Лекция 8 Параллельные сеточные вычисления

Курносов Михаил Георгиевич

E-mail: mkurnosov@gmail.com WWW: www.mkurnosov.net

Курс «Параллельные вычислительные технологии» Сибирский государственный университет телекоммуникаций и информатики (г. Новосибирск)



Расчет стационарного распределения тепла

- С течением времени в теле устанавливается некоторое не зависящее от времени распределение температуры (тепловое состояние выходит на стационарный режим)
- Распределение температуры в таком случае описывается уравнением теплопроводности
- Стационарное двумерное уравнение Лапласа (Laplace equation)

$$\Delta U = \frac{d^2 U}{dx^2} + \frac{d^2 U}{dy^2} = \mathbf{0} \tag{1}$$

- Функция U(x, y) неизвестный потенциал (теплота)
- **Задано** уравнение (1), значения функции U(x, y) на границах расчетной 2D-области
- **Требуется** найти значение функции *U*(*x, y*) во внутренних точках расчетной 2D-области

Расчет стационарного распределения тепла

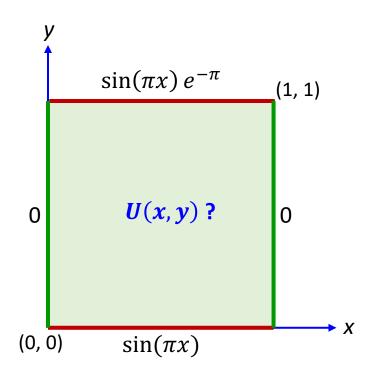
■ Найти решение стационарного двумерного уравнения Лапласа (Laplace equation)

$$\frac{d^2U}{dx^2} + \frac{d^2U}{dy^2} = \mathbf{0}$$

- Расчётная область (domain) квадрат [0, 1] x [0, 1]
- Граничные условия (boundary conditions):
 - $U(x,0) = \sin(\pi x)$

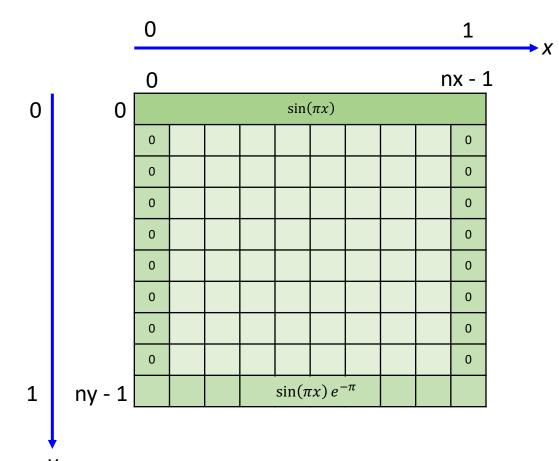
 - $\Box U(0,y) = U(1,y) = 0$
- Для данной задачи известно аналитическое решение

$$U(x,y) = \sin(\pi x) e^{-\pi y}$$



Дискретизация расчетной области

■ Расчетная область [0, 1] х [0, 1] покрывается прямоугольной сеткой с постоянным шагом: пх точек по оси ОХ и пу точек по оси ОҮ (дискретизация)



- Расчетная сетка массив [пу, пх] чисел (температура)
- Переход от индекса ячейки [i, j] к координатам в области [0, 1] x [0, 1]:

$$x = j * 1.0 / (nx - 1.0)$$

 $y = i * 1.0 / (ny - 1.0)$

Разностная аппроксимация оператора Лапласа

 Вторые производные аппроксимируются на расчетной сетке разностным уравнением с применением четырехточечного шаблона

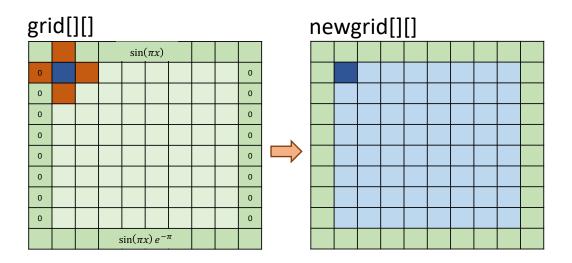
$$\Delta U = \frac{d^2 U}{dx^2} + \frac{d^2 U}{dy^2} = 0$$

