

Создание приложений для суперкомпьютеров

2022

План

Приложения	
Планировщик	Файловая система
Узлы суперкомпьютера	Узлы хранилища

- ▶ Модели параллельных вычислений.
- ▶ Методы извлечения параллелизма.
- ▶ Параллельные алгоритмы.

Суть программирования — в управлении сложностью.

Б. Керниган

- ▶ ассемблерные вставки = сложность
- ▶ ручная векторизация кода = сложность
- ▶ функция main на 10000 строк = сложность
- ▶ язык Си = сложность
- ▶ общее состояние = сложность

Суть программирования — в управлении сложностью.

Б. Керниган

- ▶ ассемблерные вставки = сложность
- ▶ ручная векторизация кода = сложность
- ▶ функция main на 10000 строк = сложность
- ▶ язык Си = сложность
- ▶ **общее состояние = сложность**

Как управлять общим состоянием?

Веб-приложения:

храним состояние
на клиенте, передаем
на сервер
по необходимости.

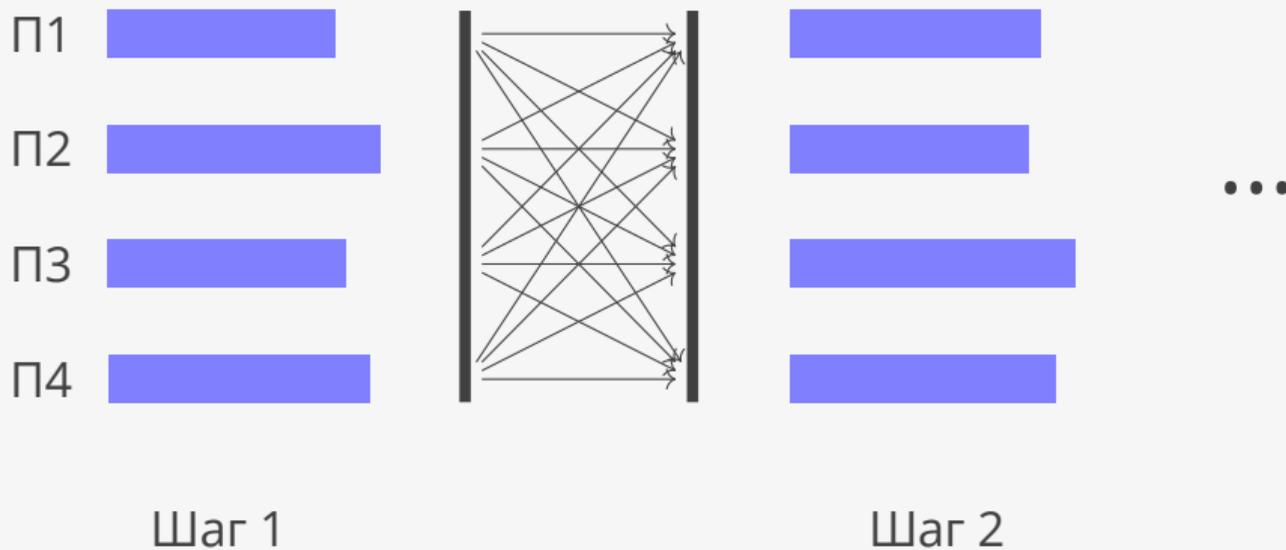
Анализ данных:

копируем состояние
на каждом шаге
обработки.

