



太原理工大学
TAIYUAN UNIVERSITY OF TECHNOLOGY

高性能计算

主讲：岳俊宏

E-mail: yuejunhong@tyut.edu.cn; Tel: 18234095983

The background features a faint world map. A large blue diamond shape is centered on the page, with a solid blue triangle in its top-left corner. The text '课程简介' is written in blue inside the diamond.

课程简介

课程简介

- 中文名称：高性能计算B
- 英文名称： High Performance Computing B
- 课程编号： 00012577
- 学分： 2.0
- 总学时： 32 上机学时： 8
 - 理论： 1-6周， 周二(1-2)， 周四(3-4);
 - 上机： 3,5,6,7周， 周五下午
 - 数科2001-2002： 7-8； 数科2003-2004： 5-6
- 课程类型： 专业选修课

课程简介

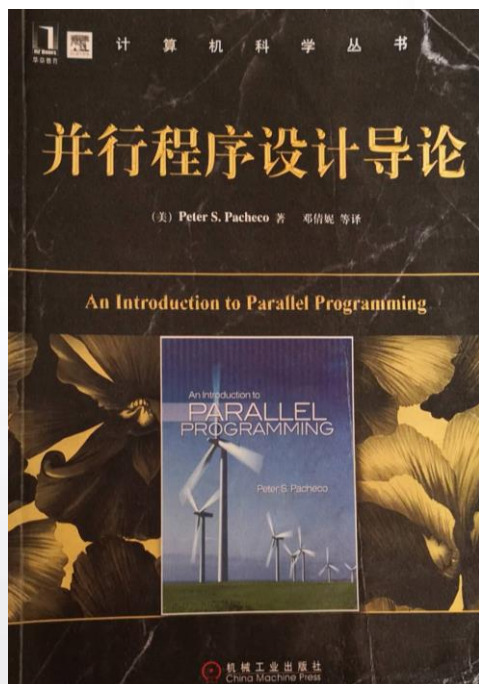
- 先修课程：**C语言程序设计**、**数据结构与算法**、**linux操作系统**、**操作系统**、**计算机组成原理**
- 课程性质：高性能计算是计算机科学的重要前沿分支。通过本课程的学习，使大家了解和掌握高性能计算的有关基本知识、基本理论、以及**并程序设计的**基本技能和科学思维方法，旨在于培养**并行编程能力**，为高效快速分析和解决大规模计算问题奠定基础。

	评价环节	考核方式
平时成绩 (20分)	课堂 (10分)	课堂表现、到课率和作业完成情况
	上机 (10分)	实验报告
结课考试成绩 (80分)	试题	闭卷考试

《并程序程序设计导论》 Peter S.Pacheco 著，邓倩妮等译

《并行计算的编程模型》 Pavan Balaji著，张云泉等译

《并行计算应用及实战》 王鹏、吕爽等编著



1. 高性能计算简介
2. 并行硬件和并行软件
3. MPI的分布式内存编程模型
4. Pthreads的共享内存编程模型
5. OpenMP的共享内存编程模型
6. 并行程序开发实例

1. MPI点对点通信编程（2学时）
2. MPI集合通信编程（2学时）
3. OpenMP的共享内存编程(2学时)
4. OpenMP的应用问题（2学时）

周志远（台湾清华大学）

并行计算与并行编程

<https://www.bilibili.com/video/av40579783/>



高性能计算

高性能计算(High performance computing, 缩写HPC) 指通常使用很多处理器（作为单个机器的一部分）或者某一集群中组织的几台计算机（作为单个计算资源操作）的**计算系统**和**环境**，执行一般个人电脑无法处理的大量资料与高速运算，其基本组成组件与个人电脑的概念无太大差异，但规格与性能则强大许多。

- 1943-1959：电子管计算机
- 1959-1964：晶体管计算机
- 1964-1971：集成电路数字计算机
- 1971-至今：大规模集成电路计算机
- 1985左右-至今：异构计算机