Новое значение в каждой точке сетки равно среднему из предыдущих значений четырех ее соседних точек (схема «крест»)

$\sin(\pi x)$									
0									0
0									0
0									0
0									0
0									0
0									0
0									0
0									0
			$\sin(\pi x) e^{-\pi}$						

Метод последовательных итераций Якоби (Jacobi)

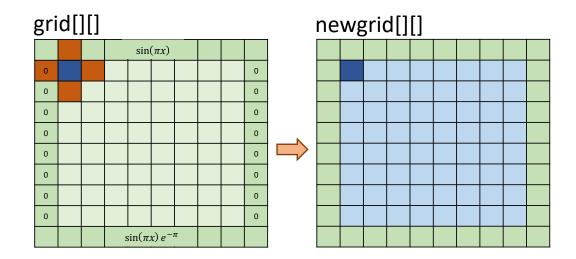
- 1. Инициализируем сетку grid[][]
- 2. Вычисляем значение в каждой внутренней ячейке сетки newgrid[i][j] как среднее из предыдущих значений четырех ее соседних точек в сетке grid (схема «крест»)



```
for (int i = 1; i < ny - 1; i++) {
    for (int j = 1; j < nx - 1; j++) {
        newgrid[IND(i, j)] = (
            grid[IND(i - 1, j)] +
            grid[IND(i + 1, j)] +
            grid[IND(i, j - 1)] +
            grid[IND(i, j + 1)]) * 0.25;
    }
}</pre>
```

Метод последовательных итераций Якоби (Jacobi)

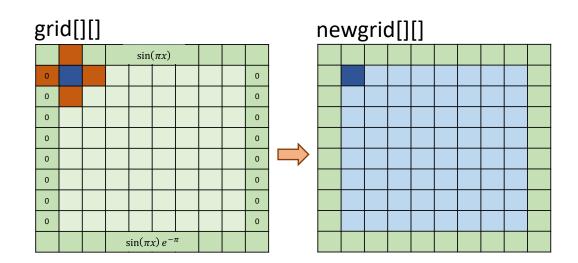
- 1. Инициализируем сетку grid[][]
- 2. Вычисляем значение в каждой внутренней ячейке сетки newgrid[i][j] как среднее из предыдущих значений четырех ее соседних точек в сетке grid (схема «крест»)
- 3. Заканчиваем итерационный процесс, если максимум из попарных разностей соответствующих ячеек двух сеток меньше заданного значения EPSILON



```
double maxdiff = -DBL_MAX;
for (int i = 1; i < ny - 1; i++) {
    for (int j = 1; j < nx - 1; j++) {
        int ind = IND(i, j);
        maxdiff = fmax(
            maxdiff,
            fabs(grid[ind] - newgrid[ind])
        );
    }
}
if (maxdiff < EPS) break;</pre>
```

Метод последовательных итераций Якоби (Jacobi)

