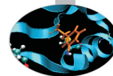
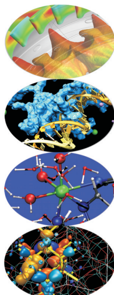
SuperComputing Applications and Innovation



HPC Scientific programming: tools and techniques

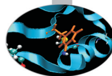
G. Amati P. Lanucara
V. Ruggiero

CINECA Roma - SCAI Department



Roma, 9-11 April 2014

AGENDA DEL CORSO



9 aprile 2014

9.30-10.30 Architetture
10.30-13.00 La cache ed il sistema di memoria + esercitazioni
14.00-15.00 Pipeline + esercitazioni
15.00-17.00 Profilers + esercitazioni

10 aprile 2014

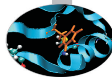
9.30-13.00 Compilatori+esercitazioni
14.00-15.30 Librerie + esercitazioni
15.00-17.00 Floating-point +esercitazioni

11 aprile 2014

9.30-11.00 Makefile + esercitazioni
11.00-13.00 Debugging+esercitazioni
14.00-17.00 Debugging+esercitazioni

SCAI
SuperComputing Applications and Innovation

Outline

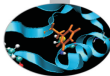


Compilatori e ottimizzazione

Librerie scientifiche

Floating Point Computing

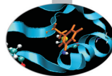
Linguaggi



- Esiste un’infinità di linguaggi differenti
- http://foldoc.org/contents/language.html

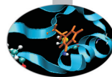
```
20-GATE; 2.PAK; 473L Query; 51forth; A#; A-0; a1; a56;
Abbreviated Test Language for Avionics Systems; ABC;
ABC ALGOL; ABCL/1; ABCL/c+; ABCL/R; ABCL/R2; ABLE;
ABSET; abstract machine; Abstract Machine Notation;
abstract syntax; Abstract Syntax Notation 1;
Abstract-Type and Scheme-Definition Language; ABSYS;
Accent; Acceptance, Test Or Launch Language; Access;
ACOM; ACOS; ACT++; Act1; Act2; Act3; Actalk; ACT ONE;
Actor; Actra; Actus; Ada; Ada++; Ada 83; Ada 95; Ada 9X;
Ada/Ed; Ada-O; Adaplan; Adaplex; ADAPT; Adaptive Simulated
Annealing; Ada Semantic Interface Specification;
Ada Software Repository; ADD 1 TO COBOL GIVING COBOL;
ADELE; ADES; ADL; AdLog; ADM; Advanced Function Presentation;
Advantage Gen; Adventure Definition Language; ADVSYS; Aeolus;
AFAC; AFP; AGORA; A Hardware Programming Language; AIDA;
AIr MAterial COmmand compiler; ALADIN; ALAM; A-language;
A Language Encouraging Program Hierarchy; A Language for Attributed ...
```

Linguaggi



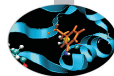
- Linguaggi interpretati
  - il linguaggio viene "tradotto" statement per statement dall'interprete durante l'esecuzione
  - impossibili ottimizzazioni tra differenti statement
  - migliore gestione degli errori semantici
  - linguaggi di scripting, Java (bytecode),. . .
- Linguaggi compilati
  - il programma viene "tradotto" dal compilatore prima dell'esecuzione
  - possibili ottimizzazioni tra differenti statement
  - gestione minimale degli errori semantici
  - Fortran, C, C++

Le CPU



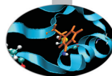
- É composta di:
  - registri (operandi delle istruzioni)
  - unità funzionali (eseguono le istruzioni)
- Unità funzionali:
  - aritmetica intera
  - operazioni logiche bitwise
  - aritmetica floating-point
  - calcolo di indirizzi
  - lettura e scrittura in memoria (load & store)
  - previsione ed esecuzione di "salti" (branch) nel flusso di esecuzione

Le CPU



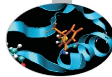
- RISC: Reduced Instruction Set CPU
  - istruzioni semplici
  - formato regolare delle istruzioni
  - decodifica ed esecuzione delle istruzioni semplificata
  - codice macchina molto "verboso"
- CISC: Complex Instruction Set CPU
  - istruzioni di semantica "ricca"
  - formato irregolare delle istruzioni
  - decodifica ed esecuzione delle istruzioni complicata
  - codice macchina molto "compatto"
- Differenza non più rilevante quanto a prestazioni: le CPU CISC di oggi convertono le istruzioni in micro operazioni RISC-like

Architettura vs. Implementazione



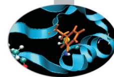
- Architettura:
  - set di istruzioni
  - registri architetturali interi, floating point e di stato
- Implementazione
  - registri fisici (2.5$\div$ 20 $\times$ registri architetturali)
  - frequenza di clock e tempo di esecuzione delle istruzioni
  - numero di unità funzionali
  - dimensione, numero, caratteristiche delle cache
  - Out Of Order execution, Simultaneous Multi-Threading
- Una architettura, più implementazioni:
  - Power: Power4, Power5, Power6, . . .
  - x86: Pentium III, Pentium 4, Xeon, Pentium M, Pentium D, Core, Core2, Athlon, Opteron, . . .
  - prestazioni differenti
  - "regole" diverse per ottenere alte prestazioni

Il compilatore



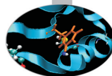
- Traduce il codice sorgente in codice macchina
- Rifiuta codici sintatticamente errati
- Segnala (alcuni) potenziali problemi semantici
- Può tentare di ottimizzare il codice
  - ottimizzazioni indipendenti dal linguaggio
  - ottimizzazioni dipendenti dal linguaggio
  - otttimizzazioni dipendenti dalla CPU
  - ottimizzazioni dipendenti dall'implementazione della CPU
  - ottimizzazioni dell'uso della memoria e della cache
  - suggerimenti al processore su cosa probabilmente farà il codice
- É uno strumento potente
  - potente: può risparmiare lavoro al programmatore
  - complesso: a volte può fare cose sorprendenti o controproducenti
  - limitato: è un sistema esperto, ma non ha l'intelligenza di un essere umano, non può capire pienamente il codice

HPC e Linguaggi



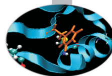
- Linguaggi ideali per l'High Performance Computing?
  - adatti all'implementazione di algoritmi "scientifici"
  - devono permettere elevati livelli di ottimizzazione
  - integrandosi nelle recenti architetture di supercalcolo
- Quali sono?
  - Fortran/C/C++, ci limitiamo a Fortran e C con qualche cenno specifico a C++
  - il Python é in ascesa, ma per le parti computazionalmente intensive si usa appoggiarsi a C o Fortran
- I compilatori piú usati per l'HPC (non sono molti)
  - GNU (gfortran, gcc, g++): "libero"
  - Intel (ifort, icc, icpc)
  - IBM (xlf, xlc, xlC)
  - Portland Group (pgf90, pgcc, pgCC)
  - PathScale, Oracle/Solaris, Fujitsu, Nag, Microsoft,...
- Linux, Windows or Mac OS X?
  - discorso complesso, ma la grande maggioranza delle architetture di supercalcolo ad oggi gira su piattaforma Linux

Building di un Programma



- Creare un eseguibile dai sorgenti é in generale un processo a tre fasi
- Pre-processing:
  - ogni sorgente é letto dal pre-processore
    - sostituire (**`#define`**) MACROs
    - inserire codice per gli statement **`#include`**
    - inserire o cancellare codice valutando **`#ifdef`**, **`#if`** ...
- Compilazione:
  - ogni sorgente é tradotto in un codice oggetto
    - un file oggetto é una collezione organizzata di simboli che si riferiscono a variabili e funzioni definite o usate nel sorgente
- Linking:
  - file oggetti sono combinati per costruire il singolo eseguibie finale
  - ogni simbolo deve essere risolto
    - i simboli possono essere definiti nei file oggetto
    - o disponibili in altri codici oggetti (librerie esterne)

Compilare con GNU gfortran



- Quando si dá il comando:

```
user@caspur$> gfortran dsp.f90 dsp_test.f90
```

  vengono eseguiti automaticamente i tre passi

- Pre-processing

```
user@caspur$> gfortran -E -cpp dsp.f90
user@caspur$> gfortran -E -cpp dsp_test.f90
```

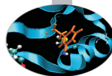
  - l'opzione `-E -cpp` dice a `gfortran` di fermarsi after pre-process
  - semplicemente chiama `cpp` (automaticamente chiamata se l'estensione é `F90`)

- Compilazione dei sorgenti

```
user@caspur$> gfortran -c dsp.f90
user@caspur$> gfortran -c dsp_test.f90
```

  - l'opzione `-c` dice `gfortran` di compilare solo i sorgenti
  - da ogni sorgente viene prodotto un file oggetto `.o`

Linking con GNU gfortran



- Linkare oggetti tra di loro

```
user@caspur$> gfortran dsp.o dsp_test.o
```

- Per risolvere i simboli definiti in librerie esterne specificare:
  - le librerie da usare (opzione `-l`)
  - le directory in cui stanno (opzione `-L`)
- Come linkare `libblas.a` nella cartella `/opt/lib`

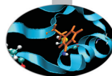
```
user@caspur$> gfortran file1.o file2.o -L/opt/lib -ldsp
```

- Come creare e linkare una libreria statica

```
user@caspur$> gfortran -c dsp.f90
ar curv libdsp.a dsp.o
ranlib libdsp.a
gfortran test_dsp.f90 -L. -ldsp
```

  - `ar` create the archive `libdsp.a` containing `dsp.o`
  - `ranlib` generare un indice per l'archiviazione

Prendere confidenza

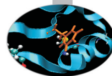


- Il manuale in linea, e.g.

```
man gcc
```

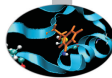
  riporta le opzioni del compilatore C di GNU e il loro significato
- Attenzione: **`man gfortran`** dá solo le opzioni ulteriori rispetto a gcc, mentre per gli altri compilatori solitamente i man sono replicati nelle parti comuni
- Il numero di opzioni é notevole e purtroppo differisce da compilatore a compilatore
- Tipologia di opzioni
  - linguaggio: sullo standard (o sul dialetto) da seguire
  - ottimizzazione: argomento delle prossime slide...
  - target: per l'integrazione con l'architettura di calcolo
  - debugging: la piú importante, **`-g`**, crea i simboli di debugging necessari per l'uso di debugger
  - warning: per avere informazioni sulla compilazione, utile per debugging e/o ottimizzazione

Il compilatore cosa sa fare



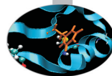
- Esegue trasformazioni del codice come:
  - Register allocation
  - Register spilling
  - Copy propagation
  - Code motion
  - Dead and redundant code removal
  - Common subexpression elimination
  - Strength reduction
  - Inlining
  - Index reordering
  - Loop pipelining , unrolling, merging
  - Cache blocking
  - . . .
- Lo scopo è massimizzare le prestazioni

Il compilatore cosa non sa fare



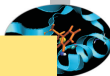
- Analizzare ed ottimizzare globalmente codici molto grossi (a meno di abilitare l'IPO, molto costoso in tempo e risorse)
- Capire dipendenze tra dati con indirizzamenti indiretti
- Strenght reduction di potenze non intere, o maggiori di $2 \div 4$
- Common subexpression elimination attraverso chiamate a funzione
- Unrolling, Merging, Blocking con:
  - chiamate a funzioni e(o) subroutine
  - chiamate o statement di Input-Output in mezzo al codice
- Fare inlining di funzioni se non viene detto esplicitamente
- Sapere a run-time i valori delle variabili per i quali alcune ottimizzazioni sono inibite

Livelli di ottimizzazione



- I compilatori forniscono dei livelli di ottimizzazione "predefiniti" utilizzabili con la semplice opzione **`-O<n>`**
  - **`n`** accresce il livello di ottimizzazione, da 0 a 3 (a volte fino a 5)
- Fortran IBM:
  - **`-O0`**: nessuna ottimizzazione (utile insieme a **`-g`** in debugging)
  - **`-O2, -O`** : ottimizzazioni locali, compromesso tra velocità di compilazione, ottimizzazione e dimensioni dell'eseguibile
  - **`-O3`**: ottimizzazioni memory-intensive, può alterare la semantica del programma (da qui in poi da considerare l'uso si **`-qstrict`** per evitare risultati errati)
  - **`-O4`**: ottimizzazioni aggressive (**`-qarch=auto`**, **`-qhot`**, **`-qipa`**, **`-qtune=auto`**, **`-qcache=auto`**, **`-qsimd=auto`**)
  - **`-O5`**: come **`-O4`** con **`-qipa=level=2`** aggressiva e lenta
- Alcuni compilatori hanno **`-fast`**, che include **`On`** e altro
- Per GNU una scelta comune insieme a **`-O3`** é **`-funroll-loops`**
- Attenzione all'ottimizzazione di default: per GNU é **`-O0`** mentre per gli altri di solito é **`-O2`**

