



超级计算机原理与操作

任课教师:吴迪、杜云飞

教师信息

- ○主讲教师: 吴迪 教授
- 个人主页: http://netlabsysu.org/dwu
- 研究方向: 并行分布式计算、边缘计算、分布式学习
- 课程网站: https://easyhpc.net/course/101
- 联系方式
 - Email: wudi27@mail.sysu.edu.cn
- ●助教:王臣
 - Email: wangch287@mail2.sysu.edu.cn

课程简介

- 课程对象: 没有接触过超级计算机的学生
- 课程目的: 讲解超级计算机的基本原理和基本操作知识
- 修这门课需要的预备知识
 - 对计算机的组成有一定的概念 (有修过计算机组成原理更好)
 - C、C++编程
 - 学过线性代数
- ○课程考核形式:笔试+编程作业(通过课程网站发布)

课程大纲

- ○超级计算机的基本概念
- ○超级计算机的发展历史
- ○超级计算机的基本架构原理
- ○超级计算机的基本操作与编程方法
- ○超级计算机上的并行计算案例
- ○并行程序优化方法

什么是超级计算机?

什么是超级 (Super) ?

联想到什么? 什么是超级?



计算机 vs. 超级计算机





保10洁 vs. 保时捷

Supercomputer = HPC

○High Performance Computer 高性能计算机

●衡量性能的指标是什么?



FLOPS

- OF loating-point Operations Per Second 每秒钟进行的浮点计算操作次数
- ○世界超算TOP500 排行榜 采用统一的测试集HPL(High Performance Linkpack)
- **o** 33.9 PFLOPS, 54.9 PFLOPS

Meta
$$\rightarrow$$
 Giga \rightarrow Tera \rightarrow Peta \rightarrow Exa
 $10^6 \rightarrow 10^9 \rightarrow 10^{12} \rightarrow 10^{15} \rightarrow 10^{18}$

超级计算机的特征

某一时代性能最高的系统,服务于国家战略目标

- 运算速度超级快
- 存储容量超级大
- 占地面积超级大 100-1000 m²
- 能耗超级高 ~10 MW
- 造价超级贵 ~Billion RMB

其关键技术迅速辐射到其它应用领域,推动 国民经济建设、科学技术进步与人类社会发展

世界上第一台超级计算机

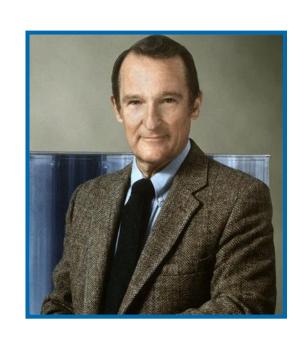
CDC 6600, 1964年

- o 约3 MFLOPS
- 性能是当时最快的计 算机IBM 7030的10倍
- 价格为800万美元



超算之父 – Seymour Cray

- 超算之父 1925~1996
- 创立了克雷公司,多次研制了世界上最快的超级计算机
- 美国国防部称他为"美国民 族的智多星"



"Anyone can build a fast CPU. The trick is to build a fast system."

"Computers should obey a square law — when the price doubles, you should get at least four times as much speed.

超级计算机的发展





Cray-1 1976 160Mflops



Intel ASCI Red 1997年,1万亿次



IBM BlueGene/L 2004年, 70Tflops 2007年, 596Tflops



中国 NUDT TH-1A 2010. 4.7Pflops



美国 Cray Titan 2012. 17.6Pflops



Cray-Y 1988年









40年系统性能增长5.8亿倍



DT 天河2号 2013. 33.86Pflops



CrayT3D 1993, 19Gflops



日本地球模拟器 2002年, 40Tflops



Cray Jaguar 2009,1.76Pflops



美国 IBM Sequoia 2012. 16.32Pflops



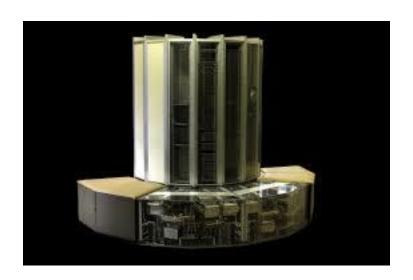
中国 太湖之光 **2016. 93Pflops**

超算发展之路

- **o** 1976, Cray-1
 - 向量处理技术
 - 射板耦合逻辑电路 (ECL)
 - 当时世界上最快的计算机
 - 133Mflops,115KW



