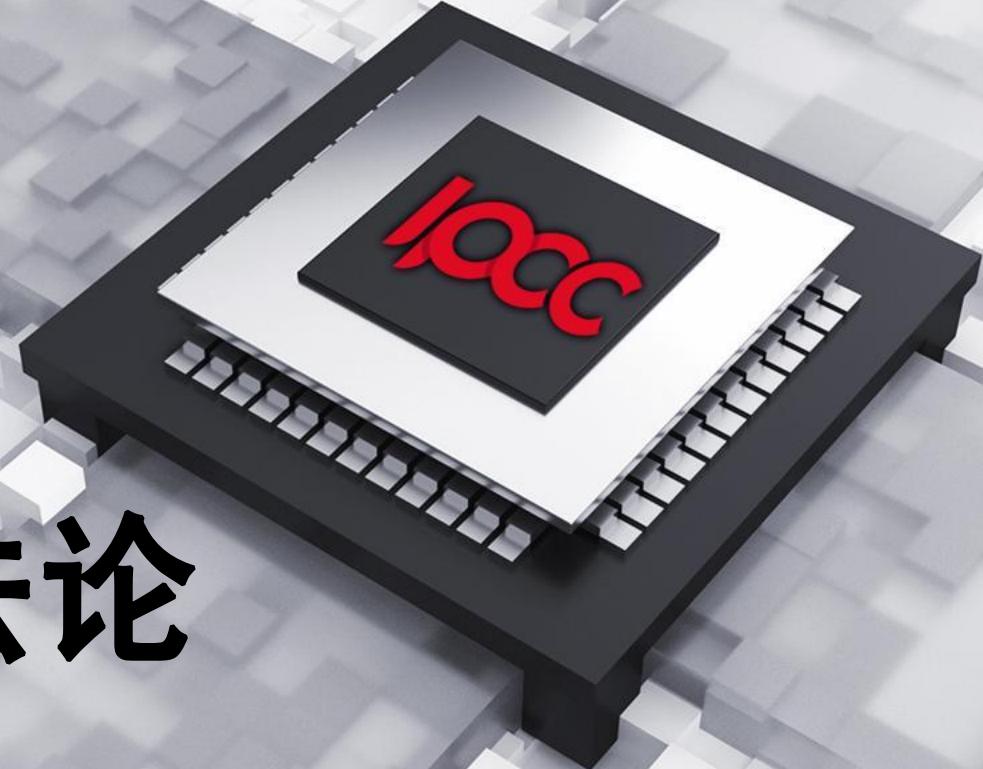




The IPCC logo is positioned in the center-left area. It features the letters "ipcc" in a bold, red, sans-serif font.



超算基本原理与方法论

ACM 中国-国际并行挑战赛-赛前讲座2022

第 2 讲 / 共 6 讲



主讲人：吴坎

- 第一讲：超算竞赛入门指南
 - 直播时间：05月26日 周四
- 第二讲：超算基本原理与方法论
 - 直播时间：06月01~~02~~日 周四
- 第三讲：现代处理器优化概论
 - 直播时间：06月08日 周三

主讲人：叶子凌锋

- 第四讲：并行开发技术与优化方法 I
 - 直播时间：06月17日 周五
- 第五讲：并行开发技术与优化方法 II
 - 直播时间：06月24日 周五
- 第六讲：并行优化常用方法与工具
 - 直播时间：06月30日 周五