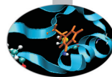
Loop con -O3 (Compilatore Intel)



```
icc (or ifort) -O3
```

- Automatic vectorization (use of packed SIMD instructions)
- Loop interchange (for more efficient memory access)
- Loop unrolling (more instruction level parallelism)
- Prefetching (for patterns not recognized by h/w prefetcher)
- Cache blocking (for more reuse of data in cache)
- Loop peeling (allow for misalignment)
- Loop versioning (for loop count; data alignment; runtime dependency tests)
- Memcpy recognition (call Intel's fast memcpy, memset)
- Loop splitting (facilitate vectorization)
- Loop fusion (more efficient vectorization)
- Scalar replacement (reduce array accesses by scalar temps)
- Loop rerolling (enable vectorization)
- Loop reversal (handle dependencies)

Dal sorgente all’eseguibile

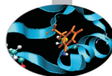


- La macchina astratta "vista" a livello di sorgente è molto diversa da quella reale
- Esempio: prodotto di matrici

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

- Il “nocciolo”
  - carica dalla memoria tre valori
  - fa una moltiplicazione ed una somma
  - immagazzina il risultato

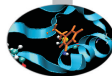
Hands-on: Livelli di Ottimizzazione



- Prodotto matrice-matrice, 1024×1024, doppia precisione
- Ordine dei loop ottimale per la cache
- Architettura considerata per la prove, PLX:
  - 2 esa-core XEON 5650 Westmere CPUs 2.40 GHz per nodo
- Per caricare i compilatori: (`module load profile/advanced`):
  - GNU: `module load gnu/4.7.2`
  - Intel: `module load intel/cs-xe-2013--binary`
  - PGI: `module load pgi/12.10`
  - Fare `unload` di un compilatore prima di caricarne un altro

	GNU	Intel	PGI	GNU	Intel	PGI
Opzione	secondi	secondi	secondi	GFlops	GFlops	GFlops
-O0						
-O1						
-O2						
-O3						
-O3 -funroll-loops		—	—		—	—
-fast	—			—		

Prodotto di matrici: performance



- Prodotto matrice-matrice, 1024$\times$1024, doppia precisione
- Ordine dei loop ottimale per la cache
- Scritto in Fortran
- Architetture considerate per le prove
  - FERMI: IBM Blue Gene/Q system, nodi da 16 core single-socket PowerA2 a 1.6 GHz di frequenza
  - PLX: 2 esa-core XEON 5650 Westmere CPUs 2.40 GHz per nodo

FERMI - xlf

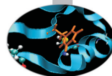
Opzione	secondi	Mflops
-O0	65.78	32.6
-O2	7.13	301
-O3	0.78	2735
-O4	55.52	38.7
-O5	0.65	3311

PLX - ifort

Opzione	secondi	MFlops
-O0	8.94	240
-O1	1.41	1514
-O2	0.72	2955
-O3	0.33	6392
-fast	0.32	6623

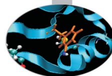
- Perché tanta varietà di risultati?
- Basta passare da -On a -On+1?

Cosa fa il compilatore: report



- Cosa accade ai diversi livelli di ottimizzazione?
  - Perché il compilatore IBM su Fermi al livello **`-O4`** degrada cosí le performance?
- Utilizzare le opzioni di report é un buon modo di capire cosa sta facendo il compilatore
- Su IBM **`-qreport`** mostra che per **`-O4`** l'ottimizzazione prende un percorso completamente diverso dagli altri casi
  - il compilatore riconosce il pattern del prodotto matrice-matrice e sostituisce le righe di codice con la chiamata a una funzione di libreria BLAS **`__xl_dgemm`**
  - che peró si rivela molto lenta perché non fa parte delle librerie matematiche ottimizzate da IBM (ESSL)
  - anche il compilatore Intel fa questo per dgemm, ma invoca le efficienti MKL
- Aumentando il livello di ottimizzazione, solitamente le performance migliorano
  - ma é bene testare questo miglioramento per il proprio codice

Uno sguardo all'assembler

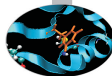


- Esempio datato, utile peró per capire

Matrix Multiply inner loop code with -qnoopt

38 instructions, 31.4 cycles per iteration

```
__L1:
    lwz     r3,160(SP)
    lwz     r9,STATIC_BSS
    lwz     r4,24(r9)
    subfi   r5,r4,-8
    lwz     r11,40(r9)
    mullw   r6,r4,r11
    lwz     r4,36(r9)
    rlwinm  r4,r4,3,0,28
    add     r7,r5,r6
    add     r7,r4,r7
    lfdx    fp1,r3,r7
    lwz     r7,152(SP)
    lwz     r12,0(r9)
    subfi   r10,r12,-8
    lwz     r8,44(r9)
    mullw   r12,r12,r8
    add     r10,r10,r12
    add     r10,r4,r10
    lfdx    fp2,r7,r10
    lwz     r7,156(SP)
    lwz     r10,12(r9)
    subfi   r9,r10,-8
    mullw   r10,r10,r11
    rlwinm  r8,r8,3,0,28
    add     r9,r9,r10
    add     r8,r8,r9
    lfdx    fp3,r7,r8
    fmadd   fp1,fp2,fp3,fp1
    add     r5,r5,r6
    add     r4,r4,r5
    stfdx   fp1,r3,r4
    lwz     r4,STATIC_BSS
    lwz     r3,44(r4)
    addi    r3,1(r3)
    stw     r3,44(r4)
    lwz     r3,112(SP)
    addic.  r3,r3,-1
    stw     r3,112(SP)
    bgt     __L1
```

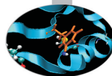


Matrix Multiply inner loop code with -qnoopt

necessary instructions

```
__L1:
    lwz      r3,160(SP)
    lwz      r9,STATIC_BSS
    lwz      r4,24(r9)
    subfi    r5,r4,-8
    lwz      r11,40(r9)
    mullw    r6,r4,r11
    lwz      r4,36(r9)
    rlwinm   r4,r4,3,0,28
    add      r7,r5,r6
    add      r7,r4,r7
    lfdx     fp1,r3,r7
    lwz      r7,152(SP)
    lwz      r12,0(r9)
    subfi    r10,r12,-8
    lwz      r8,44(r9)
    mullw    r12,r12,r8
    add      r10,r10,r12
    add      r10,r4,r10
    lfdx     fp2,r7,r10
    lwz      r7,156(SP)
    lwz      r10,12(r9)
    subfi    r9,r10,-8
    mullw    r10,r10,r11
    rlwinm   r8,r8,3,0,28
    add      r9,r9,r10
    add      r8,r8,r9
    lfdx     fp3,r7,r8
    fmadd    fp1,fp2,fp3,fp1
    add      r5,r5,r6
    add      r4,r4,r5
    stfdx    fp1,r3,r4
    lwz      r4,STATIC_BSS
    lwz      r3,44(r4)
    addi     r3,1(r3)
    stw      r3,44(r4)
    lwz      r3,112(SP)
    addic.   r3,r3,-1
    stw      r3,112(SP)
    bgt      __L1
```

Loop control

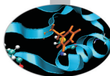


Matrix Multiply inner loop code with -qnoopt

necessary instructions   loop control

```
__L1:
    lwz     r3,160(SP)
    lwz     r9,STATIC_BSS
    lwz     r4,24(r9)
    subfi   r5,r4,-8
    lwz     r11,40(r9)
    mullw   r6,r4,r11
    lwz     r4,36(r9)
    rlwinm  r4,r4,3,0,28
    add     r7,r5,r6
    add     r7,r4,r7
    lfdx    fp1,r3,r7
    lwz     r7,152(SP)
    lwz     r12,0(r9)
    subfi   r10,r12,-8
    lwz     r8,44(r9)
    mullw   r12,r12,r8
    add     r10,r10,r12
    add     r10,r4,r10
    lfdx    fp2,r7,r10
    lwz     r7,156(SP)
    lwz     r10,12(r9)
    subfi   r9,r10,-8
    mullw   r10,r10,r11
    rlwinm  r8,r8,3,0,28
    add     r9,r9,r10
    add     r8,r8,r9
    lfdx    fp3,r7,r8
    fmadd   fp1,fp2,fp3,fp1
    add     r5,r5,r6
    add     r4,r4,r5
    stfdx   fp1,r3,r4
    lwz     r4,STATIC_BSS
    lwz     r3,44(r4)
    addi    r3,1(r3)
    stw     r3,44(r4)
    lwz     r3,112(SP)
    addic.  r3,r3,-1
    stw     r3,112(SP)
    bgt     __L1
```

L'indirizzamento!

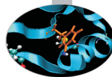


Matrix Multiply inner loop code with -qnoopt

necessary instructions   loop control   addressing code

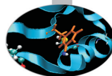
```
__L1:
    lwz     r3,160(SP)
    lwz     r9,STATIC_BSS
    lwz     r4,24(r9)
    subfi   r5,r4,-8
    lwz     r11,40(r9)
    mullw   r6,r4,r11
    lwz     r4,36(r9)
    rlwinm  r4,r4,3,0,28
    add     r7,r5,r6
    add     r7,r4,r7
    lfdx    fp1,r3,r7
    lwz     r7,152(SP)
    lwz     r12,0(r9)
    subfi   r10,r12,-8
    lwz     r8,44(r9)
    mullw   r12,r12,r8
    add     r10,r10,r12
    add     r10,r4,r10
    lfdx    fp2,r7,r10
    lwz     r7,156(SP)
    lwz     r10,12(r9)
    subfi   r9,r10,-8
    mullw   r10,r10,r11
    rlwinm  r8,r8,3,0,28
    add     r9,r9,r10
    add     r8,r8,r9
    lfdx    fp3,r7,r8
    fmadd   fp1,fp2,fp3,fp1
    add     r5,r5,r6
    add     r4,r4,r5
    stfdx   fp1,r3,r4
    lwz     r4,STATIC_BSS
    lwz     r3,44(r4)
    addi    r3,1(r3)
    stw     r3,44(r4)
    lwz     r3,112(SP)
    addic.  r3,r3,-1
    stw     r3,112(SP)
    bgt     __L1
```

Cosa fare?



- Le operazioni dominanti sono quelle di conversione indici indirizzo di memoria
- Osservazioni:
  - il loop “percorre” la memoria sequenzialmente
  - gli indirizzi degli elementi successivi sono calcolabili facilmente sommando una costante
  - sfruttare una conversione indice indirizzo per piú elementi successivi
- Puó essere fatto automaticamente?

