

**Welcome to**

# **Programming Massively Parallel Processors (PMPP)**

**Prof. Dr.-Ing. Michael Goesele**  
**Dr. Stefan Guthe**  
**Dominik Wodniok**

**Graphics, Capture and Massively Parallel Computing (GCC)**  
**TU Darmstadt**

# (Preliminary) Course Schedule

you are here



12.10.2015	Introduction to PMPP
13.10.2015	Lecture Example Project, CUDA Programming 1
19.10.2015	Lecture CUDA Programming 2
20.10.2015	Lecture CUDA Programming 3
26.10.2015	Introduction Final Projects, Exercise 1 assigned
27.10.2015	Questions and Answers (Q&A)
2.11.2015	Lecture, Final Projects assigned, Ex. 1 due, Ex. 2 assigned
3.11.2015	Questions and Answers (Q&A)
9.11.2015	Lecture, Exercise 2 due
10.11.2015	Lecture
16.11.2015	Questions and Answers (Q&A)
17.11.2015	Questions and Answers (Q&A)
23.11.2015	1 <sup>st</sup> Status Presentation Final Projects
24.11.2015	1 <sup>st</sup> Status Presentation Final Projects (continued)
30.11.2015	
1.12.2015	

# (Preliminary) Course Schedule

---

7.12.2015

8.12.2015

14.12.2015

15.12.2015

Christmas break

11.1.2016 2<sup>nd</sup> Status Presentation Final Projects

12.1.2016 2<sup>nd</sup> Status Presentation Final Projects (continued)

18.1.2016

19.1.2016

25.1.2016

26.1.2016

1.2.2016

2.2.2016

8.2.2016 Final Presentation Final Projects

9.2.2016 Final Presentation Final Projects (continued)

- | all exercises and projects will be solved using NVIDIA CUDA on Linux systems
  - | all exercises and projects will run on the HHLR
  - | register in TuCAN ASAP so that we can create your accounts
  - | fill in and sign account form
  
- | also possible but not really recommended to run CUDA on your own system
  - | no support provided
  - | all exercises and projects must run on HHLR for grading

## Nutzungsordnung des Hochleistungsrechners der TU Darmstadt Nutzung durch Studierende im Rahmen einer Lehrveranstaltung



### 1. Präambel

Diese Nutzungsordnung legt fest, nach welchen Regeln der Hochleistungsrechner von Studierenden im Rahmen einer Lehrveranstaltung der TU Darmstadt benutzt werden darf.

Der Hochleistungsrechner steht überdies den Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftlern der TU Darmstadt und den Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftlern anderer Universitäten zur Verfügung. Wissenschaftliches Rechnen ist gestattet, sofern die eingesetzte Software dies erlaubt, jegliche rein kommerzielle Nutzung ist untersagt. Bestandteil dieser Nutzungsordnung sind die Bestimmungen in der [Allgemeinen Benutzungsordnung für die Informationsverarbeitungs- und Kommunikations-Infrastruktur](#) [1] der TU Darmstadt.

Ein Verstoß gegen diese Nutzungsordnung kann zum Entzug der Nutzungsberechtigung führen.

Alle ausgefüllten Nutzungsanträge (dieses Formular) müssen vom Veranstalter gemeinsam mit dem separaten Nutzungsantrag zur Eingereichte werden. Für Fragen stehen wir Ihnen gerne auch per E-Mail: [hhlr@hrz.tu-darmstadt.de](mailto:hhlr@hrz.tu-darmstadt.de) zur Verfügung.

### 2. Aufgaben des Hochschulrechenzentrums der TU Darmstadt

#### 2.a. Betrieb des Hochleistungsrechners

Der Hochleistungsrechner wird vom Hochschulrechenzentrum (HRZ) der Technischen Universität Darmstadt betrieben. Die Zuteilung von Rechenzeit, Hilfestellung bei der Softwareinstallation und das Einrichten von Nutzerkonten.

Die Zuteilung der Rechenzeit erfolgt nach festgelegten Regeln (siehe Abschnitt 3.c) ohne Ausgleichs-Rechenzeit entgelt (z.B. wegen einer Systemauszeit oder durch Abbruch eines Rechenjobs auf Grund eines Zweifelsfalls entscheidet der Leiter des HRZ der TU Darmstadt.

#### 2.b. Speicherung von Login-Daten

Das HRZ speichert ausschließlich Login-Daten der Nutzer/-innen. Diese sind: a) Personendaten (Name, Matrikelnummer, Geburtsdatum, etc.), b) Login-Informationen (Benutzername, Passwort, etc.). Diese Daten dienen allein der internen Verwaltung des HRZ. Die Zweckbindung des § 13 Abs. 5 HDSG ist zu beachten.

#### 2.c. Speicherung von Arbeitsdaten \*Bitte BETA-Hinweis

Ein Ziel ist ausschließlich die Weiterleitung im Rahmen der unter 5 angegebenen Aufgaben der Nutzer/-innen (z.B. persönliche Bilder oder E-Mails etc.) auf der Infrastruktur. Für die Arbeitsdaten stehen dem/der Nutzer/-in der Bereich der Speicherung der Daten im Home-Verzeichnis (home) zur Verfügung. Für die Accounts im Rahmen der Speicherung der Daten im Home-Verzeichnis ist für jeden Nutzer/ jede Nutzerin begrenzt.

Sollte der/die Nutzer/-in bereits ein reguläres Home-Verzeichnis (home) eingerichtet haben, so ist dieses Home-Verzeichnis (home) zu verwenden. Für die hier beantragte Veranstaltung ist ein separates Home-Verzeichnis (home) zu erstellen.

