Revize 2

# C2115 Praktický úvod do superpočítání

13. lekce / Modul 4

Petr Kulhánek

kulhanek@chemi.muni.cz

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

# Paralelní úlohy

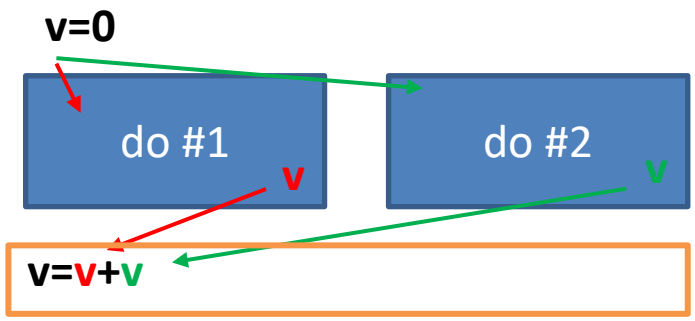
Souběh chyb, numerické chyby, spouštíme aplikace,
efektivita paralelizace (Amdahlův zákon)

# Úskalí paralelizace úloh, chyby souběhu

Paralelní úlohy jsou náchylné na **chyby souběhu** (race condition). Při návrhu paralelních aplikací je proto nutné již při návrhu aplikace tomuto úskalí věnovat značnou pozornost.

```
v = 0.0d0
!$omp do private(i,x,y),reduction(+:v)
do i=1,n
  x = (i-0.5d0)*h + rl
  y = 4.0d0/(1.0d0+x**2)
  v = v + y*d
end do
!$omp end do
```

**!!! klíčové pro funkčnost !!!**

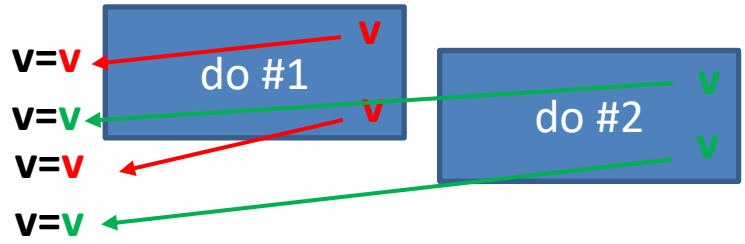



**paralelní běh** (dvě vlákna)

**bariéra** (nejdříve se počká na doběhnutí všech vláken a teprve poté se vypočítá výsledek)

**Bez bariéry** se bude proměnná "v" používat v nedefinovaném pořadí s možností přepisování mezivýsledků.

**Zjednodušeně (pro ilustraci):**



# Úskalí paralelizace úloh, numerické chyby

Pořadí vykonávání aritmetických operací se může v čase měnit, proto můžete získat **různý výsledek** za použití různého počtu CPU a či při opakování stejné paralelní úlohy (typické pro úlohy s dynamickým vyvažováním zátěže).

**Úlohy s dynamickým vyvažováním zátěže** mění rozdělení problému na jednotlivé CPU (např. atomy, které bude CPU zpracovávat v molekulové dynamice) tak, aby úloha běžela co nejrychleji.

```
[kulhanek@wolf openmp]$ OMP_NUM_THREADS=1 ./integral
 Number of threads =                    1
 integral =    3.14159265358 94521
[kulhanek@wolf openmp]$ OMP_NUM_THREADS=2 ./integral
 Number of threads =                    2
 integral =    3.14159265358 88206
[kulhanek@wolf openmp]$ OMP_NUM_THREADS=4 ./integral
 Number of threads =                    4
 integral =    3.14159265358 98944
```

# Spouštění paralelních úloh

- U **nových úloh vždy ověřujte, že skutečně spouštíte paralelní verzi aplikace** (programu).
- Pokud úloha neběží paralelně, ověřte, že spouštíte správnou verzi programu a správným způsobem (OpenMP vs MPI).

