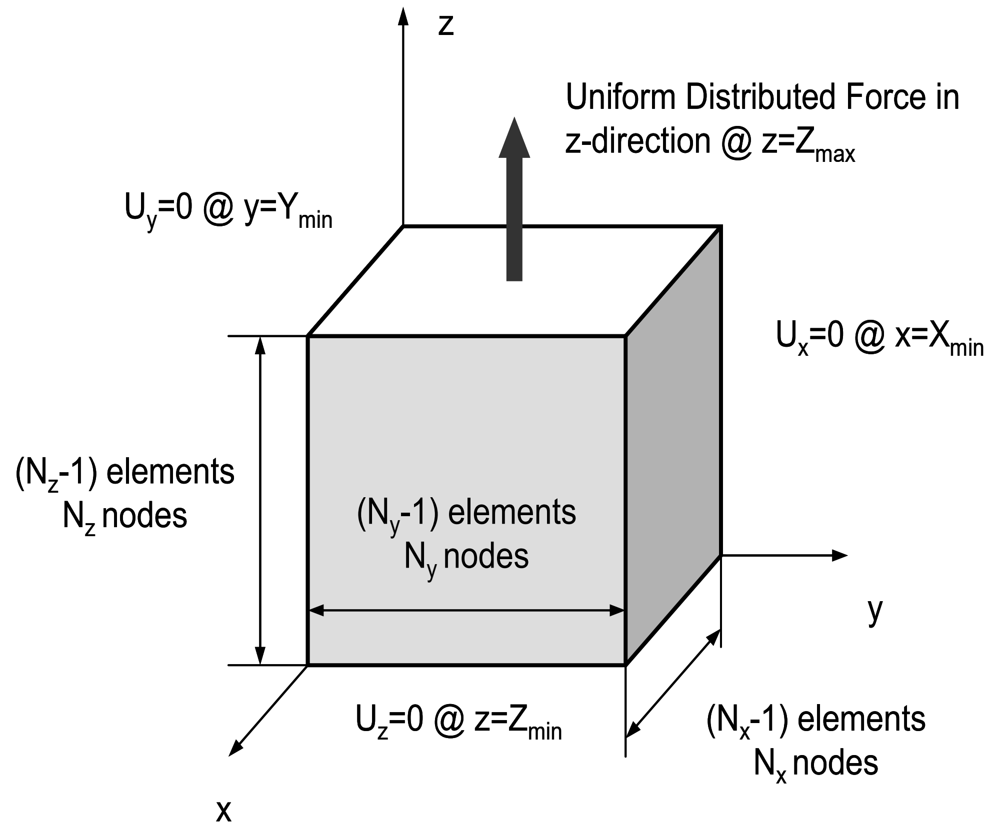
# 通信と計算のオーバーラップ
# Communication-Computation Overlapping

中島研吾
東京大学情報基盤センター

# 対象とする問題




- 境界条件
  - 対称条件
    - $U_X=0@X=0$
    - $U_Y=0@Y=0$
    - $U_Z=0@Z=0$
  - 等分布荷重
    - $F_Z=1@Z=Z_{max}$

- 弾性体
  - ヤング率：E (=1.00)，ポアソン比：ν (=0.30)
- 直方体
  - 一辺長さ1の立方体（六面体）要素
  - 各方向にNX・NY・NZ個の節点

# プログラムの概要

- 三次元弾性問題
  - 3×3ブロック処理
- 前処理無しCG法
- Hybrid

- 並列分散メッシュをプログラム内で自動生成
  - 予めメッシュ生成，領域分割等の必要ナシ
- CG法の行列ベクトル積部に「計算と通信のオーバーラップ」を導入
  - SEND_RECV：通信量少ない，実質的には呼び出し～立ち上がりのオーバーヘッド（latency）がほとんど

# ファイルコピー ＋コンパイル

## Fortranのみ

```
>$ cd ~/pFEM

>$ cp /home/S11502/nakajima/16Summer/cc-overlap.tar .

>$ tar xvf cc-overlap.tar

>$ cd cc-overlap/src0
>$ make
>$ cd ../src0m
>$ make
>$ cd ../src0m2
>$ make

>$ cd ../run
>$ ls -l sol*
   sol0            計算-通信オーバーラップ無し
   sol0m           計算-通信オーバーラップ有り
   sol0m_xxx       ＋ dynamic scheduling
```

