

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DRESDEN

FAKULTÄT INFORMATIK
INSTITUT FÜR TECHNISCHE INFORMATIK
PROFESSUR FÜR RECHNERARCHITEKTUR
PROF. DR. WOLFGANG E. NAGEL

Komplexpraktikum Paralleles Rechnen - MPI parallele Programmierung

Daniel Körsten

Dresden, 6. März 2022

Inhaltsverzeichnis

1 Aufgabenbeschreibung	2
1.1 Conway's Game-of-Life	2
1.2 Besonderheiten der Aufgabenstellung	2
2 Implementierung	4
2.1 MPI Kommunikation	6
2.1.1 Nachrichtenaustausch	6
2.1.2 Neighbour Matrix	7
2.2 Daten Initialisierung	8
2.3 Berechnung der nächsten Generation	9
2.3.1 Kanten und Ecken	9
2.3.2 Inneres Feld	11
2.4 Zeitmessung	11
2.5 Ein- und Ausgabe	12
3 Zeitmessung auf Taurus	13
3.1 Testumgebung	13
3.2 Open MPI Kommunikationskanäle	14
3.3 AMD EPYC CPU Layout	15
3.4 Testmethode	15
4 Testergebnisse	17
4.1 Dateninitialisierung	17
4.2 Berechnung	18
4.3 Komplettes Programm	19
4.4 Einfluss der exklusiven Nutzung von Knoten	21
A Tabellen	22
Literatur	23

1 Aufgabenbeschreibung

In dieser Aufgabe soll eine MPI-parallele Variante von Conway's Game-of-Life in der Programmiersprache C implementiert werden.

Anschließend soll die Simulation mit verschiedenen großen Feldern und Anzahl von ranks durchgeführt und verglichen werden.

1.1 Conway's Game-of-Life

Das Game-of-Life ist ein vom Mathematiker John Horton Conway entworfenes Simulationsspiel [Gar70]. Es basiert auf einem zellulären Automaten. Häufig handelt es sich um ein zweidimensionales Spielfeld, jedoch ist auch eine dreidimensionale Simulation möglich.

Das Spiel besteht dabei aus einem Feld mit einer festgelegten, möglichst großen, Anzahl an Zeilen und Spalten. Eine Zelle kann dabei entweder Tot oder Lebendig sein. Dieses Spielfeld wird mit einer zufälligen Anfangspopulation initialisiert.

Ein Sonderfall stellen die Ecken und Kanten des Feldes dar, da dort nach den Spielregeln das Verhalten nicht festgelegt ist. Die Aufgabenstellung gibt vor, dass das Spielfeld Torus-förmig sein soll. Alles, was das Spielfeld auf einer Seite verlässt, kommt auf der gegenüberliegenden Seite wieder herein.

Anschließend wird durch die Befolgung der Spielregeln die nächste Generation berechnet. Dafür betrachtet man jede Zelle und ihre acht Nachbarn, um ihre Entwicklung zu berechnen. Es gelten folgende Spielregeln:

1. Eine lebende Zelle mit zwei oder drei Nachbarn überlebt in der Folgegeneration.
2. Eine lebende Zelle mit vier oder mehr Nachbarn stirbt an Überpopulation, bei weniger als zwei Nachbarn an Einsamkeit.
3. Jede tote Zelle mit genau drei Nachbarn wird in der nächsten Generation geboren.

Wichtig ist, dass die Folgegeneration für alle Zellen berechnet wird und anschließend die aktuelle Generation ersetzt. Es ist also nicht möglich, die nachfolgende Generation im Spielfeld der Aktuellen zu berechnen.

1.2 Besonderheiten der Aufgabenstellung

Die Aufgabenstellung gibt vor, dass die Parallelisierung mittels MPI erfolgen soll. MPI ist eine API, die auf dem Message-Passing-Modell aufbaut [GLSM07]. Das Message-Passing-Modell beschreibt dabei eine Menge von Prozessen, die mit anderen Prozessen durch das Senden und Empfangen von Nachrichten kommunizieren können.

Ich habe in diesem Praktikum die Open-Source Implementierung OpenMPI verwendet.

Im Gegensatz zu OpenMP benötigt MPI kein *Shared-Memory System*, sondern kann auf dedizierten Rechnern ausgeführt werden, die über ein Netzwerk miteinander verbunden sind.

MPI steht dabei für *Message Passing Interface*. Konkret bedeutet das, dass die parallel laufenden Prozesse Daten über Nachrichten austauschen. Dadurch wird es möglich, das Problem aufzuteilen ("*divide and conquer*"). Der Datenaustausch geschieht nicht automatisch, sondern der Programmierer muss explizit

angeben, welcher Prozess zu welchem Zeitpunkt Daten an einen anderen Prozess sendet bzw. empfängt.

Der Nachrichtenaustausch kann dabei über verschiedene Wege erfolgen.

Innerhalb eines Sockets, oder auch zwischen Sockets auf einem Dual Socket Board, können Nachrichten über den gemeinsamen Speicher oder Interconnects, wie Infiniband oder Infinity Fabric mit sehr hoher Geschwindigkeit und geringer Latenz ausgetauscht werden.

Kommen mehrere Compute Nodes in einem Cluster zum Einsatz, kann die Kommunikation über das Netzwerk, in der Regel über TCP/IP, erfolgen.

Die genaue Testumgebung mit Kommunikationsmöglichkeiten wird später in 3.3 diskutiert.

Weitere Besonderheiten:

- Für 1, 4, 16, 64, 128 und 256 ranks die Ausführungszeiten messen und vergleichen
- Quadratische Feldgrößen von 2048×2048 , 8192×8192 , 32768×32768 und 131072×131072
- Die Felder sollen auf die ranks aufgeteilt werden
- benachbarte ranks sollen möglichst nah beieinander gescheduled sein

Begriffsklärung rank: Jeder Prozess, der am Nachrichtenaustausch teilnimmt, muss eine eindeutige Kennung besitzen, um gezielt Nachrichten versenden und empfangen zu können.

MPI erstellt dabei Prozessgruppen (typischerweise eine, wenn nicht anders spezifiziert), in der ein Prozess über seinen rank identifiziert wird.

Der rank ist dabei eine Zahl im Intervall $[0, N - 1]$, $N \dots$ Anzahl der gestarteten Prozesse.

2 Implementierung

Bei Aufgabe B & C allokierte ich einen Speicherbereich der Größe

`columns * rows * sizeof(u_int8_t)` durch die C-Funktion `malloc()`.

Der Datentyp `u_int8_t` benötigt dabei nur ein Byte pro Zelle und ist für die Speicherung mehr als ausreichend, da ich nur den Zustand 0 - Zelle tot und 1 - Zelle lebendig speichern muss. Ein Byte ist typischerweise die kleinste adressierbare Einheit im Speicher. Das ist auch der Grund, warum kein noch kleinerer Datentyp möglich ist.

Bei MPI muss dieses Feld nun so aufgeteilt werden, dass jeder Prozess einen Teil des Feldes bearbeitet. Ich entschied mich dafür für ein *chessboard* Layout, also der Aufteilung des Spielfeldes in gleich große Teilfelder.

Der Grund ist, dass hier der Kommunikationsaufwand minimal wird, da jeder Prozess seinen direkten Nachbarn nur die äußerste Reihe senden (und umgekehrt von ihnen empfangen) muss.

