C2115
Praktický úvod do superpočítání

XII. lekce

Petr Kulhánek, Tomáš Bouchal

kulhanek@chemi.muni.cz

Národní centrum pro výzkum biomolekul, Přírodovědecká fakulta,
Masarykova univerzita, Kotlářská 2, CZ-61137 Brno

Architektura

Multicore-CPU procesory:

- hyperthreading

Optimalizační techniky CPU:

- spekulativní běh (speculative execution)
- běh mimo pořadí (out-of-order execution, dynamic execution)
- SIMD (single instruction multiple data)

NUMA (Non-uniform Memory Access/Architecture:

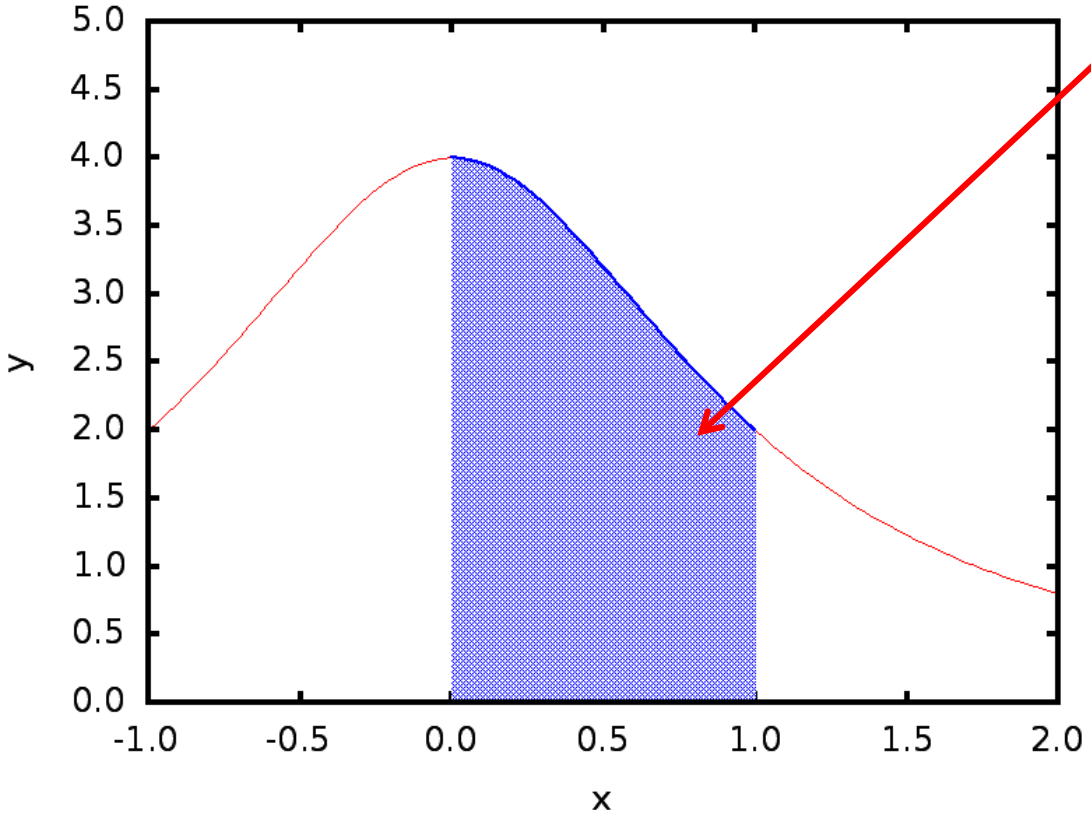
Užitečné příkazy:

```
$ lscpu
$ lstopo                # module add hwloc
$ cat /proc/cpuinfo
$ ams-host              # Infinity
```

