并行计算 II 2023 春季第一次作业: OpenMP 优化 Bellman-Ford 算法

1900017702 朱越

0. 概要

本次作业针对Bellman-Ford算法使用OpenMP进行并行优化加速,最终加速了约27倍,最终源代码见persistent_T.cpp,编译脚本使用Makefile,运行脚本使用run.slurm,其中一次的输出结果可以参考job_211795_cu06.out。

具体的过程见第4部分,最终的策略见第5部分。

1. Bellman-Ford 算法

单源最短路径,以0点为起点,通过邻接矩阵更新距离向量

输入:邻接矩阵w 输出:距离向量d

算法:

初始化:d[0]=0

状态转移:d[x] = min(d[x], d[y]+w[y][x])

终止条件:在某次迭代后没有发生更新,或已迭代了n-1轮。

此时需要多迭代一轮,判定负权。

2. 串行计算

见serial.cpp

3. 并行计算

基本分析

状态转移: dist[v] = min(dist[v], dist[u]+mat[u][v])

基于上述状态转移过程,各状态可以独立计算。但必须注意:

- 1. 最外层循环即迭代轮数不可作并行,因为这是顺序依赖的,而两层内层循环则可以**选择性地作并行**。如何设置并行区?可以在每轮迭代时开辟并行区,也可以使用持久化的并行区。
- 2. 算法的一个终止条件是基于最短路径长度不超过n,这要求我们必须保证遍历过路径长为n的所有路径,对变量之间限定了一定的依赖关系。如果是完全独立地计算,可能某一点在计算了n步后其他点都还未开始,这将导致不能给出正确的结果。因此,在每轮迭代后需要作**栅栏同步**,此外,对has change的共享也需要同步。

- 3. 对串行计算而言,每轮迭代更新的内层两重循环——工作划分并无显著区别。而对并行计 算而言,**工作划分顺序是有意义的**。
- 4. 恰当控制缓存可以减少访存部分的代价,以在并行加速之上额外提升运行速度。

4. 因素比较

流程

记得在编译时添加选项 -fopenmp make # 记得在脚本中指定偏好节点 sbatch run.slurm

• 串行计算

见serial.cpp。平均时间约0.24s

- 核心数和线程数
 - 1. 单核

平均时间约0.3s,比串行计算还慢。因为在一个核心上多线程计算实际上还是串行执行的,还需要额外调度的时间。

2. 多核

登录节点 sinfo --Node --long scontrol show node # 计算节点 lscpu

在登录节点使用sinfo命令和scontrol命令可以查看各节点粗略信息。 在计算节点使用slurm脚本获取该节点详细信息

线程数最好与硬件核心数匹配,这样能最大限度地并行化,考虑包括:

- 1. 是否支持超线程?若是,则一个核心可以运行多个线程以增加并行度(但达不到多核的并行度)。数院集群使用的CPU是E5-2650,双路12核单线程。
- 2. 一个节点的核心是单路还是多路?如果是多路,需要权衡访存一致性和硬件资源的优劣:各路之间不共享缓存但共享内存,对同一片数据并行操作会增加延迟。而增加路数可以使计算资源加倍。本问题是访存密集型的,对访存一致性要求比较高,故只使用一路12核CPU。
- 3. 虽然每个节点的CPU数基本都是24核,但在提交批处理脚本时不允许申请这么多个核心。实验中,申请12核的性能不太稳定,这是由于默认申请的节点cu01还有其他事务共享计算资源而发生调度,所以在性能下降。因此,后续在作业脚本命令中用"-wcuXX"指定节点cuXX。

经过实验,在核心数和线程数均为12时,速度最快。

- 并行划分
 - 1. 工作分配

在一轮迭代中:对于两层循环,在并行划分时可以选择针对内层或者外层作分配。

```
for (int v = tid; v < n; v += nt) // 分配
{
    // 从内层提取的复用片段
    for (int u = 0; u < n; u ++) // 完全遍历
    {
        dist[v] = min(dist[v], dist[u]+mat[u][v]);
    }
}
```

如果两层循环是直接嵌套的,那么分配方式区别不大。

不过,如果内层循环(工作集)中存在复用的代码段,则可以提取到外层一次性完成,以减少重复执行次数。

只要缓存能存得下, 就尽可能地使用更大的工作集, 以充分节约重复操作。

因此,应该在外层作分配,而使内层完全循环。

2. 遍历方式

1. 终点优先

每个线程一次对一个v遍历所有u。 好处是每个线程每次独立维护自己的可变变量dist[v]。

2. 途径点优先 (X)

每个线程一次对一个u遍历所有v。

好处是每个线程每次重复访问同一个只读变量dist[u]。

这里产生了一个问题:各线程共同修改dist[v],如果不加锁会有数据竞争,如何保证结果正确性?

事实上,dist[v]发生数据竞争时,有可能最终写入的不是最优值。但是只进行n轮迭代的要求是在每一轮都得出路径长度至多为i的最优路径,所以得到次优解违反了状态转移方程的条件,结果可能**不正确**。

3. 循环展开

在一轮迭代中,同时对终点和途径点作并行,最简单的方法就是使用collapse从句。 好处是更高的视角实现更平均的循环分配(负载更均衡),但问题是这样就不支持 前述的数据复用了。

经过实验,循环展开的速度更快,但由于这样不能在两层循环间加入优化。为了更精细化调节, 使用终点优先方式。

3. 调度策略 (?)