- 1. Инициализируем сетку grid[][]
- 2. Вычисляем значение в каждой внутренней ячейке сетки newgrid[i][j] как среднее из предыдущих значений четырех ее соседних точек в сетке grid (схема «крест»)
- 3. Заканчиваем итерационный процесс, если максимум из попарных разностей соответствующих ячеек двух сеток меньше заданного значения EPSILON
- 4. На следующей итерации текущей делаем обновленную сетку newgrid



```
// Вместо копирования ячеек newgrid в grid,
// обмениваем значения указателей

double *p = grid;
grid = newgrid;
newgrid = p;
```

```
#include <inttypes.h>
#include <math.h>
#include <float.h>
#include <sys/time.h>
#define EPS 0.001
#define PI 3.14159265358979323846
#define IND(i, j) ((i) * nx + (j))
double wtime()
    struct timeval t;
    gettimeofday(&t, NULL);
    return (double)t.tv sec + (double)t.tv usec * 1E-6;
int main(int argc, char *argv[])
    double ttotal = -wtime();
    int rows = (argc > 1) ? atoi(argv[1]) : 100;
    int cols = (argc > 2) ? atoi(argv[2]) : 100;
    const char *filename = (argc > 3) ? argv[3] : NULL;
    if (cols < 1 || rows < 1) {</pre>
        fprintf(stderr, "Invalid size of grid: rows %d, cols %d\n", rows, cols);
        exit(EXIT FAILURE);
```

```
// Allocate memory for grids [0..ny - 1][0..nx - 1]
int ny = rows;
                                                                                                             nx - 1
int nx = cols;
                                                                                     0
                                                                                                  sin(\pi x)
double talloc = -wtime();
//double *local grid = cmalloc(ny * nx, sizeof(*local grid));
//double *local newgrid = cmalloc(ny * nx, sizeof(*local newgrid));
double *local grid = malloc(ny * nx * sizeof(*local grid));
double *local newgrid = malloc(ny * nx * sizeof(*local newgrid));
talloc += wtime();
double tinit = -wtime();
                                                                                                 \sin(\pi x) e^{-\pi}
                                                                                  ny - 1
// Fill boundary points:
// - left and right borders are zero filled
     - top border: u(x, 0) = \sin(pi * x)
     - bottom border: u(x, 1) = \sin(pi * x) * \exp(-pi)
double dx = 1.0 / (nx - 1.0);
// Initialize top border: u(x, 0) = \sin(pi * x)
for (int j = 0; j < nx; j++) {
    int ind = IND(0, j);
    local newgrid[ind] = local grid[ind] = sin(PI * dx * j);
```

```
// Initialize bottom border: u(x, 1) = \sin(pi * x) * \exp(-pi)
for (int j = 0; j < nx; j++) {
    int ind = IND(ny - 1, j);
    local_newgrid[ind] = local_grid[ind] = sin(PI * dx * j) * exp(-PI);
// Initialize inner cells (we can use calloc for zeroing)
for (int i = 1; i < ny - 1; i++) {
    for (int j = 1; j < nx - 1; j++) {
        local newgrid[IND(i, j)] = 0.0;
        local grid[IND(i, j)] = 0.0;
tinit += wtime();
```

```
int niters = 0;
for (;;) {
    niters++;
    // Update interior points
    for (int i = 1; i < ny - 1; i++) {
        for (int j = 1; j < nx - 1; j++) {
            local newgrid[IND(i, j)] =
                (local\_grid[IND(i - 1, j)] + local\_grid[IND(i + 1, j)] +
                 local grid[IND(i, j - 1)] + local grid[IND(i, j + 1)]) * 0.25;
    double maxdiff = -DBL MAX;
    for (int i = 1; i < ny - 1; i++) {
                                                 // Check termination condition
        for (int j = 1; j < nx - 1; j++) {
            int ind = IND(i, j);
            maxdiff = fmax(maxdiff, fabs(local grid[ind] - local newgrid[ind]));
    double *p = local grid;
                                  // Swap grids (after termination local grid will contain result)
    local grid = local newgrid;
    local newgrid = p;
    if (maxdiff < EPS) break;</pre>
ttotal += wtime();
```

```
printf("# Heat 2D (serial): grid: rows %d, cols %d\n", rows, cols);
printf("# niters %d, total time (sec.): %.6f\n", niters, ttotal);
printf("# talloc: %.6f, tinit: %.6f, titers: %.6f\n", talloc, tinit, ttotal - talloc - tinit);
// Save grid
if (filename) {
   FILE *fout = fopen(filename, "w");
    if (!fout) {
        perror("Can't open file");
        exit(EXIT FAILURE);
    for (int i = 0; i < ny; i++) {
        for (int j = 0; j < nx; j++)
            fprintf(fout, "%.4f ", local_grid[IND(i, j)]);
       fprintf(fout, "\n");
    fclose(fout);
return 0;
```

Анализ последовательной версии метода Якоби

- Инициализация сеток $O(2N + N^2)$
- Одна итерация основного цикла метода Якоби
 - Обновление сетки $-O(N^2)$
 - Вычисление условия завершения цикла (maxdiff) $-O(N^2)$
 - Обмен указателей *O*(1)

```
# Кластер Jet (Intel Xeon E5420)

$ ./heat 5000 5000

# Heat 2D (serial): grid: rows 5000, cols 5000

# niters 243, total time (sec.): 92.918615

# talloc: 0.000062, tinit: 0.226622, titers: 92.691931
```