Im ersten Schritt muss MPI initialisiert werden. Das erfolgt direkt am Anfang:

```
1 static int rank, cluster;
2
3 int main(int argc, char *argv[]) {
4     // MPI
5     MPI_Init(&argc, &argv);
6     MPI_Comm_size(MPI_COMM_WORLD, &cluster);
7     MPI_Comm_rank(MPI_COMM_WORLD, &rank);
8 }
```

Listing 1: MPI Initialisierung mit Bestimmung von rank und cluster

Die beiden Variablen `rank` und `cluster` enthalten dabei direkt die wichtigsten Informationen: Den `rank` des Prozesses und die Gesamtzahl der Prozesse.

Da die Größe des Feldes ebenfalls bekannt ist, lässt sich nun das Feld aufteilen.

Es gilt nun zu bestimmen, in wie viele Zeilen und Spalten das Feld zerlegt werden muss. Da die Felder quadratisch sind und genau wie die `rank`s mit einer Zweierpotenz ausgedrückt werden können, ist eine Aufteilung immer möglich.

Dafür verwende ich eine Funktion, die den *Logarithmus Dualis* der `rank` Größe berechnet und so die Zeilen und Spalten berechnet.

Dabei stellt sich ein Problem: Besitzt die Zweierpotenz einer `rank` Größe einen ungeraden Exponenten, bspw. $128 = 2^7$, entspricht die Anzahl der Zeilen nicht der der Spalten.

In diesem Fall entschied ich mich mehr Blocks pro Zeile statt Spalte zu verwenden. Dies ist eine willkürliche Festlegung und sollte keinen Einfluss auf die Performance haben.

```
1 void init_chessboard() {
2     u_int32_t exponent = (u_int32_t) log2((double) cluster);
3     if (exponent & 1) {
4         // ungerade
5         blocks_per_col = pow(2, (exponent / 2));
6         blocks_per_row = blocks_per_col * 2;
7     } else {
8         // gerade
9         blocks_per_row = blocks_per_col = pow(2, (exponent / 2));
10    }
11    block_row = rows / blocks_per_row + 2;
12    block_col = columns / blocks_per_col + 2;
13    return;
14 }
```

Listing 2: Bestimmung der Zeilen und Spalten des chessboard Layouts

In Zeile 11 und 12 bestimme ich nun direkt die Zeilen und Spalten jedes Blocks, indem ich die Zeilen und Spalten des Feldes durch die jeweilige Anzahl der Blöcke teile.

Anschließend addiere ich noch 2. Wie eingangs erwähnt, benötigt jeder Block die äußerste Reihe seiner Nachbarn, um das Game-of-Life spielen zu können.

Deshalb vergrößere ich das Feld um jeweils 2 Zeilen und 2 Spalten.

Auf dieser Grundlage kann jeder rank nun sein eigenes Spielfeld initialisieren:

```
1 // initializing states and pointers
2 u_int8_t *state_1 = (u_int8_t *) malloc(block_row * block_col * sizeof(u_int8_t));
3 u_int8_t *state_2 = (u_int8_t *) malloc(block_row * block_col * sizeof(u_int8_t));
4 u_int8_t *state_in = state_1;
5 u_int8_t *state_out = state_2;
6 u_int8_t *state_tmp = NULL;
7
```

Listing 3: Initialisierung der Spielfelder

Um zu berücksichtigen, dass die Folgegeneration immer die aktuelle Generation ersetzt, allokiere ich einen zweiten Speicherbereich gleicher Größe. Vor dem Beginn einer neuen Berechnung vertausche ich die beiden Pointer, was dazu führt, dass die im vorhergehenden Schritt berechnete Folgegeneration zur aktuellen Generation wird und eine neue Generation berechnet werden kann.

2.1 MPI Kommunikation

2.1.1 Nachrichtenaustausch

Für den Nachrichtenaustausch zwischen den Prozessen verwende ich asynchrone (*non-blocking*) Kommunikation. Asynchrone Kommunikation bedeutet, dass nicht auf die Zustellung bzw. den Empfang der Nachricht gewartet wird. Die Funktionsaufrufe blockieren also nicht.

Das bietet sich aus mehreren Gründen an:

Zum einen benötigen die Kanten und Ecken aufgrund des Torus-förmigen Spielfeldes eine separate Behandlung. Gleichzeitig müssen aber auch nur Kanten und Ecken an andere Prozesse gesendet werden.

Zum anderen benötigt die Kommunikation viel Zeit, da jeder Prozess zu seinen acht Nachbarn einen *send* und *receive* Aufruf pro Generation und einmalig für die Initialisierung durchführen muss. Daher bietet sich folgender Ablauf an:

1. Kanten und Ecken berechnen
2. Berechnete Kanten und Ecken an die acht Nachbarn senden (umgekehrt vier Kanten und vier Ecken empfangen)
3. Während der Kommunikation im Hintergrund das innere Feld berechnen
4. Vor der Rückkehr aus der Funktion warten, bis die Kommunikation abgeschlossen ist

MPI bietet für die asynchrone Kommunikation die Funktionen `MPI_Isend()` und `MPI_Irecv()` an. Für das Warten auf den Abschluss der Kommunikation verwende ich `MPI_Waitall()`.

Beispiel für den Austausch einer Kante zwischen zwei ranks (vereinfacht dargestellt):

```
1 // calculate edges and corners
2 ...
3 // afterwards, send and receive
4 MPI_Status status[16];
5 MPI_Request request[16];
6 //bottom edge
7 MPI_Isend(&state[(block_row - 2) * block_col + 1], block_col - 2, MPI_UINT8_T,
8         neighbour_matrix[rank_index + neighbour_col], 0,
9         MPI_COMM_WORLD, &request[0]);
10 MPI_Irecv(&state[1], block_col - 2, MPI_UINT8_T,
11         neighbour_matrix[rank_index - neighbour_col], 0,
12         MPI_COMM_WORLD, &request[1]);
13 // do this for the remaining 3 edges and 4 corners
14 ...
15 // calculate inner part
16 ...
17 // wait for communication to complete
18 MPI_Waitall(16, request, status);
19
```

Listing 4: Asynchrone Kommunikation zwischen 2 ranks

2.1.2 Neighbour Matrix

Für den Datenaustausch über MPI ist es notwendig, dass ein Prozess mit einem gegebenen rank seine Nachbarn kennt. Da es sich um ein Torus-förmiges Spielfeld handelt, hat ein rank in der letzten Spalte als rechten Nachbarn nicht den $rank + 1$, da dieser in der ersten Spalte der nächsten Zeile liegt usw.

