



Вступ до суперкомп'ютерних обчислень

А.Ю. Дорошенко
НТУУ «КПІ» & КАУ & ІПС НАНУ

Суперкомп'ютери і паралельні обчислення: що і навіщо

- Суперкомп'ютери – це обчислювальні системи *надвеликої потужності*, яка забезпечується одночасним (паралельним) виконанням програм багатьма процесорами.
- Масштабні наукові та практичні задачі, що стоять перед людством потребують великої обчислювальної потужності.
- Наприклад, 15 петабайт на рік – такий обсяг даних обробляється в експериментах з елементарними частками на прискорювачі [Large Hadron Collider](#), що належить [CERN](#).
- Приклади інших прикладних галузей:
 - Обробка та аналіз великих даних;
 - Створення нових ліків;
 - Метеорологічне прогнозування;
 - Моделювання в біоінформатиці та генній інженерії та ін.

Як оцінюється потужність (продуктивність) суперкомп'ютерів

- швидкодія -- кількість виконуваних операцій за 1 сек. (оп/сек); найбільш уживаною одиницею вимірювання швидкодії є 1 Тфлопс= 10^{12} операцій з плаваючою крапкою за 1 сек.;
- сучасний досягнутий рівень продуктивності має порядок 1 Петафлопс (10^{15});
- наступний – 1 Екзафлопс (10^{18}).

Найпотужніші комп'ютери світу

- Ще 2 роки тому США була безумовним лідером у списку TOP500 www.top500.org з 200 системами, у Китаю було 108, в Японії – 37, Німеччина мала 33, у Франції і Великобританії було по 18.
- В 50-ій редакції списку TOP500 (листопад 2017) Китай (202) вже випереджає США (143) за кількістю таких систем.
- Далі, Японія має у цьому списку 35 системи, Німеччина – 20, Франція – 18, і Великобританії – 15.

Rank	Site	System	Cores	Rmax (TFlop/s)	Rpeak (TFlop/s)	Power (kW)
1	National Supercomputing Center in Wuxi China	Sunway TaihuLight - Sunway MPP, Sunway SW26010 260C 1.45GHz, Sunway NRCPC	10,649,600	93,014.6	125,435.9	15,371
2	National Super Computer Center in Guangzhou China	Tianhe-2 (MilkyWay-2) - TH-IVB-FEP Cluster, Intel Xeon E5-2692 12C 2.200GHz, TH Express-2, Intel Xeon Phi 31S1P NUDT	3,120,000	33,862.7	54,902.4	17,808
3	DOE/SC/Oak Ridge National Laboratory United States	Titan - Cray XK7 , Opteron 6274 16C 2.200GHz, Cray Gemini interconnect, NVIDIA K20x Cray Inc.	560,640	17,590.0	27,112.5	8,209
4	DOE/NNSA/LLNL United States	Sequoia - BlueGene/Q, Power BQC 16C 1.60 GHz, Custom IBM	1,572,864	17,173.2	20,132.7	7,890

1	<u>Sunway TaihuLight - Sunway MPP, Sunway SW26010 260C 1.45GHz, Sunway, NRCPC</u> <u>National Supercomputing Center in Wuxi</u> China	10,649,600	93,014.6	125,435.9	15,371
2	<u>Tianhe-2 (MilkyWay-2) - TH-IVB-FEP Cluster, Intel Xeon E5-2692 12C 2.200GHz, TH Express-2, Intel Xeon Phi 31S1P, NUDT</u> <u>National Super Computer Center in Guangzhou</u> China	3,120,000	33,862.7	54,902.4	17,808
3	<u>Piz Daint - Cray XC50, Xeon E5-2690v3 12C 2.6GHz, Aries interconnect, NVIDIA Tesla P100, Cray Inc.</u> <u>Swiss National Supercomputing Centre (CSCS)</u> Switzerland	361,760	19,590.0	25,326.3	2,272
4	<u>Gyokou - ZettaScaler-2.2 HPC system, Xeon D-1571 16C 1.3GHz, Infiniband EDR, PEZY-SC2 700Mhz, ExaScaler</u> <u>Japan Agency for Marine-Earth Science and Technology</u> Japan	19,860,000	19,135.8	28,192.0	1,350
5	<u>Titan - Cray XK7, Opteron 6274 16C 2.200GHz, Cray Gemini interconnect, NVIDIA K20x, Cray Inc.</u> <u>DOE/SC/Oak Ridge National Laboratory</u> United States	560,640	17,590.0	27,112.5	8,209