# 実 行

## Fortranのみ

```
>$ cd ~/pFEM/cc-overlap/run
```

修正するファイル

| | |
|---|---|
| mesh.inp | 問題設定 |
| go00.sh | sol0実行用スクリプト |
| go0m.sh | sol0m実行用スクリプト |
| go0m2.sh | sol0m_XXX実行用スクリプト |

# “mesh.inp”の中身：Hybrid 16×1

| (値) | | | (変数名) | (変数内容) |
|---|---|---|---|---|
| 400 | 400 | 600 | npx,npy,npz | p.2のNx，Ny，Nz |
| 2 | 2 | 3 | ndx,ndy,ndz | X，Y，Z軸方向の分割数 |
| 16 | 1 | | PEsmpTOT,(unused) | 各MPIプロセスにおけるスレッド数(=1)，未使用（1を入れる） |
| 200 | | | ITERmax | CG法の反復回数 |

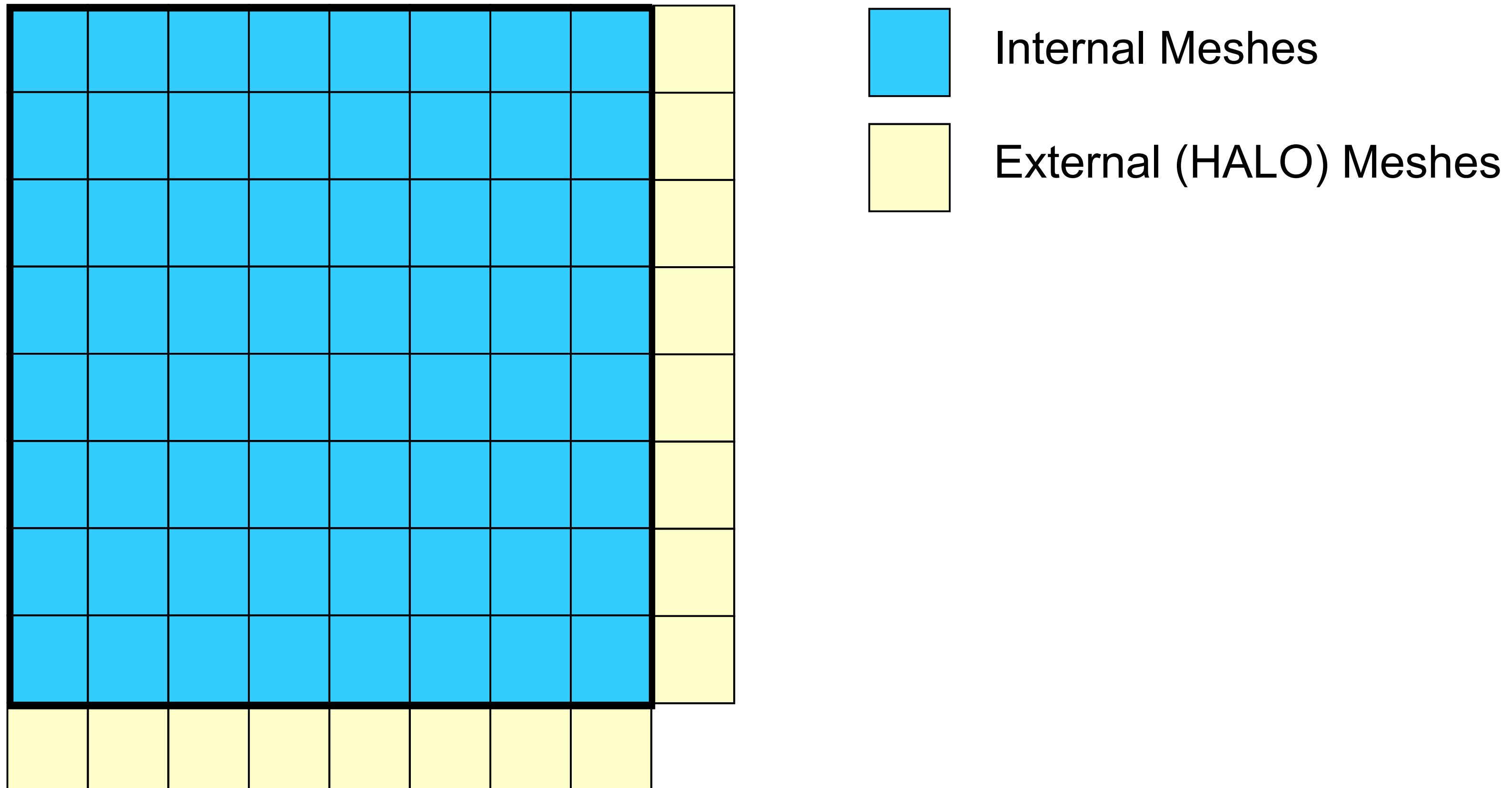
- npx,npy,npzはndx,ndy,ndzで割り切れる必要あり
- ndx×ndy×ndzが総MPIプロセス数
  – 上記の場合は12ノード，192コア，12プロセス，1プロセスあたりのスレッド数＝16（PEsmpTOT）
- とりあえず計算の性能だけを見るのであればITERmaxは上記のように少なめにする
  – 収束するまで計算すると時間がかかる

