# Hochleistungsrechnen
# Hybride Parallele Programmierung

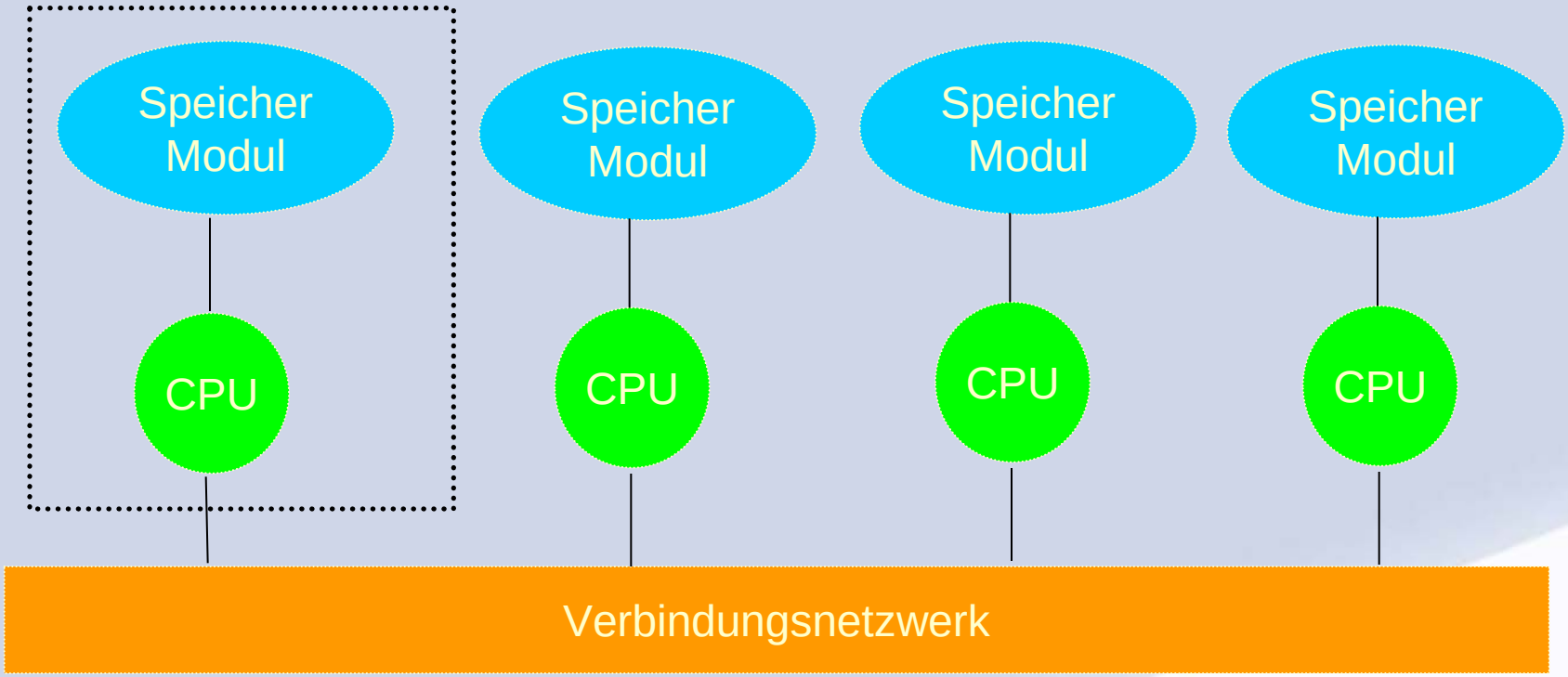
Dr. Panagiotis Adamidis
Deutsches Klimarechenzentrum

DKRZ

# Inhaltsübersicht

- Einleitung und Motivation
- Programmiermodelle für hybride Architekturen
- Thread Safety
- Abbildungsprobleme
- Zusammenfassung

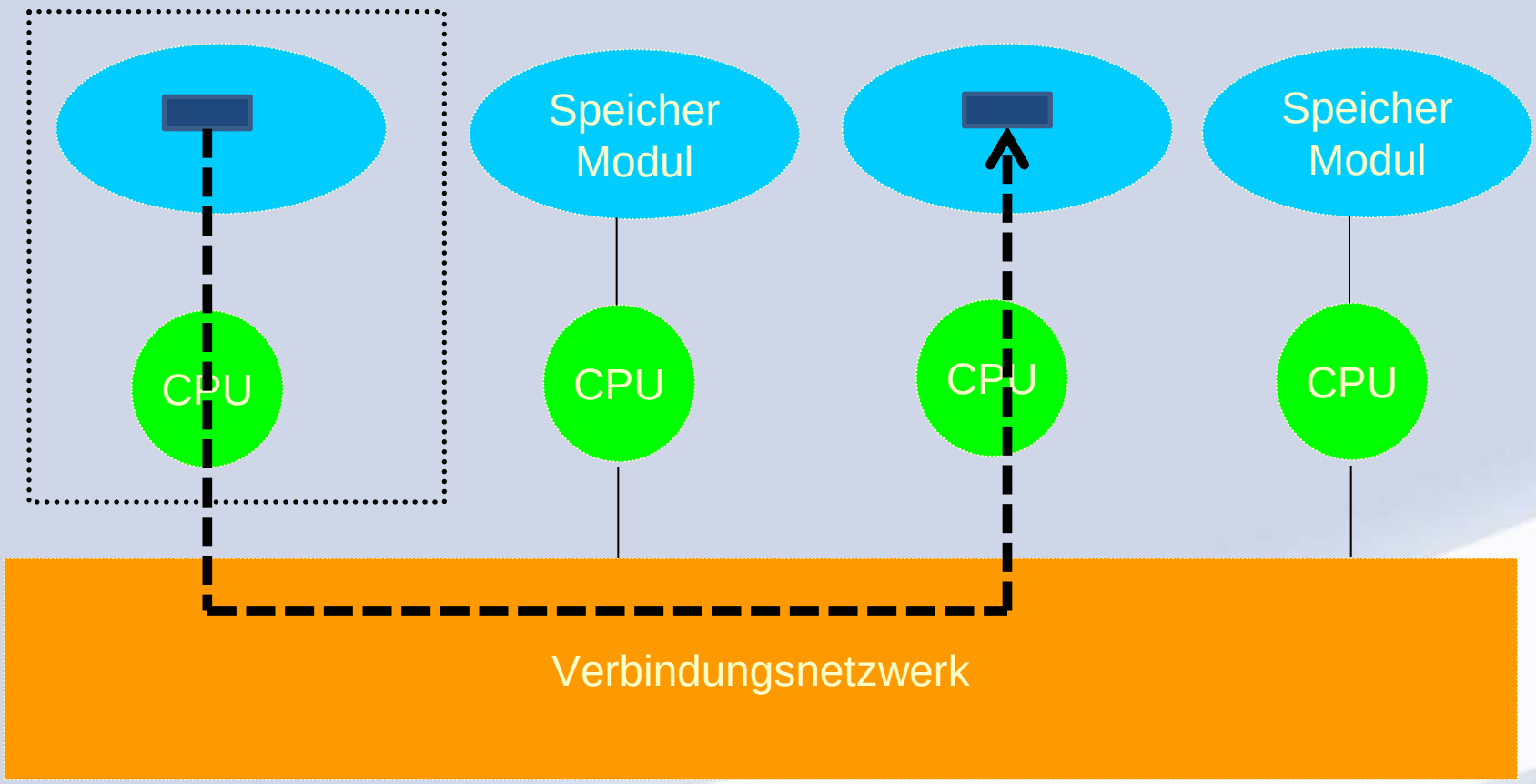
# Multicomputer – Verteilter Speicher



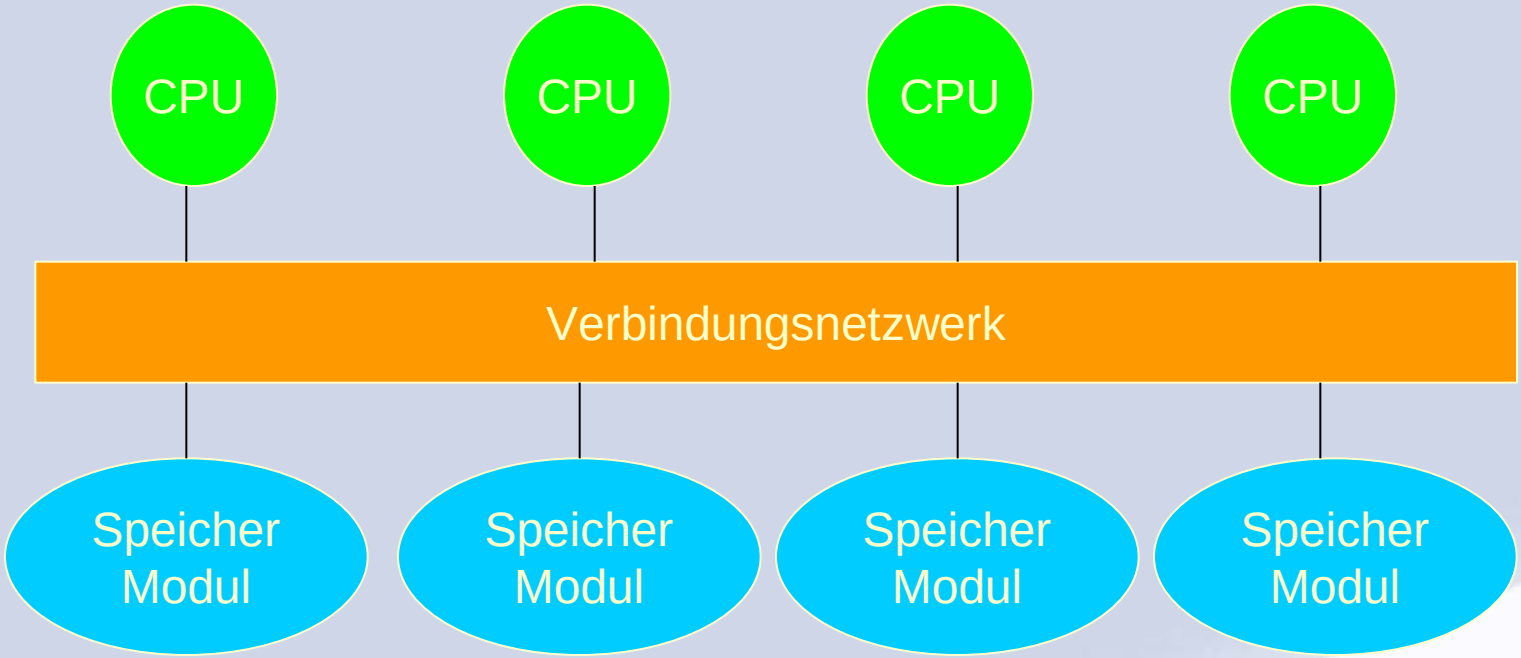
# Multicomputer – Verteilter Speicher

- Eine Anzahl von Prozessoren mit eigenem Speicher sind über ein Verbindungsnetzwerk miteinander verbunden
- Jeder Prozessor hat schnelleren Zugriff zum eigenen Speicher, und langsameren auf die Speicher der anderen Prozessoren (Non Uniform Memory Access -> NUMA)