З чого починалися суперкомп'ютери



- 1976 р. – монопроцесорна система CRAY-1, щодо якої вперше був ужитий термін «суперкомп'ютер»
- Повністю заснована на конвеєрному принципі
- Водяне охолодження

Найпопулярніші приклади застосування паралельних систем

- *Суперкомп'ютери* створюються для вирішення *суперзадач*.
- Google – пошукова система, реалізована на паралельних серверах, що об'єднували на початку сотні тисяч процесорів, здатна видавати відповіді на запити протягом долі секунди.
- Шахові програми – реалізовані на паралельних машинах (перша перемога IBM Deep Blue над чемпіоном світу Г. Каспаровим).
- Штучний інтелект – ігри, що самонавчаються, наприклад, AlphaGo.

Паралельні комп'ютери

- Головними ідеями при розпаралелюванні операцій в обчислювальних системах є ідея конвейєризації обчислень потоку даних та власне паралелізму – незалежного (і одночасного) виконання операцій на різних пристроях обчислювальної машини.
- Найбільшими класами є паралельні комп'ютери зі *спільною та розподіленою* пам'яттю.

Основні класи мультипроцесорних систем: *багатоядерні процесори*



- багатоядерні процесори (*multicore*) – основа для класів сучасних комп'ютерів широкого використання: настільних, переносних, планшетів, смартфонів і т.д.; спільна пам'ять, від 2 до 8 ядер.
- потужні робочі станції (*manycore*) – десятки ядер, спеціальні застосування

Основні класи мультипроцесорних систем: *відеографічні процесори*



- *відеографічні процесори* (GPU) – мультитядерні процесори спеціальної архітектури для обробки відеоінформації, а також для швидкого виконання програм загальноцільового призначення.

Основні класи сучасних мультимікропроцесорних систем: *кластери*

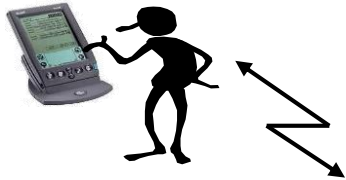


- *мультимікропроцесорний кластер* – однорідна система з мікропроцесорних вузлів з центральним керуванням;
- від сотень до десятків тисяч мультитядерних мікропроцесорних вузлів з розподіленою пам'яттю.

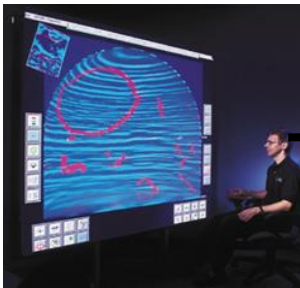


Основні класи сучасних мультипроцесорних систем: *Гріди*

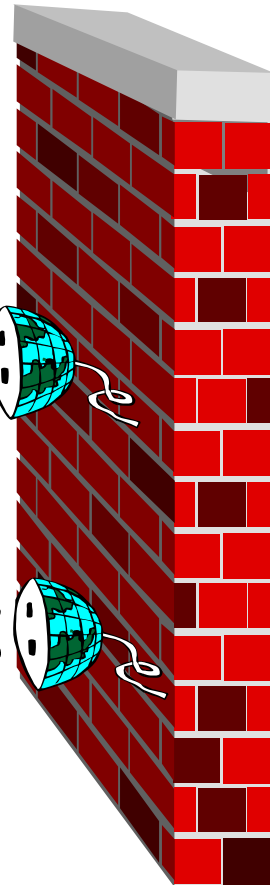
Мобільний
доступ



Робочі
станції

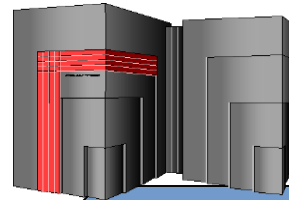


Візуалізація



Г
Р
І
Д

П
О
С
Р
Е
Д
Н
И
К



Суперкомп'ютери, кластери

Грід-сервіс – мережний програмний комплекс для вирішення складних завдань на сукупних ресурсах Грід-системи

Сховища даних, сенсори, експерименти

Автоматизація проектування Грід-сервісів – на основі використання онтологій та Інструментарію автоматизованого проектування та синтезу програм

