

# **Суперкомпьютерные вычислительные технологии.**

Лекционно-практический курс  
для студентов 5 курса факультета ВМиК МГУ  
сентябрь – декабрь 2012 г.

Лекция 1  
6 сентября 2013 г.

**Н.Н. Попова**

доцент кафедры АСВК

[popova@cs.msu.su](mailto:popova@cs.msu.su)



# План лекции

- Учебный план курса
- Обзор технологий ПП, необходимых для выполнения заданий
- Архитектура ВС pSeries 690 Regatta
- Requirements, Challenges, and Progress towards Exascale Computing

(по материалам лекции проф. Т.Стирлинга на летней суперкомпьютерной академии)

[http://academy.hpcrussia.ru/academy\\_materials](http://academy.hpcrussia.ru/academy_materials)

# Учебный план

Лекции, семинары, выполнение практических заданий

- Итоговая оценка: зачет
- Форма отчетности: отчет в электронном виде.
- Лекции - Обзор суперкомпьютерных систем и программных технологий.
- Семинарские занятия  
с 16 сентября 2013 г.
- Выполнение практических заданий на высокопроизводительных системах:
  - IBM pSeries 690 Регатта ([www.regatta.cs.msu.su](http://www.regatta.cs.msu.su))
  - IBM BlueGene/P ([hpc.cmc.msu.ru](http://hpc.cmc.msu.ru))
  - «Ломоносов»  
(<http://parallel.ru/cluster/lomonosov.html>)

# Информационные ресурсы курса

- Методические материалы, инструкции:  
<http://angel.cs.msu.su/~popova>

# Содержание курса

- Лекции - **Обзор суперкомпьютерных систем и технологий параллельного программирования.:**
  - архитектура и ПО ВС Регатта и BlueGene/P
  - архитектура и программное обеспечение суперкомпьютера «Ломоносов»
  - параллельное программирование для систем с общей памятью: технология OpenMP
  - параллельное программирование для многопроцессорных систем с распределенной памятью: технология MPI
  - гибридное MPI/OpenMP программирование

**Семинарские занятия - обсуждение и сдача практических заданий**

- см. расписание

Тема базовых заданий:  
«Исследование эффективности параллельных  
алгоритмов решения задачи Дирихле для уравнения  
Лапласа»

- Реализации:
  - OpenMP, система Regatta
  - MPI, система Regatta
  - Гибридный MPI+OpenMP Blue Gene/P, MPI «Ломоносов»
- Сроки сдачи заданий и правила оформления отчетов будут уточнены

# Задание 1. Исследование эффективности решения задачи Дирихле для уравнения Лапласа. OpenMP-реализация

- Задача Дирихле для уравнения Лапласа (1).

$$\begin{cases} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} = 0, (x, y, z) \in D, \\ u(x, y, z) = g(x, y, z), (x, y, z) \in D^0, \end{cases} \quad (1)$$

где  $u(x, y, z)$  - функция, удовлетворяющая в области  $D$  уравнению Лапласа и принимающая на границе  $D^0$  области  $D$  значения  $g(x, y, z)$ .

Подобная модель может применяться для описания установившегося течения жидкости, стационарных тепловых полей, процессов теплопередачи с внутренними источниками тепла и деформации упругих пластин.

# Постановка задачи.

## Разностная схема.

- Численный подход к решению задачи (1) основан на замене производных соответствующими конечными разностями (2).

$$\frac{u_{i+1,j,k} - 2u_{i,j,k} + u_{i-1,j,k}}{h^2} + \frac{u_{i,j+1,k} - 2u_{i,j,k} + u_{i,j-1,k}}{h^2} + \frac{u_{i,j,k+1} - 2u_{i,j,k} + u_{i,j,k-1}}{h^2} = 0, \quad (2)$$

где  $h \geq 0$  - шаг сетки,  $u_{i,j,k}$  - значение функции  $u(x, y, z)$  в точке  $x = x_i = ih, i = \overline{0, M+1}, y = y_j = jh, j = \overline{0, N+1}, z = z_k = kh, k = \overline{0, L+1}$ , где  $M, N, L$  - количество внутренних узлов по каждой координате в области  $D$ .