Numerická integrace

Cvičení LIII.3

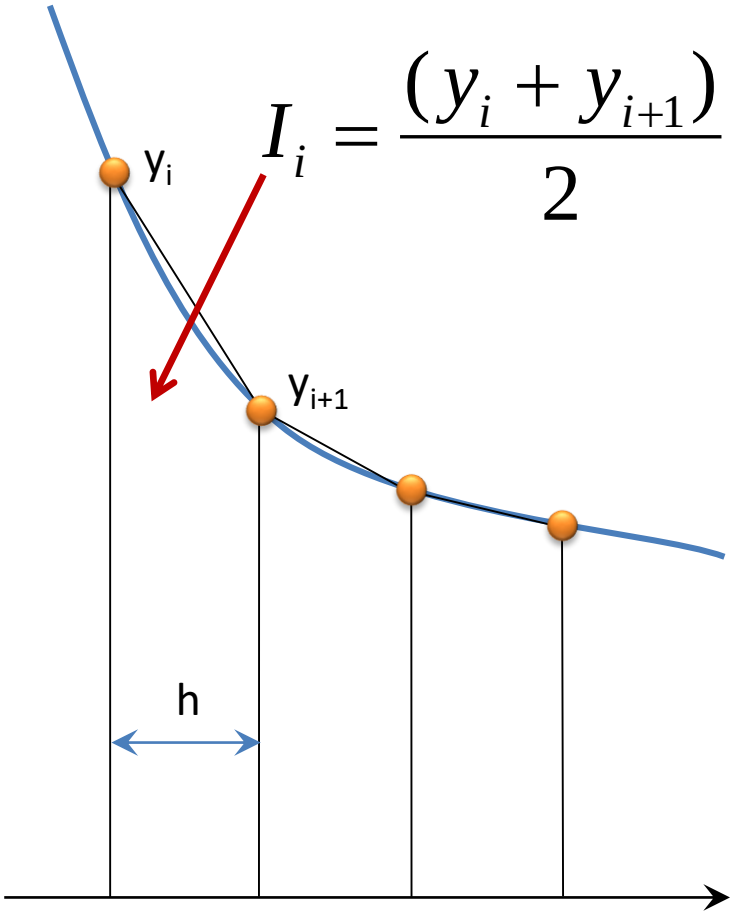
1. Napište program, který vypočte určitý integrál uvedený níže. K integraci použijte lichoběžníkovou metodu.