# Die Welt von MPI



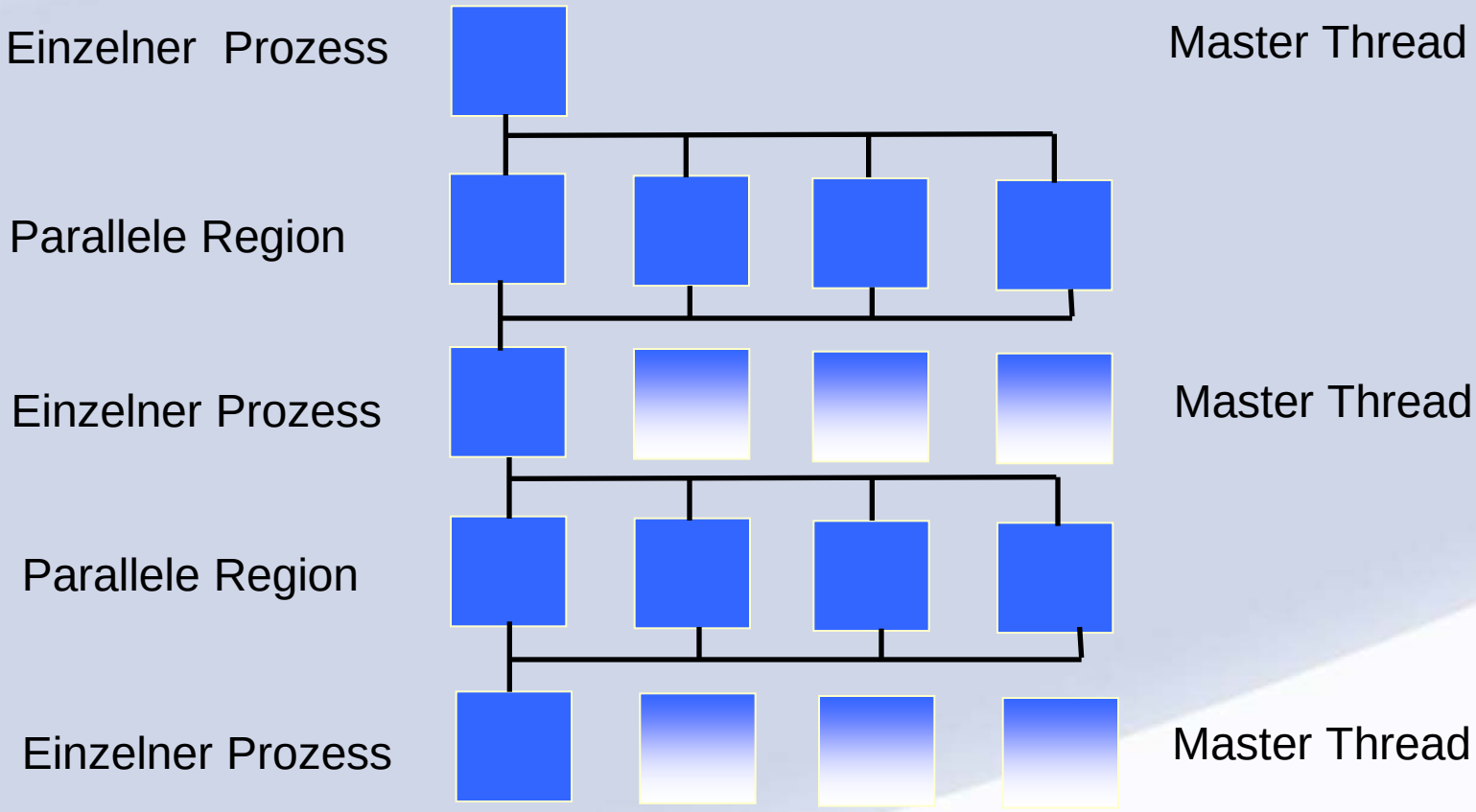
# Multiprocessor – Gemeinsamer Speicher



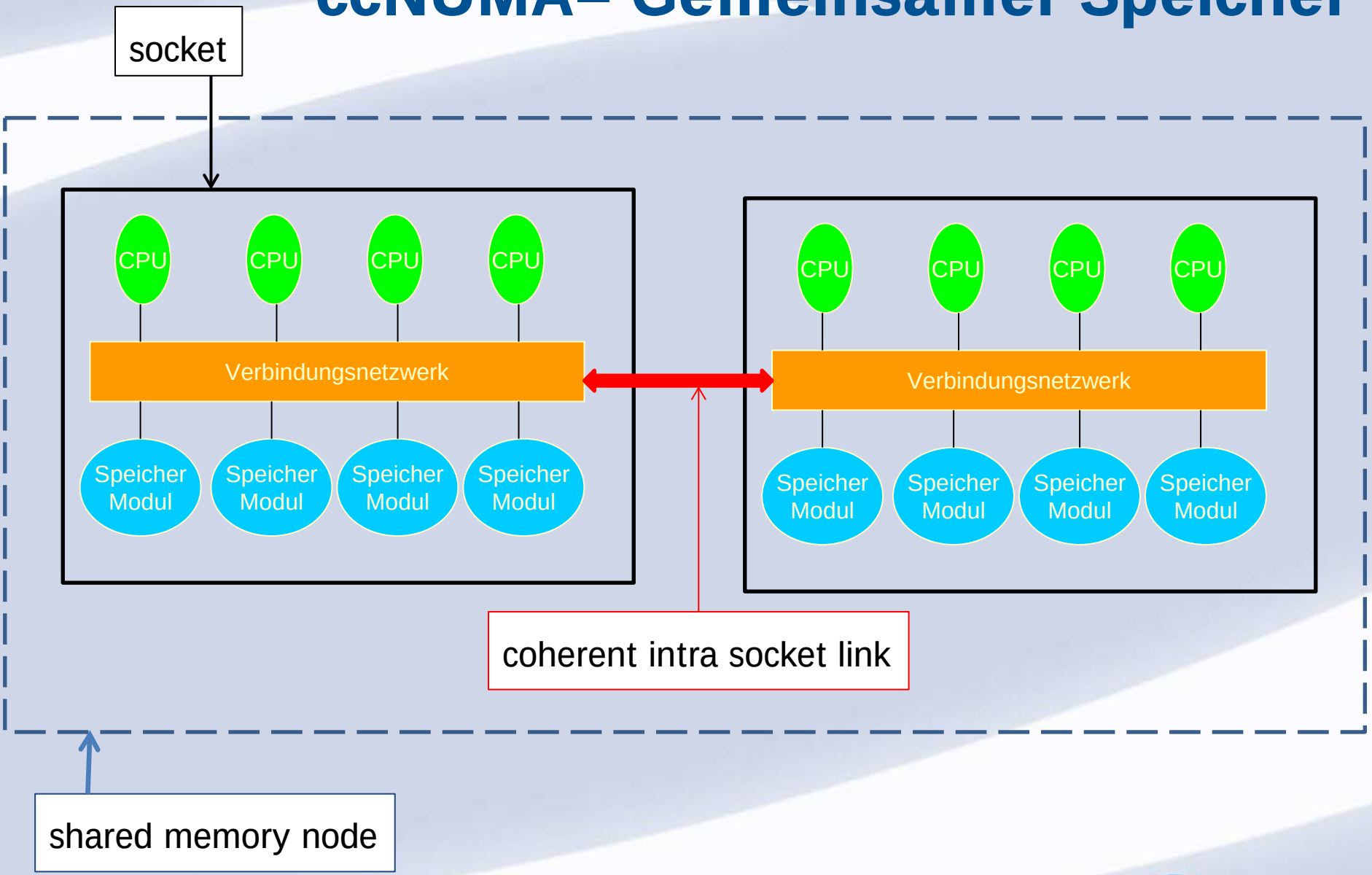
# Multiprocessor – Gemeinsamer Speicher

- Mehrere Prozessoren sind über ein Verbindungsnetzwerk an mehrere Speichermodule verbunden
- Jeder Prozessor hat die gleiche Zugriffszeit zum gemeinsamen Speicher
- Konzept bekannt als Uniform Memory Access (UMA)

