并行计算

(Parallel Computing)

课程介绍

学习目的:

- ✓ 学习和掌握并行计算的基本概念
- ✓ 学习并行算法的分析与设计方法
- ✓ 学习并行程序设计、环境与工具等

课时安排:

✓ 课堂讲授 32学时

考核方法:

✓ 作业+报告

课程介绍

参考教材:

- ✓ An Introduction to Parallel Programming, Peter S. Pacheco, Elsevier, 2011
- ✓ Introduction to Parallel Computing (2ed), Ananth, Addison Wesley, 2003
- ✓ 并行算法的设计与分析,陈国良,高等教育出版社,2009

课程介绍

授课教师:

✓ 丁建睿

联系方式:

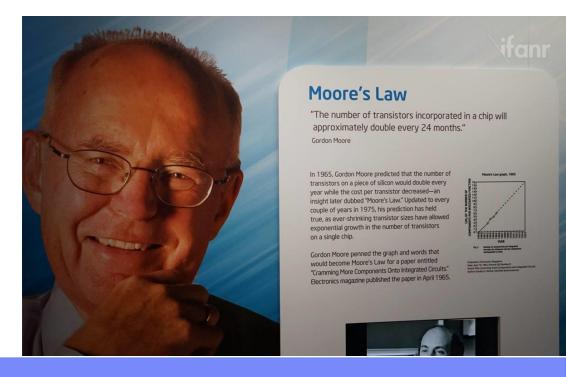
✓ dingjianrui@163.com, 研究院一号楼北505

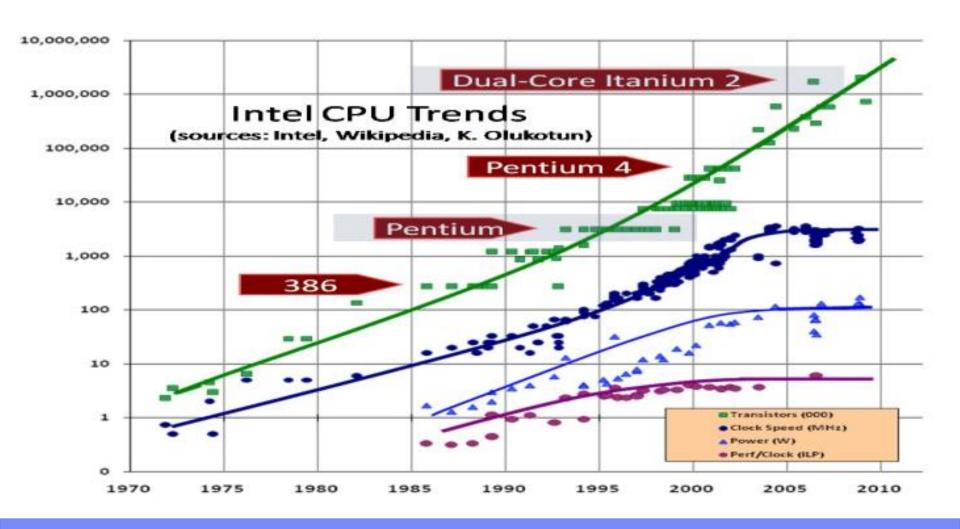
并行计算概述

学习内容:

- 为何需要构建并行系统
- 什么是并行计算
- 为何要使用并行计算
- 为何需要编写并行程序
- 如何编写并行程序

●摩尔定律:集成电路上可容纳的晶体管数目,约每隔 18个月便会增加一倍,性能也将提升一倍

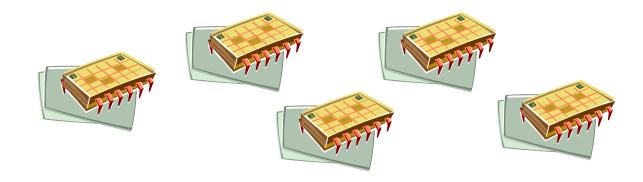






- 更小的晶体管 = 更快的处理器
- 更快的处理器 = 更大的功耗
- 更大的功耗 = 更大的散热
- 更大的散热 = 不稳定的处理器

●与其设计和制造速度更快的微处理器,不如将多个处理器放在一个集成电路上



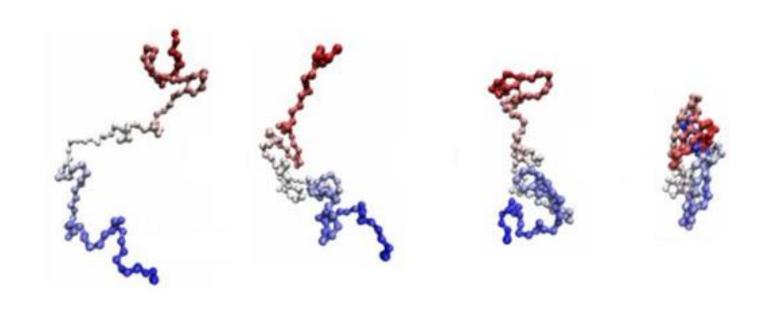
- 从单核系统(single-core systems)转向多核处理器 (multicore processors)
- "core" = central processing unit (CPU)
- 引入了并行性!!!



- ●为何需要处理器的性能持续增长
 - >计算能力在增加,但我们的计算问题和需求也在增加
 - >由于过去的增长,一些难题已被攻克
 - 如:解码人类基因组
 - ▶但更复杂的问题仍有待解决



气候建模 (Climate modeling)



蛋白质折叠(Protein folding)





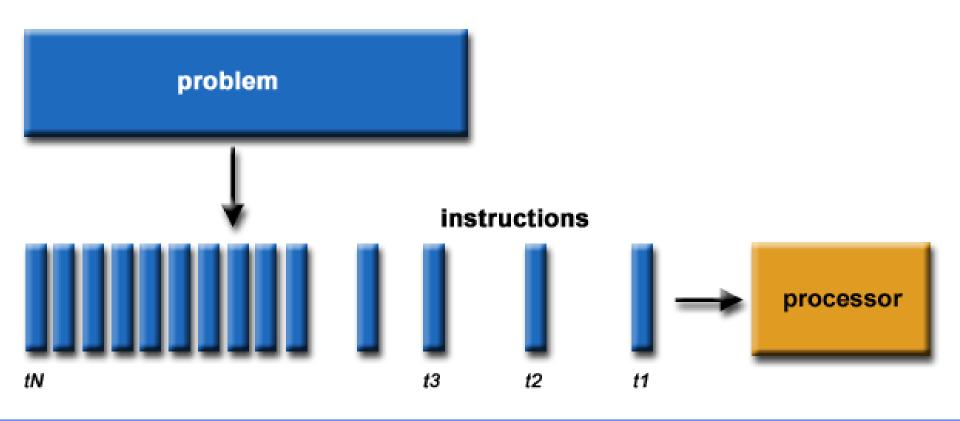
药物发现(Drug discovery)



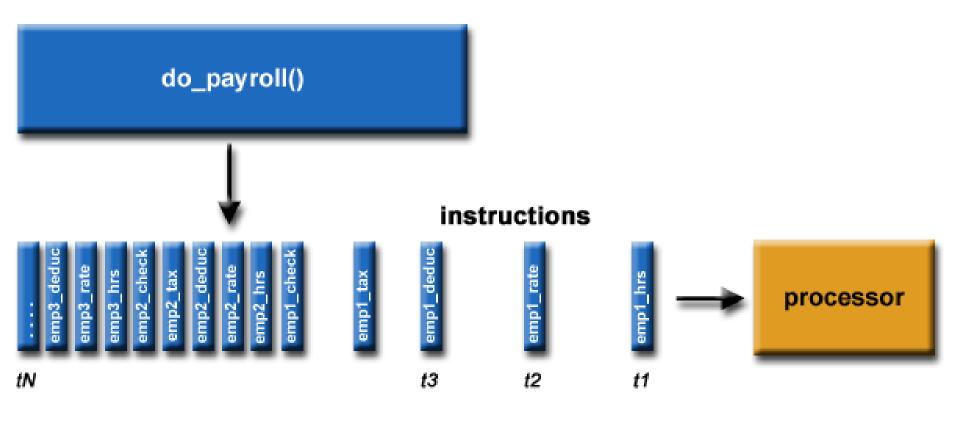
数据分析(Data analysis)