Ottimizziamo



Matrix Multiply inner loop code with -O3 -qtune=pwr4

```
__L1:
    fmadd   fp6,fp12,fp13,fp6
    lfdux   fp12,r12,r7
    lfd     fp13,8(r11)
    fmadd   fp7,fp8,fp9,fp7
    lfdux   fp8,r12,r7
    lfd     fp9,16(r11)
    lfdux   fp10,r12,r7
    lfd     fp11,24(r11)
    fmadd   fp1,fp12,fp13,fp1
    lfdux   fp12,r12,r7
    lfd     fp13,32(r11)
    fmadd   fp0,fp8,fp9,fp0
    lfdux   fp8,r12,r7
    lfd     fp9,40(r11)
    fmadd   fp2,fp10,fp11,fp2
    lfdux   fp10,r12,r7
    lfd     fp11,48(r11)
    fmadd   fp4,fp12,fp13,fp4
    lfdux   fp12,r12,r7
    lfd     fp13,56(r11)
    fmadd   fp3,fp8,fp9,fp3
    lfdux   fp8,r12,r7
    lfdu    fp9,64(r11)
    fmadd   fp5,fp10,fp11,fp5
    bdnz    __L1
```

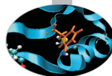
unrolled by 8

dot product accumulated in
8 interleaved parts (fp0-fp7)
(combined after loop)

3 instructions, 1.6 cycles per iteration
2 loads and 1 fmadd per iteration

SCAI
SuperComputing Applications and Innovation

Ottimizziamo di piú



Matrix multiply inner loop code with -O3 -qhot -qtune=pwr4

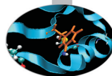
```
__L1:
    fmadd   fp1,fp4,fp2,fp1
    fmadd   fp0,fp3,fp5,fp0
    lfdux   fp2,r29,r9
    lfdu    fp4,32(r30)
    fmadd   fp10,fp7,fp28,fp10
    fmadd   fp7,fp9,fp7,fp8
    lfdux   fp26,r27,r9
    lfd     fp25,8(r29)
    fmadd   fp31,fp30,fp27,fp31
    fmadd   fp6,fp11,fp30,fp6
    lfd     fp5,8(r27)
    lfd     fp8,16(r28)
    fmadd   fp30,fp4,fp28,fp29
    fmadd   fp12,fp13,fp11,fp12
    lfd     fp3,8(r30)
    lfd     fp11,8(r28)
    fmadd   fp1,fp4,fp9,fp1
    fmadd   fp0,fp13,fp27,fp0
    lfd     fp4,16(r30)
    lfd     fp13,24(r30)
    fmadd   fp10,fp8,fp25,fp10
    fmadd   fp8,fp2,fp8,fp7
    lfdux   fp9,r29,r9
    lfdu    fp7,32(r28)
    fmadd   fp31,fp11,fp5,fp31
    fmadd   fp6,fp26,fp11,fp6
    lfdux   fp11,r27,r9
    lfd     fp28,8(r29)
    fmadd   fp12,fp3,fp26,fp12
    fmadd   fp29,fp4,fp25,fp30
    lfd     fp30,-8(r28)
    lfd     fp27,8(r27)
    bdnz      L1
```

unroll-and-jam 2x2
inner unroll by 4
interchange "i" and "j" loops

2 instructions, 1.0 cycles per iteration
balanced: 1 load and 1 fmadd per iteration

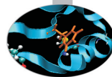
CINECA

Istruzioni macchina



- Istruzioni per `c(i,j) = c(i,j) + a(i,k)*b(k,j)`
- -O0: 24 istruzioni
  - 3 load/1 store
  - 1 floating point multiply+add Flop/istruzione 2/24
- -O2: 9 istruzioni (riuso calcolo indirizzi)
  - 4 load/1 store
  - 2 floating point multiply+add Flop/istruzione 4/9
- -O3: 150 istruzioni (unrolling)
  - 68 load/ 34 store
  - 48 floating point multiply+add Flop/istruzione 96/150
- -O4: 344 istruzioni (unrolling&blocking)
  - 139 load / 74 store
  - 100 floating point multiply+add Flop/istruzione 200/344

Fa tutto il compilatore?



- `-fast` realizza uno speed-up di 30 volte rispetto a `-O0` per il caso matrice-matrice (ifort su PLX)
  - mette in atto una vasta gamma di ottimizzazioni piú o meno complicate
- **Ha senso ottimizzare il codice anche manualmente?**
- Il compilatore sa fare automaticamente
  - Dead code removal: per esempio rimuovere un if

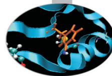
```
b = a + 5.0;
if ((a>0.0) && (b<0.0)) {
    ......
}
```

  - Redudant code removal

```
integer, parameter :: c=1.0
f=c*f
```

- Ma la vita non è sempre così facile

Loop counters: attenzione ai tipi



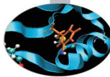
- Usare sempre i tipi corretti
- Usare un real per l'indice dei loop implica una trasformazione implicita reale $\rightarrow$ intero ...
- Secondo i recenti standard Fortran si tratta di un vero e proprio errore, ma i compilatori tendono a tollerarlo

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

Risultati in secondi

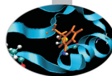
Compilazione	integer	real
(PLX) gfortran -O0	9.96	8.37
(PLX) gfortran -O3	0.75	2.63
(PLX) ifort -O0	6.72	8.28
(PLX) ifort -fast	0.33	1.74
(PLX) pgif90 -O0	4.73	4.85
(PLX) pgif90 -fast	0.68	2.30
(FERMI) bgxlf -O0	64.78	104.10
(FERMI) bgxlf -O5	0.64	12.38

Il compilatore può fare tutto?



- Il compilatore può fare molto . . . ma non è un essere umano
- È piuttosto facile intralciare il suo lavoro
  - corpo del loop troppo lungo
  - loop con i due estremi di iterazione variabili
  - uso eccessivo di costrutti condizionali(if)
  - uso eccessivo di puntatori ed indici
  - uso improprio di variabili intermedie
- Importante:
  - due codici semanticamente uguali possono avere prestazioni ben diverse
  - il compilatore può fare assunzioni erronee ed alterare la semantica

Il compilatore: index reordering



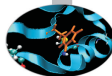
- Per un loop nest semplice ci pensa il compilatore
  - a patto di usare un opportuno livello di ottimizzazione

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

- Tempi in secondi

Compilazione	j-k-i	i-k-j
(PLX) ifort -O0	6.72	21.8
(PLX) ifort -fast	0.34	0.33

Il compilatore: index reordering / 2



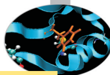
- Per loop nesting piú complicati il compilatore a volte no...
  - anche al piú alto livello di ottimizzazione
  - conoscere il meccanismo di cache é quindi utile!

```
do jj = 1, n, step
   do kk = 1, n, step
      do ii = 1, n, step
         do j = jj, jj+step-1
            do k = kk, kk+step-1
               do i = ii, ii+step-1
                  c(i,j) = c(i,j) + a(i,k)*b(k,j)
               enddo
            enddo
         enddo
      enddo
   enddo
enddo
```

- Tempi in secondi

Compilazione	j-k-i	i-k-j
(PLX) ifort -O0	10	11.5
(PLX) ifort -fast	1.	2.4

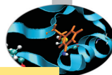
Modularizzazione e cache



```
do i=1,nwax+1
    do k=1,2*nwaz+1
       call diffus (u_1,invRe,qv,rv,sv,K2,i,k,Lu_1)
       call diffus (u_2,invRe,qv,rv,sv,K2,i,k,Lu_2)
....
    end do
 end do


 subroutine diffus (u_n,invRe,qv,rv,sv,K2,i,k,Lu_n)
   do j=2,Ny-1
     Lu_n(i,j,k)=invRe*(2.d0*qv(j-1)*u_n(i,j-1,k)-(2.d0*rv(j-1)
                +K2(i,k))*u_n(i,j,k)+2.d0*sv(j-1)*u_n(i,j+1,k))
   end do
 end subroutine
```

- 5 accessi in memoria contigui in i
- 3 accessi in memoria contigui in j

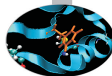
Modularizzazione e cache / 2



```
call diffus (u_1,invRe,qv,rv,sv,K2,Lu_1)
call diffus (u_2,invRe,qv,rv,sv,K2,Lu_2)
....

subroutine diffus (u_n,invRe,qv,rv,sv,K2,i,k,Lu_n)
 do k=1,2*nwaz+1
  do j=2,Ny-1
   do i=1,nwax+1
    Lu_n(i,j,k)=invRe*(2.d0*qv(j-1)*u_n(i,j-1,k)-(2.d0*rv(j-1)
              +K2(i,k))*u_n(i,j,k)+2.d0*sv(j-1)*u_n(i,j+1,k))
   end do
  end do
 end do
end subroutine
```

- Modularizzare cosí permette di avere l'ordine ottimale dei loop
- A volte il compilatore trasforma da solo: in questo caso é richiesto l'"inlining"

Inlining



- Ottimizzazione manuale o effettuata dal compilatore che sostituisce una funzione col suo corpo
  - elimina il costo della chiamata e potenzialmente l'instruction cache
  - rende piú facile l'ottimizzazione interprocedurale
- In C e C++ la keyword **`inline`** é un "suggerimento"
- Non ogni funzione é "inlinable" e in ogni caso dipende dalle capacitá del compilatore
  - oltre che dalle capacitá del programmatore
- Intel (n: 0=disable, 1=secondo la keyword, 2=se opportuno)

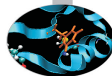
```
-inline-level=n
```

- GNU (n: size, default is 600):

```
-finline-functions
-finline-limit=n
```

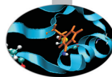
- In alcuni compilatori automaticamente attivate ad alti livelli di ottimizzazione

Common Subexpression Elimination



- Per i calcoli intermedi si riusano spesso alcune espressioni: può essere vantaggioso riciclare quantità già calcolate:
  A= B+C+D
  E= B+F+C
- Richiede: 4 load,2 store, 4 somme
  A=(B+C) + D
  E=(B+C) + F
- Richiede: 4 load, 2 store, 3 somme
- Attenzione: dal punto di vista numerico il risultato non é necessariamente identico
- Se la locazione di un array é acceduta piú di una volta puó convenire effettuare lo “Scalar replacement”
  - ad opportune ottimizzazioni il compilatore puó farlo

Funzioni e Side Effects



- Lo scopo “primo” di una funzione é in genere dare un valore in ritorno
  - a volte, per vari motivi, peró non é cosí
  - la modifica di varaibili passate, o globali o anche l’I/O si chiamano comunque side effects (effetti collaterali)
- La presenza di funzioni con side effects può inibire il compilatore dal fare ottimizzazioni
- Se:

```
function f(x)
   f=x+dx
end
```

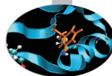
allora `f(x)+f(x)+f(x)` puó essere valutato come `3*f(x)`

- Se:

```
function f(x)
   x=x+dx
   f=x
end
```

allora la precedente valutazione non é piú corretta

CSE e chiamate a funzione



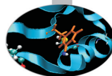
- Alterando l'ordine delle chiamate il compilatore non sa se si altera il risultato (possibili effetti collaterali)
- 5 chiamate a funzioni, 5 prodotti:

```
x=r*sin(a)*cos(b);
y=r*sin(a)*sin(b);
z=r*cos(a);
```

- 4 chiamate a funzioni, 4 prodotti (1 variabile temporanea):

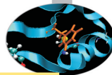
```
temp=r*sin(a)
x=temp*cos(b);
y=temp*sin(b);
z=r*cos(a);
```

CSE: limitazioni



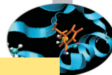
- Core loop troppo grossi:
  - il compilatore lavora su finestre di dimensioni finite: potrebbe non accorgersi di una grandezza da riutilizzare
- Funzioni:
  - se altero l'ordine delle chiamate ottengo lo stesso risultato?
- Ordine e valutazione:
  - solo ad alti livelli di ottimizzazione il compilatore altera l'ordine delle operazioni (**`-qnostrict`** per IBM)
  - per inibirla in certe espressioni: mettere le parantesi (il programmatore ha sempre ragione)
- Aumenta l'uso di registri per l'appoggio dei valori intermedi ("register spilling")

Cosa può fare il compilatore?



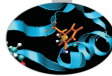
```
do k=1,n3m
   do j=n2i,n2do
      jj=my_node*n2do+j
      do i=1,n1m
         acc =1./(1.-coe*aciv(i)*(1.-int(forclo(nve,i,j,k))))
         aci(jj,i)= 1.
         api(jj,i)=-coe*apiv(i)*acc*(1.-int(forclo(nve,i,j,k)))
         ami(jj,i)=-coe*amiv(i)*acc*(1.-int(forclo(nve,i,j,k)))
         fi(jj,i)=qcap(i,j,k)*acc
     enddo
   enddo
enddo
...
...
do i=1,n1m
   do j=n2i,n2do
      jj=my_node*n2do+j
      do k=1,n3m
         acc =1./(1.-coe*ackv(k)*(1.-int(forclo(nve,i,j,k))))
         ack(jj,k)= 1.
         apk(jj,k)=-coe*apkv(k)*acc*(1.-int(forclo(nve,i,j,k)))
         amk(jj,k)=-coe*amkv(k)*acc*(1.-int(forclo(nve,i,j,k)))
         fk(jj,k)=qcap(i,j,k)*acc
      enddo
   enddo
enddo
```

Probabilmente questo



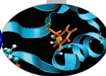
```
do k=1,n3m
   do j=n2i,n2do
      jj=my_node*n2do+j
      do i=1,n1m
         temp = 1.-int(forclo(nve,i,j,k))
         acc =1./(1.-coe*aciv(i)*temp)
         aci(jj,i)= 1.
         api(jj,i)=-coe*apiv(i)*acc*temp
         ami(jj,i)=-coe*amiv(i)*acc*temp
         fi(jj,i)=qcap(i,j,k)*acc
      enddo
   enddo
enddo
...
...
do i=1,n1m
   do j=n2i,n2do
      jj=my_node*n2do+j
      do k=1,n3m
         temp = 1.-int(forclo(nve,i,j,k))
         acc =1./(1.-coe*ackv(k)*temp)
         ack(jj,k)= 1.
         apk(jj,k)=-coe*apkv(k)*acc*temp
         amk(jj,k)=-coe*amkv(k)*acc*temp
         fk(jj,k)=qcap(i,j,k)*acc
      enddo
   enddo
enddo
```