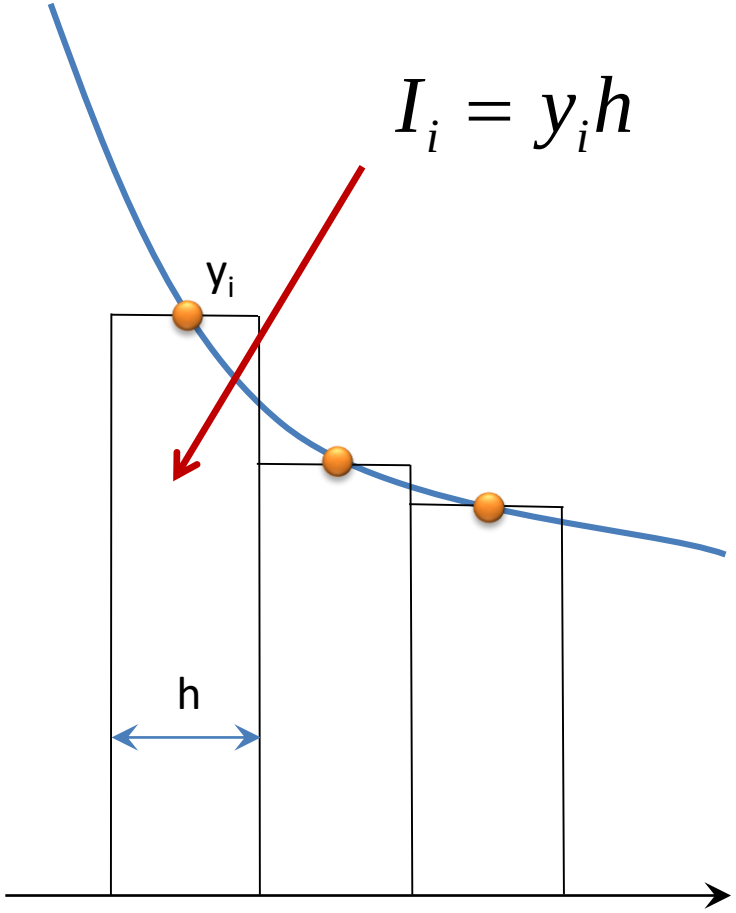
$$I = \int_0^1 \frac{4}{1+x^2} dx$$

určitý integrál je plocha pod křivkou v rozsahu integračních mezí

Lichoběžníková vs obdélníková metoda



lichoběžníková metoda



obdélníková metoda

Sekvenční implementace

obdélníková metoda

```
program integral

  implicit none
  integer(8)                :: i
  integer(8)                :: n
  double precision          :: h,v,y,x
  !-----------------------------------------------
  n = 2000000000
  h = 1.0d0/n
  v = 0.0d0

  do i=1,n
    x = (i-0.5d0)*h
    y = 4.0d0/(1.0d0+x**2)
    v = v + y*h
  end do

  write(*,*) 'integral = ',v

end program integral
```

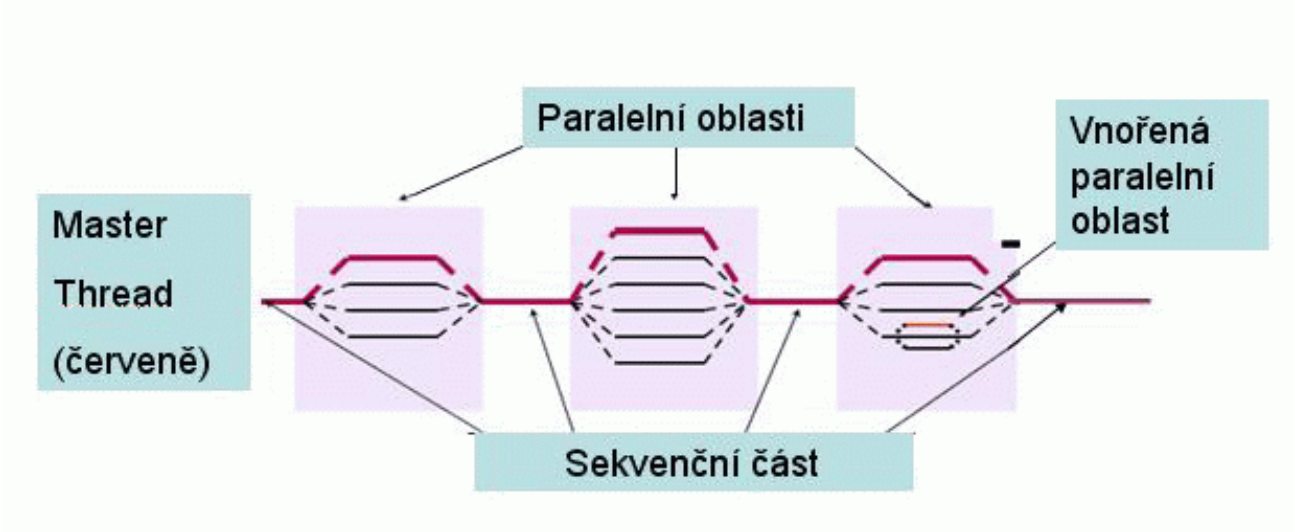
Cvičení 1

1. Zkompilujte program **integral.f90** z adresáře **/home/kulhanek/Data/C2115/Lesson12/integral/single** s optimalizací **-O3**
2. Určete dobu běhu aplikace potřebnou pro integraci funkce. K měření doby použijte program **/usr/bin/time**.