- 串行计算(Serial Computing)
 - > 问题被分解为离散的指令序列
 - ▶指令被一个接一个的顺序执行
 - ▶ 指令在一个处理器上执行
 - ▶ 某一时刻,只有一个指令可以执行

● 串行计算(Serial Computing)



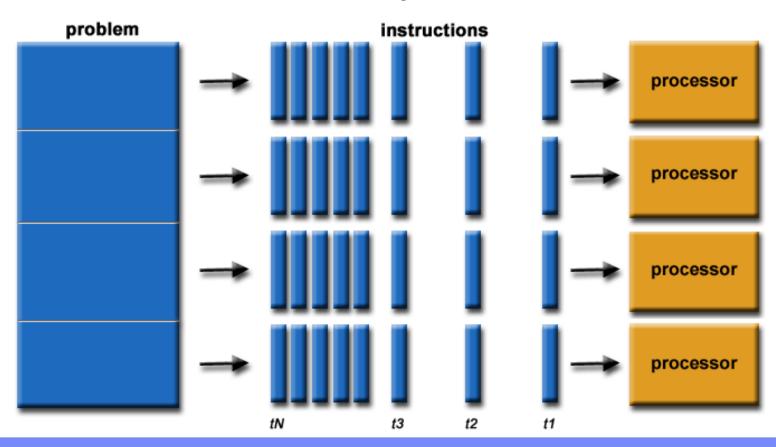
● 串行计算(Serial Computing)



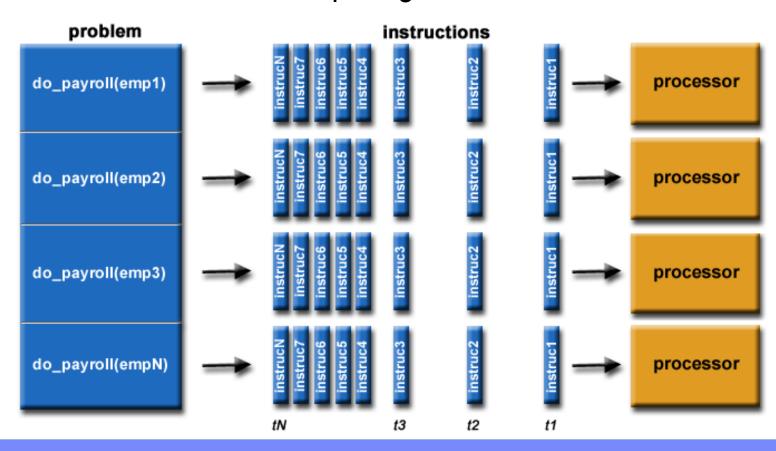
- 并行计算(Parallel Computing)
 - □ 同时利用多个计算资源解决一个计算问题
 - > 问题被分解为可以被同时解决的离散部分
 - > 每个部分被分解为一系列指令
 - > 每个部分的指令同时在不同的处理器上执行
 - ➤ 采用整体控制/协调机制

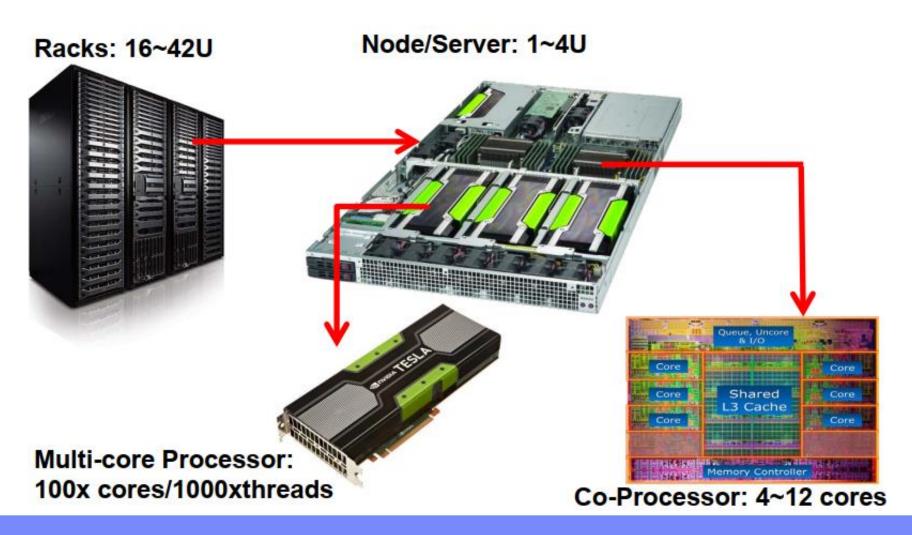
- 并行计算(Parallel Computing)
 - □ 同时利用多个计算资源解决一个计算问题
 - ▶每个部分可以同时求解
 - ▶ 任意时刻,多个指令在执行
 - ▶一台计算机,多个处理器/核
 - > 多台计算机, 联网