Ma non questo



```
do k=1,n3m
   do j=n2i,n2do
      do i=1,n1m
         temp_fact(i,j,k) = 1.-int(forclo(nve,i,j,k))
      enddo
   enddo
enddo
...
...
do i=1,n1m
   do j=n2i,n2do
      jj=my_node*n2do+j
      do k=1,n3m
         temp = temp_fact(i,j,k)
         acc =1./(1.-coe*ackv(k)*temp)
         ack(jj,k)= 1.
         apk(jj,k)=-coe*apkv(k)*acc*temp
         amk(jj,k)=-coe*amkv(k)*acc*temp
         fk(jj,k)=qcap(i,j,k)*acc
      enddo
   enddo
enddo
...
...
!  idem per l'altro loop
```

Array syntax



- Traslazione dei primi due indici di un array a tre indici (512^3)
- Il “caro vecchio” loop (stile Fortran 77): 0.19 secondi
  - l’ordine dei cicli negli indici che traslano é inverso alla traslazione per evitare di “sporcare” i dati della matrice

```
do k = nd, 1, -1
  do j = nd, 1, -1
    do i = nd, 1, -1
      a03(i,j,k) = a03(i-1,j-1,k)
    enddo
  enddo
enddo
```

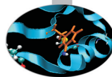
- Array syntax (stile Fortran 90): 0.75 secondi
  - secondo lo standard, le cose vanno “come se il membro a destra fosse tutto valutato prima di effettuare le operazioni richieste”

```
a03(1:nd, 1:nd, 1:nd) = a03(0:nd-1, 0:nd-1, 1:nd)
```

- Array syntax con un hint al compilatore: 0.19 secondi

```
a03(nd:1:-1,nd:1:-1,nd:1:-1) = a03(nd-1:0:-1, nd-1:0:-1, nd:1:-1)
```

Report di ottimizzazione



- Per capirne di piú in questo come in altri casi é bene attivare le flag di report di ottimizzazione
- Con Intel ifort attivare

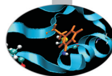
```
-opt-report[n]     n=0(none),1(min),2(med),3(max)
-opt-report-file<file>
-opt-report-phase<phase>
-opt-report-routine<routine>
```

- Le tre modalitá sono alle righe 55,64,69 rispettivamente

```
Loop at line:55 simple MEMOP Intrinsic disabled-->SIMPLE reroll
Loop at line:64 memcopy generated
Loop at line:69 simple MEMOP Intrinsic disabled-->SIMPLE reroll
```

- Tutto questo é ovviamente molto dipendente dal compilatore

Report di ottimizzazione / 2



- Purtroppo non é presente un opzione equivalente con compilatori GNU
  - La migliore alternativa é specificare

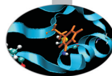
    ```
    -fdump-tree-all
    ```

    in modo che vengano stampate tutte le fase intermedie di compilazione
  - ma la lettura non é decisamente agevole
- Con il compilatore PGI

  ```
  -Minfo=accel,inline,ipa,loop,lre,mp,opt,par,unified,vect
  ```

  oppure senza opzioni per averle tutte

Dare informazioni al compilatore



- Estremi del loop noti a compile time o solo a run-time:
  - puó inibire alcune ottimizzazioni, tra cui l'unrolling

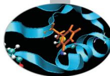
```
real a(1:1024,1:1024)
real b(1:1024,1:1024)
real c(1:1024,1:1024)
...
read(*,*) i1,i2
read(*,*) j1,j2
read(*,*) k1,k2
...
do j = j1, j2
do k = k1, k2
do i = i1, i2
c(i,j)=c(i,j)+a(i,k)*b(k,j)
enddo
enddo
enddo
```

- Tempi in secondi (Loop Bounds Compile-Time o Run-Time)

Compilazione	LB-CT	LB-RT
(PLX) ifort -O0	6.72	9
(PLX) ifort -fast	0.34	0.75

- Molto dipendente dal tipo di loop, dal compilatore, etc.

Allocazione statica o dinamica ?

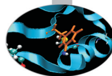


- Potenzialmente l'allocazione statica puó dare al compilatore piú informazioni per ottimizzare
  - a prezzo di un codice piú rigido
  - l'elasticitá permessa dall'allocazione dinamica é particolarmente utile nel calcolo parallelo

```
integer :: n
parameter(n=1024)
real a(1:n,1:n)
real b(1:n,1:n)
real c(1:n,1:n)
```

```
real, allocatable, dimension(:,:) :: a
real, allocatable, dimension(:,:) :: b
real, allocatable, dimension(:,:) :: c
print*,'Enter matrix size'
read(*,*) n
allocate(a(n,n),b(n,n),c(n,n))
```

Allocazione statica o dinamica ? / 2



- Per i compilatori recenti peró spesso le prestazioni statica vs dinamica si equivalgono
  - per il semplice matrice-matrice l'allocazione dinamica gestisce meglio i loop bounds letti da input

Compilazione	statica	dinamica	dinamica-LBRT
(PLX) ifort -O0	6.72	18.26	18.26
(PLX) ifort -fast	0.34	0.35	0.36

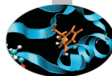
- L'allocazione statica viene fatta nella memoria cosiddetta "stack"
  - in compilazione possono esserci dei limiti di utilizzo per cui occorre specificare l'opzione **-mcmodel=medium**
  - a run-time assicurarsi che sul nodo la stack non sia limitata (se si usa bash)

```
ulimit -a
```

ed eventualmente

```
ulimit -s unlimited
```

Allocazione dinamica in C



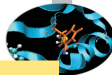
- C non conosce matrici ma array di array
  - l'allocazione statica garantisce allocazione contigua di tutti i valori

```
   double A[nrows][ncols];
```

- Con l'allocazione dinamica occorre fare attenzione
  - "the wrong way" (= non efficiente)

```
/* Allocate a double matrix with many malloc */
double** allocate_matrix(int nrows, int ncols) {
   double **A;
   /* Allocate space for row pointers */
   A = (double**) malloc(nrows*sizeof(double*) );
   /* Allocate space for each row */
   for (int ii=1; ii<nrows; ++ii) {
      A[ii] = (double*) malloc(ncols*sizeof(double));
   }
   return A;
}
```

Allocazione dinamica in C / 2



- Si puó allocare un array lineare

```
/* Allocate a double matrix with one malloc */
double* allocate_matrix_as_array(int nrows, int ncols) {
   double *arr_A;
   /* Allocate enough raw space */
   arr_A = (double*) malloc(nrows*ncols*sizeof(double));
   return arr_A;
}
```

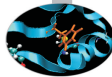
- e usarlo come una matrice (linearizzazione dell'indice)

```
arr_A[i*ncols+j]
```

- le MACROs possono aiutare
- e, eventualmente aggiungere una matrice di puntatori che puntano all'array allocato

```
/* Allocate a double matrix with one malloc */
double** allocate_matrix(int nrows, int ncols, double* arr_A) {
   double **A;
   /* Prepare pointers for each matrix row */
   A = new double*[nrows];
   /* Initialize the pointers */
   for (int ii=0; ii<nrows; ++ii) {
      A[ii] = &(arr_A[ii*ncols]);
   }
   return A;
}
```

Aliasing e Restrict

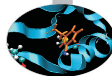


- In C, se due puntatori puntano ad una stessa area di memoria, si parla di “aliasing”
- Il rischio di aliasing puó **molto** limitare l’ottimizzazione del compilatore
  - difficile invertire l’ordine delle operazioni
  - particolarmente per gli argomenti passati a una funzione
- Lo standard C99 introduce la keyword **`restrict`** per indicare che l’aliasing non é possibile

```
void saxpy(int n, float a, float *x, float* restrict y)
```

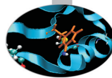
- In C++, si assume che l’aliasing non possa avvenire tra puntatori a tipi diversi (strict aliasing)

Aliasing e Restrict / 2



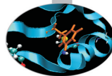
- Il Fortran assume che gli argomenti di procedure non possano puntare a identiche aree di memoria
  - tranne che per gli array per i quali gli indici permettono comunque un'analisi corretta
  - o per i **`pointer`** che peró vengono usati ove necessario
  - un motivo per cui il Fortran spesso ottimizza meglio del C!
- I compilatori permettono di configurare le assunzioni dell'aliasing (vedere il man)
  - GNU (solo strict-aliasing): **`-fstrict-aliasing`**
  - Intel (eliminazione completa): **`-fno-alias`**
  - IBM (no overlap per array): **`-qalias=noaryovrlp`**

Non solo compilatore



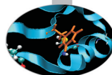
- Il compilatore ha associata una runtime library
- Contiene funzioni chiamate esplicitamente
  - funzioni trigonometriche e trascendenti
  - manipolazioni di bit
  - funzioni Input Output (C)
- Contiene funzioni chiamate implicitamente
  - funzioni Input Output (Fortran)
  - operatori complessi del linguaggio
  - routine di utilità generiche, gestione eccezioni, . . .
  - routine di supporto ad un particolare modello di calcolo (OpenMP, UPC, GAF)
- Può essere fondamentale per le prestazioni
  - qualità dell'implementazione
  - funzioni matematiche accurate vs. veloci

Input/Output



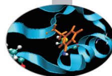
- È sempre mediato dal sistema operativo
  - causa chiamate di sistema
  - comporta lo svuotamento della pipeline
  - distrugge la coerenza dei dati in cache
  - può alterare la priorità di scheduling
  - è lento
- Regolo d'oro n.1: MAI mescolare calcolo intensivo con I/O
- Regolo d'oro n.2: leggere/scrivere i dati in blocco, non pochi per volta
- Attenzione ad I/O nascosti: swapping
  - avviene quando la RAM è insufficiente
  - usa il disco come surrogato
  - unica soluzione: fuggirlo come la peste

Ci sono più modi di fare I/O



```
do k=1,n  ;  do j=1,n  ;  do i=1,n
write(69,*) a(i,j,k)                                 ! formattato
enddo     ;  enddo     ;  enddo

do k=1,n  ;  do j=1,n  ;  do i=1,n
write(69) a(i,j,k)                                   ! binario
enddo     ;  enddo     ;  enddo

do k=1,n  ;  do j=1,n
write(69) (a(i,j,k),i=1,n)                           ! colonne
enddo     ;  enddo

do k=1,n
write(69) ((a(i,j,k),i=1),n,j=1,n)                   ! matrice
enddo

write(69) (((a(i,j,k),i=1,n),j=1,n),k=1,n)           ! blocco

write(69) a                                          ! dump
```

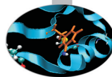
Con prestazioni differenti



Opzione	secondi	Kbyte
formattato	81.6	419430
binario	81.1	419430
colonne	60.1	268435
matrice	0.66	134742
blocco	0.94	134219
dump	0.66	134217

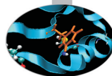
- Il file-system e anche il suo utilizzo hanno un notevole impatto sui tempi

I/O riassumendo



- La lettura/scrittura dei dati formattati è lenta
- Leggere/scrivere i dati in formato binario
- Leggere/scrivere in un blocco e non uno per volta
- Scegliere il file system più efficiente a disposizione
- I buffer di scrittura possono nascondere latenze
- Ma l'impatto sul calcolo sarà comunque devastante
- Attenzione al dump di array in caso di padding
- Soprattutto per il calcolo parallelo:
  - usare librerie di I/O: MPI-I/O, HDF5, NetCDF,...

