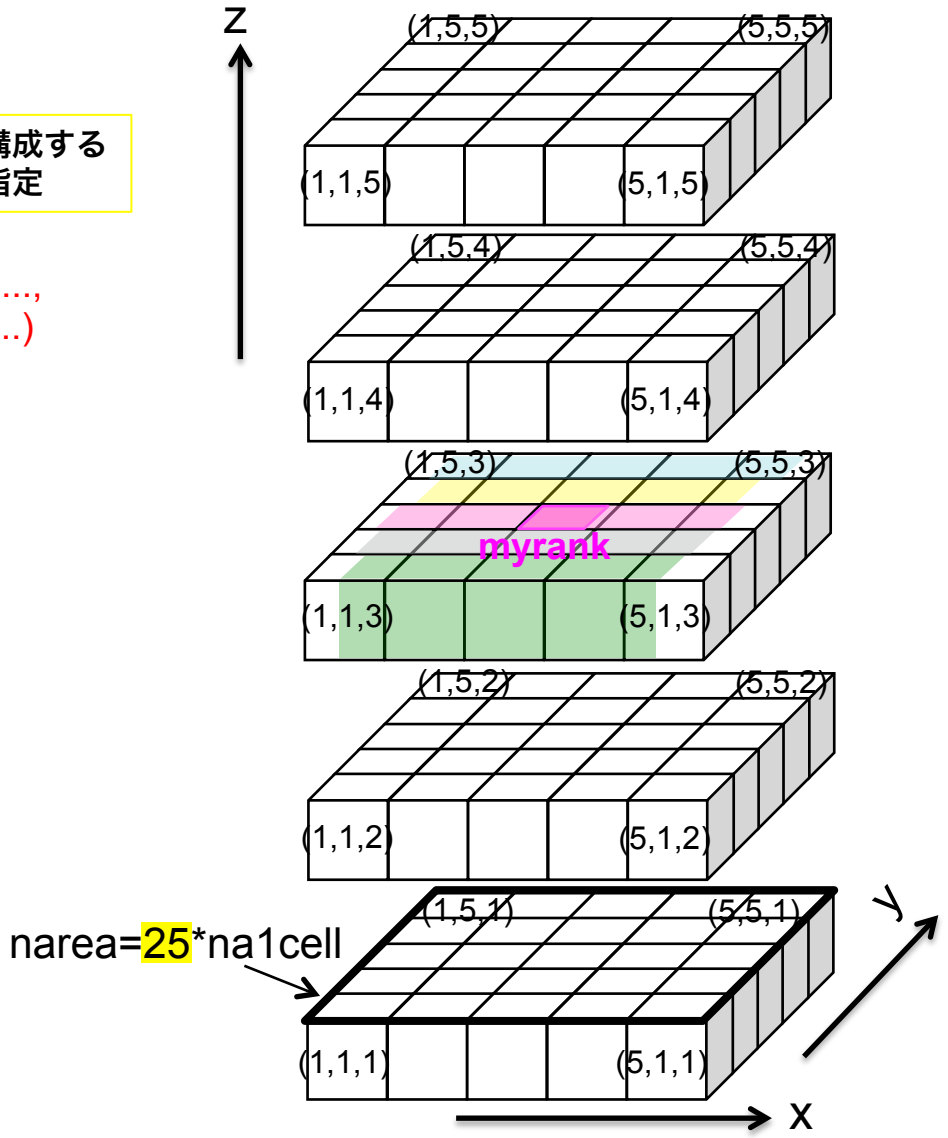
-z 軸方向通信

[**サイズ一定**の**面状データ**を送受信]

```
ipz_mdest  =送信先プロセス番号(-z)
ipz_msrc=受信元プロセス番号(-z)
do iz=-1,-2,-1
c 原子数情報の送受信

   call mpi_sendrecv(na_per_cell( ),25,...,ipz_mdest, ...,
                     na_per_cell( ),25,..., ipz_msrc, ...)
   受信データのtagを作成
c 座標情報の送受信

   call mpi_sendrecv(meta_x( ),narea,..,ipz_mdest,..,
                     meta_x( ),narea,...,ipz_msrc,..)

enddo
```

面状データを構成する
サブセル数を指定

注) myrank からみると -z 方向通信により
+z 方向の座標情報を受信



MPI 並列化技術②:通信前後での配列間コピーの消去

コーディングイメージ

-z 軸方向通信

[**サイズ一定**の**面状データ**を送受信]

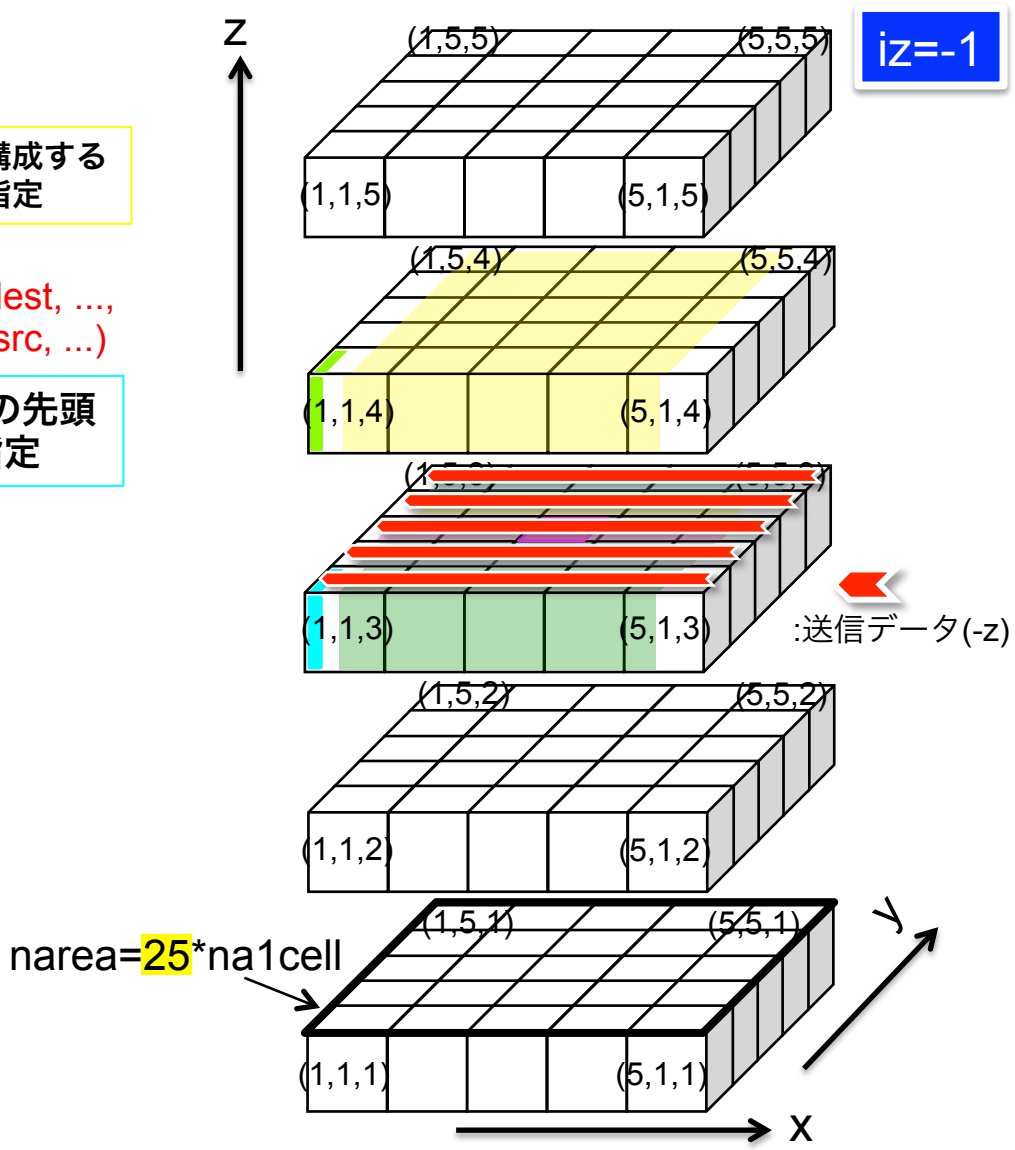
```
ipz_mdest  =送信先プロセス番号(-z)
ipz_msrc=受信元プロセス番号(-z)
do iz=-1,-2,-1
c 原子数情報の送受信
   call mpi_sendrecv(na_per_cell(1,1,3),25,...,ipz_mdest, ...,
                     na_per_cell(1,1,4),25,..., ipz_msrc, ...)
   受信データのtag(1:5,1:5,4)を作成
c 座標情報の送受信
   call mpi_sendrecv(meta_x(1,1,3),narea,..,ipz_mdest,..,
                     meta_x(1,1,4),narea,...,ipz_msrc,..)
enddo
```

面状データを構成するサブセル数を指定

(1,1,3)セルの先頭アドレスを指定

(1,1,4)セルの先頭アドレスを指定

注) myrank からみると -z 方向通信により
+z 方向の座標情報を受信



MPI 並列化技術②:通信前後での配列間コピーの消去

コーディングイメージ

-z 軸方向通信

[サイズ一定の面状データを送受信]

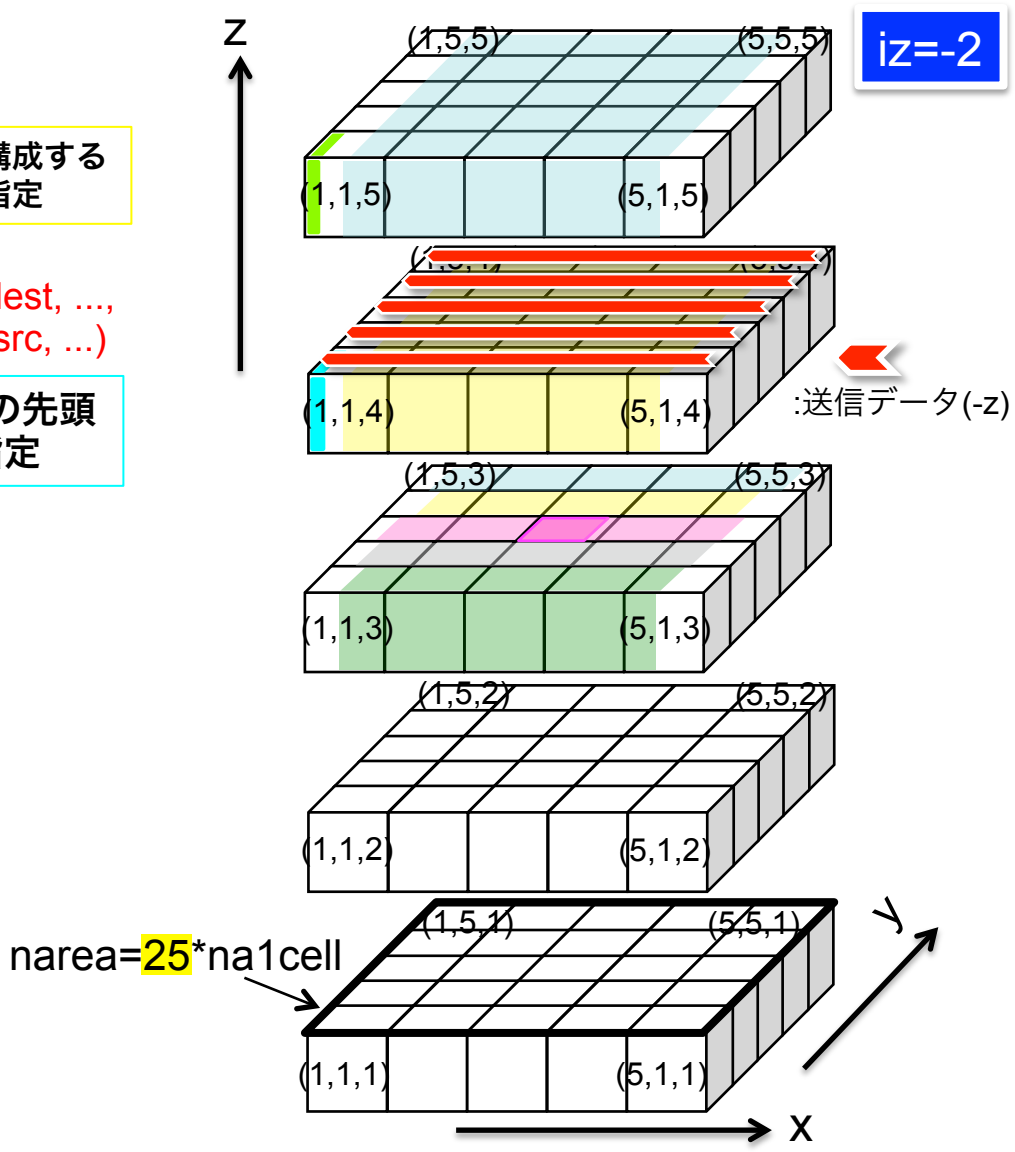
```
ipz_mdest  =送信先プロセス番号(-z)
ipz_msrc=受信元プロセス番号(-z)
do iz=-1,-2,-1
c 原子数情報の送受信
   call mpi_sendrecv(na_per_cell(1,1,4),25,...,ipz_mdest, ...,
                     na_per_cell(1,1,5),25,..., ipz_msrc, ...)
   受信データのtag(1:5,1:5,5)を作成
c 座標情報の送受信
   call mpi_sendrecv(meta_x(1,4),narea,..,ipz_mdest,..,
                     meta_x(1,5),narea,...,ipz_msrc,..)
enddo
```

面状データを構成するサブセル数を指定

(1,1,4)セルの先頭アドレスを指定

(1,1,5)セルの先頭アドレスを指定

注) myrank からみると -z 方向通信により +z 方向の座標情報を受信



MPI 並列化技術②:通信前後での配列間コピーの消去

コーディングイメージ

-z 軸方向通信

[**サイズ一定**の**面状データ**を送受信]

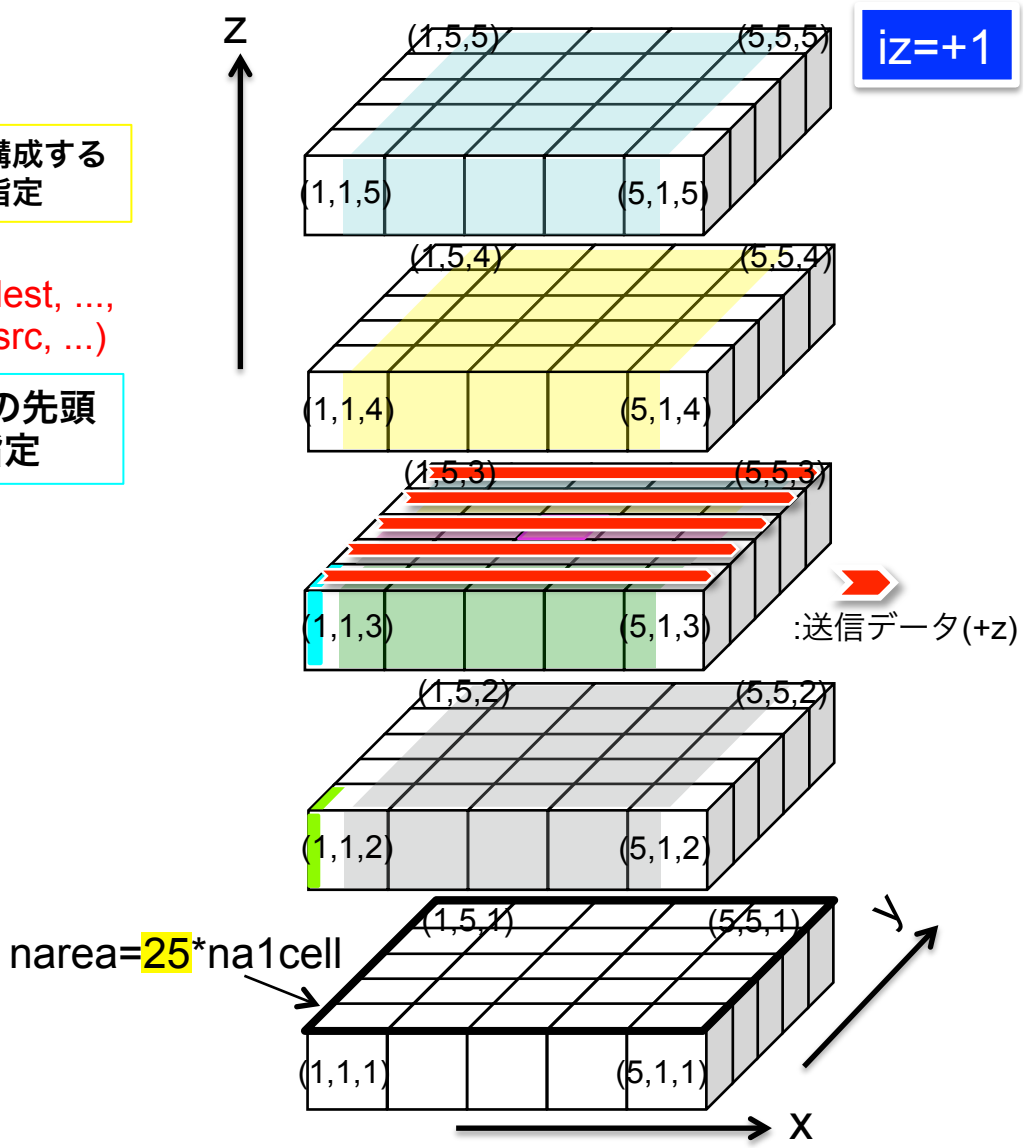
```
ipz_mdest  =送信先プロセス番号(-z)
ipz_msrc=受信元プロセス番号(-z)
do iz=-1,-2,-1
c 原子数情報の送受信
   call mpi_sendrecv(na_per_cell(1,1,3),25,...,ipz_mdest, ...,
                     na_per_cell(1,1,2),25,..., ipz_msrc, ...)
   受信データのtag(1:5,1:5,2)を作成
c 座標情報の送受信
   call mpi_sendrecv(meta_x(1,1,3),narea,..,ipz_mdest,..,
                     meta_x(1,1,2),narea,...,ipz_msrc,..)
enddo
```