如果一层循环遍历从1到n需要作并行任务划分,有两种常见静态调度策略:round-robin和 range。

理论上说,使用range策略可以让每个线程连续访问一块内存,能有效利用空间局部性(缓存线)。

但是实际上的测试结果:round-robin效果更好。

没有思考出一个合理的解释

结论:round-robin的效果更好。

充分尝试各种划分-遍历策略,发现最优的情况可以把并行算法加速至约4-5倍。

• 临时或持久的并行区

最简单的做法是每轮迭代都开辟一个并行区,并行区内划分循环,但每轮都需要初始化并行区,这可能引入额外的初始化开销。

可以尝试使用持久化的并行区,对内层循环作任务分配,在不同轮次间作一次栅栏同步即可。

经过实验,持久化的并行区效率更高。

缓存

鉴于一个线程经常访问同一个变量,因此可以对重复访问的部分作缓存优化。虽然主动缓存也需要额外开销,但在访问次数较多时还是能够加速。

可能复用的变量包括: has change, dist[v], dist[u], mat[u][v]。

has_change缓存:每个线程可以维护一个私有变量local_has_change,最后再作规约,以减小维护共享变量一致性的代价。

mat[u][v]批量缓存:可以转置矩阵,故不论是按u还是按v遍历都可以做缓存。

dist[u]缓存:这要求任务按u进行划分,根据前述讨论,这种划分影响了结果的正确性,不能使用。

dist[v]缓存:这要求任务按v进行划分,每个线程独立维护各自的v,以保证数据安全性。缓存减少了对更外层存储器(L3cache)写的次数,但由于是条件写,次数可能不多。

dist批量缓存:二者均不成立。对dist[v]的批量缓存利用率不高,因为每个dist[v]未必发生修改;对dist[u]的批量缓存会解除原有"非规则的"数据依赖,使每轮迭代更新量减少,而对只读空间,memcpy拷贝带来的时间节约并不多。

此外,由于first touch原则,在分配共享内存后,还应该在各线程上分别赋初值,以抵消内存的延迟分配。

实验发现,对has change, mat[u][v]和dist[v]作缓存都可以有效加速。

基于持久化的并行区,使用局部空间和临时变量可以额外加速大约2倍。

• 存储方式

默认的存储方式是邻接矩阵mat[u][v]。此外,还可以存储转置矩阵和邻接表。

转置矩阵matT[v][u]的应用场景是按批量按列访问时可以一次缓存一组。

邻接表table[u][index]的应用场景是当图较稀疏时,可以减少对空边的无效访问,但要额外保存v作为存储代价。在本问题中,尽管额外的空间代价不至于造成缓存满溢,但图是稠密的,预计使用邻接表的效果并不显著,不作为主要优化思路。

最终方案中选用的是按列访问,故使用转置矩阵。

• 编译选项

在C++代码中,无法显式控制缓存和寄存器的使用方式。前述缓存相关的讨论我只能以局部空间和临时变量的方式实现(显式指定保存到一个新的位置),以**期望**其进入缓存。而编译器层面则可以优化产生的汇编代码中寄存器的使用方式,给出更紧凑的流水线,以及其他汇编层面的优化。实验发现,-O2选项即有显著优化,而-O3和-Ofast没有进一步优化。

使用编译优化可以再加速大约3-4倍(果然编译优化还是强大)。

• 负权回路检测

有必要检测负权回路时,已迭代了n-1轮,而检测本身只需要1轮迭代,加速的比例本身就不大。

因此,对负权回路检测部分,只使用简单的并行划分就足够了。

• 正确性检查

check.cpp代码将输出output.txt与标准输出(串行结果)output_std.txt进行比对

在运行脚本中使用./check计算正确性,各策略结果均正确 为了快速验证正确性,只需在运行脚本run.slurm中修改target变量的值即可

• 时长比较

serial

Time(s): 0.242653

collapse

Time(s): 0.015215

PASSED destination

Time(s): 0.019752

PASSED cache

Time(s): 0.010194

PASSED

FINAL:

persistent_T

Time(s): 0.008852

PASSED

以上是执行一次脚本所反馈的结果(在job_211795_cu06.out中):

serial是串行方法,其他的都是并行方法,且作了编译优化。

destination是固定终点遍历途径点的策略,collapse是将两层循环统筹分配的策略。

cache引入了持久化和缓存机制,而perisitent T则对缓存作了进一步优化。

为了简化文件结构和方便直接测评,已经把过程文件都移入attempt文件夹下,并从编译和运行脚本中消去。

5. 总结

• 最终方案

直观上看,上述几种因素大致是**正交**的,所以最自然的方案是在每种因素上选择最优方案,组合起来即可。因此,最终的代码**persistent_T.cpp**使用了如下选项:

- 1. 线程数为12。在一轮迭代中,每个线程负责整个mat[u][v]矩阵中1/12行或列的遍历,即每轮迭代的任务负载N^2/12
- 2. 外层循环作划分,内层循环完全遍历。对应地,使用转置矩阵
- 3. 外层循环遍历v(终点),内层循环遍历u(途径点)
- 4. 调度策略为round-robin
- 5. 使用局部空间和临时变量"引导"缓存和寄存器的使用
- 6. 对共享内存并行赋初值以抵消内存延迟分配
- 7. 编译语句中使用-Ofast选项进行优化

```
g++ -std=c++11 -o final persistent_T.cpp -Ofast -fopenmp
```

• 测试方法

make clean make sbatch run.slurm

• 优化效果

在前一节的测试结果中,取serial和persistent_T的计时结果进行比较。

serial

Time(s): 0.242653

FINAL:

persistent_T

Time(s): 0.008852

可以算出最终加速了约**27倍**。大体上来说,各因素是正交的,即加速比可以作连乘(但有时某些因素优化过深,就可能对另一因素的优化不显著)。