**Užitečné příkazy:**

- **ldd** vypíše seznam dynamických knihoven, které program využívá
- **top** vypíše přehled běžících procesů
- **pstree** vypíše přehled běžících procesů

# Spouštění paralelních úloh, pokr.

**OpenMP**

```
bash(17479)──integral(21331)─┬─{integral}(21332)
                             ├─{integral}(21333)
                             └─{integral}(21334)
```

**1 proces** a **4 vlákna**

```
  PID USER      PR  NI    VIRT    RES    SHR S  %CPU %MEM     TIME+ COMMAND
21331 kulhanek  20   0   29284   1592   1452 R 399.3  0.0   1:40.14 integral
 3469 root      20   0       0      0      0 S   0.3  0.0   4:53.43 afsd
```

**MPI**

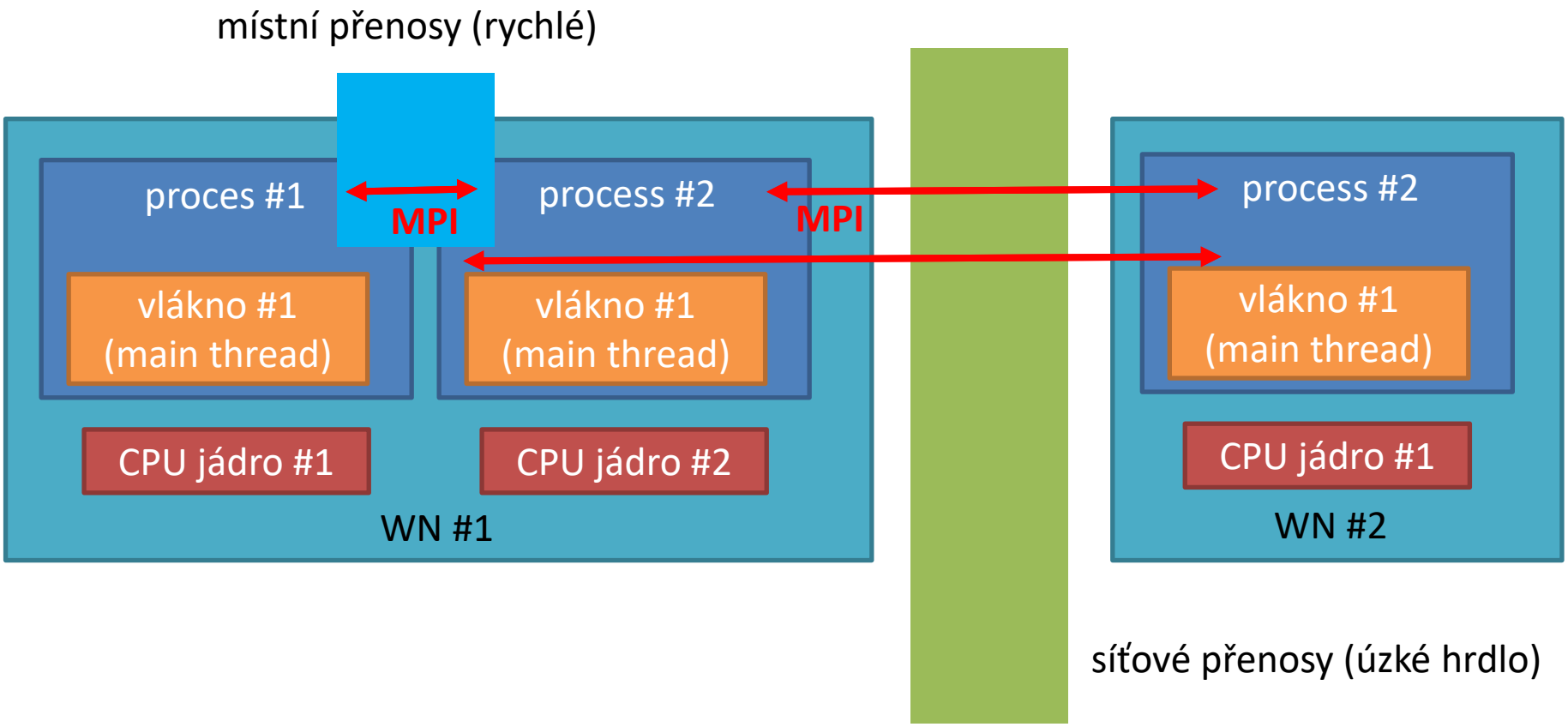
```
bash(17479)──mpirun(23938)─┬─integral(23942)─┬─{integral}(23946)
                           │                 ├─{integral}(23948)
                           │                 └─{integral}(23956)
                           ├─integral(23943)─┬─{integral}(23949)
                           │                 ├─{integral}(23952)
                           │                 └─{integral}(23955)
                           ├─integral(23944)─┬─{integral}(23947)
                           │                 ├─{integral}(23950)
                           │                 └─{integral}(23957)
                           ├─integral(23945)─┬─{integral}(23951)
                           │                 ├─{integral}(23953)
                           │                 └─{integral}(23954)
                           ├─{mpirun}(23939)
                           ├─{mpirun}(23940)
                           └─{mpirun}(23941)
```