Інтернет, мережі

Основні класи мультипроцесорних систем: “хмарні” платформи



- Новий етап “усупільнення” обчислювальних ресурсів через їх *віртуалізацію*;
- сервісно-орієнтоване використання ІТ – PaaS, SaaS, IaaS
- Приклади: Live@edu, Google Apps Education Edition



Основні класи мультипроцесорних систем: *квантові комп'ютери*

Класичний регістр

101



Квантовий регістр

000 001 010 011
100 101 110 111

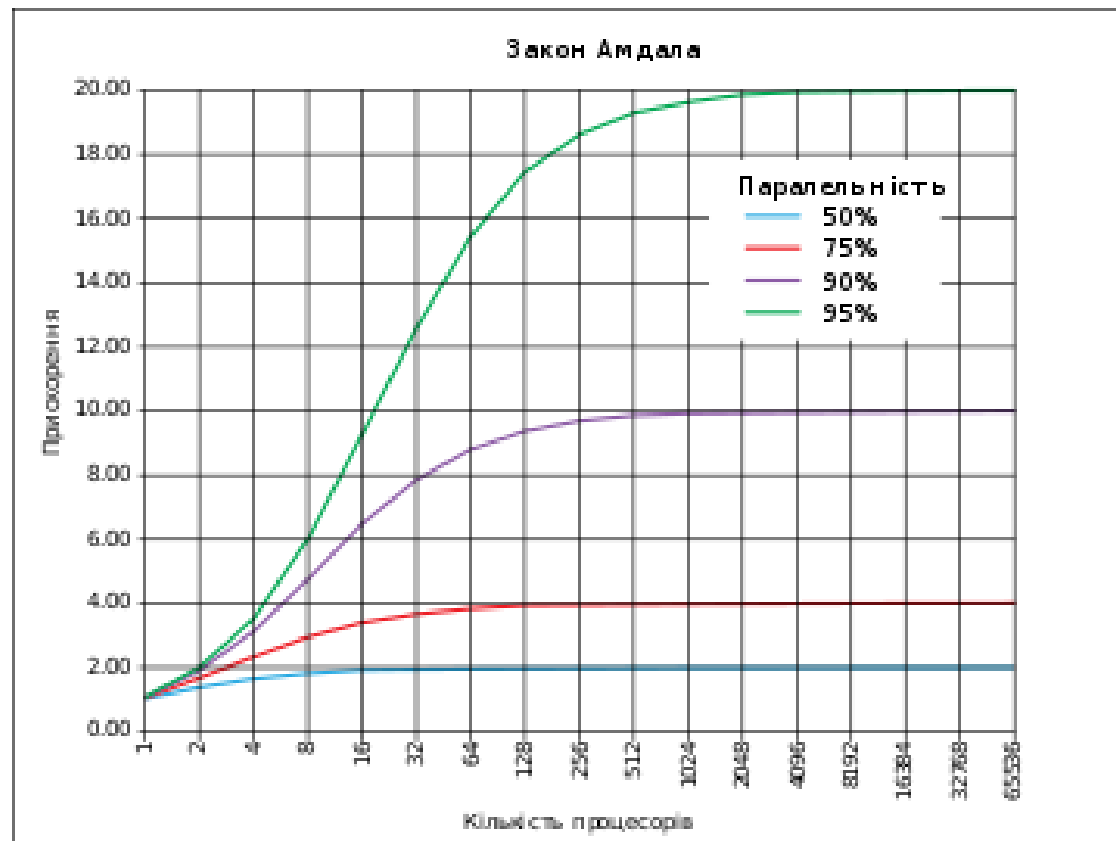
Фізичні обчислювальні пристрої, що використовує квантові біти (кубіти), які можуть знаходитися у *суперпозиції станів* («одночасно»).

- Кубіти дозволяють проводити обчислення *паралельно* з багатьма комбінаціями значень.
- Кожний доданий кубіт подвоює потужність, що означає *експоненційне зростання* потужності квантових машин.
- Існуючі зразки поки використовують невелику кількість кубітів.
- Але як тільки квантові машини наблизяться до використання 50 кубітів, навіть найбільші класичні суперкомп'ютери будуть не в змозі конкурувати.

Чи можна безмежно нарощувати потужність суперкомп'ютерів?