#### 2.d. Ende der Nutzungsberechtigung

Beim Auslaufen oder beim Entzug der Nutzungsberechtigung des Antragstellers/der Antragstellerin werden die Nutzerkonten gelöscht.

### 3. Aufgaben der Nutzer/-innen

#### 3.a. Allgemeine Hinweise

Das HPC-Cluster ist ausschließlich für Arbeiten im Rahmen der beantragten Lehrveranstaltung zur Verfügung.

#### 3.b. Nutzerkonto

Für die Nutzung des Hochleistungsrechners ist ein persönliches Nutzerkonto eingerichtet. Das Nutzerkonto gehört zum ID-System der TU Darmstadt.

Die Richtlinien aus der [Allgemeinen Benutzungsordnung](#) [1] und den Richtlinien unter [www.hhlr.tu-darmstadt.de](http://www.hhlr.tu-darmstadt.de) sind zu befolgen. Die Auswahl des Passwortes sowie die regelmäßige Änderung. Die Weitergabe des Nutzerkontos (z.B. an andere Personen) ist grundsätzlich untersagt. Der/die Besitzer/-in des Nutzerkontos haftet für Schäden, die durch die Weitergabe des Nutzerkontos entstehen (z.B. Passwortweitergabe) angerichtet werden.

Die Nutzer/-innen sind verpflichtet, sich an die allgemeinen Regeln der Nutzung des Hochleistungsrechners zu halten. Insbesondere sind a) unerlaubten Zugang zu Daten anderer Nutzer/-innen zu verschaffen, b) sich zu verschaffen oder c) den Speicherplatz für nicht zur Nutzung des Systems notwendige Zwecke zu missbrauchen. Das kann zum Entzug der Nutzungsberechtigung führen.

Die Nutzung des Hochleistungsrechners wird nach dem Prinzip des „fair-queuing“ werden auf der Webseite des Hochleistungsrechners [2] bekanntgegeben.

Die Nutzung des Hochleistungsrechners ist ausschließlich unter Einhaltung der Lizenzbedingungen einsetzen, insbesondere sind ggf. Beschränkungen der kommerziellen Anwendung zu beachten. Der/die Nutzer/-in ist für die Prüfung und Einhaltung selbst verantwortlich.

### 4. Rückfragen

[1] Allgemeine Benutzungsordnung für die Informationsverarbeitungs- und Kommunikations-Infrastruktur

<http://www.hrz.tu-darmstadt.de/tu-darmstadt/allgemeinebenutzungsordnung.de.jsp>

[2] Webseite des Hessischen Hochleistungsrechners an der TU Darmstadt

<http://www.hhlr.tu-darmstadt.de/>

\*Achtung BETA: Die Adresse des Homeverzeichnis kann sich noch ändern.

Ein Update wird ggf in der Vorlesung bekanntgegeben.

### 5. Antrag auf Nutzung des Hochleistungsrechners im Rahmen einer Lehrveranstaltung

#### Informationen über den/die Antragsteller/-in

Dieses Formular finden Sie online auch unter „[Nutzerantrag für Studierende \(Lehrveranstaltung\)](#)“ auf unserer Webseite [http://www.hhlr.tu-darmstadt.de/hhlr/lichtenberg/zugang/lichtenberg\\_zugang.de.jsp](http://www.hhlr.tu-darmstadt.de/hhlr/lichtenberg/zugang/lichtenberg_zugang.de.jsp).

Nachname, Vorname:

E-Mail:

TU-ID (auch Externe):

Universität/wiss.Einrichtung:

Titel der Lehrveranstaltung:

Semester / Jahr:

TU-Darmstadt	
Grundlagen der Informatik 3 (Gdl 3)	
Wintersemester 2013/14	

Die maximale Laufzeit der Nutzungsberechtigung richtet sich nach dem Nutzungsantrag für die Lehrveranstaltung (aber max. 6 Monate).

Ich bestätige hiermit die Richtigkeit meiner Angaben und verpflichte mich zur Einhaltung dieser Nutzungsordnung. Ich bin mit der Verarbeitung meiner personenbezogenen Daten (nach Abschnitt 2.b) einverstanden.

.....  
Ort, Datum

.....  
Unterschrift

(Wird vom HRZ ausgefüllt)

Wurde genehmigt und eingerichtet: ja/nein

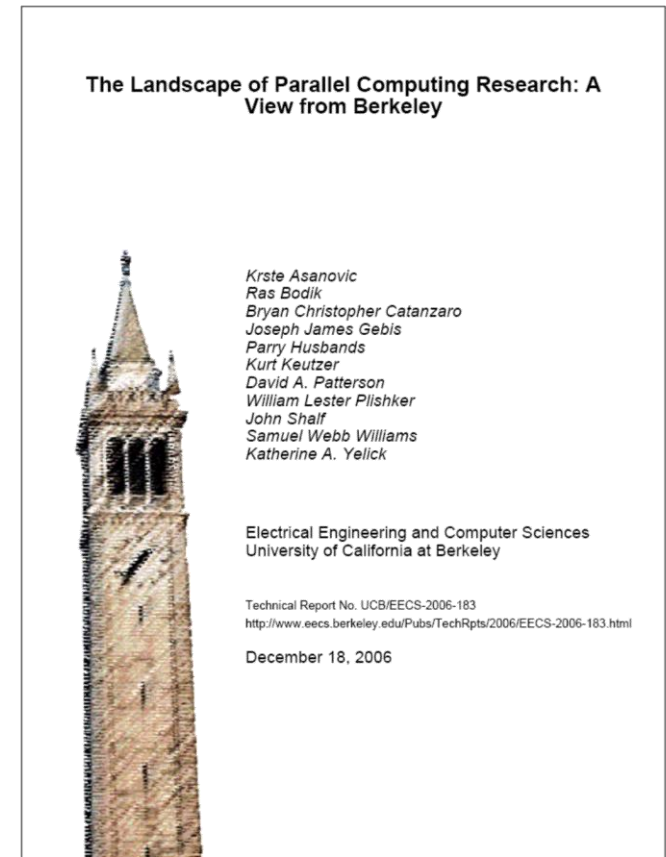
Laufzeit des Nutzerkontos: - siehe Hauptformular des/der Lehrenden -