**4 procesy** (+ servisní vlákna, které využívá MPI)

```
  PID USER      PR  NI    VIRT    RES    SHR S  %CPU %MEM     TIME+ COMMAND
23942 kulhanek  20   0  375740  15796  12576 R 100.0  0.1   0:15.48 integral
23943 kulhanek  20   0  375740  15680  12456 R 100.0  0.1   0:15.48 integral
23944 kulhanek  20   0  375740  15724  12508 R 100.0  0.1   0:15.48 integral
23945 kulhanek  20   0  375740  15736  12512 R 100.0  0.1   0:15.48 integral
```

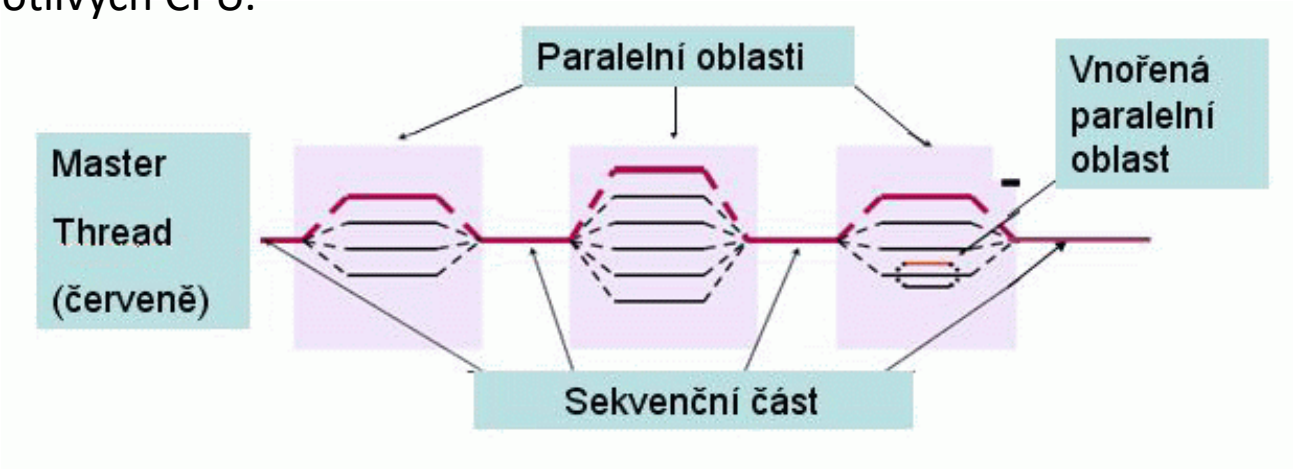
# Spouštění paralelních úloh, pokr.

