Lab4 Report

1. 实验介绍

BiCGSTAB (Biconjugate gradient stabilized method, 稳定双共轭梯度法) 正是一种迭代求解非对称线性系统的方法。它是 BiCG (Biconjuagate gradient method, 双共轭梯度法) 的变种, 有着更快速平缓的收敛表现。

我们需要对 baseline 中的 **solver.c** 进行优化,并在使用 MPI 时在 **main.c** 中添加必要的代码。 data 部分给出了三组测试数据,数据规模分别为 2001×2001 , 4001×4001 , 6001×6001 。 硬件环境是 Slurm 上的 Solver 分区,将提供 3 个节点 (M602-M604),每个节点最多使用 52 个物理核心 (2 \times Intel(R) Xeon(R) Gold 5320 CPU @ 2.20GHz),以及 503 GiB 内存。

2. 实验步骤

首先测试下 baseline 的运行情况。为了缩短程序运行时间,在优化阶段我先只使用了 case_2001.bin 这一组数据。

```
Elapsed time: 422.342 s
Status: Converged after 16495 iterations.
Check: Relative residual = 4.325519e-15
Result: Esc[1;32mAccepted, great job! :)Esc[0m]
```

2.1 Step 1

先做编译器优化。我继续沿用了 GCC 编译器,并添加 -std=c++11 -Ofast 的编译优化选项,性能有了明显提升:

```
Elapsed time: 114.272 s
Status: Converged after 19900 iterations.
Check: Relative residual = 1.691503e-15
Result: [SC[1;32mAccepted, great job! :) [SC[0m]
```

以 gemv 函数为例,用 Compiler Explorer 分析编译器优化前后的汇编语言。添加编译优化选项前:

```
gemv(double*, double*, int):
       push
                rbp
       mov
                rbp, rsp
                QWORD PTR [rbp-24], rdi
       mov
                QWORD PTR [rbp-32], rsi
       mov
                QWORD PTR [rbp-40], rdx
       mov
                DWORD PTR [rbp-44], ecx
                DWORD PTR [rbp-4], 0
       mov
        jmp
                .L2
.L5:
                eax, DWORD PTR [rbp-4]
       mov
        cdqe
       lea
                rdx, [0+rax*8]
                rax, QWORD PTR [rbp-24]
        add
                rax, rdx
        pxor
                xmm0, xmm0
                QWORD PTR [rax], xmm0
       movsd
                DWORD PTR [rbp-8], 0
       mov
        jmp
                .L3
.L4:
                eax, DWORD PTR [rbp-4]
       cdqe
        lea
                rdx, [0+rax*8]
       mov
                rax, QWORD PTR [rbp-24]
        add
                rax, rdx
                xmm1, QWORD PTR [rax]
       movsd
                eax, DWORD PTR [rbp-4]
       mov
        imul
                eax, DWORD PTR [rbp-44]
                edx, eax
       mov
                eax, DWORD PTR [rbp-8]
                eax, edx
       add
        cdge
       lea
                rdx, [0+rax*8]
       mov
                rax, QWORD PTR [rbp-32]
       add
                rax, rdx
                xmm2, QWORD PTR [rax]
       movsd
       mov
                eax, DWORD PTR [rbp-8]
        cdqe
       lea
                rdx, [0+rax*8]
                rax, QWORD PTR [rbp-40]
       mov
        add
                rax, rdx
       movsd
                xmm0, QWORD PTR [rax]
       mulsd
                xmm0, xmm2
                eax, DWORD PTR [rbp-4]
        cdqe
                rdx, [0+rax*8]
       mov
                rax, QWORD PTR [rbp-24]
        add
                rax, rdx
        addsd
                xmm0, xmm1
                QWORD PTR [rax], xmm0
       movsd
                DWORD PTR [rbp-8], 1
       add
.L3:
                eax, DWORD PTR [rbp-8]
                eax, DWORD PTR [rbp-44]
        cmp
        jl
                .L4
        add
                DWORD PTR [rbp-4], 1
```

```
mov eax, DWORD PTR [rbp-4]
cmp eax, DWORD PTR [rbp-44]
jl .L5
nop
nop
pop rbp
ret
```