.....  
Datum Unterschrift

Anmerkungen:

# Why PMPP?

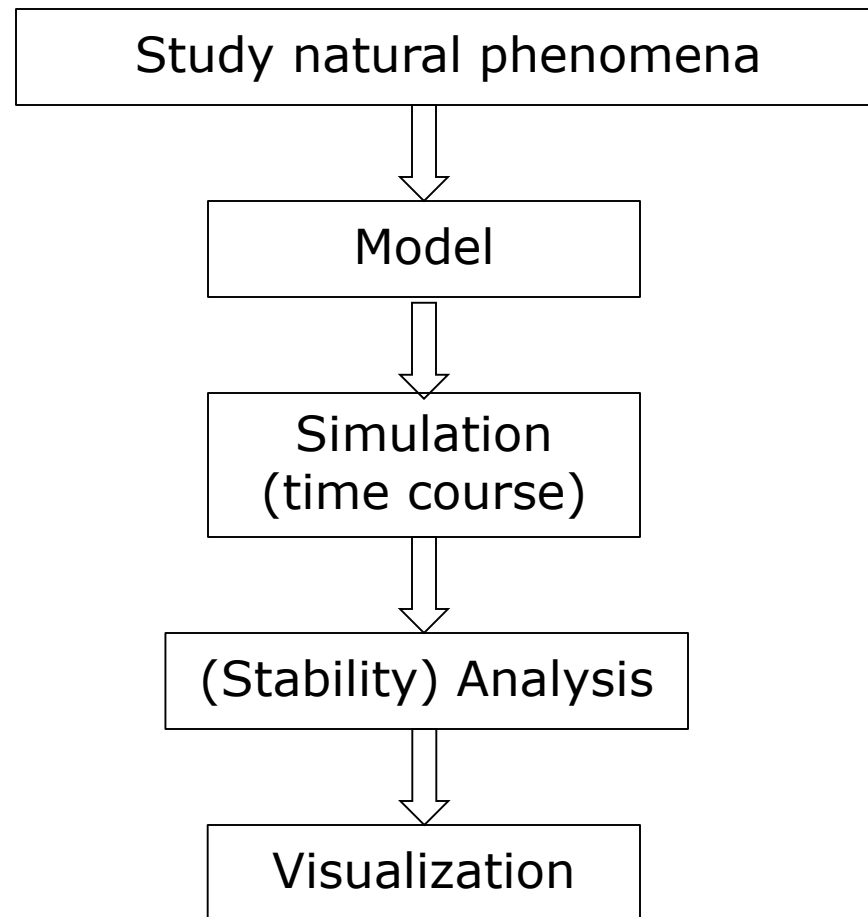
- | discussion inspired by  
The Landscape of Parallel Computing  
Research: A View from Berkeley  
by Asanovic et al., December 18, 2006  
Technical Report UCB/EECS-2006-183
- | read Sections 1-3 of the Berkeley Report  
[Asanovic et al. 2006]
  - | available online or on the course webpage
  - | you are welcome to read the whole  
document



## Massively-Parallel Simulation of Biochemical Systems

Jens Ackermann   Paul Baecher   Thorsten Franzel  
Michael Goesele   Kay Hamacher

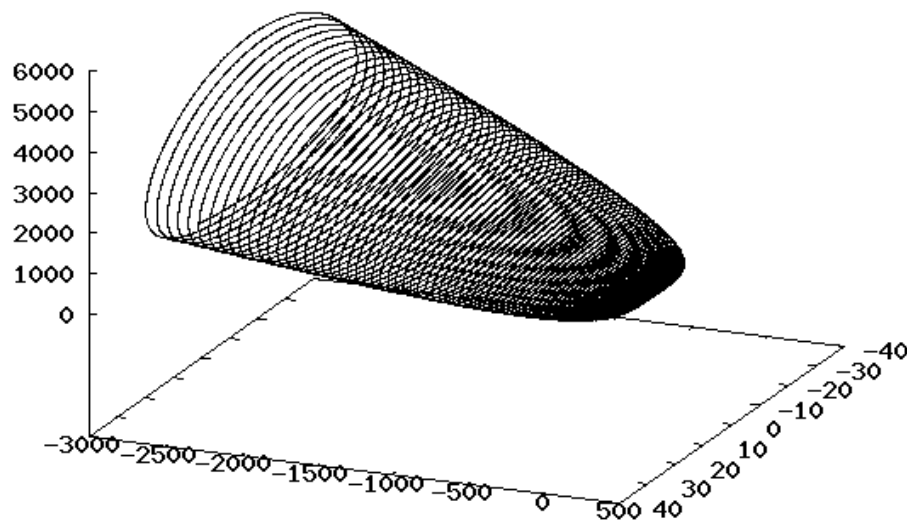
published at GI 2009 Workshop on  
Massively Parallel Computational Biology on GPUs