器件的变革

体系结构的变革

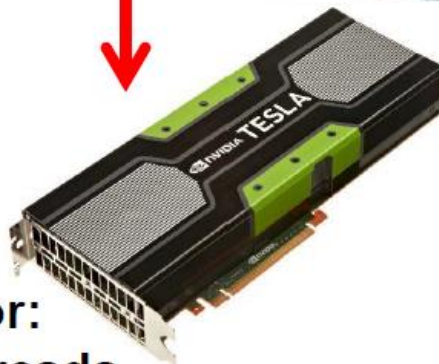
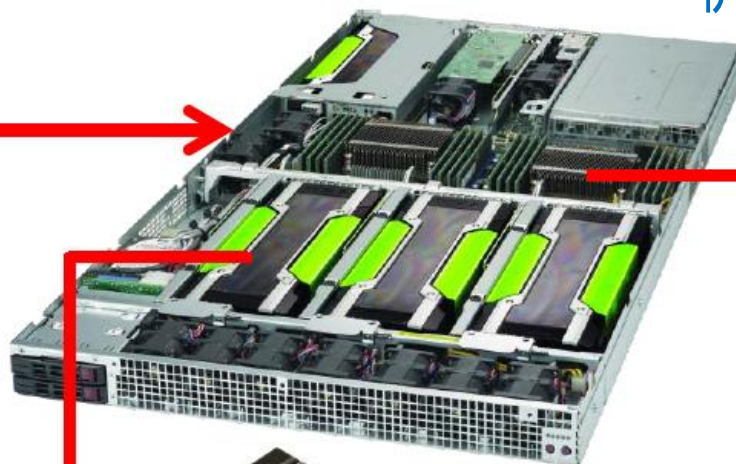
Racks: 16~42U

Node/Server: 1~4U

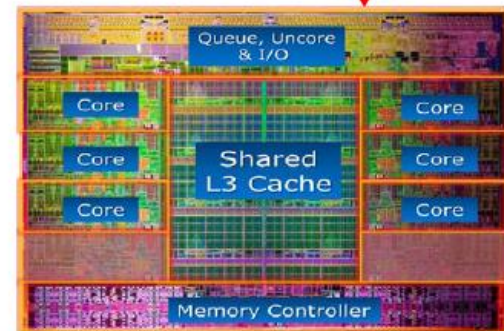
机架



机柜



Multi-core Processor:
100x cores/1000xthreads



Co-Processor: 4~12 cores

HPL(High Performance Linpack)是现代高性能计算机通用的基准测试程序，使用BLAS数学库和MPI通信来测试高性能计算机性能。

Linpack是用于测试高性能计算机系统浮点性能的基准测试程序。

通过对高性能计算机采用高斯消元法求解一元N次稠密线性代数方程组的测试，评价高性能计算的浮点性能。

$$Ax=b$$

衡量性能：每秒浮点运算次数，Floating-point operations per second (**FLOPS**或者Flop/s)

FLOPS 是floating point operations per second的缩写，意指每秒浮点运算次数，用来衡量硬件的性能（**注意全部大写**）。

FLOPs 是floating point of operations的缩写，是浮点运算次数，用来衡量算法/模型复杂度。（深度学习）

- 浮点运算包括所有涉及小数的运算，比整数运算更费时间。现今大部分处理器中都有浮点运算器。因此每秒浮点运算次数所测量的实际上就是浮点运算器的执行速度。

- ◆ 1MFLOPS (megaFLOPS) : 每秒百万 ($=10^6$) 次的浮点运算,
- ◆ 1GFLOPS (gigaFLOPS) : 每秒拾亿 ($=10^9$) 次的浮点运算,
- ◆ 1TFLOPS (teraFLOPS) : 每秒万亿 ($=10^{12}$) 次的浮点运算,
- ◆ 1PFLOPS (petaFLOPS) : 每秒千万亿 ($=10^{15}$) 次的浮点运算,
- ◆ 1EFLOPS (exaFLOPS) : 每秒百亿亿 ($=10^{18}$) 次的浮点运算