Um dieses Problem zu lösen und die Kommunikation später zu erleichtern, generiere ich eine *Neighbour Matrix*, bei der die Kanten und Ecken entsprechend gespiegelt werden.

```

1 // Generierung der Matrix
2 // 2 Zeilen und 2 Spalten groesser, um die Spiegelung zu ermoeöglichen
3 nb_row = blocks_per_row + 2;
4 nb_col = blocks_per_col + 2;
5 u_int32_t *neighbour_matrix = (u_int32_t *) malloc(nb_row * nb_col * sizeof(
    u_int32_t));
6
7 // position in neighbour_matrix
8 rank_index = (rank / blocks_per_col + 1) * nb_col + (rank % blocks_per_col + 1);
9 init_neighbour(neighbour_matrix);
10
11 // Initialisieren der Matrix mit den ranks
12 void init_neighbour(u_int32_t *neighbour_matrix) {
13     u_int32_t z = 0;
14     for (int i = 1; i < nb_row - 1; i++) {
15         for (int j = 1; j < nb_col - 1; j++) {
16             neighbour_matrix[i * nb_col + j] = z;
17             z++;
18         }
19         //left
20         neighbour_matrix[i * nb_col] = neighbour_matrix[(i + 1) * nb_col - 2];
21         //right
22         neighbour_matrix[(i + 1) * nb_col - 1] = neighbour_matrix[i * nb_col + 1];
23     }
24     for (int i = 1; i < nb_col - 1; i++) {
25         //top
26         neighbour_matrix[i] = neighbour_matrix[(nb_row - 2) * nb_col + i];
27         //bottom
28         neighbour_matrix[(nb_row - 1) * nb_col + i] = neighbour_matrix[nb_col + i];
29     }
30     // top left corner
31     neighbour_matrix[0] = neighbour_matrix[(nb_row - 1) * nb_col - 2];
32     // top right corner
33     neighbour_matrix[nb_col - 1] = neighbour_matrix[(nb_row - 2) * nb_col + 1];
34     // bottom left
35     neighbour_matrix[(nb_row - 1) * nb_col] = neighbour_matrix[nb_col];
36     // bottom right
37     neighbour_matrix[nb_row * nb_col - 1] = neighbour_matrix[nb_col + 1];
38     return;
39 }

```

Listing 5: Generierung der Neighbour Matrix

Die Variable *rank_index* enthält dabei den Index des ranks innerhalb der Matrix. Dieser Index fungiert

als konstantes Offset, um Nachrichten an seine Nachbarn adressieren zu können.

2.2 Daten Initialisierung

Gemäß den Startbedingungen muss nur eines der beiden Spielfelder mit Zufallswerten initialisiert werden.

Wie in 2.1.1 erklärt, ist der Ablauf in mehrere Schritte unterteilt.

Für die Dateninitialisierung jeder Zelle mit Null oder Eins verwende ich den Pseudo-Zufallszahlengenerator `rand_r()`. Der seed setzt sich aus `time() + rank` zusammen. Damit verändert sich der seed in Abhängigkeit der Zeit und dem rank.

Zuerst werden die Kanten und Ecken initialisiert, danach erfolgt die Kommunikation. Währenddessen wird das innere Feld initialisiert und auf den Abschluss der Kommunikation gewartet.

Zusammengesetzt ergibt sich daraus folgender Code. Da ich den Ablauf der Kommunikation schon in 2.1.1 erläutert habe, vereinfache ich das Beispiel an dieser Stelle.

```
1 void field_initializer(u_int8_t *state, u_int32_t *neighbour_matrix) {
2     // fills fields with random numbers 0 = dead, 1 = alive
3     // use different seed for every rank
4     unsigned seed = time(0) + rank;
5     // top & bottom
6     for (int i = 2; i < block_col - 2; i++) {
7         state[block_col + i] = rand_r(&seed) % 2;
8         state[(block_row - 2) * block_col + i] = rand_r(&seed) % 2;
9     }
10    // left & right + corners
11    for (int i = 1; i < block_row - 1; i++) {
12        state[i * block_col + 1] = rand_r(&seed) % 2;
13        state[(i + 1) * block_col - 2] = rand_r(&seed) % 2;
14    }
15    // MPI_Isend and MPI_Irecv for every edge and corner
16    ...
17    // do the middle, while sending/receiving
18    for (int i = 2; i < block_row - 2; i++) {
19        for (int j = 2; j < block_col - 2; j++) {
20            state[i * block_col + j] = rand_r(&seed) % 2;
21        }
22    }
23    // Wait for all IPC to complete
24    MPI_Waitall(16, request, status);
25    return;
26 }
```

Listing 6: Dateninitialisierung



Abbildung 1: Mit `rand_r()` generiertes Spielfeld der Größe 64×64

2.3 Berechnung der nächsten Generation

Die Berechnung der nächsten Generation erfolgt mithilfe beider Spielfelder.

Die Funktion `calculate_next_gen()` erhält einen Pointer auf das Array mit der aktuellen Generation `*state_old`, einen auf das Array der Folgegeneration `*state` und einen weiteren für die Neighbour Matrix.

Bei jedem Simulationsschritt werden die Pointer getauscht und die Funktion erneut aufgerufen. Damit wird die Forderung der Aufgabenstellung nach *double buffering* erfüllt, sprich die Folgegeneration in einem separatem Spielfeld berechnet.

```
1 for (int i = 0; i < repetitions; i++) {  
2     calculate_next_gen(state_out, state_in, neighbour_matrix);  
3     state_tmp = state_in;  
4     state_in = state_out;  
5     state_out = state_tmp;  
6 }
```

Listing 7: Vertauschen der Pointer vor jedem Funktionsaufruf (vereinfacht)

2.3.1 Kanten und Ecken

Ähnlich der Feldinitialisierung, werden zuerst die Kanten und Ecken berechnet, damit diese im nächsten Schritt gesendet werden können. Da die Kanten jeweils nur aus einer Zeile bzw. Spalte bestehen, wird lediglich eine `for`-Schleife benötigt.

Ich habe mich willkürlich dazu entschieden, die Ecken mit der linken und rechten Spalte zu berechnen. Man hätte sie aber auch genauso gut mit der obersten und untersten Zeile berechnen können. Vereinfacht habe ich nur die Berechnung der linken und rechten Seite dargestellt.

```
1 // left & right + corners
2 for (int i = 1; i < block_row - 1; i++) {
3     u_int8_t sum_of_l_edge = state_old[(i - 1) * block_col] +
4     state_old[(i - 1) * block_col + 1] +
5     state_old[(i - 1) * block_col + 2] +
6     state_old[i * block_col] +
7     state_old[i * block_col + 2] +
8     state_old[(i + 1) * block_col] +
9     state_old[(i + 1) * block_col + 1] +
10    state_old[(i + 1) * block_col + 2];
11    state[i * block_col + 1] = (sum_of_l_edge == 3) | ((sum_of_l_edge == 2) &
12        state_old[i * block_col + 1]);
13
14    u_int8_t sum_of_r_edge = state_old[i * block_col - 3] +
15    state_old[i * block_col - 2] +
16    state_old[i * block_col - 1] +
17    state_old[(i + 1) * block_col - 3] +
18    state_old[(i + 1) * block_col - 1] +
19    state_old[(i + 2) * block_col - 3] +
20    state_old[(i + 2) * block_col - 2] +
21    state_old[(i + 2) * block_col - 1];
22
23    state[(i + 1) * block_col - 2] =
24    (sum_of_r_edge == 3) | ((sum_of_r_edge == 2) & state_old[(i + 1) * block_col - 2])
25    ;
26 }
27 // top & bottom
28 for (int i = 2; i < block_col - 2; i++) {
29     ...
30 }
```

Listing 8: Berechnung der Kanten und Ecken

Der Zustand der Zelle in der nächsten Generation wird über die Spielregeln bestimmt und ist abhängig vom aktuellen Zustand der Zelle und ihren acht Nachbarn. Da der Zustand mit Null (tot) oder Eins (lebendig) repräsentiert wird, kann die Zahl der Nachbarzellen aufsummiert werden. Die Summe entspricht dabei der Zahl lebender Nachbarn.