# go00.shの例

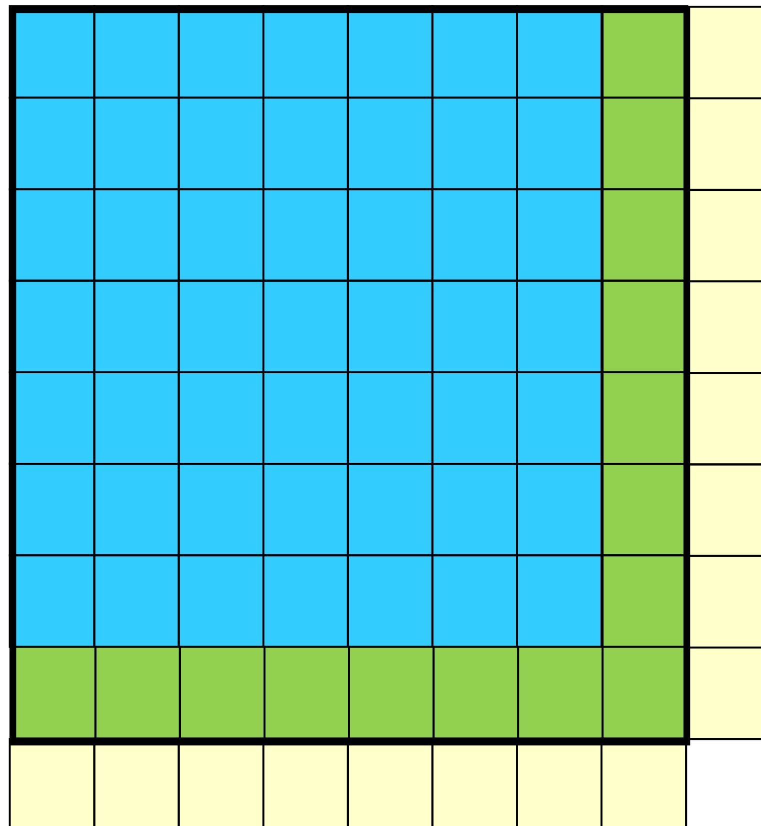
## export OMP_NUM_THREADS=PEsmpTOT

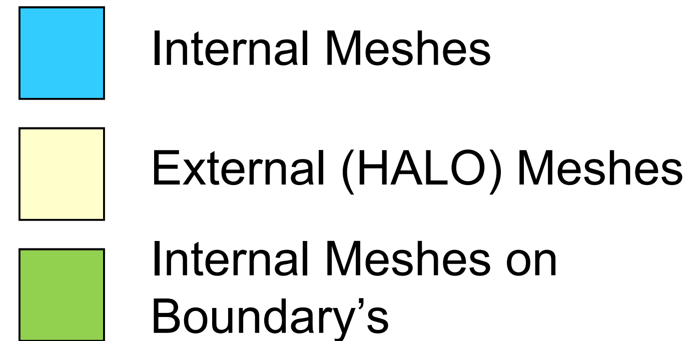
```
#!/bin/sh
#PJM -L "node=12"
#PJM -L "elapse=00:05:00"
#PJM -j
#PJM -L "rscgrp=school"
#PJM -o "t00-012-128-128-128-03.lst"
#PJM --mpi "proc=12"

export OMP_NUM_THREADS=16
mpiexec ./sol0
rm wk.*
```