HPCC(High Performance Computing Challenge)是面向高性能计算机的综合测试程序包，能够测试高性能计算机系统多个方面的性能，包括处理器速度、存储访问速度和网络通信速度，对各种应用都有一定的代表性和参考价值。（2015）

HPL简单易操作，结果直接明了，但不够精细，HPL评测标准显得过于粗略。HPCC充分弥补了HPL的一些缺点，对性能跨度非常大的各个方面都进行了充分的测试，但也存在一些问题，那就是没有一个统一的结果评价标准，评价体系的构建不方便。

HPCG (High Performance Conjugate Gradients) 高性能共轭梯度基准测试，是现在主要测试超算性能程序之一，也是TOP500的一项重要指标。一般来讲HPCG的测试结果会比HPL低很多，常常只有百分几。

2017年11月开始采用HPCG对高性能计算机进行排名(TOP500)

高性能共轭梯度算法 (HPCG) 所使用的计算模式与HPL相比，更符合当前实际应用业务的特点，给出的测试结论对于HPC的发展更有参考价值。

全球高性能计算机TOP500 排名

- 1993年开始每年进行两次排名;
- 根据HPL (1993开始)、HPCG (2017年) 等基准测试结果进行排名;
- 一年发布两次德国ISC(6月)和美国SC (11月)会议
参会者: 机器硬件的制造商, 并行软件的开发软件开发者,
以及各大厂商等。

<https://www.top500.org/>

表 1 2022 年 11 月全球超级计算机 Top10

序号	系统	所属国家	内核	运算性能 (PFlop/s)	峰值性能 (PFlop/s)	功率 (千瓦)
1	Frontier	美国	8730112	1102.00	1685.65	21100
2	Supercomputer Fugaku	日本	7630848	442.01	537.21	29899
3	LUMI	芬兰	2220288	309.10	428.70	6016
4	Leonardo	意大利	1463616	174.70	255.75	5610
5	Summit	美国	2414592	148.60	200.79	10096
6	Sierra	美国	1572480	94.64	125.71	7438
7	神威·太湖之光	中国	10649600	93.01	125.44	15371
8	Perlmutter	美国	761856	70.87	93.75	2589
9	Selene	美国	555520	63.46	79.22	2646
10	天河-2A	中国	4981760	61.44	100.68	18482

计算峰值是指计算机每秒完成的浮点计算最大次数，它包括理论浮点峰值和实测浮点峰值。

运算性能(实测浮点峰值, Rmax)是Linpack值，也就是一台机器上运行Linpack测试程序，通过各种优化方法得到的最优测试结果。

峰值性能(理论浮点峰值, Rpeak)是计算机在理论上能达到的每秒完成的浮点计算最大次数，它主要是由CPU的主频决定的。

- 中国虽然只有两台超算系统进入了TOP10，但有162台系统进入了Top500的榜单，相比去年的173台有所下降，但依然比欧洲多31台、比美国多36台，在数量上位居世界第一。
- 在算力方面，美国入榜的超算系统总性能占据Top500所有系统总性能的43.2%，排名第一，日本以19.6%排名第二，中国以10.6%位列第4。