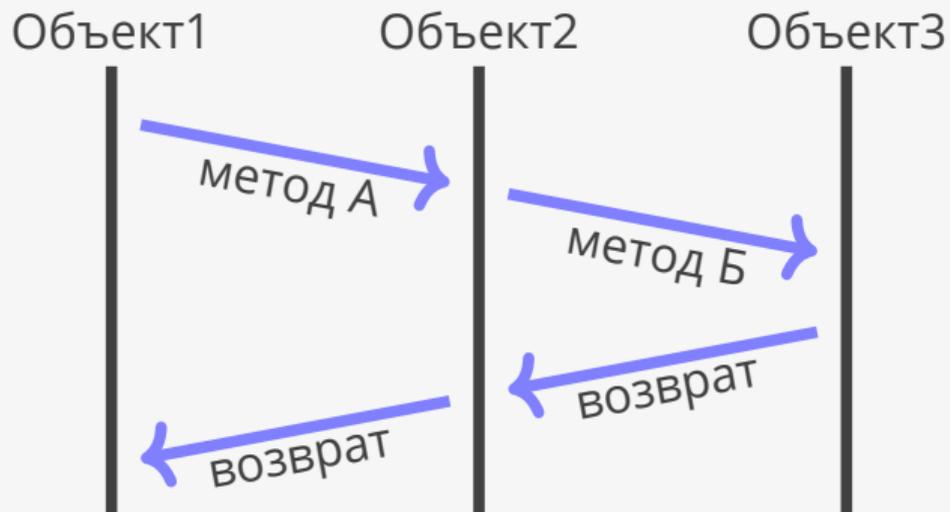
Суперкомпьютинг:

изменяем состояние
вручную.

Модель Bulk Synchronous Parallel (BSP)



Модель акторов



Модель акторов

Актор1

Актор2

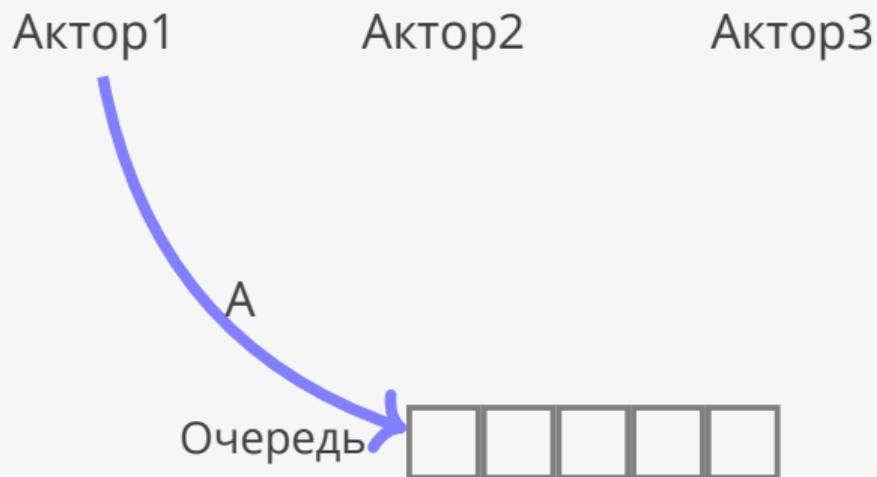
Актор3

Очередь



C. Hewitt, P. Bishop, R. Steiger "A universal modular ACTOR formalism for artificial intelligence." Proceedings of IJCAI (1973): 235-245.

Модель акторов



C. Hewitt, P. Bishop, R. Steiger "A universal modular ACTOR formalism for artificial intelligence." Proceedings of IJCAI (1973): 235-245.

