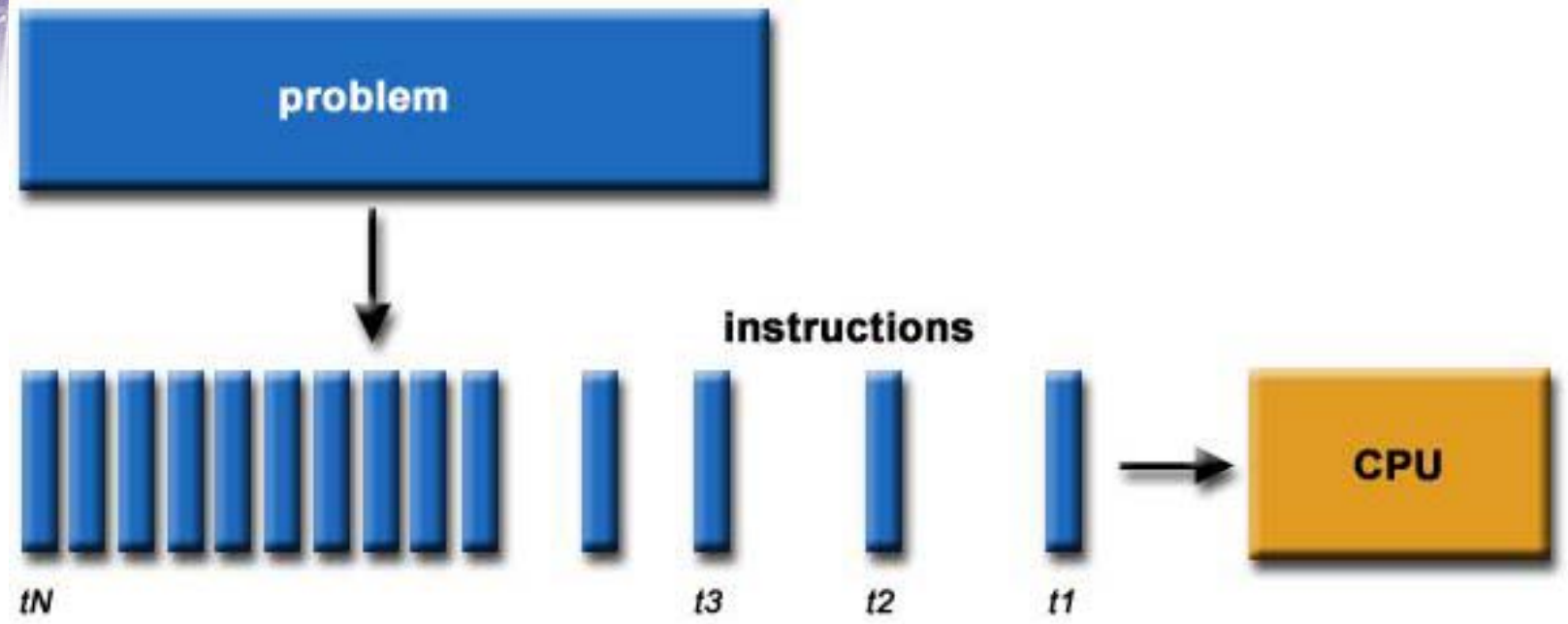
并 行 计 算 的 概述

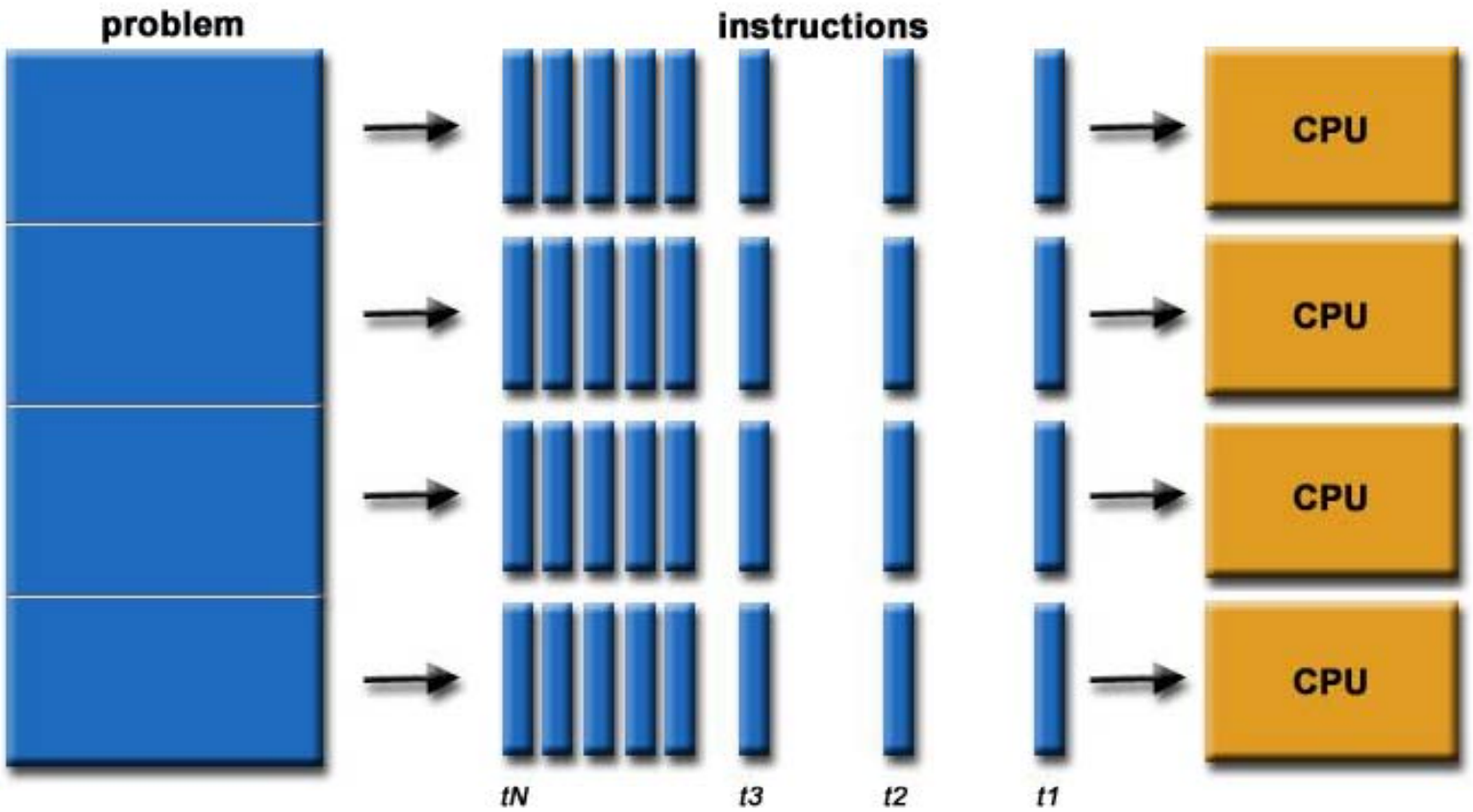
上海超级计算中心

什么是并行计算？



- 运行于单个处理单元
- 顺序执行
- 一次执行一条指令

什么是并行计算？



什么是超级计算？

- 超级计算机 Supercomputer
  - 当前处理能力最强、运算速度最快的一类计算机
- 超级计算 Supercomputing
  - 利用超级计算机所进行的计算，通常为了解决普通计算机所不能完成的大型复杂问题

什么是并行计算？

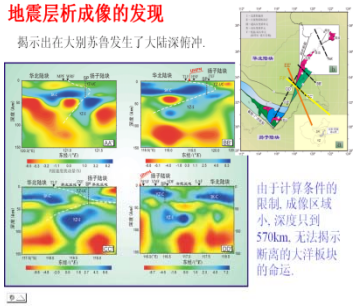
- 相对于串行计算
- 简单说，是指利用多个部件共同完成计算任务

A *parallel computer* is a collection of processing elements that cooperate to solve large problems fast

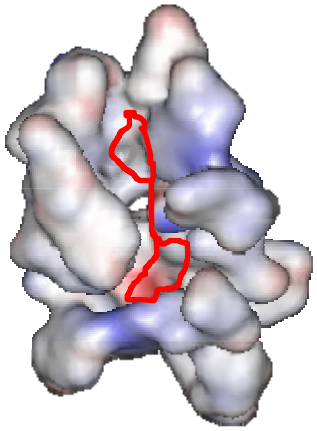
David E. Culler U.C. Berkeley

为什么要并行计算？
——大量应用需求的驱动

- 有限时间内解决复杂计算问题
  - 汽车碰撞实验：32 CPU 4小时（一个工况）
  - 中尺度天气预报：128 CPU 4小时，每天定时
  - 药物筛选： 64 CPU，500万化合物，一年
  - 蛋白质折叠，256CPU、2个月只能算一个纳秒过程
  - 宇宙大尺度结构模拟： 256 CPU，6个月