 99% времени выполнения приходится на основной цикл по итерациям метода Якоби

```
$ perf record ./heat 2000 2000
# Heat 2D (serial): grid: rows 2000, cols 2000
# niters 243, total time (sec.): 4.471221
# talloc: 0.000042, tinit: 0.020840, titers: 4.450339
[ perf record: Woken up 3 times to write data ]
[ perf record: Captured and wrote 0.700 MB perf.data (17852 samples) ]
$ perf report
```

```
Samples: 17K of event 'cycles:u', Event count (approx.): 12008426498
Overhead Command Shared Object
                                    Symbol
                                    [.] main
         heat
                 heat
                 libm-2.24.so
                                    [.] __fmax
         heat
  0.06% heat
                 [kernel.kallsyms]
                                    [k] page_fault
  0.03% heat
                                    [.] fmax@plt
                 heat
                 [kernel.kallsyms]
  0.02% heat
                                    [k] __irqentry_text_start
  0.00% heat
                ld-2.24.so
                                    [.] _dl_lookup_symbol_x
  0.00% heat
                                    [.] _dl_start
                ld-2.24.so
  0.00% heat
                 ld-2.24.so
                                    [.] _start
```

- 75% циклов процессора пришлось на функцию main
- 24.8% циклов процессора потрачено на выполнение функции fmax

```
main /home/data/teaching/pct/pct-spring2017/lecture10/src/heat.serial/heat
                             local_newgrid[IND(i, j)] =
                                 (local_grid[IND(i - 1, j)] + local_grid[IND(i + 1, j)] +
              movsd (%rdi, %rax, 8), %xmm0
 0.13
              addsd (%rsi,%rax,8),%xmm0
                                 local_grid[IND(i, j - 1)] + local_grid[IND(i, j + 1)]) * 0.25;
               addsd 0x8(%rdx, %rax, 8), %xmm0
              mulsd Ox512(%rip),%xmm0
                                              # 4010a0 <__dso_handle+0xf8>
                    niters++;
                     // Update interior points
                    for (int i = 1; i < ny - 1; i++) {
                         for (int j = 1; j < nx - 1; j++) {
                            local_newgrid[IND(i, j)] =
                for (;;) {
                    niters++;
                     // Update interior points
                     for (int i = 1; i < ny - 1; i++) {
                         for (int j = 1; j < nx - 1; j++) {
 0.07
                     %eax,%ebp
            ↑ jg
                      350
                     $0x1, %r9d
                int niters = 0;
                for (;;) {
                    niters++;
                     // Update interior points
                     for (int i = 1; i < ny - 1; i++) {
                     %r10d,%ebx
              movslq %r8d,%rax
 0.01
            ↑ jg
                      318
                     0x18(\%rsp),\%eax
               movsd 0x4cd(%rip),%xmm0
                                               # 401080 < dso handle+0xd8>
          for help on key bindings
```

Аннотированный исходный код

14.74% + 12.76% + 11.20%
 процентов циклов
 процессора потрачены
 на обновление ячеек
 в главном цикле

```
main /home/data/teaching/pct/pct-spring2017/lecture10/src/heat.serial/heat
                            int ind = IND(i, j);
                            maxdiff = fmax(maxdiff, fabs(local_grid[ind] - local_newgrid[ind]));
              subsd 0x8(%rbx,%rbp,8),%xmm1
              andpd 0x4a7(%rip),%xmm1
                                              # 4010b0 <__dso_handle+0x108>
                    // Check termination condition
                    double maxdiff = -DBL_MAX;
                    for (int i = 1; i < ny - 1; i++) {
                        for (int j = 1; j < nx - 1; j++) {
 0.01
                     3d0
            ↑ jne
                     // Check termination condition
                    double maxdiff = -DBL_MAX;
                    for (int i = 1; i < ny - 1; i++) {
                     $0x1,%r14d
 0.01
              add
 0.01
                     0x18(%rsp),%r15d
              add
                     0x1c(%rsp),%r14d
 0.06
              cmp
            ↑ jne
                      3a8
                    // Swap grids (after termination local_grid will contain result)
                    double *p = local_grid;
                    local_grid = local_newgrid;
                    local_newgrid = p;
                    if (maxdiff < EPS)</pre>
              movsd 0x47d(%rip),%xmm1
                                               # 4010a8 <__dso_handle+0x100>
                     0x20(%rsp),%r13
              mov
                     0x10(%rsp),%ebp
              ucomis %xmm0, %xmm1
```