面状データを構成するサブセル数を指定

(1,1,3)セルの先頭アドレスを指定

(1,1,2)セルの先頭アドレスを指定

注) myrank からみると +z 方向通信により
-z 方向の座標情報を受信



MPI 並列化技術②:通信前後での配列間コピーの消去

コーディングイメージ

-z 軸方向通信

[**サイズ一定の面状データ**を送受信]

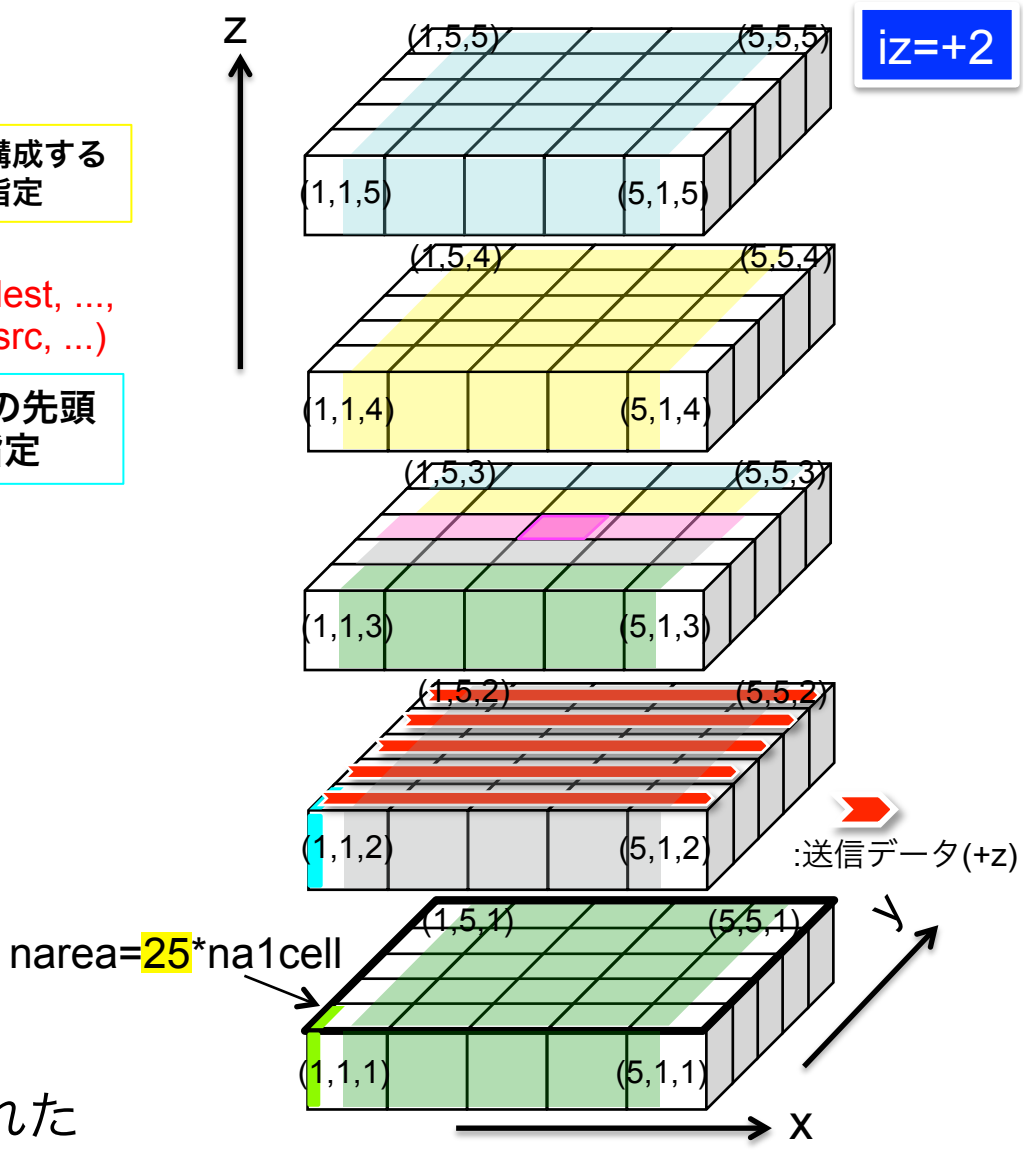
```
ipz_mdest  =送信先プロセス番号(-z)
ipz_msrc=受信元プロセス番号(-z)
do iz=-1,-2,-1
c 原子数情報の送受信
   call mpi_sendrecv(na_per_cell(1,1,2),25,...,ipz_mdest, ...,
                     na_per_cell(1,1,1),25,..., ipz_msrc, ...)
   受信データのtag(1:5,1:5,2)を作成
c 座標情報の送受信
   call mpi_sendrecv(meta_x(1,1,2),narea,..,ipz_mdest,..,
                     meta_x(1,1,1),narea,...,ipz_msrc,..)
enddo
```

面状データを構成するサブセル数を指定

(1,1,2)セルの先頭アドレスを指定

(1,1,1)セルの先頭アドレスを指定

注) myrank からみると +z 方向通信により
-z 方向の座標情報を受信



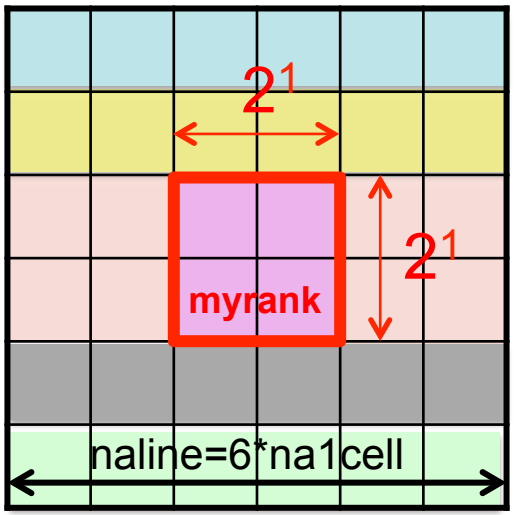
→ すべての袖部のデータが受信された

MPI 並列化技術②:通信前後での配列間コピーの消去

汎用性のため実際のコードでは以下の点にも対応.

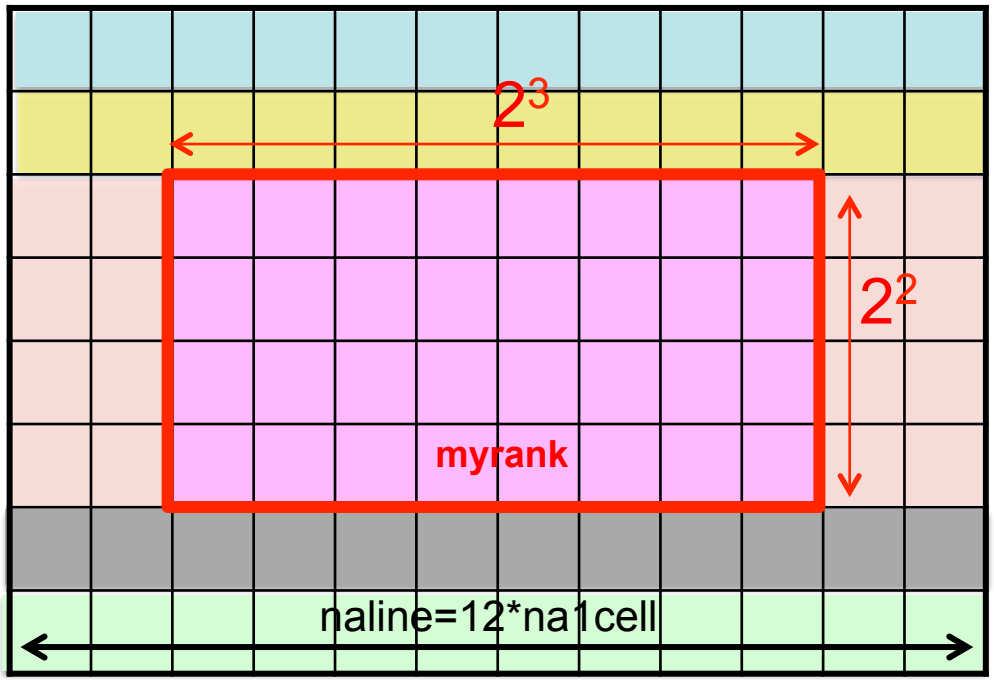
・任意のmyrank所持サブセルブロック厚さ2^n (n≥0)
・直方体形状のmyrank所持サブセルブロック

narea=36*na1cell



allocate(tag(1:6,1:6))
allocate(na_per_cell(1:6,1:6))

narea=96*na1cell



allocate(tag(1:12,1:8))
allocate(na_per_cell(1:12,1:8))

注) 開発経緯の都合上, 実際のコードでは z → y → x の順に通信しています.
comm_3.f, comm_fmm.f

MPI 並列化技術③: 通信の演算による代用

代用の目的 (1): プログラム全体の計算時間の短縮

冗長な多重演算時間 < 単一演算結果の通信時間

代用

現在のスパコン構成では, しばしば生じる関係.

代用の目的 (2): デバッグのしやすいコードの作成

- **多重演算だが, 分かりやすいコード**
- **単一演算だが, 複雑なコード**

代用

上のコードが完成した上で, 下のコードを派生させる.
最初から下のコードを作ることは難易度が高い.

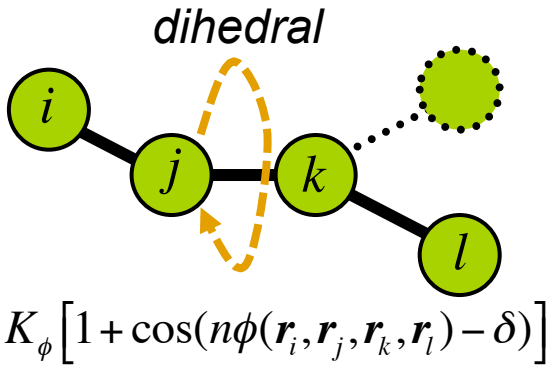
MPI 並列化技術③: 通信の演算による代用

冗長な多重演算の例

- 分子内相互作用計算 [目的(2)]
- 分子間近距離相互作用計算 [目的(1),(2)]
- FMM 上位階層の M2M/L2L [目的(1)]

MPI 並列化技術③: 通信の演算による代用

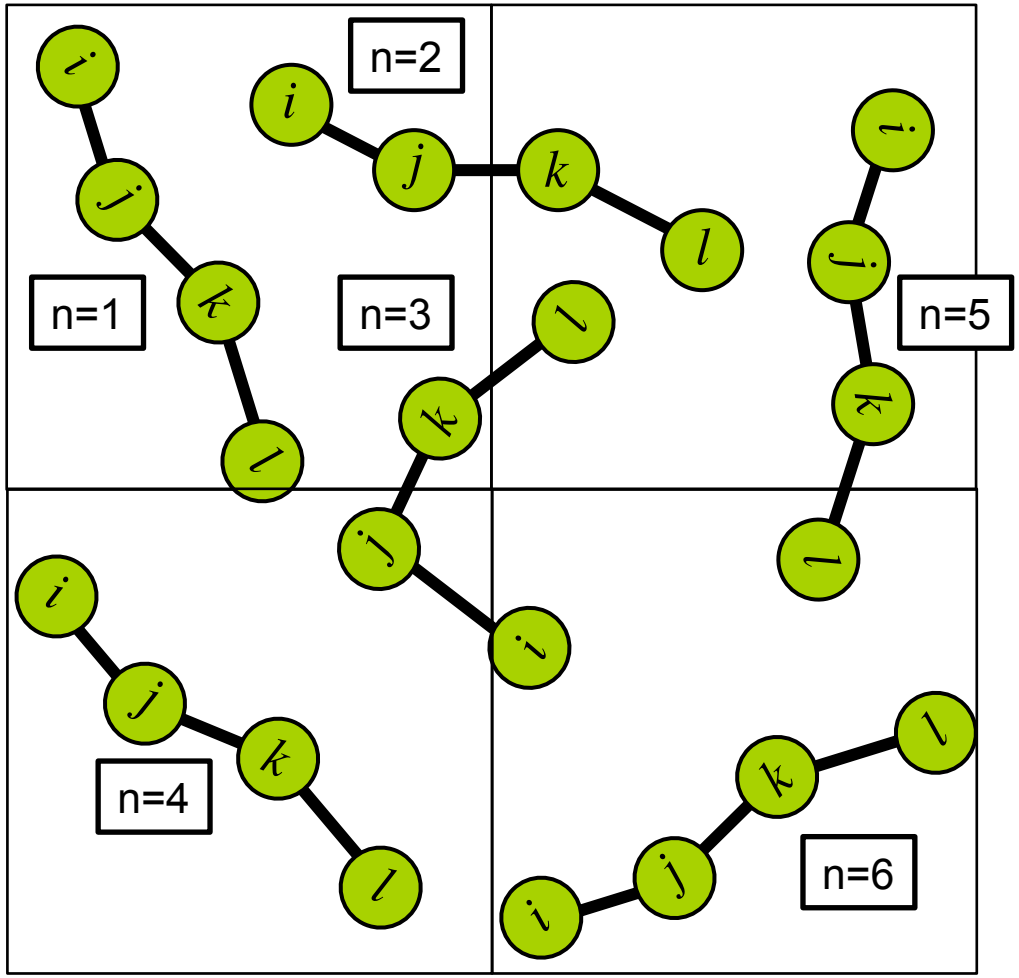
冗長な多重演算: 分子内相互作用計算



$$K_\phi\left[1+\cos(n\phi(\boldsymbol{r}_i,\boldsymbol{r}_j,\boldsymbol{r}_k,\boldsymbol{r}_l)-\delta)\right]$$

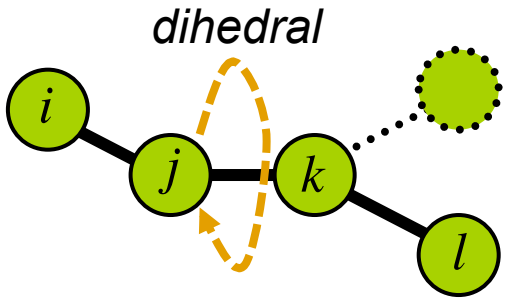
オリジナルコード

```
do n=1,ndihedrals
  phi=phi(ri, rj, rk, rl)
  ポテンシャルの計算
  Fi, Fj, Fk, Fl の計算
  f(i)=f(i)+Fi
  f(j)=f(j)+Fj
  f(k)=f(k)+Fk
  f(l)=f(l)+Fl
enddo
```



MPI 並列化技術③: 通信の演算による代用

冗長な多重演算: 分子内相互作用計算

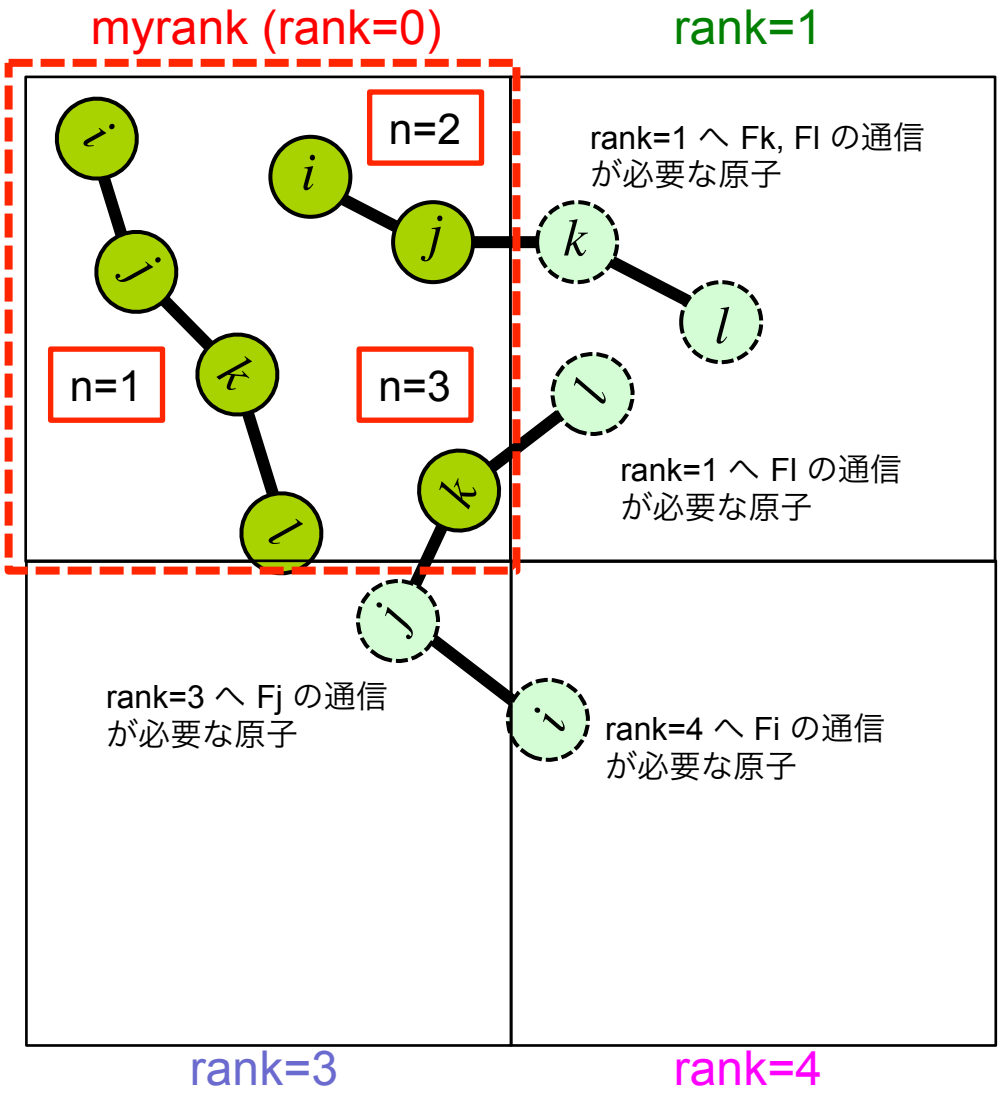


$$K_\phi\left[1+\cos(n\phi(\boldsymbol{r}_i,\boldsymbol{r}_j,\boldsymbol{r}_k,\boldsymbol{r}_l)-\delta)\right]$$