# Метод Якоби.

- Одним из простейших методов решения полученной системы (2) является итерационный метод Якоби (3).

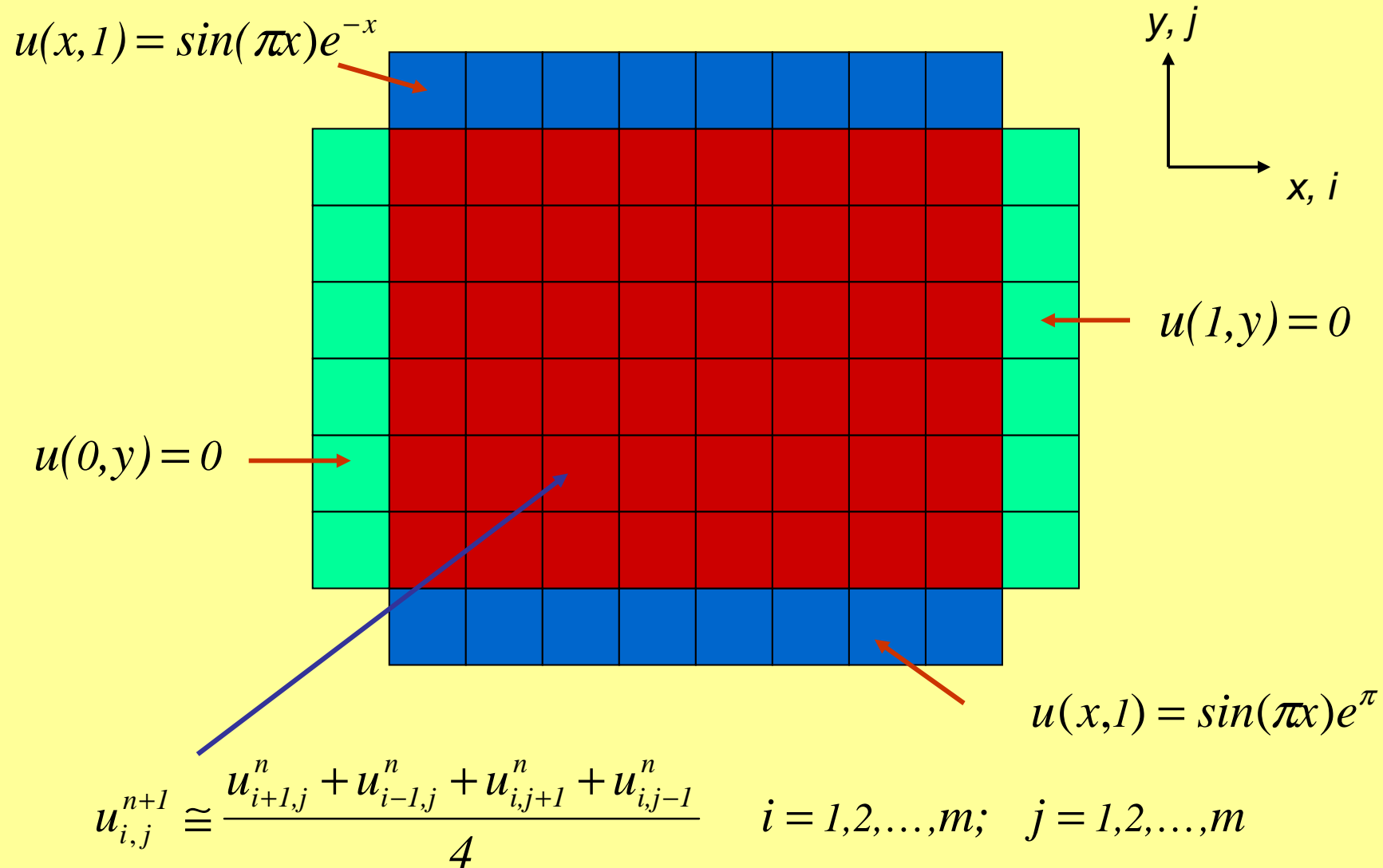
$$u_{i,j,k}^n = (u_{i-1,j,k}^{n-1} + u_{i+1,j,k}^{n-1} + u_{i,j+1,k}^{n-1} + u_{i,j-1,k}^{n-1} + u_{i,j,k+1}^{n-1} + u_{i,j,k-1}^{n-1}) / 6$$
$$u_{i,j,k}^n = g_{i,j,k}, (x, y, z) \in D^0, n=1, 2, \dots \quad (3)$$