Аннотированный исходный код

10.62% + 8.72% + 23.73% +
 10.90% процентов тактов процессора потрачены на вычисление условия завершения цикла (maxdiff)

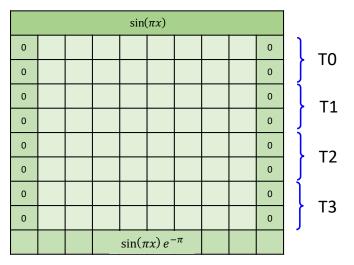
План создания параллельной версии метода Якоби

- 1. Распараллеливание вычисления условия завершения цикла (maxdiff) $O(N^2)$
- 2. Распараллеливание обновления сетки $O(N^2)$
- 3. Инициализация сеток $O(2N + N^2)$

Параллельная версия метода Якоби (v1)

```
double tinit = -omp get wtime();
// Fill boundary points:
// - left and right borders are zero filled
// - top border: u(x, 0) = \sin(pi * x)
// - bottom border: u(x, 1) = \sin(pi * x) * \exp(-pi)
double dx = 1.0 / (nx - 1.0);
// Initialize top border: u(x, 0) = \sin(pi * x)
#pragma omp parallel for
for (int j = 0; j < nx; j++) {
    int ind = IND(0, j);
    local newgrid[ind] = local grid[ind] = sin(PI * dx * j);
// Initialize bottom border: u(x, 1) = \sin(pi * x) * \exp(-pi)
#pragma omp parallel for
for (int j = 0; j < nx; j++) {
    int ind = IND(ny - 1, j);
    local newgrid[ind] = local grid[ind] = sin(PI * dx * j) * exp(-PI);
#pragma omp parallel for
for (int i = 1; i < ny - 1; i++) {
    for (int j = 1; j < nx - 1; j++) {
        local newgrid[IND(i, j)] = 0.0;
        local grid[IND(i, j)] = 0.0;
tinit += omp get wtime();
```

Параллельная инициализация



Параллельная версия метода Якоби (v1)

```
for (;;) {
    niters++;
   #pragma omp parallel for
    for (int i = 1; i < ny - 1; i++) {
        for (int j = 1; j < nx - 1; j++) {
            local newgrid[IND(i, j)] =
                (local\_grid[IND(i - 1, j)] + local\_grid[IND(i + 1, j)] +
                 local_grid[IND(i, j - 1)] + local_grid[IND(i, j + 1)]) * 0.25;
    double maxdiff = -DBL MAX;
    #pragma omp parallel for reduction(max:maxdiff)
    for (int i = 1; i < ny - 1; i++) {
        for (int j = 1; j < nx - 1; j++) {
            int ind = IND(i, j);
            maxdiff = fmax(maxdiff, fabs(local_grid[ind] - local_newgrid[ind]));
    double *p = local_grid; local_grid = local_newgrid; local_newgrid = p;
    if (maxdiff < EPS) break;</pre>
```

Анализ параллельного метода Якоби (v1)

1. Верификация — проверяем корректность работы параллельной программы

```
$ ./heat 1000 1000 result.serial
$ ./heatomp 1000 1000 result.omp
$ diff ./result.serial ./result.omp
```

2. Анализ эффективности (масштабируемости) — оцениваем значение коэффициента ускорения

```
$ ./heat 5000 5000
# niters 243, total time (sec.): 92.839720
# talloc: 0.000060, tinit: 0.226680, titers: 92.612980
```

```
$ OMP_NUM_THREADS=2 ./heatomp 5000 5000
# niters 243, total time (sec.): 57.545329
# talloc: 0.000018, tinit: 0.183661, titers: 57.361649
```

```
S_2 = 1.6
```