Paralelizace - OpenMP

OpenMP je soustava **direktiv** pro překladač a knihovních procedur pro paralelní programování. Jedná se o standard pro programování počítačů se sdílenou pamětí. OpenMP usnadňuje vytváření vícevláknových programů v programovacích jazycích Fortran, C a C++.

www.wikipedia.org



Specifikace: **www.openmp.org**

OpenMP implementace

```
ncpu = 1
!$ ncpu = omp_get_max_threads()
write(*,*) 'Number of threads = ',ncpu

!$omp parallel

!$omp do private(i,x,y),reduction(+:v)
do i=1,n
  x = (i-0.5d0)*h
  y = 4.0d0/(1.0d0+x**2)
  v = v + y*d
end do
!$omp end do

!$omp end parallel
write(*,*) 'integral = ',v
```

OpenMP

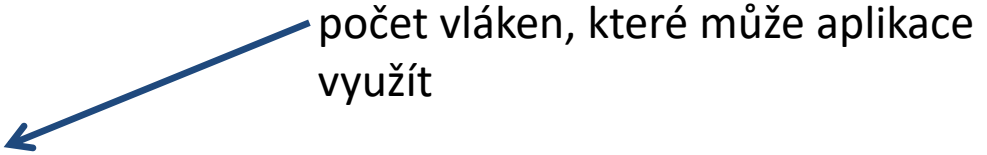
výhody x nevýhody

OpenMP kompilace

```
$ gfortran -O3  integral.f90 -o integral
$ ldd ./integral
        linux-vdso.so.1 =>
        libgfortran.so.3 => /usr/lib/x86_64-linux-gnu/libgfortran.so.3
        libc.so.6 => /lib/x86_64-linux-gnu/libc.so.6
        libquadmath.so.0 => /usr/lib/x86_64-linux-gnu/libquadmath.so.0
        libm.so.6 => /lib/x86_64-linux-gnu/libm.so.6
        /lib64/ld-linux-x86-64.so.2

$ gfortran -O3 -fopenmp integral.f90 -o integral
$ ldd ./integral
        linux-vdso.so.1 =>  (0x00007fff593ff000)
        libgfortran.so.3 => /usr/lib/x86_64-linux-gnu/libgfortran.so.3
        libgomp.so.1 => /usr/lib/x86_64-linux-gnu/libgomp.so.1
        libc.so.6 => /lib/x86_64-linux-gnu/libc.so.6
        libquadmath.so.0 => /usr/lib/x86_64-linux-gnu/libquadmath.so.0
        libm.so.6 => /lib/x86_64-linux-gnu/libm.so.6
        librt.so.1 => /lib/x86_64-linux-gnu/librt.so.1
        libpthread.so.0 => /lib/x86_64-linux-gnu/libpthread.so.0
        /lib64/ld-linux-x86-64.so.2
```

OpenMP spuštění




```
$ export OMP_NUM_THREADS=4
$ ./integral
 Number of threads =                    4
 integral =    3.1415925965295672
```

Poznámka: pokud není proměnná OMP_NUM_THREADS nastavena, použije se maximální počet dostupných CPU jader
(na klastru WOLF je však výchozí hodnota proměnné OMP_NUM_THREADS explicitně nastavena na 1)

Cvičení 2

1. Zkompilujte program **integral.f90** z adresáře **/home/kulhanek/Data/C2115/Lesson12/integral/openmp** s optimalizací **-O3** bez podpory OpenMP.
2. Určete dobu běhu aplikace potřebnou pro integraci funkce. K měření doby použijte program **/usr/bin/time**.
3. Zkompilujte program **integral.f90** s optimalizací **-O3** a zapnutou podporou OpenMP.
4. Určete počet CPU jader na vašem počítači (lscpu).
5. Spouštějte program **integral** postupně pro 1, 2, 3, až N vláken, kde N je maximální dostupný počet CPU jader. Pro každé spuštění určete dobu běhu. Získaná data zapisujte do následující tabulky a vyhodnoťte.

