

Ciência de Dados e Alto Desempenho

Lucas Mello Schnorr
Instituto de Informática, UFRGS

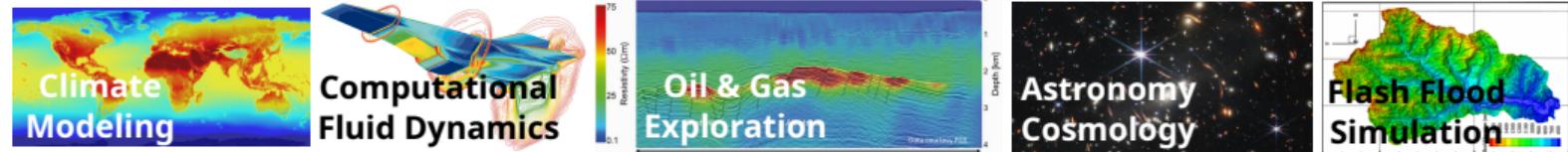
– Café com Pesquisa do PPGC –
PPGC/UFRGS, Porto Alegre, Brasil
25 de janeiro de 2024, 13h



O maior supercomputador do mundo (de acordo com Top500 em 11/2023)

Processamento de Alto Desempenho (PAD) – *High-Performance Computing* (HPC)

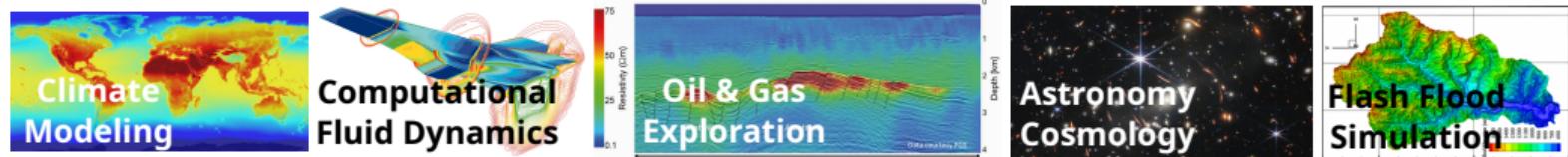
Área da computação que emprega computadores para resolver problemas grandes



O maior supercomputador do mundo (de acordo com Top500 em 11/2023)

Processamento de Alto Desempenho (PAD) – *High-Performance Computing* (HPC)

Área da computação que emprega computadores para resolver problemas grandes



Supercomputador *Frontier*
(Oak Ridge National Laboratory, USA)

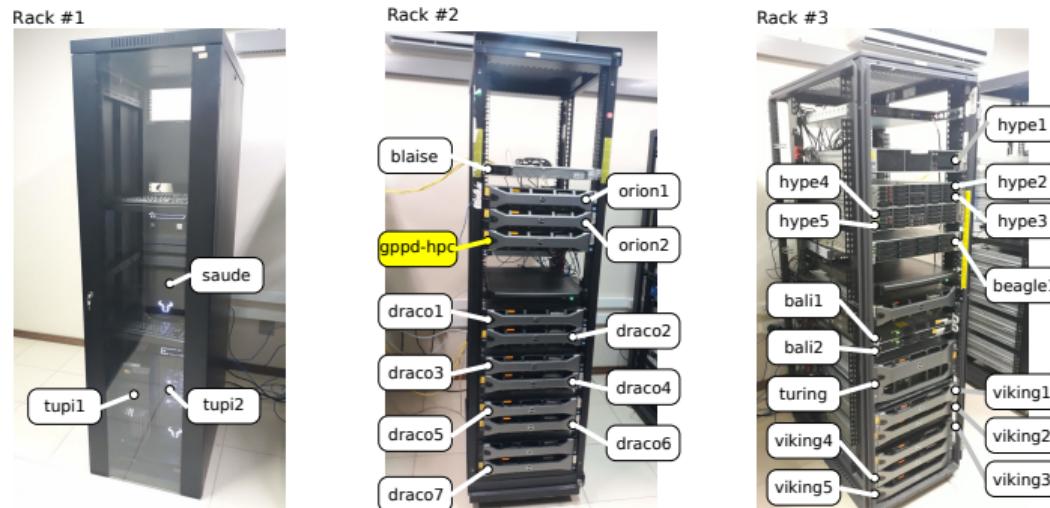
- Custo estimado → 600M USD (fonte, \approx 33% LOA2023 de POA)
- Power → 22.7 MW (\approx 15% da UH Passo Real)
- 1.194 exaFLOPS (operações em ponto-flutuante por segundo)
 - 9472 AMD Epyc 7A53s "Trento" 64 core 2 GHz CPUs
 - 37,888 Radeon Instinct MI250X GPUs
- 74 racks, cada um com 64 *blades*, cada blade com 2 nós
 - 1 nó: 1 CPU (4 TBytes), 4 GPUs (cada uma com 128 GBytes)
 - Todos os nós computacionais são iguais (recursos homogêneos)