- Загальна відповідь – *негативна* (закон Амдала)

$$S_p < \frac{1}{x + \frac{1-x}{p}} < \frac{1}{x}, \text{ } x - \text{ частка нерозпаралелюваного коду.}$$



Основні критерії оцінки ефективності паралельних обчислень

- Для оцінки складності і ефективності паралельних обчислень використовуються абстрактні моделі *RAM і PRAM*;
- T_1 - час виконання на одному процесорі (ядрі);
- T_p - час виконання на одному процесорі (ядрі);
- $s_p = \frac{T_1}{T_p} \leq p$ - мультипроцесорне прискорення;
- $e_p = \frac{s_p}{p} \leq 1$ - коефіцієнт ефективності;

Обмеження традиційних моделей

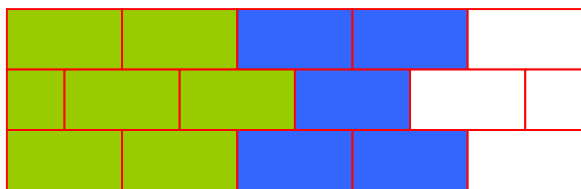
- Традиційні моделі складності і продуктивності паралельних обчислень (RAM або PRAM) мають характер *статичної парадигми*. Зокрема:
 - 1) *вхідні дані* обчислень вважаються *зарані визначеними і незмінними* як за обсягом, так і за значенням;
 - 2) *обсяг обчислень* також вважається незмінним і *визначається зарані сукупністю операцій алгоритму*, виконання яких необхідно для досягнення результату;
 - 3) на час виконання операцій паралельного алгоритму *не накладається ніяких часових обмежень*, а важливий тільки факт їх завершення.
- Ці обмеження є, з одного боку, *спрощують аналіз* таких моделей на предмет їх складності і продуктивності обчислень. А з іншого – вони є *принциповими обмеженнями*, що звужують клас паралельних алгоритмів, які використовуються в системах високопродуктивних обчислень для вирішення реальних задач.

Більш реалістичні і досконаліші моделі паралельних обчислень

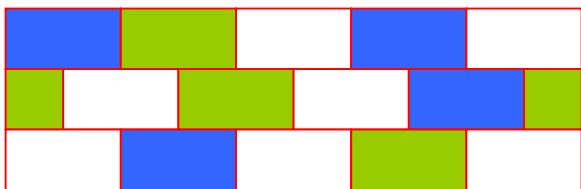
- *RAM і PRAM* – занадто прості і абстрактні моделі для вивчення ефективності обчислень через 1-рівневу пам'ять.
- Розробка ефективних паралельних програм потребує досконаліших моделей з більш *реалістичними припущеннями*.
- Розширена модель *PRAM** вводить додатковий рівень *локальної* пам'яті (як абстракцію кеша), що має набагато менший час доступу.

Як програмуються паралельні обчислення – парадигми

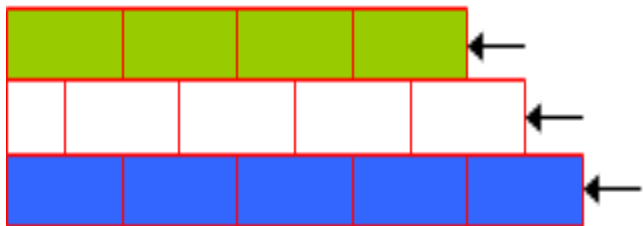
- “Будівельний” приклад паралельних обчислень.