Модель акторов

Актор1

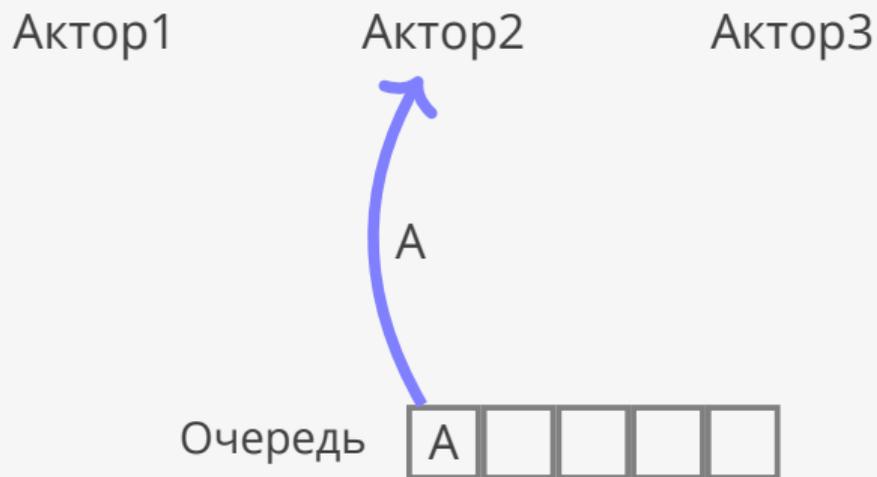
Актор2

Актор3

Очередь

A				
---	--	--	--	--

Модель акторов



C. Hewitt, P. Bishop, R. Steiger "A universal modular ACTOR formalism for artificial intelligence." Proceedings of IJCAI (1973): 235-245.

Модель акторов

Актор1

Актор2

Актор3

Очередь



Модель акторов

Актор1

Актор2

Актор3

Очередь



C. Hewitt, P. Bishop, R. Steiger "A universal modular ACTOR formalism for artificial intelligence." Proceedings of IJCAI (1973): 235-245.

Модель акторов

Актор1

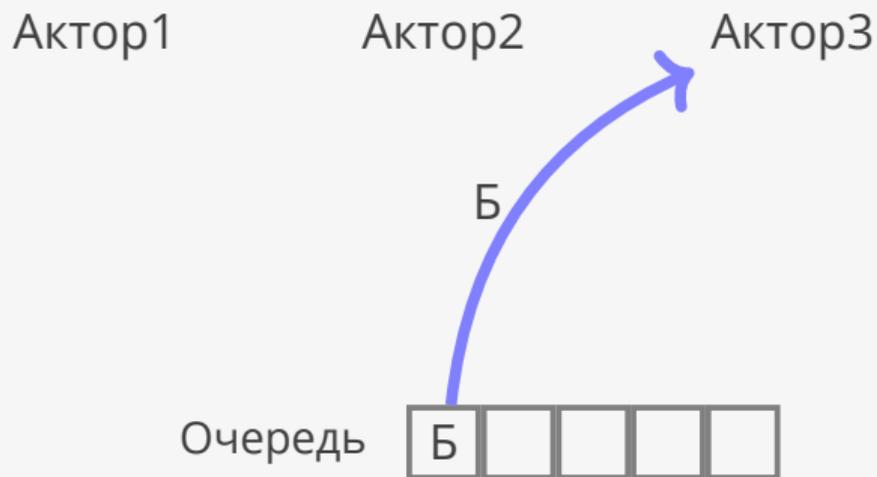
Актор2

Актор3

Очередь

Б				
---	--	--	--	--

Модель акторов



C. Hewitt, P. Bishop, R. Steiger "A universal modular ACTOR formalism for artificial intelligence." Proceedings of IJCAI (1973): 235-245.

Модель акторов

Актор1

Актор2

Актор3

Очередь



Модель акторов

Актор1

Актор2

Актор3

Очередь



C. Hewitt, P. Bishop, R. Steiger "A universal modular ACTOR formalism for artificial intelligence." Proceedings of IJCAI (1973): 235-245.

Модель акторов

Актор1

Актор2

Актор3

Очередь

Б'				
----	--	--	--	--

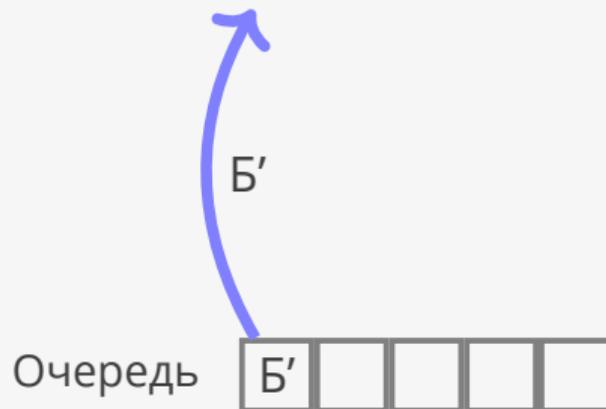
C. Hewitt, P. Bishop, R. Steiger "A universal modular ACTOR formalism for artificial intelligence." Proceedings of IJCAI (1973): 235-245.