添加编译优化选项后:

```
gemv(double*, double*, int):
       test
               ecx, ecx
       jle
               .L1
       movsx rcx, ecx
               rcx, 3
               r8, [rdi+rcx]
       lea
.L4:
               QWORD PTR [rdi], 0x000000000
               eax, eax
               xmm1, xmm1
       pxor
.L3:
               xmm0, QWORD PTR [rsi+rax]
       movsd
       mulsd
               xmm0, QWORD PTR [rdx+rax]
               rax, 8
       addsd
               xmm1, xmm0
               QWORD PTR [rdi], xmm1
               rcx, rax
               .L3
       add
               rdi, 8
       add
               rsi, rcx
       cmp
               r8, rdi
               .L4
       jne
.L1:
       ret
```

原始代码频繁地在栈上保存和加载变量,优化后的代码更多地依赖寄存器来存储,将循环结构简化, 以减少不必要的计算和跳转;优化后的代码利用了 rcx 和 r8 寄存器来跟踪循环计数和内存地址, 避免了在每次迭代中重复计算偏移量。

但是也可以看出,编译器优化后使用的依然是 xmm 寄存器,没有启用ymm / zmm 系列的向量化寄存器。这是因为编译器并不知道硬件是不是支持 AVX 。这时我们可以让编译器自己检测当前硬件支持的指令集,只需要添加编译器优化指令 -march=native 即可。

效果是非常明显的, 速度在原来的基础上又快了一倍:

```
Elapsed time: 53.8361 s
Status: Converged after 18641 iterations.
Check: Relative residual = 1.082694e-15
Result: ESC[1;32mAccepted, great job! :)ESC[0m]
```

所以最终我们的编译器设置为:

```
# Set Compiler
8
    set(CMAKE C COMPILER "gcc")
    set(CMAKE CXX COMPILER "g++")
10
    set(CMAKE Fortran COMPILER "gfortran")
11
12
13
    # Set flags
14
    set(CMAKE C FLAGS "-g -march=native -fopenmp -Ofast")
    set(CMAKE_CXX_FLAGS "-g -std=c++11 -march=native -fopenmp -Ofast")
15
    set(CMAKE_Fortran_FLAGS "-Ofast -g")
16
```

2.2 Step 2

由于对 BICGSTAB 算法没有了解,所以根据 Lab 文档的建议,我们关注 solver.c 代码本身。在 run.sh 中通过 source /opt/intel/oneapi/setvars.sh 启用性能分析工具 Vtune 进行 profile 。我尝试了直接在 VS Code 上通过 X11 转发启动图形化界面,但似乎有些问题一直无法成功; 又尝试了 MobaXterm ,但反应延迟非常高,并且没法正常启动分析; 最后是将生成的报告下载 到本地查看。

```
source /opt/intel/oneapi/setvars.sh

VTUNE_OUTPUT_DIR=vtune_results
mkdir -p $VTUNE_OUTPUT_DIR

vtune -collect hotspots -result-dir $VTUNE_OUTPUT_DIR -quiet ./build/bicgstab ./data/case_2001.bin
vtune -finalize -result-dir $VTUNE_OUTPUT_DIR
```

这里我主要关注了 hotspot 的信息:

▼ Top Hotspots >

This section lists the most active functions in your application. Optimizing these hotspot functions typically results in improving overall application performance.

Function	Module	CPU Time ③	% of CPU Time ②
gemv	bicgstab 🏲	425.651s	99.9%
dot_product	bicgstab 🏲	0.276s	0.1%
bicgstab	bicgstab 🏲	0.104s	0.0%
precondition_apply	bicgstab 🏲	0.052s	0.0%
std::istream::read	libstdc++.so.6	0.017s	0.0%
[Others]	N/A*	0.020s	0.0%

^{*}N/A is applied to non-summable metrics.