паралелізм за даними



паралелізм за керуванням



потоківий паралелізм

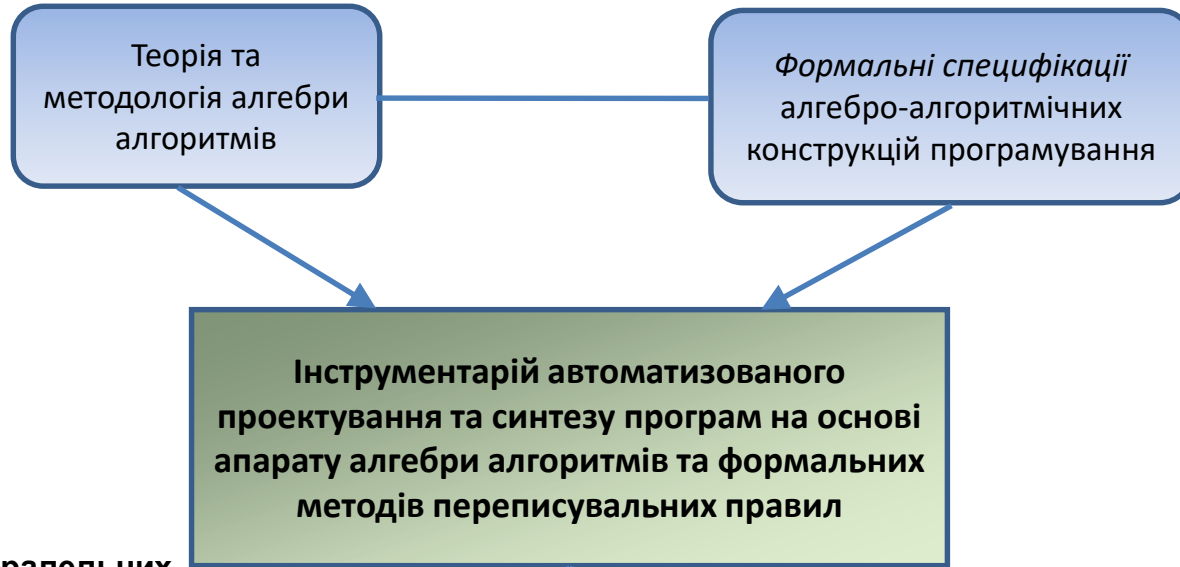
Проблема автоматизації генерації ефективного коду

- На сьогодні паралельні системи – це масштабні системи паралельної дії, часто неоднорідні (наприклад, що поєднують CPU та GPU), спрямовані на забезпечення *високої продуктивності обчислень* при вирішенні широкого кола науково-технічних задач.
- Проте, залишається *велика частка ручної праці* при програмуванні таких систем, до того ж *генерований код часто є неоптимальним*, що призводить до недовикористання потенційної потужності паралельних систем.
- Отже, викликом є *проблема автоматизації генерації ефективного коду* для паралельних систем в умовах великого розмаїття обчислювальних платформ, середовищ розробки та виконання програмного коду.

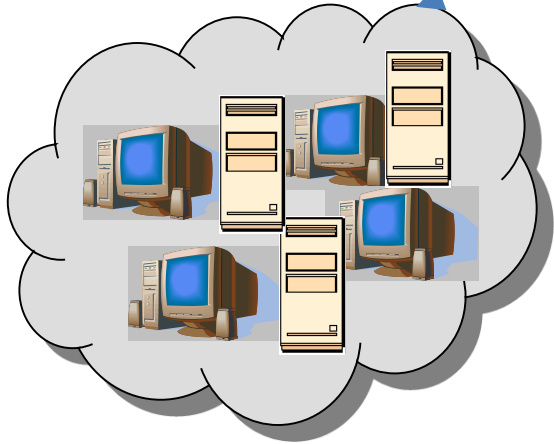
Недоліки існуючих підходів та технологій

- Традиційні компіляторні технології мають *обмежене значення*, бо націлені тільки на конкретні архітектури процесорної техніки.
- Методи паралельного програмування багатьох мультипроцесорних платформ, зазвичай передбачають *неформальне розпаралелювання обчислень вручну*.
- Загалом, технології розробки програмного забезпечення для неоднорідних паралельних платформ є складними і на сьогодні недостатньо формалізовані, а значить, є *надзвичайно трудомісткими*.