→ 并行计算(Parallel Computing)



● 并行计算 (Parallel Computing)





- 超级计算机(Supercomputers)
 - ➤ 性能由FLOPS (floatingpoint operations per second) 来衡量, 而不是MIPS (million instructions per second)
 - ➤ 1993年开始,TOP500排名(<u>https://www.top500.org/lists</u>)
 - ➤ HPL(the High-Performance Linpack Benchmark)用于测试高性能计算机系统浮点性能的benchmark

$$Ax = b; A \in \mathbf{R}^{n \times n}; x, b \in \mathbf{R}^n$$

▶ 技术和财富的比拼

- 超级计算机(Supercomputers)
 - ▶MFLOPS(megaFLOPS)每秒一佰万(=10⁶)次浮点运算
 - ➤GFLOPS(gigaFLOPS)每秒十亿(=10^9)次浮点运算
 - ▶TFLOPS(teraFLOPS)每秒一万亿(=10^12)次浮点运算
 - ▶PFLOPS(petaFLOPS)每秒一千万亿(=10^15)次浮点运算
 - ▶EFLOPS(exaFLOPS)每秒一佰京(=10^18)次的浮点运算

● 超级计算机(Supercomputers)

TOP500 List (2018 June)

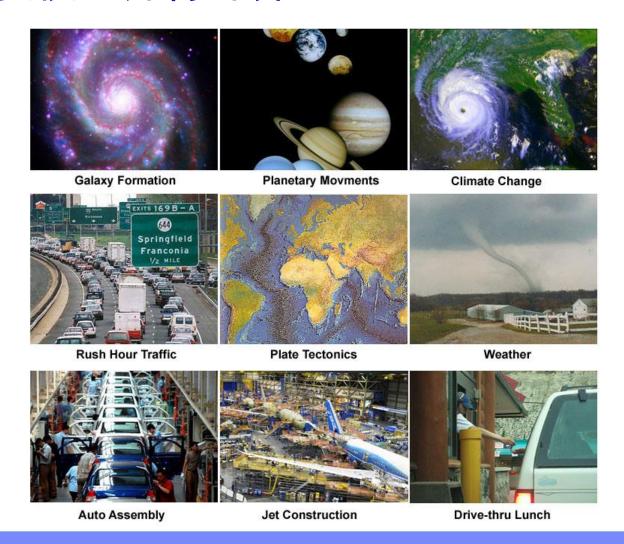
	Country	System	Vendor	#cores	Accelerator	Rmax (PFLOPS)	Rpeak (PFLOPS)	Power (kW)
1	US	Summit	IBM	2.2M	V100 GPU	122	187.7	8,806
2	China	TaihuLight	NRCPC	10M		93.0	125.4	15,371
3	US	Sierra	IBM	5.6M	V100 GPU	71.6	119.2	
4	China	Tianhe-2	NUDT	5M	Matrix 2000	61.4	100.7	18,482
5	Japan	ABCI	Fujitsu	391K	V100 GPU	19.8	32.6	1,649

超级计算机(Supercomputers)

TOP500 List (2020 June)

	Country	System	Vendor	#cores	Rmax (PFLOPS)	Rpeak (PFLOPS)	Power (kW)
1	Japan	FUGAKU	Fujitsu	7.3M	415.5	513.9	28,335
2	US	Summit	IBM	2.4M	148.6	200.8	10,096
3	US	Sierra	IBM	1.6M	94.6	125.7	7,438
4	China	TAIHULIGHT	NRCPC	10.6M	93.0	125.4	15,371
5	China	Tianhe-2A	NUDT	5.0M	61.4	100.7	18,482