- Vyvarujte se spouštění paralelních úloh na více uzlech (MPI).
- Pokud je to nezbytné, použijte co nejrychlejší síťové propojení (**Infiniband** vs Ethernet)



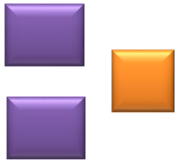
# Efektivita paralelizace

Nedílnou (nicméně nechtěnou) součástí paralelní aplikace jsou sekvenční části. Běh této části není urychlován se zvyšováním počtu CPU, což ve výsledku vede k snižovaní efektivity využití jednotlivých CPU.




**1 CPU**

**2 CPU**



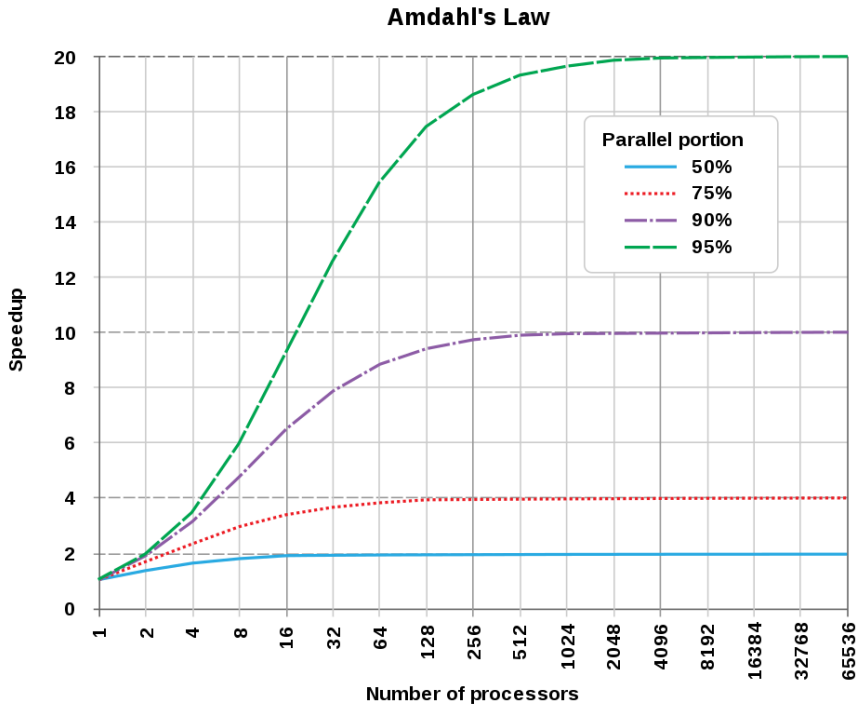
zůstává stejné

zkracuje se

# Amdahlův zákon

**Amdahlův zákon** vyjadřuje maximální předpokládané urychlení paralelní úlohy.

**https://en.wikipedia.org/wiki/Amdahl's_law**




**Teoretické urychlení:**

$$S_{speedup} = \frac{1}{(1-p) + \frac{p}{N}}$$

p - paralelní část programu (zlomek)
N - počet CPU

- **VŽDY ověřujte efektivitu paralelního běhu aplikace** (hlavně u nových problémů či změně jejich velikosti).
- Ověření se dělá podle cvičení L13.M2.1, přičemž akceptovatelná minimální efektivita na jedno CPU je cca 80%.

# Cvičení M4.1

**Zdrojové kódy:**
/home/kulhanek/Documents/C2115/code/integral/openmp

1. Zkompilujte program **integral_rc.f90** s optimalizací **-O3** a podporou OpenMP.
2. Spouštějte program **integral_rc** postupně pro 1, 2, 3, až N vláken, kde N je maximální dostupný počet CPU jader. Jak se mění výsledek a proč?
3. Opakovaně spusťte program **integral_rc** na 2 vláknech. Jak se mění výsledek a proč?