Модель акторов

Актор1

Актор2

Актор3



C. Hewitt, P. Bishop, R. Steiger "A universal modular ACTOR formalism for artificial intelligence." Proceedings of IJCAI (1973): 235-245.

Модель акторов

Актор1

Актор2

Актор3

Очередь



Модель акторов

Актор1

Актор2

Актор3

Очередь



C. Hewitt, P. Bishop, R. Steiger "A universal modular ACTOR formalism for artificial intelligence." Proceedings of IJCAI (1973): 235-245.

Модель акторов

Актор1

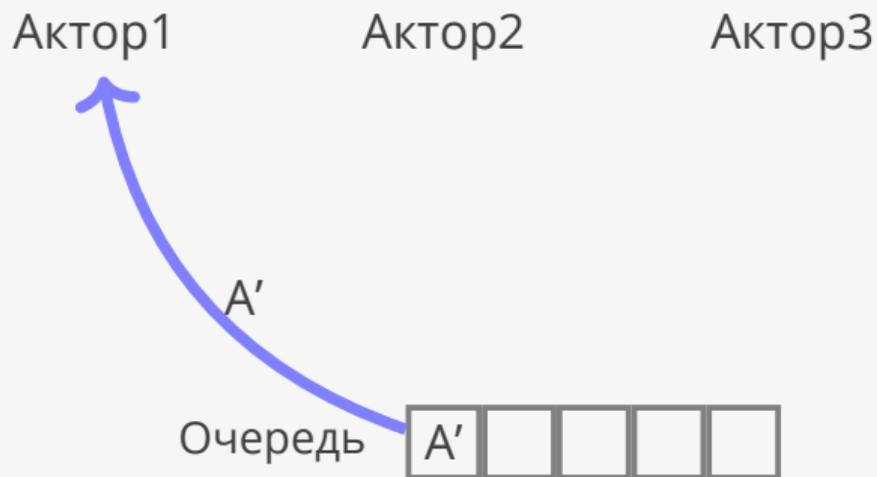
Актор2

Актор3

Очередь

A'				
----	--	--	--	--

Модель акторов



C. Hewitt, P. Bishop, R. Steiger "A universal modular ACTOR formalism for artificial intelligence." Proceedings of IJCAI (1973): 235-245.

Модель акторов

Актор1

Актор2

Актор3

Очередь



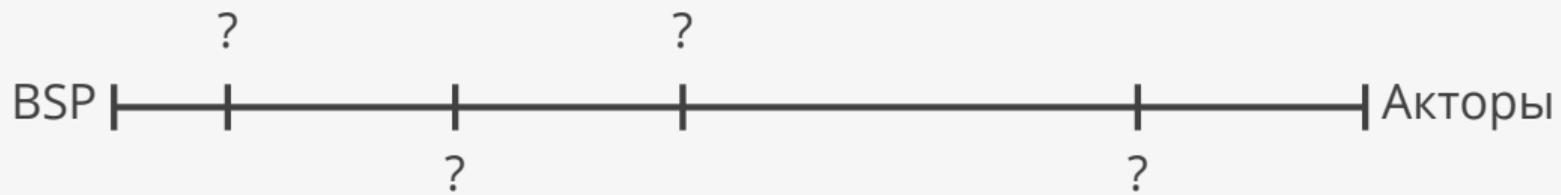
Преимущества и недостатки

Массовый параллелизм (BSP)

- ▶ Легко реализовать контрольные точки восстановления.
- ▶ Легко программировать.
- ▶ Глобальная синхронизация может быть медленной и ненужной.

Акторы

- ▶ Нет глобальной синхронизации.
- ▶ Очередь обрабатывается параллельно.
- ▶ Сложно программировать.
- ▶ Идеальна для задач со сложными информационными зависимостями.