- ●在自然界中,许多复杂的、相互关联的事件同时发生
- ●与串行计算相比,并行计算更适合于建模、模拟和理 解复杂的现实世界



- ●节省时间和金钱
 - ▶从理论上讲,在一个任务上投入更多的资源将缩短其完成时间,并可能节省成本



- ●解决更大、更复杂的问题
 - > 许多问题太大或太复杂, 在一台计算机上解决它们是不切实际或不可能的
 - Web搜索引擎、数据库每秒处理数百万事务



- ●提供并发性
 - ▶一个计算资源一次只能做一件事。多个计算资源可以同时做很多事情
 - 网络协作



- ●充分利用非本地资源
 - ▶在本地计算资源稀缺或不足时使用广域网络,甚至是Internet上的计算资源
 - SETI@home (setiathome.berkeley.edu)
 - Folding@home (folding.stanford.edu)



●充分利用并行硬件

	DUAL XEON CPU server	DGX-1 GPU server (8 GPUs)
FLOPS	3TF	170TF
Node Mem BW	76GB/s	768GB/s
Alexnet Train Time	150 Hr	2Hr
Train in 2Hr	>250Nodes	1Node

4. 为何需要编写并行程序

- ●对于程序员
 - >如果没有意识到增加的处理器,则并没有什么帮助
 - ▶传统的串行程序(Serial programs)大多数情况下并不能从多处理器中获益



4. 为何需要编写并行程序

- ●在多核处理器上运行一个串行程序的多个实例通常用处不大
 - ▶如:运行你所喜欢的游戏的多个实例
- ●你真正想要的是让它跑得更快



4. 为何需要编写并行程序

- ●重写串行程序(Serial Programs), 使其并行化
- ●编写转换程序(Translation Programs),自动将串行程序转换为并 行程序
 - ▶ 非常困难!
 - 一些编码结构可以被自动程序生成器识别,并转换为并行结构
 - ▶ 结果很可能是一个非常低效的程序
- ●有时最好的并行解决方案是根据问题设计一个全新的算法

- ●计算n个值并将它们相加
- ●串行解决方案:

```
sum = 0;
for (i = 0; i < n; i++) {
    x = Compute_next_value(. . .);
    sum += x;
}</pre>
```

- ●假设我们有p个核(cores),p < n
- ●每个核可以执行部分累加操作(n/p 个值)

```
my_sum = 0;
my_first_i = . . . ;
my_last_i = . . . ;
for (my_i = my_first_i; my_i < my_last_i; my_i++) {
    my_x = Compute_next_value( . . .);
    my_sum += my_x;
}</pre>
```

每个核使用自己的私有变量,执行独立于其他核的代码块

- ●每个核执行完代码后, 其私有变量 my_sum 包含调用 Compute_next_value 并累加得到的值
- ●如: p = 8, n = 24, 调用 Compute_next_value 返回值为:

1,4,3, 9,2,8, 5,1,1, 5,2,7, 2,5,0, 4,1,8, 6,5,1, 2,3,9

●当所有的核计算完其私有的 my_sum 后,它们可以将结果发送给指定的"主"核(master core)来得到最终全局累加和(global sum)

```
if (I'm the master core) {
    sum = my_x;
    for each core other than myself {
        receive value from core;
        sum += value;
    }
} else {
    send my_x to the master;
}
```

Core	0	1	2	3	4	5	6	7
my_sum	8	19	7	15	7	13	12	14

Global sum

$$8 + 19 + 7 + 15 + 7 + 13 + 12 + 14 = 95$$

Core	0	1	2	3	4	5	6	7
my_sum	95	19	7	15	7	13	12	14

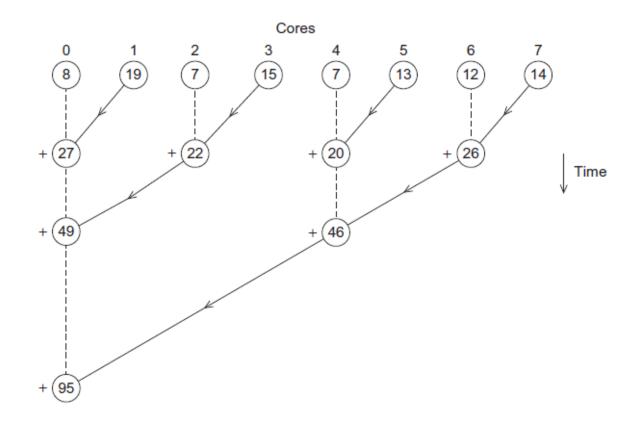
有没有更好的方法来计算全局累加和呢?