# 計算と通信のオーバーラップ



# 計算と通信のオーバーラップ






行列ベクトル積

- リナンバリング：■⇒■の順番に番号を振り直す
- 外点情報を通信する
- 同期を待たずに■の計算を実施し通信とオーバーラップ
- 通信の同期
- 続いて■の計算を実施する

# q=Apの部分：src0

```
      call SOLVER_SEND_RECV_3                                            &
     &   ( N, NP, NEIBPETOT, NEIBPE, STACK_IMPORT, NOD_IMPORT,           &
     &     STACK_EXPORT, NOD_EXPORT, WS, WR, WW(1,P) , SOLVER_COMM,      &
     &     my_rank)

!$omp parallel do private (j,k,i,X1,X2,X3,WVAL1,WVAL2,WVAL3)
      do j= 1, N
           X1= WW(3*j-2,P)
           X2= WW(3*j-1,P)
           X3= WW(3*j  ,P)
        WVAL1= D(9*j-8)*X1 + D(9*j-7)*X2 + D(9*j-6)*X3
        WVAL2= D(9*j-5)*X1 + D(9*j-4)*X2 + D(9*j-3)*X3
        WVAL3= D(9*j-2)*X1 + D(9*j-1)*X2 + D(9*j  )*X3
        do k= INL(j-1)+1, INL(j)
           i= IAL(k)
          X1= WW(3*i-2,P)
          X2= WW(3*i-1,P)
          X3= WW(3*i  ,P)
          WVAL1= WVAL1 + AL(9*k-8)*X1 + AL(9*k-7)*X2 + AL(9*k-6)*X3
          WVAL2= WVAL2 + AL(9*k-5)*X1 + AL(9*k-4)*X2 + AL(9*k-3)*X3
          WVAL3= WVAL3 + AL(9*k-2)*X1 + AL(9*k-1)*X2 + AL(9*k  )*X3
        enddo
        do k= INU(j-1)+1, INU(j)
           i= IAU(k)
          X1= WW(3*i-2,P)
          X2= WW(3*i-1,P)
          X3= WW(3*i  ,P)
          WVAL1= WVAL1 + AU(9*k-8)*X1 + AU(9*k-7)*X2 + AU(9*k-6)*X3
          WVAL2= WVAL2 + AU(9*k-5)*X1 + AU(9*k-4)*X2 + AU(9*k-3)*X3
          WVAL3= WVAL3 + AU(9*k-2)*X1 + AU(9*k-1)*X2 + AU(9*k  )*X3
        enddo

        WW(3*j-2,Q)= WVAL1
        WW(3*j-1,Q)= WVAL2
        WW(3*j  ,Q)= WVAL3
      enddo
```

# q=Apの部分：src0m（1/3）

```
      do neib= 1, NEIBPETOT
        istart= STACK_EXPORT(neib-1)
        inum  = STACK_EXPORT(neib  ) - istart
!$omp parallel do private (ii)
        do k= istart+1, istart+inum
               ii   = 3*NOD_EXPORT(k)
           WS(3*k-2)= WW(ii-2,P)
           WS(3*k-1)= WW(ii-1,P)
           WS(3*k  )= WW(ii  ,P)
        enddo
        call MPI_ISEND (WS(3*istart+1), 3*inum,MPI_DOUBLE_PRECISION,    &
     &                  NEIBPE(neib), 0, MPI_COMM_WORLD, req1(neib),    &
     &                  ierr)
      enddo

      do neib= 1, NEIBPETOT
        istart= STACK_IMPORT(neib-1)
        inum  = STACK_IMPORT(neib  ) - istart
        call MPI_IRECV (WW(3*(istart+N)+1,P), 3*inum,                   &
     &                  MPI_DOUBLE_PRECISION,                           &
     &                  NEIBPE(neib), 0, MPI_COMM_WORLD,                &
     &                  req1(neib+NEIBPETOT), ierr)
      enddo

!C
!C-- Pure Inner Nodes

!$omp parallel do private (j,k,i,X1,X2,X3,WVAL1,WVAL2,WVAL3)
      do j= 1, Ninn
           X1= WW(3*j-2,P)
           X2= WW(3*j-1,P)
           X3= WW(3*j  ,P)
        WVAL1= D(9*j-8)*X1 + D(9*j-7)*X2 + D(9*j-6)*X3
        WVAL2= D(9*j-5)*X1 + D(9*j-4)*X2 + D(9*j-3)*X3
        WVAL3= D(9*j-2)*X1 + D(9*j-1)*X2 + D(9*j  )*X3
```