Summary 中给出了 Top Hotspots 的汇总,可以明显看到 gemv 函数占据了绝大部分 CPU Time 。 所以接下了优化重心放在 gemv 上。

P.S 实际上 Vtune 的功能十分强大,但现在属实还不太会用,光让它生成出一份正常的报告就花了很多时间,所以实际优化的时候 Vtune并没有帮到我什么忙qwq,希望之后有机会详细学一下

2.3 Step 3

对于 gemv 的优化, 首先我尝试了访存优化, 利用程序的空间局部性, 对矩阵和向量进行分块:

我将矩阵分成了 560×560 的块,将向量分成了 1×560 的块。选取 560 是因为节点的 L1d cache 的大小为 2.4 MiB ,能存储约 560×560 个 double 数。

在内循环中,随着 jj 累加,对 A 和对 x 的内存访问是连续进行的,这样可以通过数据预取机制提前将数据加载到缓存中,减少 cache miss。

但是这种做法的效果并不好,在时间上几乎没有任何提升,加上后面我始终没想明白怎么把分块和SIMD结合在一起,所以在最终代码中并没有体现任何分块,这只是一次对访存优化不成功的尝试。

2.4 Step 4

接下来尝试 SIMD 指令级并行。我们直接使用 AVX-512 指令集,同时取出 8 个 double 类型的数据同时运算。具体优化类似 Lab2.5 手写 SIMD 向量化。

我对 gemv dot-product precondition precondition_apply 四个函数使用了指令级并行优化,但真正对运行时间起到决定性作用的是 gemv 函数:

```
void gemv(double* y, double* A, double* x, int N) {
  for (int i = 0; i < N; i++) {
    __m512d y_reg = _mm512_setzero_pd();</pre>
```

由于 A, x 的读取不在 solver.c 中,所以没法将内存对齐。总体思路就是每次从 A, x 中读取 8 个 double 数据,并行地做向量的逐位乘法,再做向量累加,最后将 8 位数据相加得到对应结果向量第 i 位的值。

SIMD 指令级优化后, 时间减少了约 10s:

```
Elapsed time: 44.6019 s
Status: Converged after 17010 iterations.
Check: Relative residual = 1.267652e-15
Result: ESC[1;32mAccepted, great job! :)ESC[0m]
```

2.5 Step 5

在单节点上,我们往往使用多线程来进行并行化。OpenMP 是一种简单易用的多线程并行编程模型。

由于 OpenMP 本身在线程创建、调度、销毁上就有开销,所以我只对 gemv 函数使用了 OpenMP 。具体使用其实只是在外层 for 循环外加一句

```
#pragma omp parallel for
```

用于启动多线程并行执行这个 for 循环,需要在 run. sh 中声明变量

```
export OMP_NUM_THREADS=52
```

由于实验环境每个节点最多使用 52 个物理核心 (2 × Intel(R) Xeon(R) Gold 5320 CPU @ 2.20GHz), 所以我直接声明了 52 个线程。由于时间有限, 我没有详细测试最优的线程数, 只测试了应用超线程后 104 个线程和 52 个线程的效果差不多。

添加 OpenMP 后的代码如下:

```
void gemv(double* y, double* A, double* x, int N) {
    #pragma omp parallel for
    for (int i = 0; i < N; i++) {
        __m512d y_reg = _mm512_setzero_pd();
       int j;
       for (j = 0; j \leftarrow N - 8; j += 8) {
           m512d A reg = mm512 loadu pd(A + i * N + j); // 内存未对齐
            _m512d x_reg = _mm512_loadu_pd(x + j);
            __m512d mul_reg = _mm512_mul_pd(A_reg, x_reg);
           y_reg = _mm512_add_pd(y_reg, mul_reg);
       }
       y[i] = _mm512_reduce_add_pd(y_reg);
       // 剩余边界
        for (; j < N; j++) {
           y[i] += A[i * N + j] * x[j];
   }
}
```

值的一提的是,从寄存器累加到 y[i] 前面是不需要限定 # pragma omp critical 的,因为每个 线程并行处理时都对应单独的 i ,写入时 y[i] 是不存在冲突的,增加 critical 的限定反而会造成性能下降。

可以在 for 后添加 schedule(kind[, chunk_size]) 指定调度方式和粒度。我尝试了 static 和 dynamic 两种模式以及一些参数,但似乎都没有优化效果,加上时间有限,没有细致测试合适的参数,所以最后没有设置 schedule 。

