# Суперкомпьютеры и параллельная обработка данных

**Бахтин Владимир Александрович** к.ф.-м.н., ведущий научный сотрудник Института прикладной математики им М.В.Келдыша PAH

кафедра системного программирования факультет вычислительной математики и кибернетики Московского университета им. М.В. Ломоносова

# CPU или GPU



#### Вычисление числа π с использованием **CUDA**

```
#include <stdio.h>
#include <cuda.h>
#define N 1000000
#define NUM BLOCK 32 // Number of thread blocks
#define NUM_THREAD 32 // Number of threads per block
int tid;
float pi = 0;
// Kernel that executes on the CUDA device
  _global___ void cal_pi(float *sum) {
    int i;
    float x, step=1.0/N; // Step size
    // Sequential thread index across the blocks
    int idx = blockldx.x*blockDim.x+threadldx.x;
    for (i=idx; i< N; i+=NUM_BLOCK*NUM_THREAD) {</pre>
      x = (i+0.5)*step;
      sum[idx] += 4.0/(1.0+x*x);
                                                  http://cacs.usc.edu/education/cs596/src/cuda/pi.cu
    }}
```

#### Вычисление числа π с использованием **CUDA**

```
int main(void) { // Main routine that executes on the host
    dim3 dimGrid(NUM_BLOCK,1,1); // Grid dimensions
    dim3 dimBlock(NUM_THREAD,1,1); // Block dimensions
    float *sumHost, *sumDev; // Pointer to host & device arrays
    size_t size = NUM_BLOCK*NUM_THREAD*sizeof(float); //Array size
    sumHost = (float *)malloc(size); // Allocate array on host
    cudaMalloc((void **) &sumDev, size); // Allocate array on device
    cudaMemset(sumDev, 0, size); // Initialize array in device to 0
    // Do calculation on device
    cal_pi <<<dimGrid, dimBlock>>> (sumDev); // call CUDA kernel
    // Retrieve result from device and store it in host array
    cudaMemcpy(sumHost, sumDev, size, cudaMemcpyDeviceToHost);
    for(tid=0; tid<NUM THREAD*NUM BLOCK; tid++) pi += sumHost[tid];
    pi *= step:
    printf("PI = %f\n",pi); // Print results
    free(sumHost); // Cleanup
    cudaFree(sumDev);
                                                      http://cacs.usc.edu/education/cs596/src/cuda/pi.cu
    return 0;
```

#### **Вычисление числа** π с использованием **OpenACC**

```
#include <stdio.h>
int main ()
                                 pgcc -acc test.c -Minfo=all
                                main:
                                   8, Accelerator kernel generated
  int n = 100000, i;
                                     Generating Tesla code
  double pi, h, sum, x;
                                      9, #pragma acc loop gang, vector(128) /* blockIdx.x
                                threadIdx.x */
  h = 1.0 / (double) n;
                                     12, Sum reduction generated for sum
  sum = 0.0;
#pragma acc parallel loop
  for (i = 1; i \le n; i ++)
          x = h * ((double)i - 0.5);
          sum += (4.0 / (1.0 + x*x));
   pi = h * sum;
   printf("pi is approximately %.16f", pi);
   return 0;
21 сентября
```

Москва, 2021

#### Вычисление числа $\pi$ с использованием DVM

```
#include <stdio.h>
int main ()
  int n =100000, i;
  double pi, h, s, x;
#pragma dvm template[n] distribute[block]
  void *tmp;
  h = 1.0 / (double) n;
  s = 0.0;
#pragma dvm parallel (i on tmp[i]) reduction(sum(s)) private(x)
  for (i = 1; i \le n; i ++)
  {
          x = h * ((double)i - 0.5);
          s += (4.0 / (1.0 + x*x));
   pi = h * s;
   printf("pi is approximately %.16f", pi);
   return 0;
 21 сентября
 Москва. 2021
```

#### Вычисление числа π с использованием **OpenMP**

```
#include <stdio.h>
int main ()
  int n = 100000, i;
  double pi, h, sum, x;
  h = 1.0 / (double) n;
  sum = 0.0;
#pragma omp parallel for reduction(+:sum) private(x)
  for (i = 1; i \le n; i ++)
          x = h * ((double)i - 0.5);
          sum += (4.0 / (1.0 + x*x));
   pi = h * sum;
   printf("pi is approximately %.16f", pi);
   return 0;
21 сентября
```