第一讲 并行应用开发概论 直播时间 05月23日 周日 19:30-20:30 扫码进入直播间 主讲人 邵奇 职业背景 <ul style="list-style-type: none"> - 山东大学硕士 - 国家超级计算机某中心高性能计算工程师 - 主要从事分子动力学模拟应用在国产异构处理器下的优化工作 - 参与部分分子动力学模拟软件 GROMACS、BIO-ESMD 等应用在国产系统上的移植和并行化工作 课程大纲 <ul style="list-style-type: none"> - 并行计算的重要性 - 处理器技术 - 并行计算系统发展的趋势 - 后期培训课程简介 	第二讲 性能优化方法论 直播时间 05月30日 周日 19:30-20:30 扫码进入直播间 主讲人 赵雄君 职业背景 <ul style="list-style-type: none"> - 浙江大学博士 (在读) - 专业：计算机科学与技术 - 研究方向：人工智能、医疗大数据、并行计算 - 2019 ACM-ICPC 国际大学生程序设计竞赛全国邀请赛金奖 - 2019 ASCC 世界大学生超级计算机竞赛二等奖 课程大纲 <ul style="list-style-type: none"> - 前期提要 - 性能优化方法论和通用步骤 - 性能度量指标 - 性能分析实用工具 	第三讲 并行开发技术概论 直播时间 6月6日 周日 19:30-21:00 扫码进入直播间 主讲人 张力越 职业背景 <ul style="list-style-type: none"> - 华南理工大学 - 第八届全国并行应用挑战赛 (PAC2020) 全国银奖 - 第三届全国大学生并行应用挑战赛一等奖 - 中山大学 学术研究奖 - 曾任中山大学实验室管理员 - 曾任职于物联网数据有限公司，主要负责公司产品的后台开发，熟悉使用 Vue, uni-app, Ant Design, Node.js, echarts, webrtc 等技术栈和开发工具。 课程大纲 <ul style="list-style-type: none"> - 并行编程 - 并行平台使用演示 - OpenMP 并行编程基础 - MPI 并行编程入门 
第四讲 现代处理器优化技术 直播时间 06月14日 周日 19:30-20:30 扫码进入直播间 主讲人 邵奇 职业背景 <ul style="list-style-type: none"> - 山东大学硕士 - 国家超级计算机某中心高性能计算工程师 - 主要从事分子动力学模拟应用在国产异构处理器下的优化工作 - 参与部分分子动力学模拟软件 GROMACS、BIO-ESMD 等应用在国产系统上的移植和并行化工作 课程大纲 <ul style="list-style-type: none"> - 前期课程回顾 - 通用优化技术 - 编译器优化 	第五讲 优化开发常用工具 直播时间 06月20日 周日 19:30-20:30 扫码进入直播间 主讲人 邵奇 职业背景 <ul style="list-style-type: none"> - 山东大学硕士 - 国家超级计算机某中心高性能计算工程师 - 主要从事分子动力学模拟应用在国产异构处理器下的优化工作 - 参与部分分子动力学模拟软件 GROMACS、BIO-ESMD 等应用在国产系统上的移植和并行化工作 课程大纲 <ul style="list-style-type: none"> - 前期课程回顾 - 编译器及数学库 - 辅助开发工具 	第六讲 并行优化实战 直播时间 6月27日 周日 19:30-21:00 扫码进入直播间 主讲人 张力越 职业背景 <ul style="list-style-type: none"> - 华南理工大学 - 第八届全国并行应用挑战赛 (PAC2020) 全国银奖 - ASCC 19 世界大学生超级计算机竞赛一等奖 - 中山大学 学术研究奖 - 曾任中山大学实验室管理员 - 曾任职于物联网数据有限公司，主要负责公司产品的后台开发，熟悉使用 Vue, uni-app, Ant Design, Node.js, echarts, webrtc 等技术栈和开发工具。 课程大纲 <ul style="list-style-type: none"> - 前期回顾 - 第一届 IPCC 初赛题优化分析 - 并行优化经验之谈 

更多学习资料与往届
讲座分享，尽在比赛
交流群

1046805935 !

学习平台：哔哩哔哩[超级云讲堂]

- **第一讲：并行计算基础概论** | **主讲人：邵奇**
- **第二讲：性能优化方法论** | **主讲人：赵雄君**
- **第三讲：并行开发技术概论** | **主讲人：张力越**
- **第四讲：现代处理器优化技术** | **主讲人：邵奇**
- **第五讲：并行优化常用工具** | **主讲人：邵奇**
- **第六讲：并行优化实战技巧** | **主讲人：张力越**



- 参赛之前
 - 超算竞赛（PAC、IPCC、CPC、ASC、PRA 等）介绍与 IPCC 参赛流程
 - 超算竞赛（IPCC 等）与传统的程序设计竞赛（ICPC 等）比赛的区别？
 - 应当如何选择适合的队友？
- 比赛期间
 - 当我不知道该做什么的时候，应该去做什么？（如何获得优化思路？）
 - 当我知道该做什么的时候，应该怎么做？
- 赛后总结
 - 如何组建一支可以延续的超算竞赛团队？

- 超级计算机基本原理
 - 摩尔定律与十年千倍定律
 - Amdahl 定律与 Gustafson 定律
- 超算技术发展史与方法论（软件、硬件、理论协同发展）
 - 60 ~ 70 年代：FORTRAN/C/C++ 语言、集成电路、Flynn 分类法
 - 70 ~ 80 年代：线性代数过程（BLAS、Linpack）、向量处理（SIMD）
 - 90 年代：共享内存（SMP、OpenMP）、消息传递（MPP、MPI）
 - 00 年代：大规模集群计算（Cluster）
 - 10 年代：异构计算（CUDA、ROCM、OpenCL 等）
- 超算经典使用案例与展望