但是第一次开启 OpenMP 后发现时间反而变慢了。起初我以为是 OpenMP 有巨大开销,测试的矩阵规模不够大,或是编译器优化已经优化到了这种程度。但都没有道理,这似乎是既增加了 OpenMP 的开销,又没有启用线程级并行的结果。

最后发现问题出在 run. sh 文件, 我依旧沿用了初始 #SBATCH - cpus-per-task=1 的设置, 这相当于重新限制了只能使用一个 CPU 核心。在设定了每个 task 分配的 CPU 核心数并简单设定绑核策略为 close 后

```
#SBATCH --cpus-per-task=104

export OMP_PROC_BIND=close
```

运算速度有了巨大提升:

Elapsed time: 1.52376 s

Status: Converged after 17010 iterations. Check: Relative residual = 1.267652e-15

Result: Esc[1;32mAccepted, great job! :) Esc[0m

2.6 优化效果测试

至此,优化已经有较好的成效,在 oj 平台进行测试 取得 103.89 分:

并用 Vtune 测试性能进行对比:

This section lists the most active functions in your application. Optimizing these hotspot functions typically results in improving overall application performance.

Function	Module	CPU Time ②	$\%$ of CPU Time \circledcirc
func@0x1f5e4	libgomp.so.1	159.807s	48.5%
gemvomp_fn.0	bicgstab	101.718s	30.9%
func@0x1f784	libgomp.so.1	43.714s	13.3%
func@0x1f6d0	libgomp.so.1	15.037s	4.6%
func@0x1f934	libgomp.so.1	4.360s	1.3%
[Others]	N/A*	4.957s	1.5%

^{*}N/A is applied to non-summable metrics.

可以看到 hotspot 已经发生了很大变化,似乎 CPU 时间不再集中在 gemv 函数上,而在计时区内运行 BICGSTAB 的时间很短,对于整个程序,更多的时间是用在 OpenMP 相关的额外开销上,比如 libomp. so 是用于实现 OpenMP 并行变成的库,而 gemv._omp_fn.0 应该是自动生成线程处理的函数,负责执行如 #pragma omp for 指令中的代码块。

在这两张图中显示的更详细:整个程序的主要时间是用在前后红色框中 OpenMP 带来的开销,中间紫色框的部分所占用的时间是极少的;与之相反,在 baseline 的测试结果中, gemv 函数的耗时是集中且极高的。

Function Stack	CPU Time: Total ▼ »	CPU Time: Self	Module	Function (Full)	Source File	Start Add
Total	100.0%	0s				
▼clone3	93.3%	0s	libc.so.6	clone3	clone3.S	0x1097b0
▼ start_thread	93.3%	0s	libc.so.6	start_thread	pthread_cr	0x88e70
▼ func@0x1cc44	93.3%	2.124s	libgom	func@0x1cc44		0x1cc44
▶ func@0x1f5e4	45.7%	150.563s	libgom	func@0x1f5e4		0x1f5e4
▶ gemvomp_fn.0	28.8%	94.742s	bicgstab	gemvomp_f	solver.c	0x27a0
▶ func@0x1f784	12.6%	41.404s	libgom	func@0x1f784		0x1f784
▶ func@0x1f6d0	4.3%	14.259s	libgom	func@0x1f6d0		0x1f6d0
▶ func@0x1f934	1.3%	4.136s	libgom	func@0x1f934		0x1f934
func@0x1f5e4	2.8%	9.244s	libgom	func@0x1f5e4		0x1f5e4
gemvomp_fn.0	1.8%	6.035s	bicgstab	gemvomp_f	solver.c	0x27a0
▼ _start	1.0%	0s	bicgstab	_start		0x26b0
libc_start_main_impl	1.0%	0s	libc.so.6	libc_start	libc-start.c	0x27280
▼ main	1.0%	0s	bicgstab	main	main.cpp	0x231e
▼ bicgstab	1.0%	0.100s	bicgstab	bicgstab	solver.c	0x3050
▶ gemv	0.4%	0s	bicgstab	gemv	solver.c	0x3a05
▶ gemv	0.4%	0s	bicgstab	gemv	solver.c	0x357d
▶ precondition_apply	0.0%	0.048s	bicgstab	precondition	solver.c	0x34a1
▶ precondition_apply	0.0%	0.024s	bicgstab	precondition	solver.c	0x392b
▶ dot_product	0.0%	0.060s	bicgstab	dot_product	solver.c	0x35d0
▶ dot_product	0.0%	0.020s	bicgstab	dot_product	solver.c	0x3ec6
▶ gemv	0.0%	0s	bicgstab	gemv	solver.c	0x3177
▶ dot_product	0.0%	0s	bicgstab	dot_product	solver.c	0x3a60
▶ dot_product	0.0%	0.028s	bicgstab	dot_product	solver.c	0x3b8d
▶ dot_product	0.0%	0s	bicgstab	dot_product	solver.c	0x381e
▶ read_data	0.0%	0s	bicgstab	read_data(st	judger.cpp	0x22b0
▶ judge	0.0%	0s	bicgstab	judge(int, std:	judger.cpp	0x4730
▶ func@0x1f784	0.7%	2.310s	libgom	func@0x1f784		0x1f784
func@0x1f6d0	0.2%	0.778s	libgom	func@0x1f6d0		0x1f6d0