# **Достоинства использования OpenMP вместо MPI для**

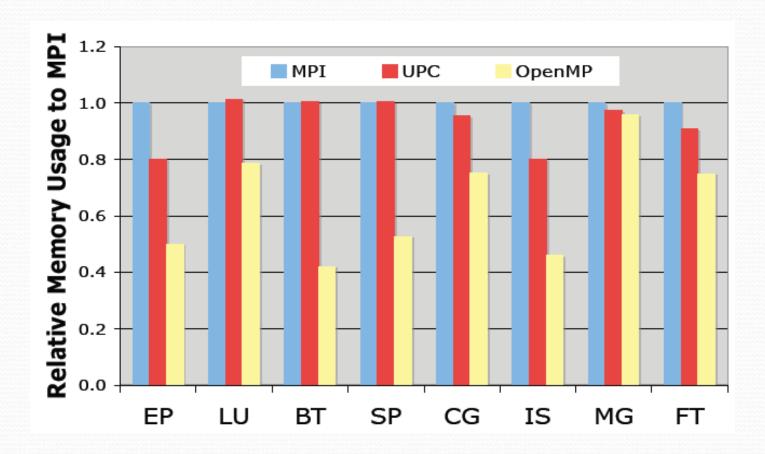
#### многоядерных процессоров

- Возможность инкрементального распараллеливания
- Упрощение программирования и эффективность на нерегулярных вычислениях, проводимых над общими данными
- Ликвидация дублирования данных в памяти, свойственного МРІпрограммам
- □ Объем памяти пропорционален быстродействию процессора. В последние годы увеличение производительности процессора достигается удвоением числа ядер, при этом частота каждого ядра снижается. Наблюдается тенденция к сокращению объема оперативной памяти, приходящейся на одно ядро. Присущая ОрепМР экономия памяти становится очень важна.
- Наличие локальных и/или разделяемых ядрами КЭШей будут учитываться при оптимизации OpenMP-программ компиляторами, что не могут делать компиляторы с последовательных языков для MPI-процессов.

## Тесты NAS

ВТ	3D Навье-Стокс, метод переменных направлений
CG	Оценка наибольшего собственного значения симметричной разреженной матрицы
EP	Генерация пар случайных чисел Гаусса
FT	Быстрое преобразование Фурье, 3D спектральный метод
IS	Параллельная сортировка
LU	3D Навье-Стокс, метод верхней релаксации
MG	3D уравнение Пуассона, метод Multigrid
SP	3D Навье-Стокс, Beam-Warning approximate factorization

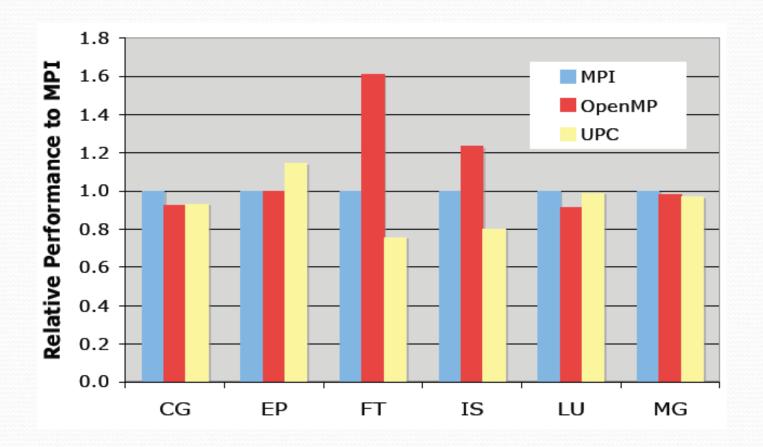
#### **Тесты NAS**



# **Analyzing the Effect of Different Programming Models Upon Performance and Memory Usage on Cray XT5 Platforms**

https://www.nersc.gov/assets/NERSC-Staff-Publications/2010/Cug2010Shan.pdf

#### **Тесты NAS**



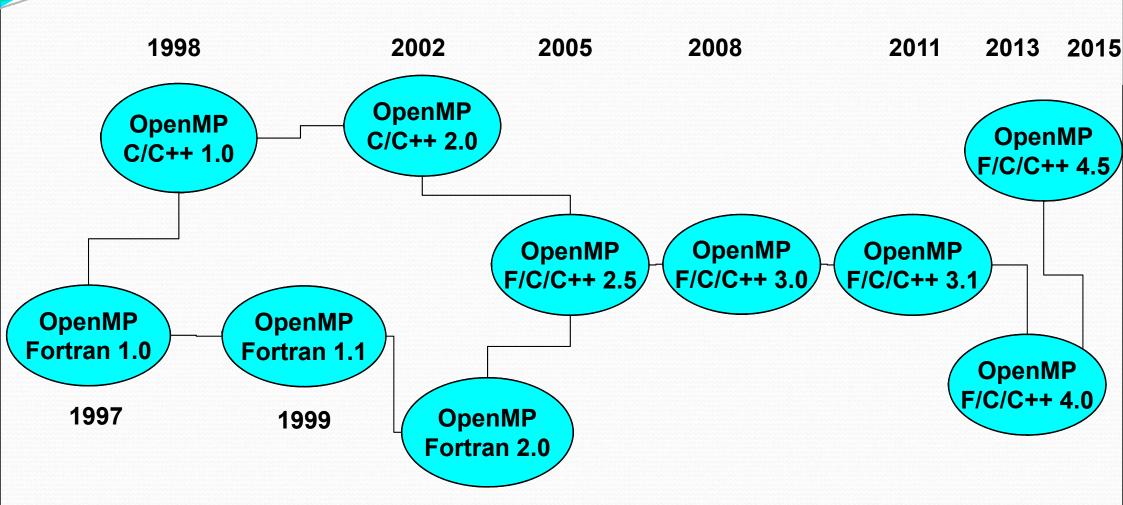
# **Analyzing the Effect of Different Programming Models Upon Performance and Memory Usage on Cray XT5 Platforms**