An dieser Stelle könnte mithilfe einer *if*-Verzweigung der Folgezustand entschieden werden. Allerdings entschied ich mich für die Verwendung von bitweisen Operatoren. Es handelt sich dabei aus schaltungs-technischer Sicht um die einfachsten Operationen auf den einzelnen Bits.

Der Grund liegt darin, dass diese bitweisen Operatoren sich gut bei SIMD Operationen verwenden lassen.

2.3.2 Inneres Feld

Im ersten Schritt werden alle inneren Zellen berechnet. Dafür verwende ich zwei geschachtelte `for`-Schleifen:

```
1 for (int i = 2; i < block_row - 2; i++) {
2     for (int j = 2; j < block_col - 2; j++) {
3         //count up a number (8)
4         u_int8_t sum_of_8 = state_old[(i - 1) * block_col + (j - 1)] +
5             state_old[(i - 1) * block_col + j] +
6             state_old[(i - 1) * block_col + (j + 1)] +
7             state_old[i * block_col + (j - 1)] +
8             state_old[i * block_col + (j + 1)] +
9             state_old[(i + 1) * block_col + (j - 1)] +
10            state_old[(i + 1) * block_col + j] +
11            state_old[(i + 1) * block_col + (j + 1)];
12        state[i * block_col + j] = (sum_of_8 == 3) | ((sum_of_8 == 2) & state_old[i *
13            block_col + j]);
14    }
```

Listing 9: Berechnung der inneren Zellen

Diese Berechnung findet während der Kommunikation statt und wird nicht mit anderen ranks geteilt. Die Berechnung der Kanten und Ecken wäre auch in diesem Schritt möglich, in dem man die Zählvariablen um eins früher beginnen und eins später enden lassen würde.

Dann könnte jedoch erst nach Abschluss der Berechnung der Datenaustausch stattfinden, was den Performancevorteil der asynchronen Kommunikation kaputt machen würde.

2.4 Zeitmessung

Ich habe mich für eine zweistufige Zeitmessung entschieden.

In erster Instanz messe ich die Ausführungszeiten der Funktionen `calculate_next_gen()` und `field_initializer()`.

Die vergangene Zeit messe ich mit der Funktion `clock_gettime()`.

Für die Berechnung der Ausführungszeit wird vor und nach Ausführung der zu untersuchenden Funktion `clock_gettime()` aufgerufen. Die Differenz aus den beiden Momentaufnahmen entspricht der jeweiligen Zeit.

Zusätzlich messe ich die Ausführungszeit des kompletten Programms mit dem Linux Befehl `time`. Da die Funktionen `calculate_next_gen()` und `field_initializer()` den größten Anteil der Programm haben, lässt sich, zumindest näherungsweise, der MPI Overhead zum spawnen und initialisieren der Prozesse berechnen.

```
1 clockid_t clk_id = CLOCK_MONOTONIC;
2 double time_calc = 0;
3 struct timespec calc_s, calc_e;
4 for (int i = 0; i < repetitions; i++) {
5     clock_gettime(clk_id, &calc_s);
6     // function call
7     clock_gettime(clk_id, &calc_e);
8     time_calc += (double) (calc_e.tv_nsec - calc_s.tv_nsec) / 1000000000 +
9                 (double) (calc_e.tv_sec - calc_s.tv_sec);
10 }
11 printf("Calculation took %f seconds to execute.\n", time_calc);
```

Listing 10: Berechnung der Ausführungszeit eines *function calls*

2.5 Ein- und Ausgabe

Da die Messung später in verschiedenen Feldgrößen durchgeführt wird, habe ich mich für den Einsatz von `getopt` entschieden. Es ermöglicht, die Anzahl der Schleifendurchläufe, die Feldgröße und eine optionale Fortschrittsanzeige über Argumente beim Programmstart einzustellen.

Ebenso lässt sich das Ergebnis über *pbm*-Files visualisieren. Dabei fügt jeder rank seiner Ausgabedatei seinen rank an. Das Bild ließe sich aus diesen Einzelbildern konstruieren, ist jedoch nicht Schwerpunkt dieser Aufgabe.

Alle Funktionen sowie die Syntax lassen sich über den Parameter `--help` ausgeben.

Um mehrfache Ausgaben auf der Konsole zu vermeiden, werden Ausgaben nur vom Prozess mit dem rank 0 ausgeführt.

3 Zeitmessung auf Taurus

3.1 Testumgebung

Alle Messungen wurden auf dem Hochleistungsrechner Taurus der TU Dresden durchgeführt. Verwendet habe ich die Romeo-Partition, die auf AMD Rome EPYC 7702 Prozessoren basiert [Mar21]. Ein EPYC 7702 besteht aus 64 physischen Kernen. *Simultaneous Multithreading* ist deaktiviert. Ein Node verwendet 2 EPYC Prozessoren auf einem Dual-Socket Board und ist mit 512 GB RAM ausgestattet. Als Betriebssystem kommt Centos 7 zum Einsatz.

Vor Beginn der Messung muss noch die Topologie des unterliegenden Systems betrachtet werden. Für die optimale Performance sollten die größten Vektorregister zum Einsatz kommen. Bei den EPYC Prozessoren entspricht das AVX2. Die Breite der Register liegt hier bei 256 Bit.

Außerdem wird FMA unterstützt. FMA steht für Fused-multiply-add und steigert die Leistung durch verbesserte Ausnutzung von Registern und einem kompakteren Maschinencode. Das wird durch das Zusammenfassen einer Addition und Multiplikation zu einem Befehl erreicht.

Ich kompilierte das Programm mit dem GCC (GNU Compiler Collection, Version 11.2) unter Verwendung von OpenMPI (Version 4.1.2) mit den Compiler-Flags:

- `O3` - Optimierungsflag des Compilers (u.a. Verwendung von SIMD Instruktionen)
- `mavx2` - Verwendung von AVX2
- `mfma` - Verwendung von FMA
- `lm` - Notwendig für das einbinden der *math library*

Um die NUMA Eigenschaften optimal zu nutzen, verwendete ich bei der Slurm Ausführung die Parameter:

- `--cpu_bind=cores`
- `--distribution=block:block`

Der CPU bind bewirkt, dass jedem Prozess ein (physischer) Core zugewiesen wird.

Die *distribution* bestimmt die Verteilung der Prozesse über die Sockets und Nodes.