- 并行技术
- 四个向量处理器
- ECL器件, 200MHZ, 941MFLOPS
- 液冷技术



超算发展之路

- ○80年代末-90年代,百花齐放
 - Stanford DASH
 - SGI, Origin
 - IBM
 - Intel



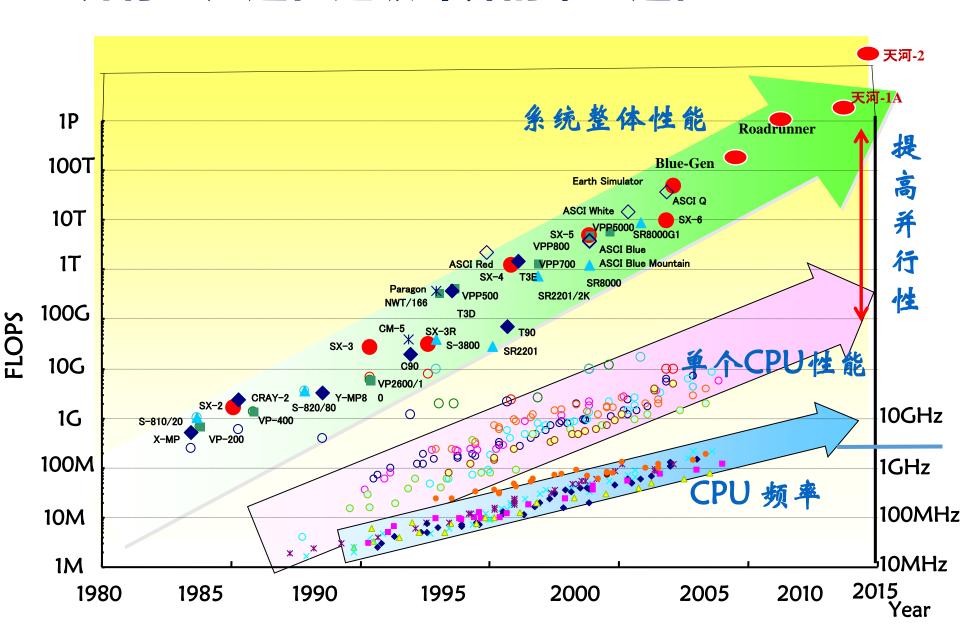
0 1997, Intel ASCI Red

超算发展之路

- **O IBM Blue Gene**
 - **2004**
 - 嵌入式处理器
 - **100TFLOPS**
 - 功耗仅为2.9MW
- ○天河一号、二号、神威
 - 2010开始



"并行"是通往超级计算的唯一途径



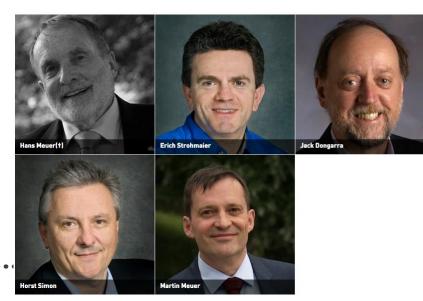
Top500排行榜

● Top500--世界超算500强排行榜

- TOP 500
 The List.
- 世界最快的计算机,公开数据,基于Linpack结果
- 每年发布2次,6月德国ISC,11月美国SC
- 1993年开始
- http://www.top500.org
- 组织者

○ 其他榜单

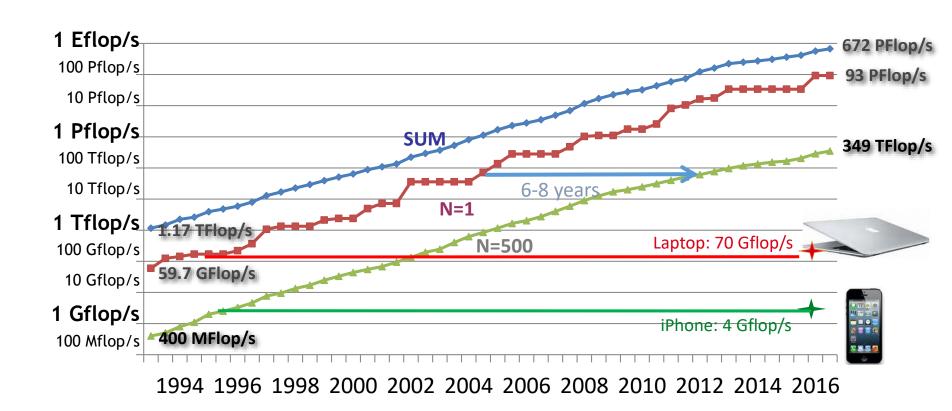
• Green500, Graph500, HPCG....