- 本讲部分内容参考自
 - 中大《超级计算机原理与操作》课程
 - 吴迪、杜云飞老师主讲
 - 中大《编译原理》课程
 - 张献伟老师主讲
- 这个理念先搞懂！



The screenshot shows a web browser displaying a course page. The URL in the address bar is easyhpc.net/course/37. The page title is '超算习堂② 在线实训 EasyHPC'. The main content area features a large image of a supercomputer server. To the right, course details are listed: '超级计算机原理与操作 - 2019年春', '46人', '并行计算', and '中山大学吴迪、杜云飞老师主讲'. Below the image, there are tabs for '课程概览' (selected), '课时列表', '参考材料', and '课程作业'. The '课程介绍' section contains a paragraph about the importance of supercomputers in scientific research. The '时间地点' section lists the schedule: '每周一 (1-9周): 下午19:00-20:40 教学楼A101,' and '每周三 (1-18周): 下午19:00-20:40 教学楼A101'.

•高性能计算优质教育内容的在线教育实践平台

- 中大、清华、北大、中科大等多所国内一流高校共同合作研发
 - 广州超算、长沙超算、中科院超算、上海超算等提供机时与计算资源
 - 面向全国广大高校本科生与研究生（免费！！！）

•涵蓋課程教育、**在线编程**、**在线实训**、**案例学习**等诸多內容

The screenshot displays a grid of 20 cards, each representing a different scientific or computational resource. The resources include:

- Linux 基础入门
- MPI 编程环境部署
- Real Potential $V(r)$
- 水中的溶质面
- 边缘计算与智能
- 并行计算—结构、算法、编程
- 高阶并行设计
- 在国产计算机平台上玩转机器学习
- 立方氯化物(C-BrN)的光学性能并行求解
- MASNUJM海浪模型的并行优化
- 分子动力学模拟并行化求解
- 宇宙N-Body并行化求解

Other visible cards include:

- Linux基础入门 (1.1万)
- MPI编程环境部署 (1.0万)
- Real Potential $V(r)$ (4.593)
- 水中的溶质面 (113)
- 边缘计算与智能 (23)
- 并行计算—结构、算法、编程 (8.706)
- 高阶并行设计 (4.2)
- 在国产计算机平台上玩转机器学习 (8.11)
- 立方氯化物(C-BrN)的光学性能并行求解 (944)
- MASNUJM海浪模型的并行优化 (265)
- 分子动力学模拟并行化求解 (720)
- 宇宙N-Body并行化求解 (390)

The cards feature various icons such as a penguin, a globe, molecular structures, and mathematical plots.

• 经典误区一：超算是堆￥堆算力得到的，没有技术含量

- 天河二号研发投入约 7 亿元
- 广州超算年收入超过 1 亿元
- 天河二号每年电费约 1 亿元 … 每天一辆奔驰！
- 如果超算只是“大力出奇迹”，后续维护成本将远远超过以上数值！

• 什么是超算？

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

- Floating-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 Linpack)