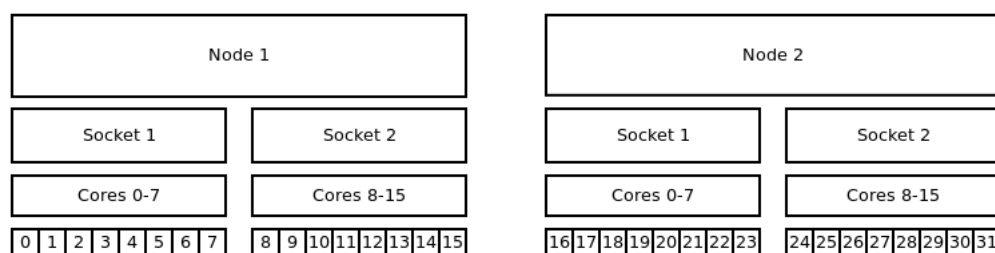


Abbildung 2: Aufteilung der ranks über mehrere Sockets und Nodes mit `block:block`.
Quelle: ZIH HPC Compendium

Es werden also zuerst alle Cores innerhalb eines Sockets und anschließend innerhalb eines Nodes verwendet. Je näher die ranks beieinander liegen, desto schneller ist die Kommunikation. Darauf möchte ich unter Betrachtung der AMD EPYC CPU einmal genauer eingehen.

3.2 Open MPI Kommunikationskanäle

Der Nachrichtenaustausch bei OpenMPI kann dabei über verschiedene Kanäle erfolgen, wie in ?? angesprochen. Die Verfügbaren lassen sich mit dem Befehl `ompi_info | grep 'MCA [mb]tl'` ausgeben.

Auf Taurus bestehen folgende Möglichkeiten:

1. `self` - Sinnvoll für Kommunikation zum selben rank, beispielsweise bei der Ausführung mit nur einem rank
2. `vader` - shared memory communication innerhalb eines Knotens
3. `ofi` - OpenFabrics Interfaces, wichtig für die Verwendung von AMDs *Infinity Fabric*
4. `tcp` - Kommunikation über das Netzwerk mittels TCP/IP

OpenMPI versucht dann bei einer Kommunikation immer den schnellsten Kommunikationsweg zwischen zwei ranks zu finden.

3.3 AMD EPYC CPU Layout

Bevor ich zur Testmethode und den Ergebnissen übergehe, möchte ich erst auf die Struktur der AMD EPYC CPU eingehen, um Ergebnisse später besser deuten zu können.

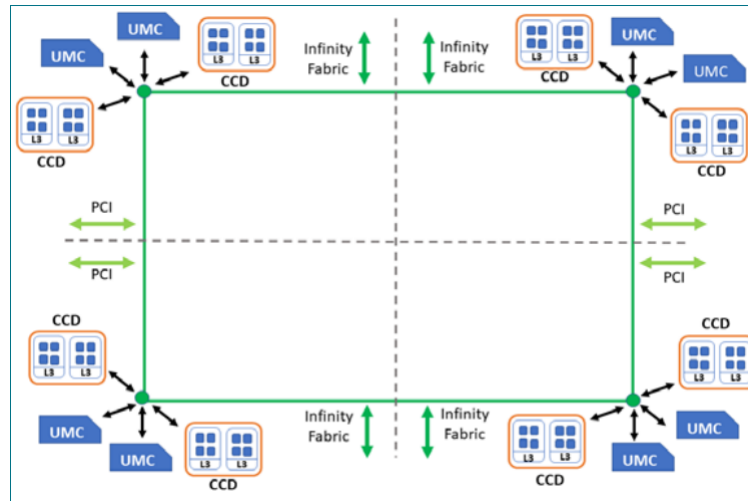


Abbildung 3: CPU Layout eines AMD EPYC 7002.

Quelle: HPC Tuning Guide for AMD EPYC 7002 Series Processors

Der verwendete AMD EPYC 7702 ist ein 64 Kern Prozessor. Jeder Socket besteht dabei aus 8 CCDs, die über ein *Infinity Fabric* untereinander und mit den CCDs des anderen Sockets sehr schnell Daten austauschen können [AMD20]. Jeder CCD besteht damit aus 8 Cores oder anders ausgedrückt aus 2 CCX à 4 Cores.

Das zu erwartende Ergebnis ist, dass der Geschwindigkeitsvorteil geringer wird, sobald man mehr als einen CCD (also 8 Cores) benötigt. Bei den durchgeführten Messungen ist das ab 16 ranks der Fall. Ab da müssen die CCDs über *Infinity Fabric* miteinander kommunizieren, was mehr Zeit benötigen sollte, als die Kommunikation innerhalb eines CCDs.

Die nächste interessante Schwelle liegt bei 64 Cores. Sobald sie überschritten wird, müssen die ranks über den Socket hinweg kommunizieren, was aufgrund der längeren Leitungswege ebenfalls Zeit kostet.

Mit der Überschreitung von 128 Cores muss dann zwischen zwei Nodes kommuniziert werden. Hier sind die größten Geschwindigkeitseinbrüche zu erwarten, da der Datenaustausch über das Netzwerk im Vergleich zum Datenaustausch auf einem Board höhere Latenzen mit sich bringt.

3.4 Testmethode

Die Tests wurden automatisiert mit `sbatch`-Skripten ausgeführt. Um Schwankungen auszugleichen, wurde jede Messung 20 mal wiederholt. Ich allokierte den Knoten für jede Messreihe exklusiv, um Einflüsse durch koexistierende Prozesse auszuschließen.

Da nicht genügend Rechenressourcen zur Verfügung standen, machte ich die Anzahl der Simulations-

schritte von der Feldgröße abhängig.

Ich entschied mich dabei für eine exponentielle Abnahme der Wiederholungen, da die Feldgröße exponentiell ansteigt.

Dafür testete ich die höchste Anzahl an ranks (256) mit der kleinsten Feldgröße (2048). Die minimale Ausführungszeit sollte bei etwa einer Sekunde (ohne den Overhead von MPI) liegen, um verlässliche Werte zu erhalten. Diese wurde bei 10.000 Simulationsschritten erreicht. Mit der nächst höheren Feldgröße sinkt die Anzahl der Wiederholungen um eine Dekade.

Die Messwerte sind daher ungeeignet, um zu beurteilen, wie sich die Ausführungszeit verändert, wenn man die Anzahl der ranks gleich belässt, aber die Feldgröße ändert.

Dass die Ausführungsgeschwindigkeit mit der Feldgröße ansteigt, ist logisch. Interessanter für das Praktikum ist jedoch das Verhalten bei MPI-paralleler Ausführung, was sich beurteilen lässt.

Aus den 20 Wiederholungen pro Messung habe ich den Mittelwert gebildet und logarithmische Diagramme erzeugt. Diese Darstellung bietet sich aufgrund der exponentiell ansteigenden Feldgröße und ranks an.

Anmerkung zur Notation: Mit einer Feldgröße von 128 meine ich ein Feld mit 128×128 Zellen. Da hier im Praktikum alle Feldgrößen quadratisch sind, ist die Angabe der zweiten Größe redundant, weshalb ich auch auf diese verzichte.

Anmerkung zur exklusiven Nutzung von Knoten: Aufgrund der begrenzten Rechenressourcen stand ich vor der Entscheidung, Knoten exklusiv zu allokalieren oder die Anzahl der Simulationsschritte von der Feldgröße abhängig zu machen.

Ich entschied mich für letzteres, wie oben beschrieben. Warum, zeige ich in 4.4.

4 Testergebnisse

In diesem Abschnitt habe ich die Messwerte aus den Tabellen A visualisiert.

4.1 Dateninitialisierung

Zuerst möchte ich auf die Ausführungszeiten der Funktion `field_initializer()` des Spiels eingehen.