# Die Welt von OpenMP



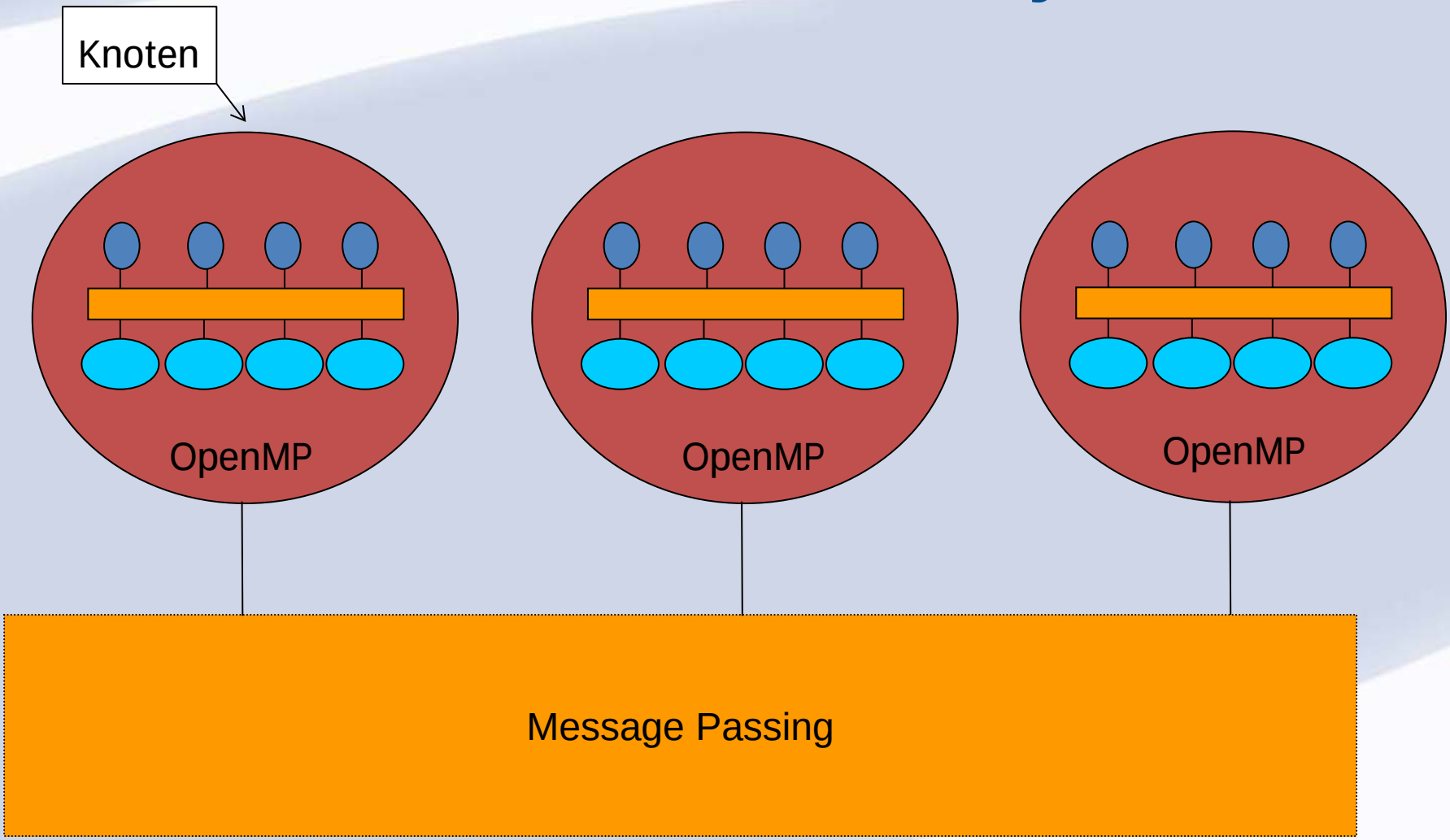
# ccNUMA– Gemeinsamer Speicher



# ccNUMA – Gemeinsamer Speicher

- Hardware mit verteiltem Speicher
- Logisch ist ein gemeinsamer Speicher sichtbar  (ein Adressraum)
- Unterschiedliche Zugriffszeiten je nachdem ob Zugriffe im lokalen oder entfernten Speicher stattfinden
- cache-coherent Nonuniform Memory Access

# Die hybride Welt



# Engpässe von Hybriden Systemen

- Verbindungsnetzwerk
- Speicherbandbreite
- Ruhende Prozessoren/Kerne

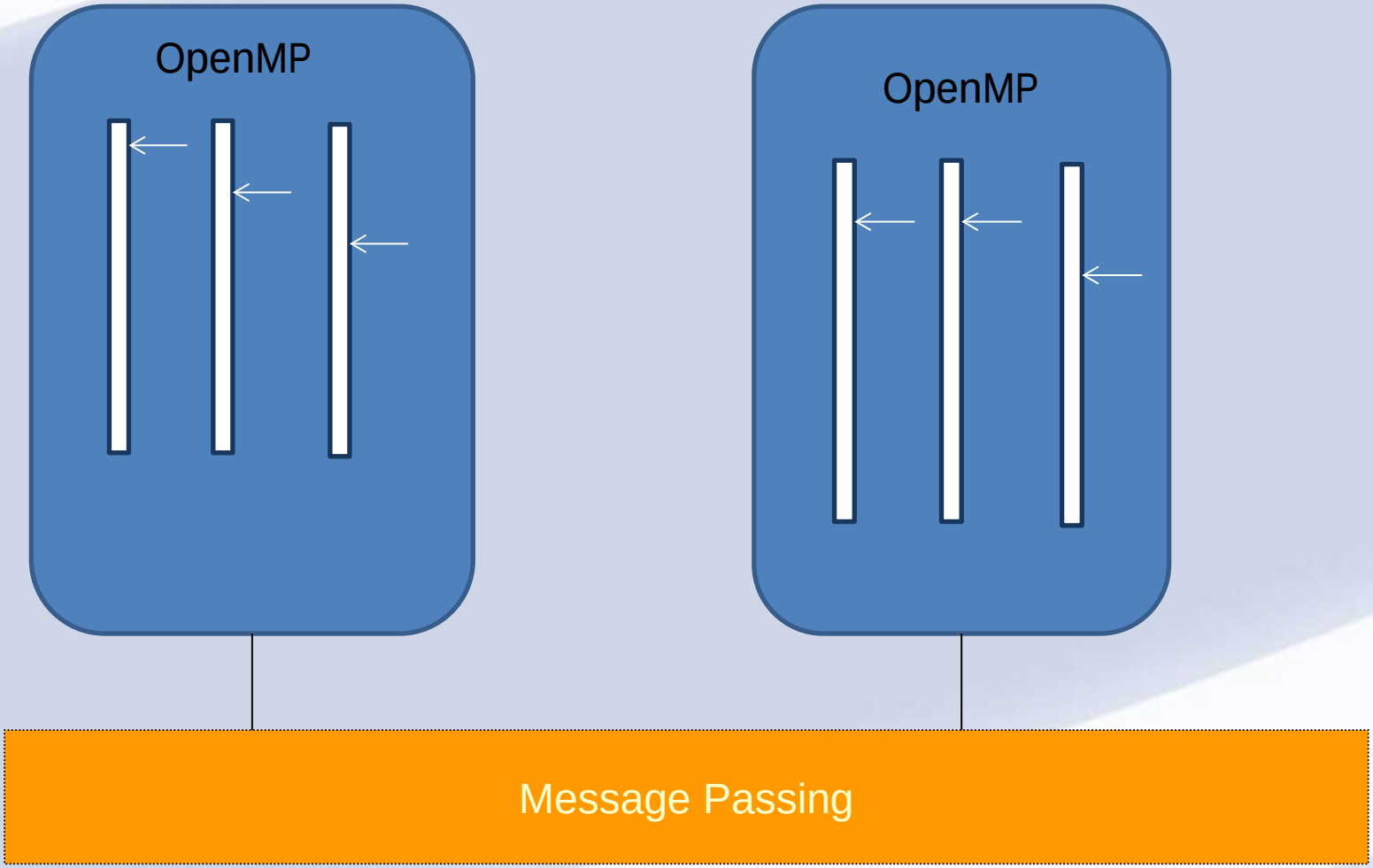
# Warum hybride Parallelisierung

- Der logische Schritt um hybride Architekturen zu programmieren ist ein hybrides Programmiermodell
- Minimierung des MPI-Kommunikation Zusatzaufwands innerhalb von SMP-Knoten
- Hybride Programmiermodelle ermöglichen multilevel Parallelisierung von Anwendungen

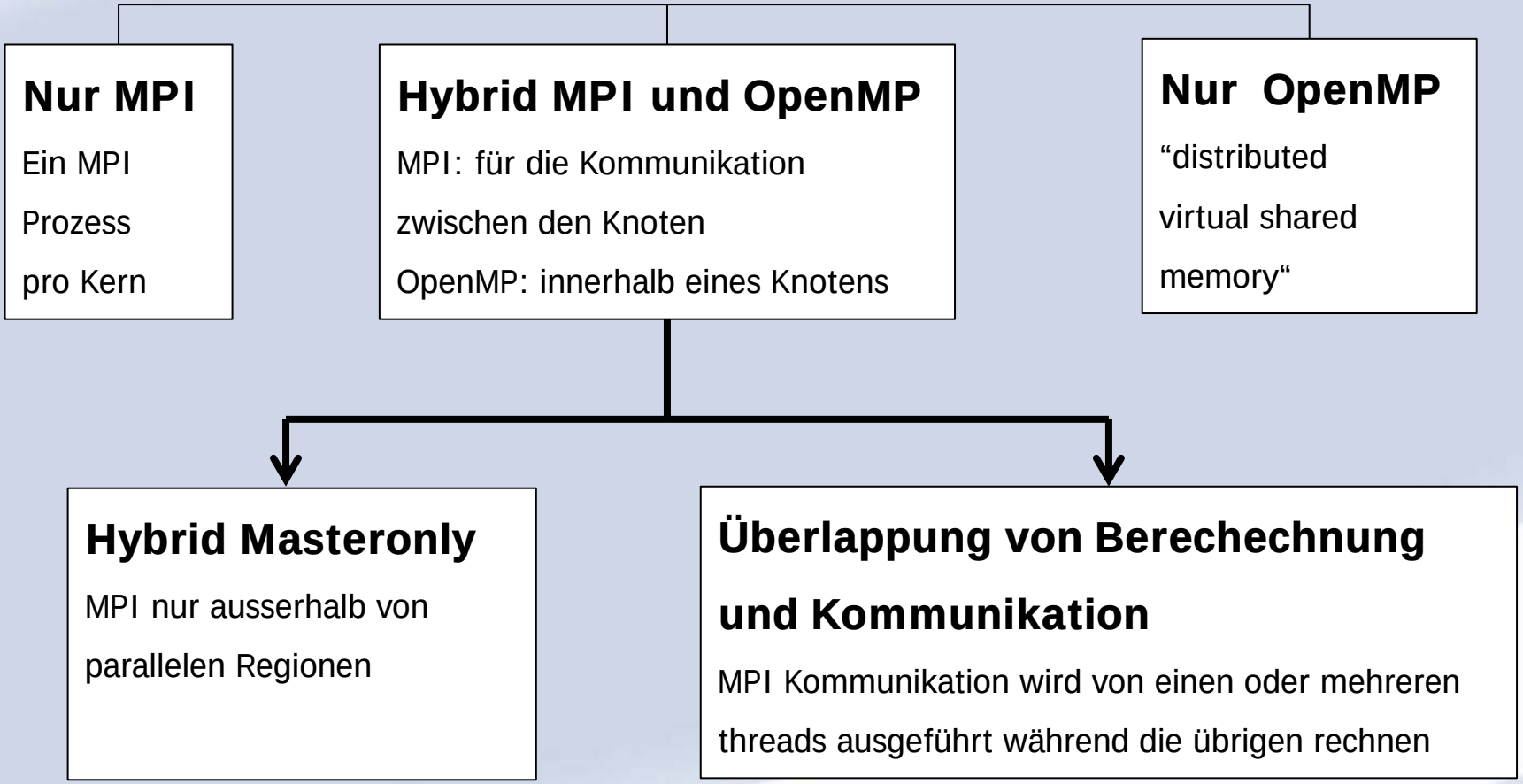
# Multilevel Parallelisierung

- Schritt 1
  - *coarse-grained parallelism*
    - Zerlegung des Problems in möglichst unabhängige Teilprobleme deren Berechnung gelegentlich Austausch von Informationen benötigt
    - Jedes Teilproblem wird auf ein MPI-Prozess abgebildet
- Schritt 2
  - *fine-grained parallelism*
    - Zusätzliche Parallelisierung mit OpenMP Direktiven z.B. auf loop-level