天河2A是由中国国防科技大学（NUDT）开发并部署在中国广州国家超级计算机中心，由Intel Xeon CPU和Matrix-2000加速器提供动力。



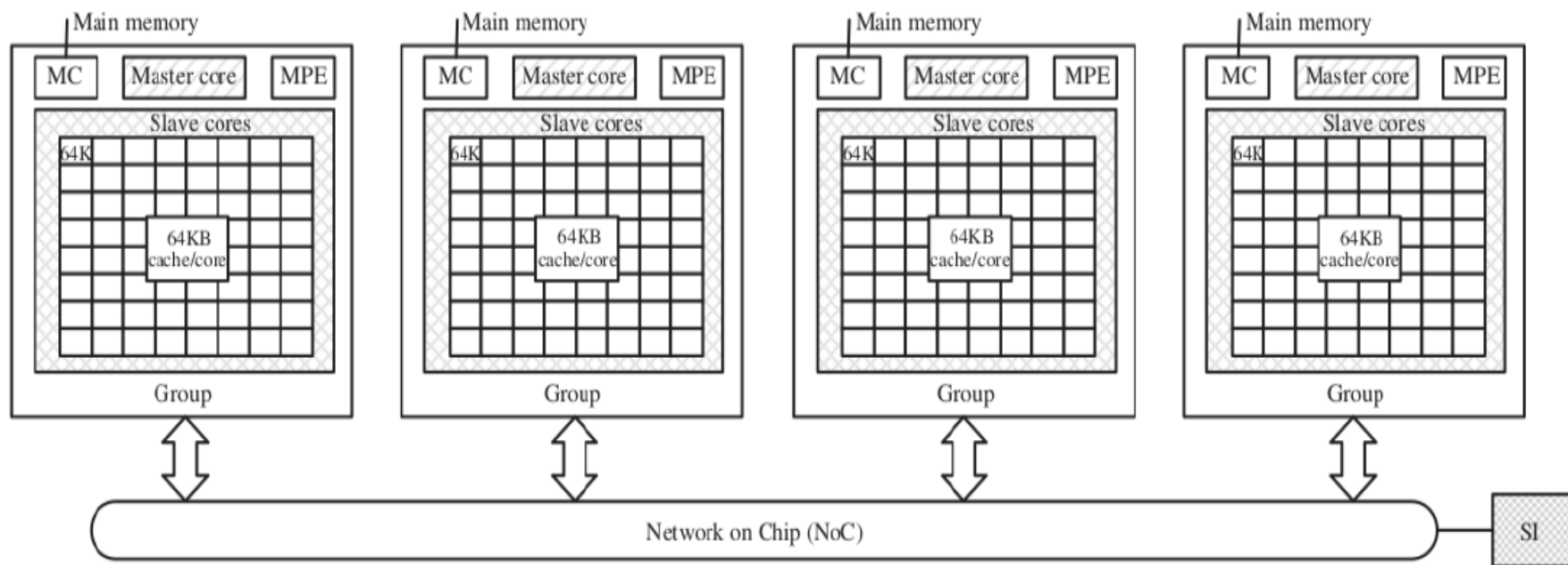
- 2013年6月-2015年11月天河二号第一；
- 2015年4月9日，美国商务部发布了一份公告，决定禁止向中国4家国家超级计算机中心出售“至强”（XEON）芯片，这一决定使天河二号升级受到阻碍。

□2016年6月，中国研发出了当世界上最快的超级计算机“神威太湖之光”，坐落在无锡的中国国家超级计算机中心。该超级计算机的浮点运算速度是当时世界第二快超级计算机“天河二号”的2倍，达9.3亿亿次每秒。（截止2017年11月排名第一）

神威.太湖之光 Sunway TaihuLight 的 HPL 值为 93.0 petaFLOPS。太湖之光由中国国家并行计算机工程与技术研究中心（NRCPC）开发，配置的是国产的 Sunway SW26010 处理器。



每个节点包含四个核心，每个核心包含一个**主处理器**（MPE, RISC架构核心）和一个8*8的**计算单元阵列**（CPEs, SIMD）。





高性能计算 应用

- 虽然计算机的性能不断提高，但是我们需要计算的问题和规模也不断增大。
- 因为过去几年计算机性能的提高，一些我们从未想到的问题得到解决，比如解码人类基因组。
- 更复杂的问题仍有待解决。

...人类对于计算能力的需求是无止境的...