MPI, OpenMP, OpenCL, Charm++



Параллелизм по данным

Последовательный код:

```
float interval = 2.0f;  
std::valarray<float> arr(1000);  
  
for (size_t i=0; i<arr.size(); ++i) {  
    arr[i] = bisection(-interval, interval,  
        Equation(...), eps);  
}
```

Параллельный код:

```
float interval = 2.0f;
std::valarray<float> arr(1000);
#pragma omp parallel
{
    #pragma omp for
    for (size_t i=0; i<arr.size(); ++i) {
        arr[i] = bisection(-interval, interval,
            Equation(...), eps);
    }
}
```

Динамическая балансировка нагрузки:

```
float interval = 2.0f;
std::valarray<float> arr(1000);
#pragma omp parallel
{
    #pragma omp for schedule(dynamic,1)
    for (size_t i=0; i<arr.size(); ++i) {
        arr[i] = bisection(-interval, interval,
            Equation(...), eps);
    }
}
```

Векторизация

$$p(x, y) = -g\zeta(x, y) - \frac{1}{2} (\phi_x^2 + \phi_y^2 + \phi_z^2)$$

p давление

ζ подъем поверхности

ϕ потенциал скорости

Массив структур phi:

```
const float g = 9.8f;
for (int i=0; i<nx; ++i) {
    for (int j=0; j<ny; ++j) {
        int idx = i*nx + j;
        p[idx] = -g*zeta[idx] - 0.5f*(pow2(phi[idx].x)
            + pow2(phi[idx].y) + pow2(phi[idx].z));
    }
}
```

Структура массивов phi_x, phi_y, phi_z:

```
for (int i=0; i<nx; ++i) {  
    for (int j=0; j<ny; ++j) {  
        int idx = i*nx + j;  
        phi_x[idx] = phi[idx].x;  
        phi_y[idx] = phi[idx].y;  
        phi_z[idx] = phi[idx].z;  
    }  
}
```

Новый цикл:

```
int n = nx*ny;  
for (int i=0; i<n; ++i) {  
    p[i] = -g*zeta[i] - 0.5f*(pow2(phi_x[i])  
                               + pow2(phi_y[i])  
                               + pow2(phi_z[i]));  
}
```

Новый цикл:

```
int n = nx*ny;
for (int i=0; i<n; ++i) {
    p[i] = -g*zeta[i] - 0.5f*(pow2(phi_x[i])
                               + pow2(phi_y[i])
                               + pow2(phi_z[i]));
}
```

Если p , $zeta$, phi_x , phi_y , phi_z имеют тип `std::valarray<float>`:

```
p = -g*zeta - 0.5f*(pow2(phi_x) + pow2(phi_y) + pow2(phi_z));
```

Исходная формула: $p(x, y) = -g\zeta(x, y) - \frac{1}{2} (\phi_x^2 + \phi_y^2 + \phi_z^2)$.

Выводы

- ▶ Для 80% случаев достаточно `#pragma omp parallel for`.
- ▶ Библиотеки многомерных массивов ускоряют программу за счет векторизации.
- ▶ Итераторы и большинство алгоритмов STL бесполезны для многомерных массивов.

Вихрь Мерсенна

Последовательная версия

```
unsigned long seed = ...;  
sgenrand(seed);          // инициализация генератора  
double d = genrand();    // генерация псевдо-случайного числа
```

Параллельная версия

Программа для динамического создания генераторов (DCMT):

```
init_dc();                // инициализация генератора  
mtconf = genmt(period);  // генерация Вихря Мерсенна
```

Основная программа:

```
unsigned long seed = ...;  
sgenrand(seed, mtconf);  // из программы 1  
double d = genrand();    // генерация псевдо-случайного числа
```

Особенности

- ▶ Программа DCMT последовательная, основная — параллельная.
- ▶ У параллельных генераторов меньший период.
- ▶ Последовательности чисел некоррелированы друг с другом.
- ▶ Параллелизм по данным.