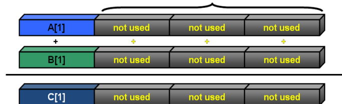
Unitá vettoriali



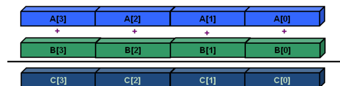
- Da non confondere con le macchine vettoriali!
- Le unitá vettoriali lavorano con set di istruzioni SIMD e circuiti dedicati a operazioni floating-point simultanee
  - Intel MMX (1996), AMD 3DNow! (1998), Intel SSE (1999) che aggiungono nuovi registri e possibilitá floating point
  - Nuove istruzioni (packet) SSE2, SSE3, SSE4, AVX
- Esempio di vettorizzazione: addizione di due array a 4 componenti puó diventare una singola istruzione

```
c(0) = a(0) + b(0)
c(1) = a(1) + b(1)
c(2) = a(2) + b(2)
c(3) = a(3) + b(3)
```

non vettorizzato

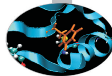


vettorizzato



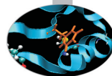
- L'esecuzione SSE é sincrona

Evoluzione unitá SIMD



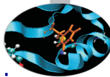
- SSE: registri a 128 bit (intel Core - AMD Opteron)
  - 4 operazioni floating/integer in singola precisione
  - 2 operazioni floating/integer in doppia precisione
- AVX: registri a 256 bit (intel Sandy Bridge - AMD Bulldozer)
  - 8 operazioni floating/integer in singola precisione
  - 4 operazioni floating/integer in doppia precisione
- MIC: registri a 512 bit (Intel Knights Corner - 2013)
  - 16 operazioni floating/integer in singola precisione
  - 8 operazioni floating/integer in doppia precisione

Vettorizzazione



- La vettorizzazione dei loop puó incrementare drammaticamente le performance
- Ma per essere vettorizzabili, i loop devono obbedire a certi criteri
- E il programmatore deve aiutare il compilatore a verificarli
- Anzitutto, l'assenza di dipendenza tra i dati di diverse iterazioni
  - circostanza frequente ma non troppo in ambito HPC
- Altri criteri
  - Countable (numero delle iterate costante)
  - Single entry-single exit (nessun break or exit)
  - Straight-line code (nessun branch a meno di implementazioni come assegnazione di mask)
  - Deve essere il loop interno di nest
  - Nessuna chiamata a funzione (eccetto quelle matematiche o quelle inlined)
- AVX puó essere una sorgente di risultati diversi in calcolo numerico (e.g., Fused Multiply Addiction)

Algoritmi e vettorizzazione



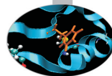
- Differenti algoritmi per lo stesso scopo possono comportarsi diversamente rispetto alla vettorizzazione
  - Gauss-Seidel: dipendenza tra le iterazioni, non vettorizzabile

```
for( i = 1; i < n-1; ++i )
  for( j = 1; j < m-1; ++j )
    a[i][j] = w0 * a[i][j] +
      w1*(a[i-1][j] + a[i+1][j] + a[i][j-1] + a[i][j+1]);
```

- Jacobi: nessuna dipendenza tra le iterazioni, vettorizzabile

```
for( i = 1; i < n-1; ++i )
  for( j = 1; j < m-1; ++j )
     b[i][j] = w0*a[i][j] +
       w1*(a[i-1][j] + a[i][j-1] + a[i+1][j] + a[i][j+1]);
for( i = 1; i < n-1; ++i )
  for( j = 1; j < m-1; ++j )
     a[i][j] = b[i][j];
```

Ottimizzazione e vettorizzazione



- Alcuni comuni “coding tricks” possono impedire la vettorizzazione
  - vettorizzabile

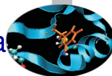
```
for( i = 0; i < n-1; ++i ){
   b[i] = a[i] + a[i+1];
}
```

  - `x` a una certa iterazione é necessaria per lo step successivo

```
x = a[0];
for( i = 0; i < n-1; ++i ){
  y = a[i+1];
  b[i] = x + y;
  x = y;
}
```

- Quando si compila é bene controllare se la vettorizzazione é stata attivata
- In caso contrario, si puó provare ad aiutare il compilatore
  - modificando il codice per renderlo vettorizzabile
  - inserendo direttive per forzare la vettorizzazione

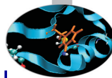
Direttive di vettorizzazione



- Se il programmatore ha certezza che una certa dipendenza riscontrata dal compilatore sia in realtá solo apparente puó forzare la vettorizzazione con direttive “compiler dependent”
  - Intel Fortran: **`!DIR$ simd`**
  - Intel C: **`#pragma simd`**
- Poiché **`inow`** é diverso da **`inew`**, la dipendenza é solo apparente

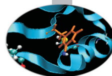
```
62     do k = 1,n
63!DIR$ simd
        do i = 1,l
...
66          x02 = a02(i-1,k+1,inow)
67          x04 = a04(i-1,k-1,inow)
68          x05 = a05(i-1,k  ,inow)
            x06 = a06(i  ,k-1,inow)
            x11 = a11(i+1,k+1,inow)
            x13 = a13(i+1,k-1,inow)
72          x14 = a14(i+1,k  ,inow)
73          x15 = a15(i  ,k+1,inow)
74          x19 = a19(i  ,k  ,inow)
75
76          rho =+x02+x04+x05+x06+x11+x13+x14+x15+x19
...
126         a05(i,k,inew) = x05 - omega*(x05-e05) + force
127         a06(i,k,inew) = x06 - omega*(x06-e06)
```

Hands-on: Vettorizzazione



- Confrontare le performance con e senza vettorizzazione del loop presente nel programma **`simple_loop.f90`** con i compilatori PGI e Intel
  - usando **`-fast`**, per disabilitare la vettorizzazione specificare le opzioni **`-Mnovect`** or **`-no-vec`**, rispettivamente
- Il programma **`vectorization_test.f90`** contiene 18 loops con differenti condizioni paradigmatiche
  - provare a predire quale loop é vettorizzabile, quale no e le relative cause
  - verificare le proprie assunzioni con il compilatore PGI, attivando le ottimizzazioni e il reporting **`-fast -Minfo`**
  - ripetere con il compilatore Intel e le opzioni **`-fast -opt-report3 -vec-report3`**
  - qualche idea per rendere qualche loop vettorizzabile?
  - per inciso, usando GNU l'opzione é **`-ftree-vectorizer-verbose=n`**

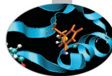
Hands-on: Vettorizzazione / 2



	PGI	Intel
Vectorized time		
Non-Vectorized time		

# Loop	# Description	Vect/Not	PGI	Intel
1	Simple			
2	Short			
3	Previous			
4	Next			
5	Double write			
6	Reduction			
7	Function bound			
8	Mixed			
9	Branching			
10	Branching-II			
11	Modulus			
12	Index			
13	Exit			
14	Cycle			
15	Nested-I			
16	Nested-II			
17	Function			
18	Math-Function			

Vettorizzazione manuale

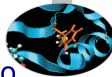


- É possibile istruire direttamente il codice delle funzioni vettoriali da utilizzare
- In pratica, si tratta di scrivere un loop che fa quattro iterazioni alla volta usando registri e operazioni vettoriali, ed essere pratici con le “mask”

```
void scalar(float* restrict result,
            const float* restrict v,
            unsigned length)
{
  for (unsigned i = 0; i < length; ++i)
  {
    float val = v[i];
    if (val >= 0.f)
      result[i] = sqrt(val);
    else
      result[i] = val;
  }
}
```

```
void sse(float* restrict result,
         const float* restrict v,
         unsigned length)
{
  __m128 zero = _mm_set1_ps(0.f);

  for (unsigned i = 0; i <= length - 4; i += 4)
  {
    __m128 vec  = _mm_load_ps(v + i);
    __m128 mask = _mm_cmpge_ps(vec, zero);
    __m128 sqrt = _mm_sqrt_ps(vec);
    __m128 res  =
         _mm_or_ps(_mm_and_ps(mask, sqrt),
         _mm_andnot_ps(mask, vec));
    _mm_store_ps(result + i, res);
  }
}
```

Parallelizzazione automatica



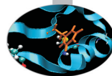
- Alcuni compilatori offrono opzioni per sfruttare il parallelismo architetturale delle macchina (e.g., i cores) senza modificare il codice sorgente
- Shared Memory Parallelism (solo intra-nodo)
- Simile a OpenMP ma non richiede direttive
  - performance attese piú limitate
- Intel:

```
-parallel
-par-threshold[n] - set loop count threshold
-par-report{0|1|2|3}
```

- IBM:

```
-qsmp                   la abilita automaticamente
-qsmp=openmp:noauto     per disabilitare la
                        parallelizzazione automatica
```

Outline

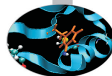


Compilatori e ottimizzazione

Librerie scientifiche

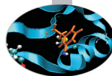
Floating Point Computing

Librerie statiche e dinamiche



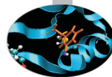
- Una libreria puó essere statica o dinamica
  - entrambe sono richieste in fase di compilazione aggiungendo **`-L<directory_libreria> -l<nome_libreria>`**
- Libreria statica:
  - estensione **`.a`**
  - tutti i simboli oggetti della libreria vengono inclusi nell'eseguibile al momento del linking
  - se si crea una libreria che si appoggia ad un'altra non include i suoi simboli: l'eseguibile dovrá linkare tutte le librerie in cascata
  - eseguibile piú efficiente
- Libreria dinamica:
  - estensione **`.so`**
  - richiede di specificare la directory in cui cercare la librerie in fase di esecuzione (per esempio settando la variabile di ambiente **`LD_LIBRARY_PATH`**)
  - **`ldd <nome_eseguibile>`** dice le librerie dinamiche richieste dall'eseguibile
  - eseguibile piú snello

Librerie scientifiche



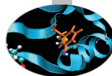
- Le librerie sono insiemi di funzioni che implementano una varietá di algoritmi, spesso numerici.
- Operazioni aritmetiche di basso livello (e.g. prodotto scalare o numeri casuali), ma anche algoritmi piú complicati (trasformata di Fourier o diagonalizzazione di matrici)
- Le performance delle migliori librerie sono difficilmente superabili da un utente ordinario
- A volte ottimizzate in assembler
- Libere o proprietarie
- Occorre fare attenzione ad utilizzare la migliore libreria possibile per una certa coppia compilatore-libreria

Vantaggi e svantaggi



- Vantaggi:
  - migliorano la modularitá
  - standardizzazione
  - portabilitá
  - efficienza
  - pronte all’uso
- Svantaggi:
  - dettagli nascosti
  - spesso non si sa cosa si usa
  - troppa fiducia nell’implementazione

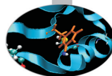
Panomarica



- Difficile avere una panoramica completa
  - tante tipologie
  - e uno scenario in continua evoluzione
  - anche per le nuove architetture in arrivo (GPU)

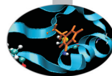
- Tipologie di uso comune
  - algebra lineare
  - fft
  - input-output
  - calcolo parallelo
  - mesh decomposition
  - suite

Algebra lineare



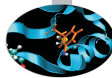
- Per applicazioni massive é cruciale il tipo di parallelizzazione
  - alcune sono giá fornite multi-threaded o anche parallele a memoria distribuita
- Memoria condivisa
  - BLAS
  - GOTOBLAS
  - LAPACK/CLAPACK/LAPACK++
  - ATLAS
  - PLASMA
  - SuiteSparse
- Memoria distribuita
  - Blacs (solo suddivisione)
  - ScaLAPACK
  - PSBLAS
  - Elemental

BLAS



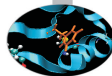
- BLAS: Basic Linear Algebra Subprograms
  - la Basic Linear Algebra Subprograms é tra le prime librerie scritte (1979), in origine per calcolatori con architettura vettoriale
  - comprende operazioni elementari tra vettori e matrici come il prodotto scalare e la moltiplicazione tra scalari, vettori, matrici, anche in forma trasposta
  - é utilizzata da numerose librerie di livello piú alto, perció ne sono state prodotte diverse versioni, ottimizzate per varie piattaforme di calcolo
- 3 livelli
  - BLAS liv. 1 subroutine Fortran per il calcolo di operazioni di base scalare-vettore. Sono la conclusione di un progetto terminato nel 1977
  - BLAS liv. 2 operazioni vettore-matrice. Scritte tra il 1984 e 1986
  - BLAS liv. 3 subroutine Fortran per operazioni matrice-matrice, disponibili dal 1988

BLAS / 2



- Le subroutine BLAS si applicano a dati reali e complessi, in semplice o doppia precisione
- Operazioni scalare-vettore (O(n))
  - SWAP scambio vettori
  - COPY copia vettori
  - SCAL cambio fattore di scala
  - NRM2 norma L2
  - AXPY somma: Y + A*X
- Operazioni vettore-matrice ($O(n^2)$)
  - GEMV prodotto vettore/matrice generica
  - HEMV prodotto vettore/matrice hermitiana
  - SYMV prodotto vettore/matrice simmetrica

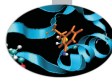
BLAS / 3



- Operazioni matrice-matrice ($O(n^3)$)
  - GEMM prodotto matrice/matrice generica
  - HEMM prodotto matrice/matrice hermitiana
  - SYMM prodotto matrice/matrice simmetrica

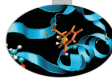
- GOTOBLAS
  - Kazushige Goto, un ricercatore del Texas Advanced Computing Center (University of Texas at Austin), ha ottimizzato manualmente in assembler le subroutine BLAS per diversi supercomputer

LAPACK & Co.



