Расширение возможностей DVM-системы для решения задач с интенсивным нерегулярным доступом к памяти

В.А. Бахтин, **А.С. Колганов**, В.А. Крюков, Н.В.Поддерюгина, М.Н. Притула, О.А. Савицкая

Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша РАН

http://dvm-system.org

Класс задач с нерегулярным доступом к памяти

- Графовые задачи;
- Задачи, использующие разреженные матрицы;
- Научно-технические рассчеты на нерегулярных сетках.

Класс задач с нерегулярным доступом к памяти

- Графовые задачи;
- Задачи, использующие разреженные матрицы;
- Научно-технические рассчеты на нерегулярных сетках.

<u>Могут использовать один и тот же формат хранения данных, например, CSR</u>

Программы с регулярным доступом к памяти

Проблемы

- Единый шаг сетки по расчетной области – нет гибкости, неподъемные требования по памяти и вычислительной мощности при измельчении;
- Реализация численных методов зачастую привязана к форме сетки – двумерные, трехмерные, декартовы, цилиндрические, и т.д. Тем самым сложно заменять геометрию.

Положительные стороны

- Отношение соседства и пространственные координаты не хранятся явно – экономия памяти;
- Обращения к массивам с константными смещениями – свобода для компиляторных оптимизаций, ясность для распараллеливаниия (в том числе автоматического).

Программы с нерегулярным доступом к памяти

Положительные стороны

- Свобода вариации подробности сетки – поддержание нужной степени измельчения в отдельных частях области;
- Хорошие возможности по переиспользованию вычислительного кода, свобода в выборе формы расчетных областей.

Проблемы

- Отношение соседства и пространственные координаты приходится хранить явно;
- Косвенная индексация при обращениях к массивам – препятствие для компиляторных оптимизаций, сложность для распараллеливаниия (в особенности автоматического).

```
double A[L][L];

double B[L][L];

int main(int argc, char *argv[]) {
    for(int it = 0; it < ITMAX; it++) {

        {

            for (int i = 1; i < L - 1; i++)
                for (int j = 1; j < L-1; j++)
                    A[i][j] = B[i][j];


            for (int i = 1; i < L - 1; i++)
                for (int j = 1; j < L - 1; j++)
                    B[i][j] = (A[i - 1][j] + A[i + 1][j] + A[i][j - 1] + A[i][j + 1]) / 4.;
        }
    }
   FILE *f = fopen("jacobi.dat", "wb");

   fwrite(B, sizeof(double), L * L, f);
   fclose(f);
   return 0;
}
```

Алгоритм Якоби

```
#pragma dvm array distribute[block][block], shadow[1:1][1:1]
double A[L][L];
#pragma dvm array align([i][j] with A[i][j])
double B[L][L];

int main(int argc, char *argv[]) {
    for(int it = 0; it < ITMAX; it++) {

        {

            for (int i = 1; i < L - 1; i++)
                for (int j = 1; j < L-1; j++)
                    A[i][j] = B[i][j];


            for (int i = 1; i < L - 1; i++)
                for (int j = 1; j < L - 1; j++)
                    B[i][j] = (A[i - 1][j] + A[i + 1][j] + A[i][j - 1] + A[i][j + 1]) / 4.;
        }
    }
   FILE *f = fopen("jacobi.dat", "wb");

   fwrite(B, sizeof(double), L * L, f);
   fclose(f);
   return 0;
}
```

Алгоритм Якоби в модели DVMH

```
#pragma dvm array distribute[block][block], shadow[1:1][1:1]
double A[L][L];
#pragma dvm array align([i][j] with A[i][j])
double B[L][L];

int main(int argc, char *argv[]) {
    for(int it = 0; it < ITMAX; it++) {

        {
            #pragma dvm parallel([i][j] on A[i][j])
            for (int i = 1; i < L - 1; i++)
                for (int j = 1; j < L-1; j++)
                    A[i][j] = B[i][j];

            #pragma dvm parallel([i][j] on B[i][j]), shadow_renew(A)
            for (int i = 1; i < L - 1; i++)
                for (int j = 1; j < L - 1; j++)
                    B[i][j] = (A[i - 1][j] + A[i + 1][j] + A[i][j - 1] + A[i][j + 1]) / 4.;
        }
    }
    FILE *f = fopen("jacobi.dat", "wb");

    fwrite(B, sizeof(double), L * L, f);
    fclose(f);
    return 0;
}
```