где  $n$  - номер итерации.

# Метод Якоби – тестовая задача.

- Метод Якоби решения разностной задачи для уравнения Лапласа – это типичная **тестовая задача** в параллельном программировании. Он включает в себя общие шаблоны для большинства параллельных задач.
- Метод гарантирует однозначность результатов независимо от способа распараллеливания, но требует использования дополнительного объема памяти. Из-за медленной сходимости метода на практике ему обычно предпочитают более быстрые.



# Вычислительная область



# 5-точечный шаблон

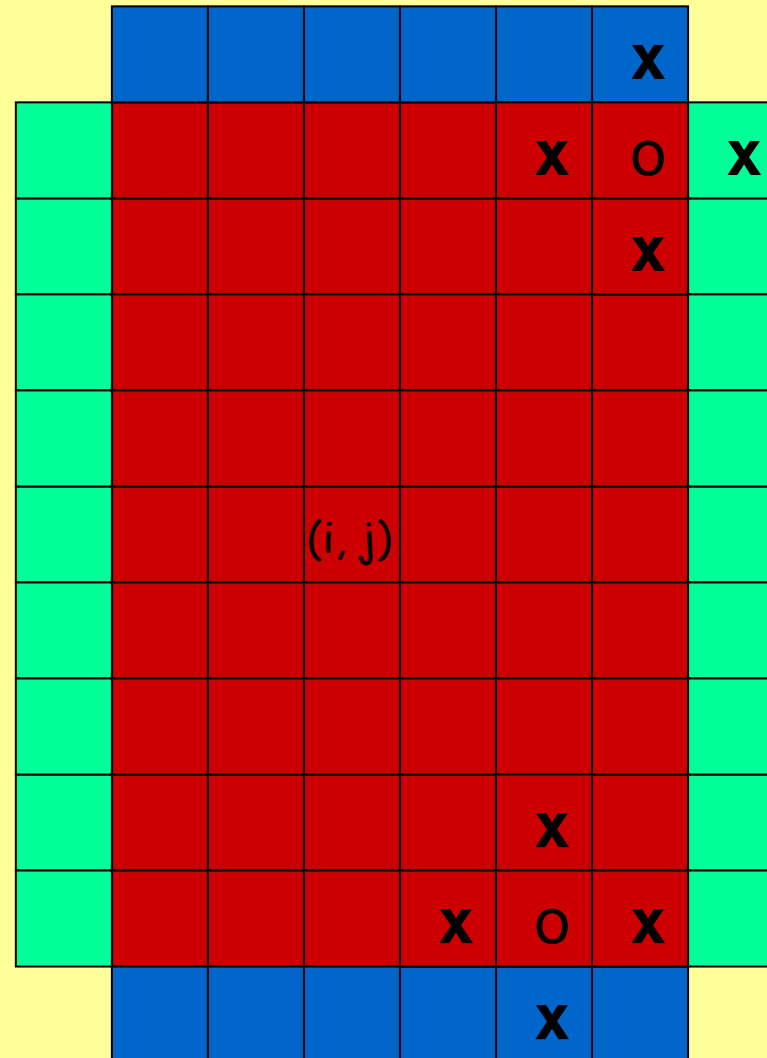
$$u_{i,j}^{n+1} \cong \frac{u_{i+1,j}^n + u_{i-1,j}^n + u_{i,j+1}^n + u_{i,j-1}^n}{4}$$

■ внутренняя область, на которой ищется решение уравнения

  граничная область.