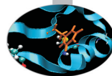
- LAPACK: Linear Algebra PACKage
  - evoluzione di LINPACK e EISPACK
  - soluzione di problemi di algebra lineare, tra cui sistemi di equazioni lineari, problemi di minimi quadrati, autovalori
- ATLAS: Automatically Tuned Linear Algebra Software
  - implementazione BLAS e di alcune routine di LAPACK efficiente grazie alla procedura di autotuning che avviene durante l'installazione
- PLASMA: Parallel Linear Algebra Software for Multi-core Architectures
  - soluzione di sistemi lineari, progettate per essere efficienti su processori multi-core, funzionalitá simili a LAPACK ma piú limitate
- SuiteSparse
  - collezione di pacchetti per matrici sparse

Ancora algebra lineare



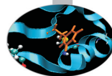
- Calcolo di autovalori/autovettori
  - EISPACK: calcolo di autovalori e autovettori, con versioni specializzate per matrici di diversi tipi, reali e complesse, hermitiane, simmetriche, tridiagonali
  - ARPACK: problemi agli autovalori di grandi dimensioni. La versione parallela é un'estensione della libreria classica e usa le librerie BLACS e MPI
- Algebra lineare a memoria distribuita
  - BLACS: linear algebra oriented message passing interface
  - ScaLAPACK: Scalable Linear Algebra PACKage
  - Elemental: framework per algebra lineare densa
  - PSBLAS: Parallel Sparse Basic Linear Algebra Subroutines
  - SLEPc: problemi agli autovalori

Input/Output



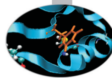
- Le librerie di I/O risultano particolarmente utili per
  - interoperabilitá: C/Fortran, Little Endian/Big Endian,...
  - visualizzazione
  - analisi di sub-set
  - metadati
  - I/O parallelo
- HDF5: “is a data model, library, and file format for storing and managing data”
- NetCDF: “NetCDF is a set of software libraries and self-describing, machine-independent data formats that support the creation, access, and sharing of array-oriented scientific data”
- VTK: “open-source, freely available software system for 3D computer graphics, image processing and visualization”

Librerie per calcolo parallelo e mesh



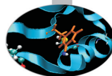
- MPI: Message Passing Interface
  - standard piú diffuso per la parallelizzazione in memoria distribuita
  - implementazioni piú importanti come librerie: MPICH e OpenMPI
- Decomposizione di mesh
  - METIS e ParMETIS: “can partition a graph, partition a finite element mesh, or reorder a sparse matrix”
  - Scotch e PT-Scotch: “sequential and parallel graph partitioning, static mapping and clustering, sequential mesh and hypergraph partitioning, and sequential and parallel sparse matrix block ordering”

Suite per il calcolo scientifico



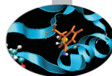
- Trilinos
  - collezione di algoritmi in stile object-oriented per la soluzione di problemi scientifici e ingegneristici multi-fisica
  - struttura a due livelli concepita attorno a collezione di “package” sviluppati da diversi esperti in materia (precondizionatori, solutori non lineari,...)
- PETSc
  - strutture dati e funzioni per la soluzione su calcolatori paralleli di equazioni alle derivate parziali
  - include solutori per equazioni lineari, non lineari e integratori ODE
  - utilizza MPI per realizzare il parallelismo e permette di sviluppare programmi che richiedono ingenti risorse computazionali

Versioni specializzate



- MKL: Intel Math Kernel Library
  - Major functional categories include Linear Algebra, Fast Fourier Transforms (FFT), Vector Math and Statistics. Cluster-based versions of LAPACK and FFT are also included to support MPI-based distributed memory computing.
- ACML: AMD Core Math Library
  - Libreria di funzioni altamente ottimizzate per processori AMD. Include tra l'altro BLAS, LAPACK, FFT, Random Generators
- GSL: GNU Scientific Library
  - The library provides a wide range of mathematical routines such as random number generators, special functions and least-squares fitting. There are over 1000 functions in total with an extensive test suite.
- ESSL (IBM): Engineering and Scientific Subroutine library
  - BLAS, LAPACK, ScaLAPACK, solutori sparsi, FFT e altro. La versione parallela utilizza MPI.

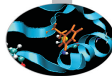
Chiamare le librerie



- Per utilizzare le librerie nei programmi é necessario innanzitutto che la sintassi di chiamata delle funzioni sia corretta
- Inoltre in fase di generazione dell'eseguibile é indispensabile fornire tutte le indicazioni necessarie per l'individuazione della versione corretta della libreria
- Spesso nel caso di librerie proprietarie esistono modalitá di compilazione e linking specifiche
- Puó non essere banale, e.g. Intel ScaLAPACK

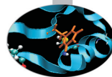
```
mpif77 <programma> -L$MKLROOT/lib/intel64 \
   -lmkl_scalapack_lp64  -lmkl_blacs_openmpi \
   -lmkl_intel_lp64 -lmkl_intel_thread -lmkl_core \
   -liomp5 -lpthread
```

Librerie: Interoperabilitá



- Molte librerie scientifiche sono scritte in C, molte in Fortran
- Chiamare le funzioni di libreria da un linguaggio diverso dall'originario puó dare qualche difficoltá
  - matching dei tipi: l'**`int`** del C non é garantito corrispondere all'**`integer`** del Fortran
  - matching dei simboli: Fortran e C++ deformano i nomi dei simboli sorgenti nel produrre gli oggetti
- Problema affrontato in modo un po' "rozzo" fino a non molto tempo fa
  - tentando di matchare i tipi e aggiungendo gli _ necessari per matchare con gli oggetti della libreria
  - il comando **`nm <file_oggetto>`** elenca i simboli ivi contenuti
  - alcune librerie fornivano a questo scopo wrapper giá pronti
- Problema affrontato in modo efficace nello standard Fortran 2003 (modulo **`iso_c_binding`**)
  - librerie piú importanti forniscono le interfacce Fortran 2003
- In C++ vedere il comando **`extern "C"`**

Librerie: Interoperabilitá / 2

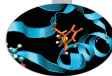


- Per chiamare librerie scritte in C dal Fortran o viceversa
- **mpi** scritta in C/C++:
  - vecchia modalitá : **include "mpif.h"**
  - nuova modalitá: **use mpi**
  - non sono del tutto equivalenti: usare il modulo vuol dire avere il check dei tipi a compile-time
- **fftw** scritta in C
  - legacy : **include "fftw3.f"**
  - modern:

```
use iso_c_binding
include 'fftw3.f03'
```

  - di nuovo: la versione moderna offre maggiori potenzialitá
- **BLAS** scritte in Fortran
  - legacy : chiamare **dgemm_**
  - modern: chiamare **cblas_dgemm**
- Purtroppo ancora poca standardizzazione
  - studiare il manuale e tentare di essere standard o almeno portabile

BLAS: Interoperabilitá / 1



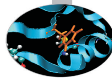
- Argomenti delle funzioni sul sito “netlib”

```
http://www.netlib.org/blas/
```

- Poiché le BLAS sono scritte in Fortran 77, anche dal Fortran alcuni compilatori rendono disponibili interfacce per chiamarle in sicurezza (check dei tipi) e con le features del Fortran 95 (assumed shape arrays e argomenti opzionali)
  - Con Intel e MKL

```
use mkl95_blas
```

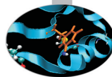
BLAS: Interoperabilitá / 2



- C (modalitá legacy):
  - aggiungere l'underscore ai nomi delle funzioni
  - poiché il Fortran passa tutti gli argomenti per reference, é necessario sempre passare i puntatori
  - assumere matching dei tipi (compiler dependent): probabilmente **`double`**, **`int`**, **`char`** per **`double precision`**, **`integer`**, **`character`**
  - ma l'ordinamento di array multidimensionali verrá trasposto!
- C (modalitá moderna)
  - usare le interafcce **`cblas`**: le GSL di GNU o le MKL di Intel le forniscono
  - in effetti le GSL includono anche l'implementazione delle BLAS (non solo wrapper)
  - includere l'header **`#include <gsl.h>`** o **`#include<mkl.h>`**
  - rispettare la sintassi (si puó specificare l'ordinamento delle matrici)

http://www.gnu.org/software/gsl/manual/html_node/GSL-CBLAS-Library.html

Hands-on: BLAS



- Sostituire il codice matrice-matrice di matrixmul con una chiamata a `DGEMM`, la routine BLAS che esegue il prodotto matrice-matrice in doppia precisione
- `DGEMM` esegue (l'operatore `op` consente trasposizioni)

```
C := alpha*op( A )*op( B ) + beta*C,
```

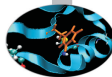
- Argomenti della `DGEMM` : `http://www.netlib.org/blas/dgemm.f`
- Fortran: GNU, BLAS efficienti sono le `acml`, nelle versioni:
  - `gfortran64` (seriali)
  - `gfortran64_mp` (multi-thread)

```
module load profile/advanced
module load gnu/4.7.2 acml/5.3.0--gnu--4.7.2
gfortran -O3 -L$ACML_HOME/gfortran64/lib/ -lacml matrixmulblas.F90
export LD_LIBRARY_PATH=$LD_LIBRARY_PATH:$ACML_HOME/gfortran64/lib/
```

- Fortran: Intel, BLAS efficienti sono le proprietarie MKL
  - `sequential` (seriali)
  - `parallel` (multi-thread)

```
module load profile/advanced
module load intel/cs-xe-2013--binary
ifort -O3 -mkl=sequential matrixmulblas.F90
```

Hands-on: BLAS / 2



- C: compilatore Intel (MKL con cblas)
  - includere l'header file `#include<mkl.h>` nel sorgente
  - provare `-mkl=sequential` e `-mkl=parallel`

```
module load profile/advanced
module load intel/cs-xe-2013--binary
icc -O3 -mkl=sequential matrixmulblas.c
```

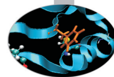
- C: compilatore GNU (GSL con cblas)
  - includere l'header file `#include <gsl/gsl_cblas.h>` nel sorgente

```
module load profile/advanced
module load gnu/4.7.2 gsl/1.15--gnu--4.7.2
gcc -O3 -L$GSL_HOME/lib -lgslcblas matrixmulblas.c -I$GSL_INCLUDE
```

  - Confrontare le performance con quelle ottenibili con `-O3`/`-fast`
- Provare anche le versioni multithreaded: osservazioni?
- Riportare i **GFlop** e considerare matrici 4096x4096 (risultati piú stabili)

GNU -O3	Intel -fast	GNU-ACML/GSL seq	Intel-MKL seq
—	Intel -fast -parallel	GNU-ACML par	Intel-MKL par
—			

Si puó andare oltre?

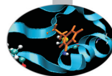


- GPU...

blas + cublas MPI
blas + cublas
cublas 3.2 (magmablas 0.3)
cublas 3.1
shared memory hand-made GPU
naive hand-made GPU (cache a 48Kb)
PGI accelerator
mkl, 12 thread
unrolling+padding, ifort -fast
naive 12 thread, ifort -fast
mkl
unrolling+padding, ifort -fast
naive, ifort -fast

0 50 100 150 200 250 300 350 400 450

Outline

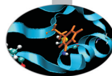


Compilatori e ottimizzazione

Librerie scientifiche

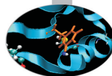
Floating Point Computing

Why talking about data formats?