Алгоритм Якоби в модели DVMH

```
#pragma dvm array distribute[block][block], shadow[1:1][1:1]
double A[L][L];
#pragma dvm array align([i][j] with A[i][j])
double B[L][L];

int main(int argc, char *argv[]) {
    for(int it = 0; it < ITMAX; it++) {
        #pragma dvm region inout(A, B)
        {
            #pragma dvm parallel([i][j] on A[i][j])
            for (int i = 1; i < L - 1; i++)
                for (int j = 1; j < L-1; j++)
                    A[i][j] = B[i][j];

            #pragma dvm parallel([i][j] on B[i][j]), shadow_renew(A)
            for (int i = 1; i < L - 1; i++)
                for (int j = 1; j < L - 1; j++)
                    B[i][j] = (A[i - 1][j] + A[i + 1][j] + A[i][j - 1] + A[i][j + 1]) / 4.;
        }
    }
    FILE *f = fopen("jacobi.dat", "wb");
    #pragma dvm get_actual(B)
    fwrite(B, sizeof(double), L * L, f);
    fclose(f);
    return 0;
}
```

Алгоритм Якоби в модели DVMH

Средства программирования

C-DVMH = Язык Си + спец. прагмы

Fortran-DVMH = Язык Фортран 95 + спец. комментарии

- Специальные комментарии и прагмы являются высокоуровневыми спецификациями параллелизма в терминах последовательной программы;
- Отсутствуют низкоуровневые передачи данных и синхронизации в коде программы;
- Последовательный стиль программирования;
- Спецификации параллелизма «невидимы» для стандартных компиляторов;
- Существует единственный экземпляр программы для последовательного и параллельного счета.

Спецификации параллельного выполнения программы

- Распределение элементов массива между процессорами (директивы distribute / align);
- Распределение витков цикла между вычислительными устройствами (директива parallel);
- Спецификация параллельно выполняющихся секций программы (параллельных задач) и отображение их на процессоры (директива task);
- Организация эффективного доступа к удаленным данным, расположенным на других вычислительных устройствах (спецификации shadow / across / remote).

Спецификации параллельного выполнения программы

- Организация эффективного выполнения редукционных операций – глобальных операций с расположенными на различных вычислителях данными (спецификация reduction: max/min/sum/maxloc/minloc/…);

- Определение фрагментов программы (регионов) для возможного выполнения на ускорителях и многоядерных CPU (директива region);

- Управление перемещением данных между памятью CPU и памятью GPU (директивы actual / get_actual).

Компоненты DVM-системы

- Компилятор Fortran-DVMH;
- Компилятор C-DVMH;
- Библиотека поддержки Lib-DVMH (DVMH Run Time System);
- Отладчик DVMH-программ;
- Анализатор производительности DVMH-программ.

Использование средств DVMH в MPI-программе: причины

- Уже накоплен фонд и опыт написания параллельных программ для кластера;
- Модель DVMH предполагает распараллеливание последовательных программ;
- Пользователь не желает отказываться от своей параллельной программы;
- Программа распараллелена вручную так, как не удастся (или потребует трюков) сделать средствами DVMH (например – она с **не**регулярным доступом к памяти);
- Есть желание добавить параллелизм на нитях CPU и/или на GPU, а также воспользоваться инструментарием DVMH (отладка и профилирование).

Использование средств DVMH в MPI-программе: результаты

- Добавлен новый режим работы DVM-системы локально в каждом процессе;
- Добавлена конструкция нераспределенного параллельного цикла;
- Инкрементальное распараллеливание и быстрая оценка эффективности DVMH-модели на нитях CPU и GPU перед проведением полного распараллеливания;
- Возможность использовать DVMH-распараллеливание внутри узла кластера в готовых MPI-программах.

Использование средств DVMH в MPI-программе: опыт

- Солвер явной схемы – часть большого развитого комплекса вычислительных программ:
  - C++, 39 000 LOC, шаблоны, полиморфизм, и т.п.;
  - богатая платформа базовых понятий и структур данных;

- Модификации только локальные, в одном модуле в ~3000 строк, которые сводятся к добавлению нескольких директив (около 10);
- Получено ускорение
  - 2 CPU Intel Xeon X5670 по 6 ядер – **9.8 раз**;
  - GPU NVidia GTX Titan (Kepler) – **18 раз**.