Параллельная модель авторегрессии

$$\zeta_{l,m,n} = \sum_{i=0}^{n_1} \sum_{j=0}^{n_2} \sum_{k=0}^{n_3} \Phi_{i,j,k} \zeta_{l-i,m-j,n-k} + \epsilon_{l,m,n}$$

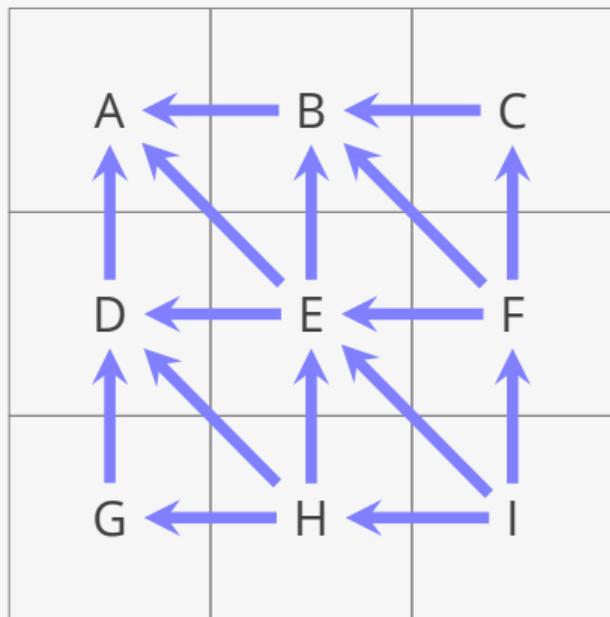
Параллельная модель авторегрессии

взволнованная поверхность

$$\zeta_{l,m,n} = \sum_{i=0}^{n_1} \sum_{j=0}^{n_2} \sum_{k=0}^{n_3} \Phi_{i,j,k} \zeta_{l-i,m-j,n-k} + \epsilon_{l,m,n}$$

коэффициенты белый шум

Информационные зависимости



Двухмерная модель

- ▶ Размер блоков ограничен сверху и снизу.
- ▶ Конвейер + параллелизм по данным.

Параллельная модель скользящего среднего

$$\zeta_{l,m,n} = \sum_{i=0}^{m_1} \sum_{j=0}^{m_2} \sum_{k=0}^{m_3} \Theta_{i,j,k} \epsilon_{l-i,m-j,n-k}$$