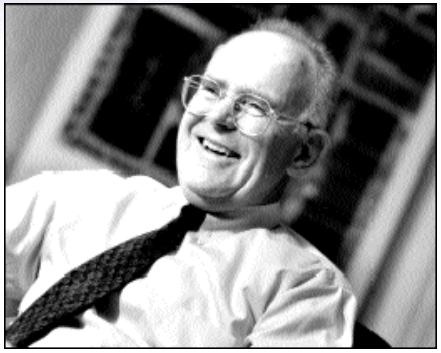
地震层析成像


药物筛选

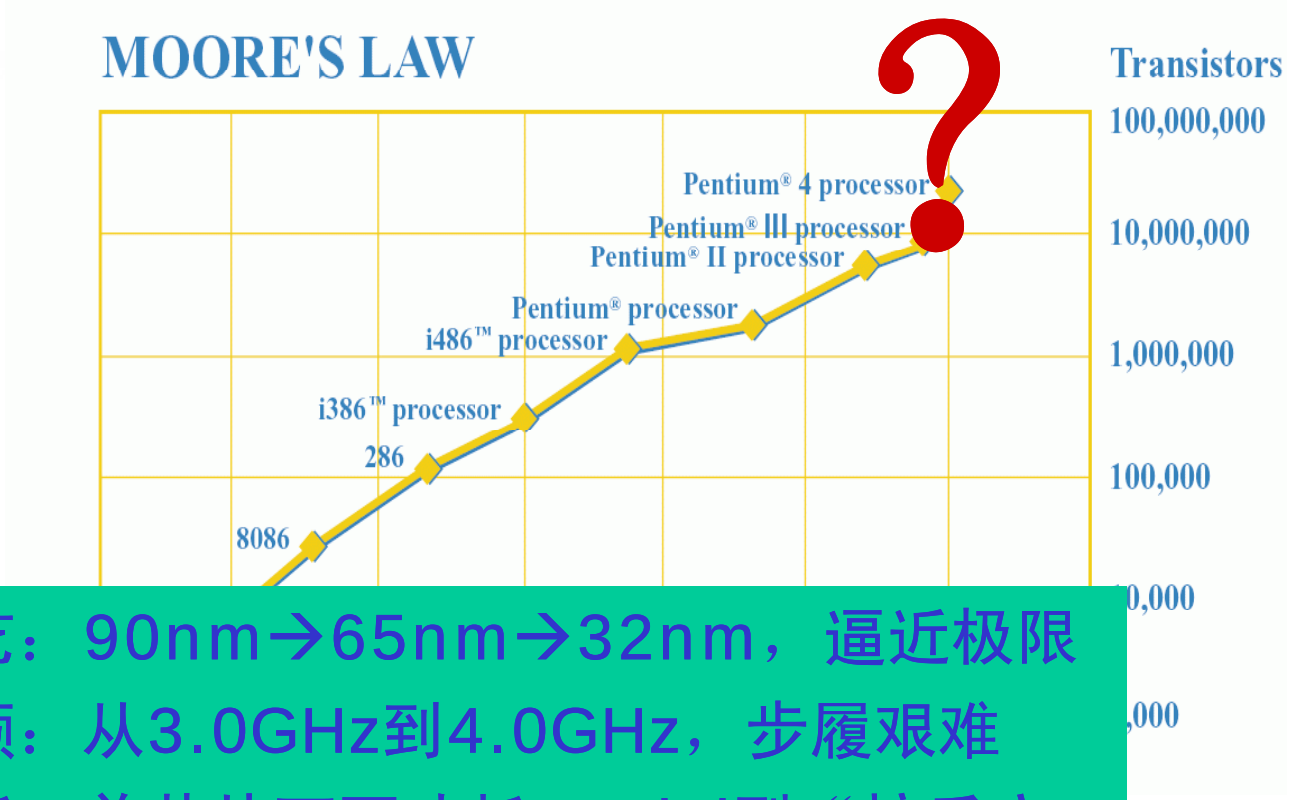

飞机设计


汽车碰撞

为什么要并行计算？
——计算机技术发展的推动



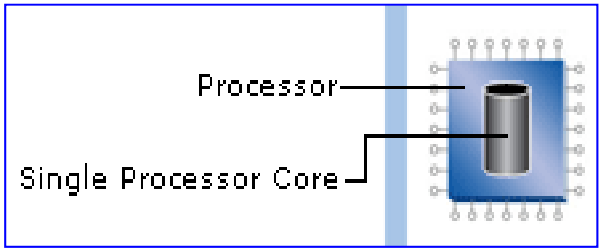
芯片上晶体管数目
每18个月增长一倍

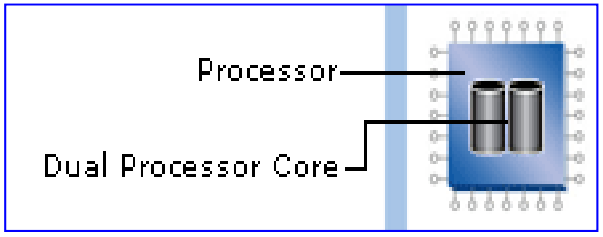


- 工艺：90nm→65nm→32nm，逼近极限
- 主频：从3.0GHz到4.0GHz，步履艰难
- 功耗：单芯片百瓦功耗，mini型“核反应堆”

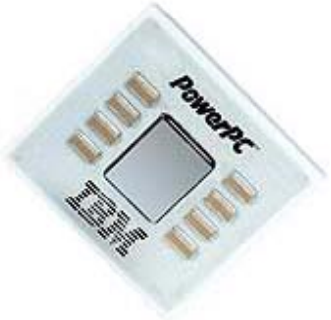
为什么要并行计算？
——多核CPU的发展

- 在单个芯片上内置多个处理单元—“核”
- 每个处理器视为小型的并行计算机
- 双核 → 多核





- 并行计算已经成为必然！



并行计算的大量应用（传统应用）

- 气候环境：天气预报、气候、气象等
- 生物技术：基因、蛋白质、药物设计
- 能　　源：石油勘探与模拟、核能模拟
- 材　　料：纳米材料、高分子材料设计
- 制　　造：外形设计、碰撞试验、发动机燃烧
- 国防和国家安全：密码破译、先进武器制造
- 海 量 数 据 处 理
- ……