https://www.nersc.gov/assets/NERSC-Staff-Publications/2010/Cug2010Shan.pdf

#### Содержание

- □ Тенденции развития современных вычислительных систем
- □ OpenMP модель параллелизма по управлению
- □ Конструкции распределения работы
- □ Конструкции для синхронизации нитей
- □ Система поддержки выполнения ОрепМР-программ
- □ Новые возможности OpenMP

#### **История** ОрепМР

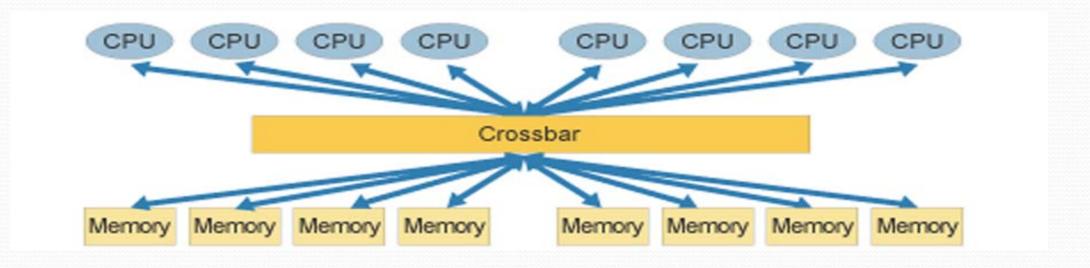


#### **OpenMP** Architecture Review Board

- □ ARM
- □ Cray
- □ Fujitsu
- □ HP
- □ IBM
- □ Intel
- Micron
- □ NEC
- □ NVIDIA
- □ Oracle Corporation
- □ Red Hat
- □ Texas Instrument

- □ ANL
- □ ASC/LLNL
- □ cOMPunity
- □ EPCC
- □ LANL
- LBNL
- □ NASA
- □ ORNL
- □ RWTH Aachen University
- Texas Advanced Computing Center
- □ SNL- Sandia National Lab
- BSC Barcelona Supercomputing Center
- University of Houston

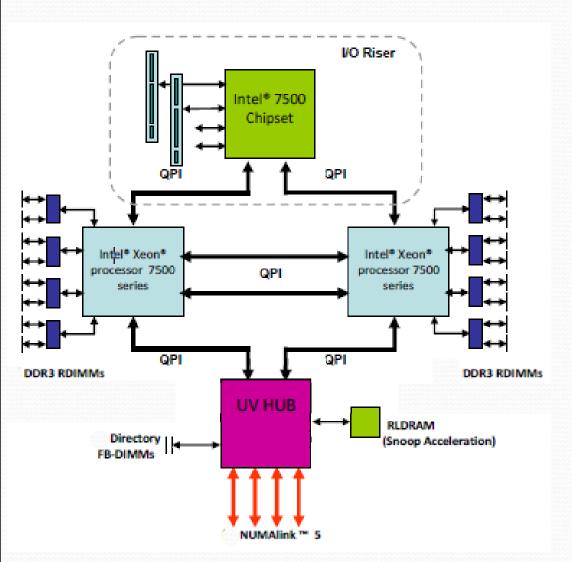
#### Симметричные мультипроцессорные системы (SMP)



- Все процессоры имеют доступ к любой точке памяти с одинаковой скоростью.
- □ Процессоры подключены к памяти либо с помощью общей шины, либо с помощью crossbar-коммутатора.
- □ Аппаратно поддерживается когерентность кэшей.

Например, серверы HP 9000 V-Class, Convex SPP-1200,...

#### Системы с неоднородным доступом к памяти (NUMA)



- Система состоит из однородных базовых модулей (плат), состоящих из небольшого числа процессоров и блока памяти.
- Модули объединены с помощью высокоскоростного коммутатора.
- Поддерживается единое адресное пространство.
- □ Доступ к локальной памяти в несколько раз быстрее, чем к удаленной.