Grouping: Function / Call Sta	CK		_	1 % Q G
Function / Call Stack	CPU Time ▼ »	Module	Function (Full)	Source File
▶ gemv	425.651s	bicgstab	gemv	solver.c
dot_product	0.276s	bicgstab	dot_product	solver.c
▶ bicgstab	0.104s	bicgstab	bicgstab	solver.c
▶ precondition_apply	0.052s	bicgstab	precondition_apply	solver.c
▶ std::istream::read	0.017s	libstdc++.so.6	std::istream::read(char*, long)	
▶ check_answer	0.012s	bicgstab	check_answer(int, double*, double*, double*)	judger.cpp
▶ OS SyscallIsSuccess	0.008s	libc-dynamic.so	OS SyscallIsSuccess	

2.7 MPI

MPI 是一种非共享内存的进程级并行编程模型,因此在使用 MPI 进行并行化时,需要手动进行进程间的通信来实现数据在进程间的传输。 MPI 可以让我们突破单个节点的硬件限制,在多节点上实现并行化。

简单来说, OpenMP 让我们在单一节点上实现多线程并行, 而 MPI 让我们在可以实现多节点并行。

因为是多节点并行,所以显然需要分配计算任务,具体来说就是将输入进来的矩阵进行切割,并通过进程间的通信来分配给各个进程,每个进程分别计算出结果再合并输出。根据这个思路,我尝试由一个进程读取数据,将数据分配给其他进程的模式。

但我的第一次尝试把问题想得太简单了,我直接在根进程读取完数据后就对矩阵进行了分割,给每个函数都加上 start 和 end ,试图让后面每个进程的操作都针对分割后的一块矩阵单独进行,最后把结果拼接成要求的向量。

```
// bad version

void gemv(double* y, double* A, double* x, int N, int start, int end);

double dot_product(double* x, double* y, int N, int start, int end);

...

int chunk = N / size;
int remainder = N % size;
int start, end;

if (rank < remainder) {
    start = rank * (chunk + 1);
    end = start + chunk;
} else {
    start = rank * chunk + remainder;
    end = start + chunk - 1;
}</pre>
```

这显然是不合理的,结果也是显而易见的,虽然可以跑通,但答案错误。

发现问题后只能退而求其次,只对 gemv 部分使用 MPI 。但我仍然沿用了上个版本的思路,只由根进程读取数据再传输到各个子进程;每个进程在其他部分都各自执行,只在 gemv 时拆分成每个进程算一部分,合并后又各自执行。

由于对 MPI 太不熟悉,想出的这个路径显然是一种及其低效的思路。不但会因为根进程向子进程传输大矩阵而增加巨量开销,而且这样做相当于在 gemv 部分之外每个进程在进行着相同且重复的工作。