# q=Apの部分：src0m（2/3）

```
!C
!C-- Pure Inner Nodes

!$omp parallel do private (j,k,i,X1,X2,X3,WVAL1,WVAL2,WVAL3)
      do j= 1, Ninn
           X1= WW(3*j-2,P)
           X2= WW(3*j-1,P)
           X3= WW(3*j  ,P)
        WVAL1= D(9*j-8)*X1 + D(9*j-7)*X2 + D(9*j-6)*X3
        WVAL2= D(9*j-5)*X1 + D(9*j-4)*X2 + D(9*j-3)*X3
        WVAL3= D(9*j-2)*X1 + D(9*j-1)*X2 + D(9*j  )*X3
        do k= INL(j-1)+1, INL(j)
           i= IAL(k)
          X1= WW(3*i-2,P)
          X2= WW(3*i-1,P)
          X3= WW(3*i  ,P)
          WVAL1= WVAL1 + AL(9*k-8)*X1 + AL(9*k-7)*X2 + AL(9*k-6)*X3
          WVAL2= WVAL2 + AL(9*k-5)*X1 + AL(9*k-4)*X2 + AL(9*k-3)*X3
          WVAL3= WVAL3 + AL(9*k-2)*X1 + AL(9*k-1)*X2 + AL(9*k  )*X3
        enddo
        do k= INU(j-1)+1, INU(j)
           i= IAU(k)
          X1= WW(3*i-2,P)
          X2= WW(3*i-1,P)
          X3= WW(3*i  ,P)
          WVAL1= WVAL1 + AU(9*k-8)*X1 + AU(9*k-7)*X2 + AU(9*k-6)*X3
          WVAL2= WVAL2 + AU(9*k-5)*X1 + AU(9*k-4)*X2 + AU(9*k-3)*X3
          WVAL3= WVAL3 + AU(9*k-2)*X1 + AU(9*k-1)*X2 + AU(9*k  )*X3
        enddo

        WW(3*j-2,Q)= WVAL1
        WW(3*j-1,Q)= WVAL2
        WW(3*j  ,Q)= WVAL3
      enddo

      call MPI_WAITALL (2*NEIBPETOT, req1, sta1, ierr)      ここで同期をとる
```