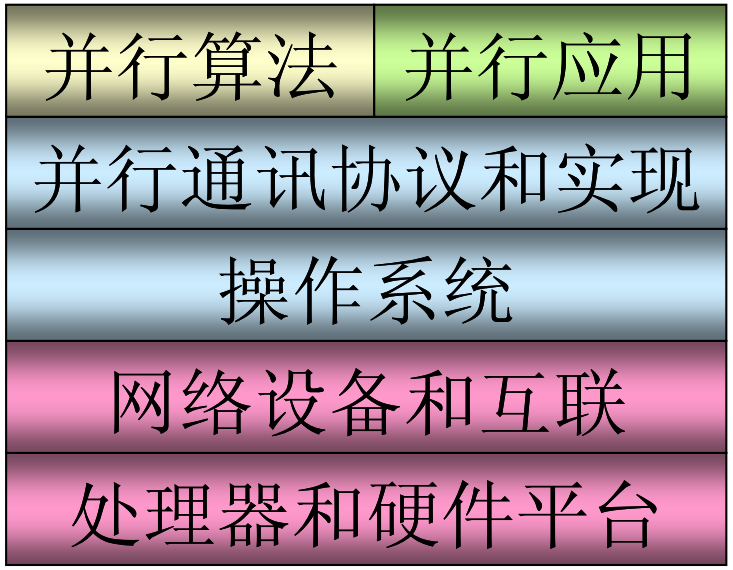
并行计算怎么算？

4 并行应用开发

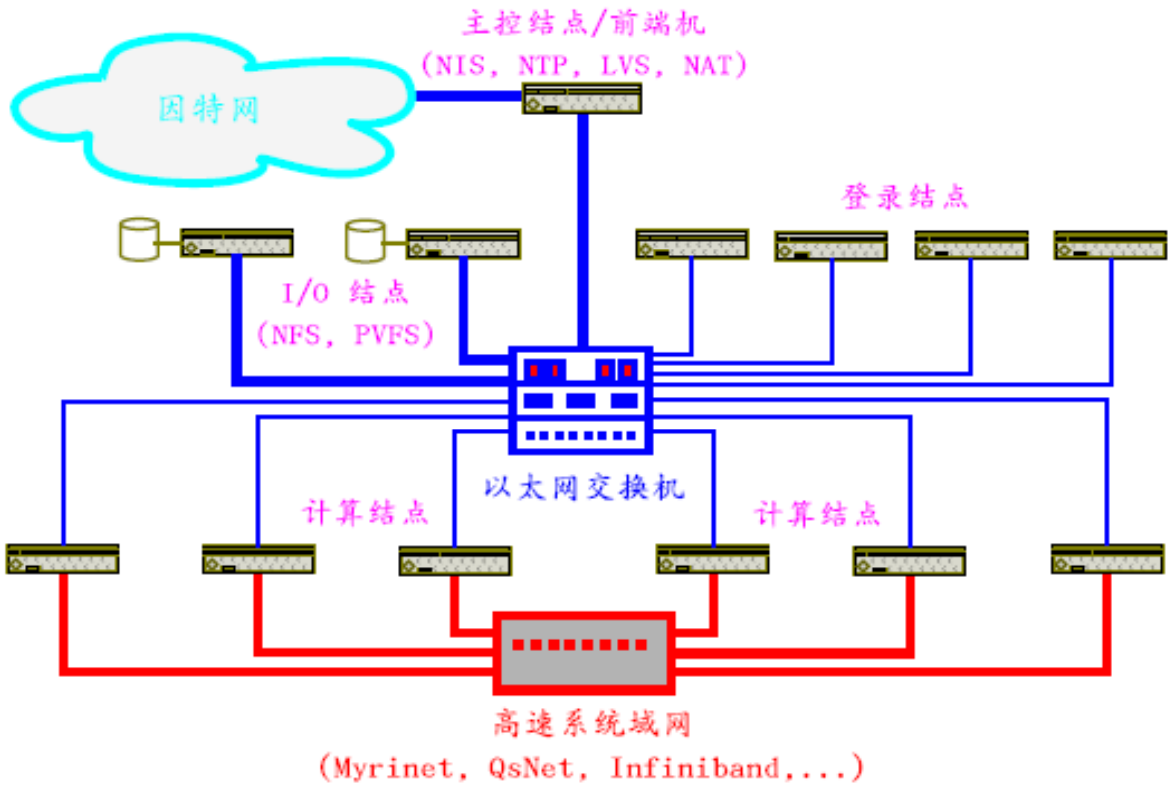
3 并行算法设计

2 并行计算机系统软件

1 并行计算机体系结构



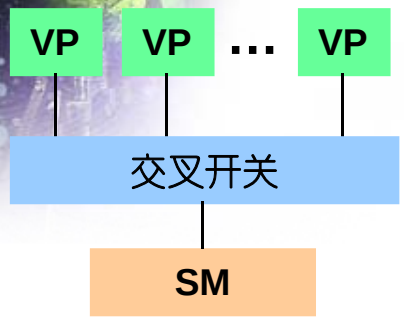
典型的机群系统结构


主控结点/前端机
(NIS, NTP, LVS, NAT)
因特网
登录结点
I/O 结点
(NFS, PVFS)
以太网交换机
计算结点
计算结点
高速系统域网
(Myrinet, QsNet, Infiniband,...)

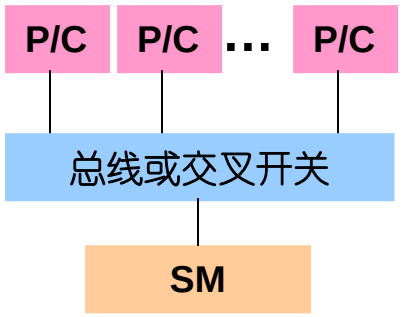
主要并行计算机类型

- 并行向量机
  - Parallel Vector Processor，银河1号，地球模拟器
- 对称多处理机
  - Symmetric Multiprocessor，曙光1号，SGI Power Challenge
- 大规模并行处理机
  - Massively Parallel Processor，神威I，IBM SP2
- 分布共享存储多处理机
  - Distributed Shared Memory，SGI Origin2000/3000
- 集群或集群系统
  - Cluster，Cluster of Workstation，曙光4000A，深腾6800