# Prozesse und threads



# Programmiermodelle für hybride Systeme



# Unterstützung von Multithreading

- Die MPI-Bibliothek muss den Zustand berücksichtigen, dass mehrere threads MPI-Routinen aufrufen, ohne sich dabei gegenseitig zu stören (thread safety)
- MPI-1 Standard unterstützt kein multithreading
- MPI-2 Standard hat multithreading Unterstützung

# Prozesse und threads

- Einzelne threads sind  nicht sichtbar ausserhalb ihres Prozesses
- Die threads führen MPI-Aufrufe im Auftrag ihres Prozesses aus
  - D.h. in den MPI-Routinen wird der **rank** des MPI-Prozesses benutzt und nicht die thread-id

    MPI_Xxxx(……,**rank**,……)

# Unterstützung von Multithreading

- MPI_Init
  - Initialisierung ohne multithreading
- MPI_Init_thread
  - Initialisierung mit multithreading
- MPI_Init_thread (int*argc, char*((*argv)[], int required, int* provided)

# Unterstützung von Multithreading

- MPI_Init_thread (int*argc, char*((*argv)[], int required, int* provided)
  - required: der gewünschte multithreading Modus
  - provided: Rückgabewert, der den aktuellen Modus, der vom System unterstützt wird enthält

# Unterstützung von Multithreading

- MPI_THREAD_SINGLE
  - Nur ein thread pro Prozess
  - Ähnlich wie MPI_Init
- MPI_THREAD_FUNNELED
  - Der Prozess ist multithreaded aber nur der master thread führt MPI-Aufrufe aus
- MPI_THREAD_SERIALIZED
  - Mehrere threads können MPI-Routinen aufrufen, aber nur einer zu einem gewissen Zeitpunkt

# Unterstützung von Multithreading

- MPI_THREAD_MULTIPLE
  - Mehrere threads dürfen MPI-Routinen aufrufen ohne jede Restriktion
- Überlappung von Kommunikation und Berechnung erlauben
  - MPI_THREAD_FUNNELED
  - MPI_THREAD_SERIALIZED und
  - MPI_THREAD_MULTIPLE

# Auswirkungen auf die Korrektheit

- Je höher der multithreading level desto höher die Komplexität der parallelen Algorithmen der Anwendungen
  - Einerseits kann man dadurch eine Effizienzsteigerung erreichen
  - Andererseits sind die Fehler die man dabei machen kann schwieriger zu finden
- Die Implementierung der MPI-Bibliothek ist auch komplexer

# Unterstützung von Multithreading

- OpenMPI und mpich2 unterstützen alle multithreading level
- Debugging von hybrid MPI/OpenMP parallelen Programmen ist mit dem DDT debugger möglich
- Profiling und Trace Analysis ist mit dem VAMPIR tool möglich

# Unterstützung von Multithreading

- int MPI_Query_thread(int *provided)
  - Ein thread kann den multithreading Modus abfragen, um sicher zu sein dass es erlaubt ist Aufrufe der MPI-Routinen zu machen
- int MPI_Is_thread_main(int *flag)
  - Ein thread kann herausfinden ob er der master thread ist
  - Wichtig bei MPI_THREAD_FUNNELED

# Beispiel

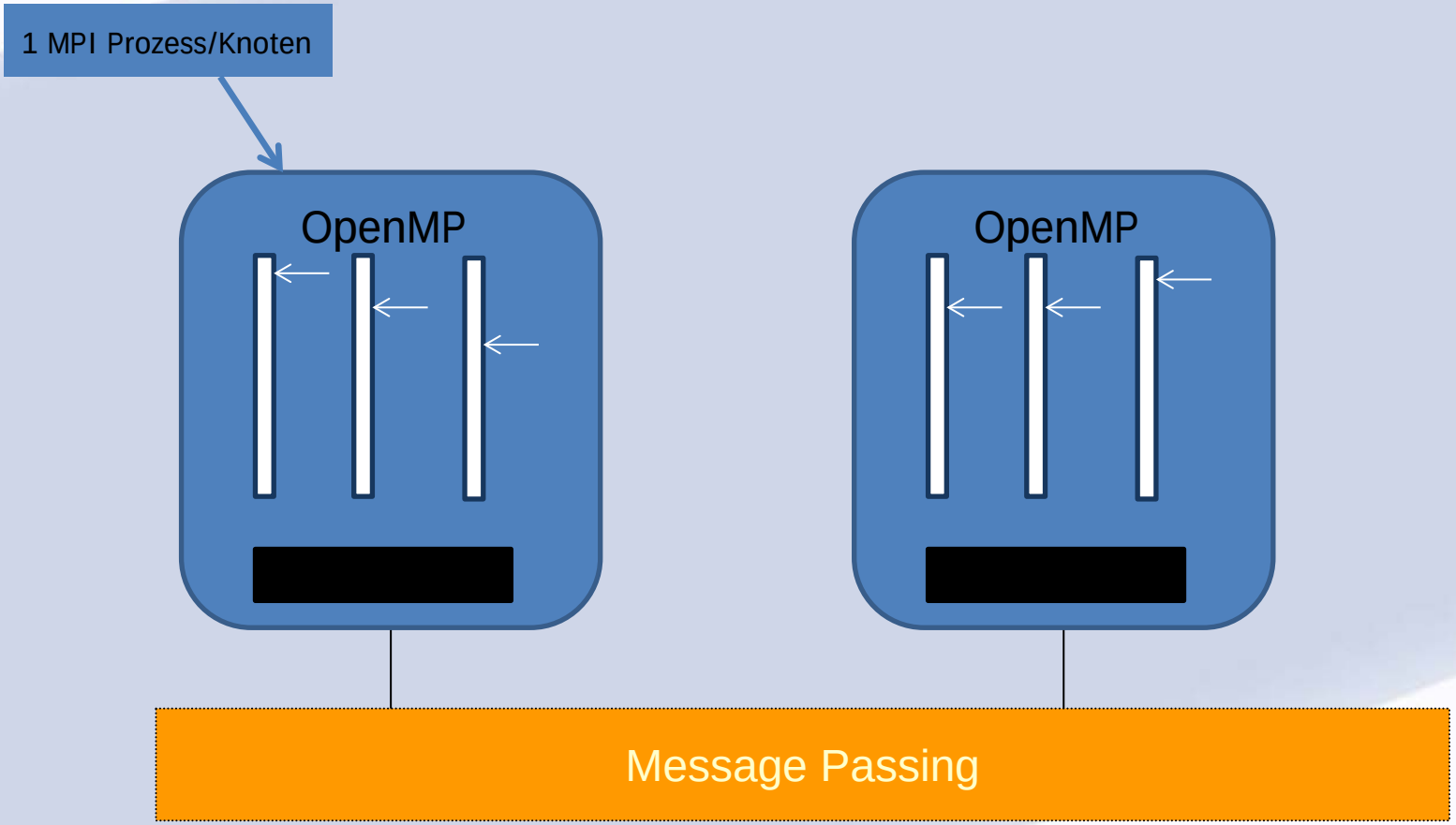
```
int thread_level, thread_is_main


MPI_Query_thread(&thread_level);
MPI_Is_thread_main(&thread_is_main);
If ((thread_level > MPI_THREAD_FUNNELED ) ||
     (thread_level == MPI_THREAD_FUNNELED && thread_is_main)) {
       ..... /* diese threads duerfen MPI Routinen aufrufen */
else {
  printf("Fehler: Dieser thread darf keine MPI Kommunikation machen \n")
}
.....
```

# Hybrid Master Only

- MPI-Aufrufe nur ausserhalb von parallelen Regionen
- Üblicherweise 1 MPI Prozess pro Knoten und 1 OpenMP thread pro Kern innerhalb des Knotens

# Prozesse und threads



# Hybrid Master Only

```
for (iteration = 1.....n)
 {
   #pragma omp parallel
    {
          /* compute something */
    }
    /* ON MASTER THREAD ONLY */
    MPI_Send(sendbuffer, ..........)
    MPI_Recv(recvbuffer,.............)
}
```

# Hybrid Master Only und OMP MASTER

-Innerhalb von OMP MASTER

```
#pragma omp barrier
 #pragma omp master
      MPI_Xxx(.....)
#pragma omp barrier
```

# Hybrid Master Only und OMP MASTER

- MPI_THREAD_FUNNELED ist notwendig
- OMP MASTER garantiert keine Synchronisation
- OMP BARRIER ist notwendig um sicher zu gehen, dass der Kommunikationspuffer nicht von anderen threads benutzt wird

# Beispiel mit MPI_Send

```
#pragma omp parallel
{
 #pragma omp for
      for(i=0;i<1000;i++)
          buf[i] = a[i];
#pragma omp barrier
#pragma omp master
          MPI_Send(buf,.....);
#pragma omp barrier
#pragma omp for
       for(i=0;i<1000;i++)
          buf[i] = c[i];
} /* omp end parallel */
```