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

• 经典误区二：超算属于“大国重器”，民用领域很难受益

- 2004, IBM “蓝色基因/L” 70 Tflop/s, 2.9 兆瓦
- 2021, 中大“星河一号” 79 Tflop/s, 2.9 千瓦

• 超算引领计算机领域发展

- 超算是诸多重要计算机技术的综合
 - 软硬件架构、网络、并行算法等
 - 下放民用的速度，比 F1 快得多！



i@wu-kan.cn
<https://wu-kan.cn>

中山大学超算队 吴坎

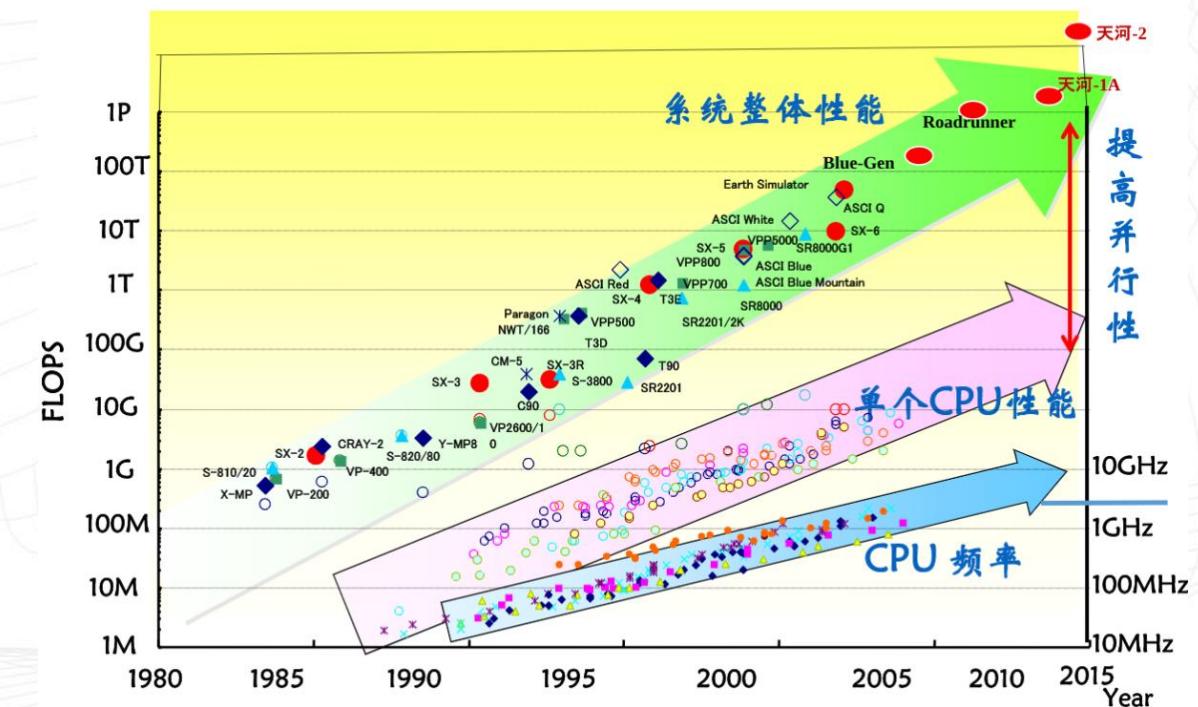
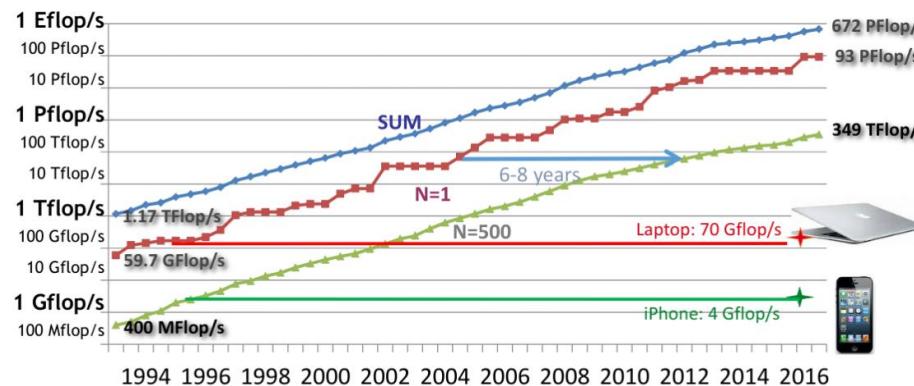


中山大学
SUN YAT-SEN UNIVERSITY

NSSCC GZ
NATIONAL SUPERCOMPUTER CENTER IN GUANGZHOU

- 摩尔定律：芯片性能每十八个月提升一倍
- 十年千倍定律：顶级超算性能每十年提升千倍
 - 远远快于芯片性能提升速度！

Top500性能增长的趋势





•十年千倍定律的启示：“并行”是通向超级计算的唯一途径

•Amdahl 定律

- 问题规模固定时，可并行化的比例是固定的

- 若 f 代表程序可并行部分比例， m 为并行核数，则 $\text{Speedup} = 1 / \left((1 - f) + \frac{f}{m} \right)$