Параллельная модель скользящего среднего

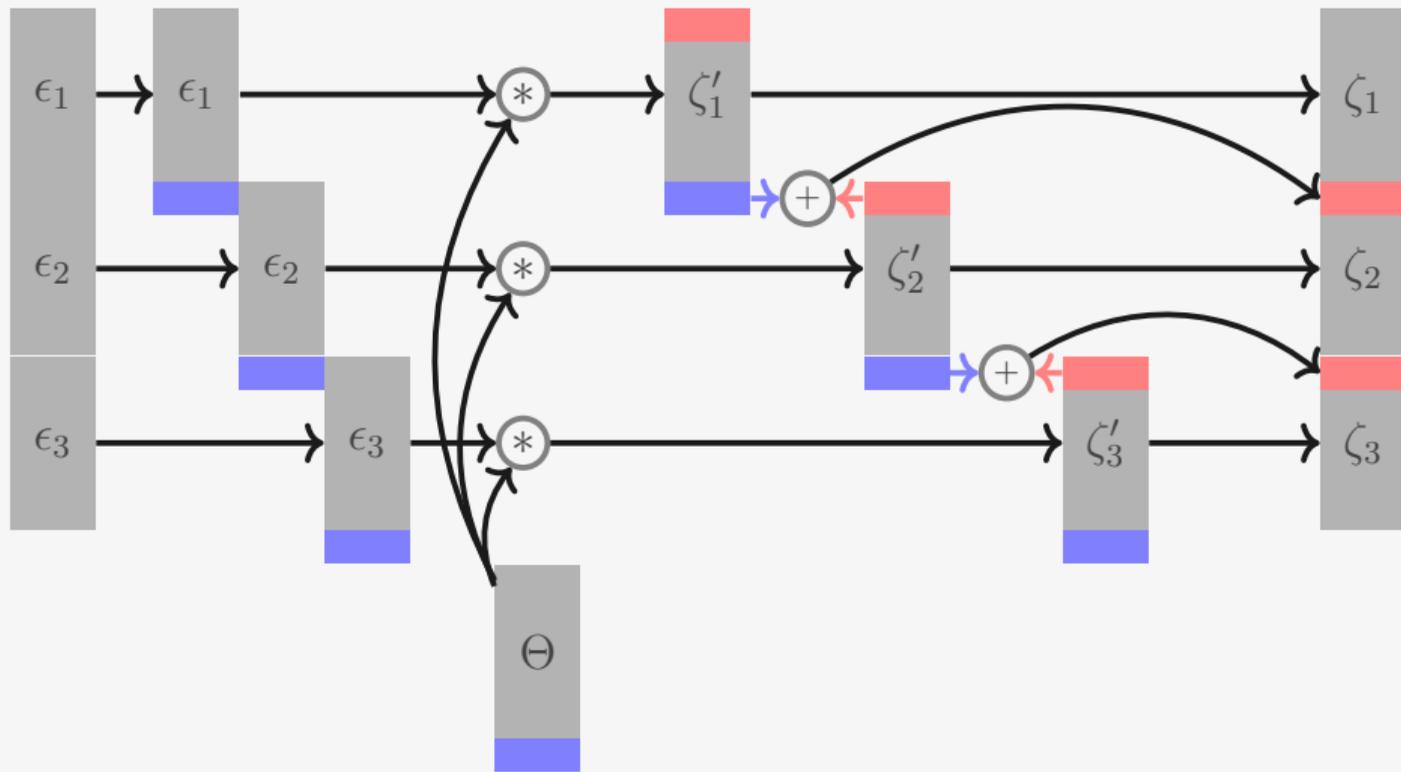
коэффициенты

$$\zeta_{l,m,n} = \sum_{i=0}^{m_1} \sum_{j=0}^{m_2} \sum_{k=0}^{m_3} \Theta_{i,j,k} \epsilon_{l-i,m-j,n-k}$$

взволнованная поверхность белый шум

Перепишем модель в виде свертки и воспользуемся одноименной теоремой:

$$\begin{aligned}\zeta_{l,m,n} &= \sum_{i=0}^{m_1} \sum_{j=0}^{m_2} \sum_{k=0}^{m_3} \Theta_{i,j,k} \epsilon_{l-i,m-j,n-k} \\ &= \Theta * \epsilon \\ &= \mathcal{F}^{-1}\{\mathcal{F}\{\Theta\} \mathcal{F}\{\epsilon\}\}\end{aligned}$$



Karas Pavel, David Svoboda.
 "Algorithms for efficient computation of convolution."
 Design and Architectures for Digital Signal Processing. InTech, 2013.

Особенности

- ▶ Очень много уровней параллелизма.
- ▶ Размер блоков ограничен сверху и снизу.
- ▶ Конвейер + параллелизм по данным + векторизация.
- ▶ Идеален для видеокарты.