MPI並列化コード

```
do n=1,ndihedrals(myrank)
  phi=phi(ri, rj, rk, rl)
  ポテンシャルの計算
  Fi, Fj, Fk, Fl の計算
  IF(ri in myrank)   f(i)=f(i)+Fi,  ELSE Fiを通信
  IF(rj in myrank)   f(j)=f(j)+Fj,  ELSE Fjを通信
  IF(rk in myrank) f(k)=f(k)+Fk, ELSE Fkを通信
  IF(rl  in myrank)  f(l)=f(l)+Fl,  ELSE Flを通信
enddo
```

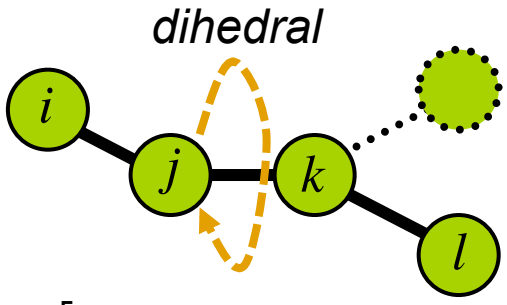
＊ELSEの場合, 実際には合力をまとめて該当プロセスへ通信



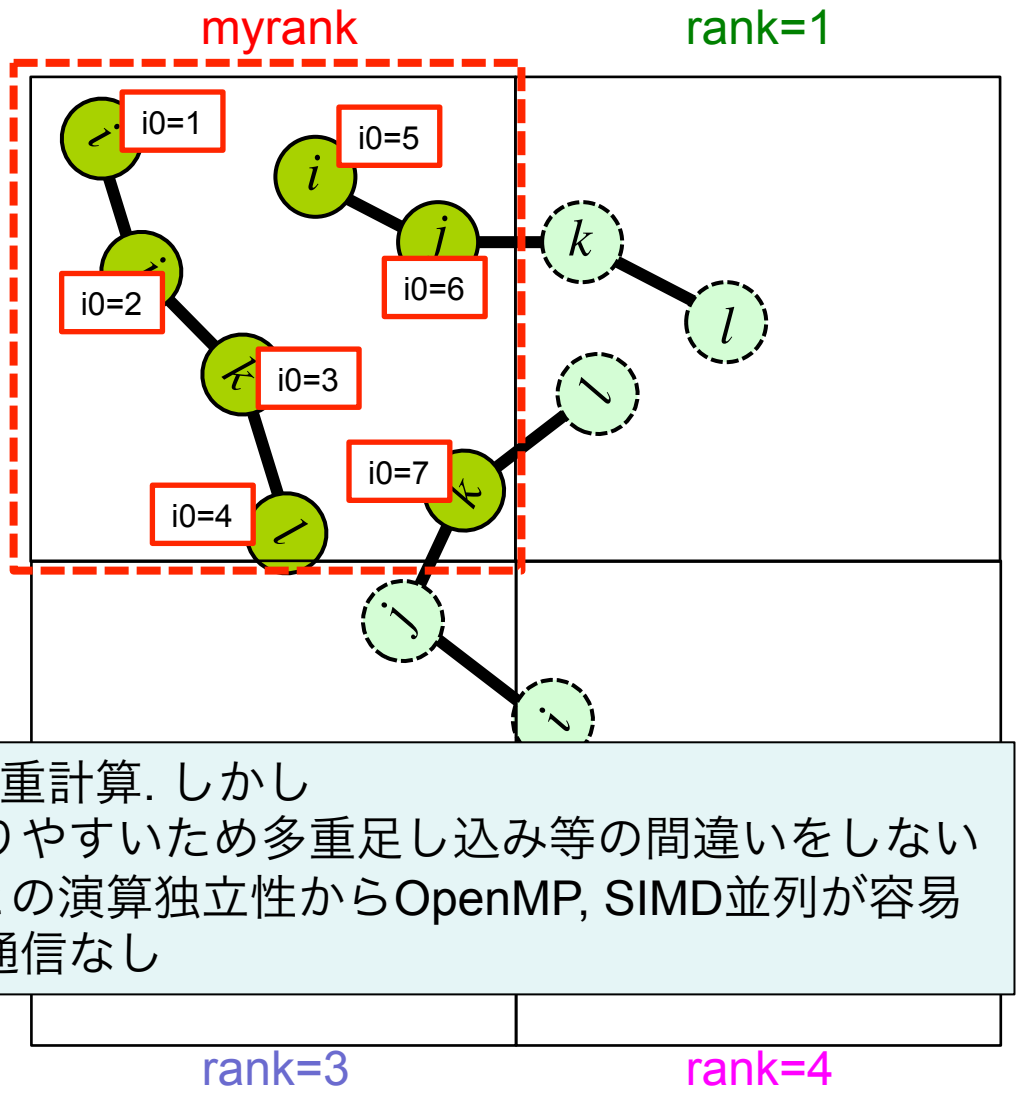
MPI 並列化技術③: 通信の演算による代用

冗長な多重演算: 分子内相互作用計算

i0 : myrank内の原子通し番号



$$K_\phi\left[1+\cos(n\phi(\boldsymbol{r}_i,\boldsymbol{r}_j,\boldsymbol{r}_k,\boldsymbol{r}_l)-\delta)\right]$$



演算冗長MPI並列化コード

```
do i0=1,natom(myrank)
  dihedral番号を i0 より逆引き
  phi=phi(ri, rj, rk, rl)
  ポテンシャルの計算
  Fi の計算
  f(i)=f(i)+Fi
enddo
```

4重の多重計算. しかし
- 分かりやすいため多重足し込み等の間違いをしない
- i0ごとの演算独立性からOpenMP, SIMD並列が容易
- 力の通信なし

md_charmm_f90.f

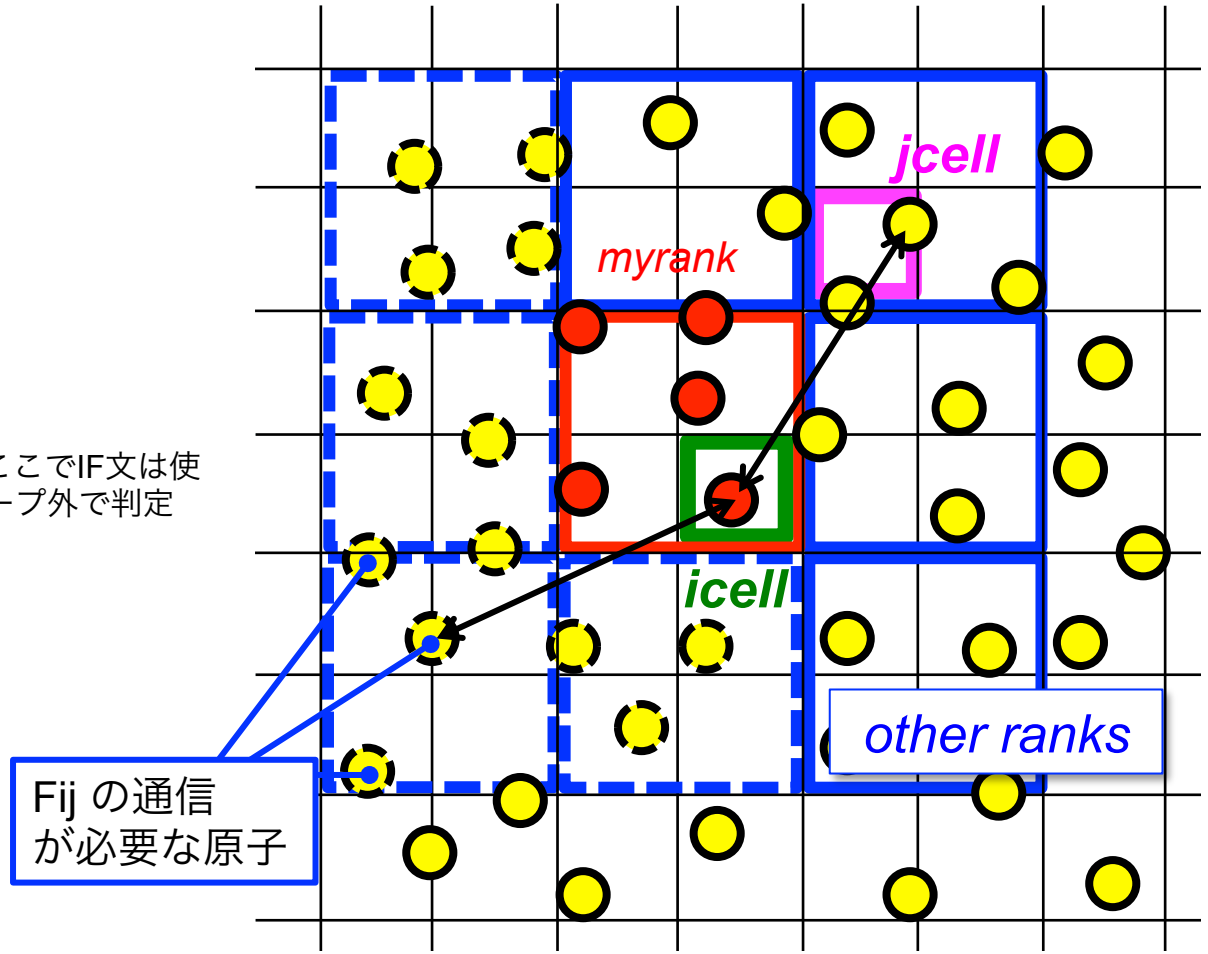
MPI 並列化技術③: 通信の演算による代用

冗長な多重演算: 分子間近距離相互作用計算

二体力　$\boldsymbol{F}_{ij} = -\boldsymbol{F}_{ji}$　　例) Lennard-Jones, Coulombの粒子対計算

```
do icell(myrank)
do jcell_list(myrank or otherranks)
do i=na_per_cell(icell)
do j=na_per_cell(jcell)
  rij=rij(ri, rj)
  カットオフ判定
  ポテンシャルの計算
  Fij の計算
  f(i)=f(i)+Fij
  IF(rj in myrank) f(j)=f(j)-Fij
  ELSE storeF(j)=storeF(j)-Fij
enddo ! j
enddo ! i
enddo ! jcell
enddo ! icell
storeF(j)を対象プロセスへ通信
```

＊実際にはここでIF文は使わず, DOループ外で判定

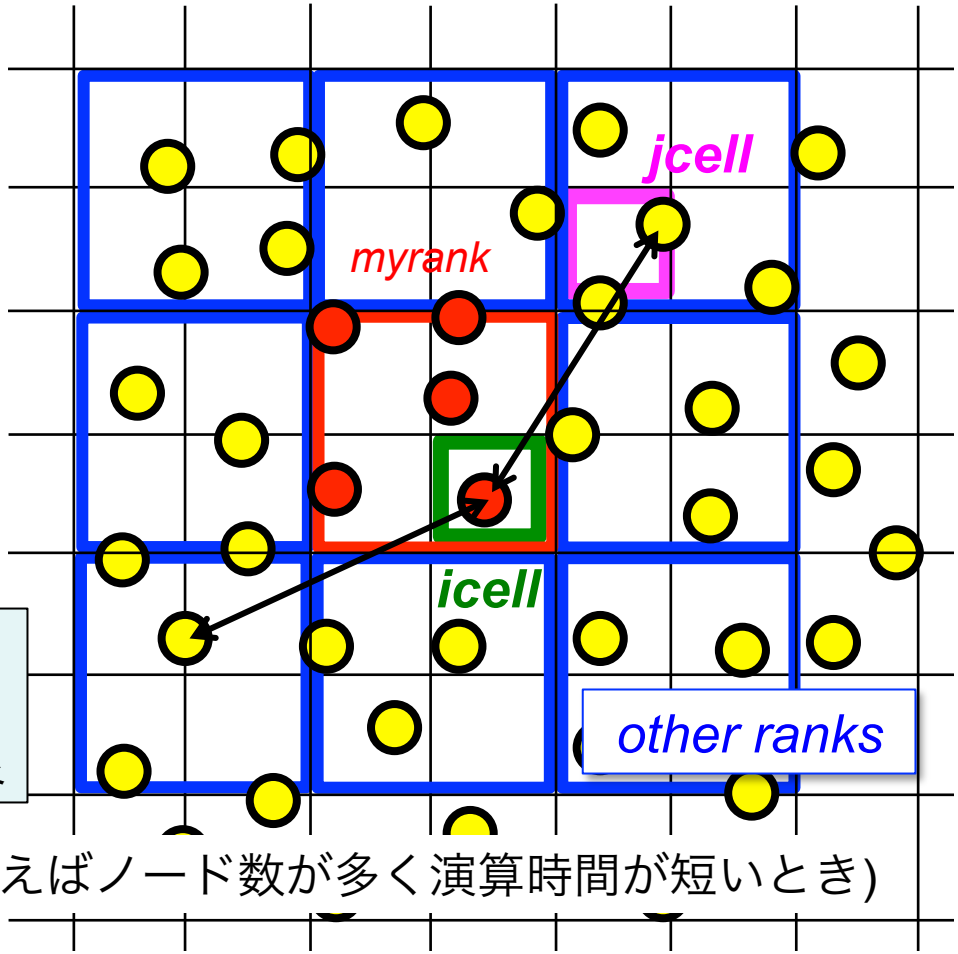


MPI 並列化技術③: 通信の演算による代用

冗長な多重演算: 分子間近距離相互作用計算

二体力　$\boldsymbol{F}_{ij} = -\boldsymbol{F}_{ji}$　　例) Lennard-Jones, Coulombの粒子対計算

```
do icell(myrank)
do jcell_list(myrank or otherranks)
do i=na_per_cell(icell)
do j=na_per_cell(jcell)
  rij=rij(ri, rj)
  カットオフ判定
  ポテンシャルの計算
  Fij の計算
  f(i)=f(i)+Fij        ! i 原子のみ足し込み
enddo ; enddo ; enddo ; enddo
```

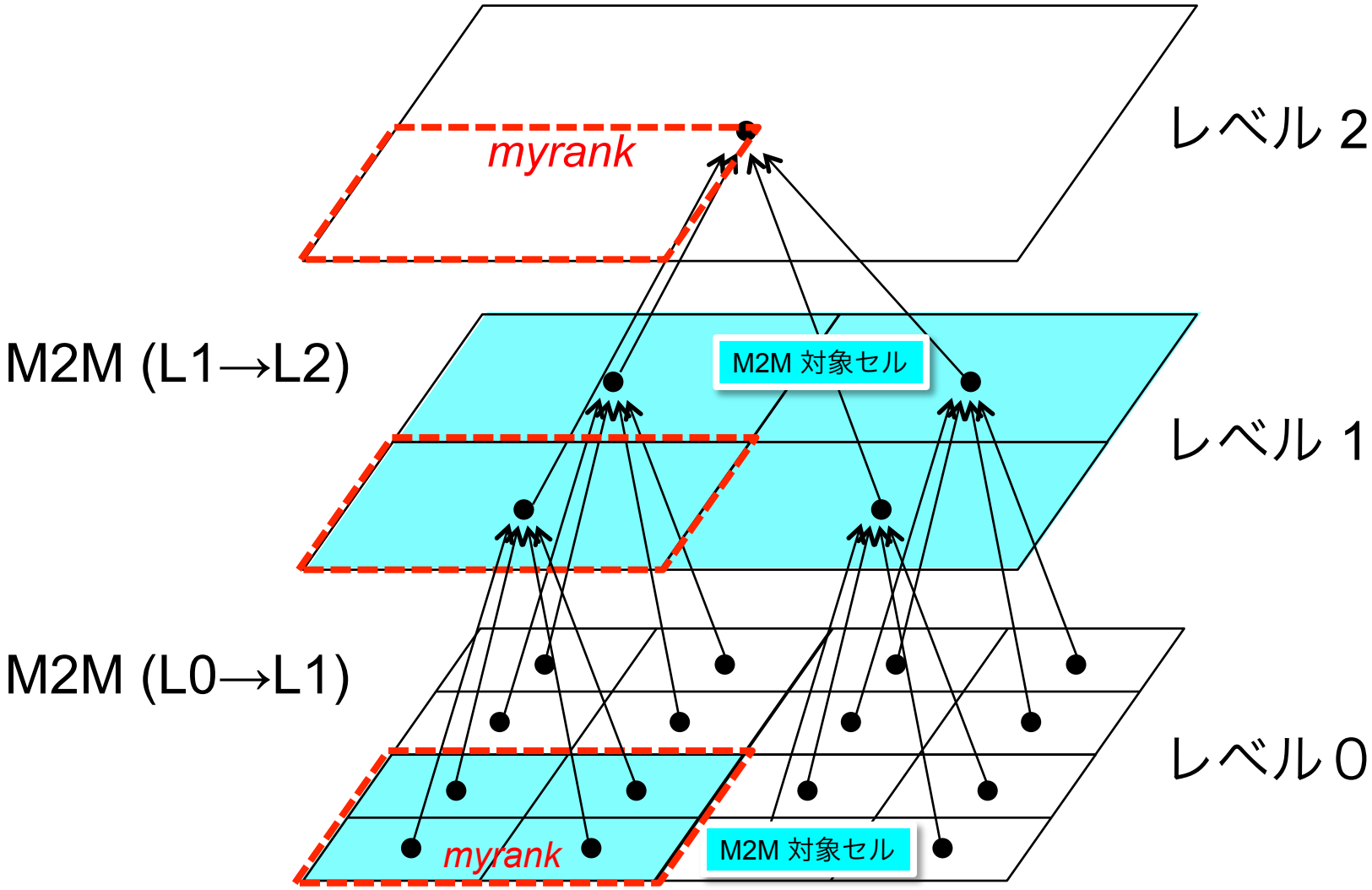


2重の多重計算. しかし
・力の通信なし
・OpenMP, SIMD並列が容易 = 演算効率良

実演算時間 < 実通信時間の範囲で有効 (例えばノード数が多く演算時間が短いとき)