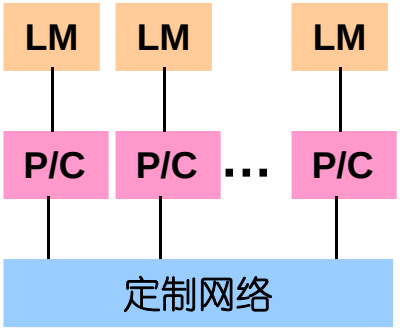
并行计算机体系架构



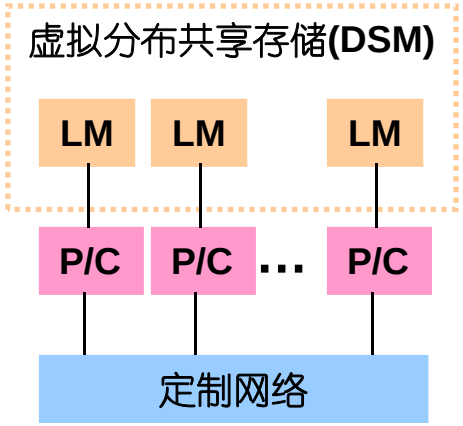
(a) PVP



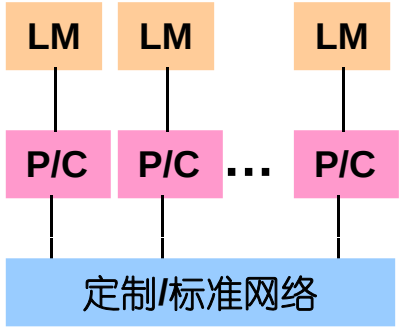
(b) SMP, 物理上单一地址空间



(c) MPP, 物理/逻辑上多地址空间



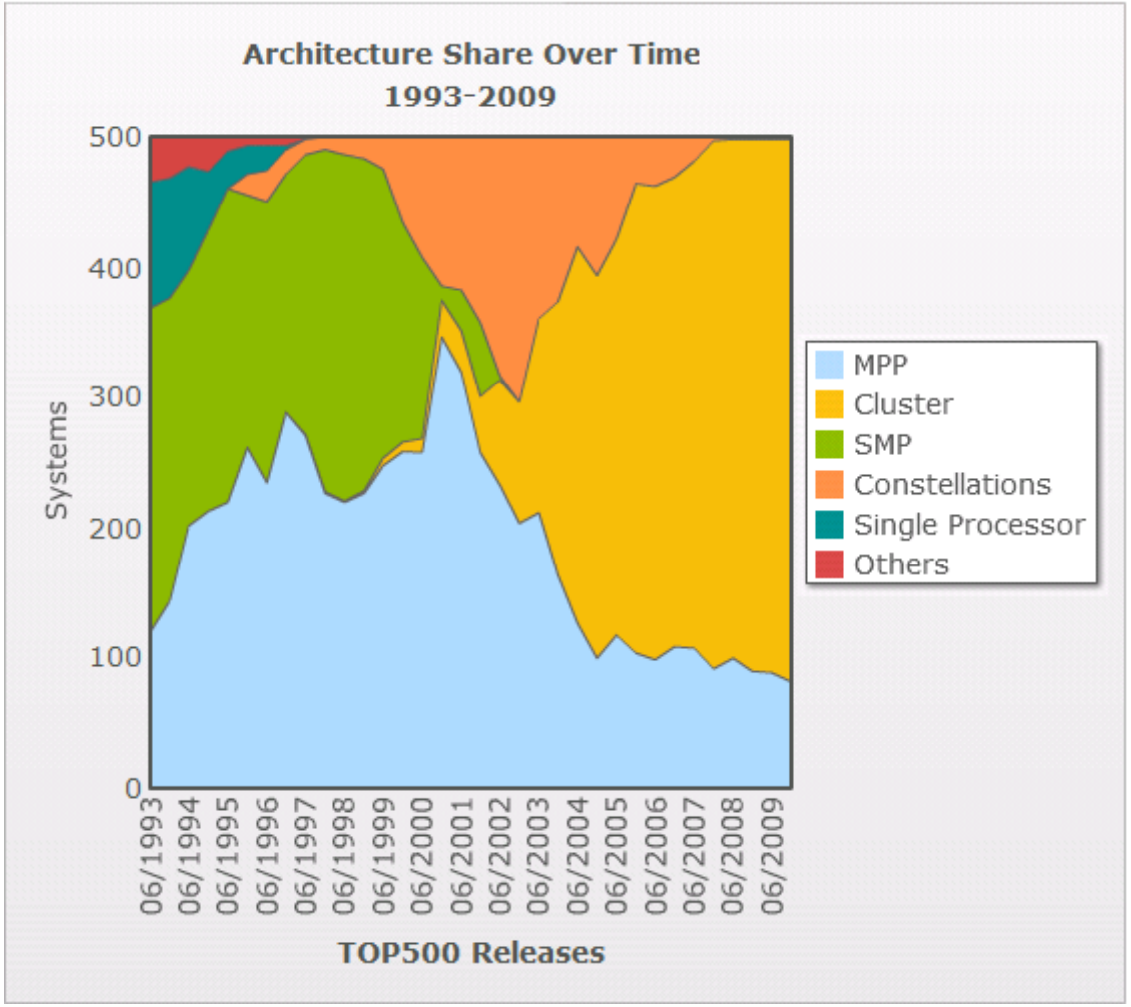
(d) DSM 逻辑上单一地址空间



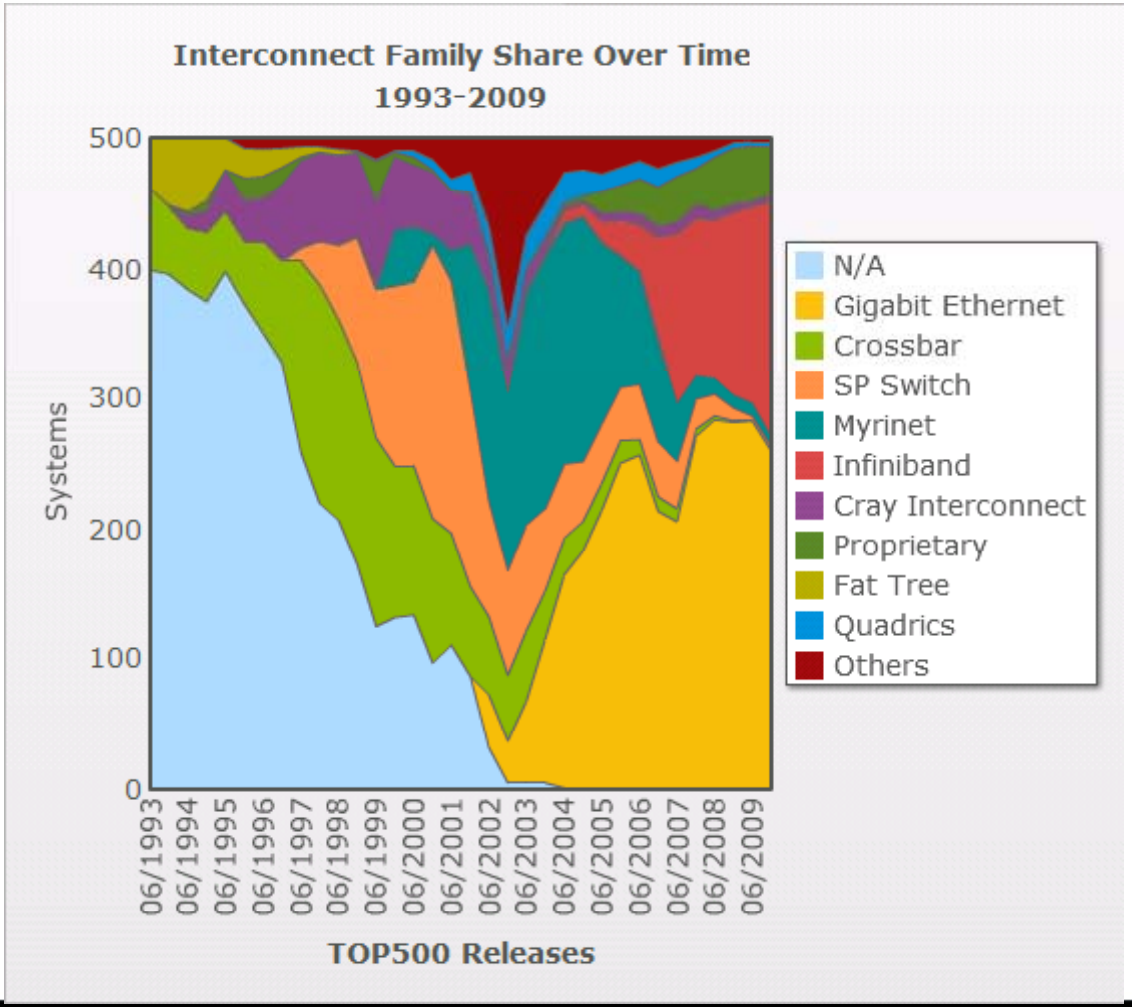
(e) Cluster/COW, 物理/逻辑上多地址空间

体系架构理论模型：UMA, NUMA, cc-NUMA

Top500 体系架构趋势 (1993－2009)



Top500 互联技术的发展趋势 (1993－2009)



当前世界主要超级计算机

－TOP500，2010年11月

Rank	Site	Computer	Architecture
1	National Supercomputing Center in Tianjin, China	Tianhe-1A - NUDT TH MPP, X5670 2.93Ghz 6C, NVIDIA GPU, FT-1000 8C NUDT	MPP
2	DOE/SC/Oak Ridge National Laboratory, United States	Jaguar - Cray XT5-HE Opteron 6-core 2.6 GHz Cray Inc.	MPP
3	National Supercomputing Centre in Shenzhen ,(NSCS) China	Nebulae - Dawning TC3600 Blade, Intel X5650, NVidia Tesla C2050 GPU Dawning	Cluster
4	GSIC Center, Tokyo Institute of Technology Japan	TSUBAME 2.0 - HP ProLiant SL390s G7 Xeon 6C X5670, Nvidia GPU, Linux/Windows NEC/HP	Cluster
5	DOE/SC/LBNL/NERSC United States	Hopper - Cray XE6 12-core 2.1 GHz Cray Inc.	MPP

提 纲

- 前言
- 并行计算机
- ➢ 并行计算方法
- 并行软件开发
- 展望与挑战

寻找并行性

- 数据并行：分解数据，并行处理

```
for i=0 to 99 do
   a[i]=b[i]+c[i]
end for
```

- 功能并行：分解问题，并行处理

```
a=2  b=3
Task1 = (a+b)/2
Task2 = a*b
Result = Task1+Task2
```