Top500排行榜 (2019年11月)

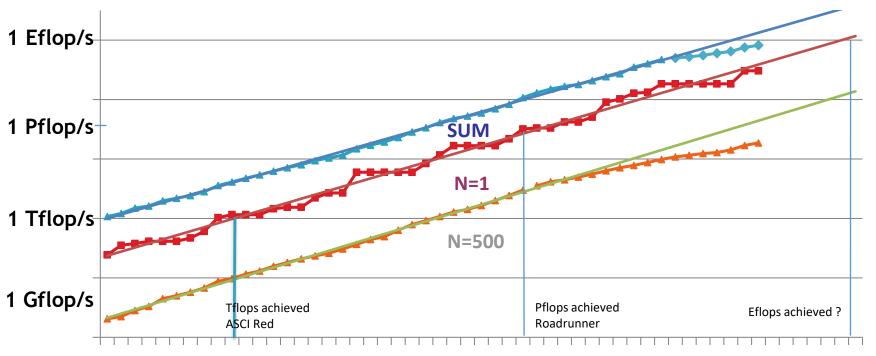
Rank	System	Cores	Rmax (TFlop/s)	Rpeak (TFlop/s)	Power (kW)
1	Summit - IBM Power System AC922, IBM POWER9 22C 3.07GHz, NVIDIA Volta GV100, Dual-rail Mellanox EDR Infiniband , IBM DOE/SC/Oak Ridge National Laboratory United States	2,414,592	148,600.0	200,794.9	10,096
2	Sierra - IBM Power System AC922, IBM POWER9 22C 3.1GHz, NVIDIA Volta GV100, Dual-rail Mellanox EDR Infiniband , IBM / NVIDIA / Mellanox DOE/NNSA/LLNL United States	1,572,480	94,640.0	125,712.0	7,438
3	Sunway TaihuLight - Sunway MPP, Sunway SW26010 260C 1.45GHz, Sunway , NRCPC National Supercomputing Center in Wuxi China	10,649,600	93,014.6	125,435.9	15,371
4	Tianhe-2A - TH-IVB-FEP Cluster, Intel Xeon E5-2692v2 12C 2.2GHz, TH Express-2, Matrix-2000, NUDT National Super Computer Center in Guangzhou China	4,981,760	61,444.5	100,678.7	18,482
5	Frontera - Dell C6420, Xeon Platinum 8280 28C 2.7GHz, Mellanox InfiniBand HDR , Dell EMC Texas Advanced Computing Center/Univ. of Texas United States	448,448	23,516.4	38,745.9	