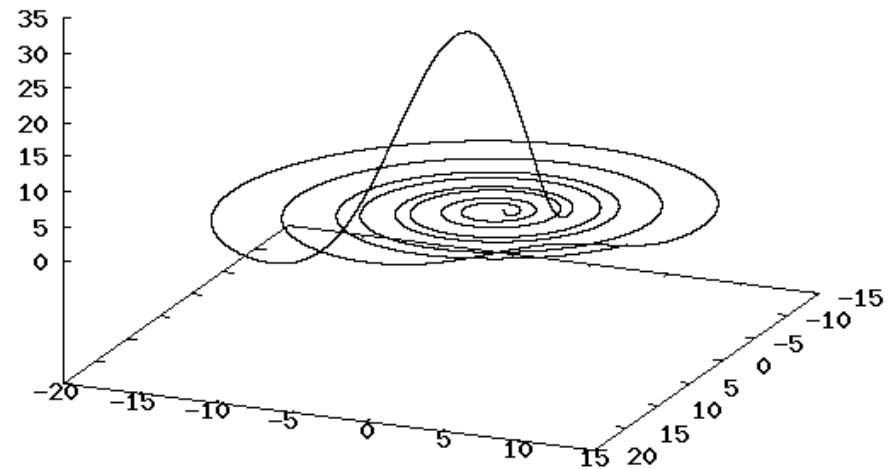


# Parameter Dependency

- Behavior of a single system can be highly dependent on the parameters/conditions:

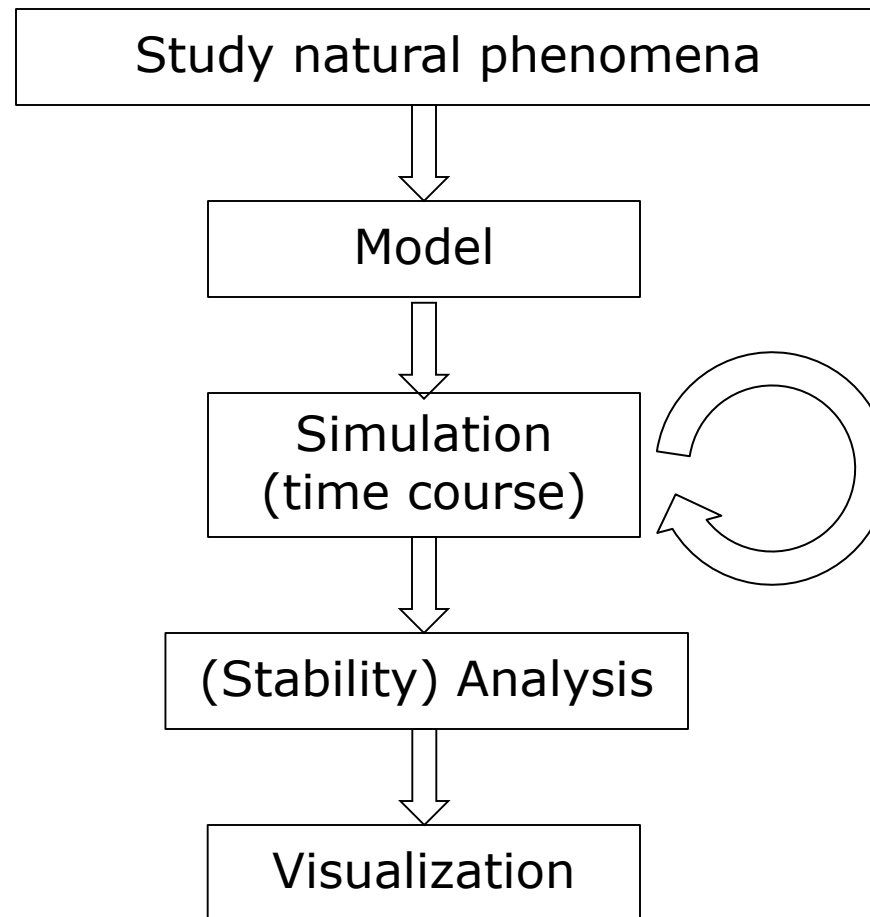


$$(a,b,c) = (0.2, 0.0, 0.0)$$

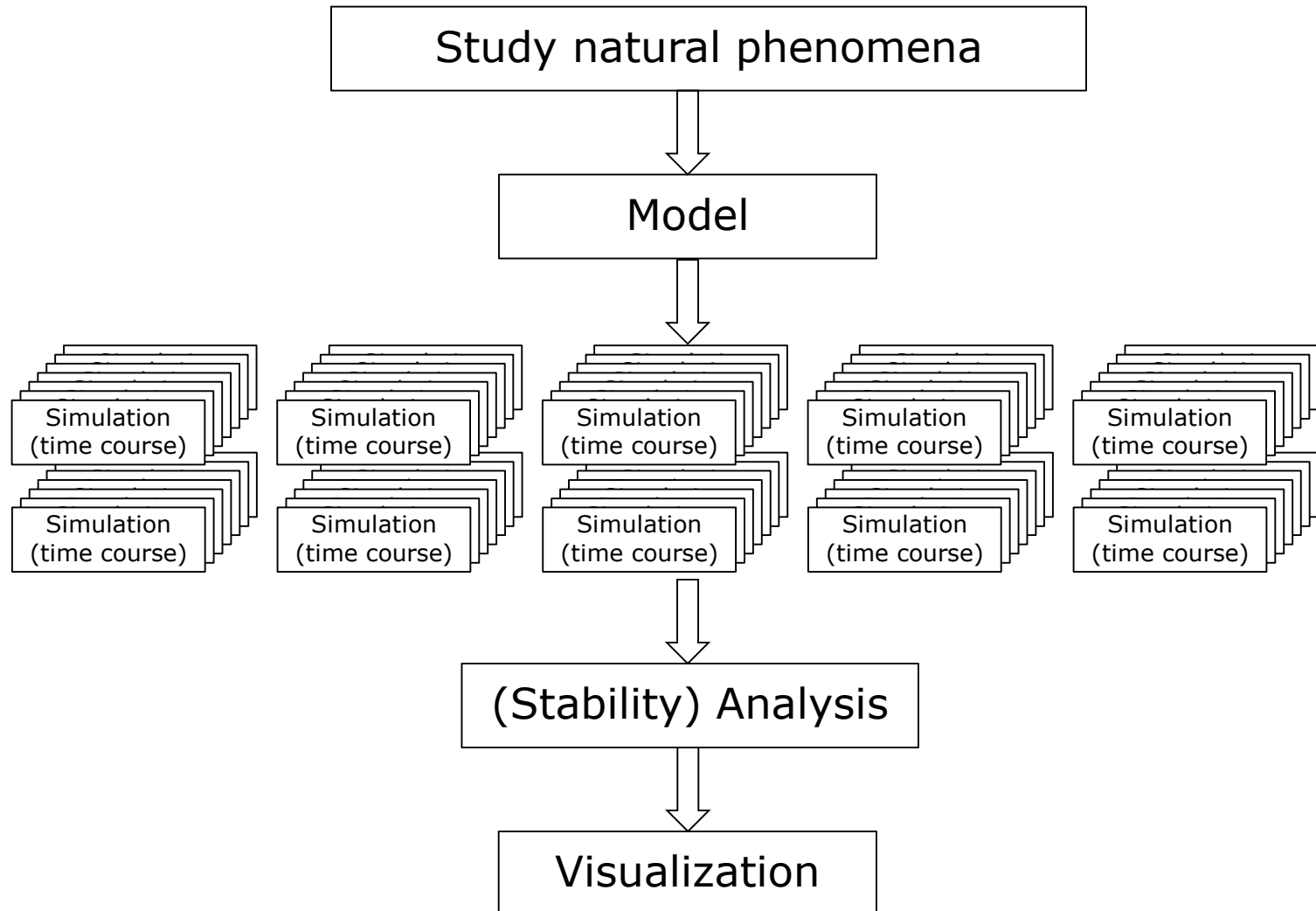


$$(a,b,c) = (0.15, 0.2, 10.0)$$

# Multiple Simulations



# Multiple Simulations



- Automated pipeline from models in high-level description language to CUDA simulation.
- Considerable speedup for simple model.
  - New possibilities for the analysis.
  - No need for expensive clusters.

- [SOSlib]: outdated, not massively parallel
- [BioNessie]: large-scale grid computing → HPC clusters are expensive
- [Copasi]: sequential parameter scans, export model to C

„You have to be careful [..], COPASI will run 100 time course simulations during this two-dimensional scan which can take a long time.“

- XML based language → machine-readable
- Covers different kinds of models: chemical reactions, metabolic pathways, ...
- There exists a multitude of tools for modeling and analysis.  
→ SBML as common ground for data inter-change.
- Databases available.

```
<species id="ATP" compartment="cell"/>
...
<parameter id="temperature" value="0.5"/>
...
<rateRule variable="ATP">
  <math xmlns="...">
    <apply><times/>
      <ci>temperature</ci>
      <ci>ADP</ci>
    </apply>
  </math>
</rateRule>...
```

Time dependent variables

$$(x_1(t), \dots, x_n(t))$$

Initial values

$$(x_1(t_0), \dots, x_n(t_0))$$

System of (autonomous) ODEs

$$\begin{array}{l} dx_1/dt = f_1(p, x(t)) \\ \dots \\ dx_n/dt = f_n(p, x(t)) \end{array} \iff dx/dt = f(p, x(t))$$

Fixed parameters

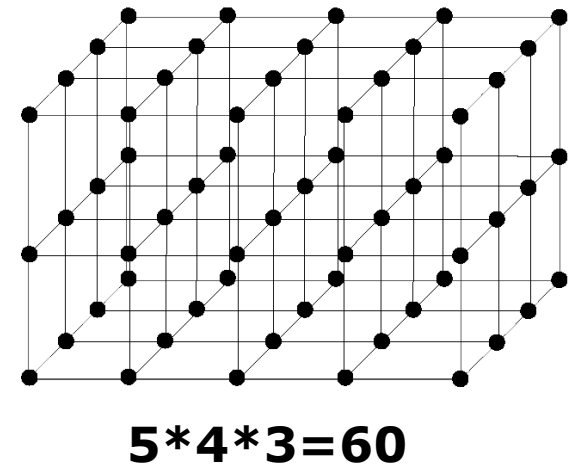
$$(p_1, \dots, p_m)$$

Time

$t$

# Brute-force Parameter Scan

- Sample the m-dimensional space of all possible parameters with a grid.
- For each parameter set p:
  - Evolve ODEs by integrating f.
  - Analyze emerging time series.