●更好的并行算法

- ➤不要让 master core 做所有的工作,将它的工作分给其他 core
- ▶ 将 core 进行配对, core 0 将其结果与 core 1 累加
- ➤ core 2 将其结果与 core 3 累加,以此类推
- 对偶数核得到的结果重复上述过程
- ➤ core 0 将其结果与 core 2 累加, core 4 将其结果与 core 6 累加, 以此类推
- ▶ 将被4整除的核重复上述过程(core 0 将其结果与 core 4 累加),得到最终 结果

●更好的并行算法



●分析

- ➤ 在第一个算法中, master core 执行了 7 次接收和 7 次累加操作
- ➤ 在第二个算法中, master core 执行了 3 次接收和 3 次累加操作
- ▶操作减少了1倍

●分析

- ▶ 随着核的数量增加,这种性能差异会更加明显(假如我们有1000个核)
- ➤ 在第一个算法中, master core 执行了 999 次接收和 999 次累加操作
- ➤ 在第二个算法中, master core 执行了 10 次接收和 10 次累加操作
- ▶ 性能提升了接近 100 倍

- ●任务并行(Task parallelism)
 - > 对任务进行划分,并分配给各个 core 来执行
- ●数据并行(Data parallelism)
 - ▶ 对数据进行划分,并分配给各个 core
 - ➤ 每个 core 在其数据上执行相似的操作

- ●教师批改试卷
 - ▶每份试卷 15 个问题
 - ▶共有300份试卷

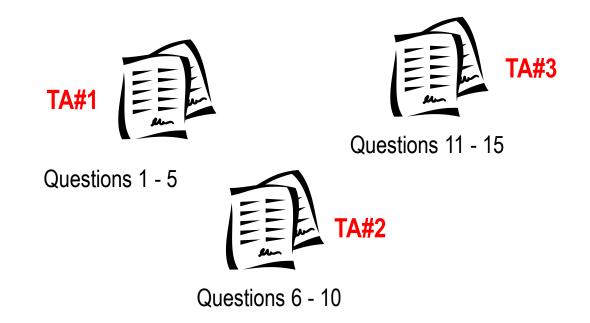




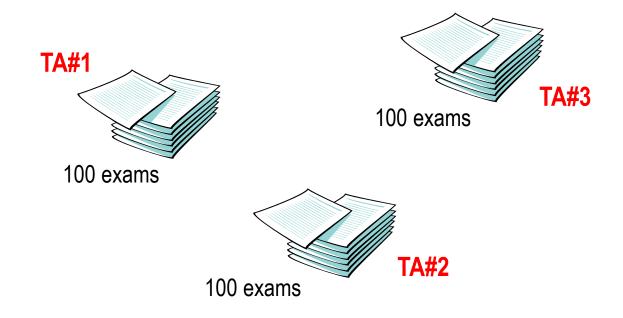
●教师批改试卷



- ●教师批改试卷
 - ➤任务并行(Task parallelism)



- ●教师批改试卷
 - ▶数据并行(Data parallelism)



●数据并行(Data parallelism)

```
sum = 0;
for (i = 0; i < n; i++) {
    x = Compute_next_value(. . .);
    sum += x;
}</pre>
```

●任务并行(Task parallelism)

```
if (I'm the master core) {
   sum = my_x;
   for each core other than myself {
      receive value from core;
      sum += value;
} else {
                                   <u>Tasks</u>
   send my_x to the master;
```