- 无限增加并行核数，所能取得的加速比是有限的

- 悲观：痛，太痛了

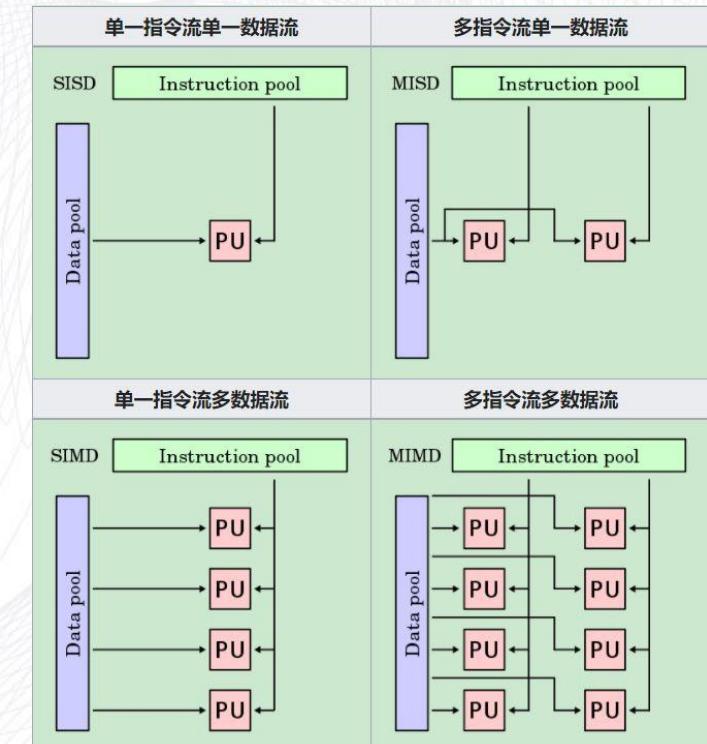
•Gustafson 定律

- 问题规模增加时，问题并行化程度提高，加速比越接近于并行核数

- 增加并行核数，可以处理不断增长的问题规模

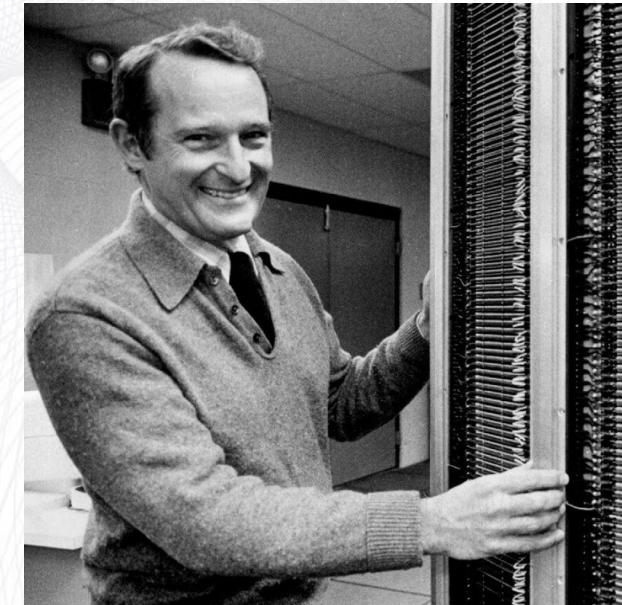
- 对 Amdahl 定律的补充…重拾大规模并行计算的信心！

- Fortran 语言 (1956) , C 语言 (1972) , C++ 语言 (1979)
- 电子管计算机 (1946 ~ 1957)
- 晶体管计算机 (1958 ~ 1964)
- 中、小规模集成电路计算机 (1964 ~ 1971)
- 大规模及超大规模集成电路计算机 (1972)
- Flynn 分类法 (1966)
 - 依照指令流、数据流的多倍性特征
 - 对计算机系统进行了分类
 - 软件、硬件、理论是协同发展的!



Flynn 分类法

- 超算之父（1925 ~ 1996）
- 世界上第一台晶体管超级计算机（1958）
- 对精简指令高端微处理器的产生有重大贡献
- 创立克雷公司，多次研制世界上最快的超算

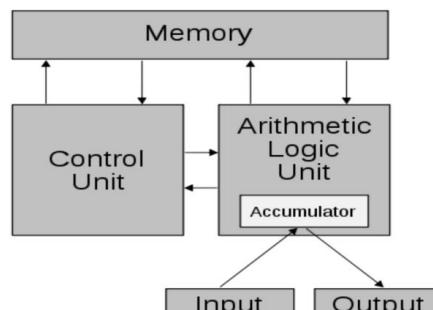


- "Anyone can build a fast CPU. The trick is to build a fast system."*
- "Computers should obey a square law: when the price doubles, you should get at least four times as much speed."*

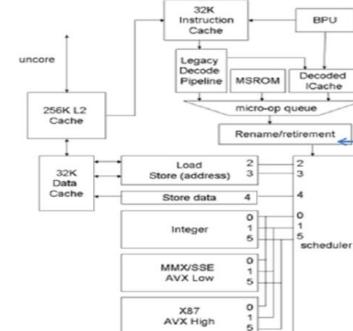


- SISD → SIMD
 - 单指令周期内同时处理多个数据流
 - 属于数据级并行
- 指令级并行等，敬请关注下一讲！

架构的转变-SISD、 SIMD、 MIMD



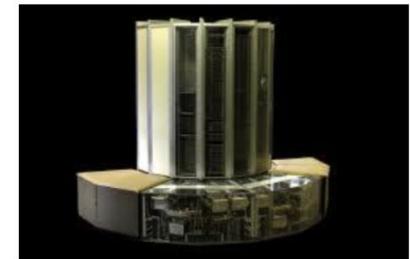
i@wu-kan.cn
<https://wu-kan.cn>



中山大学超算队 吴坎

● 1976, Cray-1

- 向量处理技术, 80M
- 射板耦合逻辑电路 (ECL)
- 当时世界上最快的计算机
- 133Mflops, 115KW



● 1982, CrayX-MP

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

SIMD-单指令多数据流

▪ 向量化技术

- MMX (MultiMedia eXtensions)
- SSE (Streaming SIMD Extensions) 、 SSE2、 SSE3、 SSE4
- AVX (Advanced Vector Extensions) 、 AVX2、 AVX512