# Hybrid Master Only

- Vorteile
  - Keine MPI-Kommunikation innerhalb eines SMP Knotens
  - Kein Topologie Problem
- Nachteile
  - Während der Master kommuniziert schlafen alle anderen threads
  - Nur ein kommunizierender thread (master) kann in den meisten Fällen nicht die volle MPI-Bandbreite zwischen den Knoten ausnutzen

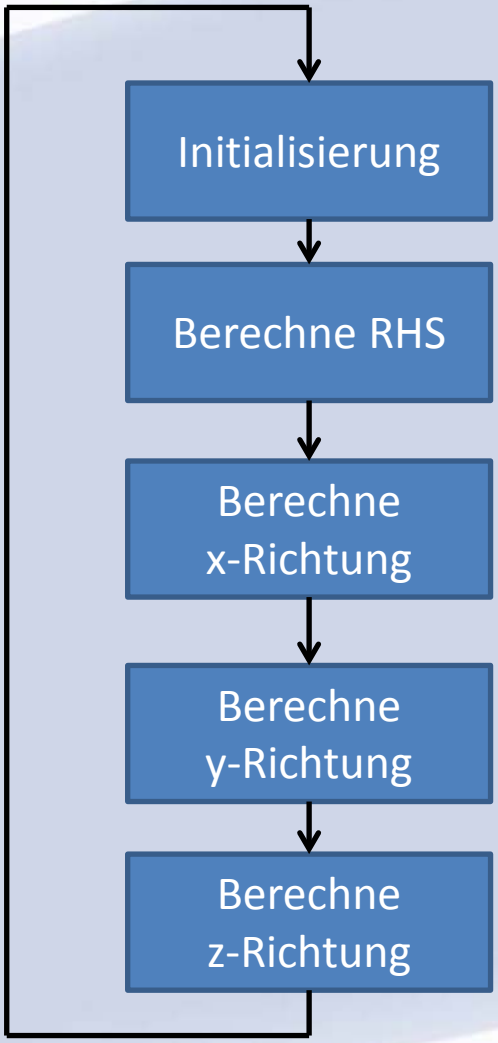
# Hybrid mit Überlappung (Mixed Modell)

- Überlappung von Kommunikation und Berechnung
- Mehr als ein MPI-Prozess pro Knoten
- MPI-Aufrufe können von mehreren threads ausgeführt werden
- MPI-Bibliothek muss multithreading unterstützen

# Hybrid Mixed

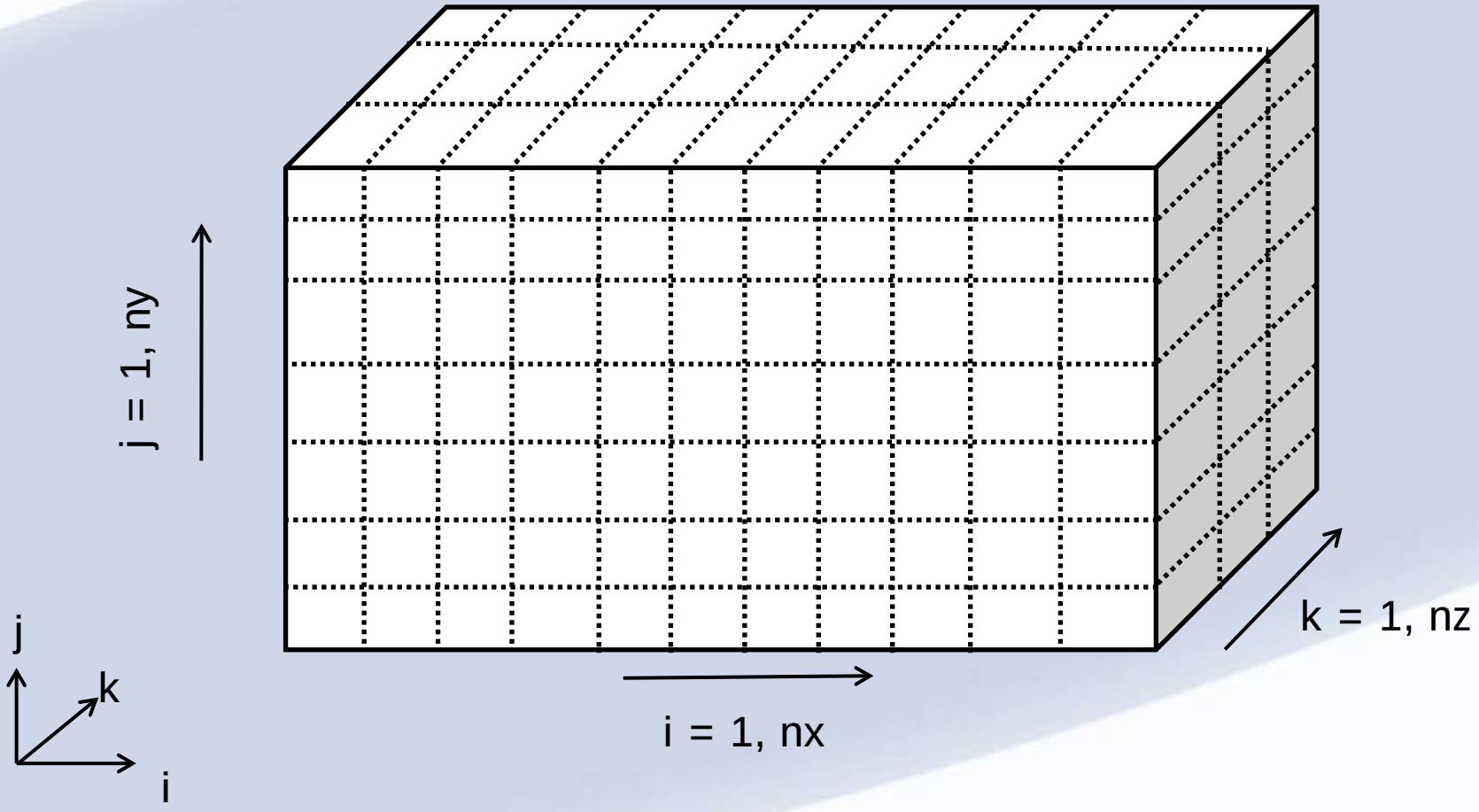
```
#pragma omp parallel
{
 if ( my_thread_id == id1)  {
     MPI_Send(sendbuffer, ......)
  }
 else if ( my_thread_id == id2) {
     MPI_Recv(recvbuffer, ......)
  }
 else
  {
    /* compute something */
 }
}
```