数据单位	数据换算	说明	备注
DB	1DB(DoggaByte)=1024NB	2的110次方字节	刀字节
NB	1NB(NonaByte)=1024BB	2的100次方字节	诺字节
BB	1BB(BrontoByte)=1024YB	2的90次方字节	波字节
YB	1YB(YottaByte)=1024ZB	2的80次方字节	尧字节
ZB	1ZB(zettaByte)=1024EB	2的70次方字节	泽字节
EB	1EB(ExaByte)=1024PB	2的60次方字节	艾字节
PB	1PB(PetaByte)=1024TB	2的50次方字节	拍字节
TB	1TB(TeraByte)=1024GB	2的40次方字节	太字节
GB	1GB(GigaByte)=1024MB	2的30次方字节	吉字节
MB	1MB(MegaByte)=1024KB	2的20次方字节	兆字节
KB	1KB(KiloByte)=1024B	2的10次方字节	千字节

高性能计算的应用领域

- 汽车制造
- 生物医药
- 气象分析
- 石油勘探
- 航天航空



高性能计算比你想象的更加有用

“进入21世纪以来，计算方法与分子模拟、虚拟实验，已经继实验方法、理论方法之后，成为第三个重要的科学方法，对未来科学与技术的发展，将起着越来越重要的作用。”

——徐光宪 院士

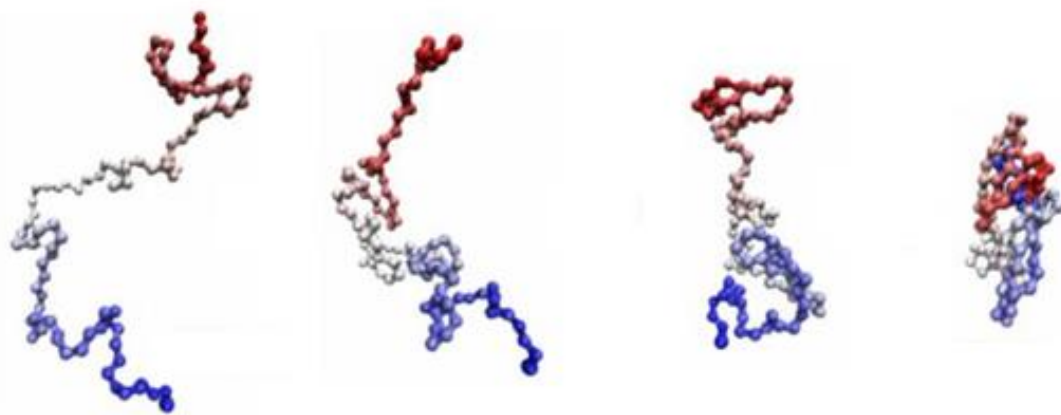
在许多情况下，如理论模型复杂甚至理论尚未建立，实验费用昂贵甚至无法进行时，计算就成了求解问题的唯一或主要的手段。