#### Системы с неоднородным доступом к памяти (NUMA)



#### SGI Altix UV (UltraVioloet) 2000

- □ 256 Intel® Xeon® processor E5-4600 product family 2.4GHz-3.3GHz - 2048 Cores (4096 Threads)
- □ 64 ТВ памяти
- NUMAlink6 (NL6; 6.7GB/s bidirectional)

http://www.sgi.com/products/servers/uv/

#### Обзор основных возможностей OpenMP

OpenMP: API для написания C\$OMP FLUSH многонитевых приложений C\$OMP THREADPRIVATE(/ABC/) □ Множество директив компилятора, набор функции библиотеки системы C\$OMP PARALLEL DO SHARED(A,B,( поддержки, переменные окружения CALL OMP\_INIT\_LOCK (LCK) □ Облегчает создание многонитиевых программ на Фортране, С и С++ C\$OMP SINGLE PRIVATE(X) SEI Обобщение опыта создания параллельных программ для SMP и CSOMP PARALLEL DO ORDERED PRI DSM систем за последние 20 лет C\$OMP PARALLEL REDUCTION (+: A, B) CSOMP SECTIONS #pragma omp parallel for private(a, b) CSOMP BARRIER C\$OMP PARALLEL COPYIN(/blk/) C\$OMP DO LASTPRIVATE(XX) nthrds = OMP\_GET\_NUM\_PROCS() omp\_set\_lock(lck)

#### Директивы и клаузы

Спецификации параллелизма в OpenMP представляют собой директивы вида:

**#pragma omp название-директивы**[ клауза[ [,]клауза]...]

Например:

#pragma omp parallel default (none) shared (i,j)

Исполняемые директивы:

- barrier
- taskwait
- taskyield
- flush
- taskgroup

Описательная директива:

threadprivate

### Структурный блок

```
Действие остальных директив распространяется на структурный блок:
 #pragma omp название-директивы[ клауза[ [,]клауза]...]
   структурный блок
 Структурный блок: блок кода с одной точкой входа и одной точкой
    выхода.
#pragma omp parallel
                                      #pragma omp parallel
 mainloop: res[id] = f (id);
                                        mainloop: res[id] = f (id);
 if (res[id] != 0) goto mainloop;
 exit (0);
                                      if (res[id] != 0) goto mainloop;
} Структурный блок
                                      Не структурный блок
```

#### Составные директивы

```
#pragma omp parallel for private(i) \
  firstprivate(n)
for (i = 1; i <= n; i ++)
    {
        A[i]=A[i]+ B[i];
    }</pre>
```

#### Компиляторы, поддеживающие OpenMP

#### OpenMP 4.5:

- □ GNU gcc (6.1): Linux, Solaris, AIX, MacOSX, Windows, FreeBSD, NetBSD, OpenBSD, DragonFly BSD, HPUX, RTEMS
- □ Intel 17.0: Linux, Windows and MacOS
- LLVM: clang (3.9) Linux and MacOS
- HPE CCE Compiling Environment (CCE) 11.0

#### OpenMP 4.0:

- Oracle Developer Studio12.5: Linux and Solaris
- Cray Compiling Environment (CCE) 8.5

#### OpenMP 3.0:

- PGI 8.0: Linux and Windows
- IBM 10.1: Linux and AIX
- Absoft Pro FortranMP: 11.1
- NAG Fortran Complier 5.3

#### Предыдущие версии OpenMP:

- Lahey/Fujitsu Fortran 95
- Microsoft Visual Studio 2008 C++

http://www.openmp.org/resources/ openmp-compilers/

# Компиляция OpenMP-программы

Производитель	Компилятор	Опция компиляции	
GNU	gcc	-fopenmp	
LLVM	clang	-fopenmp	
IBM	XL C/C++ / Fortran	-qsmp=omp	
Oracle	C/C++ / Fortran	-xopenmp	
Intel	C/C++ / Fortran	-openmp, -qopenmp /Qopenmp	
Portland Group	C/C++ / Fortran	-mp	
Microsoft	Visual Studio 2008 C++	/openmp	