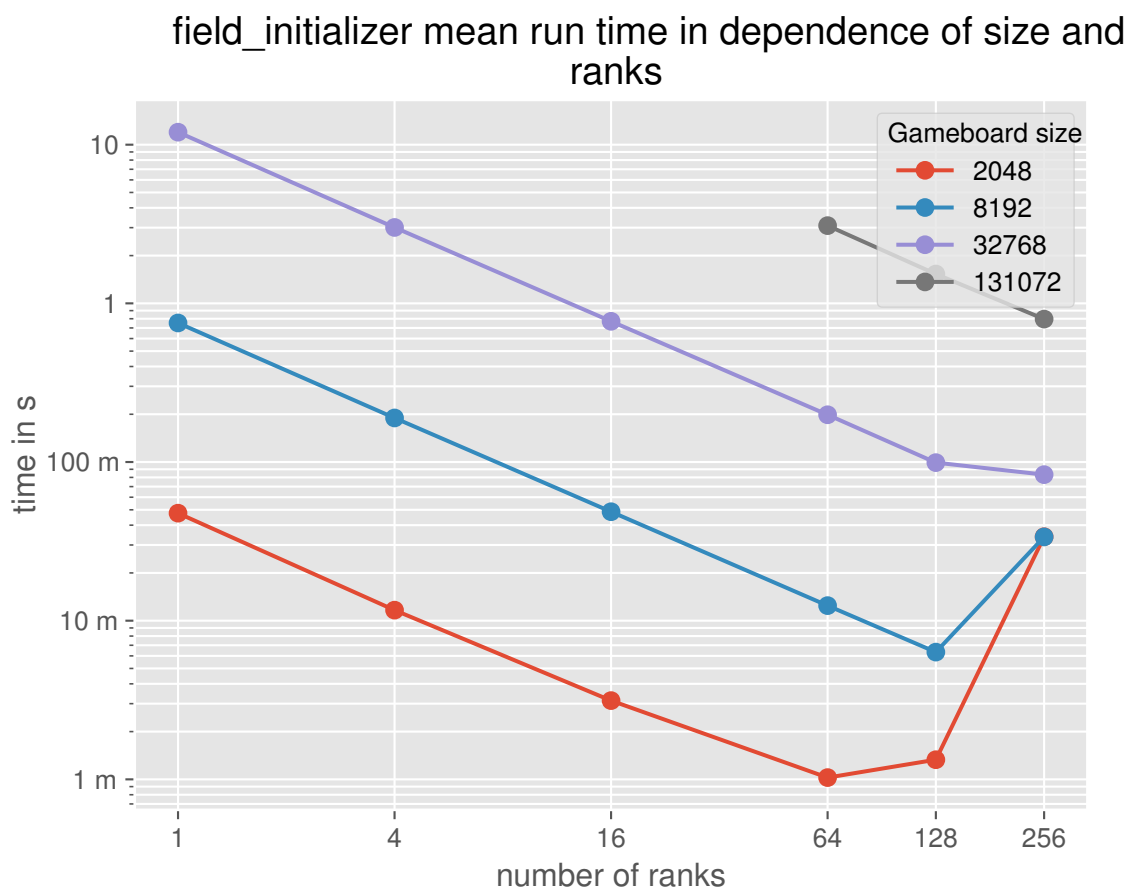


Abbildung 4: Logarithmische Darstellung der Ausführungszeit der Funktion `field_initializer()`.

Die allgemeine Tendenz zeigt, was zu erwarten war: Mehr ranks verbessern die Ausführungsgeschwindigkeit.

Es ist zu erkennen, dass bei 64 Cores für kleine Feldgrößen ein Minimum erreicht wird. Mehr Cores verschlechtern wieder die Performance. Warum? Die Kommunikation nimmt hier mehr Zeit in Anspruch als der eigentliche Vorgang.

Das zeigt sich auch sehr gut daran, dass die Werte der Feldgrößen 2048 und 8192 bei 256 ranks auf einen Punkt fallen. Dadurch wird deutlich, dass der Datenaustausch die Ausführungszeit dominiert und nicht das Füllen der Felder mit Zufallswerten.

Beim Sprung von 64 auf 128 ranks findet eine Kommunikation zwischen den Sockets statt, was die La-

tenz erhöht. Bei 256 ranks wird ein zweiter Node benötigt. Die Zeit steigt hier dramatisch an. Dieses Verhalten habe ich bereits in 3.3 erklärt.

4.2 Berechnung

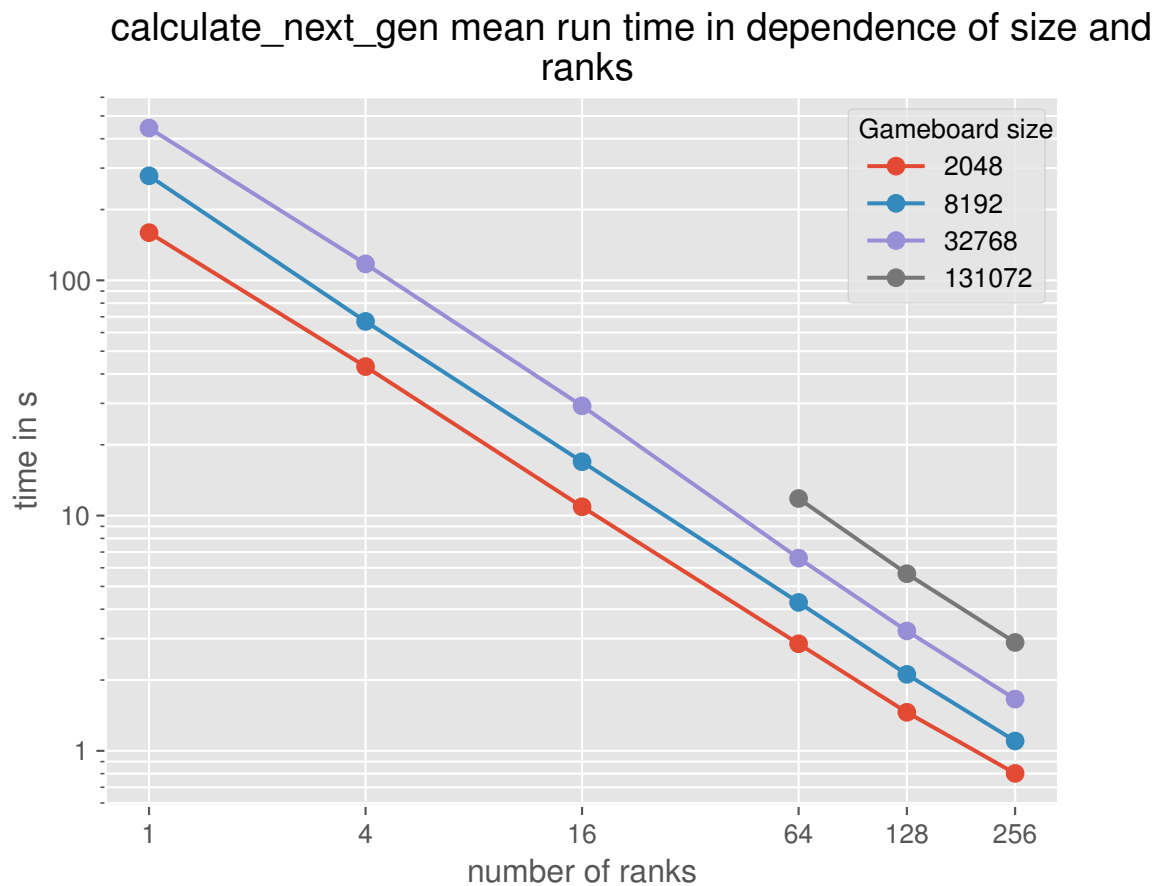


Abbildung 5: Logarithmische Darstellung der Ausführungszeit der Funktion `calculate_next_gen()`.