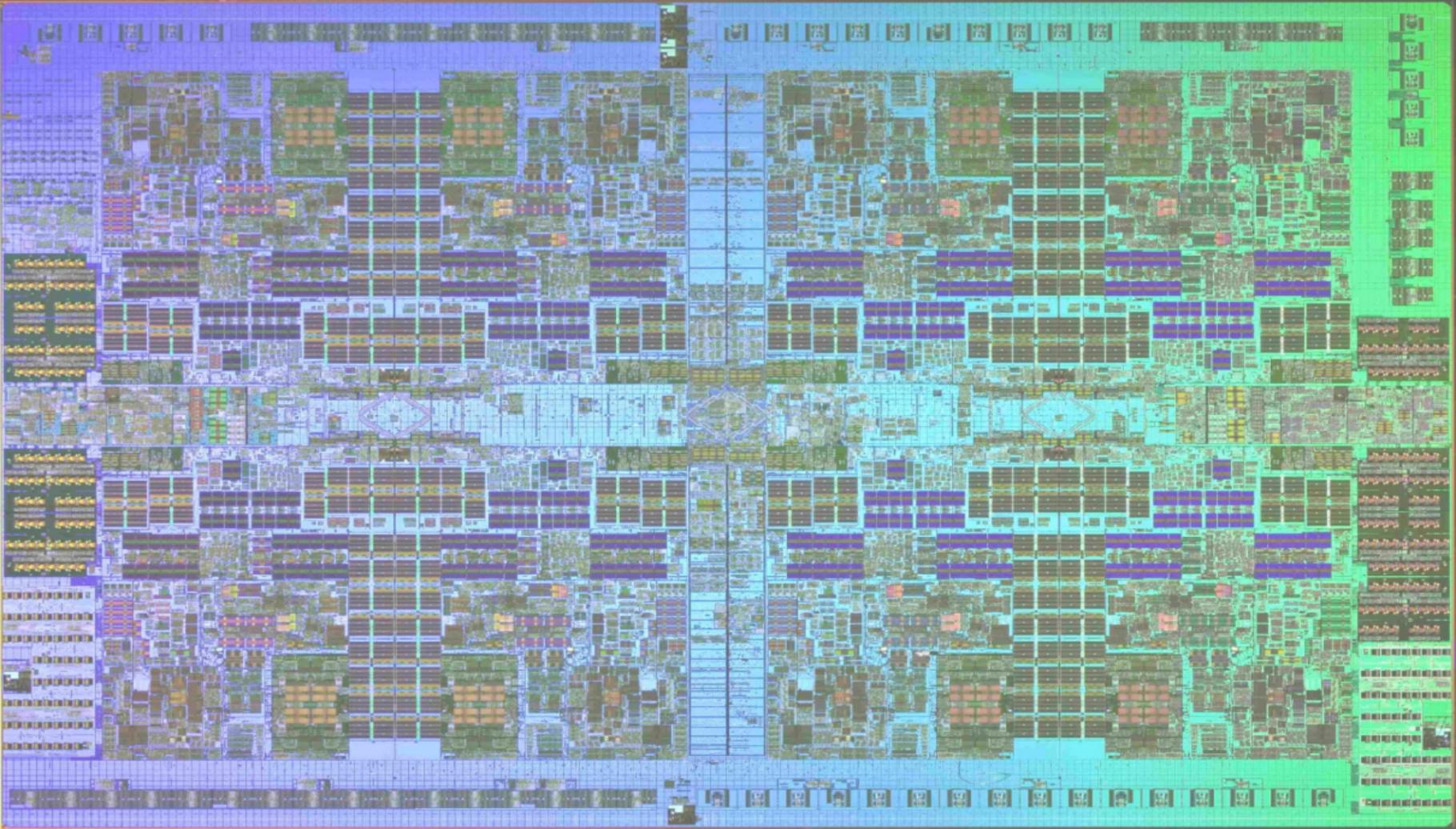
«Алгоритм» ускорения программы

Пока программа не достаточно ускорена

- ▶ найти часть, занимающую большую часть времени (hot spot),
- ▶ найти параллелизм по операциям и переписать через конвейер,
- ▶ найти параллелизм по данным и переписать, используя потоки,
- ▶ векторизовать оставшиеся куски кода.

Ссылки

- ▶ R. Fielding Architectural Styles and the Design of Network-based Software Architectures, PhD, 2000.
- ▶ Makoto Matsumoto, Takuji Nishimura. Mersenne Twister: a 623-dimensionally equidistributed uniform pseudo-random number generator, ACM Transactions on Modeling and Computer Simulation 8.1 (1998): 3-30.
- ▶ Makoto Matsumoto, Takuji Nishimura. Dynamic creation of pseudorandom number generators Monte Carlo and Quasi-Monte Carlo Methods 2000 (1998): 56-69.



© 2018–2022 Ivan Gankevich i.gankevich@spbu.ru

This work is licensed under a Creative Commons Attribution-ShareAlike 4.0 International License. The copy of the license is available at <https://creativecommons.org/licenses/by-sa/4.0/>.