- 流水线：依据次序，时域并行

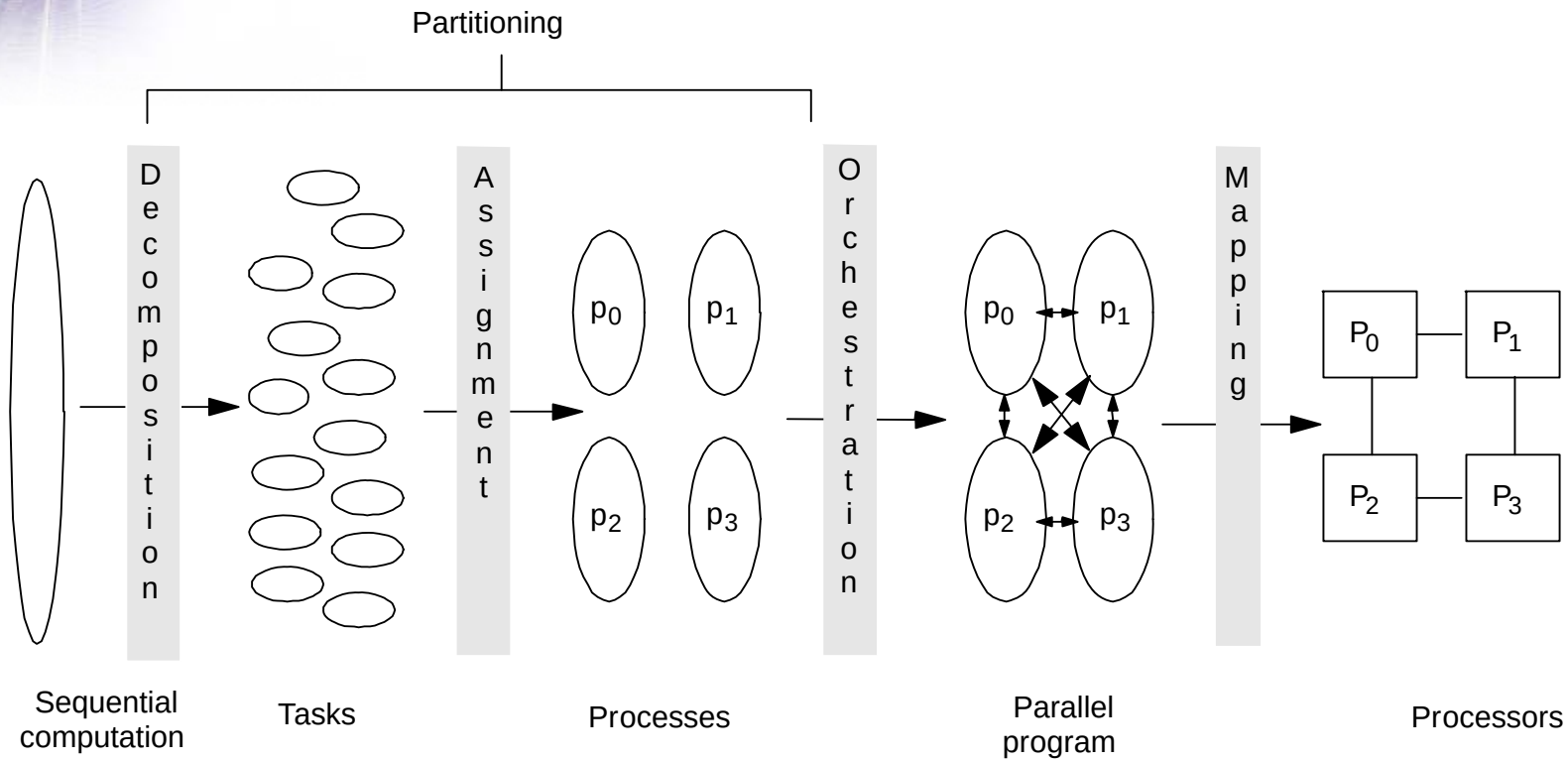
并行算法设计三个要点

- 寻求问题求解过程中的并行性
- 寻求并行算法与并行计算机结构的最佳匹配
- 合理的组织任务，减少额外开销

并行算法设计的四个步骤

1. 划分
   - 数据分解或功能分解
2. 通信
   - 确定通信模式(局部/全局),负载均衡,
3. 聚集
   - 依据计算机规模聚合并行化,最小化并行开销,可扩展性
4. 映射
   - 将任务分配给处理器

并行算法设计的四个步骤



Partition 分解

- 分解，即将大规模的计算量分解成小份task
  - 区域分解 domain decomposition
  - 任务分解 functional decomposition
- 注意事项 check list
  - task数至少比并行处理器数目多
  - 每个task对应的计算量相当
  - 分解task数目要和问题规模相对应
  - 分解需要尽可能的避免不必要的通讯/存储

Communication 通讯

- 每个子task可以同时(concurrency)在不同处理器上计算，但是无法避免子task间交换数据
  - 区域分解：task间通讯比较难分析
  - 任务分解：task间通讯直接，即task的数据流
- Communication注意事项 check list
  - 子task间通讯平衡
  - 任务间的全局通讯
  - 计算和通讯尽量能够重叠(overlap)
  - 不同task的计算能同时(concurrently)进行，

- Communication注意事项 check list
  - 各子task间通讯平衡
  - 任务间的全局通讯可能会降低并行算法的可扩展性，稳定性
  - 计算和通讯尽量能够重叠(overlap)，如果不，需要用divide and conquer分解算法
  - 不同task的计算能同时(concurrently)进行，