Parque Computacional de Alto Desempenho (PCAD) @ INF/UFRGS

Site: <https://gppd-hpc.inf.ufrgs.br/>

Possui aproximadamente 40 nós: 1000+ núcleos de CPU e 100.000+ de GPU



Temos um Grupo de Trabalho (GT) → Formamos alunos no gerenciamento da plataforma

- **gt-cluster-l@inf.ufrgs.br** (para mais informações)

Inúmeros desafios para empregar eficientemente estas máquinas



(1) Pensamento computacional paralelo

<https://doi.org/10.5753/sbc.13058.5>

Cap 3: Pensamento Computacional Paralelo: Desafios do Presente e do Futuro

- INF01008 (Prog. Distr. e Par.) e PPGC/CMP270 (Intr. HPC)

Inúmeros desafios para empregar eficientemente estas máquinas



(1) Pensamento computacional paralelo

<https://doi.org/10.5753/sbc.13058.5>

Cap 3: Pensamento Computacional Paralelo: Desafios do Presente e do Futuro

- INF01008 (Prog. Distr. e Par.) e PPGC/CMP270 (Intr. HPC)

(2) Escolha do modelo de programação paralela adequado

- Tradicional: MPI/OpenMP/CUDA
- Modelos mais abstratos baseado em grafo de tarefas
(OpenMP Tasks, StarPU, ...)

Inúmeros desafios para empregar eficientemente estas máquinas



(1) Pensamento computacional paralelo

<https://doi.org/10.5753/sbc.13058.5>

Cap 3: Pensamento Computacional Paralelo: Desafios do Presente e do Futuro

- INF01008 (Prog. Distr. e Par.) e PPGC/CMP270 (Intr. HPC)

(2) Escolha do modelo de programação paralela adequado

- Tradicional: MPI/OpenMP/CUDA
- Modelos mais abstratos baseado em grafo de tarefas
(OpenMP Tasks, StarPU, ...)

(3) Balanceamento/escalonamento de carga computacional

- Dividir corretamente a carga de trabalho
- Mais complexo em máquinas heterogêneas

Inúmeros desafios para empregar eficientemente estas máquinas



(1) Pensamento computacional paralelo

<https://doi.org/10.5753/sbc.13058.5>

Cap 3: Pensamento Computacional Paralelo: Desafios do Presente e do Futuro

- INF01008 (Prog. Distr. e Par.) e PPGC/CMP270 (Intr. HPC)

(2) Escolha do modelo de programação paralela adequado

- Tradicional: MPI/OpenMP/CUDA
- Modelos mais abstratos baseado em grafo de tarefas
(OpenMP Tasks, StarPU, ...)

(3) Balanceamento/escalonamento de carga computacional

- Dividir corretamente a carga de trabalho
- Mais complexo em máquinas heterogêneas

Reflexão importante quando em produção

Estou usando adequadamente? Será que poderia ser melhor?