Обзор новых возможностей

- Задание произвольных поэлементных распределений, в том числе получаемые пакетами Metis, Chaco, …;
- Построение согласованных распределений на основе имеющихся (блочных или поэлементных);
- Задание произвольных по содержанию буферов удаленных элементов с эффективным однородным доступом к ним и обновлением;
- Сохранение быстрого доступа к распределенным массивам с помощью механизмов перехода на локальную индексацию;
- Возможность реорганизации данных – оптимизации шаблона доступа к памяти путем изменения порядка хранения локальных элементов.

Новые правила распределения

- Косвенное – задается массивом целых чисел, размер которого равен размеру косвенно распределяемого измерения, а значения задают номер домена.
  distribute `A[indirect(B)]`

- Производное – задается правилом, по форме похожим на правило выравнивания (ALIGN) модели DVMH: возможность согласованно распределять сеточные элементы. Например, ячейки, ребра, вершины.
  distribute `A[derived([cells[i][0]: cells[i][2]] with cells[@i])]`

Новые теневые грани

- Теневые грани – это набор элементов, не принадлежащих текущему процессу, для которых:
  - Возможен доступ без специальных указаний из любой точки программы;
  - Имеются специальные средства работы с ними: **shadow_renew**, **shadow_compute**, **across**

- Любой набор удаленных элементов задается аналогично производному распределению:
  shadow_add `(nodes[neigh[i][0]:neigh[i][numneigh[i]-1] with nodes[@i]] = neighbours)`

Переход к локальной индексации

- Процедура для перевода глобального (исходного) индекса в локальный (непосредственно для доступа к памяти) слишком долгая;

- Для блочных распределений глобальный и локальный индексы совпадают;

- Для поэлементных распределений введена исполняемая директива локализации значений индексных массивов

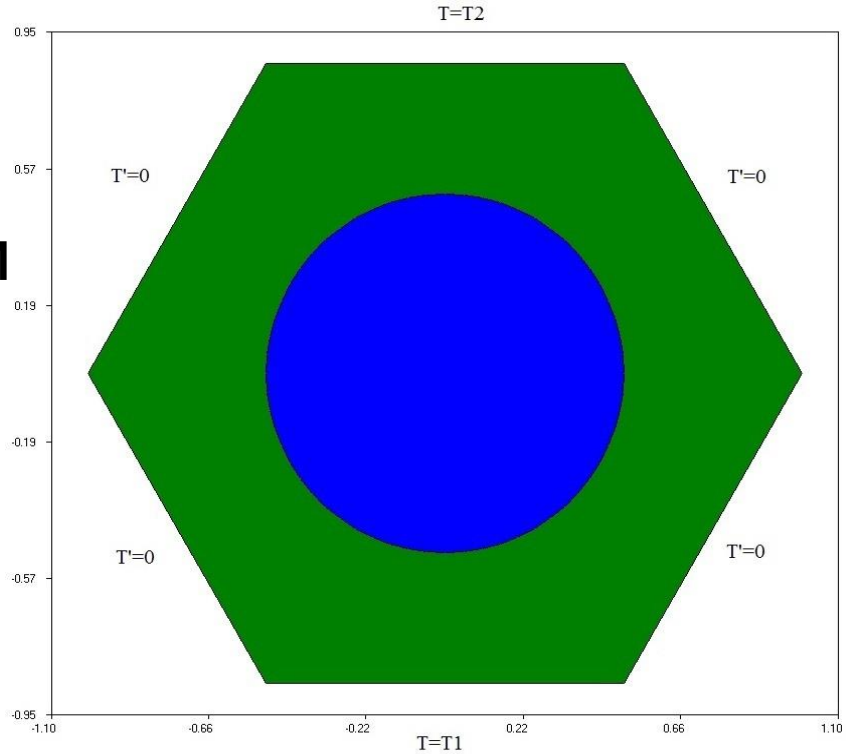
```
localize(neigh => nodes[:])
```

В результате дальнейшие действия производятся над локальными индексами и нет необходимости менять компиляцию исполняемых конструкций.

Рассматриваемая задача

- Двумерная задача теплопроводности с постоянным, но разрывным коэффициентом в шестиграннике.

- Область состоит из двух материалов с различными коэффициентами температуропроводности.