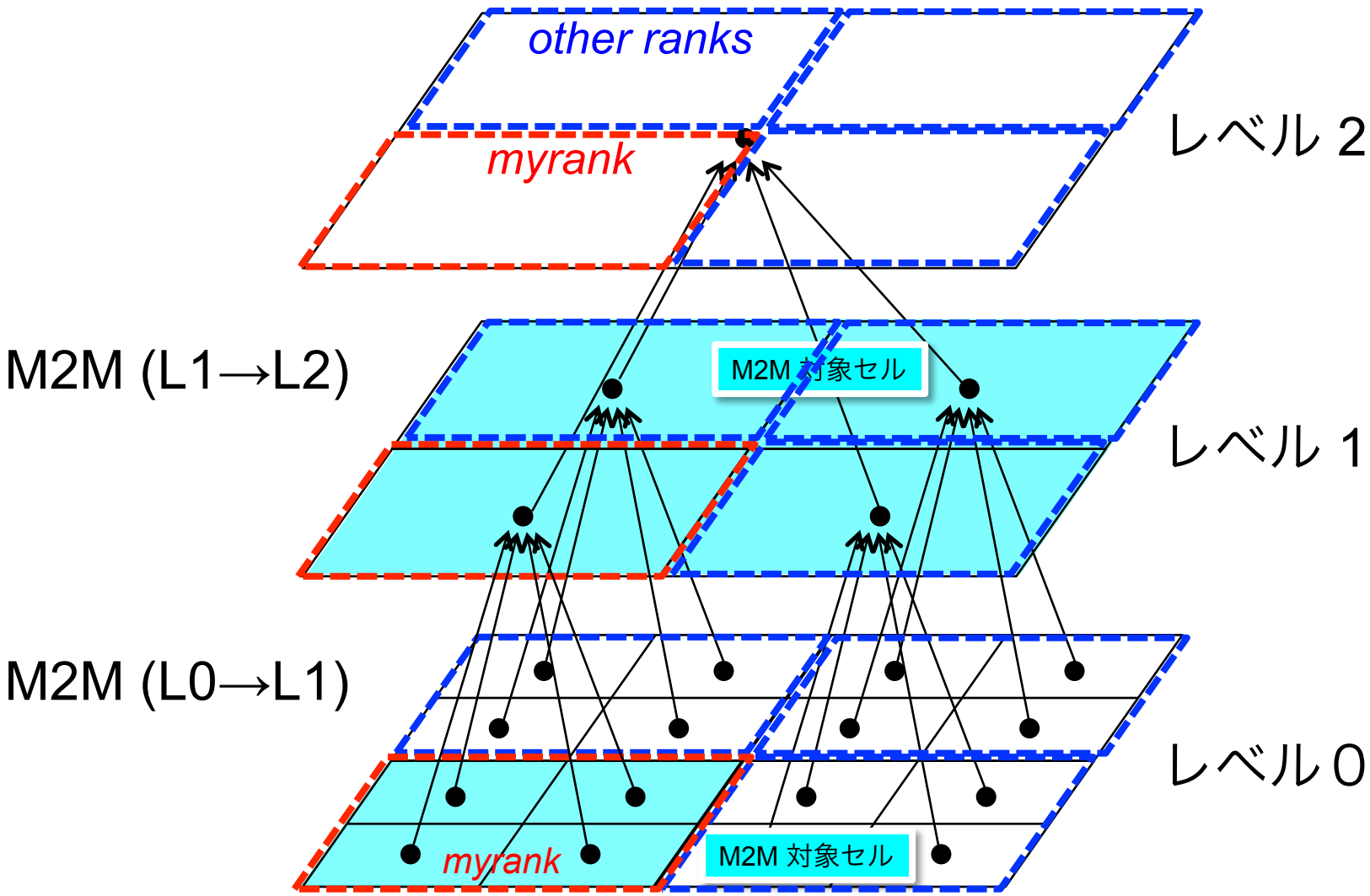
MPI 並列化技術③: 通信の演算による代用

冗長な多重演算: FMM 上位階層の M2M



MPI 並列化技術③: 通信の演算による代用

冗長な多重演算: FMM 上位階層の M2M

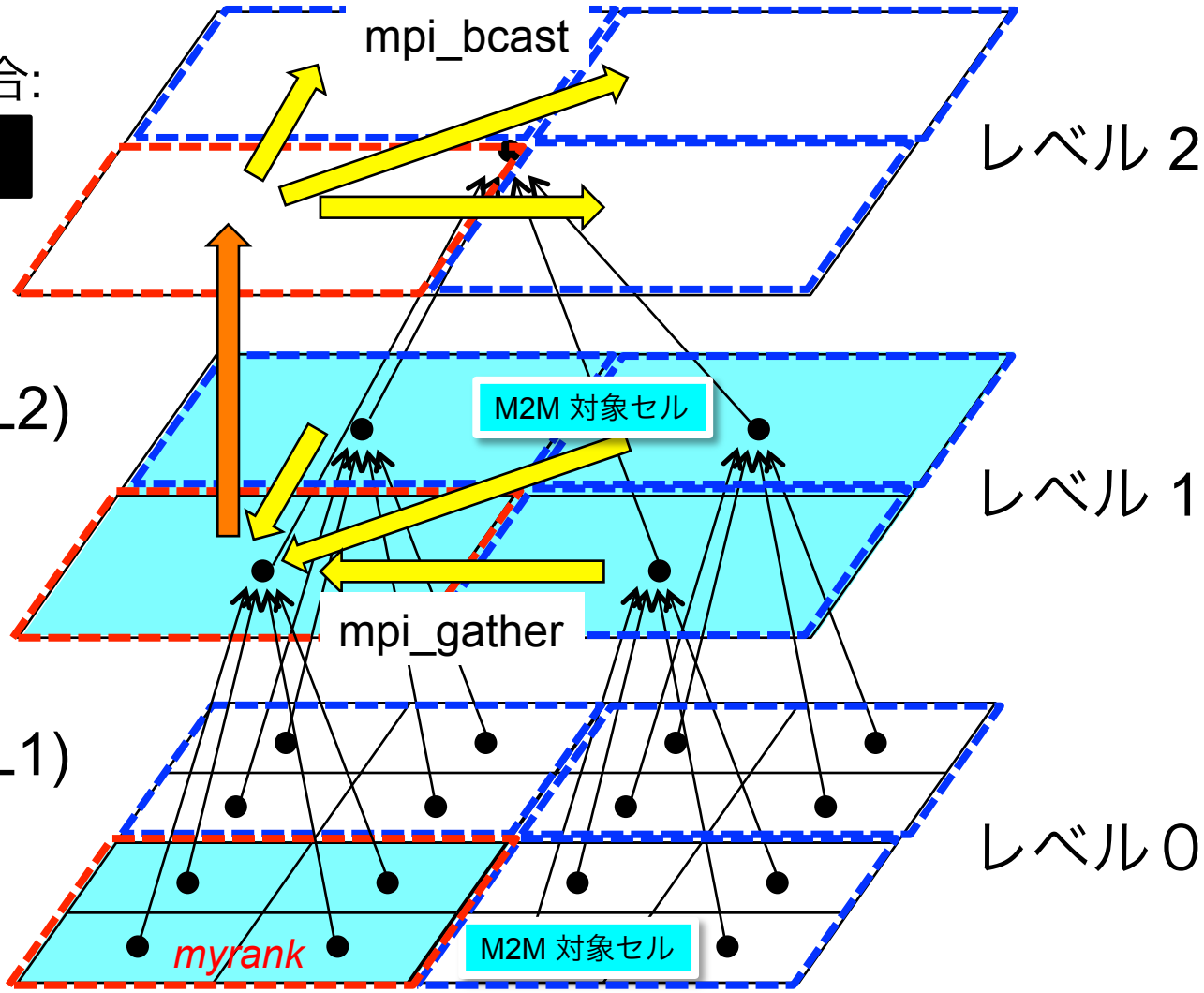


MPI 並列化技術③: 通信の演算による代用

冗長な多重演算: FMM 上位階層の M2M

単一演算の場合:

通信6+演算1



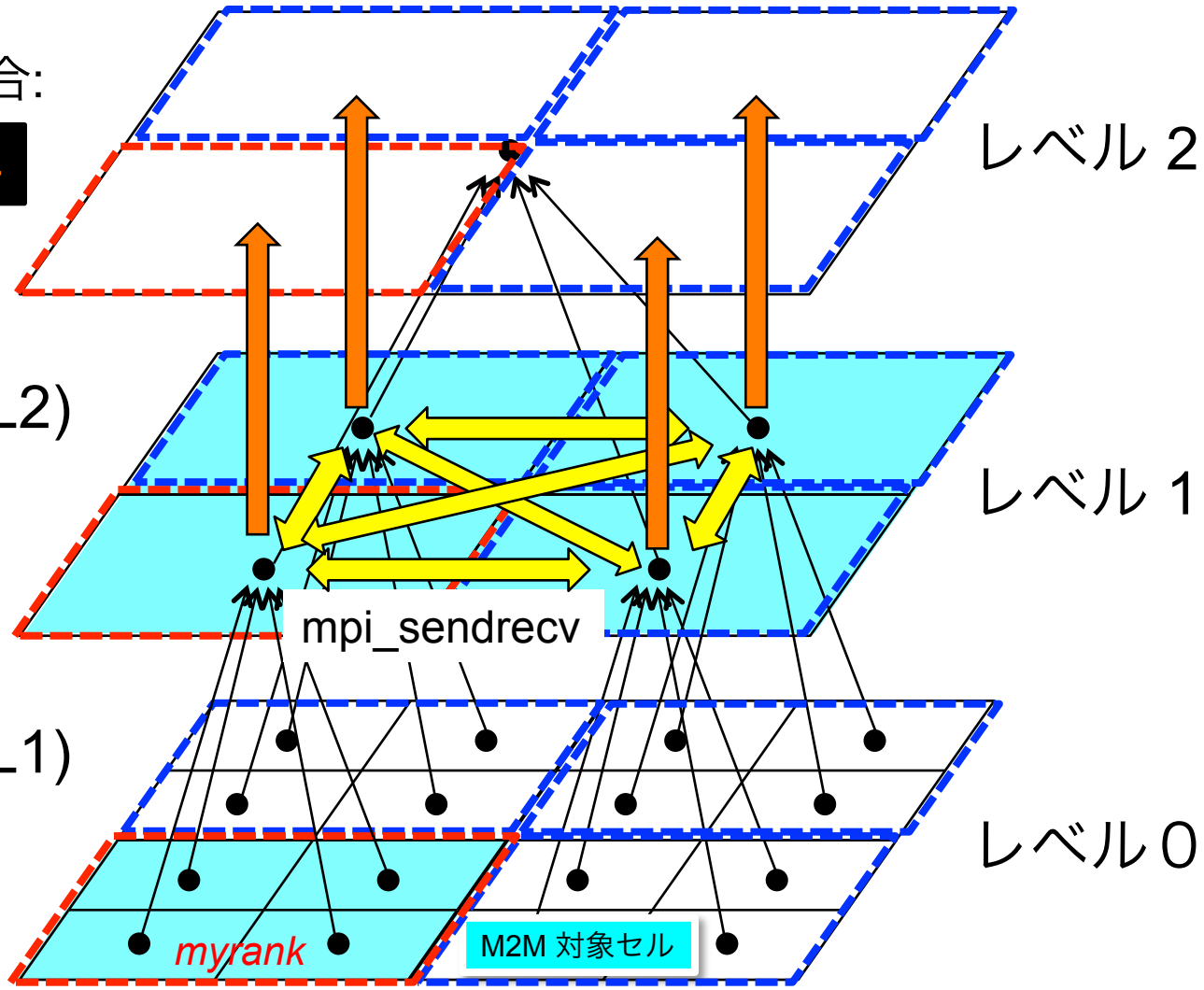
MPI 並列化技術③: 通信の演算による代用

プログラム全体の
実行時間短縮

冗長な多重演算: FMM 上位階層の M2M

冗長演算の場合:

通信3+演算4



並列化技術 3

演算効率化の前提

・データの連続化

・ブロック化によるキャッシュの有効利用

OpenMP 並列化技術

・スレッド間のロードバランス調整

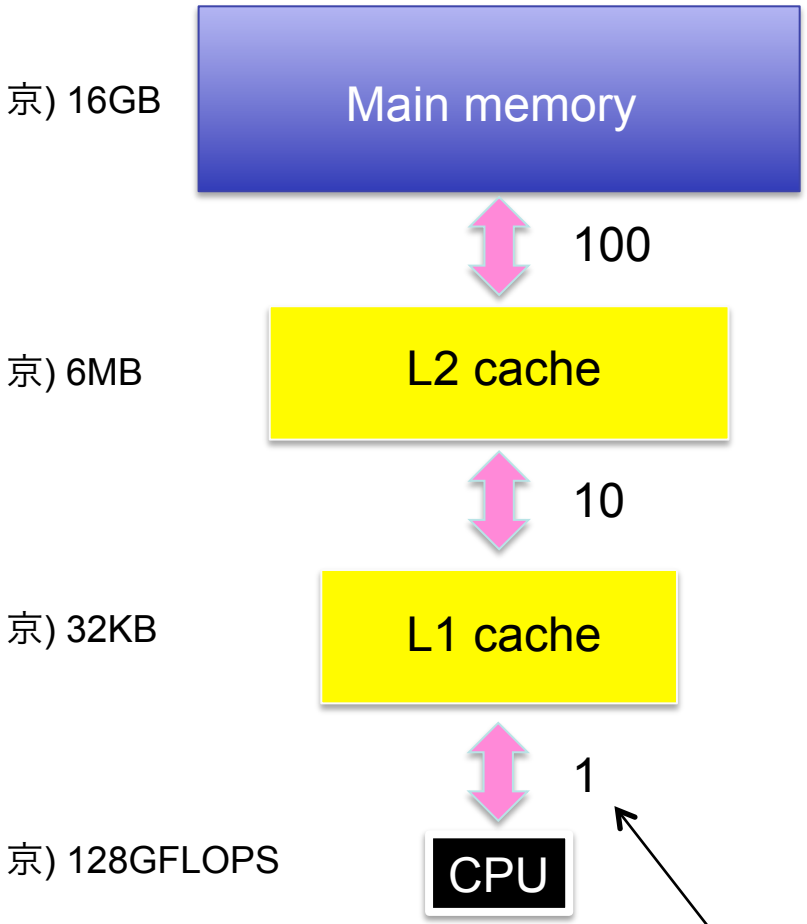
・スレッド並列前後処理の削減

SIMD 並列化技術

・IF文の削除

・ベクトル長の確保

演算効率化のために



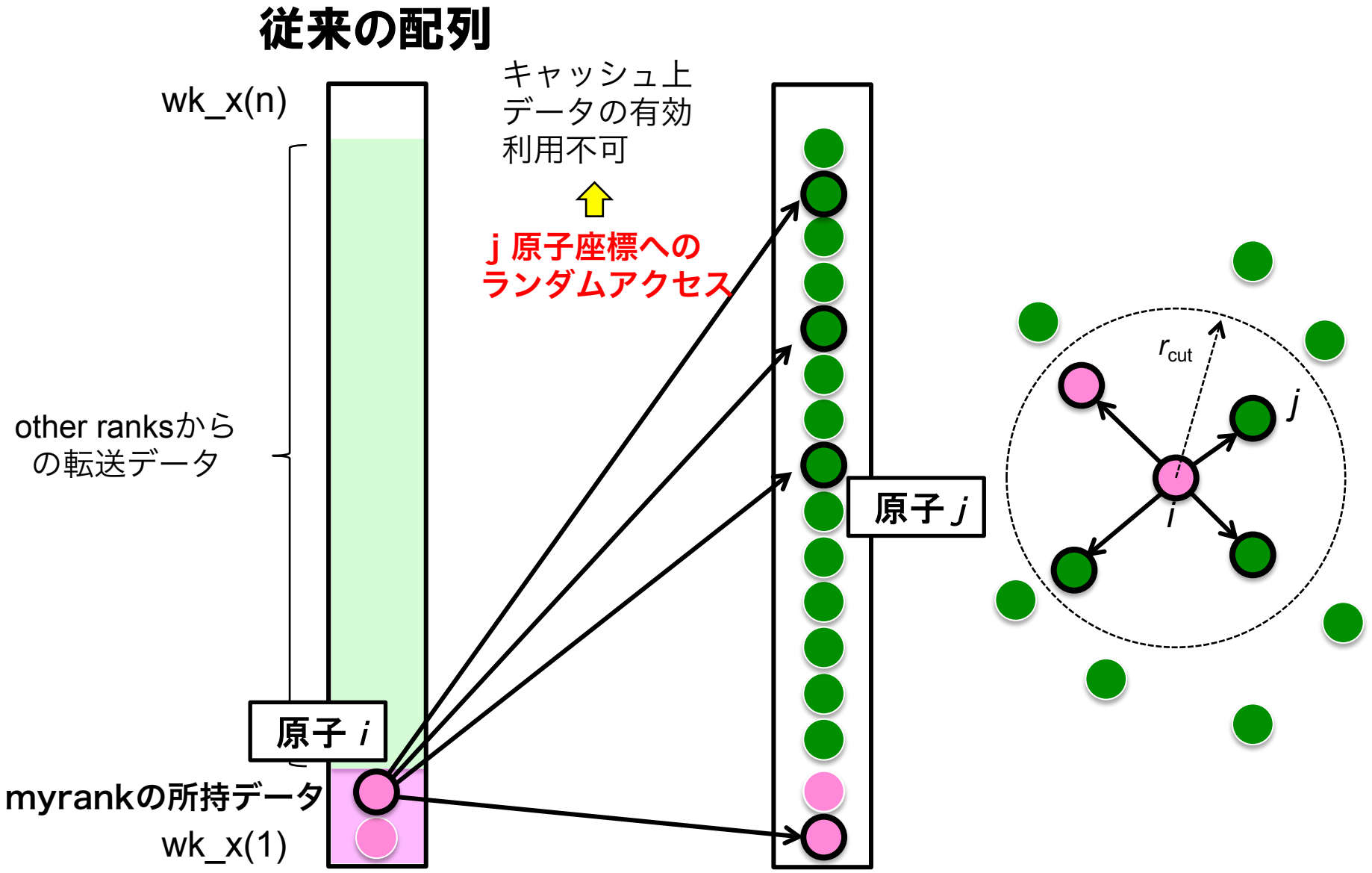
CPUを効率よく動作させるためには
L1 キャッシュの有効利用が必要.