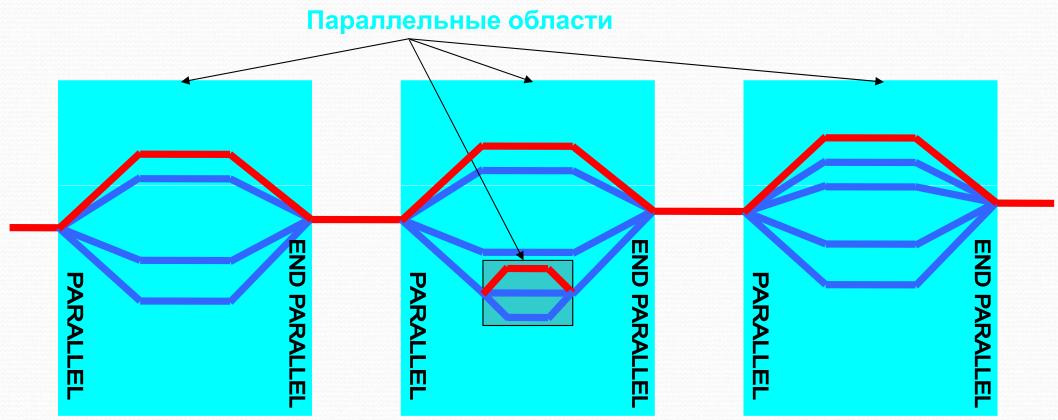
#### Условная компиляция ОрепМР-программы

```
#include <stdio.h>
#include <omp.h> // Описаны прототипы всех функций и типов
int main()
#ifdef OPENMP
  printf("Compiled by an OpenMP-compliant implementation.\n");
  int id = omp get max threads ();
#endif
  return 0;
В значении переменной OPENMP зашифрован год и месяц (уууутт)
версии стандарта OpenMP, которую поддерживает компилятор.
```

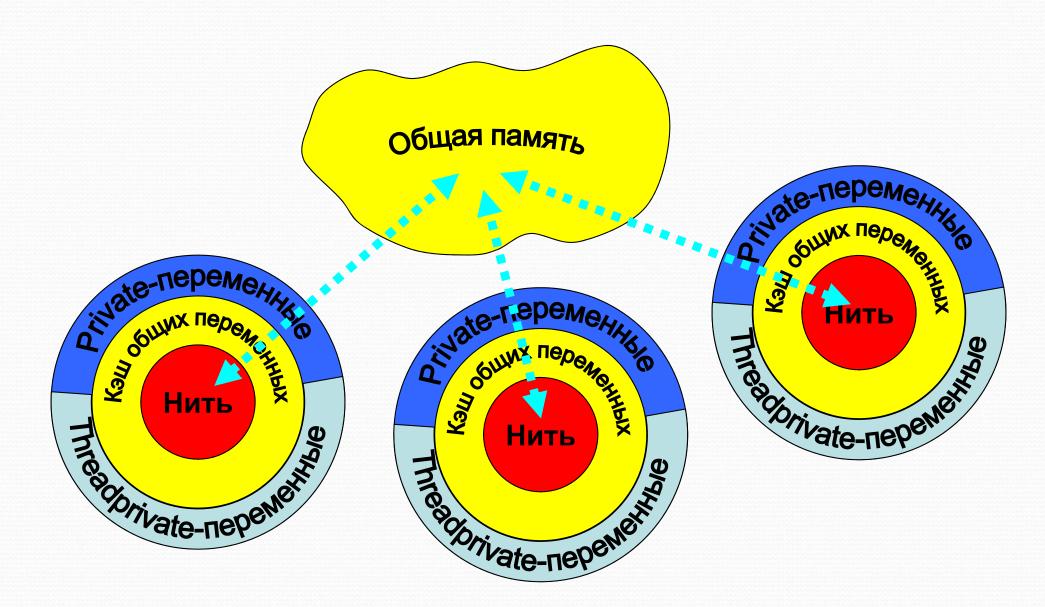
### Выполнение OpenMP-программы

#### Fork-Join параллелизм:

- Главная (master) нить порождает группу (team) нитей по мере небходимости.
- □ Параллелизм добавляется инкрементально.



#### Модель памяти в OpenMP



#### Фрагмент программы

```
int a, b, c, d, x, y;
                          // переменные
int *p, *q;
                         // указатели
int f(int *p, int *q);
                          // прототип функции
a = x * (x - 1);
                         // а хранится в регистре
b = y * (y + 1);
                         // b хранится в регистре
c = a * a + a * b + b * b;
                         // будет использовано позднее
d = a * b * c;
                         // будет использовано позднее
p = &a;
                         // получает адрес а
q = &b;
                         // получает адрес b
x = f(p, q);
                         // вызов функции
```

#### Когерентность и консистентность памяти

P0:

W(x)a

R(y)b

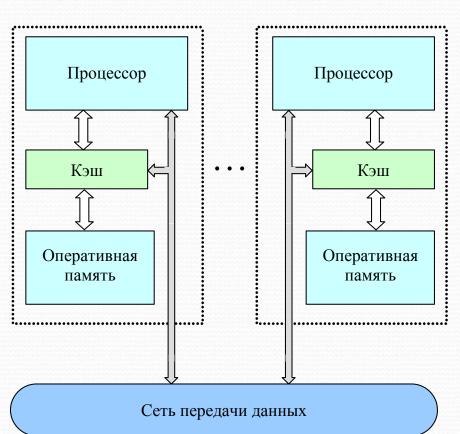
Время

P1: W(y)b

R(y)b

R(x)a

W(x)b



#### Модели консистентности памяти

- Модель консистентности представляет собой некоторый договор между программами и памятью, в котором указывается, что при соблюдении программами определенных правил работа памяти будет корректной, если же требования к программе будут нарушены, то память не гарантирует правильность выполнения операций чтения/записи.
- □ Далее рассматриваются основные модели консистентности.