Top500性能增长的趋势



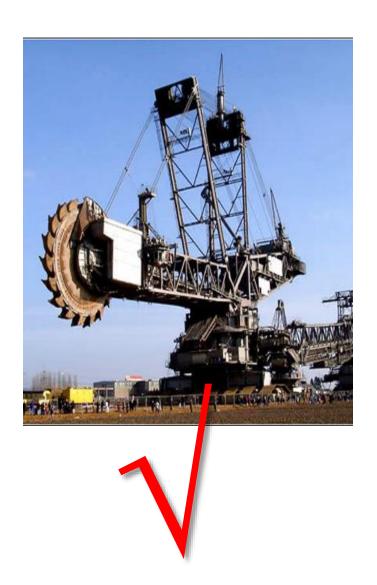
Top500性能增长的趋势

○ 干倍定律: 超级计算机的速度每十年提升干倍



1994 1996 1998 2000 2002 2004 2006 2008 2010 2012 2014 2016 2018 2020



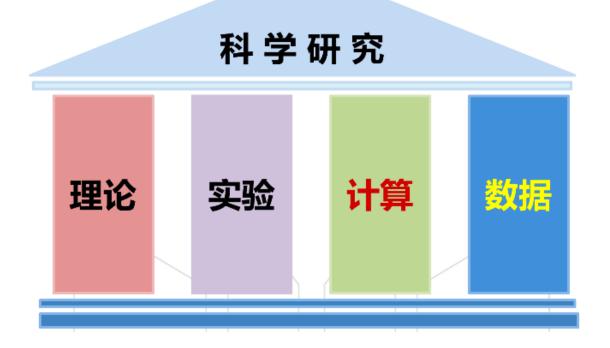




● 超级计算机对科学发现、技术创新、产业革命的重要 作用

- 高性能计算: 是科学研究的三大手段之一

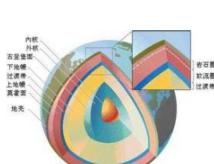
- 大数据处理:正成为科学研究的第四范式

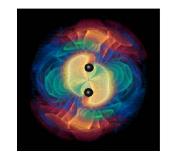




○ 超级计算可以帮助人们解决一系列重要问题

- 尺度超大 Too big
- 尺度超小 Too small
- 时变超快 Too fast
- 时变超慢 Too slow
- 过程超昂贵 Too expensive
- 过程超危险 Too dangerous



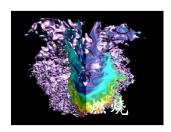






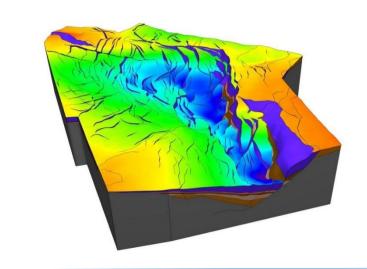




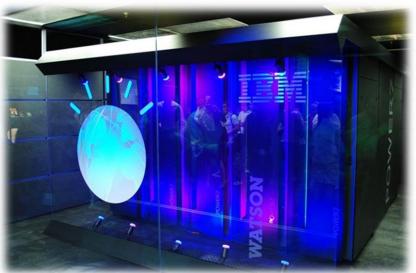


算天、算地、算人、算命









超级计算机的应用领域

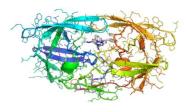
- 气候环境
- 天文物理
- 新型能源
- 材料化工
- 航空航天
- 工程设计
- 石油勘探
- 生命科学

- 智慧城市
- 金融分析
- 互/物联网
- 智能交通
- 动漫渲染
- 人工智能
- 测绘分析
- 精准医疗



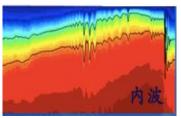


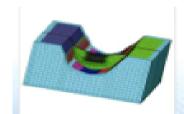


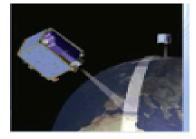


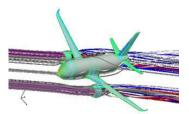


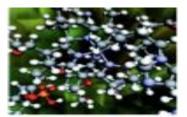












中国超算的发展之路

超级计算机发展的世界格局

- 高性能计算是战略性、前沿性的高技术
 - · 国家创新体系的重要组成部分
 - 产生原始创新和高端技术,影响下游产业

国际态势

- 美国长期保持领先优势
 - · 顶级水平超级计算机, TeraGrid, XSEDE等高性能计算基础设施
 - · 应用面广,水平高,国家计划持续支持,如最近的NSCI
- 日本多年紧随美国
 - · K-Computer, HPCI日本国家计算基础设施, 国家持续投资
- 欧盟在基础理论、低功耗超级计算机、应用方面有优势
 - · 低功耗E级计算机研究, 欧洲PRACE高性能计算基础设施
 - 大规模仿真应用, 欧盟协调主要成员国的力量