MD計算では, 例えば
・L1上相手 j 原子座標の再利用促進
・L1上 wm, M2L 変換行列の再利用促進

前提

(1) メモリ上の演算対象データの**連続化**
(2) 演算の**ブロック化**

データの連続化　[1] 座標

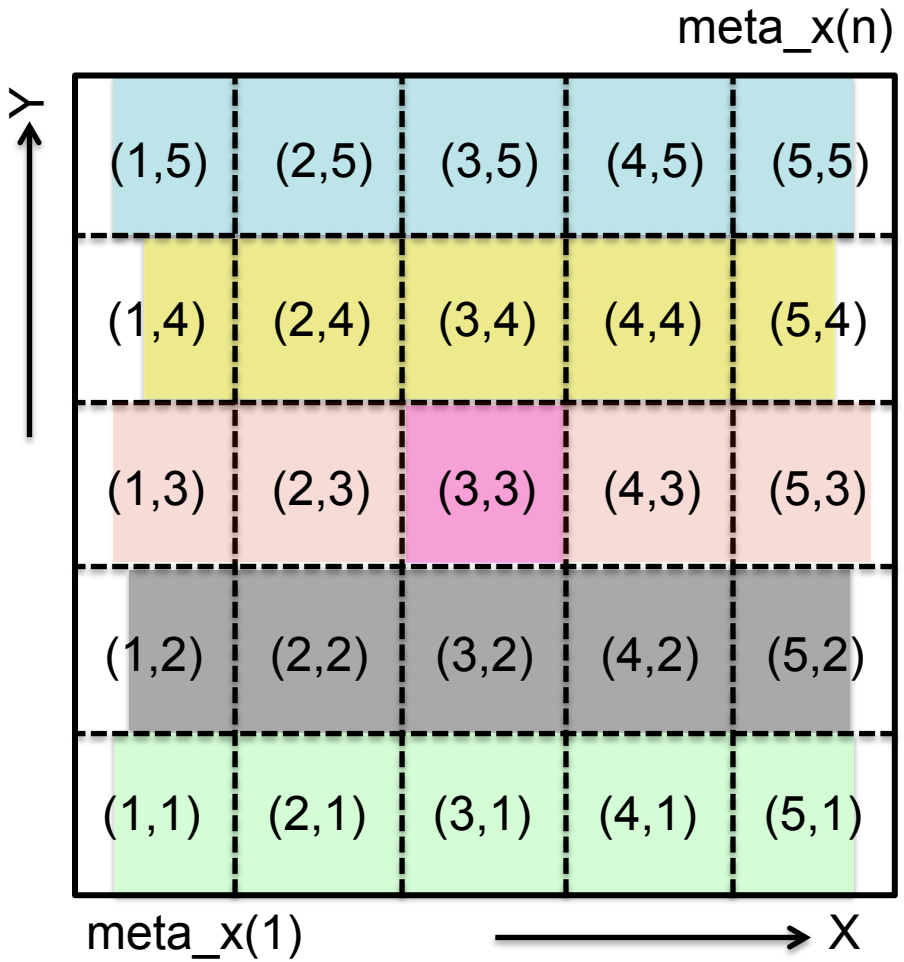

従来の配列
wk_x(n)
キャッシュ上
データの有効
利用不可
j 原子座標への
ランダムアクセス
other ranksから
の転送データ
原子 i
myrankの所持データ
wk_x(1)
原子 j
r_{cut}
j
i