Низкая масштабируемость

```
$ OMP_NUM_THREADS=8 ./heatomp 5000 5000
# niters 243, total time (sec.): 52.546717
# talloc: 0.000018, tinit: 0.288810, titers: 52.257888
```

$$S_8 = 1.8$$

План создания параллельной версии метода Якоби (v2)

- Сократим накладные расходы на активацию параллельных регионов #pragma omp parallel
- Активируем параллельный регион один раз перед запуском основного цикла по итерациям
- Совместим в одном цикле обновление сетки и вычисление условия завершения цикла
- Для сокращения числа разделяемых потоками объектов, каждый из них содержит локальные копии:
 - Указателей на сетки: p, local_grid, local_newgrid
 - Счетчика числа итераций niters

Параллельная версия метода Якоби (v2)

```
double maxdiff;
#pragma omp parallel
    // Thread-private copy of shared objects
    double *grid = local grid;
    double *newgrid = local newgrid;
    int niters = 0;
    for (;;) {
        #pragma omp barrier  // All threads finished to check break condition
        maxdiff = -DBL MAX;
        #pragma omp barrier  // All threads updated maxdiff and ready to start reduction
        #pragma omp for reduction(max:maxdiff)
        for (int i = 1; i < ny - 1; i++) {
            for (int j = 1; j < nx - 1; j++) {
                int ind = IND(i, j);
                newgrid[ind] =
                    (grid[IND(i - 1, j)] + grid[IND(i + 1, j)] +
                     grid[IND(i, j - 1)] + grid[IND(i, j + 1)]) * 0.25;
                maxdiff = fmax(maxdiff, fabs(grid[ind] - newgrid[ind]));
```

Параллельная версия метода Якоби (v2)

```
double *p = grid;
                           // Swap grids (after termination grid will contain result)
       grid = newgrid;
       newgrid = p;
       niters++;
       if (maxdiff < EPS)</pre>
           break;
   } // for iters
   #pragma omp barrier
   #pragma omp master
       ttotal += omp get wtime();
       printf("# Heat 2D (OMP %d): grid: rows %d, cols %d\n", omp_get_num_threads(), rows, cols);
       printf("# niters %d, total time (sec.): %.6f\n", niters, ttotal);
       printf("# talloc: %.6f, tinit: %.6f, titers: %.6f\n", talloc, tinit, ttotal - talloc - tinit);
       // Restore shared objects
       local grid = grid;
} // pragma omp parallel
```

Анализ параллельного метода Якоби (v2)

- 1. Верификация проверяем корректность работы параллельной программы
- **2. Анализ эффективности (масштабируемости)** оцениваем значение коэффициента ускорения

Кластер Jet

```
$ ./heat 5000 5000
# niters 243, total time (sec.): 92.839720
# talloc: 0.000060, tinit: 0.226680, titers: 92.612980
```

```
$ OMP_NUM_THREADS=8 ./heatomp 5000 5000
# niters 243, total time (sec.): 33.912818
# talloc: 0.000018, tinit: 0.286725, titers: 33.626075
```

 $S_8 = 2.8$

Анализ параллельного метода Якоби (v2)

- 1. Верификация проверяем корректность работы параллельной программы
- 2. Анализ эффективности (масштабируемости)

Двухпроцессорный сервер – 2 x Intel Xeon E5-2620 v4 (16 ядер на сервер)

```
$ ./heat 5000 5000
# niters 243, total time (sec.): 28.630018
# talloc: 0.000089, tinit: 0.163370, titers: 28.466559
```

```
$ OMP_NUM_THREADS=8 ./heatomp 5000 5000 # niters 243, total time (sec.): 3.198653 S_8 = 8.9 # talloc: 0.000018, tinit: 0.029181, titers: 3.16945
```

```
$ OMP_NUM_THREADS=16 ./heatomp 5000 5000 # niters 243, total time (sec.): 2.265093 S_{16} = 12.7 # talloc: 0.000019, tinit: 0.021303, titers: 2.243771
```

План создания параллельной версии метода Якоби (v3)

 Изменим условие завершения итерационного процесса – завершение при достижении предельного числа итераций (не всегда допустимо!)