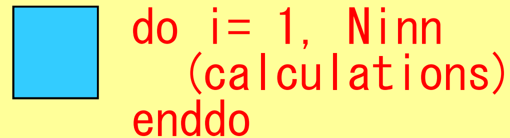
# q=Apの部分：src0m（3/3）

```
!C
!C-- Boundary Nodes

!$omp parallel do private (j,k,i,X1,X2,X3,WVAL1,WVAL2,WVAL3)
      do j= Ninn+1, N
           X1= WW(3*j-2,P)
           X2= WW(3*j-1,P)
           X3= WW(3*j  ,P)
        WVAL1= D(9*j-8)*X1 + D(9*j-7)*X2 + D(9*j-6)*X3
        WVAL2= D(9*j-5)*X1 + D(9*j-4)*X2 + D(9*j-3)*X3
        WVAL3= D(9*j-2)*X1 + D(9*j-1)*X2 + D(9*j  )*X3
        do k= INL(j-1)+1, INL(j)
           i= IAL(k)
          X1= WW(3*i-2,P)
          X2= WW(3*i-1,P)
          X3= WW(3*i  ,P)
          WVAL1= WVAL1 + AL(9*k-8)*X1 + AL(9*k-7)*X2 + AL(9*k-6)*X3
          WVAL2= WVAL2 + AL(9*k-5)*X1 + AL(9*k-4)*X2 + AL(9*k-3)*X3
          WVAL3= WVAL3 + AL(9*k-2)*X1 + AL(9*k-1)*X2 + AL(9*k  )*X3
        enddo
        do k= INU(j-1)+1, INU(j)
           i= IAU(k)
          X1= WW(3*i-2,P)
          X2= WW(3*i-1,P)
          X3= WW(3*i  ,P)
          WVAL1= WVAL1 + AU(9*k-8)*X1 + AU(9*k-7)*X2 + AU(9*k-6)*X3
          WVAL2= WVAL2 + AU(9*k-5)*X1 + AU(9*k-4)*X2 + AU(9*k-3)*X3
          WVAL3= WVAL3 + AU(9*k-2)*X1 + AU(9*k-1)*X2 + AU(9*k  )*X3
        enddo

        WW(3*j-2,Q)= WVAL1
        WW(3*j-1,Q)= WVAL2
        WW(3*j  ,Q)= WVAL3
      enddo
```

# 計算と通信のオーバーラップ

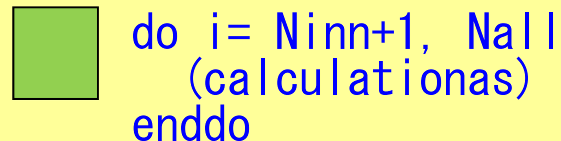
## With Reordering (current)

```
call MPI_Isend
call MPI_Irecv
```

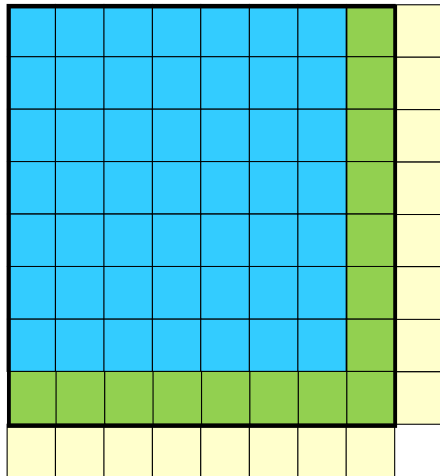


```
do i= 1, Ninn
  (calculations)
enddo
```

```
call MPI_Waitall
```

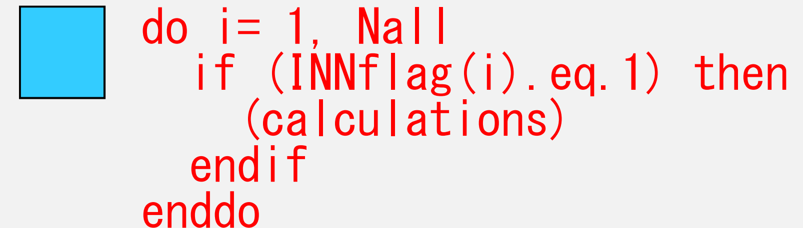


```
do i= Ninn+1, Nall
  (calculationas)
enddo
```



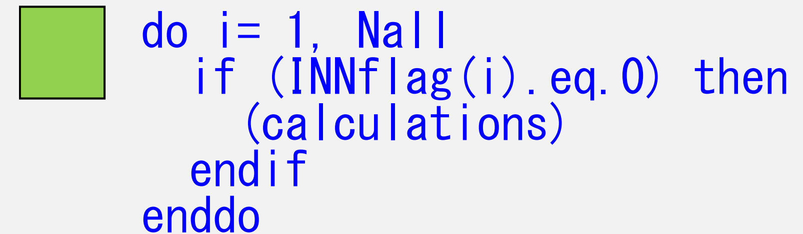
## Without Reordering

```
call MPI_Isend
call MPI_Irecv
```



```
do i= 1, Nall
  if (INNflag(i).eq.1) then
    (calculations)
  endif
enddo
```

```
call MPI_Waitall
```



```
do i= 1, Nall
  if (INNflag(i).eq.0) then
    (calculations)
  endif
enddo
```