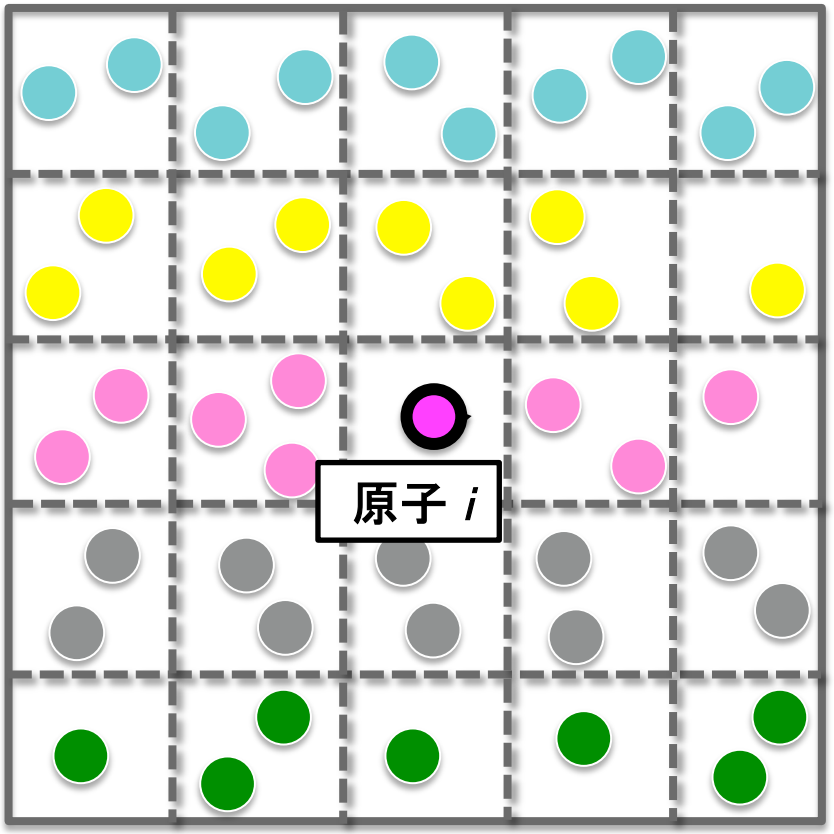
データの連続化　[1] 座標

前回説明

メタデータ配列

meta_x: X-Y 平面上での原子の相対位置関係 (= **メタデータ**) を保持





1) 自プロセスを中心にデータを局所化

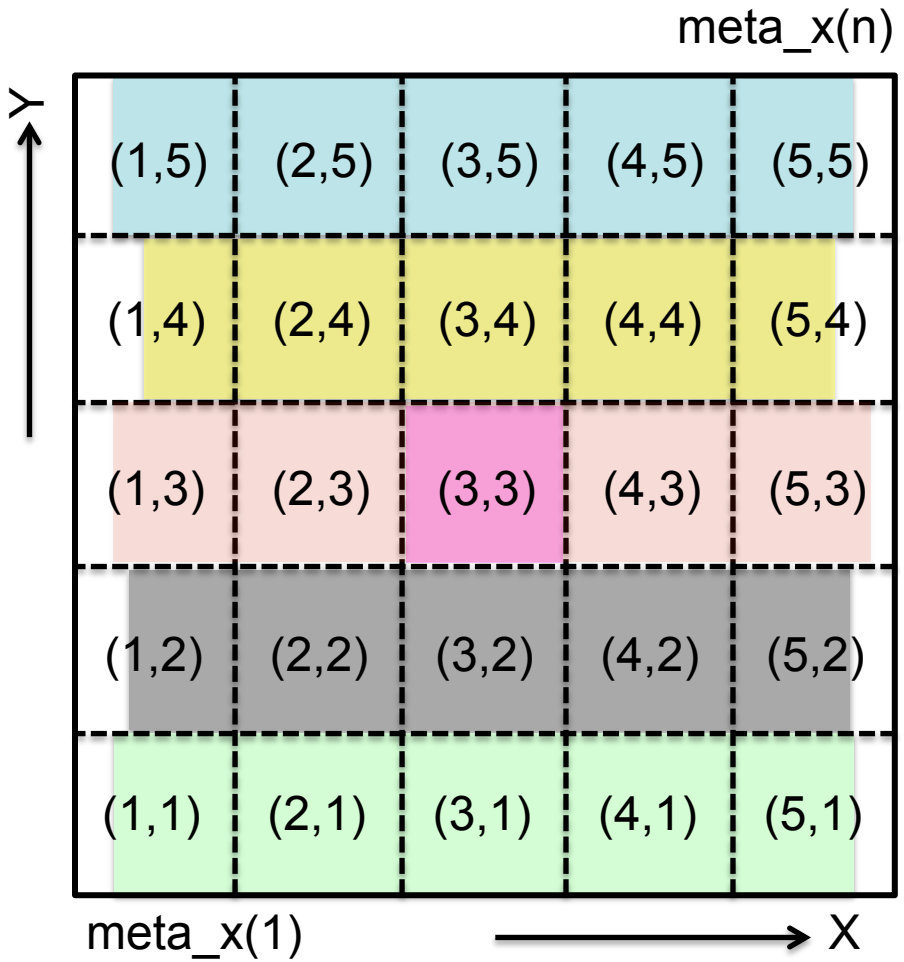
2) 袖部に直にデータ装填

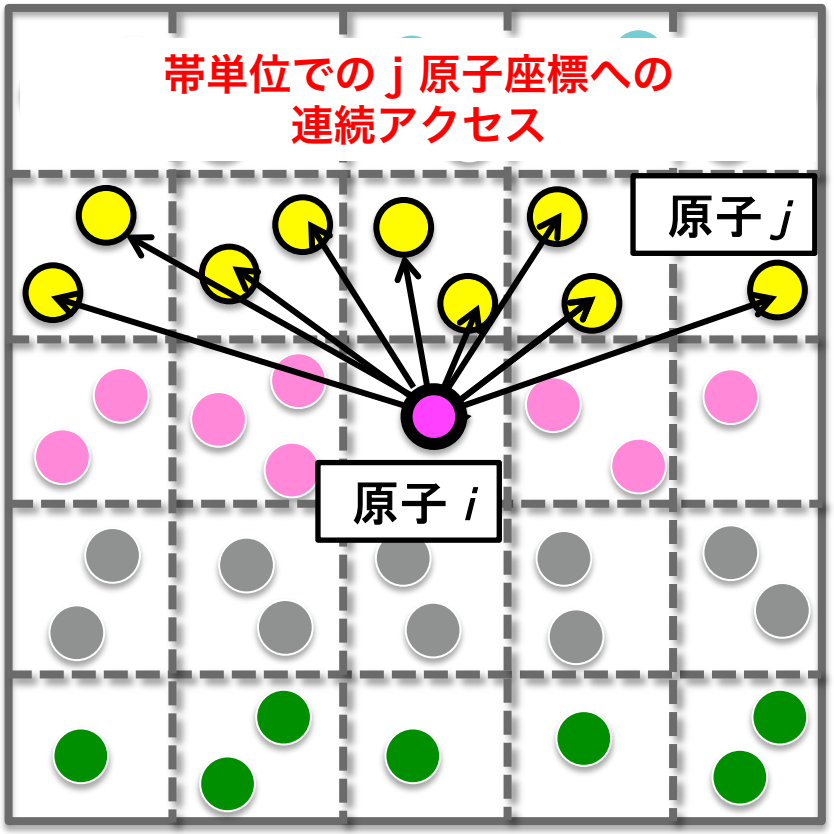
データの連続化　[1] 座標

前回説明

メタデータ配列

meta_x: X-Y 平面上での原子の相対位置関係 (= **メタデータ**) を保持





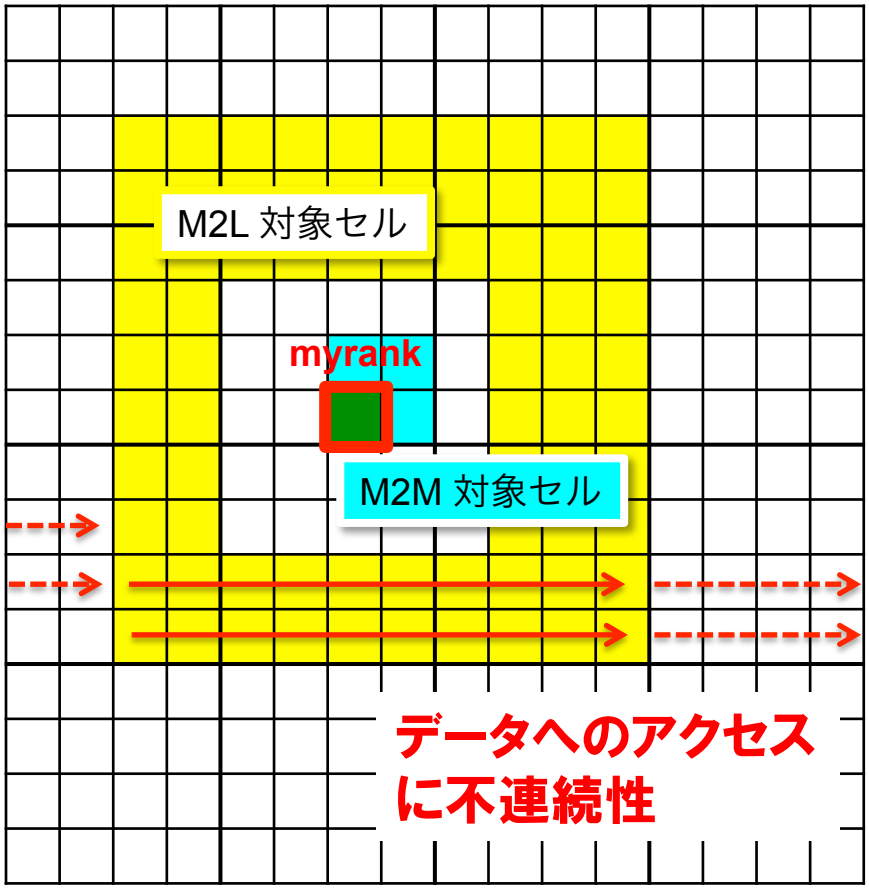
1) 自プロセスを中心にデータを局所化

2) 袖部に直にデータ装填

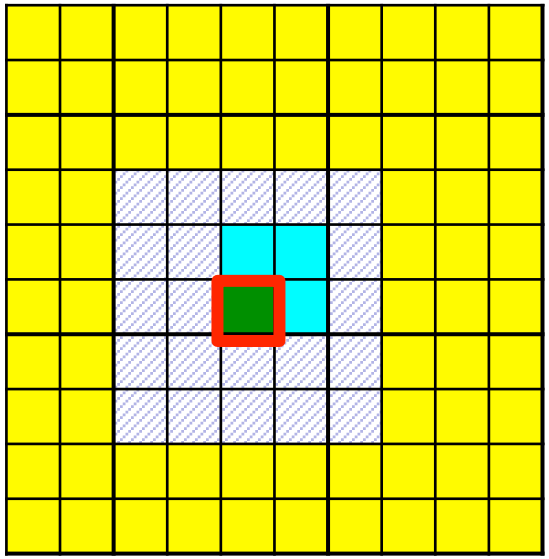
データの連続化　[2] 多極子

前回説明

従来の配列



袖部付き局所化配列



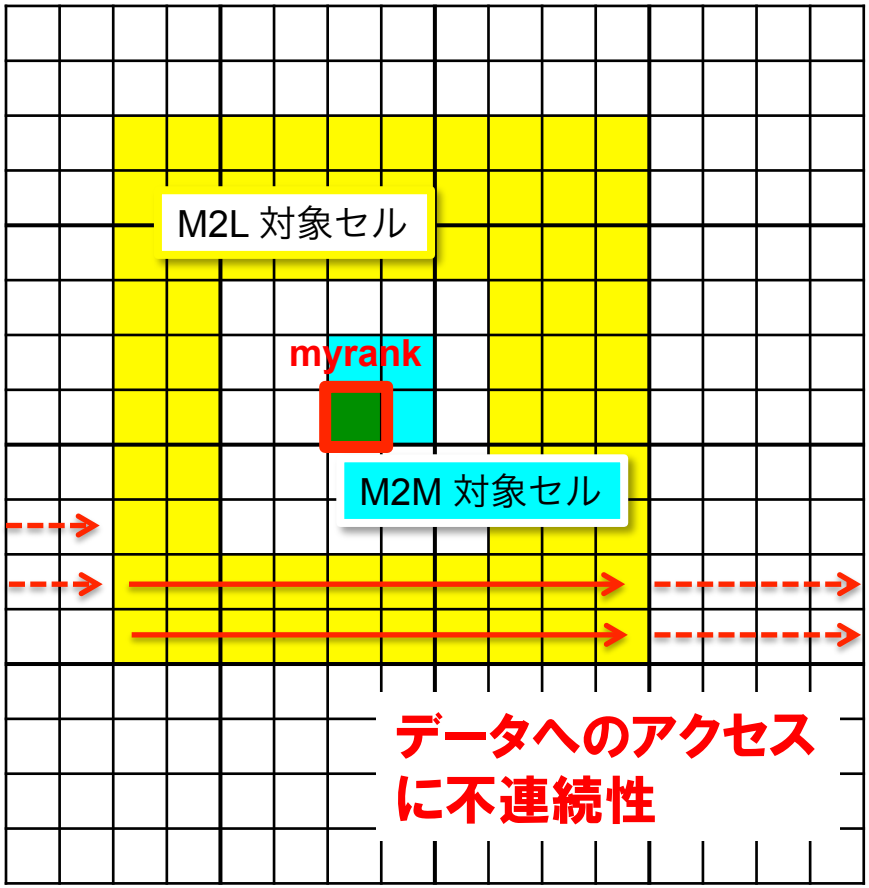
1) 自プロセスを中心にデータを局所化

2) 袖部に直にデータ装填

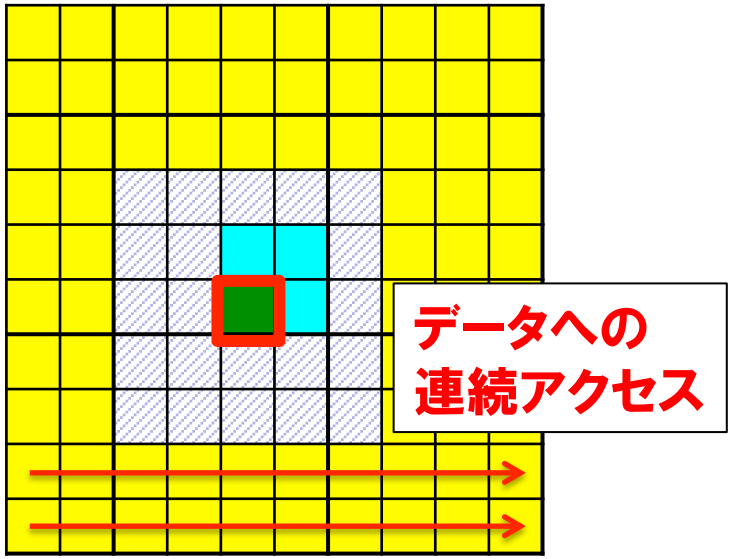
データの連続化　[2] 多極子

前回説明

従来の配列



袖部付き局所化配列



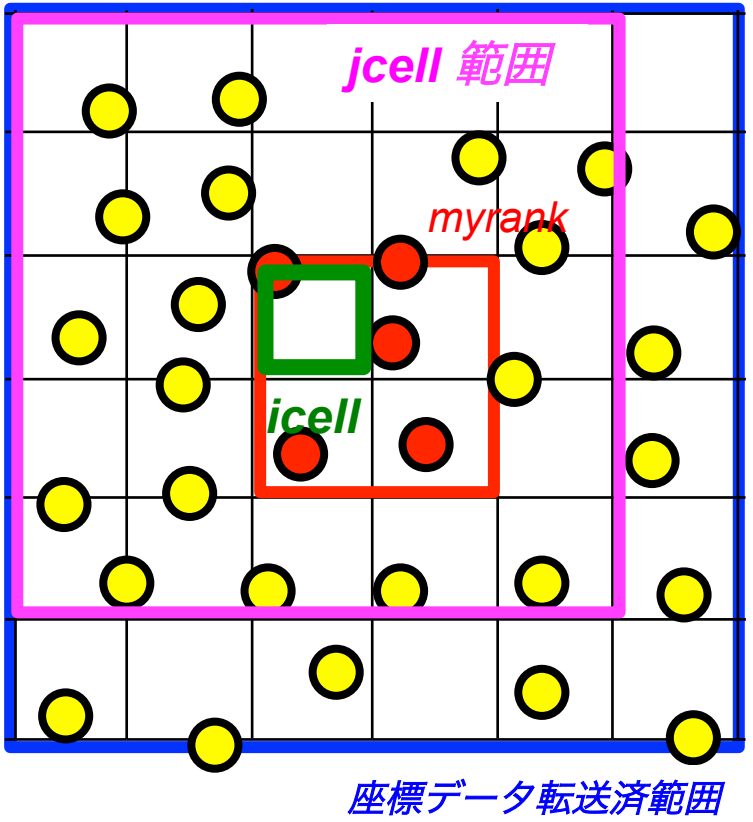
1) 自プロセスを中心にデータを局所化

2) 袖部に直にデータ装填

ブロック化によるキャッシュの有効利用 (1)

ブロック化前のループ構造:

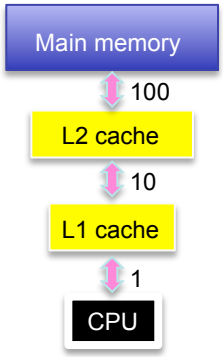
```
do icell(myrank)
do jcell
  do iatm=tag(icell),
             tag(icell)+na_per_cell(icell)-1
  do jatm=tag(jcell),
             tag(jcell)+na_per_cell(jcell)-1
    ポテンシャルの計算
    力の計算
  enddo
  enddo
enddo
enddo
```

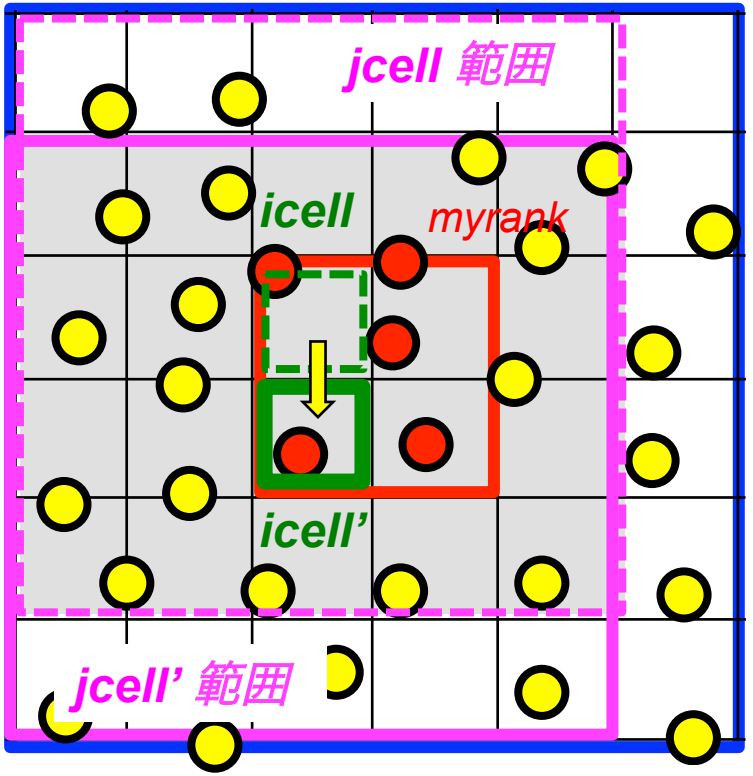


ブロック化によるキャッシュの有効利用 (1)

ブロック化前のループ構造:

```
do icell(myrank)
do jcell
  do iatm=tag(icell),
             tag(icell)+na_per_cell(icell)-1
  do jatm=tag(jcell),
             tag(jcell)+na_per_cell(jcell)-1
    ポテンシャルの計算
    力の計算
  enddo
  enddo
enddo
enddo
```





座標データ転送済範囲

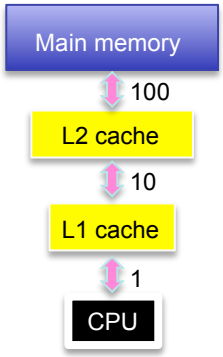
問題点:

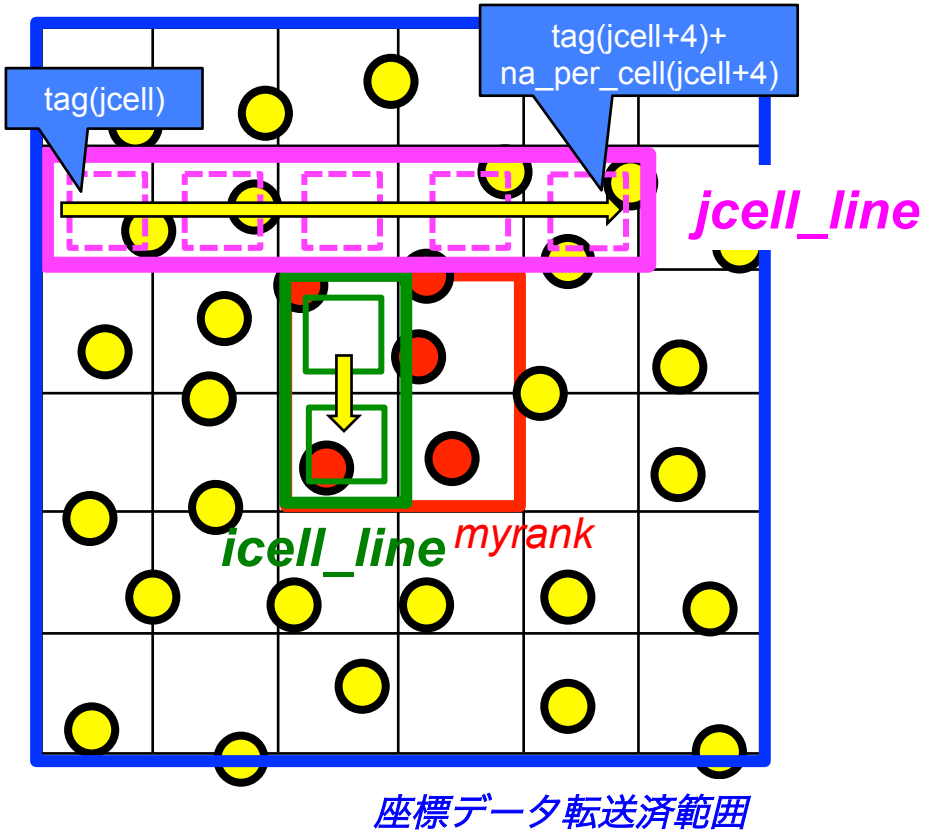
(1) 右図灰色部分のデータは icell ⇨ icell' と変わった結果メモリから再ロードされる
よって、いったんキャッシュに乗ったデータを使い切っていない
(2) jcell 内原子数が少なく最内ベクトル長が稼げない．よって, SIMDの性能が出ない

ブロック化によるキャッシュの有効利用 (1)

ブロック化後のループ構造:

```
do jcell_line                    ← jcellを外側へ移動
do icell(myrank)                 [along icell_line]
  do iatom=tag(icell),
              tag(icell)+na_per_cell(icell)-1
  do jatom=tag(jcell),
        tag(jcell+4)+na_per_cell(jcell+4)-1
    ポテンシャルの計算
    力の計算
  enddo
  enddo
enddo
enddo
```

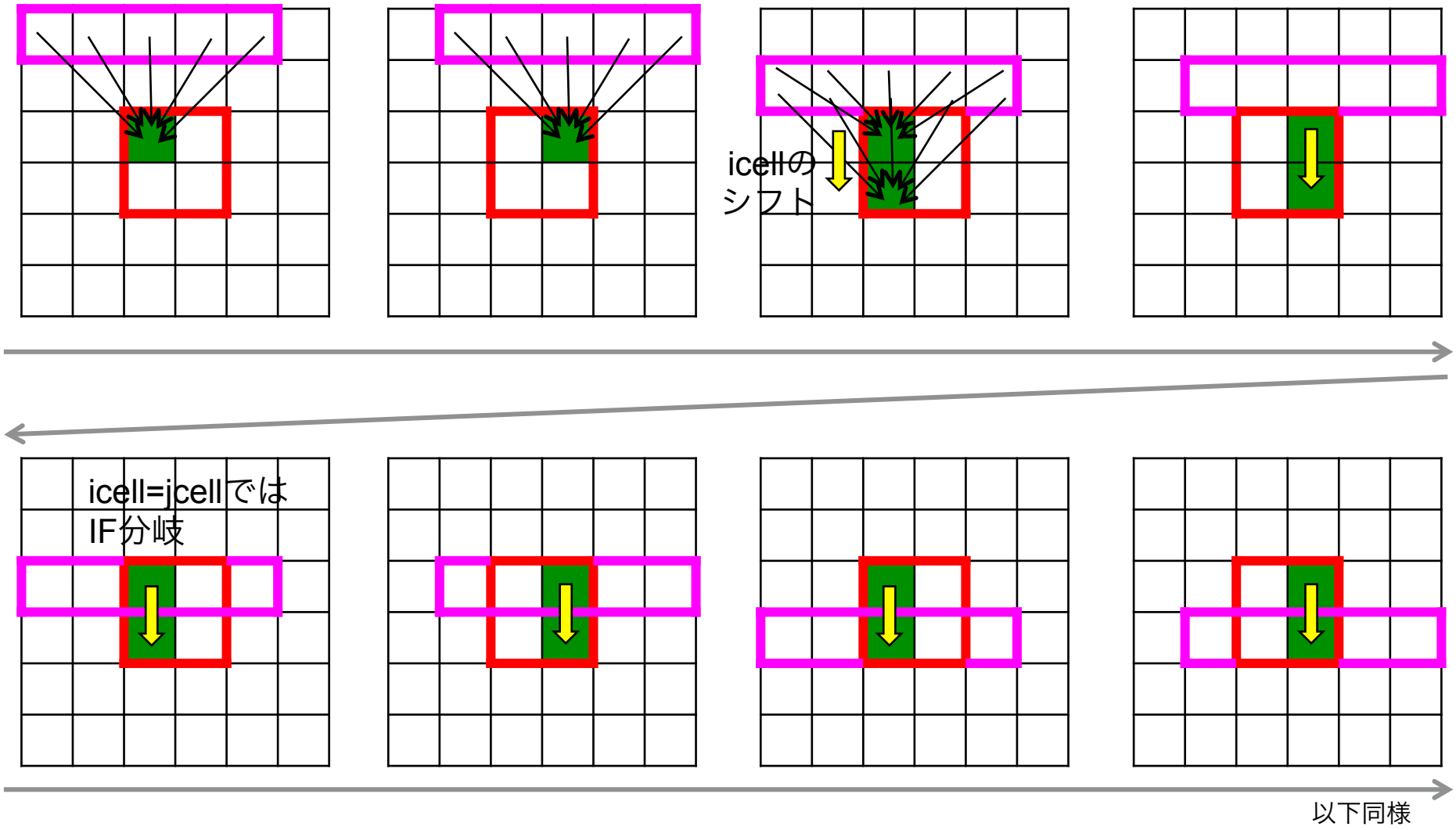




(1) jcell_lineの原子座標データは 1 回のみロードされる.
　すなわち、いったんキャッシュに乗ったデータを使い切る.
(2) jcell_line 内原子数は５倍のベクトル長, かつ連続.　よってSIMDの性能向上

ブロック化によるキャッシュの有効利用 (1)

最外DOループによる jcell_line シフトの概念図



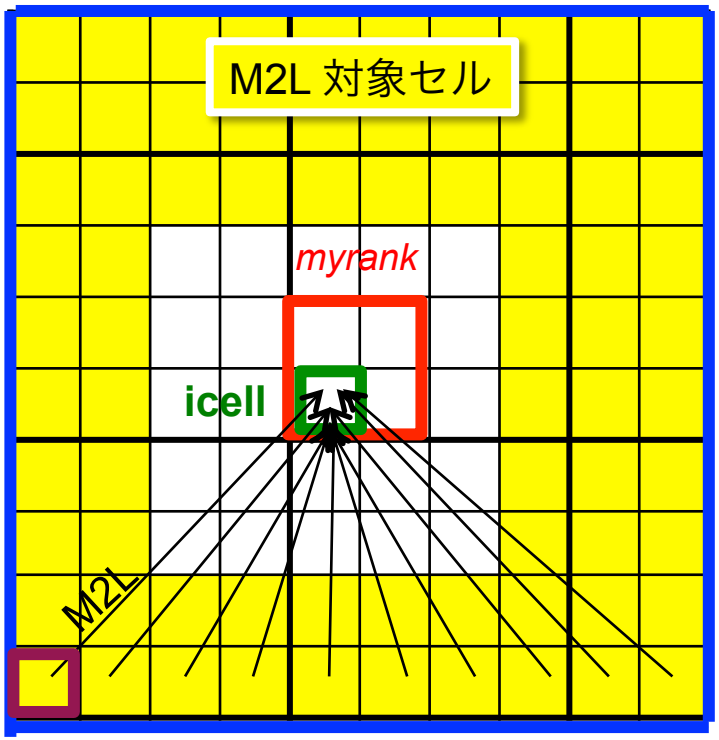
実際のコードは3次元のシフトに対応　**md_direct_f90.f**

ブロック化によるキャッシュの有効利用 (2)

ブロック化前のループ構造 (M2L):

```
do icell(myrank)
do icy=1,10
do icx=1,10
if(icx,icyが近接2セル以遠の領域にあれば)
do m1=1,(nmax+1)2
do m2=1,(nmax+1)2
   wl_local=wl_local+m2l*wm_local
enddo
enddo
endif
enddo
enddo
enddo
```

wm_local((nmax+1)^2,10,10)