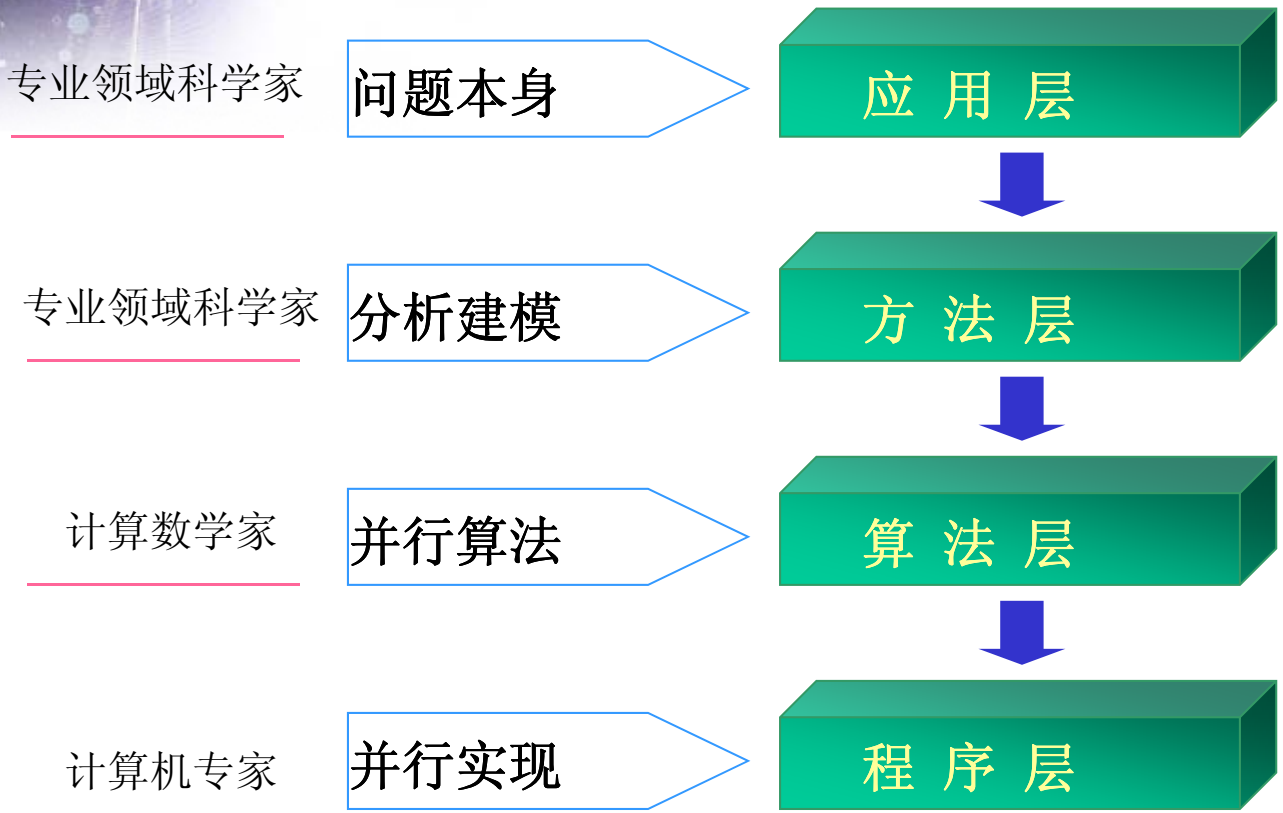
Agglomeration（聚集）

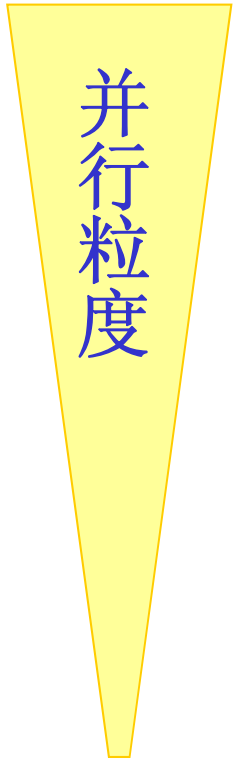
- 将分解和通讯得到的算法具体化
  - 将子task聚集在一起，增加子任务大小，减少总的子任务数目
  - 对计算和数据的重复存放
- 在聚集阶段，需要面对3个目标
  - 减少通讯开销
    - 增加每个子任务的粒度granularity
  - 一定的灵活性，保证映射阶段的可扩展性
  - 减少软件工程的开销

Mapping（映射）

- 建立task和并行处理器的映射关系
- 目标：减少总的执行时间
  - 增强concurrency
  - 将相互通讯密集的task放在临近的节点上
- 映射问题有大量理论研究（NP-complete）
- 针对需要负载不均衡(load imbalance)
  - 考虑动态负载平衡
  - 需要增加额外的通讯/计算开销

不同的并行层次


专业领域科学家
问题本身
应 用 层
专业领域科学家
分析建模
方 法 层
计算数学家
并行算法
算 法 层
计算机专家
并行实现
程 序 层

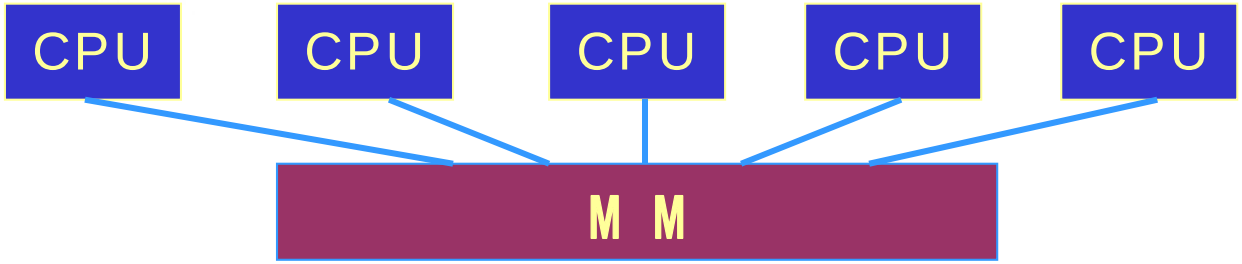

并行粒度

提 纲

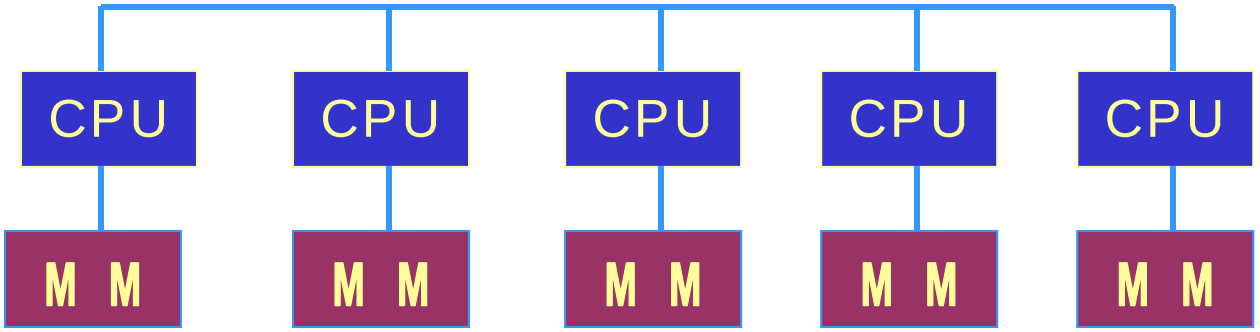
- 前言
- 并行计算机
- 并行计算方法
- ➢ 并行软件开发
- 展望与挑战

两种内存模型

- 共享存储



- 分布式存储



并行程序实现技术

- 共享存储
  - 自动并行化
  - 线程并行
  - 编译器制导语言，OpenMP
- 分布式存储—消息传递
  - MPI，Message Passing Interface
  - PVM，Parallel Virtual Machine
- 其他
  - 数据并行，HPF
  - 混合并行

程序并行化途径

- 串行程序自动并行化
  - 编译器执行自动并行化，只对部分应用有效
  - 目前为止没有行之有效的方法和工具
  - 半自动化并行途径(编译制导)成为目前的一个重要途径
- 使用全新的并行语言，如HPF
  - 需要重写已有程序
- 串行程序＋并行化扩展
  - 基于已有程序进行改写
  - 当前主流的并行程序实现途径
  - MPI，OpenMP

谢谢，欢迎提问和讨论！