Голубые клетки - неоднородные граничные условия,

## Зеленые - однородные



# Рекомендации по выполнению заданий

- Оптимизация программ с использование оптимизирующих возможностей компиляторов (анализ и настройка соответствующих опций компиляторов).
- Гибридное MPI/OpenMP программирование с использованием директив OpenMP в MPI-программах.
- Использование библиотечных функций (BLAS, ESSL, PESSL, MKL, Lapack)

# Исследование эффективности

- Ускорение  $S$
- Эффективность  $\eta$
- Пусть:  $T_1$  - время выполнения наилучшего последовательного алгоритма,  
 $T_n$  - время выполнения параллельной программы на  $n$  процессорах

$$S = \frac{T_1}{T_n}$$

$$\eta = \frac{T_1}{nT_n} = \frac{S}{n}$$

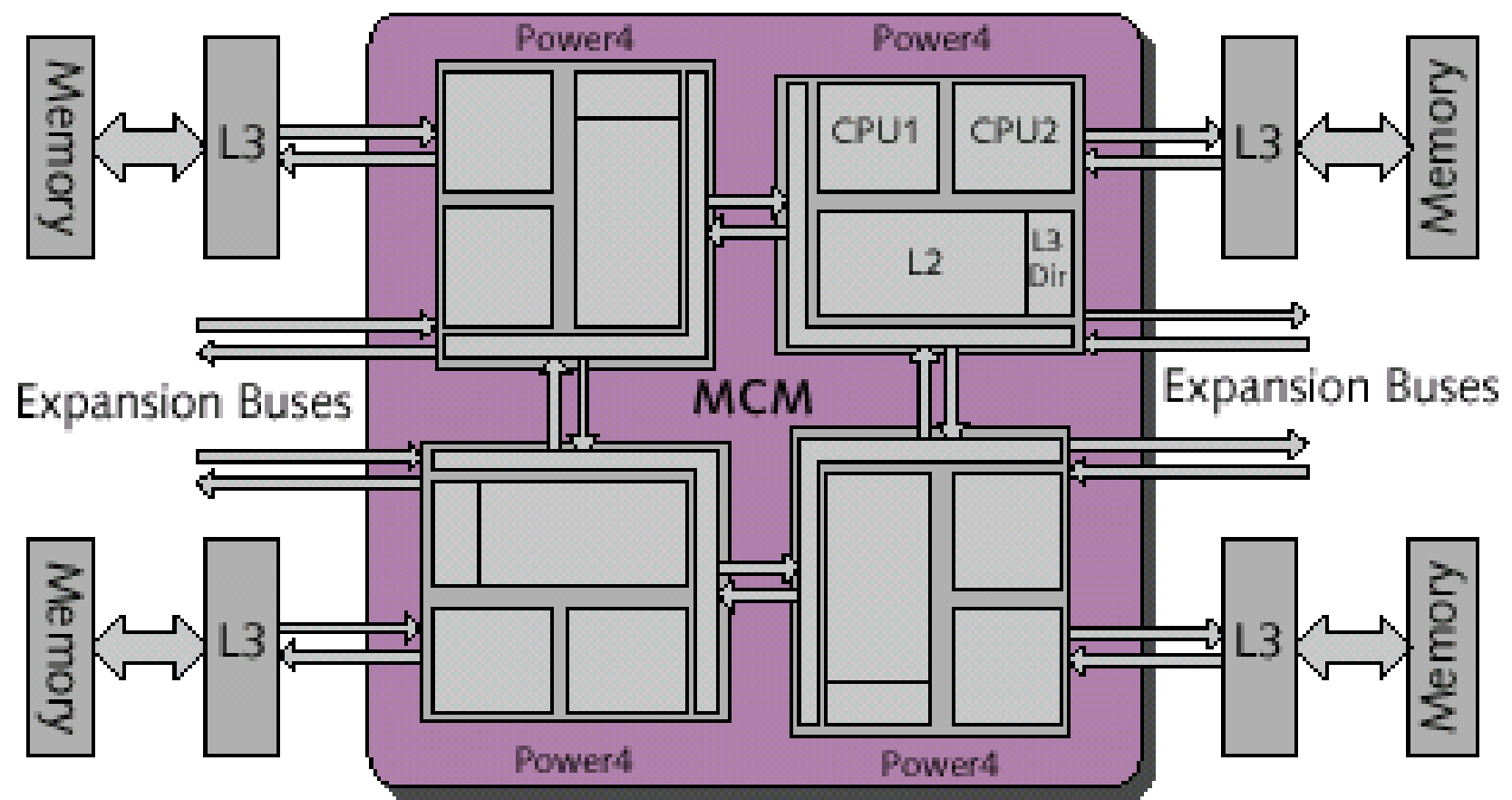
# Вычислительные системы

## IBM p-series 690 Regatta (Регатта)

- 16-процессорная SMP система
- IBM Power4 процессоры
- 1.3 GHz - тактовая частота
- 83 GFlops -максимальная производительность
- 64 Gbytes ОЗУ
- 32 KB L1 cache на процессор
- 1.41 MB L2 cache (общий для 2-ух процессор.)
- 128 MB L3 cache (общий для 8 процессоров)