# Beispiel aus Strömungsmechanik

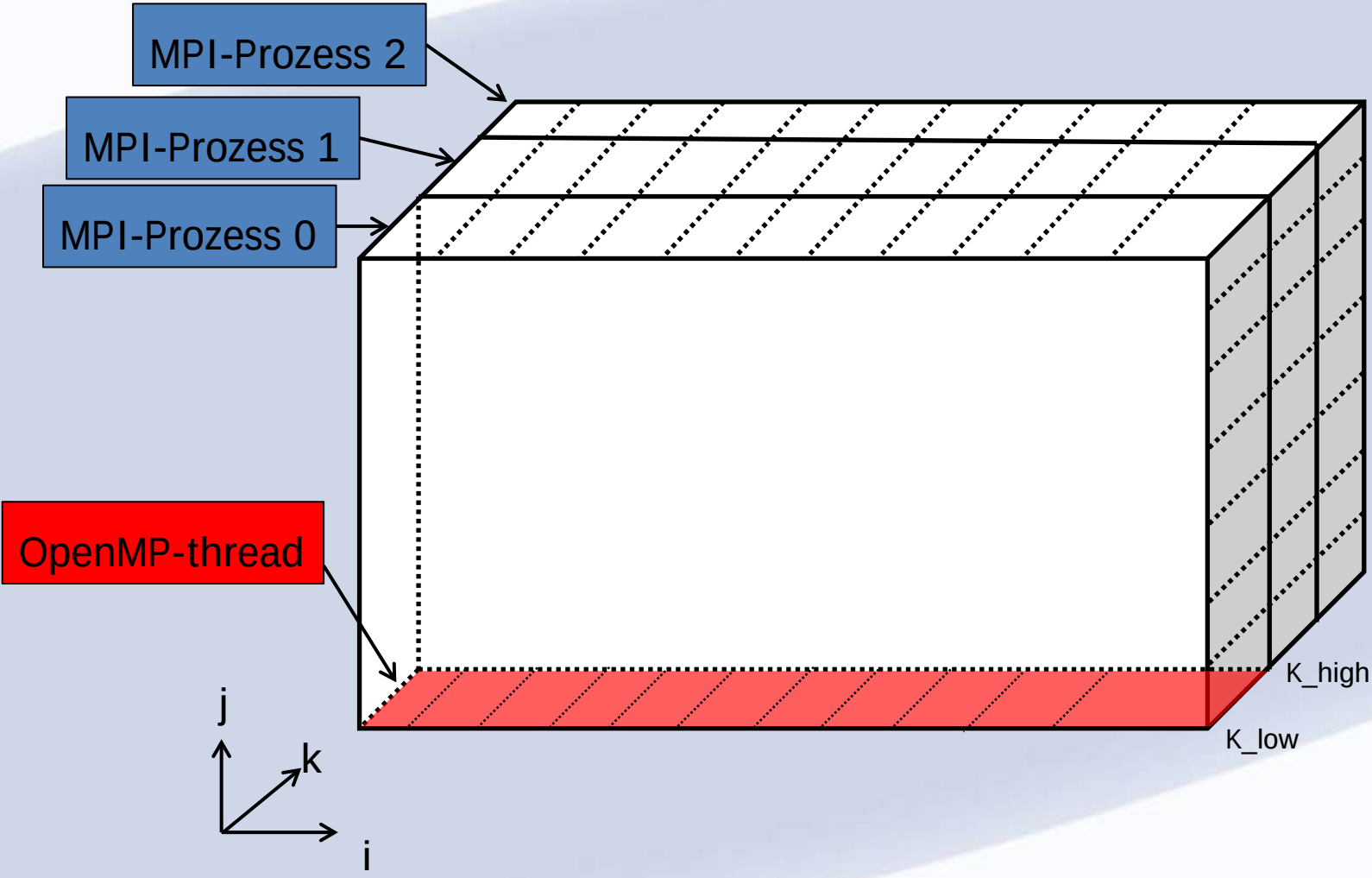



3D Navier Stokes Gleichungen

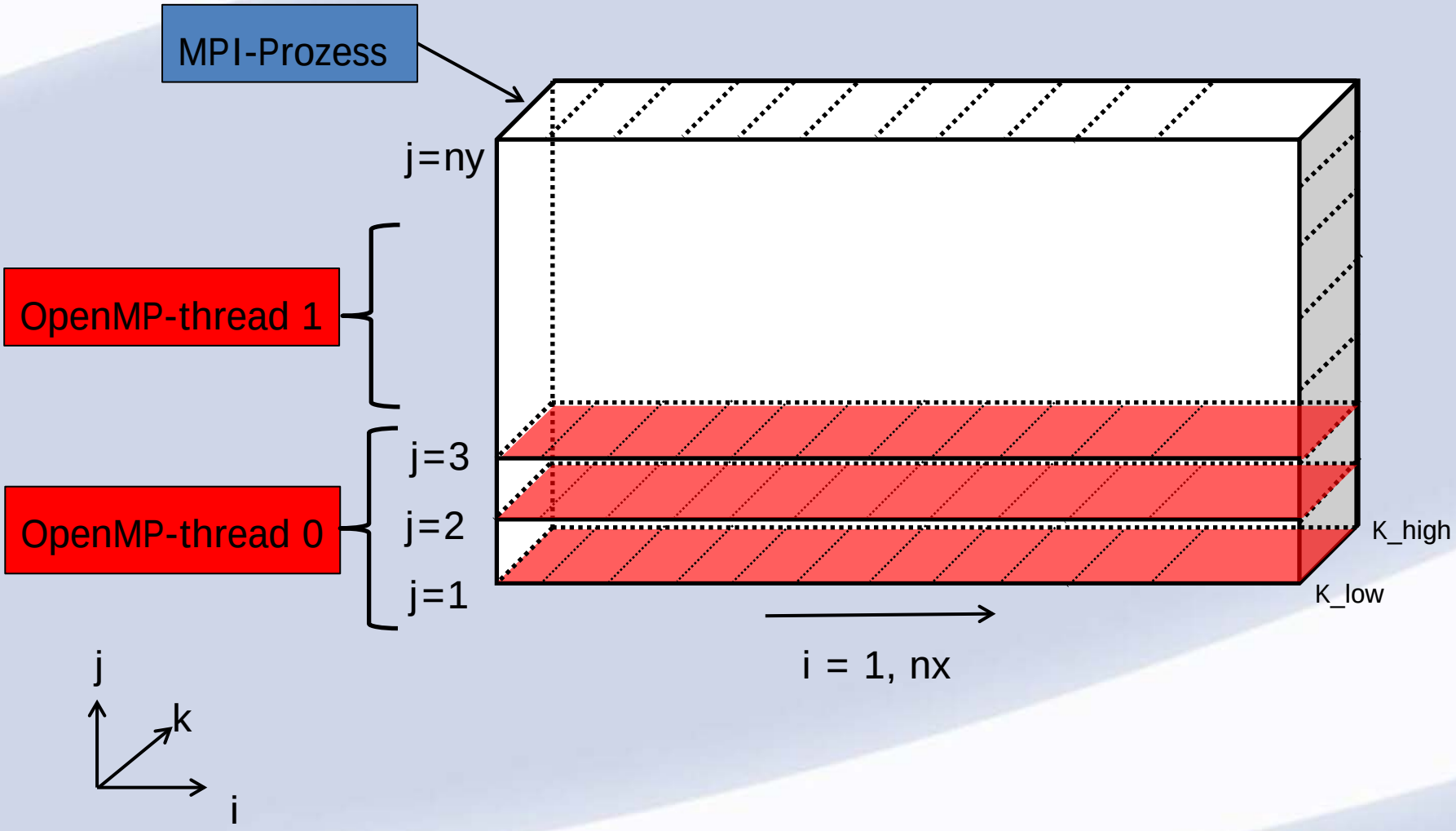
# 3 Dimensionales Rechengebiet



# 1D Gebietszerlegung in z-Richtung



# 1D Gebietszerlegung in z-Richtung



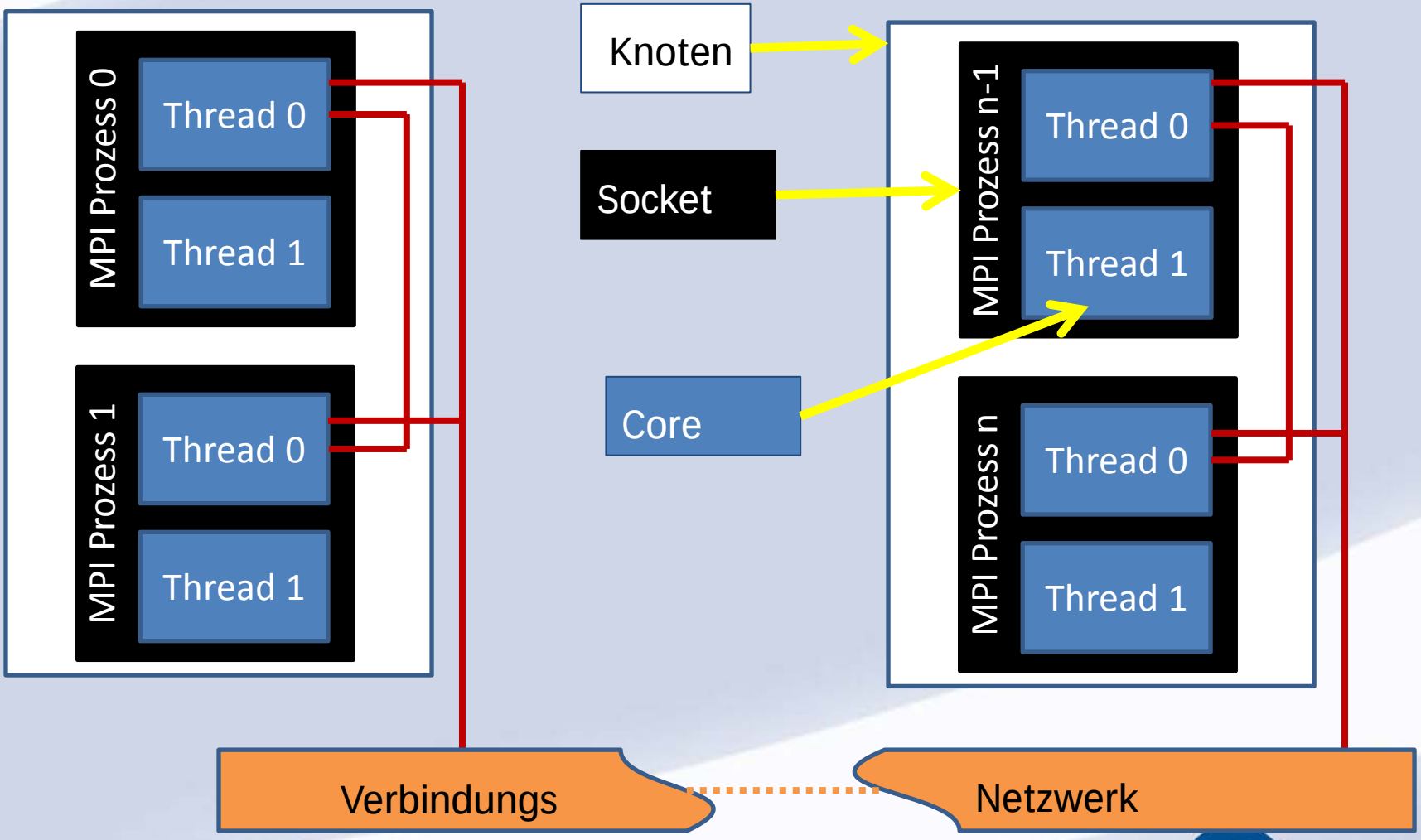
# Hybrid Mixed

```
MPI_Init_thread(MPI_THREAD_MULTIPLE,.....)
#pragma omp for
for (j=1; j<ny; j++) {
  MPI_Receive(pid1, ..............)
   for (k=k_low; k<k_high; k++)
     for (i=1; i<nx; i++)
    {
        z[i,j,k] = z[i,j,k-1] + .........
     }
   MPI_Send(pid2,..............)
}
```