Як розробляються паралельні програми – алгеброалгоритмічний інструментарій



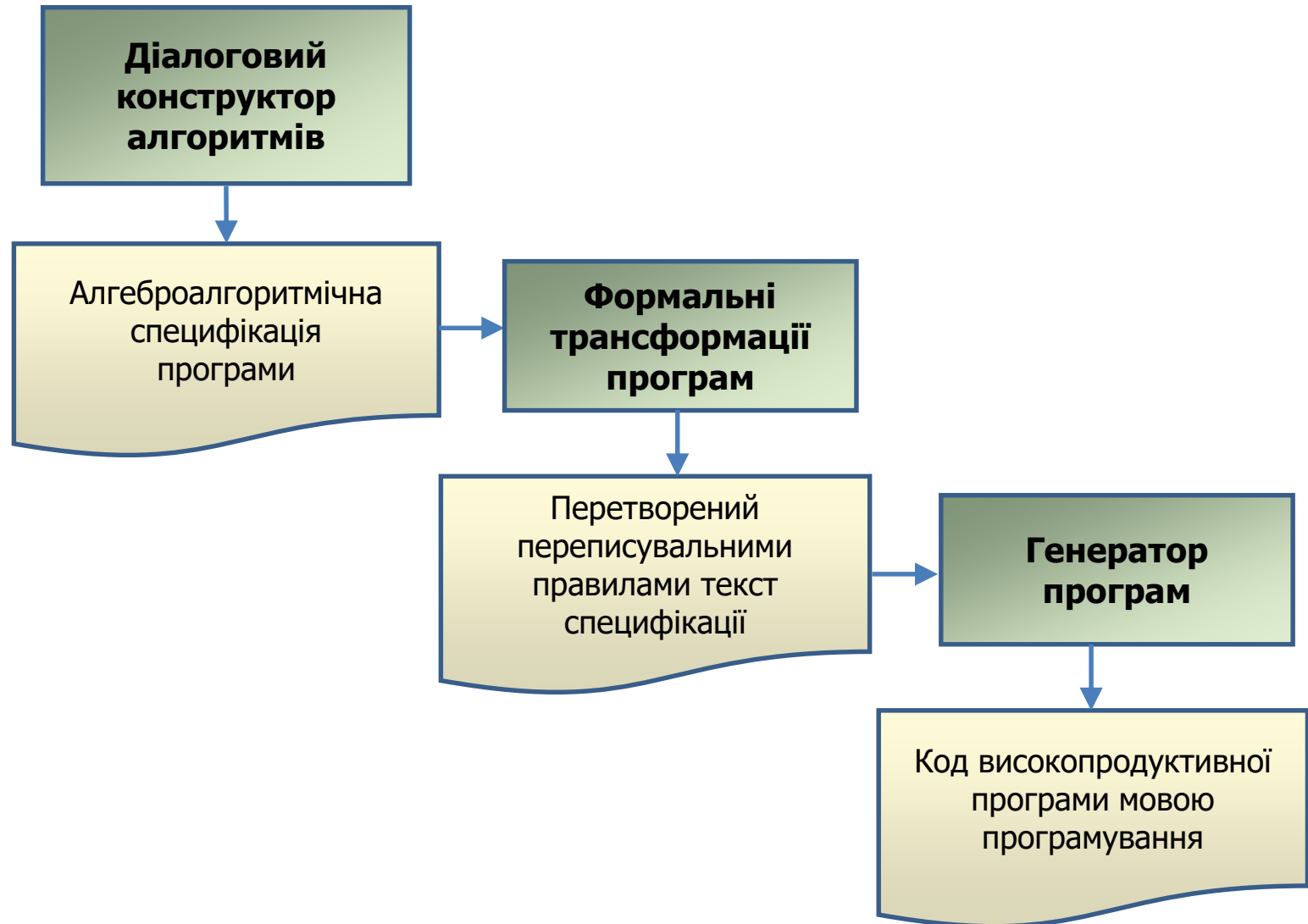
Програми для паралельних платформ – мультитядерних, відеографічних, кластерних, Грід-та ін.