- 1. 接收并累加结果
- 2. 向 master core 发送结果

- ●协作(Coordination)
 - ▶ 核之间通常需要进行协作、协调它们的任务
 - ➤ 通信(Communication): 一个或多个核发送它们的结果给另一个核
 - ➤ 负载均衡(Load balancing):将工作均匀的分配给各个核,避免一些核很 忙,一些核很闲
 - ➤ 同步(Synchronization): 在进行某些操作时,需要统一各个核的步伐, 不能有些太快,有些太慢

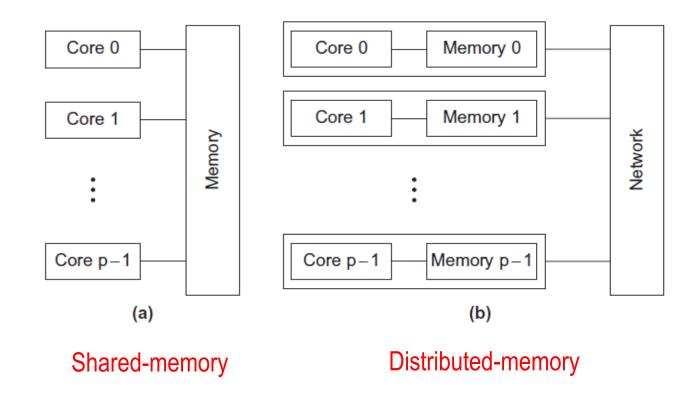
6. 本课程学习什么

- 学习如何编写并行程序
- 使用三个对 C 语言的扩展
 - Message-Passing Interface (MPI)
 - Posix Threads (Pthreads)
 - ➤ OpenMP

并行系统的类型

- ●共享内存(Shared-memory)
 - > 各个核共享对内存的访问
 - > 需要协调各个核对共享内存的访问
- 分布式内存(Distributed-memory)
 - > 每个核拥有自己的私有内存
 - > 核之间需要通过发送消息进行通信

并行系统的类型



7. 几个术语

- Concurrent computing a program is one in which multiple tasks can be in progress at any instant.
- Parallel computing a program is one in which multiple tasks cooperate closely to solve a problem
- ◆ Distributed computing a program may need to cooperate with other programs to solve a problem.

7. 几个术语

- 并发 vs. 并行
 - ▶并发:是指多个线程任务在同一个CPU上快速地轮换执行,一种逻辑上的同时进行;
 - ▶并行:是指多个线程任务在不同CPU上同时进行

7. 几个术语

● 并发 vs. 并行

Concurrent and Parallel Programming

05 Apr 2013

What's the difference between concurrency and parallelism?

Explain it to a five year old.

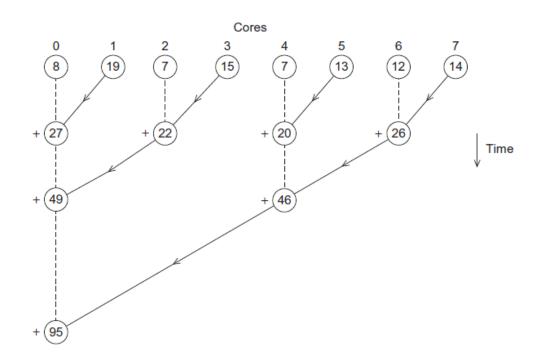
@ Jae Amstry 2013

小结

- 物理定律将我们引向多核技术
- 串行程序通常不能从多核处理器中受益
- ●从串行程序代码自动生成并行程序并不是获得高性能的最有 效方法
- 编写并行程序包括学习如何协调各个核之间的数据、速度等
- 并行程序通常非常复杂

思考题

- 写出树形结构求和的伪代码
 - ▶ 假设core的数目为2的幂次(如: 1,2,4,8,...)



思考题

- 写出树形结构求和的伪代码
 - ▶提示: 使用变量 divisor 来决定一个core是否应该发送其sum, 还是接收 并求和
 - ▶ divisor 应该从 2 开始,并且每次迭代翻倍
 - ▶变量 core_difference 决定当前 core 的 partner, 从1开始, 每次迭代翻倍
 - ▶如:第一次迭代,0% divisor = 0和 1% divisor = 1,所以0接收并累加,1

 发送,0+core_difference = 1和 1-core_difference = 0,所以0和 1是一对



群名称: 18级并行计算

群号: 617564372