

Paralelização do cálculo de estrutura de bandas usando o Portland HPF

Rodrigo Daniel Malara e Guilherme Matos Sipahi

malara@sc.usp.br e sipahi@if.sc.usp.br

Grupo de Instrumentação e Informática

Instituto de Física de São Carlos - USP

O trabalho em andamento no Grupo de Instrumentação e Informática do Instituto de Física da USP de São Carlos consiste em se estudar uma extensão padronizada da linguagem Fortran 90 chamada HPF (High Performance Fortran) em suas várias versões (1.0, 1.1 e 2.0) e em avaliar a plataforma de portabilidade HPF através do uso de suas diretivas e qualificadores de procedimentos para efetuar a paralelização do programa seqüencial de cálculo de estruturas de bandas de valência de semicondutores codificado em Fortran 90. Este trabalho ainda tem por objetivo estudar e aprimorar o algoritmo visando otimizar o tempo de execução seqüencial e em paralelo.

O HPF permite a paralelização de programas escritos em Fortran que possam ser executados de acordo com o paradigma SPMD (Single Program Multiple Data) que implicam no emprego do paralelismo por dados, ou seja, um único programa será utilizado em diversos processadores. Cada processador ficará responsável por processar uma parte dos dados. Uma grande vantagem do HPF é que as diretivas são dispostas na forma de comentários em um código que pode ser compilado para executar seqüencialmente. Caso seja necessário que ele seja executado em paralelo, basta compilá-lo com um compilador HPF mais adequado a arquitetura destino. Ao se mudar de arquitetura, bastaria se mudar de compilador HPF (ou se adicionar opções na linha de comando de compilação) e o próprio compilador se encarregaria de gerar o código paralelizado mais adequado para a arquitetura alvo.

Embora o processo se pareça muito simples, a paralelização de um programa utilizando o HPF não é tão trivial. Existem muitas maneiras de se escrever um programa que gere o mesmo resultado e os compiladores disponíveis não são capazes de identificar todas elas, o que já é um fato esperado. Além disso, os compiladores estudados não geram mensagens de erro que sirvam como subsídio para guiar o desenvolvedor a escrever seu código de maneira que o compilador consiga paralelizá-lo. Fica a cargo do desenvolvedor possuir a paciência e imaginação suficientes para implementar diferentes tentativas com a esperança de se conseguir que o compilador paralelize o seu programa.

De acordo com os dados de profiling produzidos por várias execuções das variantes MPI, HPF e seqüencial sobre um problema de pequeno porte (o tempo de execução da variante seqüencial foi de cerca de 22 minutos), foi possível verificar que o speedup atingido pela variante HPF é aproximadamente da mesma ordem de grandeza do speedup conseguido para a variante MPI. Este resultado é interessante, pois após vencida a curva de aprendizado do HPF, ele se torna uma ótima opção para se paralelizar programas que podem explorar o paralelismo por dados. Através de uma instrumentação fina do código pôde-se observar que os trechos que executam em paralelo apresentam o mesmo ganho de desempenho para um mesmo número de processadores tanto para programa HPF quanto para o MPI.

Referências

Foster, I. Designing and Building Parallel Programs. 1a. ed. Boston, MA, USA: Addison Wesley Publishing Company, 1995