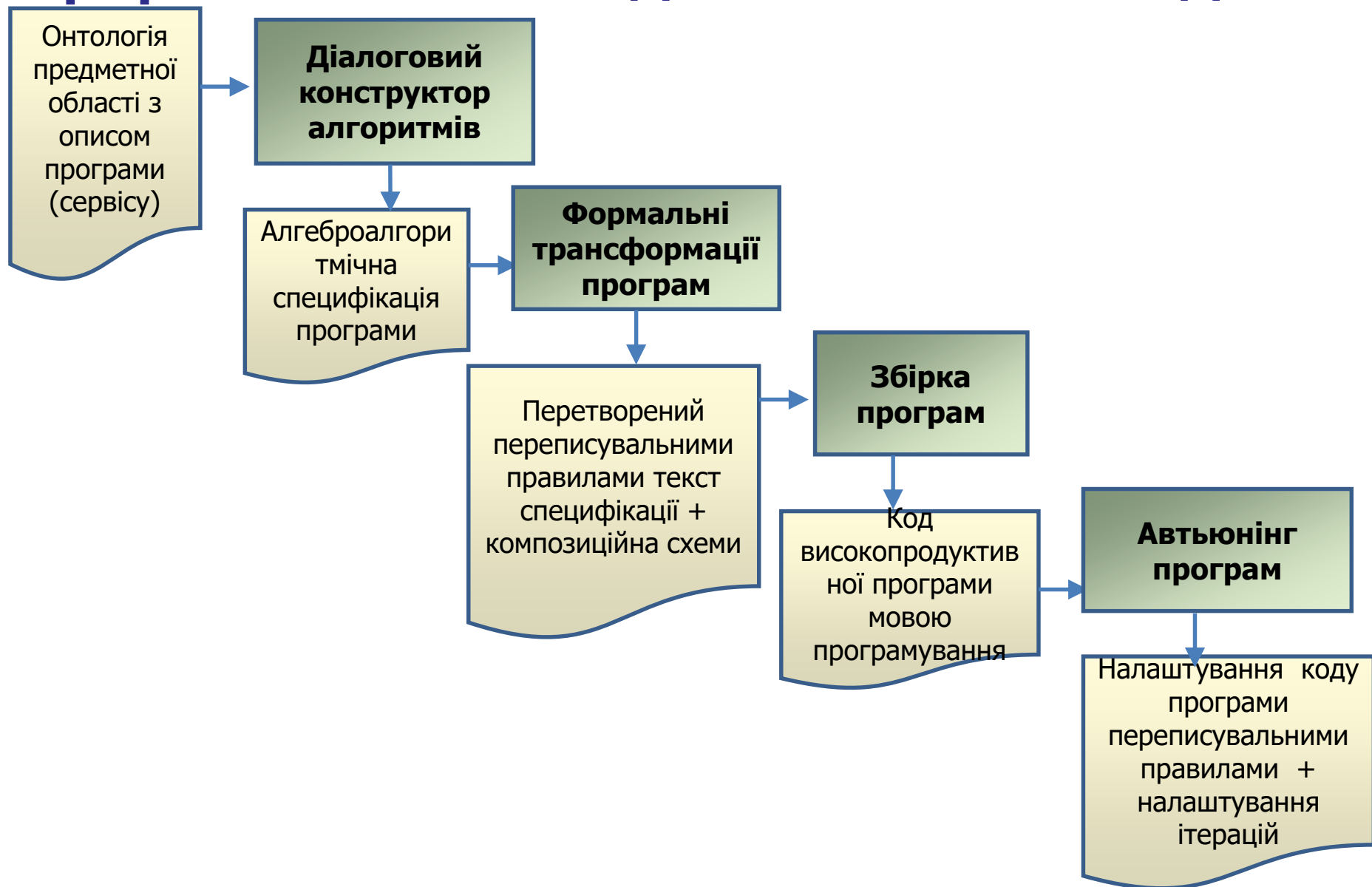
Застосування:

- розробка засобів автоматизації програмування мультитядерних процесорів та відеоприскорювачів
- засоби паралельного програмування для метеорологічного прогнозування

Формальні методи автоматизації програмування паралельних обчислень в алгеброалгоритмічному інструментарії



Потік робіт для розробки програм формальними та адаптивними методами

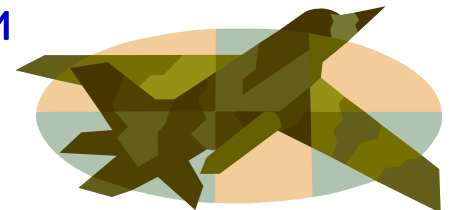
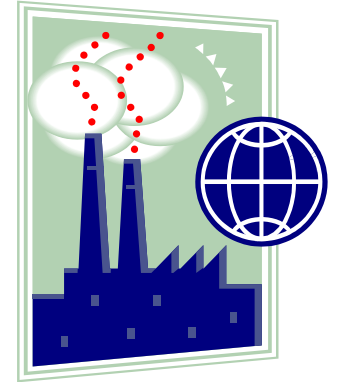




Застосування: паралельні обчислення для високоточного і швидкісного регіонального прогнозування погоди

Спільно з Українським гідрометеорологічним інститутом розроблена нова гідродинамічна модель циркуляції атмосфери з урахуванням підстилаючої поверхні землі та стратифікації атмосфери,

- Розроблена паралельна реалізація обчислювальних методів на кластерній архітектурі, що забезпечує прискорення в десятки разів.
- Дослідження були підтримані міжнародним науковим грантом НАТО.
- Сферою використання результатів є гідрометзабезпечення галузей економіки України (сільське господарство, авіація, енергетика, МНС та інші).