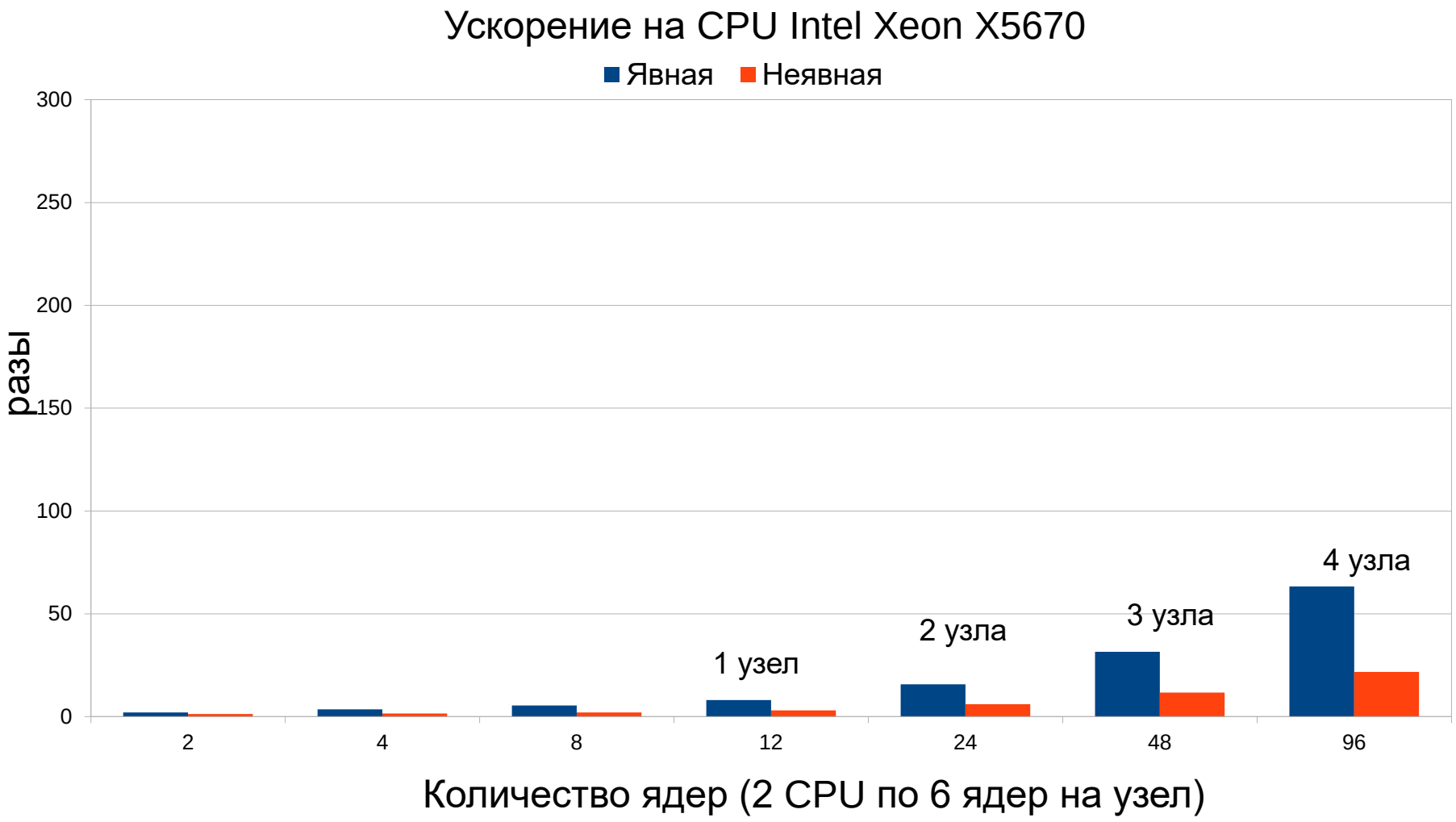


Рассматриваемая задача

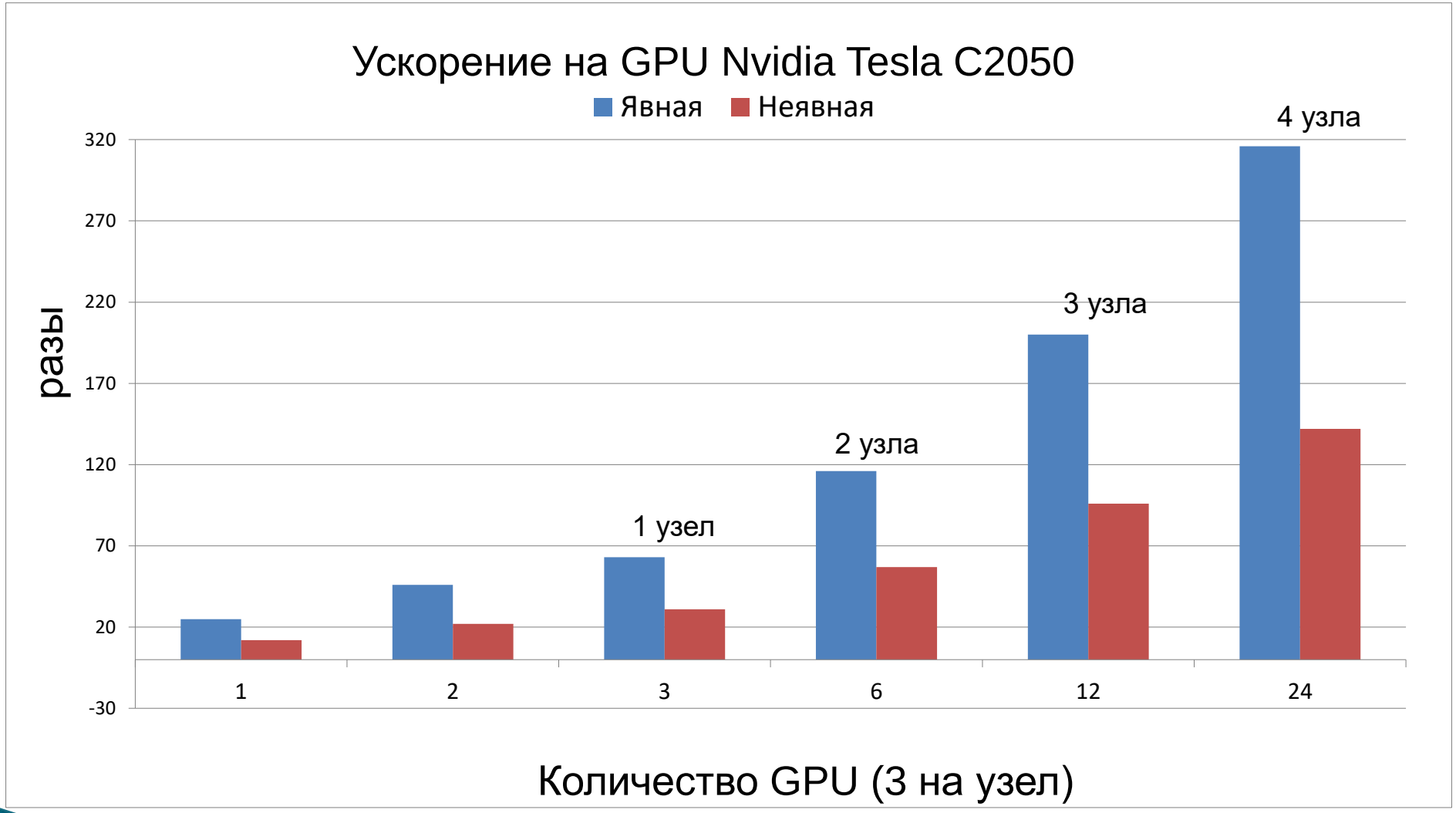
- Массивы величин одномерные - **tt1,tt2**
- Переменное число “соседей” – **ii**
- Связи задаются массивом – **jj**

```
do i = 1, np2
  nn = ii(i)
  nb = npa(i)
  if (nb.ge.0) then
    s1 = FS(xp2(i),yp2(i),tv)
    s2 = 0d0
    do j = 1, nn
      j1 = jj(j,i)
      s2 = s2 + aa(j,i) * tt1(j1)
    enddo
    s0 = s1 + s2
    tt2(i) = tt1(i) + tau * s0
  else if (nb.eq.-1) then
    tt2(i) = vtemp1
  else if (nb.eq.-2) then
    tt2(i) = vtemp2
  endif
  s0 = (tt2(i) - tt1(i)) / tau
  gt = DMAX1(gt,DABS(s0))
enddo
do i = 1, np2
  tt1(i) = tt2(i)
enddo
```

Полученные ускорения, 8 млн узлов



Полученные ускорения, 8 млн узлов



Выводы

- Расширены возможности DVM-системы для решения задач с нерегулярным доступом к памяти.
  Данные возможности позволяют распараллелить их на кластер с многоядерными и графическими процессорами:
  - возможность перехода на ручное распределение данных (например, средствами MPI);
  - новые экспериментальные конструкции языка C-DVMH и их реализация в компиляторе и системе поддержки;

- В дальнейшем предполагается существенно расширить новые средства и улучшить их интеграцию с DVMH-программами, использующие блочно-распределенные данные.

Вопросы, замечания?

СПАСИБО !

сайт: http://dvm-system.org
почта: dvm@keldysh.ru