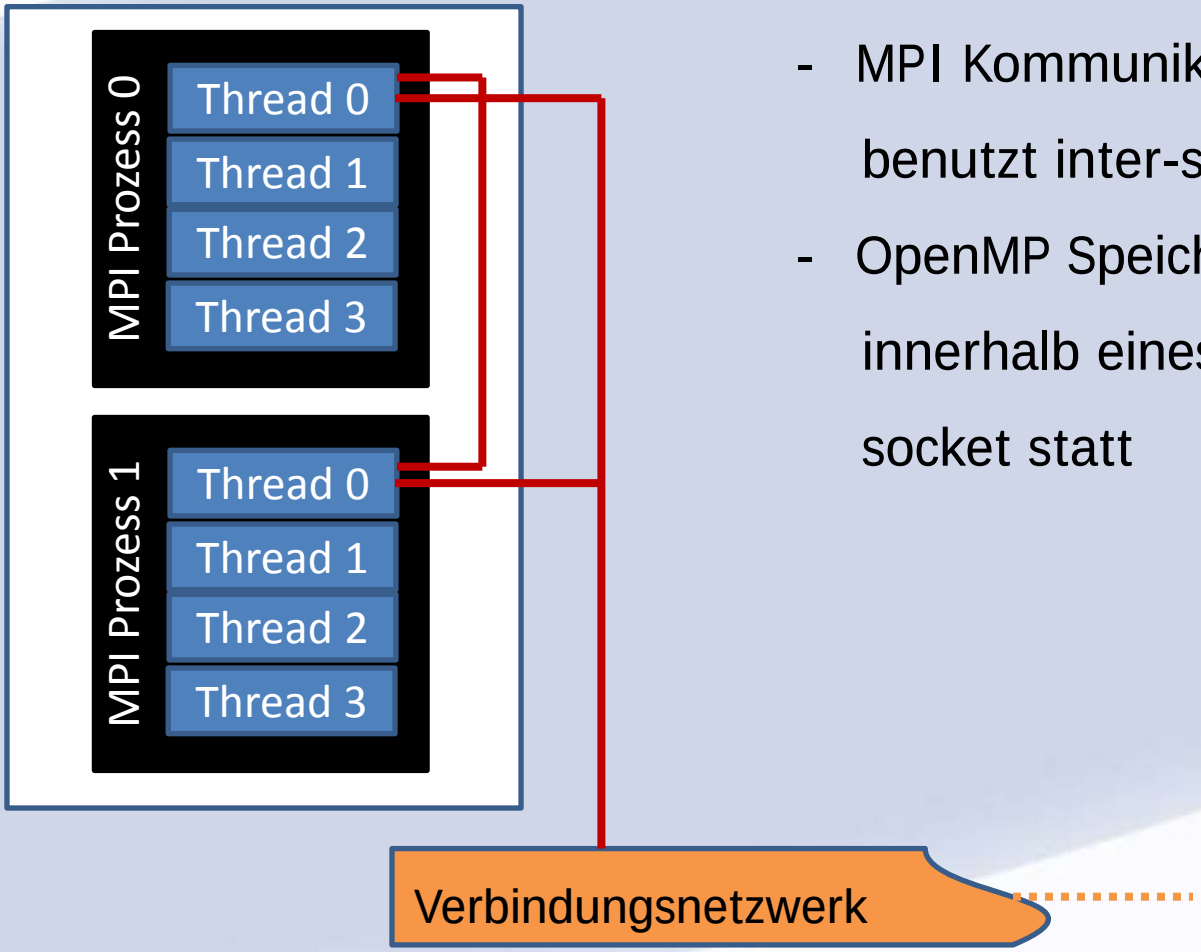
# OpenMP und MPI Non Blocking Kommunikation

- Es ist nicht erlaubt
  - dass mehrere threads ein MPI_Wait oder MPI_Test auf eine und dieselbe MPI Non Blocking Operation (request Objekt) durchführen
- Es ist erlaubt
  - dass ein thread eine Non Blocking Operation startet und ein anderer diese abschliesst. Es dürfen aber nicht zwei threads versuchen diese zu beenden

# Abbildung von Prozessen/Threads auf die Hardware (mixed Modell)

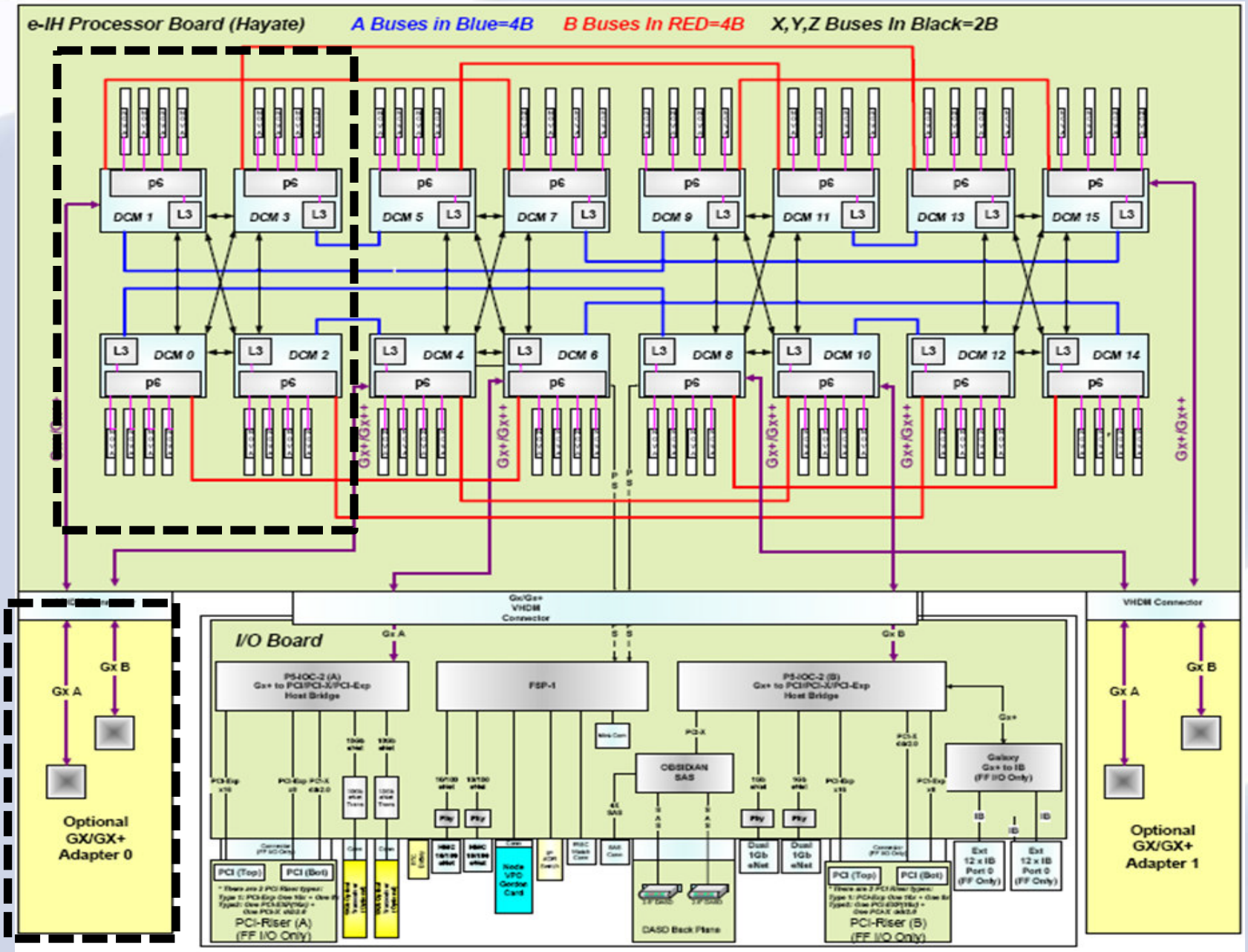


# Abbildungsbeispiel 8 core 2 socket Knoten




- MPI Kommunikation im Knonten benutzt inter-socket Verbindungen
- OpenMP Speicherzugriffe finden innerhalb eines multicore socket statt

# Power6 p575 Node




Quad

Infiniband Galaxy-2 Adapters

# Power6 p575 Task Affinity

- ST mode 32 MPI Tasks/Knoten :

  tasks_per_node = 32

  task_affinity = core(1)
- SMT mode 64 MPI Tasks/Knoten :

  tasks_per_node = 64

  task_affinity = cpu(1)
- Hybrid ST mode
  8 MPI Tasks x 4 OpenMP threads :

  tasks_per_node = 8

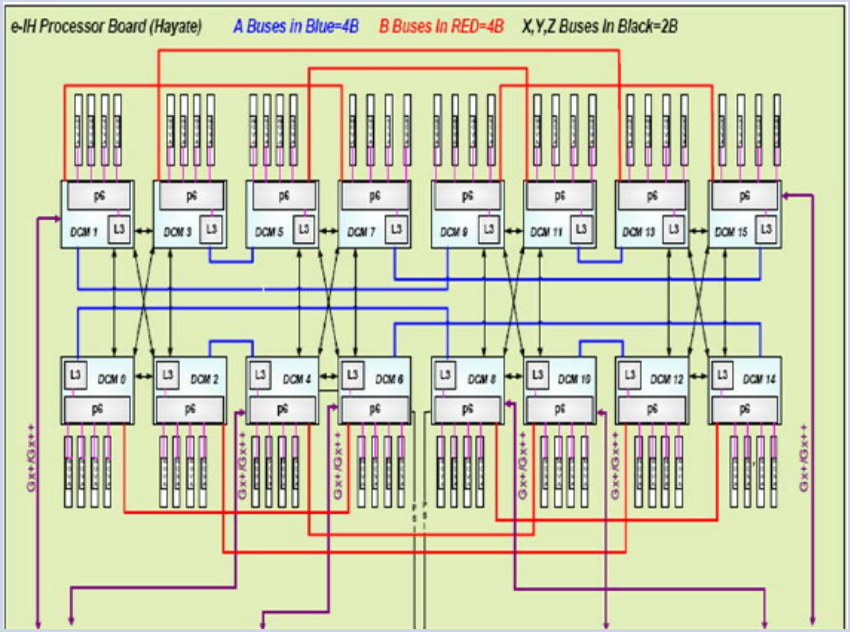
  task_affinity = core(4)

  parallel_threads = 4
- Hybrid SMT mode
  32 MPI Tasks x 2 OpenMP threads :

  tasks_per_node = 32

  task_affinity = cpu(2)

  parallel_threads = 2



# Abbildungsproblem

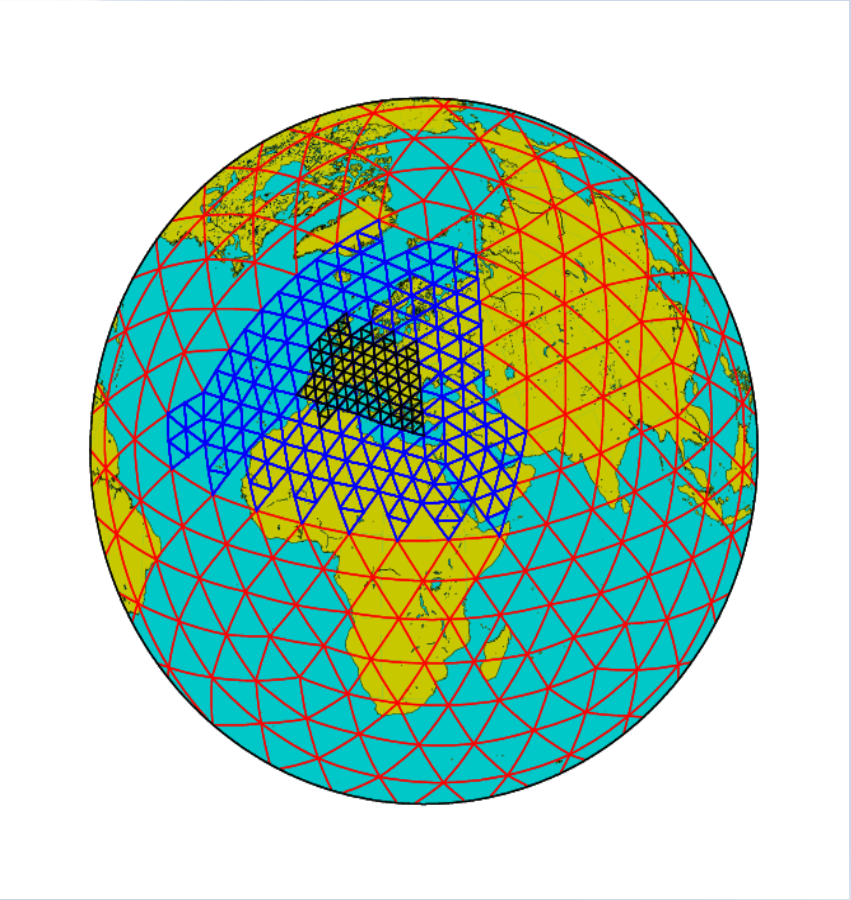
- Task Geometry Power6 p575
  - **task_geometry={**(*task id*,*task id*,...)(*task id*,*task id*, ...) ... **}**
  - **Beispiel:** Ein job mit 6 MPI Tasks auf 4 Knoten:
    task_geometry={(0,1) (3) (5,4) (2)}