美国主要高性能战略计算计划



- · 1981年,戈尔在美国科学与电视艺术研究的一次演讲中,首先提出"信息高速公路"
- · 1983年, "战略计算机计划 (SCP)"
- · 1993年初美国总统发布"发展信息高速公路" (NII) 总统令
- · 1993年, "高性能计算和通信 (HPCC)" 计划
- · 1994年4月美国总统发布"建立国家(地球)空间数据基础实施 (NSDI)"的总统令
- · 1996年, "加速战略计算创新 (ASCI)" 计划
- 1998年1月31日,美国副总统戈尔(Al.Gore)在美国加利福尼亚科学中心发表了题为"数字地球—二十一世纪认识地球的方式"的演讲,首次提出"数字地球"的全新概念
- · 总投资数百亿美元

中国高性能计算发展战略计划



中国国家863计划的持续努力

- 2002-2005年: 高性能计算机及核心软件(863重大专项)
 - 强调资源共享与协同工作,以网格支持多领域应用
 - · 成功研发10万亿次量级计算机和中国国家网格实验床
- 2006-2010年: 高效能计算机与应用服务环境(863重大项目)
 - 性能结合开发效率、程序可移植性、系统的鲁棒性等
 - 强调机器、环境、应用三位一体的发展, 强调环境的服务特征
 - · 成功研发干万亿次量级计算机天河一号, 建立国家高性能计算服务环境
- 2010-2016年:高效能计算机及应用服务环境(863重大项目)
 - 强调环境新的运行模式和机制,探索建立计算服务业的途径
 - · 发展应用社区, 更好地支持应用
 - · 研制世界领先的计算系统: 天河二号、神威·太湖之光

中国巨型计算机之父 -慈云桂

- 慈云桂(1917-1990),中国 科学院院士,中国计算机界 老前辈中的举旗人
- 主持研制成功我国首台亿次 级巨型计算机"银河—I"