Inúmeros desafios para empregar eficientemente estas máquinas



(1) Pensamento computacional paralelo

<https://doi.org/10.5753/sbc.13058.5>

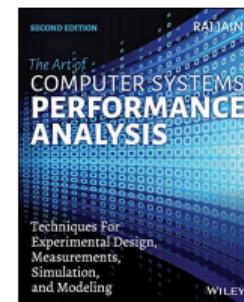
Cap 3: Pensamento Computacional Paralelo: Desafios do Presente e do Futuro

- INF01008 (Prog. Distr. e Par.) e PPGC/CMP270 (Intr. HPC)

(2) Escolha do modelo de programação paralela adequado

- Tradicional: MPI/OpenMP/CUDA
- Modelos mais abstratos baseado em grafo de tarefas
(OpenMP Tasks, StarPU, ...)

Análise de desempenho



(3) Balanceamento/escalonamento de carga computacional

- Dividir corretamente a carga de trabalho
- Mais complexo em máquinas heterogêneas

Reflexão importante quando em produção

Estou usando adequadamente? Será que poderia ser melhor?

PPGC/CMP223
(Comp. Syst. Perf. Analysis)

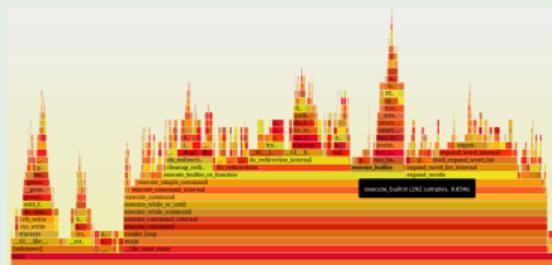
Observação do comportamento de aplicações paralelas

Existem basicamente duas técnicas

Profiling

Perfilamento periódico

- Fornece uma visão geral com baixo custo



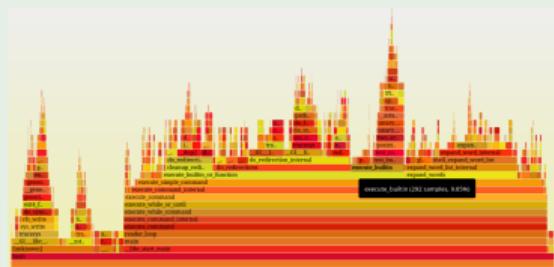
Observação do comportamento de aplicações paralelas

Existem basicamente duas técnicas

Profiling

Perfilamento periódico

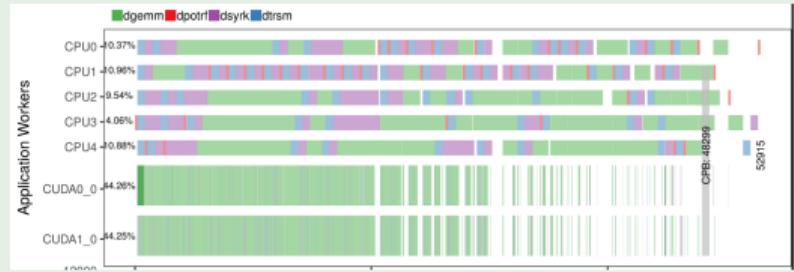
- Fornece uma visão geral com baixo custo



Tracing

Rastreamento de eventos importantes

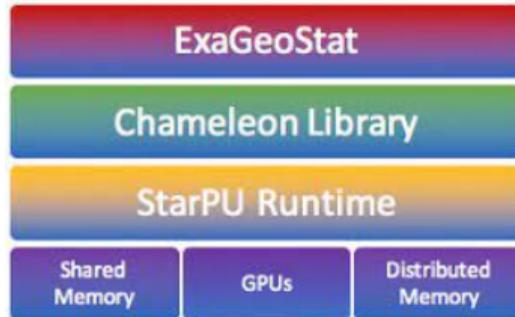
- Habilita reconstruir comportamento



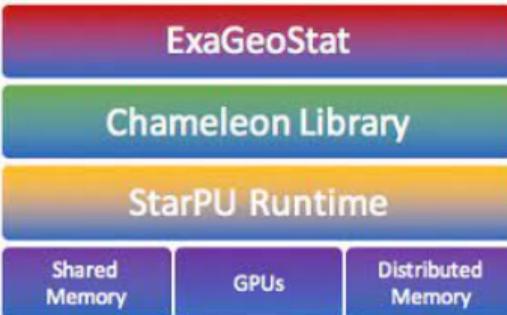
Um exemplo do grande volume de dados (*Big Data*)