#### Строгая консистентность

□ Операция чтения ячейки памяти с адресом X должна возвращать значение, записанное самой последней операцией записи с адресом X, называется моделью строгой консистентности.

а) строгая консистентность

P0:

W(x)a

Время

P1:

R(x)a

б) нестрогая консистентность

P0:

W(x)a

Время

P1:

R(x)NIL R(x)a

#### Последовательная консистентность

- □ Впервые определил Lamport в 1979 г. в контексте совместно используемой памяти для мультипроцессорных систем.
- □ Результат выполнения должен быть тот-же, как если бы операторы всех процессоров выполнялись бы в некоторой последовательности, причем операции каждого отдельного процесса выполнялись бы в порядке, определяемой его программой.
- □ Последовательная консистентность не гарантирует, что операция чтения возвратит значение, записанное другим процессом наносекундой или даже минутой раньше, в этой модели только точно гарантируется, что все процессы знают последовательность всех записей в память.

#### Последовательная консистентность

□ а) удовлетворяет последовательной консистентности

P1	W(x)a				
P2		W(x)b			
Р3			R(x)b		R(x)a
P4				R(x)b	R(x)a

□ б) не удовлетворяет последовательной консистентности

P1	W(x)a				
P2		W(x)b			
Р3			R(x)b		R(x)a
P4				R(x)a	R(x)b

#### Причинная консистентность

- □ Предположим, что процесс Р1 модифицировал переменную *x*, затем процесс Р2 прочитал *x* и модифицировал *y*. В этом случае модификация *x* и модификация *y* потенциально причинно зависимы, так как новое значение *y* могло зависеть от прочитанного значения переменной *x*. С другой стороны, если два процесса одновременно изменяют значения различных переменных, то между этими событиями нет причинной связи.
- Операции, которые причинно не зависят друг от друга называются параллельными.
- □ Причинная модель консистентности памяти определяется следующим условием: Последовательность операций записи, которые потенциально причинно зависимы, должна наблюдаться всеми процессами системы одинаково, параллельные операции записи могут наблюдаться разными процессами в разном порядке.

#### Причинная консистентность

P1	W(x)a				
P2		R(x)a	W(x)b		
P3				R(x)b	R(x)a
P4				R(x)a	R(x)b

Нарушение модели причинной консистентности

Корректная последовательность для модели причинной консистентности

P1	W(x)a			W(x)c		
P2		R(x)a	W(x)b			
Р3		R(x)a			R(x)c	R(x)b
P4		R(x)a			R(x)b	R(x)c

Определение потенциальной причинной зависимости может осуществляться компилятором посредством анализа зависимости операторов программы по данным.

#### PRAM (Pipelined RAM) и процессорная консистентность

**PRAM:** Операции записи, выполняемые одним процессором, видны всем остальным процессорам в том порядке, в каком они выполнялись, но операции записи, выполняемые разными процессорами, могут быть видны в произвольном порядке.

Записи выполняемые одним процессором могут быть конвейеризованы: выполнение операций с общей памятью можно начинать не дожидаясь завершения предыдущих операций записи в память.

**Процессорная:** PRAM + когерентность памяти. Для каждой переменной **X** есть общее согласие относительно порядка, в котором процессоры модифицируют эту переменную, операции записи в разные переменные - параллельны. Таким образом, к упорядочиванию записей каждого процессора добавляется упорядочивание записей в переменные или группы.

### Слабая консистентность (weak consistency)

- Пусть процесс в критической секции циклически читает и записывает значение некоторых переменных. Даже, если остальные процессоры и не пытаются обращаться к этим переменным до выхода первого процесса из критической секции, для удовлетворения требований рассматриваемых ранее моделей консистентности они должны видеть все записи первого процессора в порядке их выполнения, что, естественно, совершенно не нужно.
- □ Наилучшее решение в такой ситуации это позволить первому процессу завершить выполнение критической секции и, только после этого, переслать остальным процессам значения модифицированных переменных, не заботясь о пересылке промежуточных результатов.