Перспективи застосування суперкомп'ютерних обчислень масштабу Exascale (10^{18} флопс)

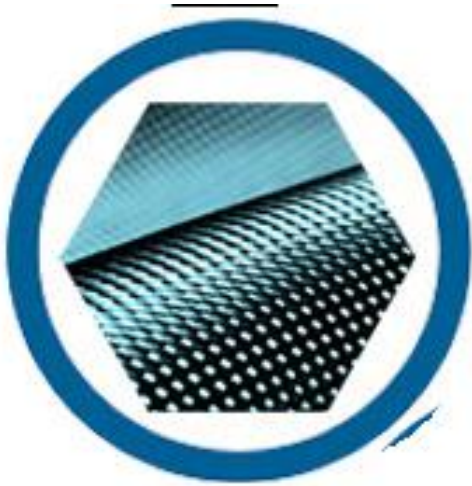
- Плануються для наступного 50- до 100-кратного збільшення потужності суперкомп'ютерів у широкому колі питань (*мільярд мільярдів операцій в секунду*).
- Суперкомп'ютери повинні мати можливості *зберігати і читати величезні обсяги даних* на високій швидкості.
- Відкриваються *нові застосування* ExaScale обчислень: від створення нових, більш ефективних двигунів внутрішнього згоряння і нові енергетичних рішень – до глибоких досягнень в галузі охорони здоров'я, біології та передбачення природних катаклізмів.

Зниження рівня забруднення довкілля



- Більше *85 відсотків світової енергії* виробляється за рахунок спалювання викопного палива. Завдання – його звести до мінімуму за рахунок *моделювання і контролю хімічного процесу горіння*.
- Очікується, що за допомогою ExaScale обчислень буде можливо підвищити *ефективність систем згоряння в двигунах і газових турбін* для транспортування і виробництва електроенергії потенційно *на 25-50%*, і знизити викиди.

Нові матеріали



Моделювання поведінки матеріалів з використанням суперкомп'ютерів і великих баз даних відомих сполук для ідентифікації комбінацій з бажаними властивостями.

- Наприклад, *електричні батареї з нових матеріалів* набагато ефективніші, дешевші і більш живучі.

Нові енергетичні рішення



Вітрові турбіни мають стати *більш ефективними і тихішими*, а їх *розташування у вітрових фермах*, має стати *оптимальним* за допомогою комп'ютерного моделювання.

Важливим є *управління гібридною електромережею*, коли стихає вітер в районі вітропарку. Запуск генераторів на викопному паливі має бути зроблено швидко. Оскільки це неможливо передбачити точно, інтенсивні обчислення мають забезпечити *завчасне управління*.

Точна медицина та біологія



ExaScale обчислення прискорюють дослідження раку, допомагаючи зрозуміти *молекулярні основи ключових взаємодій білків* шляхом автоматизації аналізу мільйонів записів пацієнтів для визначення оптимальних стратегій лікування.



ExaScale обчислення в біології можуть уможливити прогнозування параметрів для динамічних моделей метаболізму, які дозволили б сприяти розробці методів *лікування від нових типів інфекцій*.

Передбачення суворих погодних умов



Високоточні моделі і швидкісні методи прогнозування погоди матимуть можливість *більш точно і швидко передбачити терміни і шляхи проходження суворих погодних явищ* (таких як урагани) шляхом використання значно більш високої просторової роздільної здатності, результатів фізичних досліджень і засвоєння більшої кількості даних спостережень.

Поліпшення якості життя



- Використання ExaScale обчислень в міській зоні може знизити небезпеку для здоров'я та поліпшити якість життя в містах за рахунок *оптимізації міської інфраструктури* (транспорт, енергетика, житлове будівництво, охорона здоров'я).
- Така оптимізація вимагає *збору і аналізу численних даних* з баз даних, датчиків і результатів моделювання і проведення тисяч можливих сценаріїв.

Розвиток фундаментальної науки



- Застосування ExaScale обчислень стосуються *фундаментальних наукових питань* в таких областях, як фізика високих енергій, квантова хімія та ін.

Хоча вони й не націлені на негайну користь суспільству, зате мають на меті серйозні наслідки у розвитку технологій.

Висновки

- Технології паралельних обчислень стали *всюдисущими* (ubiquitous): від мобільних телефонів до суперкомп'ютерів.
- Суперкомп'ютерні системи за рахунок комп'ютерного моделювання і паралельних обчислень дозволяють “*заглянути за горизонт*” в багатьох сферах досліджень.
- Засоби автоматизації програмування суперкомп'ютерних застосувань є *необхідною умовою* ефективного використання масштабних паралельних обчислень в різних передових галузях знань.

Запитання?