- The “numbers” used in computers are different from the “usual” numbers
- Some differences have known consequences
  - size limits
  - numerical stability
  - algorithm robustness
- Other differences are often misunderstood
  - portability
  - exceptions
  - surprising behaviours with arithmetic

Bits and Integers



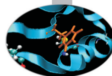
- Computers usually handle bits
- An integer number n may be stored as a sequence of bits
- Of course, you have a range

$$-2^{r-1} \leq n \leq 2^{r-1} - 1$$

- Two common sizes
  - 32 bit: range $-2^{31} \leq n \leq 2^{31} - 1$
  - 64 bit: range $-2^{63} \leq n \leq 2^{63} - 1$
- Languages allow for declaring different flavours of integers
  - select the type you need compromizing on avoiding overflow and saving memory
- Is it difficult to have an integer overflow?
  - consider a cartesian discretization mesh $(1536 \times 1536 \times 1536)$ and a linearized index i

$$0 \leq i \leq 3623878656 > 2^{31} = 2147483648$$

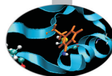
Bits and Integers / 2



- Fortran “officially” does not let you specify the size of declared data
  - you request **`kind`** and the language do it for you
  - in principle very good, but interoperability must be considered with attention
  - and the underlying types are usually just a few of “well known” types

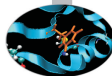
- C standard types do not match exact sizes, too
  - look for **`int`**, **`long int`**, **`unsigned int`**, ...
  - **`char`** is an 8 bit integer
  - unsigned integers available, doubling the maximum value $0 \leq n \leq 2^r - 1$

Bits and Reals



- Note: From now on, some examples will consider base 10 numbers just for readability
- Representing reals using bits is not natural
- Fixed size approach
  - select a fixed point corresponding to comma
  - e.g., with 8 digits and 5 decimal places 36126234 gets interpreted as 361.26234
- Cons:
  - limited range: from 0.00001 to 999.99999, spanning 10^8
  - only numbers having at most 5 decimal places can be exactly represented
- Pros:
  - constant resolution, i.e. the distance from one point to the closest one (0.00001)

Floating point approach

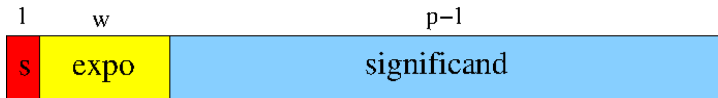


- Consider scientific notation

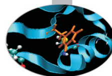
$$n = (-1)^s \cdot m \cdot \beta^e$$

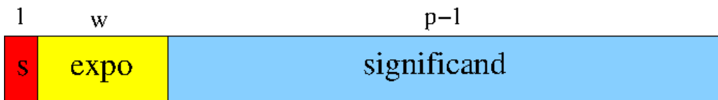
$$0.0046367 = (-1)^0 \cdot 4.6367 \cdot 10^{-3}$$

- Represent it using bits reserving
  - one digit for sign s
  - "p-1" digits for significand (mantissa) m
  - "w" digits for exponent e



Exponent and Significand

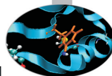


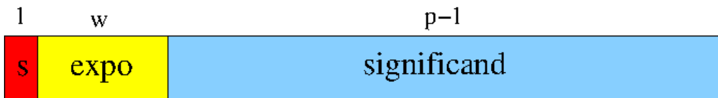


- Exponent
  - unsigned biased exponent
  - $e_{min} \leq e \leq e_{max}$
  - e_{min} must be equal to $(1 - e_{max})$
- Mantissa
  - precision p, the digits x_i are $0 \leq x_i < \beta$
  - "hidden bit" format used for normal values: 1.xx...x

IEEE Name	Format	Storage Size	w	p	e_{min}	e_{max}
Binary32	Single	32	8	24	-126	+127
Binary64	Double	64	11	53	-1022	+1023
Binary128	Quad	128	15	113	-16382	+16383

Mantissa



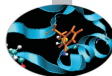


- Cons:
  - only “some” real numbers are floating point numbers (see later)
- Pros:
  - constant relative resolution (relative precision), each number is represented with the same *relative error* which is the distance from one point to the closest one divided by the number (see later)
  - wide range: “normal” positive numbers from $10^{e_{min}}$ to $9,999..9 \cdot 10^{e_{max}}$
- The representation is unique assuming the mantissa is

$$1 \leq m < \beta$$

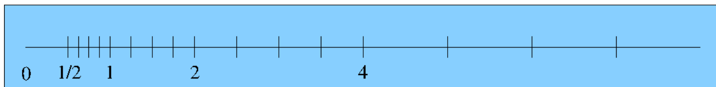
i.e. using “normal” floating-point numbers

Resolution

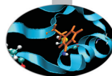


- The distance among “normal” numbers is not constant
- E.g., $\beta = 2$, $p = 3$, $e_{min} = -1$ and $e_{max} = 2$:
  - 16 positive “normalized” floating-point numbers

```
e = -1 ; m = 1 + [0:1/4:2/4:3/4] ==> [4/8:5/8:6/8:7/8]
e =  0 ; m = 1 + [0:1/4:2/4:3/4] ==> [4/4:5/4:6/4:7/4]
e = +1 ; m = 1 + [0:1/4:2/4:3/4] ==> [4/2:5/2:6/2:7/2]
e = +2 ; m = 1 + [0:1/4:2/4:3/4] ==> [4/1:5/1:6/1:7/1]
```



Relative Resolution



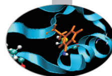
- What does it mean “constant relative resolution”?
- Given a number $N = m \cdot \beta^{e}$ the nearest number has distance

$$R = \beta^{-(p-1)}\beta^{e}$$

  - E.g., given $3.536 \cdot 10^{-6}$, the nearest (larger) number is $3.537 \cdot 10^{-6}$ having distance $0.001 \cdot 10^{-6}$
- The relative resolution is (nearly) constant (considering $m \simeq \beta/2$)

$$\frac{R}{N} = \frac{\beta^{-(p-1)}}{m} \simeq 1/2\beta^{-p}$$

Intrinsic Error

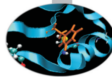


- Not any real number can be expressed as a floating point number
  - because you would need a larger exponent
  - or because you would need a larger precision
- The resolution is directly related to the intrinsic error
  - if $p = 4$, 3.472 may approximate numbers between 3.4715 and 3.4725, its intrinsic error is 0.0005
  - the instrinsic error is (less than) $(\beta/2)\beta^{-p}\beta^{e}$
  - the relative intrinsic error is

$$\frac{(\beta/2)\beta^{-p}}{m} \leq (\beta/2)\beta^{-p} = \varepsilon$$

  - The intrinsic error ε is also called “machine epsilon” or “relative precision”

Measuring error



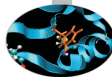
- When performing calculations, floating-point error may propagate and exceed the intrinsic error

```
real value              = 3.14145
correctly rounded value = 3.14
current value           = 3.17
```

- The most natural way to measure rounding error is in “ulps”, i.e. units in the last place
  - e.g., the error is 3 ulps
- Another interesting possibility is using “machine epsilon”, which is the relative error corresponding to 0.5 ulps

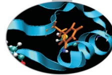
```
relative error   = 3.17-3.14145 = 0.02855
machine epsilon  = 10/2*0.001   = 0.005
relative error   = 5.71 ε
```

Handling errors



- Featuring a constant relative precision is very useful when dealing with rescaled equations
- Beware:
  - 0.2 has just one decimal digit using radix 10, but is periodic using radix 2
  - periodicity arises when the fractional part has prime factors not belonging to the radix
  - by the way, in Fortran if `a` is double precision, `a=0.2` is badly approximated (use `a=0.2d0` instead)
- Beware overflow!
  - you think it will not happen with your code but it may happen
  - exponent range is symmetric: if possibile, perform calculations around 1 is a good idea

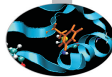
Types features



IEEE Name	min	max	ε	C	Fortran
Binary32	1.2E-38	3.4E38	5.96E-8	float	real
Binary64	2.2E-308	1.8E308	1.11E-16	double	real(kind(1.d0))
Binary128	3.4E-4932	1.2E4932	9.63E-35	long double	real(kind=...)

- There are also “double extended” type and parametrized types
- Extended and quadruple precision devised to limit the round-off during the double calculation of trascendental functions and increase overflow
- Extended and quad support depends on architecture and compiler: often emulated and, hence, slow!
- Decimal with 32, 64 and 128 bits are defined by standards, too
- FPU are usually “conformant” but not “compliant”
- To be safe when converting binary to text specify 9 decimals for single precision and 17 decimal for double

Error propagation



- Assume $p = 3$ and you have to compute the difference $1.01 \cdot 10^1 - 9.93 \cdot 10^0$
- To perform the subtraction, usually a shift of the smallest number is performed to have the same exponent
- First idea: compute the difference exactly and then round it to the nearest floating-point number

$$x = 1.01 \cdot 10^1 \quad ; \quad y = 0.993 \cdot 10^1$$

$$x - y = 0.017 \cdot 10^1 = 1.70 \cdot 10^{-2}$$

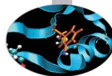
- Second idea: compute the difference with $\mathbf{p}$ digits

$$x = 1.01 \cdot 10^1 \quad ; \quad y = 0.99 \cdot 10^1$$

$$x - y = 0.02 \cdot 10^1 = 2,00 \cdot 10^{-2}$$

the error is 30 ulps!

Guard digit



- A possibile solution: use the guard digit (p+1 digits)

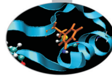
$$x = 1.010 \cdot 10^1$$

$$y = 0.993 \cdot 10^1$$

$$x - y = 0.017 \cdot 10^1 = 1.70 \cdot 10^{-2}$$

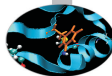
- Theorem: if x and y are floating-point numbers in a format with parameters and p, and if subtraction is done with p + 1 digits (i.e. one guard digit), then the relative rounding error in the result is less than 2 ε.

Cancellation



- When subtracting nearby quantities, the most significant digits in the operands match and cancel each other
- There are two kinds of cancellation: catastrophic and benign
  - benign cancellation occurs when subtracting exactly known quantities: according to the previous theorem, if the guard digit is used, a very small error results
  - catastrophic cancellation occurs when the operands are subject to rounding errors
- For example, consider $b = 3.34$, $a = 1.22$, and $c = 2.28$.
  - the exact value of $b^2 - 4ac$ is 0.0292
  - but b^2 rounds to 11.2 and $4ac$ rounds to 11.1, hence the final answer is 0.1 which is an error by $70 ulps$
  - the subtraction did not introduce any error, but rather exposed the error introduced in the earlier multiplications.

Cancellation / 2

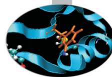


- The expression $x^2 - y^2$ is more accurate when rewritten as $(x - y)(x + y)$ because a catastrophic cancellation is replaced with a benign one
  - replacing a catastrophic cancellation by a benign one may be not worthwhile if the expense is large, because the input is often an approximation
- Eliminating a cancellation entirely may be worthwhile even if the data are not exact
- Consider second-degree equations

$$x_1 = \frac{-b + \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a}$$

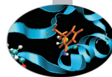
  - if $b^2 >> ac$ then $b^2 - 4ac$ does not involve a cancellation
  - but, if $b > 0$ the addition in the formula will have a catastrophic cancellation.
  - to avoid this, multiply the numerator and denominator of x_1 by $-b - \sqrt{b^2 - 4ac}$ to obtain $x_1 = (2c)/(-b - \sqrt{b^2 - 4ac})$ where no catastrophic cancellation occurs

Rounding and IEEE standards



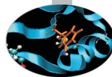
- The IEEE standards requires correct rounding for:
  - addition, subtraction, mutiplication, division, remainder, square root
  - conversions to/from integer
- The IEEE standards recommends correct rounding for:
  - e^x, $e^x - 1$, 2^x, $2^x - 1$, $\log_\alpha(\phi)$, $1/\sqrt(x)$, $sin(x)$, $cos(x)$, $tan(x)$,....
- Remember: “No general way exists to predict how many extra digits will have to be carried to compute a transcendental expression and round it correctly to some preassigned number of digits” (W. Kahan)

Special values

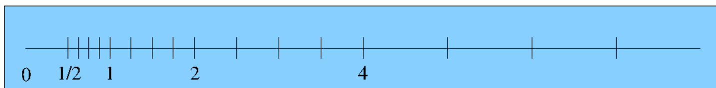


- Zero: signed
- Infinity: signed
  - overflow, divide by 0
  - Inf-Inf, Inf/Inf, $0 \cdot$ Inf $\rightarrow$ NaN (indeterminate)
  - Inf op a $\rightarrow$ Inf if a is finite
  - a / Inf $\rightarrow$ 0 if a is finite
- NaN: not a number!
  - Quiet NaN or Signaling NaN
  - e.g. $\sqrt{a}$ with $a < 0$
  - NaN op a $\rightarrow$ NaN or exception
  - NaNs do not have a sign: they aren't a number
  - The sign bit is ignored
  - NanS can "carry" information

Zero and Denormals

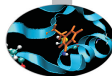


- Considering positve numbers, the smallest ”normal” floating point number is $n_{smallest} = 1.0 \cdot \beta^{e_{min}}$
- In the previous example it is $1/2$



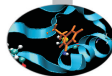
- At least we need to add the zero value
  - there are two zeros: **+0** and **−0**
- When a computation result is less than the minimum value, it could be rounded to zero or to the minimum value

Zero and Denormals / 2



- Another possibility is to use denormal (also called subnormal) numbers
  - decreasing mantissa below 1 allows to decrease the floating point number, e.g. $0.99 \cdot \beta^{e_{min}}, 0.98 \cdot \beta^{e_{min}}, \ldots, 0.01 \cdot \beta^{e_{min}}$
  - subnormals are linearly spaced and allow for the so called "gradual underflow"
- Pro: $k/(a-b)$ may be safe (depending on k) even is $a-b < 1.0 \cdot \beta^{e_{min}}$
- Con: performance of denormals are significantly reduced (dramatic if handled only by software)
- Some compilers allow for disabling denormals
  - Intel compiler has **`-ftz`**: denormal results are flushed to zero
  - automatically activated when using any level of optimization!