# OpenMP：ループスケジューリング

```
!$omp parallel do schedule (kind, [chunk])
!$omp do schedule (kind, [chunk])
```

```
#pragma parallel for schedule (kind, [chunk])
#pragma for schedule (kind, [chunk])
```

| kind | 説　明 |
|---|---|
| **static** | ループを同じ大きさのチャンク，または （ループの反復数がスレッド数にチャンクサイズ(chunk)を掛けた値で割り切れない場合は） できるだけ同じ大きさのチャンクに分割。デフォルトでは，チャンクサイズはループ反復数を利用可能なスレッド数で割った値(scheduleを省略するとstaticのデフォルトになる)。 |
| **dynamic** | 各スレッドでチャンクサイズ分のブロックのループ反復処理を実施。スレッドが終了すると，作業キューの一番上から次のブロックを取得する。デフォルトでは，チャンクサイズ=1。チャンクサイズが小さすぎるとオーバーヘッドが大きい。 |
| **guided** | 大きなチャンクサイズから開始して，徐々に小さくしていき，ループ反復間の負荷不均衡を軽減。chunk パラメーターは，使用するチャンクサイズの最小値を指定。デフォルトでは，チャンクサイズはループ反復数を利用可能なスレッド数で割った値とほぼ同じ。 |
| **auto** | schedule (auto) が指定されると、スケジュールに関する決定はコンパイラーが行う。チーム内のスレッドへの反復の割り当てはコンパイラーが選択。 |
| **runtime** | OMP_SCHEDULE 環境変数を使用して，3 つのループ・スケジュール(static, dynamic, guided)のいずれかを指定。 |

# 方 針〔Idomura et al. 2014〕

- dynamicと「!$omp master～!$omp end master」，マスタースレッドが通信担当

```
!$omp parallel private (neib,j,k,i,X1,X2,X3,WVAL1,WVAL2,WVAL3)
!$omp&         private (istart,inum,ii,ierr)

!$omp master                    通信はマスタースレッド（0番）が担当
!C
!C- Send & Recv.
(…)
      call MPI_WAITALL (2*NEIBPETOT, req1, sta1, ierr)
!$omp end master

!C
!C-- Pure Inner Nodes           内点の計算はdynamic，通信が終了したらマスタースレッドも参加

!$omp do schedule (dynamic,200)    チャンクサイズ＝200
      do j= 1, Ninn
        (…)
      enddo
!C
!C-- Boundary Nodes             境界点の計算は全スレッド（static）

!$omp do                        デフォルトは !$omp do schedule (static)
      do j= Ninn+1, N
        (…)
      enddo

!$omp end parallel
```

Idomura, Y. et al., Communication-overlap techniques for improved strong scaling of gyrokinetic Eulerian code beyond 100k cores on the K-computer, Int. J. HPC Appl. 28, 73-86, 2014

# 計算結果：1反復計算時間（sec.）

## 12ノード（プロセス）使用時

| | | チャンクサイズ | 計算時間 |
|---|---|---|---|
| Original (sol0) | static | - | 0.311 |
| 計算～通信オーバラップ（sol0m） | static | - | 0.313 |
| 計算～通信オーバラップ+スケジューリング（sol0m_XXXXX） | dynamic | 50 | 0.309 |
| | | 100 | 0.300 |
| | | 200 | 0.297 |
| | | 300 | 0.302 |
| | | 500 | 0.309 |
| | | 750 | 0.310 |
| | | 1000 | 0.314 |
| | guided | 50 | 0.323 |

# まとめ

- 様々なケースで実行して見よ
  - 問題サイズ
    - プロセス上のデータサイズが$2^n$にならないように注意：**sol0**では並べ替えがされていないので，Bank Conflictが起こる
  - プロセスあたりスレッド数
  - チャンクサイズ
- 計算と通信のオーバーラップ
  - 行列ベクトル積程度ではほとんど効果はない（遅くなる場合もある）
    - OpenMPのDynamic Schedulingと組み合わせると効果が得られる
  - 陽解法でループあたりの計算量が大きい場合は大幅な向上が期待できる場合がある
  - 複雑な前処理がはいった場合の対処法は研究の途上にある