关于 MPI 的各种函数的接口定义, 可以查看 Microsoft MPI Reference 。

```
// bad version, too!

void gemv(double* y, double* A, double* x, int N, int start, int end);

...

int rank, size;

// 获取当前进程的相关信息

MPI_Comm_rank(MPI_COMM_WORLD, &rank);

MPI_Comm_size(MPI_COMM_WORLD, &size);

int *recvcounts = (int*)malloc(size * sizeof(int));
 int *displs = (int*)malloc(size * sizeof(int));

int chunk = N / size;
 int remainder = N % size;

int offset = 0;
```

```
for (int i = 0; i < size; i++) {
    // 每个进程的接收数据量
   recvcounts[i] = chunk + (i < remainder ? 1 : 0);</pre>
   displs[i] = offset;
   offset += recvcounts[i];
}
// 计算当前进程的起始位置和结束位置
int start = displs[rank];
int end = start + recvcounts[rank];
. . .
int bicgstab(int N, double* A, double* b, double* x, int max_iter, double tol, MPI_Comm comm);
. . .
// 1. r0 = b - A * x0
gemv(r, A, x, N, start, end);
MPI_Barrier(comm);
if(rank == 0)
   MPI_Gatherv(MPI_IN_PLACE, 0, MPI_DOUBLE, r, recvcounts, displs, MPI_DOUBLE, 0, comm);
   MPI_Gatherv(r + start, end - start , MPI_DOUBLE, r, recvcounts, displs, MPI_DOUBLE, 0, comm);
MPI_Barrier(comm);
MPI_Bcast(r , N , MPI_DOUBLE , 0 ,comm);
for (int i = 0; i < N; i++) {
    r[i] = b[i] - r[i];
}
```

数据读取模式:

```
// Read data from file
if (world_rank == 0) {
   read data(filename, &N, &A, &b, &x);
}
// 对各个进程广播 N 的值
MPI_Bcast(&N, 1, MPI_INT, 0, MPI_COMM_WORLD);
// 只有主进程读取数据,其他进程的数据由主进程分配
if (world_rank != 0) {
   A = (double*)malloc(N * N * sizeof(double));
   b = (double*)malloc(N * sizeof(double));
   x = (double*)malloc(N * sizeof(double));
}
// 向各个进程广播 A, b, x 的值
MPI_Bcast(A, N * N, MPI_DOUBLE, 0, MPI_COMM_WORLD);
MPI_Bcast(b, N, MPI_DOUBLE, 0, MPI_COMM_WORLD);
MPI_Bcast(x, N, MPI_DOUBLE, 0, MPI_COMM_WORLD);
```

但即使是这种极其 naive 的 MPI 实现,我也遇到了直到最后都没有解决的问题: 迭代没有收敛,始终是 -nan

```
Iteration 1000, residul = -nan
Iteration 1000, residul = -nan
Iteration 1000, residul = -nan
Iteration 2000, residul = -nan
Iteration 2000, residul = -nan
Iteration 2000, residul = -nan
Iteration 3000, residul = -nan
Iteration 3000, residul = -nan
Iteration 3000, residul = -nan
Iteration 4000, residul = -nan
Iteration 5000, residul = -nan
```

迫于对于 MPI 有限的知识和调试手段,这个问题直到报告提交都没有解决qwq

3. 结语

这是本次 HPC101 超算短学期的最后一个实验报告。回顾 Lab4 , 虽然通过 SIMD 指令级并行和 OpenMP 已经实现了 oj 较为不错的分数, 但是没有实现 MPI 还是十分遗憾的。

而回顾整个短学期课程,觉得当初选择这门课程实在是明智的选择。早在报名之初就有队内同学让我"做好付出整个暑假的准备"。如今暑假悄然过去,顿感不虚此行,获益良多。从最初对 linux 一无所知挣扎着配置出集群运行 HPL ,到 Lab5 艰难的构建 Transformer ;从 Lab2 简单的向量化计算到后面的 OpenMP 和 MPI ,仿佛一段旅程,路途艰险但风景灿烂。希望短学期的课程只是我与超算缘分的开始。也感谢老师、助教和学长们对课程辛苦的付出!