Aplicação ExaGeoStat - Modelagem de dados geoestatísticos

- <https://github.com/ecrc/exageostat>



Um exemplo do grande volume de dados (*Big Data*)



Aplicação ExaGeoStat - Modelagem de dados geoestatísticos

- <https://github.com/ecrc/exageostat>

Cuidadosamente configurando o rastreamento para um determinada entrada

- 500MBytes por nó computacional a cada 3 iterações
- Uma execução completa tem aproximadamente 180 iterações
 - Usando 128 nós do Supercomputador SDumont: $\approx 4\text{Tbytes}$ de dados

Como analisar esses dados?

- A aplicação se comportou adequadamente?
- Foi eficiente no uso dos recursos?

Ciência de dados para análise de aplicações paralelas

Python

Python for Data Analysis, 3E
<https://wesmckinney.com/book/>



R

R for Data Science, 2E \approx tidyverse
<https://r4ds.hadley.nz/>



Ciência de dados para análise de aplicações paralelas

Python

Python for Data Analysis, 3E
<https://wesmckinney.com/book/>



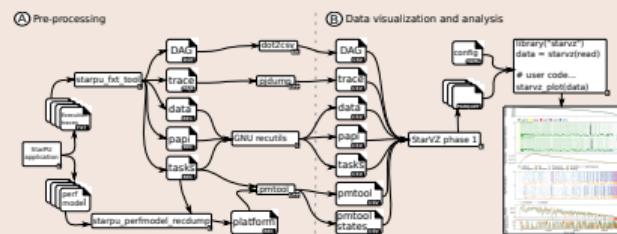
R

R for Data Science, 2E \approx tidyverse
<https://r4ds.hadley.nz/>



starvz: R-Based Visualization Techniques for Task-Based Applications

- (dev) <https://github.com/schnorr/starvz> | (release) <https://CRAN.R-project.org/package=starvz>
- Visualização de dados focada na semântica da aplicação paralela

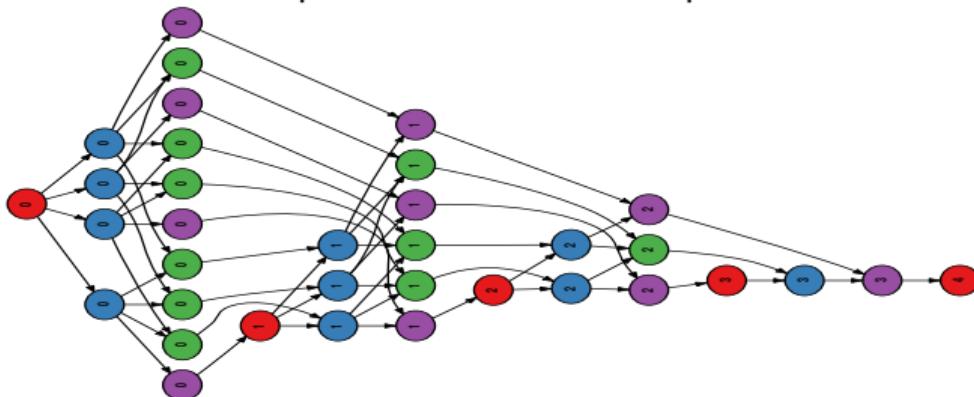


Visualização do comportamento da aplicação paralela (Exemplo)