• Scalar processing

$$\begin{array}{c} X \\ + \\ Y \\ \hline X + Y \end{array}$$

• SIMD processing

$$\begin{array}{ccccccccc} X & & x_3 & x_2 & x_1 & x_0 & & & \\ + & & & & & & & & \\ Y & & y_3 & y_2 & y_1 & y_0 & & & \\ \hline & & x_3+y_3 & x_2+y_2 & x_1+y_1 & x_0+y_0 & & & \end{array}$$

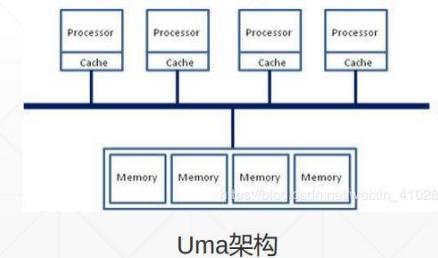
- SIMD → MIMD
 - 多指令周期内同时处理多个数据流
 - Pthread (1995)、OpenMP (1997)

• 绑核、NUMA

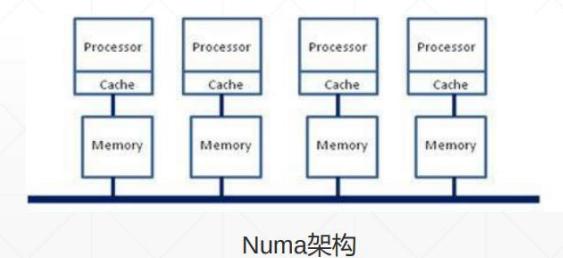
- socket、inner socket
- numa、numa node
- 全明星赛决胜点
- 跨 NUMA 性能差
- 锁、原子操作性能差

MIMD-多指令多数据流

- SMP (共享内存处理机、对等多处理机)
 - UMA 一致内存访问，各个核心对内存访问时间相同
 - NUMA 非一致内存访问，同numa内访问内存速度快，跨numa访问速度慢



Uma架构



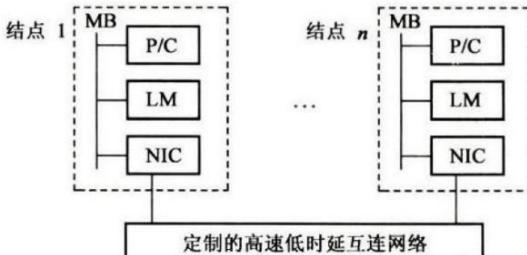
Numa架构



- MIMD 的扩展：SPMD、MPMD
- P = Program
- 消息传递、MPI (1991)

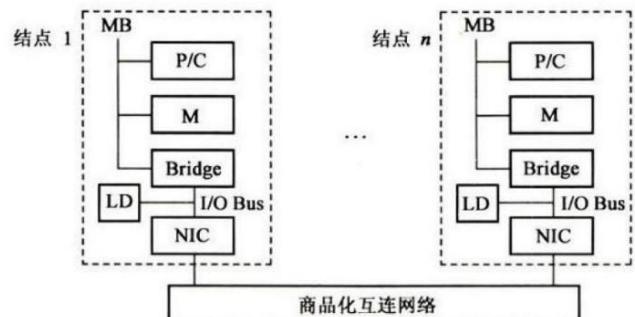
MIMD-多指令多数据流

- MMP (大规模并行机)
- MMP的组件大多是单独定制开发，每个节点使用定制CPU，运行OS微内核，使用单独开发的专有网络连接



MIMD-多指令多数据流

- 集群 (cluster)
 - 商品化的互连网络和处理器
 - 结点机通过I/O总线与网卡相连
 - 每个结点机上驻留有一个完整的操作系统
 - NORMA存储模型



- 2021 图灵奖得主: Jack Dongarra
- BLAS、Linpack、MPI、SLATE、Top500 ...
- 他改变了超算!



Jack 与广州超算合影 (2017)



Association for
Computing Machinery
@TheOfficialACM

...