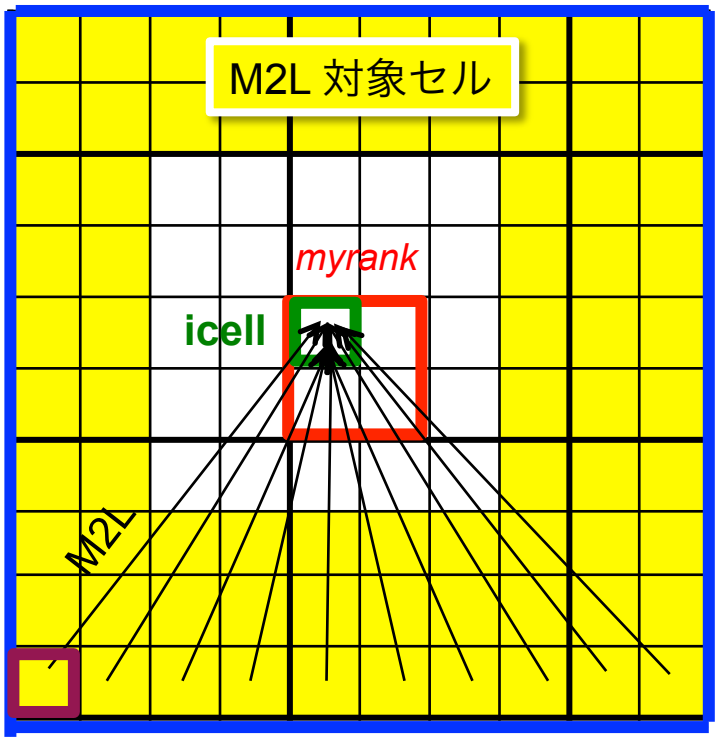
多極子データ転送済範囲

ブロック化によるキャッシュの有効利用 (2)

ブロック化前のループ構造 (M2L):

```
do icell(myrank)
do icy=1,10
do icx=1,10
if(icx,icyが近接2セル以遠の領域にあれば)
do m1=1,(nmax+1)^2
do m2=1,(nmax+1)^2
   wl_local=wl_local+m2l*wm_local
enddo
enddo
endif
enddo
enddo
enddo
```

wm_local((nmax+1)^2,10,10)

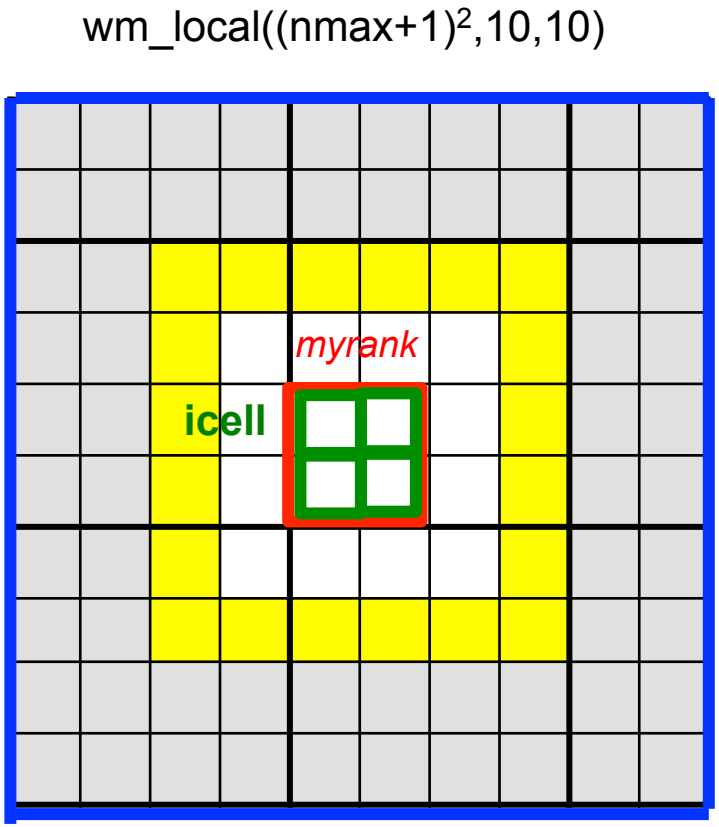


多極子データ転送済範囲

ブロック化によるキャッシュの有効利用 (2)

ブロック化前のループ構造 (M2L):

```
do icell(myrank)
do icy=1,10
do icx=1,10
if(icx,icyが近接2セル以遠の領域にあれば)
do m1=1,(nmax+1)^2
do m2=1,(nmax+1)^2
   wl_local=wl_local+m2l*wm_local
enddo
enddo
endif
enddo
enddo
enddo
```



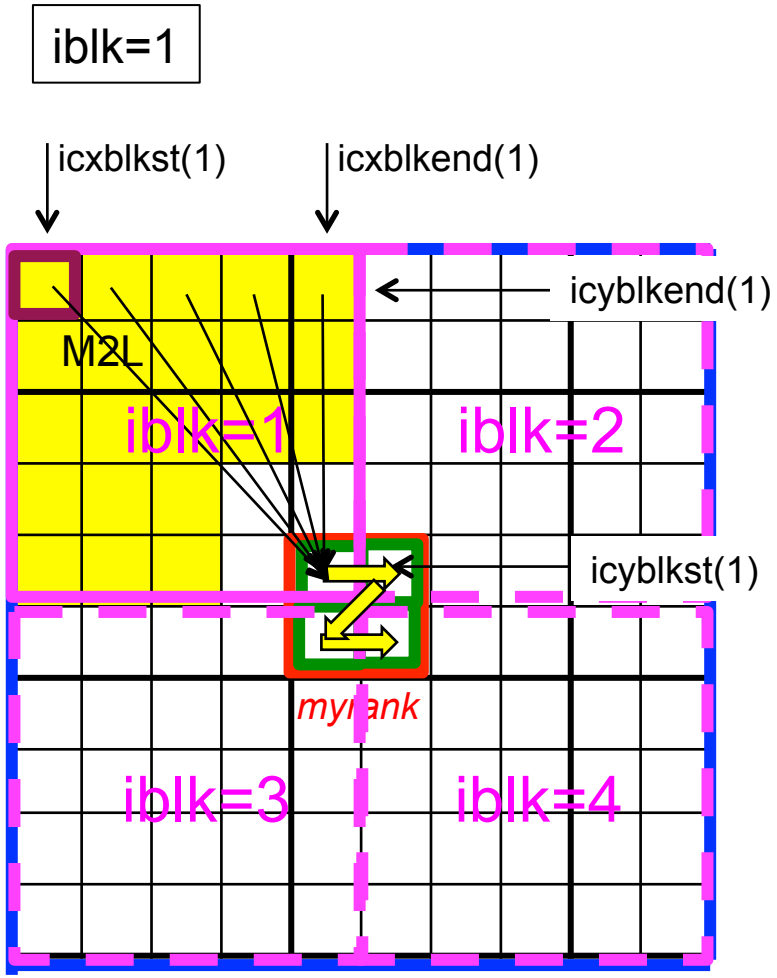
問題点

- **icell** が変わるごと右図灰色の領域の**wm_local**, 変換行列**m2l**はメモリから再ロード. よって、いったんキャッシュに乗ったデータを使い切っていない.

ブロック化によるキャッシュの有効利用 (2)

ブロック化後のループ構造 (M2L):

```
do iblk=1,nblock
do icy=icyblkst(iblk),icyblkend(iblk)
do icx=icxblkst(iblk),icxblkend(iblk)
do icell(myrank)
if(icx,icyが近接2セル以遠の領域にあれば)
do m1=1,(nmax+1)^2
do m2=1,(nmax+1)^2
   wl_local=wl_local+m2l*wm_local
enddo
enddo
endif
enddo
enddo
enddo
enddo
```

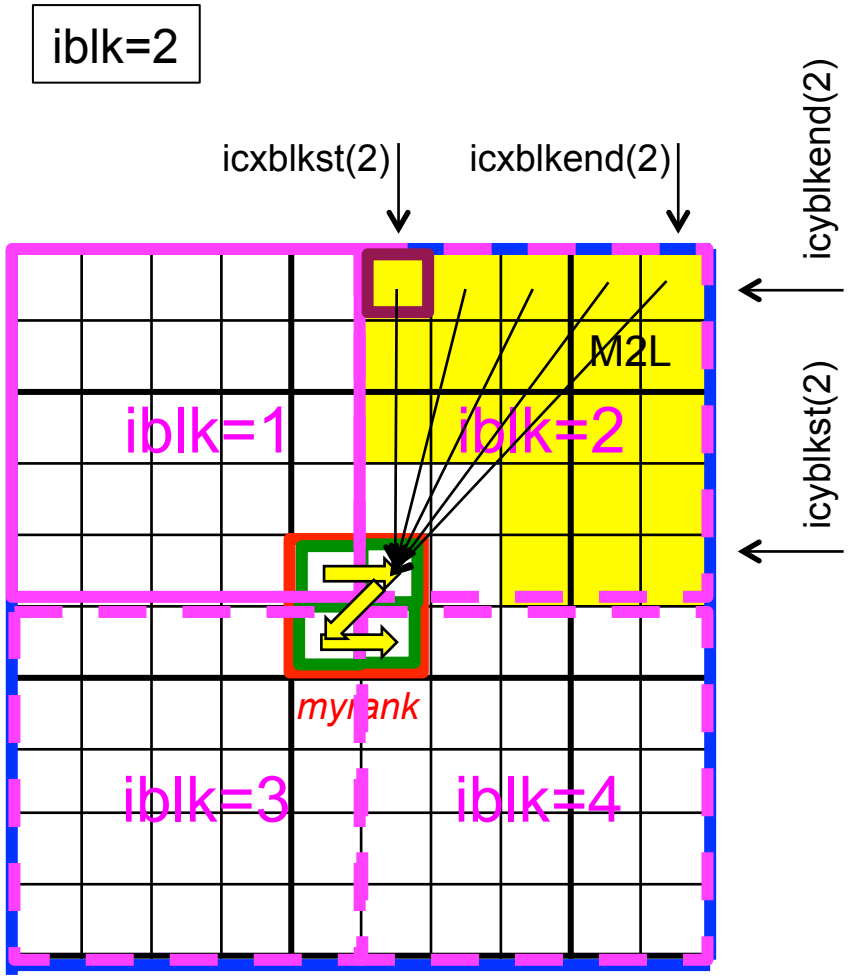


・**iblk**番目のブロック内**wm_local**, 変換行列**m2l**は **icell** に対し 1 回のみロードされる.
すなわち、いったんキャッシュに乗ったデータを使い切る.

ブロック化によるキャッシュの有効利用 (2)

ブロック化後のループ構造 (M2L):

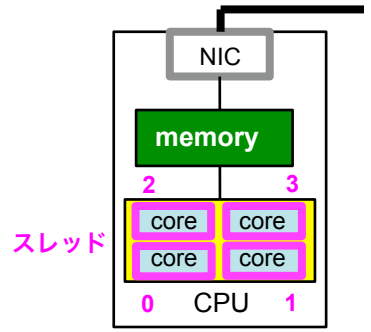
```
do iblk=1,nblock
do icy=icyblkst(iblk),icyblkend(iblk)
do icx=icxblkst(iblk),icxblkend(iblk)
do icell(myrank)
if(icx,icyが近接2セル以遠の領域にあれば)
do m1=1,(nmax+1)^2
do m2=1,(nmax+1)^2
   wl_local=wl_local+m2l*wm_local
enddo
enddo
endif
enddo
enddo
enddo
enddo
```



・**iblk**番目のブロック内**wm_local**, 変換行列**m2l**は **icell** に対し 1 回のみロードされる.
すなわち、いったんキャッシュに乗ったデータを使い切る.

OpenMP 並列化技術

OpenMP 言語拡張機能



・共有メモリー型並列化のための規格
・商用コンパイラ (ifort, pgf90, frtpx) に標準的に備わっている
　→ 表2のコンパイルオプションを入れることで有効化
・「**スレッド**」と呼ばれる単位にタスクが割り振られる
・!$omp (Fortran) ないし#pragma omp (C言語) ではじまる各種の指示文 (ディレクテブ) をプログラムに追記する [do/for ループごと]
・コンパイラに自動 OpenMP 並列化のオプションがある
　→ ただし実用上は配列への初期値代入程度にしか使えない

表2　OpenMP, SIMD並列化に関わるコンパイルオプション

コンパイラ名	OpenMP 並列化	OpenMP 自動並列化	SIMD 自動並列化	メーセージ出力
ifort	-qopenmp	-parallel	-xHOST	-openmp-report, -vec-report
pgf90	-mp	-Mconcur	-fastsse	-Minfo
frtpx	-Kopenmp	-Kparallel	-Ksimd	-Koptmsg

OpenMP 並列化技術

サンプル hello_omp.f:

```
include ‘omp_lib.h’                    OpenMP変数,関数の読み込み

nomp = omp_get_max_threads()  スレッド数(nomp)取得 ← 環境変数 OMP_NUM_THREADS

!$omp parallel
iam = omp_get_thread_num()    自スレッド番号(iam)取得  ＊0 始まり
!$omp do
Do i=1,nomp
  WRITE(*,*) ‘Hello’, iam
Enddo
!$omp end do
!$omp end parallel

STOP
END
```

コンパイル
> ifort -openmp hello_omp.f

実行
> export OMP_NUM_THREADS=4
> ./a.out

Hello 0
Hello 1
Hello 2
Hello 3

OpenMP 並列化技術

・ロードインバランス調整 (M2L)

```
!$omp parallel
!$omp do
do iblk=1,nblock
do icy=icyblkst(iblk),icyblkend(iblk)
do icx=icxblkst(iblk),icxblkend(iblk)
do icell(myrank)
if(icx,icyが近接2セル以遠の領域にあれば)
do m1=1,(nmax+1)2
do m2=1,(nmax+1)2
   wl_local=wl_local+m2l*wm_local
enddo
enddo
endif
enddo
enddo
enddo
enddo
!$omp end do
!$omp end parallel
```

あらかじめM2L対象セルをスレッド数にあわせ均等にブロック化しておく.

任意のスレッド数に対応できないという問題

OpenMP 並列化技術

・ロードインバランス調整 (M2L)

```
!$omp parallel
!$omp do schedule(static,nchunk)
do load=1,nload
  icx=lddir(1,load)
  icy=lddir(2,load)
do icell(myrank)
if(icx,icyが近接2セル以遠の領域にあれば)
do m1=1,(nmax+1)^2
do m2=1,(nmax+1)^2
    wl_local=wl_local+m2l*wm_local
enddo
enddo
endif
enddo
enddo
!$omp end do
!$omp end parallel
```

あらかじめM2L対象セル番地をlddirに登録しておく. nchunk個ごとスレッドに割り当てる.

・任意のスレッド数に対応
・異方的セル分割(均等2ベキ以外)にも対応可能

md_fmm_f90.f

OpenMP 並列化技術

・スレッド並列前後処理の削減

```
do jcell_line
do icell            [along icell_line]
!$omp parallel
!$omp do
do iatom=tag(icell),
                tag(icell)+na_per_cell(icell)-1
  do jatom=tag(jcell),
          tag(jcell+4)+na_per_cell(jcell+4)-1
    ポテンシャルの計算
    力の計算
  enddo
enddo
!$omp enddo
!$omp end parallel
enddo
enddo
```

OpenMP 並列化技術

・スレッド並列前後処理の削減

$!omp parallelを大外に出す

jcell_line数*icell数回の
parallel領域open/closeの
オーバヘッドが削減

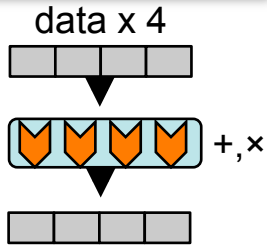
```
do jcell_line
do icell          [along icell_line]
!$omp parallel
!$omp do
do iatom=tag(icell),
            tag(icell)+na_per_cell(icell)-1
  do jatom=tag(jcell),
        tag(jcell+4)+na_per_cell(jcell+4)-1
    ポテンシャルの計算
    力の計算
  enddo
enddo
!$omp enddo
!$omp end parallel
enddo
enddo
```

```
!$omp parallel
do jcell_line
do icell          [along icell_line]
!$omp do
do iatom=tag(icell),
            tag(icell)+na_per_cell(icell)-1
  do jatom=tag(jcell),
        tag(jcell+4)+na_per_cell(jcell+4)-1
    ポテンシャルの計算
    力の計算
  enddo
enddo
!$omp enddo nowait
enddo
enddo
!$omp end parallel
```

演算が独立であれば
nowait 指示句により
スレッド間同期バリア
を削減できる

SIMD 並列化技術

SIMD (single instruction multiple data)



・複数のデータに対する単一命令実行
・ハードウェアに固有の拡張命令セットを利用

				単精度	倍精度
例)	intel	SSE	pentium III~	128bit	(32bit X 4, 64 bit X 2)
		AVX	Sandy Bridge~	256bit	(32bit X 8, 64 bit X 4)
		AVX512	Skylake SP~	512bit	(32bit X 16, 64 bit X 8)

ポスト「京」でも採用

・SIMD 化を行なう方法:
  ・コンパイラの SIMD 自動並列化機能にまかせる
    コンパイルメッセージ, プロファイル結果を読みながら,
    Fortran/C コードを調整し最適化 → 一般人
  ・intrinsic 関数でコーディング → プロフェッショナル

表2 OpenMP, SIMD並列化に関わるコンパイルオプション

コンパイラ名	OpenMP 並列化	OpenMP 自動並列化	SIMD 自動並列化	メーセージ出力
ifort	-qopenmp	-parallel	-xHOST	-openmp-report, -vec-report
pgf90	-mp	-Mconcur	-fastsse	-Minfo
frtpx	-Kopenmp	-Kparallel	-Ksimd	-Koptmsg