## **Problem:**

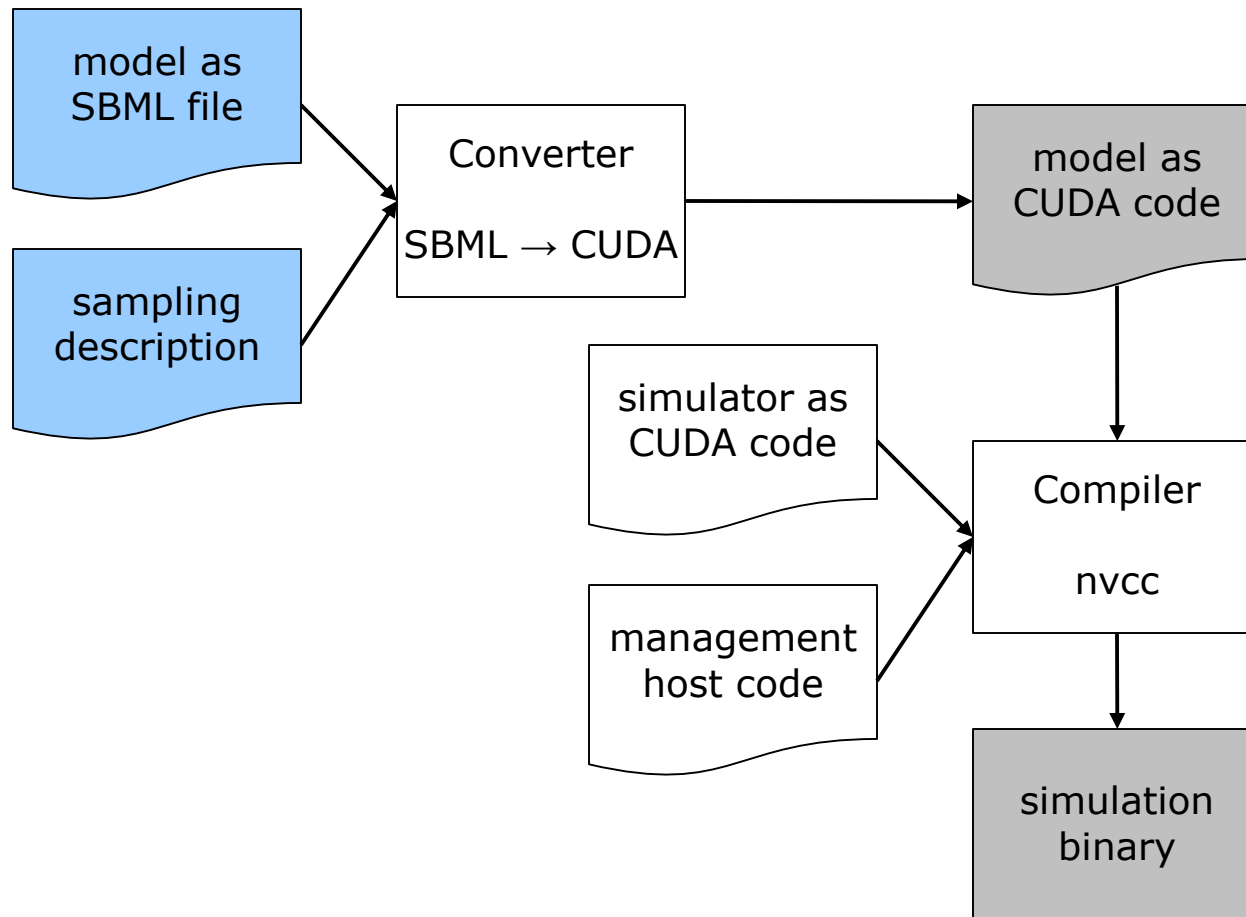
Combinatorics → many parameter sets even for small grid sizes.

## **Solution:**

embarrassingly parallel  
→ use CUDA



# Our Pipeline



- One thread = one parameter setting.

```
__device__ float f(float *x, uint i) {...}
...
for (uint t = 0; t < T; t++)                // time steps
    for (uint i = 0; i < n; i++) {           // coordinates

        x[i] = x[i] + step_size * f(x,i);    // Euler
        result[thdOffset + t*n + i] = x[i];
    }
```

Global  
memory  
write!

- Euler method needs to evaluate the model function  $f$ .
- Lots of data. Storing all time series would slow things down.

- Function  $f$  needed:

- Extract from SBML model.