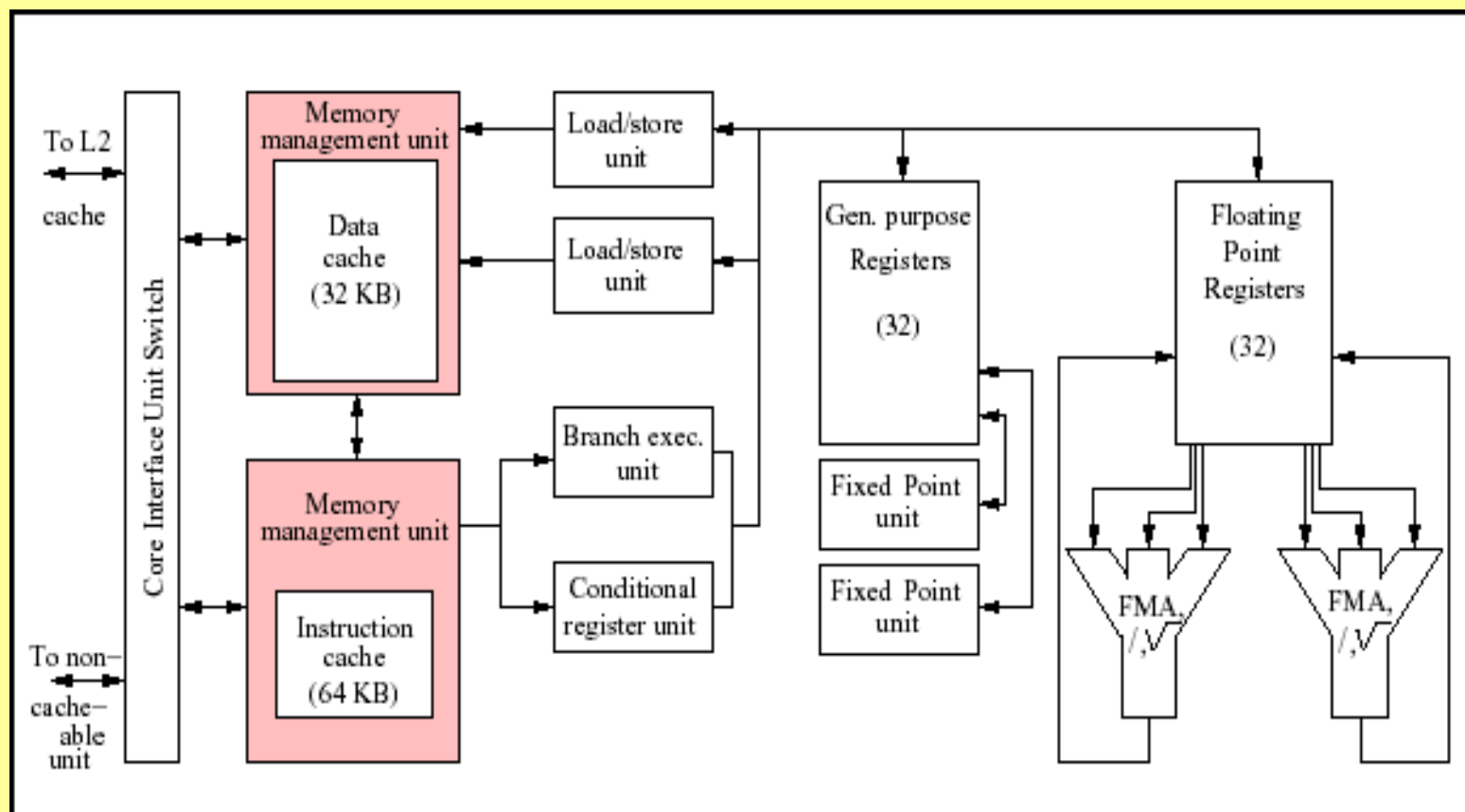


# Архитектура IBM pSeries690 Regatta



# Архитектура IBM pSeries690 Regatta.

## Процессор POWER4.



# IBM компиляторы

	Посл.	MPI	OpenMP	Mixed
Fortran 77	xlf	mpxlf	xlf_r	mpxlf_r
Fortran 90	xlf90	mpxlf90	xlf90_r	mpxlf90_r
Fortran 95	xlf95	mpxlf95	xlf95_r	mpxlf95_r
C	cc	mpcc	cc_r	mpcc_r
	xlc	mpxlc	xlc_r	mpxlc_r
C++	xlC	mpCC	xlC_r	mpCC_r

# Математическая библиотека (1)

- MASS library
  - Mathematical Acceleration SubSystem
- sqrt, rsqrt, exp, log, sin, cos, tan, atan, atan2, sinh, cosh, tanh, dnint,  $x^{**}y$

# Математическая библиотека (2)

- Опции:

C: -Imass -Im

- Ускорение:

exp	2.4
log	1.6
sin	2.2
complex atan	4.7

# LoadLeveler

- Система управления заданиями на многопользовательских системах, состоящих из нескольких вычислительных узлов
- Оптимизирует использование имеющихся вычислительных ресурсов
  - Учет приоритета задач и пользователей
  - Динамическое распределение ресурсов
  - Допускается использование разнородных вычислительных узлов
  - Используется для запуска как последовательных, так и параллельных задач
- Пользователь формулирует задания в виде командных файлов
- Поддерживает очередь заданий