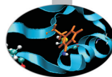
Walking Through



- Double precision: w=11 ; p=53

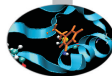
```
0x0000000000000000  +zero
0x0000000000000001  smallest subnormal
...
0x000fffffffffffff  largest subnormal
0x0010000000000000
...
0x001fffffffffffff  smallest normal
0x0020000000000000  2 X smallest normal
...
0x7fefffffffffffff  largest normal
0x7ff0000000000000  +infinity
```

Walking Through



```
0x7ff0000000000001  NaN
...
0x7fffffffffffffff  NaN
0x8000000000000000  -zero
0x8000000000000001  negative subnormal
...
0x800fffffffffffff  'largest' negative subnormal
0x8010000000000000  'smallest' negative normal
...
0xfff0000000000000  -infinity
0xfff0000000000001  NaN
...
0xffffffffffffffff  NaN
```

Error-Free Transformations

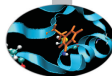


- An error-free transformation (EFT) is an algorithm which determines the rounding error associated with a floating-point operation
- E.g., addition/subtraction

$$a + b = (a \oplus b) + t$$

  where $\oplus$ is a symbol for floating-point addition
- Under most conditions, the rounding error is itself a floating-point number
- **An EFT can be implemented using only floating-point computations in the working precision**

EFT for Addition



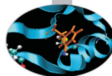
- FastTwoSum: compute $a + b = s + t$ where

$$|a| \geq |b|$$

$$s = a \oplus b$$

```
void FastTwoSum( const double a, const double b,
                 double* s, double* t ) {
            // No unsafe optimizations !
            *s = a + b;
            *t = b - ( *s - a );
            return;
      }
```

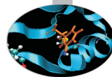
EFT for Addition / 2



- No requirements on *a* or *b*
- Beware: avoid compiler unsafe optimizations!

```
void TwoSum( const double a, const double b,
                  double* s, double* t ) {
             // No unsafe optimizations !
             *s = a + b;
             double z = *s - b;
             *t = (a-z)+(b-s-z));return;
```

Summation techniques

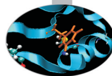


- Condition number

$$C_{sum} = \frac{|\sum a_i|}{\sum |a_i|}$$

- If C_{sum} is “ not too large”, the problem is not ill conditioned and traditional methods may suffice
- But if it is “too large”, we want results appropriate to higher precision without actually using a higher precision
- But if higher precision is available, consider to use it!
  - beware: quadruple precision is nowadays only emulated

Traditional summation

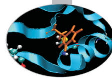


$$s = \sum_{i=0}^{n} x_i$$

```
double Sum( const double* x, const int n ) {
   int i;
   for ( i = 0; i < n; i++ ) {
      Sum += x[ i ];
   }
   return Sum;
}
```

- Traditional Summation: what can go wrong?
  - catastrophic cancellation
  - magnitude of operands nearly equal but signs differ
  - loss of significance
  - small terms encountered when running sum is large
  - the smaller terms don't affect the result
  - but later large magnitude terms may reduce the running sum

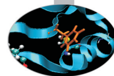
Kahan summation



- Based on FastTwoSum and TwoSum techniques
- Knowledge of the exact rounding error in a floating-point addition is used to correct the summation
- Compensated Summation

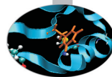
```
double Kahan( const double* a, const int n ) {
   double s = a[ 0 ];          //  sum
   double t = 0.0;             //  correction term
   for(int i=1; i<n ; i++) {
       double y = a[ i ] - t;  //  next term "plus" correction
       double z = s + y;       //  add to accumulated sum
       t = ( z - s ) - y;      //  t <- -( low part of y )
       s = z;                  //  update sum
   }
   return s;
}
```

More



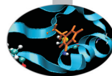
- Many variations known (Knutht, Priest,...)
- Sort the values and sum starting from smallest values (for positive numbers)
- Other techniques (distillation)
- Use a greater precision or emulate it (long accumulators)
- Similar problems for Dot Product, Polynomial evaluation,...

Exceptions (IEEE 754-2008)



- Underflow
  - Absolute value of a non zero result is less than the minimum value (i.e., it is subnormal or zero)
- Overflow
  - Magnitude of a result greater than the largest finite value
  - Result is $\pm\infty$
- Division by zero
  - a/b where a is finite and non zero and b=0
- Inexact
  - Result, after rounding, is not exact
- Invalid
  - an operand is sNaN, square root of negative number or combination of infinity

Handling exceptions



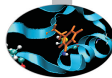
- Let us say you may produce a NaN
- What do you want to do in this case?

- First scenario: go on, there is no error and my algorithm is robust
- E.g., the function **`maxfunc`** compute the maximum value of a scalar function $f(x)$ testing each function value corresponding to the grid points **`g(i)`**

```
call maxfunc(f,g)
```

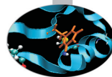
  - to be safe I should pass the domain of f but the it could be difficult to do
  - I may prefer to check each grid point **`g(i)`**
  - if the function is not defined somewhere, I will get a NaN (or other exception) but I do not care: the maximum value will be correct

Handling exceptions / 2



- Second scenario: ops, something went wrong during the computation...
- (Bad) solution: complete your run and check the results and, if you see NaN, throw it away
- (First) solution: trap exceptions using compiler options (usually systems ignore exception as default)
- Some compilers allow to enable or disable floating point exceptions
  - Intel compiler: **`-fpe0`**: Floating-point invalid, divide-by-zero, and overflow exceptions are enabled. If any such exceptions occur, execution is aborted.
  - GNU compiler: **`-ffpe-trap=zero,overflow,invalid,underflow`**
- very useful, but the performance loss may be material!
- use only in debugging, not in production stage

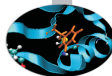
Handling exceptions / 3



- (Second) solution: check selectively
  - each N_{check} time-steps
  - the most dangerous code sections
- Using language features to check exceptions or directly special values (NaNs,...)
  - the old print!
  - Fortran (2003): from module **`ieee_arithmetic`**, **`ieee_is_nan(x)`**, **`ieee_is_finite(x)`**
  - C: from **`<math.h>`**, **`isnan`** or **`isfinite`**, from C99 look for **`fenv.h`**
  - do not use old style checks (compiler may remove them):

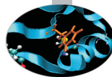
```
int IsFiniteNumber(double x) {
    return (x <= DBL_MAX && x >= -DBL_MAX);
}
```

Floating-point control



- Why doesn't my application always give the same answer?
  - inherent floating-point uncertainty
  - we may need reproducibility (porting, optimizing,...)
  - accuracy, reproducibility and performance usually conflict!
- Compiler safe mode: transformations that could affect the result are prohibited, e.g.
  - $x/x = 1.0$, false if $x = 0.0, \infty, NaN$
  - $x - y = -(y - x)$ false if $x = y$, zero is signed!
  - $x - x = 0.0$ ...
  - $x * 0.0 = 0.0$ ...

Floating-point control / 2

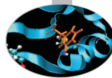


- An important case: reassociation is not safe with floating-point numbers
  - $(x + y) + z = x + (y + z)$: reassociation is not safe
  - compare

$$-1.0+1.0e-13+1.0 \;=\; 1.0-1.0+1.0e-13 \;=\; 1.0e-13+1.0-1.0$$

  - $a * b/c$ may give overflow while $a * (b/c)$ does not
- Best practice:
  - select the best expression form
  - promote operands to the higher precision (operands, not results)

Floating-point control / 3



- Compilers allow to choose the safety of floating point semantics
- GNU options (high-level):

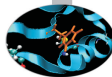
```
-f[no-]fast-math
```

  - It is off by default (different from icc)
  - Also sets abrupt/gradual underflow (FTZ)
  - Components control similar features, e.g. value safety (`-funsafe-math-optimizations`)

- For more detail

```
http://gcc.gnu.org/wiki/FloatingPointMath
```

Floating-point control / 4



- Intel options:

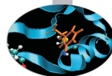
```
-fp-model <type>
```

  - fast=1: allows value-unsafe optimizations (**default**)
  - fast=2: allows additional approximations
  - precise: value-safe optimizations only
  - strict: precise + except + disable fma

- Also pragmas in C99 standard

```
#pragma STDC FENV_ACCESS etc
```

Endianness

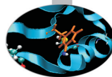


- Which is the ordering of bytes in memory? E.g.,

```
-1267006353 ===> 10110100011110110000010001101111
```

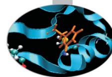
  - Big endian: `10110100 01111011 00000100 01101111`
  - Little endian: `01101111 00000100 01111011 10110100`
  - Other exotic layouts (VAX,...) nowadays unusual
  - Limits portability
- Possibile solutions
  - conversion binary to text and text to binary
  - compiler extensions(Fortran):
    - HP Alpha, Intel: -convert big_endian | little_endian
    - PGI: -byteswapio
    - Intel, NEC: F_UFMTENDIAN (variabile di ambiente)
  - explicit reoredering
  - conversion libraries

C and Fortran data portability



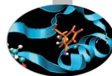
- For C Standard Library a file is written as a stream of byte
- In Fortran file is a sequence of records:
  - each read/write refer to a record
  - there is record marker before and after a record (32 or 64 bit depending on file system)
  - remember also the different array layout from C and Fortran
- Possible portability solutions:
  - read Fortran records from C
  - perform the whole I/O in the same language (usually C)
  - use Fortran 2003 **`access='stream'`**
  - use I/O libraries

How much precision do I need?



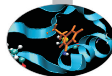
- Single, Double or Quad?
  - maybe single is too much!
  - computations get (much) slower when increasing precision, storage increases and power supply too
- Famous story
  - Patriot missile incident (2/25/91) . Failed to stop a scud missile from hitting a barracks, killing 28
  - System counted time in 1/10 sec increments which doesn't have an exact binary representation. Over time, error accumulates.
  - The incident occurred after 100 hours of operation at which point the accumulated errors in time variable resulted in a 600+ meter tracking error.
- **Wider floating point formats turn compute bound problems into memory bound problems!**

How much precision do I need? / 2



- Programmers should conduct mathematically rigorous analysis of their floating point intensive applications to validate their correctness
- Training of modern programmers often ignores numerical analysis
- Useful tricks
  - Repeat the computation with arithmetic of increasing precision, increasing it until a desired number of digits in the results agree
  - Repeat the computation in arithmetic of the same precision but rounded differently, say Down then Up and perhaps Towards Zero, then compare results
  - Repeat computation a few times in arithmetic of the same precision but with slightly different input data, and see how widely results vary

Interval arithmetic

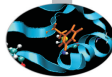


- A “correct” approach
- Interval number: possible values within a closed set

$$\mathbf{x} \equiv [x_L, x_R] := \{x \in \mathbb{R} | x_L \leq x \leq x_R\}$$

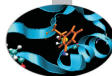
  - e.g., 1/3=0.33333 ; 1/3 $\in$ [0.3333,0.3334]
- Operations
  - Addition x + y = [a, b] + [c, d] = [a + c, b + d]
  - Subtraction x + y = [a, b] + [c, d] = [a -d, b -c]
  - ...
- Properties are interesting and can be applied to equations
- Interval Arithmetic has been tried for decades, but often produces bounds too loose to be useful
- A possible future
  - chips supporting variable precision and uncertainty tracking
  - runs software at low precision, tracks accuracy and reruns computations automatically if the error grows too large.

References



- N.J. Higham, Accuracy and Stability of Numerical Algorithms 2nd ed., SIAM, capitoli 1 e 2
- D. Goldberg, What Every Computer Scientist Should Know About Floating-Point Arithmetic, ACM C.S., vol. 23, 1, March 1991 http://docs.oracle.com/cd/E19957-01/806-3568/ncg_goldberg.html
- W. Kahan http://www.cs.berkeley.edu/ wkahan/
- Standards: http://grouper.ieee.org/groups/754/

Hands-on: Compensated sum



- The code in **`summation.cpp/f90`** initializes an array with an ill-conditioned sequence of the order of

```
100,-0.001,-100,0.001,.....
```

- Simple and higher precision summation functions are implemented
- Implement Kahan algorithm in C++ or Fortran
- Compare the accuracy of the results