在汽车制造方面，通常汽车制造需要进行实际汽车碰撞，以确保汽车的安全性能。

- 未使用数值模拟：至少需要10辆车；
- 使用数值模拟：2辆车（从仿真模拟得到最优参数之后通过实测验证汽车是否已达到国家标准，真正去国家检验机构进行验证）。

通过ABQUES等有限元建模工具进行汽车碰撞的仿真模拟。

研究疾病与基因、疾病与药物之间的关系



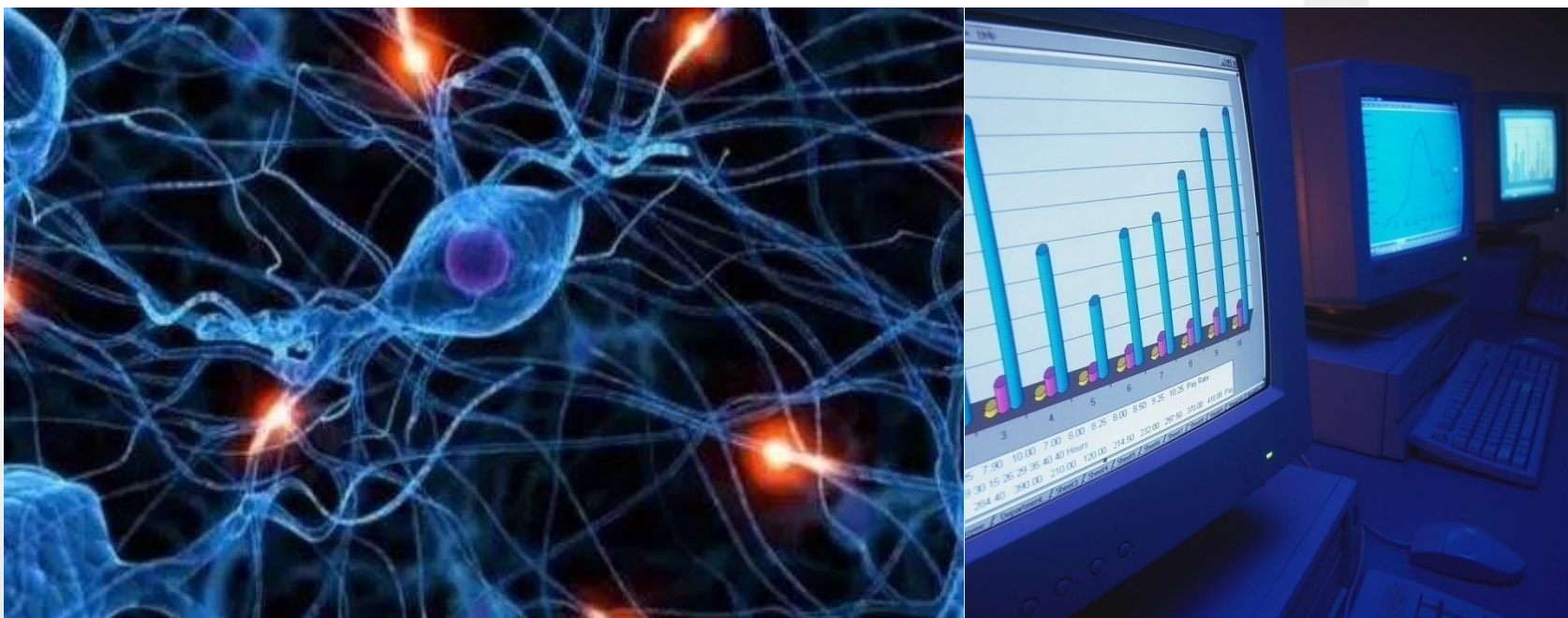
帕金森、老年痴呆等疾病与由基因控制的蛋白质的错误折叠有千丝万缕的联系。

计算能严重制约了研究复杂分子结构的能力



普通CPU服务器和GPU服务器上ALEXnet训练的时间对比

	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



渲染：作为计算机数字图像处理中的一道重要工序，经过渲染，将场景输出成图像文件、视频信号或者电影胶片。

用SGI工作站进行电影渲染时，每帧一般需要1~2小时。

一部2小时的电影渲染需要：

$2\text{小时} \times 3600\text{秒} \times 24\text{帧} \times (1\sim 2\text{小时}) / 24\text{小时} = 20\sim 40\text{年!}$

特殊场景每帧甚至可能需要60个小时！

- 高性能计算机的基准测试程序包括HPL、 [填空1] 和 [填空2] 。
- 高性能计算机的浮点性能是通过HPL (High performance Linpack) 基准程序包测定的，其单位是 [填空3] 。

高性能计算的性能衡量的单位是FLOPS，那1EFLOPS是_____.

- ☐ A 每秒千万亿次的浮点运算
- ☐ B 每秒万亿的浮点运算
- ☒ C 每秒百亿亿的浮点运算
- ☐ D 每秒拾亿的浮点运算

提交

下列哪台高性能计算机是我国目前性能最高的超级计算机。

- ☐ A sierra
- ☐ B 天河二号
- ☐ C Summit
- ☒ D Sunway TaihuLight

提交

**高性能计算不仅仅是人工智能
高性能计算决定未来**



结束!