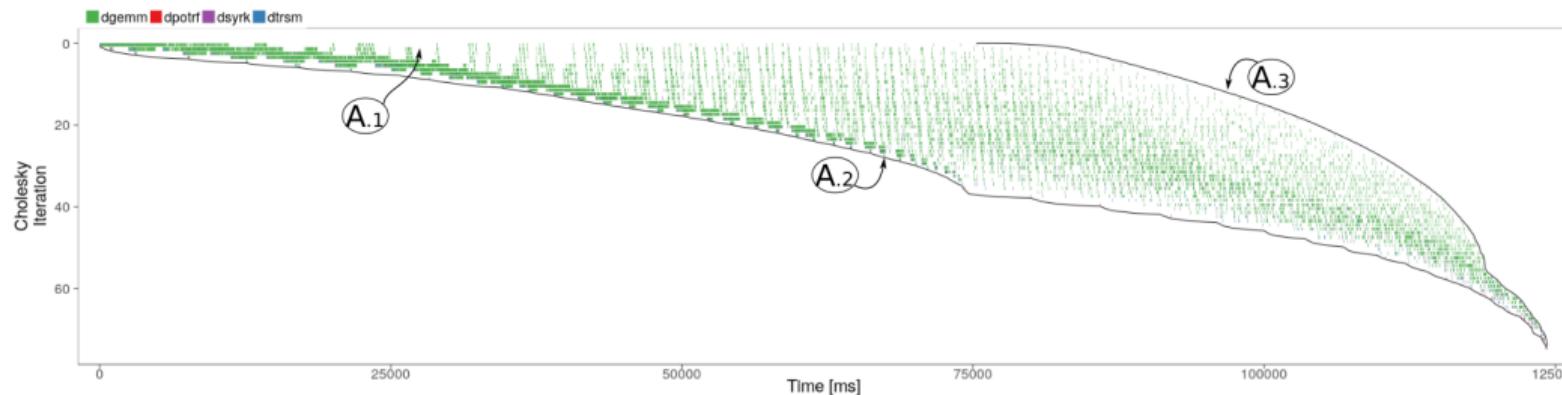
Fatoração Cholesky por blocos

```
for (k = 0; k < N; k++) {  
    DPOTRF(RW, A[k][k]);  
    for (i = k+1; i < N; i++)  
        DTRSM(RW, A[i][k], R, A[k][k]);  
    for (i = k+1; i < N; i++) {  
        DSYRK(RW, A[i][i], R, A[i][k]);  
        for (j = k+1; j < i; j++)  
            DGEMM(RW, A[i][j], R, A[i][k],  
                   R, A[j][k]);  
    }  
}
```

Grafo de tarefas que será escalonado na plataforma



Empregando StarVZ



Linhas de Pesquisa e Contato

Computação de Alto Desempenho e Sistemas Distribuídos

Área de Concentração: Sistemas de Computação → Arthur Francisco Lorenzon, Claudio Fernando Resin Geyer, **Lucas Mello Schnorr**, Philippe Olivier Alexandre Navaux

Mineração, Integração e Análise de Dados

Área de Concentração: Ciência de Dados e Engenharia de Software → João Luiz Dihl Comba, Jose Palazzo Moreira De Oliveira, Joel Luis Carbonera, Karin Becker, **Lucas Mello Schnorr**, Mara Abel, Mariana Recamonde Mendoza, Renata De Matos Galante, Viviane Pereira Moreira

Linhas de Pesquisa e Contato

Computação de Alto Desempenho e Sistemas Distribuídos

Área de Concentração: Sistemas de Computação → Arthur Francisco Lorenzon, Claudio Fernando Resin Geyer, **Lucas Mello Schnorr**, Philippe Olivier Alexandre Navaux

Mineração, Integração e Análise de Dados

Área de Concentração: Ciência de Dados e Engenharia de Software → João Luiz Dihl Comba, Jose Palazzo Moreira De Oliveira, Joel Luis Carbonera, Karin Becker, **Lucas Mello Schnorr**, Mara Abel, Mariana Recamonde Mendoza, Renata De Matos Galante, Viviane Pereira Moreira

Obrigado pela atenção!

schnorr@inf.ufrgs.br