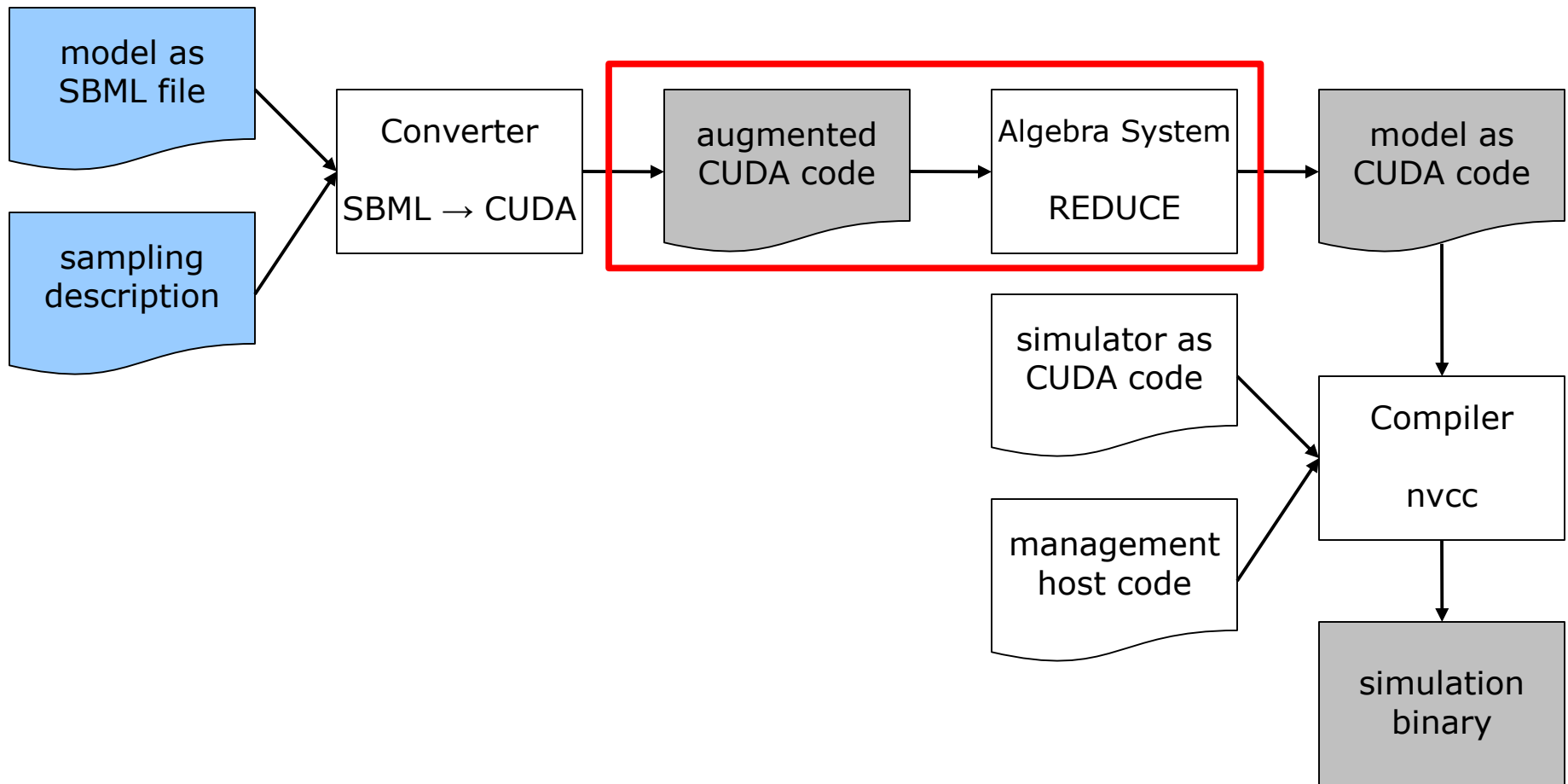


- Convert  $f$  to CUDA code and compile into simulation binary.

- Too much data:

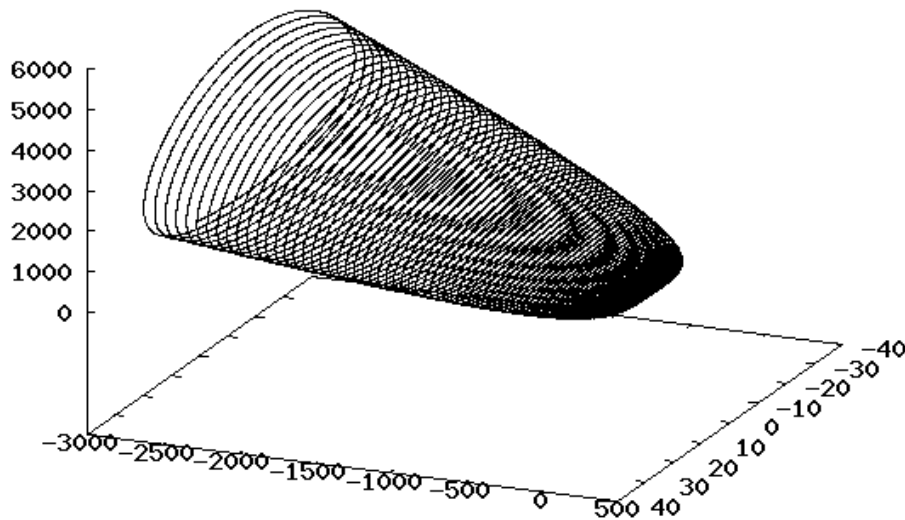
- Store only characteristics, e.g., Lyapunov numbers.
  - Computation needs Jacobian of  $f$ .
    - Computer Algebra System to automatically differentiate  $f$ .