## Схема выполнения заданий на системе Regatta

- Выход на удаленную систему.  
`ssh -X ivanov@regatta.cs.msu.su`
- Компиляция MPI-программы  
`mpicc -o prog prog.c`
- Компиляция OpenMP- программы  
`gcc -fopenmp -o prog prog.c`
- Постановка MPI-программы в очередь на выполнение  
`mpisubmit -w 10:00 -n 8 prog`
- Постановка OpenMP-программы в очередь на выполнение  
`ompsubmit -n <число_процессоров> -W <лимит_счетного_времени> <имя_программы> <параметры_программы>`
- Просмотр состояния очереди  
`llq`
- Удаление задания из очереди в случае необходимости  
`llcancel <id>`
- Копирование результатов на локальную машину.

## Материалы лекции

- <http://angel.cs.msu.su/~popova>
- [http://academy.hpcrussia.ru/academy\\_materials](http://academy.hpcrussia.ru/academy_materials)
- [www.ibm.com/software/awdtools/xlcpp/library/](http://www.ibm.com/software/awdtools/xlcpp/library/)
- IBM POWER4, IBM Journal of Research and Development(Vol. 46, No. 1, Jan. 2002),  
[www.research.ibm.com/journal/rd46-1.html](http://www.research.ibm.com/journal/rd46-1.html)
- [www.redbooks.ibm.com](http://www.redbooks.ibm.com)  
The POWER4 Processor.Introduction and Tuning Guide,SG24-7041-00, Nov. 2001