N	T_{real} [s]	Speedup	CPU effectivity [%]
1	27.8	1.0	100.0
2	14.7	1.9	94.8
3	11.0	2.5	84.1
4	8.2	3.4	84.7

naměřený čas

$$Speedup = \frac{T_{real}(N=1)}{T_{real}}$$

$$CPUeffectivity = \frac{Speedup}{N} 100$$

Paralelizace - MPI

Message Passing Interface (dále jen MPI) je knihovna implementující stejnojmennou specifikaci (protokol) pro podporu paralelního řešení výpočetních problémů v počítačových clusterech. Konkrétně se jedná o rozhraní pro vývoj aplikací (API) založené na zasílání zpráv mezi jednotlivými uzly. Jedná se jak o zprávy typu point-to-point, tak o globální operace. Knihovna podporuje jak architektury se sdílenou pamětí, tak s pamětí distribuovanou.

MPI implementace

MPI

výhody x nevýhody

MPI kompilace

```
$ mpif90 -O3  integral.f90 -o integral
```

MPI spuštění

počet procesů, které aplikace využívá k výpočtu

```
$ mpirun -np 2 ./integral
```

```
$ mpirun -np 2 -machinefile nodes ./integral
```

seznam uzlů, na kterých se spouští procesy, v dávkovém prostředí se používá hodnota proměnné PBS_NODEFILE

Předpoklady:

- ssh bez hesla
- aplikace musí být ve stejné cestě na všech uzlech, na kterých se spouští procesy

Cvičení 3

1. Zkompilujte program **integral.f90** z adresáře **/home/kulhanek/Data/C2115/Lesson07/integral/mpi** s optimalizací **-O3**.
2. Spouštějte program **integral** postupně pro 1, 2, 3, až N procesů, kde N je maximální dostupný počet CPU jader. Pro každé spuštění určete dobu běhu. Získaná data zapisujte do tabulky a vyhodnoťte jako ve cvičení 2
3. Spouštějte program **integral** postupně pro 1, 2, 4, 8 až N procesů (násobky 2), kde N je maximální dostupný počet uzlů klastru WOLF. Pro každé spuštění určete dobu běhu. Získaná data zapisujte do tabulky a vyhodnoťte jako ve cvičení 2. Spouštění je nutné koordinovat s ostatními uživateli klastru. V jiném terminálu monitorujte běžící procesy příkazem **top**.

Cvičení 4

1. Zkompilujte program **mult_mat_blas_dp.f90** z adresáře **/home/kulhanek/Data/C2115/Lesson12/matmult** s optimalizací **-O3** proti systémové knihovně blas (program obsahuje jiný způsob měření času oproti LIV.2).
2. Určete dobu běhu aplikace **mult_mat_blas_dp** programem **/usr/bin/time**.
3. Zkompilujte program **mult_mat_blas_dp.f90** s optimalizací **-O3** proti knihovně MKL.

```
gfortran -O3 mult_mat_blas_dp.f90 -o mult_mat_blas_dp \
         -lmkl_gf_lp64 -lmkl_gnu_thread -lmkl_core \
         -lgomp -lpthread \
-L/software/ncbr/softrepo/common/intelcore/2015.0.090/x86_64/para/lib
```

4. Určete dobu běhu aplikace **mult_mat_blas_dp** programem **/usr/bin/time**. Pro spuštění aplikace musíte aktivovat modul **intelcore:2015.0.090** Porovnejte dobu běhu mezi MKL a systémovou knihovnou blas. Která knihovna poskytuje větší výpočetní výkon?
5. Spouštějte program **mult_mat_blas_dp** postupně pro 1, 2, 3, až N vláken, kde N je maximální dostupný počet CPU jader. Počet vláken pro MKL knihovnu se nastavuje pomocí systémové proměnné **MKL_NUM_THREADS**. Pro každé spuštění určete dobu běhu. Získaná data zapisujte do tabulky a vyhodnoťte jako ve cvičení 2.