Параллельная версия метода Якоби (v3)

```
double maxdiff;
#pragma omp parallel
    // Thread-private copy of shared objects
    double *grid = local grid;
    double *newgrid = local_newgrid;
    int niters = 0;
    for (int it = 0; it < 243; it++) {
        #pragma omp for
        for (int i = 1; i < ny - 1; i++) {
            for (int j = 1; j < nx - 1; j++) {
                newgrid[IND(i, j)] =
                    (grid[IND(i - 1, j)] + grid[IND(i + 1, j)] +
                     grid[IND(i, j - 1)] + grid[IND(i, j + 1)]) * 0.25;
```

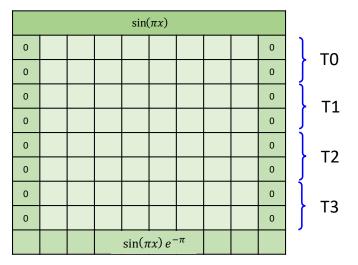
Параллельная версия метода Якоби (v3)

```
// Swap grids (after termination grid will contain result)
    double *p = grid;
    grid = newgrid;
    newgrid = p;
    niters++;
} // for iters
#pragma omp for reduction(max:maxdiff)
for (int i = 1; i < ny - 1; i++) {
    for (int j = 1; j < nx - 1; j++) {
        int ind = IND(i, j);
        maxdiff = fmax(maxdiff, fabs(grid[ind] - newgrid[ind]));
#pragma omp master
    printf("# maxdiff %.8f, total time (sec.): %.6f\n", maxdiff, ttotal);
    local_grid = grid;
```

Активация параллельных регионов по условию (v1)

```
double tinit = -omp get wtime();
// Fill boundary points:
// - left and right borders are zero filled
// - top border: u(x, 0) = \sin(pi * x)
// - bottom border: u(x, 1) = \sin(pi * x) * \exp(-pi)
double dx = 1.0 / (nx - 1.0);
// Initialize top border: u(x, 0) = \sin(pi * x)
#pragma omp parallel for if (nx > 1000)
for (int j = 0; j < nx; j++) {
    int ind = IND(0, j);
    local newgrid[ind] = local grid[ind] = sin(PI * dx * j);
// Initialize bottom border: u(x, 1) = \sin(pi * x) * \exp(-pi)
#pragma omp parallel for if (nx > 1000)
for (int j = 0; j < nx; j++) {</pre>
    int ind = IND(ny - 1, j);
    local newgrid[ind] = local_grid[ind] = sin(PI * dx * j) * exp(-PI);
#pragma omp parallel for if (ny > omp_get_num_threads() * 100)
for (int i = 1; i < ny - 1; i++) {
    for (int j = 1; j < nx - 1; j++) {
        local newgrid[IND(i, j)] = 0.0;
        local grid[IND(i, j)] = 0.0;
tinit += omp get wtime();
```

Параллельная инициализация



Объединение вложенных циклов

```
// N < количество потоков; как эффективно загрузить потоки?
for (j = 0; j < N; j++) {
    for (i = 0; i < M; i++) {
        A[i][j] = work(i, j);
// Объединяем циклы
#pragma omp parallel for private(j, i)
for (ij = 0; ij < N * M; ij++) {</pre>
    j = ij / M;
    i = ij \% M;
   A[i][j] = work(i, j);
```

Объединение пространств итераций циклов

```
#define N 3
#define M 4
#pragma omp parallel
    #pragma omp for collapse(2)
    for (i = 0; i < N; i++) {
        for (j = 0; j < M; j++)
            printf("Thread %d i = %d\n", omp_get_thread_num(), i);
i:
                                                                Директива collapse(n)
                                                                объединяет пространства
                                                                итераций п циклов
                     1,0
                              1,2
                                  1,3 | 2,0
                                           2,1 | 2,2 | 2,3
            0,2
                0,3
   0,0
       0,1
                         1,1
        T0
                      T1
                                   T2
                                                T3
```