# Слабая консистентность (weak consistency)

**Модель слабой консистентности**, основана на выделении среди переменных специальных синхронизационных переменных и описывается следующими правилами:

- 1. Доступ к синхронизационным переменным определяется моделью последовательной консистентности;
- 2. Доступ к синхронизационным переменным запрещен (задерживается), пока не выполнены все предыдущие операции записи;
- 3. Доступ к данным (запись, чтение) запрещен, пока не выполнены все предыдущие обращения к синхронизационным переменным.

# Слабая консистентность (weak consistency)

- Первое правило определяет, что все процессы видят обращения к синхронизационным переменным в определенном (одном и том же) порядке.
- Второе правило гарантирует, что выполнение процессором операции обращения к синхронизационной переменной возможно только после выталкивания конвейера (полного завершения выполнения на всех процессорах всех предыдущих операций записи переменных, выданных данным процессором).
- □ Третье правило определяет, что при обращении к обычным (не синхронизационным) переменным на чтение или запись, все предыдущие обращения к синхронизационным переменным должны быть выполнены полностью. Выполнив синхронизацию перед обращением к общей переменной, процесс может быть уверен, что получит правильное значение этой переменной.

# Слабая консистентность (weak consistency)

P1	W(x)a	W(x)b	S			
P2				R(x)a	R(x)b	S
Р3				R(x)b	S	

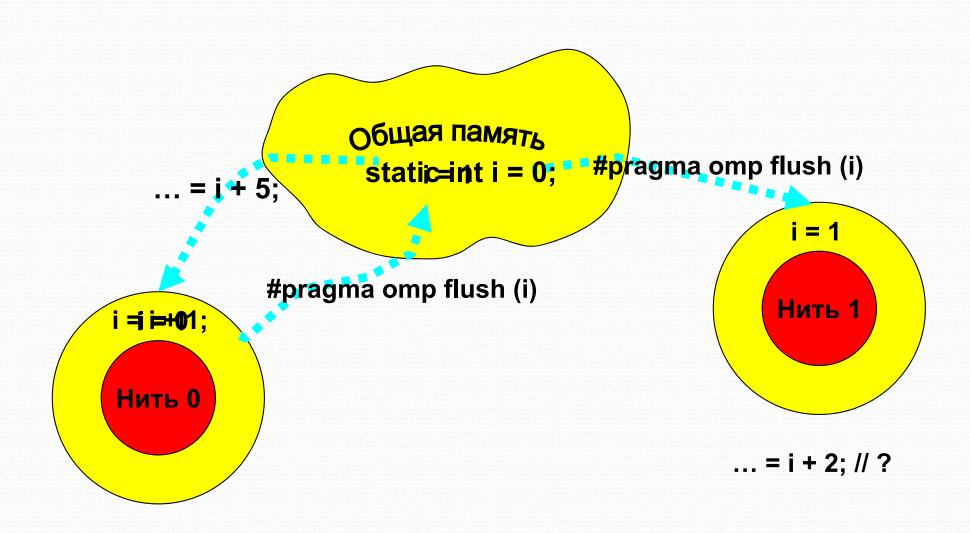
Допустимая последователь- ность событий

Недопустимая последовательность событий

P1	W(x)a	W(x)b	S		
P2				S	R(x)a

...

### Модель памяти в OpenMP



### Консистентность памяти в ОрепМР

Корректная последовательность работы нитей с переменной:

- Нить0 записывает значение переменной write (var)
- Нить0 выполняет операцию синхронизации flush (var)
- □ Нить1 выполняет операцию синхронизации flush (var)
- Нить1 читает значение переменной read (var)

1: A = 1

. . .

2: flush(A)

#### Консистентность памяти в ОрепМР

#pragma omp flush [(список переменных)]

- По умолчанию все переменные приводятся в консистентное состояние (#pragma omp flush):
- при барьерной синхронизации;
- при входе и выходе из конструкций parallel, critical и ordered;
- при выходе из конструкций распределения работ (for, single, sections, workshare), если не указана клауза nowait;
- при вызове omp\_set\_lock и omp\_unset\_lock;
- □ при вызове omp\_test\_lock, omp\_set\_nest\_lock, omp\_unset\_nest\_lock и omp\_test\_nest\_lock, если изменилось состояние семафора.

При входе и выходе из конструкции **atomic** выполняется **#pragma omp flush(x)**, где x — переменная, изменяемая в конструкции **atomic**.

### Консистентность памяти в ОрепМР

- Если пересечение множеств переменных, указанных в операциях flush, выполняемых различными нитями не пустое, то результат выполнения операций flush будет таким, как если бы эти операции выполнялись в некоторой последовательности (единой для всех нитей).
- 2. Если пересечение множеств переменных, указанных в операциях flush, выполняемых одной нитью не пустое, то результат выполнения операций flush, будет таким, как если бы эти операции выполнялись в порядке определяемом программой.
- 3. Если пересечение множеств переменных, указанных в операциях flush, пустое, то операции flush могут выполняться независимо (в любом порядке).