SIMD 並列化技術

SIMD自動並列化の例

サンプル simd.f:

```
real(8)::a(10000,10000),b(10000)
real(8)::c(10000)
a=1d0
b=1d0
do i=1,10000
c(i)=0d0
do j=1,10000
  c(i)=c(i)+a(i,j)*b(j)
enddo
enddo

stop
end
```

行列ベクトル積
C(i)=ΣA(i,j)*B(j)

一般に最内側の do ループのみがSIMD化対象
・十分なループ長の確保
・if 分岐の削除
・ループ間のデータ依存性削除
・データへの連続アクセス

SIMD自動並列化無しコンパイル
>ifort -O0 simd.f

```
>time ./a.out
real        0m1.782s
user        0m1.274s
sys         0m0.508s
```

SIMD自動並列化コンパイル
>ifort -xHOST -vec-report simd.f

```
simd.f(3): (col. 2) remark: LOOP WAS VECTORIZED.
simd.f(4): (col. 2) remark: LOOP WAS VECTORIZED.
simd.f(5): (col. 2) remark: PERMUTED LOOP WAS
VECTORIZED.
```

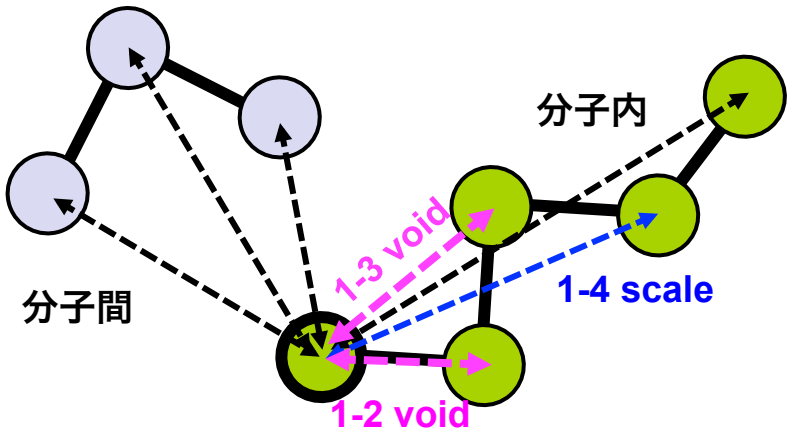
```
>time ./a.out
real        0m0.718s
user        0m0.397s
sys         0m0.321s
```

このコンパイルメッセージを読みながらコードを調整し最適化していく.
・計算の多い部分がVECTORIZEDされているか？

SIMD 並列化技術

・IF文の削除, ベクトル長の確保

話をだいぶ遡ぼれば・・・



分子のループではOpenMP並列の粒度,
および最内ベクトル長が確保できない

分子間

```
do imol=1,nmol-1
do jmol=imol+1,nmol
do i=1,natom(imol)
do j=1,natom(jmol)
  rij=rij(ri, rj)
  LJカットオフ判定
  φnonbond=φnonbond+φij
  f(i)=f(i)+Fi
  f(j)=f(j)+Fj
enddo
enddo
enddo
enddo
```

分子内

```
do imol=1,nmol
do i=1,natom(imol)-1
do j=i+1,natom(imol)
  rij=rij(ri, rj)
  LJカットオフ判定
  x = { 0  if 1-2,-3 void
      { s  if 1-4 scale
      { 1  else
  φnonbond=φnonbond+x*φij
  f(i)=f(i)+x*Fi
  f(j)=f(j)+x*Fj
enddo
enddo
enddo
```

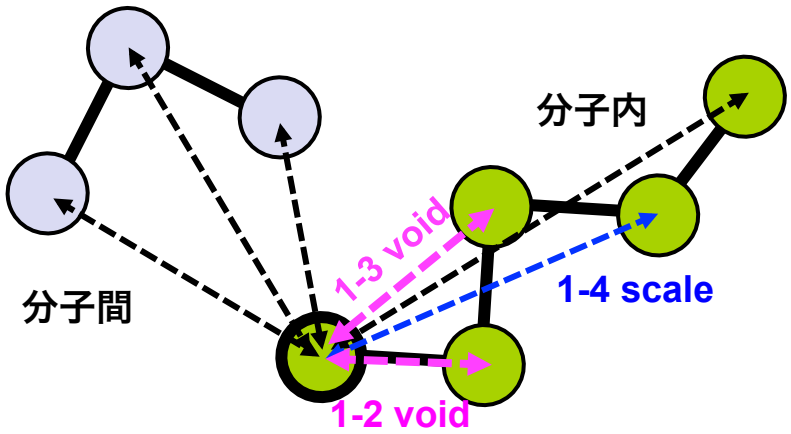
分子内 *nonbond* 項計算の注意点:

・1番目および2番目の隣接原子とは相互作用しない (1-2, 1-3 void)
・3番目の隣接原子との相互作用は因子 *s* でスケールする (1-4 scale) [*s* は LJ, Coulomb べつ]
・4番目以降の隣接原子とは通常の相互作用

SIMD 並列化技術

・IF文の削除, ベクトル長の確保

話をだいぶ遡ぼれば・・・



分子間と分子内の統合

原子ループでOpenMP並列の粒度を確保

```
do jcell_line
do icell  [along icell_line]
do iatom=tag(icell),
                tag(icell)+na_per_cell(icell)-1
  do jatom=tag(jcell),
          tag(jcell+4)+na_per_cell(jcell+4)-1
    rij=rij(ri,rj)
    LJカットオフ判定
    x= { 0  if 1-2,-3 void
       { s  if 1-4 scale
       { 1  else
    φnonbond=φnonbond+x*φij
    f(i)=f(i)+x*Fi
    f(j)=f(j)+x*Fj
  enddo
enddo
enddo
enddo
```

jcell_line原子ループでベクトル長を確保

代償として if 文がループ最内側に移動

分子内 *nonbond* 項計算の注意点:

・1番目および2番目の隣接原子とは相互作用しない (1-2, 1-3 void)

・3番目の隣接原子との相互作用は因子 *s* でスケールする (1-4 scale), *s* は LJ, Coulomb べつ

・4番目以降の隣接原子とは通常の相互作用

SIMD 並列化技術

- **IF文の削除, ベクトル長の確保**

```
do jcell_line
do icell  [along icell_line]
do iatom=tag(icell),
              tag(icell)+na_per_cell(icell)-1
 do jatom=tag(jcell),
       tag(icell+4)+na_per_cell(icell+4)-1
   rij=rij(ri,rj)
   if(rij≥rcut) LJ_epsilon=0d0
   φnonbond=φnonbond+φij
   f(i)=f(i)+Fi
   f(j)=f(j)+Fj
  enddo
enddo
enddo
enddo
```

jcell_line原子ループでベクトル長を確保

マスク処理を利用

ひとまずvoid, scaleの区別無くすべて計算

```
do iatom=tag(icell),
              tag(icell)+na_per_cell(icell)-1
 do jatom=1,voidpair123(iatom)
  rij=rij(ri,rj)
  φnonbond=φnonbond−φij
  f(i)=f(i) – Fi
  f(j)=f(j) – Fj
 enddo
 do jatom=1,scalepair14(iatom)
  rij=rij(ri,rj)
  x=1-s
  φnonbond=φnonbond−x*φij
  f(i)=f(i) – x*Fi
  f(j)=f(j) – x*Fj
 enddo
enddo
```

voidを引き算

scale との差分を引き算

赤字：専用計算機 (MDGRAPE) の分野で使われてきたテクニック

問題点

桁落ちによる精度低下 (倍精度なら実用上問題なし).

SIMD 並列化技術

・ループ順序入れ替えによる SIMD 化促進 (p2p, L2p)

オリジナルコード

```
do ii=1,lxdiv*lydiv*lzdiv          プロセス所持サブセル数
!$omp do
      do i0=tag(icz0,icy0,icx0),
     &       tag(icz0,icy0,icx0)+na_per_cell(icz0,icy0,icx0)-1   サブセル内原子数  平均 40 原子程度
      call cart2angle(xta,yta,zta,rad,the,csthe,phi)
      do j0=0,nmax    [典型的にはnmax=4]
      do k0=-j0,j0
           球面調和関数演算
             zphi=dcmplx(0.d0,k*phi)
             g=f*pre(j,iabs(k))*algndr(j,iabs(k),csthe)
           force, potential
      enddo ! k0
      enddo ! j0
      enddo ! i0
!$omp end do nowait
enddo ! ii
```

k0ループ長は j0 に依存, 最大でも -4:4

- SIMDループ長不足
- 関数参照pre, algndr
- if分岐

SIMD化が困難

$$Y_\ell^m(\theta,\phi) = (-1)^{(m+|m|)/2}\sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi}\frac{(\ell-|m|)!}{(\ell+|m|)!}}\,P_\ell^{|m|}(\cos\theta)\,e^{im\phi}$$

j0 = l, k0 = m

SIMD 並列化技術

・ループ順序入れ替えによる SIMD 化促進 (p2p, L2p)

改良コード

```
!$omp do
do ii=1,lxdiv*lydiv*lzdiv
      do i0=tag(icz0,icy0,icx0),
     &       tag(icz0,icy0,icx0)+na_per_cell(icz0,icy0,icx0)-1
           call cart2angle(xta,yta,zta,rad,the,csthe,phi)
           → rad,the,csthe,phi 配列
      enddo
      do j0=0,nmax    [典型的にはnmax=4]
      do k0=-j0,j0
      do i0=tag(icz0,icy0,icx0),
     &       tag(icz0,icy0,icx0)+na_per_cell(icz0,icy0,icx0)-1
           rad,the,csthe,phi 配列に対する球面調和関数演算
           force, potential
      enddo
      enddo ! k0
      enddo ! j0
      enddo ! i0
enddo ! Ii
!$omp end do nowait
```

JHPCN課題: jh170024-NAH
「分子動力学計算ソフトウェアMODYLASの大規模メニーコア・ワイドSIMDクラスター対応並列化に関する研究」

・SIMDループ長 ~セル内原子数
・pre, algndr をテーブル化

高効率なSIMD化

表3　FX100でのSIMD化率の実測

	浮動小数点演算ピーク比	SIMD 浮動小数点演算命令率	SIMD 整数演算命令率
p2M	2.9%⇦0.7%	49.2%⇦0.6%	1.4%
L2p	5.4%⇦1.0%	55.0%⇦15.1%	4.7%

SIMD 並列化技術

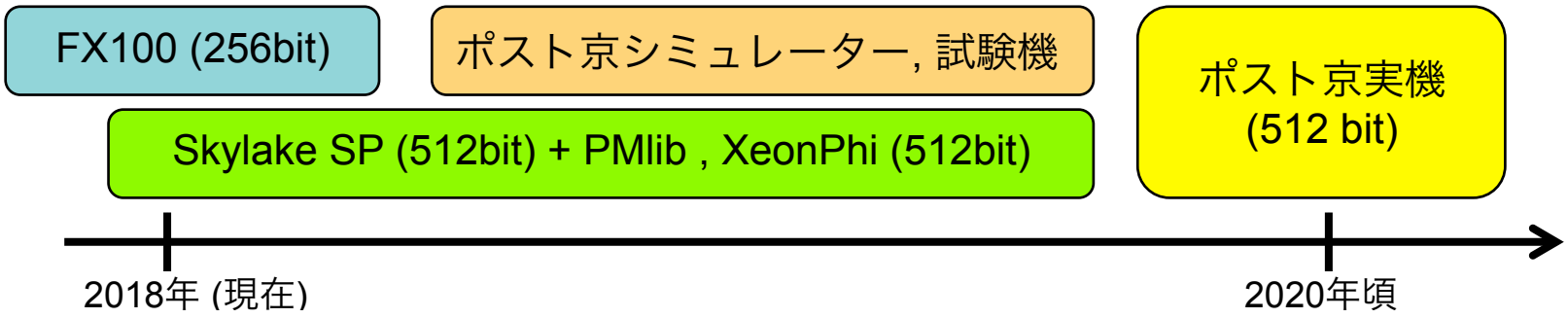
- **PMlib ライブラリ利用の勧め**

512bit SIMD (単精度x16, 倍精度x8) を活かした演算の高効率化がポスト「京」時代には必須. しかしながら, プロファイラーなどで512bit SIMD 性能を測定する簡便な方法がない.

Intel VTune Amplifier → 「測定できる」と謳うが, 実際は…

そこで、理研AICSの開発した **PMlib ライブラリ**：
https://github.com/avr-aics-riken/PMlib

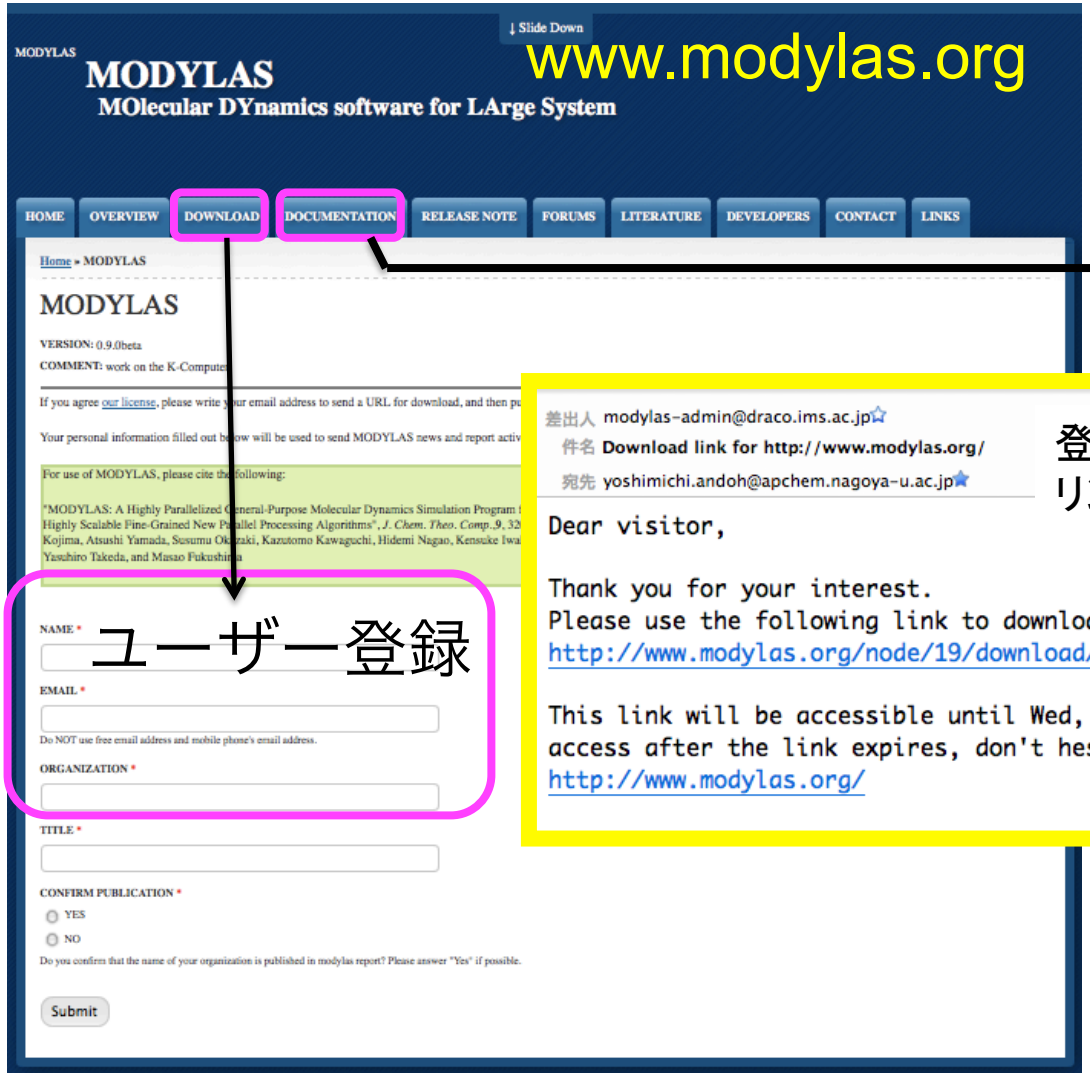
Skylake SP 上 (ITO@九大情報セ 等) でコンパイラによって生成された SIMD 命令の詳細が測定可能 → ポスト京に向けたチューニングの指針が得られる



まとめ

- 3次元トーラスネットワークに最適化したMPI並列化手法について, 通信間衝突の回避,通信前後での配列間コピーの消去,および通信の演算による代用をキーワードに解説した.
- 演算効率化の前提となる,データの連続化およびブロック化によるキャッシュの有効利用について解説した.
- OpenMP並列化技術 (スレッド間のロードバランス調整,スレッド並列前後処理の削減) およびSIMD並列化技術 (IF文の削除,ベクトル長の確保) について解説した.
- ポスト京では 512bit SIMD の活用がキーとなる.

付録



・マニュアル(PDF)
・チュートリアル(PDF)
のダウンロード

差出人 modylas-admin@draco.ims.ac.jp
件名 Download link for http://www.modylas.org/
宛先 yoshimichi.andoh@apchem.nagoya-u.ac.jp

Dear visitor,

Thank you for your interest.
Please use the following link to download the files:
http://www.modylas.org/node/19/download/a233f49281a202d6de3ca1a9ccfd2538

This link will be accessible until Wed, 01/22/2014 - 13:31. If you need access after the link expires, don't hesitate to revisit the download page on
http://www.modylas.org/

登録後このようなメールが送られてくる.
リンク先からソースコードをダウンロード

使い方については
第21回CMSI神戸ハンズオン:
MODYLASチュートリアル　資料
なども参照。