Congratulations to Jack Dongarra, who receives 2021 #ACMTuringAward for pioneering contributions to numerical algorithms and libraries that enabled high performance computational software to keep pace with exponential hardware improvements for decades."
bit.ly/381HBiV

翻译推文

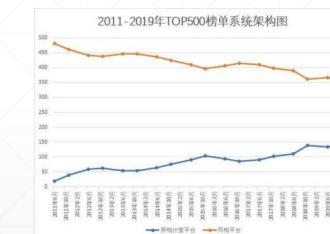




- CPU 算力不再能够满足日益增长需求
 - 3D 图形加速卡 voodoo (1995) 、 GPU (1999)
 - OpenGL (1992) 、 CUDA (2007) 、 OpenCL (2008 年底)
- 异构超算开始成为主流 … 伴随中国超算崛起!
 - 天河一A (2010) , 首台登顶异构超算
 - 天河二号 (2013) , 全自研互联网络
 - 神威 · 太湖之光 (2017) , 全国产主核+从核

异构计算

- 使用不同类型的指令集和计算单元组成系统
- 常见的异构组合有 CPU + GPU, CPU + FPGA



不要上来就

#pragma omp parallel for

•按照技术出现时刻并行，自顶向下

- 首先考虑是否可以使用异构加速，设计对应的算法
- 随后完成 MPI 版本（每个节点一个进程 / 每个物理核心一个进程）
- 随后使用 OpenMP 等完成更细粒度的并行（注意绑核）
- 最后进行向量化 / 专用 BLAS 库加速
- 一些个人经验（对于非比赛等需要极致挖掘性能的场所）
 - 只做到 MPI 级别并行即可在性能/可维护性上取得较好平衡
 - 越往下收益越小！
 - OpenMP 要写出高性能，写起来就像 MPI（要做 NUMA 间资源的隔离）
 - 一个充分优化后的并行最短路，纯 MPI 版本 1.48s, OpenMP 版本 1.42s
 - 向量化最好交给编译器 / 专业的 BLAS 软件团队

•相较于云计算厂商，更强大、高性价比的算力

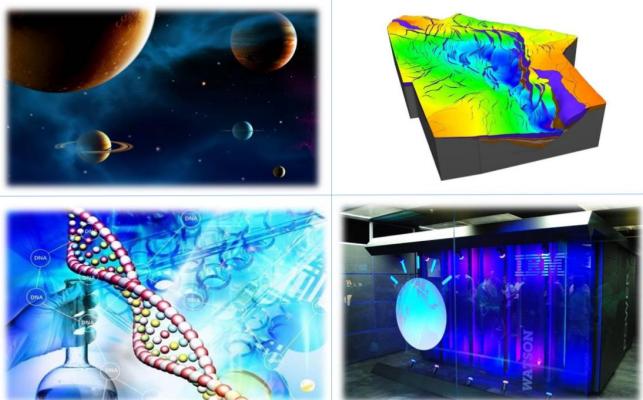
超级计算机能干什么？

- 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：是科学的研究的三大手段之一
- 大数据处理：正成为科学的研究的第四范式



算天、算地、算人、算命

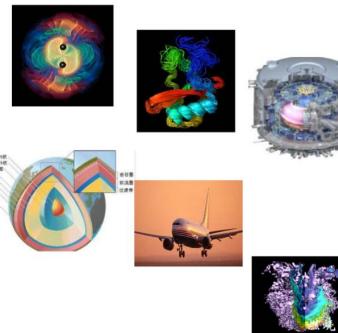


超级计算机能干什么？

- 超级计算可以帮助人们解决一系列重要问题

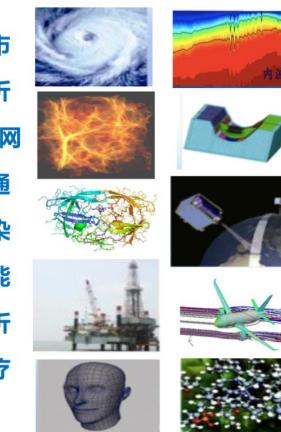
- 尺度超大 Too big
- 尺度超小 Too small
- 时变超快 Too fast
- 时变超慢 Too slow
- 过程超昂贵 Too expensive
- 过程超危险 Too dangerous

微观 宏观 极端条件



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
-



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、联想参与千万亿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