- Finde die Optimale Abbildung der Prozess Topologie der Anwendung, auf die Topologie der Hardware
  - Finde optimalen Lastausgleich aller Recheneinheiten
  - Minimiere den Kommunikationsaufwand
  - Dieses Problem ist NP-complete

# Abbildungsproblem

- Lösungsansätze
  - Die Prozess Topologie der Anwendung wird auf Graphen abgebildet
  - Das Lastausgleichproblem wird als Graphenpartitionierungs Problem formuliert
  - Die Partitionierungsalgorithmen basieren auf Heuristiken
  - Bekannte Bibliotheken: METIS, Jostle

# ICON auf IBM Power6 “blizzard”



- MPI (ST) 4 Knoten
  32 MPI-Prozesse/Knoten
  Wallclock : 779 sec
- MPI (SMT) 4 Knoten
  64 MPI-Prozesse/Knoten
  Wallclock : 549 sec
  Gewinn : 29,5% zu MPI (ST)
- MPI/OpenMP (SMT) 4 Knoten
  Pro Knoten:
  32 MPI-Prozesse x 2 OpenMP Threads
  Wallclock : 499 sec
  Gewinn : 9% zu MPI (SMT)
  Gewinn : 35,9% zu MPI (ST)

DKRZ

# ICON auf IBM Power6 “blizzard”

**ST Mode**

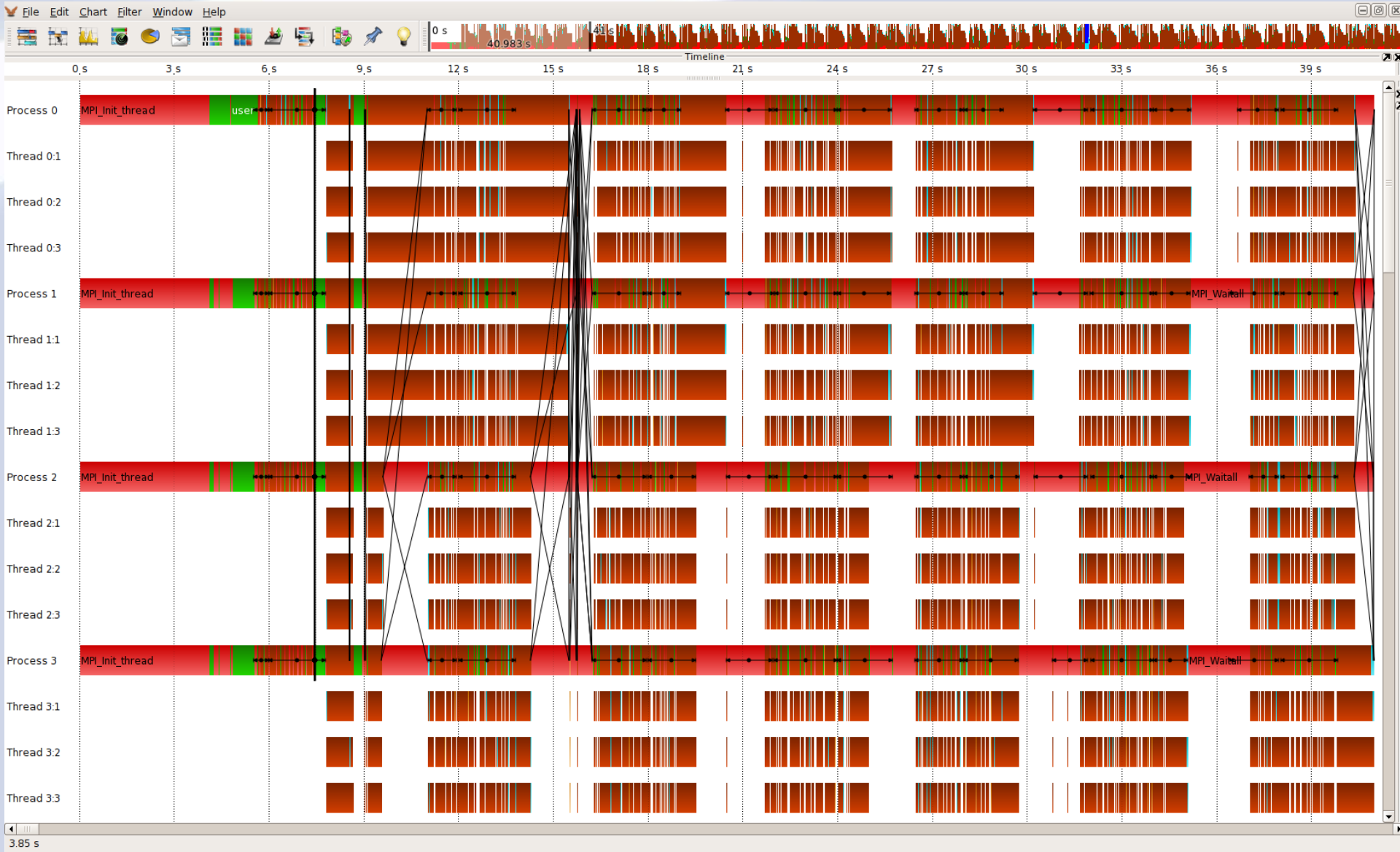
- MPI (ST) 1 Knoten
  Wallclock : 2981 sec
- MPI (ST) 2 Knoten
  Wallclock : 1516 sec
  Strong Scaling=**1,96**
- MPI (ST) 4 Knoten
  Wallclock : 779 sec
  Strong Scaling=**3,82**
- MPI (ST) 8 Knoten
  Wallclock : 410 sec
  Strong Scaling=**7,27**

**SMT Mode**

- MPI (SMT) 1 Knoten
  Wallclock : 2021 sec
  Strong Scaling=1,47 -> **75%** vom
  Speedup auf **2 Knoten ST**

- MPI/OpenMP (SMT) 4 Knoten
  32 MPI-Prozesse x 2 OpenMP Threads
  Wallclock : 499 sec
  Strong Scaling = 5,97 -> **82%** vom
  Speedup auf **8 Knoten ST**

DKRZ


File Edit Chart Filter Window Help
0 s
40.983 s
Timeline
0 s 3 s 6 s 9 s 12 s 15 s 18 s 21 s 24 s 27 s 30 s 33 s 36 s 39 s
Process 0
MPI_Init_thread
user
Thread 0:1
Thread 0:2
Thread 0:3
Process 1
MPI_Init_thread
MPI_Waitall
Thread 1:1
Thread 1:2
Thread 1:3
Process 2
MPI_Init_thread
MPI_Waitall
Thread 2:1
Thread 2:2
Thread 2:3
Process 3
MPI_Init_thread
MPI_Waitall
Thread 3:1
Thread 3:2
Thread 3:3
3.85 s

DKRZ

# Paralleler I/O in OpenMP

- OpenMP spezifiziert nichts über parallele I/O
- Programmierer ist verantwortlich das Parallele I/O im multi-threaded Programm sicherzustellen
- In Fortran,  führt nicht synchronisierter I/O auf der gleichen “unit” zu einem nicht spezifiziertem Verhalten
- In hybriden Programmen kann man weiterhin parallele I/O in der MPI Welt machen

# Zusammenfassung

- Hybride MPI/OpenMP Parallelisierung hat das Potential die Skalierung von Anwendungen auf modernen hybriden Architekturen zu steigern
- MPI-Kommunikation innerhalb von SMP-Knoten kann dabei vermieden werden
- Multilevel Parallelisierung der Anwedungen wird dadurch ermöglicht

# Zusammenfassung

- Die MPI-Bibliothek muss thread safe sein
- Die Komplexität der hybrid parallelen Programmen ist grösser im Vergleich zu den nur MPI oder nur OpenMP parallelen Programmen
- Auswirkungen auf Korrektheit
  - Die Fehler sind schwieriger zu finden

# Zusammenfassung

- Auswirkungen auf Effizienz
  - Zusatzaufwand der Generierung und Synchronisation der threads
- Es ist schwierig die optimale Anzahl der OpenMP threads pro MPI-Prozess zu bestimmen
- Ein guter Lastausgleich zwischen allen Recheneinheiten des Systems hat sehr grosse Auswirkung auf die Effizienz des parallelen Programms

# Referenzen

- “Performance Characteristics of Hybrid MPI/OpenMP Implementations of NAS Parallel Benchmarks SP and BT on large-scale Multicore Clusters”, Xingfu Wu and Valerie Taylor
- “Communication Characteristics and Hybrid MPI/OpenMP Parallel Programming in Clusters of Multi-core SMP Nodes”, Georg Hager, Gabriele Jost, Rolf Rabenseifner
- http://glaros.dtc.umn.edu/gkhome
- http://staffweb.cms.gre.ac.uk/~c.walshaw/partition
- Bei Fragen: Panos Adamidis

  DKRZ-Raum 213 (adamidis@dkrz.de)