Auch hier sinkt die Ausführungszeit mit Anzahl der ranks ab. Es gibt jedoch kein Abknicken, wie noch bei der Initialisierung.

Eine mögliche Begründung dafür ist, dass die Berechnung des inneren Feldes soviel Zeit in Anspruch nimmt, dass währenddessen die asynchrone Kommunikation abgeschlossen wird.

Das ist ein wünschenswertes Verhalten und verdeutlicht, dass das Problem sehr gut mit MPI parallelisiert werden kann.

4.3 Komplettes Programm

Hier betrachte ich die benötigte Zeit des Programms, inklusive Spawnen der Prozesse und der Initialisierung von MPI.

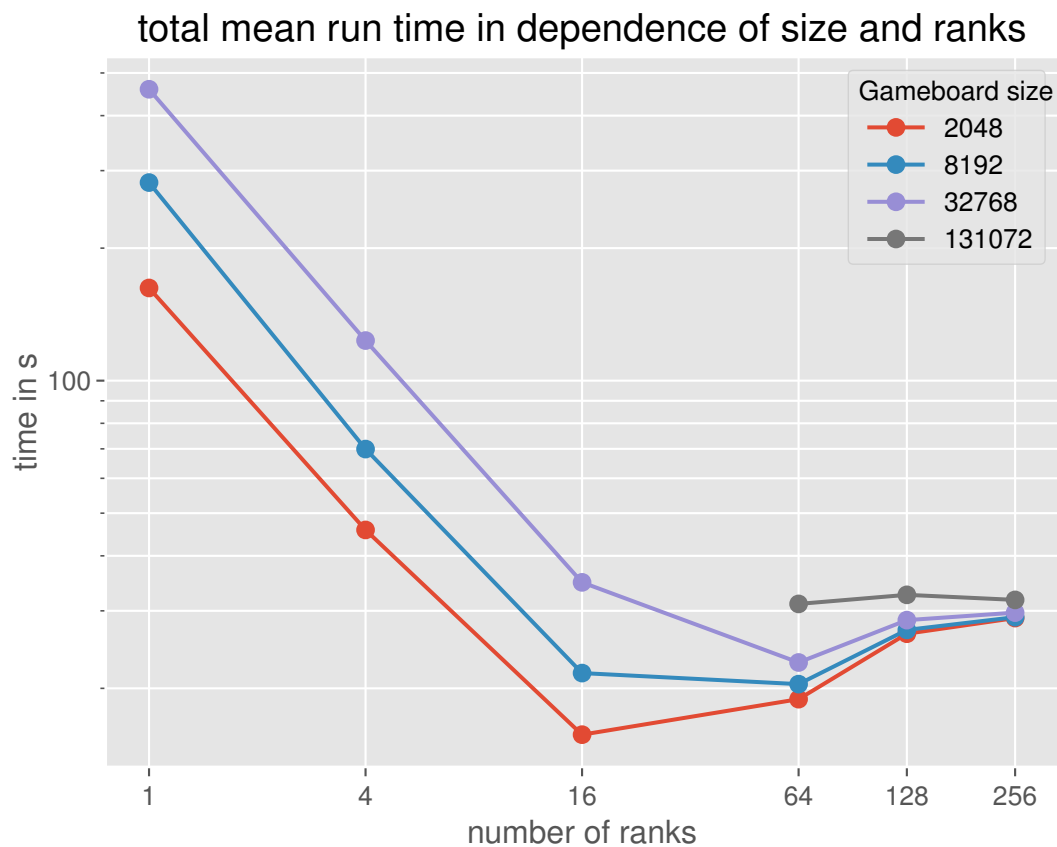


Abbildung 6: Logarithmische Darstellung der Ausführungszeit des kompletten Programms.

Es zeigt sich, dass die Ausführungszeit ab 16 ranks immer stärker vom Overhead durch MPI dominiert wird. Erkennen lässt sich das daran, dass die Ausführungszeiten ab dieser Grenze stagnieren und anschließend wieder steigen. Gleichzeitig rücken die Feldgrößen immer näher zusammen. Das verdeutlicht, dass sie nicht mehr der dominierende Faktor sind.

Subtrahiert man von der Ausführungszeit des kompletten Programms die Zeiten der Dateninitialisierung und Berechnung (inklusive der jeweiligen Kommunikation), ergibt sich folgendes Bild.

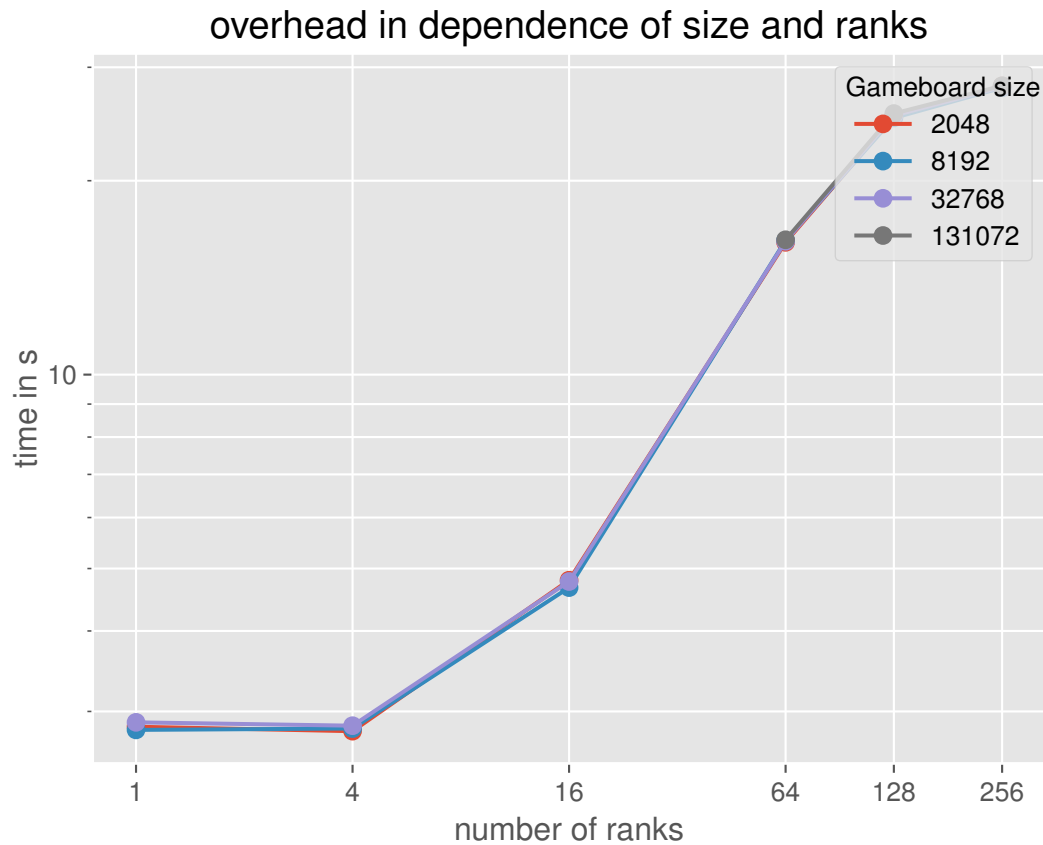


Abbildung 7: Logarithmische Darstellung des ungefähren Overheads.