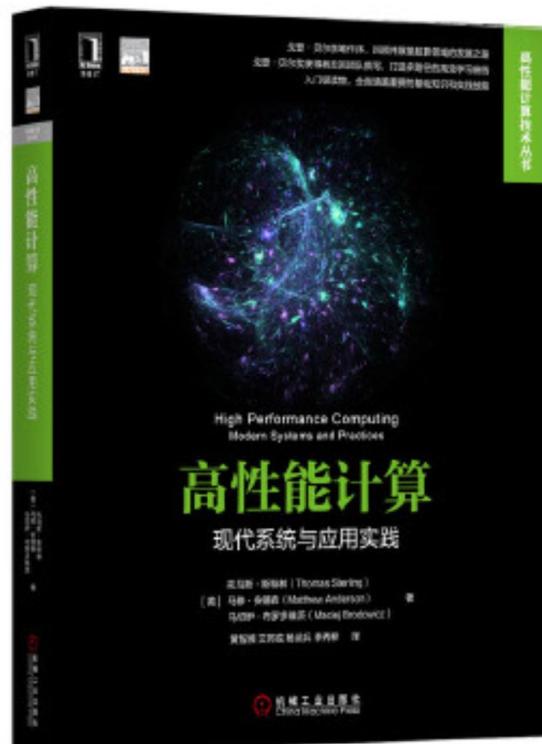
- 尺度超大 尺度超小 时变超快 时变超慢 过程超昂贵 过程超危险



- 首台正式宣布的 E 级超算, Frontier (2022.05.30)
- 新一轮计算机软硬件架构的黄金时代已经到来 (十年千倍!)
 - DSA (Domain Specific Architectures) , RISC-V (2010)
 - TPU, DPU, NPU, BPU ...
- A New Golden Age for Computer Architecture (2019)
 - John M. Hennessy, David A. Patterson
- The Golden Age of Compiler Design in an Era of HW/SW co-design (2021)
 - Chris Lattner (LLVM、MLIR)
- 打好基础、时代弄潮!



扫码反馈



i@wu-kan.cn
<https://wu-kan.cn>

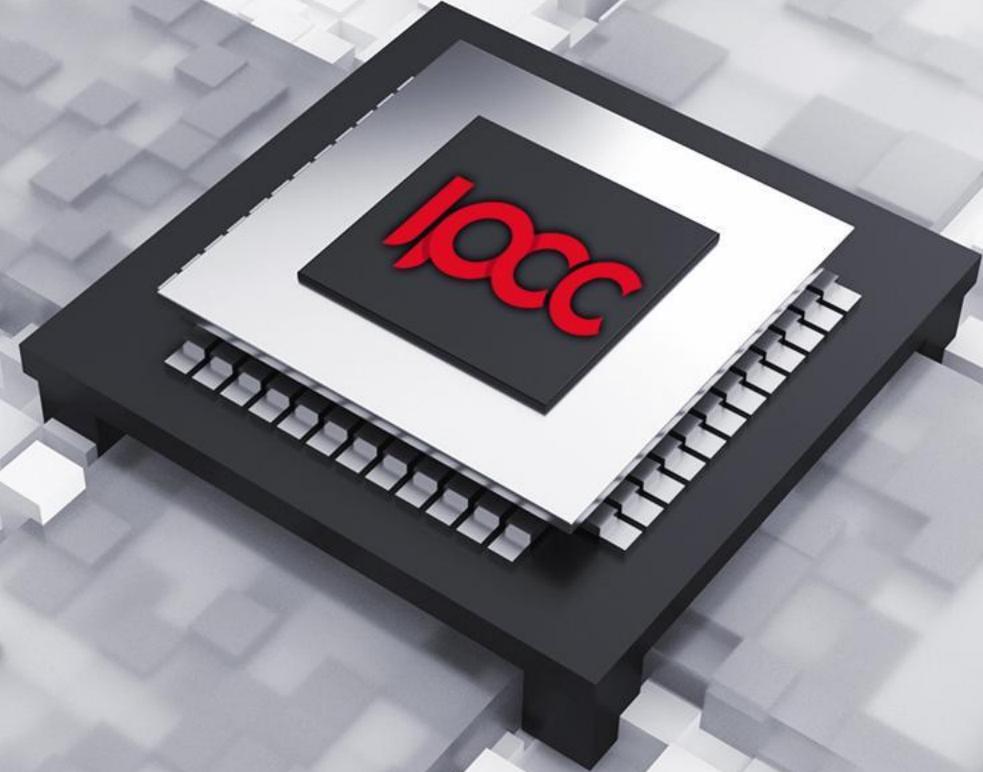


组委会联系方式

- 官网: www.paraedu.org.cn
- 邮箱: ACM_IPCC@163.com
- 电话: 18310726311 (余老师)
- 微信公众号:
 - 北京超级云计算中心(BJBLSC)
- 交流群:
 - 1046805935 (参赛选手)
 - 1095416620 (指导老师)



jpcc



Thanks!

ACM 中国-国际并行挑战赛-赛前讲座2022

下期预告：现代处理器优化概论

不要走开，精彩继续~