银河颂

银河疑是九天来,妙算神机费剪裁。 跃马横刀多壮士,披星戴月育雄才。 精雕岂为人称誉,细刻缘求玉琢材。 极目远穷干里外,琼楼更上不徘徊。



中国首台登顶TOP500的超算系统

・天河一号A

○计算性能: 2.57 PFLOPS

○2010年11月,首次将五星红旗插上超级计算领域的世界之巅



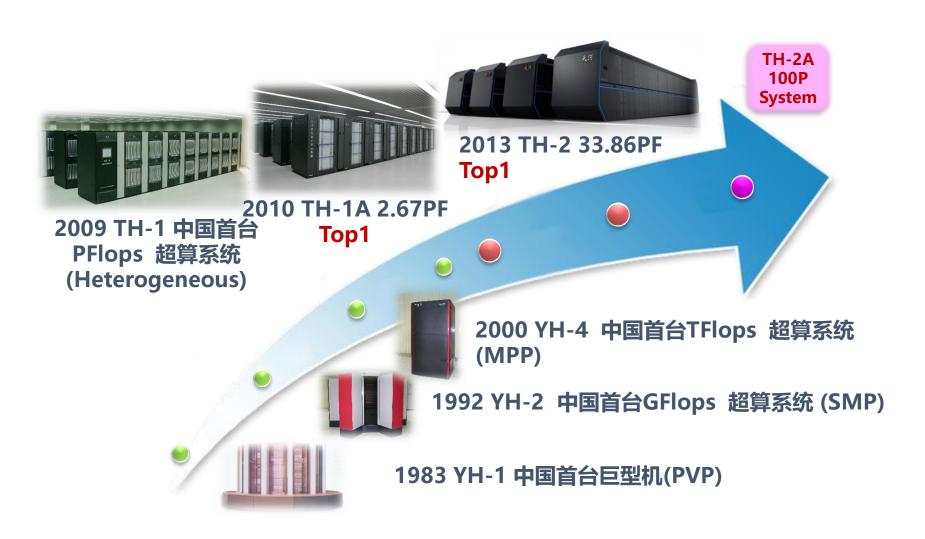
世界上唯一一台六连冠的超算系统

天河二号

- 计算性能: 33.9 PFLOPS
 - ▶ 约 16,000个节点
 - ▶ 约 3,000,000个核
- 约是个人电脑外星人 i74770K的36万倍



银河天河系列超级计算机



国家级的超算中心分布



中国国家网格环境



NSCC-广州,2013 天河2



NSCC-长沙,2012 天河1A



NSCC-天津,2010 天河1A



NSCC-无锡, 2016 太湖之光



NSCC-济南,2012 神威蓝光



NSCC-深圳,2011 曙光6000

"神威太湖之光"超级计算机

○ 神威太湖之光

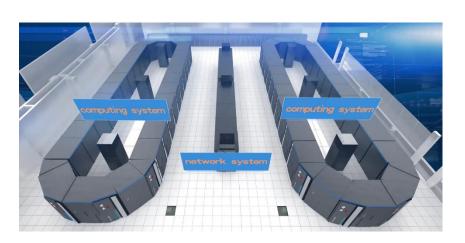
- 采用国产申威众核处理器
- 全系统4万个结点, 1000万核
- 峰值性能12.5亿亿次/秒,Linpack 9.3亿亿次/秒
- 能效比 6GF/W
- 装备国家超算无锡中心

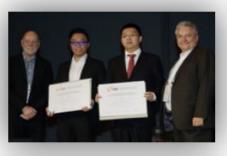


行榜 "三连冠"

2016.6~2018.6







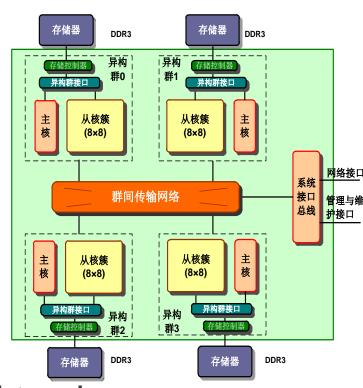


超级计算机的发展



○ 神威众核处理器

- 核心工作频率: 1.5 GHz
- 双精度浮点峰值运算速度: 3.0 Tflops
- 工艺: 28nm
- 采用异构众核架构,芯片集成260个运算核心,集成存储控制器和网络接口
- 主核 (MPE)64-bit RISC core
 - 支持用户态和系统态
 - 256-bit 向量指令
 - 32 KB L1 instruction cache, and 32 KB L1 data cache
 - 256 KB L2 cache, 8x8 CPE mesh
- 从核(CPE)64-bit RISC core
 - 只支持用户态
 - 256-bit 向量指令
 - 16 KB L1 instruction cache, and a Scratch Pad Memory (SPM)



戈登.贝尔奖—超高可扩展大气动力学算法研究历程

进程级并行: ○(10万) 线程级并行: ○(100)

[2016 GB 奖]: 三维非静力模式 1060万SW核 神威太湖之光

[2011 JCP]: 全球浅水波模式 8万CPU核

天河一号

2007:开始

[2013 PPoPP]: 全球浅水波模式 10万CPU-GPU核 0.8 PF / 天河一号

[2014 IPDPS]:

全球浅水波模式

159万CPU-MIC核 1.63 PF / 天河二号

[2010 SISC]: 全球浅水波模式 2千CPU核 蓝色基因L



[2015 ToC]: 三维非静力模式 119万CPU-MIC核 1.74 PF / 天河二号



-中科院软件所杨超提供

性能的不同层次

- 峰值性能 (Peak performance)
- O LINPACK 性能
 - Avg. 80% ___

40+ years

- O Gordon Bell Prize 应用性能
 - ~30%-

10~20 years

- 平均持续应用性能
 - · <5%~10%——

3~5 years

- O HPCG
 - · 1% ~ 5%——

1~2 years

- 优化投入

中国超算发展的重要经验

- 国家科技计划与地方、应用部门的发展计划相结合
 - · 多渠道筹资研制高效能计算机
 - · 科技部和地方政府共同支持建立国家超算中心

○ 产学研用的结合

- · 高性能计算中心在高效能计算机研制中发挥作用
 - · 遴选研制团队 / 提出系统指标
- 企业参与国家科技计划,提高自身水平,促进研制工作
 - · 浪潮、曙光、联想参与干万亿次和亿亿次计算机的研制
- · 应用部门牵头发展应用软件
- 机器、环境、应用三者均衡发展,相互促进

小结

- 超级计算机是某一时代性能最高的系统,服务于国家战略目标
 - · 运算速度超级快
 - · 存储容量超级大
 - · 占地面积超级大
 - 能耗超级高
 - 造价超级贵
- 超级计算可以帮助人们解决一系列重要问题
 - ・ 尺度超大 尺度超小 时变超快 时变超慢 过程超昂贵 过程超危险

更多精彩还在后面!