Es zeigt in etwa den Overhead durch MPI. Der Overhead sollte nur von der Anzahl der ranks abhängen, da die Initialisierung von MPI und das Spawnen der Prozesse unabhängig von der Problemgröße ist. Das ist erfüllt, da alle Kurven etwa übereinander liegen.

Bei den ranks 1 und 4 ist der Overhead in etwa konstant und im Vergleich zur kompletten Ausführungszeit weniger als 1%.

Danach steigt er drastisch an, bis er bei 256 ranks schon ca. 90% ausmacht.

Daran sieht man, dass MPI mit steigender Anzahl von Prozessen einen hohen initialen Overhead verursacht. Das Problem muss entsprechend sehr groß sein, um eine gute Gesamtausführungszeit zu erreichen.

4.4 Einfluss der exklusiven Nutzung von Knoten

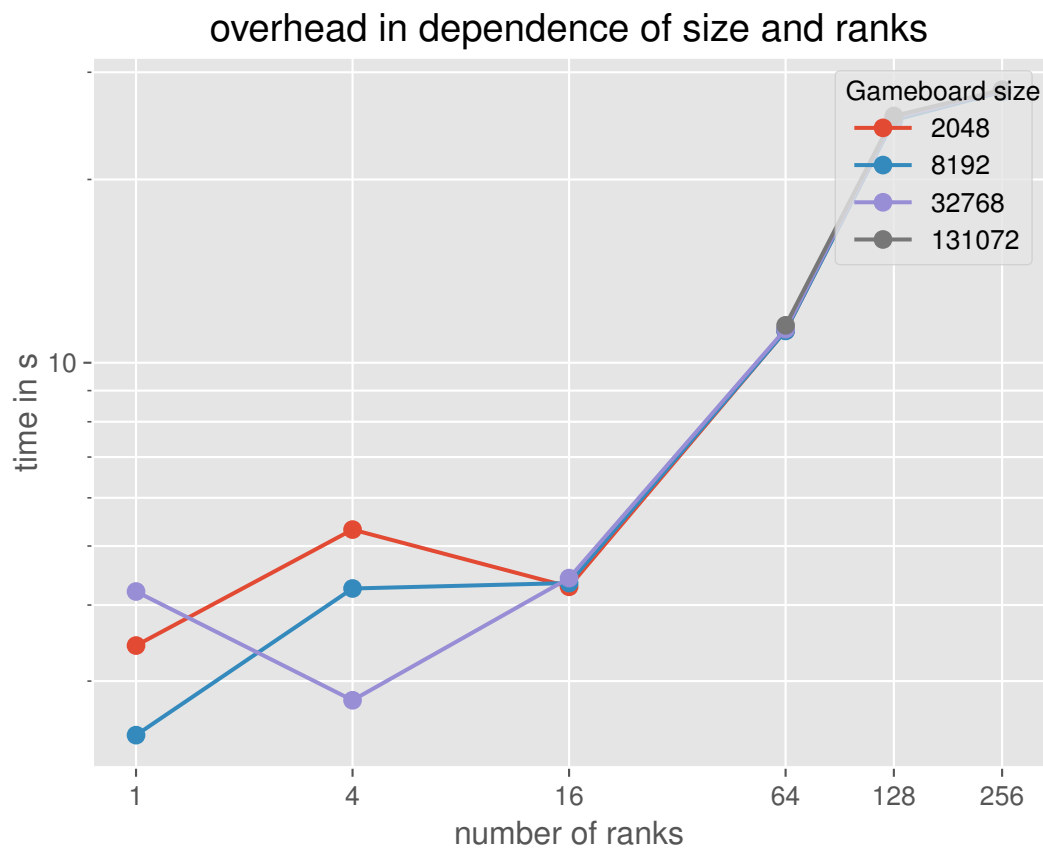


Abbildung 8: Logarithmische Darstellung des ungefähren Overheads bei nicht exklusiver Knotennutzung.

Diese Berechnung entstand auf der Grundlagen von Messwerten, die auf einem Knoten, der nicht exklusiv allokiert wurde, gemessen wurden. Erkennbar ist eine deutlich Streuung der Messwerte, besonders bei den ranks 1 und 4, die nur durch den Einfluss koexistierender Prozesse zu erklären ist.

Aufgrund dessen entschied ich mich, die Messungen mit exklusiven Knoten zu wiederholen, da noch Rechenressourcen vorhanden waren.

A Tabellen

Size	Ranks	Initialization in s	Calculation in s	Total time in s
2048	1	0.0476	159.4984	162.3866
2048	4	0.0117	42.9935	45.8009
2048	16	0.0031	10.8978	15.6966
2048	64	0.001	2.8518	18.8994
2048	128	0.0013	1.458	26.6152
2048	256	0.0338	0.8018	28.8851
8192	1	0.7524	278.2817	281.8427
8192	4	0.1895	66.9046	69.9164
8192	16	0.0486	16.9429	21.6623
8192	64	0.0124	4.2742	20.4464
8192	128	0.0063	2.1142	27.151
8192	256	0.0337	1.1012	29.0222
32768	1	11.9899	444.2583	459.1336
32768	4	3.0087	117.4779	123.3376
32768	16	0.7706	29.2729	34.8168
32768	64	0.1985	6.5923	22.8972
32768	128	0.0991	3.233	28.5742
32768	256	0.0833	1.66	29.7171
131072	64	3.0897	11.8205	31.104
131072	128	1.5304	5.6618	32.6177
131072	256	0.796	2.8887	31.7655

Tabelle 1: Messergebnisse. *Initialization* und *Calculation* beziehen sich auf die beiden Funktionen `field_initializer()` und `calculate_next_gen()`. Zeiten sind Mittelwerte und gerundet auf 4 Nachkommastellen.

Literatur

- [AMD20] AMD. *HPC Tuning Guide for AMD EPYC 7002 Series Processors*.
<https://www.amd.com/system/files/documents/amd-epyc-7002-tg-hpc-56827.pdf>. 2020
- [Gar70] GARDNER, Martin. *MATHEMATICAL GAMES - The fantastic combinations of John Conway's new solitaire game "life"*.
<https://web.stanford.edu/class/sts145/Library/life.pdf>. 1970
- [GLSM07] GROPP, William ; LUSK, Ewing ; SKJELLUM, Anthony ; MOLITOR, Paul: *MPI - Eine Einführung*. De Gruyter Oldenbourg, 2007
- [Mar21] MARKWARDT, Dr. U. *Introduction to HPC at ZIH*.
<https://doc.zih.tu-dresden.de/misc/HPC-Introduction.pdf>. 2021