# Our Pipeline (final)

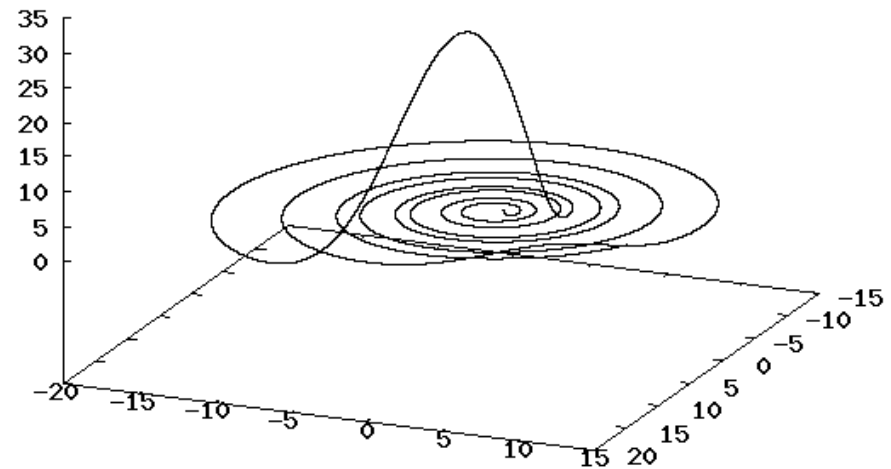


# Proof of Concept: Roessler Attractor

- [Roessler, 1976], [Samardzija, 1989]
- 3 variables, 3 parameters.
- SBML model is "human readable".



$$(a,b,c) = (0.2, 0.0, 0.0)$$



$$(a,b,c) = (0.15, 0.2, 10.0)$$

# Results

- 3 variables, 3 parameters,  $10^6$  parameter sets:

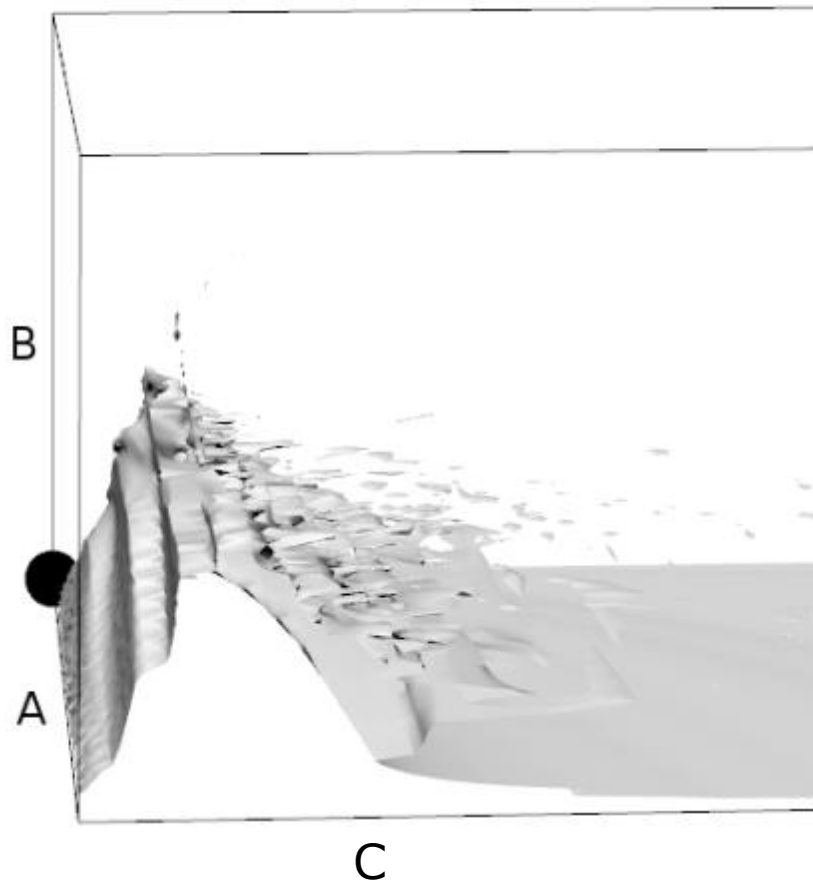
GPU/CPU	#MPs	threads/block	Time [10 <sup>3</sup> s]
9800 GX2	1x16	256	12.22
9800 GX2	2x16	256	6.13
9800 GX2	2x16	320	5.55
Xeon CPU	-	serialized	~280

 Speedup ~ 47

**Preliminary results.!**

19 variables, 48 parameters  Speedup 27

Isosurface extraction in the parameter space:



- Parameter scanning is important for understanding complex system behavior.
  - Ideally suited for parallel computation.
  - Potentially high performance gain if it fits to the architecture.
- Automatic SBML to CUDA conversion connects modeling tools to fast, parallel simulations.



# Corresponding Publication



Scholar



Bearbeiten



Exportieren ▾



Michael Goesele

## Massively-Parallel Simulation of Biochemical Systems.

[\[PDF\]](#) von emis.de

Autoren Jens Ackermann, Paul Baecher, Thorsten Franzel, Michael Goesele, Kay Hamacher

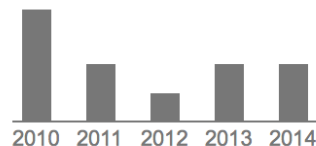
Publikationsdatum 2009/9/29

Konferenz GI Jahrestagung

Seiten 739-750

**Beschreibung** Abstract: Understanding biological evolution prompts for a detailed understanding of the realized phenotype. Biochemical and gene regulatory dynamics are a cornerstone for the physiology of the cell and must therefore be regarded as one of the major aspects of such a phenotype. Experimental insight into molecular parameters is, however, hard to come by. Model development therefore requires computational parameter estimation. At the same time, design of cellular dynamics is highly efficient when done in-silico. We therefore ...

Zitate insgesamt **Zitiert von: 11**



Google Scholar-  
Artikel [Massively-Parallel Simulation of Biochemical Systems.](#)  
J Ackermann, P Baecher, T Franzel, M Goesele... - GI Jahrestagung, 2009  
[Zitiert von: 11](#) - [Ähnliche Artikel](#) - [Alle 7 Versionen](#)