#### Классы переменных

- □ В модели программирования с разделяемой памятью:
  - Большинство переменных по умолчанию считаются **shared**
- Глобальные переменные совместно используются всеми нитями (shared):
  - Фортран: COMMON блоки, SAVE переменные, MODULE переменные
  - Си: file scope, static
  - Динамически выделяемая память (ALLOCATE, malloc, new)
- □ Но не все переменные являются разделяемыми ...
  - Стековые переменные в подпрограммах (функциях), вызываемых из параллельного региона, являются **private**.
  - Переменные объявленные внутри блока операторов параллельного региона являются приватными.
  - Счетчики циклов витки которых распределяются между нитями при помощи конструкций **for** и **parallel for**.

#### Классы переменных

```
#define N 100
                                             extern double Array1[N];
double Array1[N];
                                             void work(int *Array, int i) {
int main() {
  int Array2[N],i;
                                               double TempArray[10];
#pragma omp parallel
                                               static int count;
    int iam = omp_get_thread_num();
    #pragma omp for
    for (i=0; i < N; i++)
      work(Array2, i);
                               TempArray, iam, i
 printf("%d\n", Array2[0]);
                                                     Array1, Array2,
                                  TempArray,
          Array1, Array2,
                                                          count
                                    iam, i
               count
                                 TempArray,
                                    iam, i
```

#### Классы переменных

Можно изменить класс переменной при помощи конструкций:

- shared (список переменных)
- private (список переменных)
- firstprivate (список переменных)
- lastprivate (список переменных)
- threadprivate (список переменных)
- default (private | shared | none)

### Конструкция private

- Конструкция «private(var)» создает локальную копию переменной «var» в каждой из нитей.
  - Значение переменной не инициализировано
  - Приватная копия не связана с оригинальной переменной
  - В OpenMP 2.5 значение переменной «var» не определено после завершения параллельной конструкции

```
sum = -1.0;
#pragma omp parallel for private (i,j,sum)
for (i=0; i< m; i++)
{
    sum = 0.0;
    for (j=0; j< n; j++)
        sum +=b[i][j]*c[j];
    a[i] = sum;
}
// sum == -1.0</pre>
```

### Конструкция firstprivate

«firstprivate» является специальным случаем «private»
 Инициализирует каждую приватную копию соответствующим значением из главной (master) нити.

```
BOOL FirstTime=TRUE;
#pragma omp parallel for firstprivate(FirstTime)
for (row=0; row<height; row++)
{
   if (FirstTime == TRUE) { FirstTime = FALSE; FirstWork (row); }
   AnotherWork (row);
}</pre>
```

# Конструкция lastprivate

 lastprivate передает значение приватной переменной, посчитанной на последней итерации в глобальную переменную.

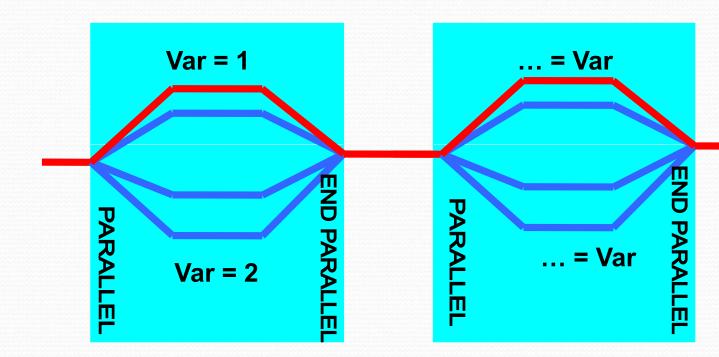
```
int i;
#pragma omp parallel
{
    #pragma omp for lastprivate(i)
    for (i=0; i<n-1; i++)
        a[i] = b[i] + b[i+1];
}
a[i]=b[i];    /*i == n-1*/</pre>
```

# **Директ**ива threadprivate

Отличается от применения конструкции private:

- private скрывает глобальные переменные
- threadprivate переменные сохраняют глобальную область видимости внутри каждой нити

#pragma omp threadprivate (Var)



Если количество нитей не изменилось, то каждая нить получит значение, посчитанное в предыдущей параллельной области.

### Конструкция default

Меняет класс переменной по умолчанию:

- default (shared) действует по умолчанию
- default (private) есть только в Fortran
- default (firstprivate) есть только в Fortran OpenMP 3.1
- default (none) требует определить класс для каждой переменной

```
itotal = 100
#pragma omp parallel
private(np,each)
{
   np = omp_get_num_threads()
   each = itotal/np
.......
}
```

```
itotal = 100
#pragma omp parallel default(none)
private(np,each) shared (itotal)
{
    np = omp_get_num_threads()
    each = itotal/np
.......
}
```