

Основные понятия теории и практики параллельных вычислений

(Занятие 1)

Игорь Николаевич Коньшин

МГУ - 02.07.2012

Теория + Обучение + Наука + Практика

- Структура занятий
- Различные взгляды
- Опыт работы
- Передовой край
- Практические занятия

Вопросы

- Методы // вычислений
- Линейная алгебра
- Unix
- MPI

- Писали сами ?
- Account ?

- ВОПРОСЫ – сразу!

Начало

Linear Solvers

USA 199x EM

- Serial – Parallel
- Dense – Sparse
- In-core – Out-of-core
- Symmetric – Unsymmetric
- Real – Complex

Gordon gold prize pretender (iter+dense)

TOP-500 (June 2011)

| # | Country | Computer | Year | Cores | Rmax (Pflops, 10 ¹⁵) |
|-----|---------|---|------|--------|--|
| 1 | Japan | K computer, SPARC64 VIIIfx 2.0GHz, Tofu interconnect | 2011 | 548352 | 8.162 |
| 2 | China | NUDT TH MPP, X5670 2.93Ghz 6C, NVIDIA GPU, FT-1000 8C | 2010 | 186368 | 2.566 |
| 3 | USA | Cray XT5-HE Opteron 6-core 2.6 GHz | 2009 | 224162 | 1.759 |
| ... | | | | | |
| 13 | Russia | T-Platforms T-Blade2/1.1, Xeon X5570/X5670 2.93 GHz, Nvidia 2070 GPU, Infiniband QDR, «Ломоносов» | 2011 | 33072 | 0.674 |

TOP-500 (June 2012)

| # | Country | Computer | Year | Cores | Rmax (Pflops, 10 ¹⁵) |
|-----|---------------|--|------|---------|--|
| 1 | United States | Sequoia - BlueGene/Q, Power BQC 16C 1.60 GHz, Custom / IBM | 2011 | 1572864 | 16.324 |
| 2 | Japan | Institute for Computational Science (AICS) Japan K computer, SPARC64 VIIIfx 2.0GHz, Tofu interconnect / Fujitsu | 2011 | 705024 | 10.510 |
| 3 | United States | Mira - BlueGene/Q, Power BQC 16C 1.60GHz, Custom / IBM | 2012 | 786432 | 8.162 |
| ... | | | | | |
| 22 | Russia | «Ломоносов» - T-Platforms T-Blade2/1.1, Xeon X5570/X5670/E5630 2.93/2.53 GHz, Nvidia 2070 GPU, PowerXCell 8i Infiniband QDR / T-Platforms | 2011 | 78660 | 0.901 |

Линейная алгебра

- Основное время расчетов
- «Царица» вычислительной математики
- Готовые решения – пакеты программ

PLAPACK

(Parallel Linear Algebra Package) University of Texas at Austin

PLAPACK R3.2 <http://www.cs.utexas.edu/users/plapack/>

PLAPACK – пакет параллельных процедур линейной алгебры, который включает параллельные версии процедур решения **плотных** систем линейных уравнений с помощью LU и QR-разложений, а также разложения Холецкого.

Для реализации параллелизма PLAPACK использует геометрическое декартово распределение матриц и векторов.

Для осуществления межпроцессорных коммуникаций в PLAPACK использован интерфейс передачи сообщений MPI.

- *Предназначен для решения плотных систем.*

SuperLU

Lawrence Berkeley National Laboratory

<http://crd.lbl.gov/~xiaoye/SuperLU/>

SuperLU - библиотека общего назначения, предназначенная для **прямого** решения больших **разреженных** несимметричных систем линейных уравнений на высокопроизводительных машинах

Существует 3 различных варианта библиотеки:

- для последовательных архитектур (библиотека SuperLU версии 4.3 от 27 октября 2011);
- для параллельных архитектур с разделяемой памятью (shared memory) (библиотека SuperLU_MT версии 2.0 от 10 сентября 2007);
- для параллельных архитектур с распределенной памятью (distributed memory) (библиотека SuperLU_DIST версии 3.1 от 20 мая 2012).

Trilinos

Sandia National Laboratories

Trilinos v.10.10 от 24.04.2012 г.

<http://trilinos.sandia.gov/>

- Работа с векторами, матрицами и графами;
- Решение линейных систем прямыми и итеративными методами;
- Решение задач на собственные значения;
- Решение уравнений в частных производных;
- Решение нелинейных систем.

Включает различных 50 пакетов.

Trilinos

Sandia National Laboratories

Trilinos v.10.10 от 24.04.2012 г.

<http://trilinos.sandia.gov/>

Основные библиотеки линейной алгебры:

- Epetra, EpetraExt

Предобуславливания:

- AztecOO, IFPACK, ML

Решатели линейных систем:

- Epetra, Teuchos, AztecOO, Amesos

PETSc

(PETSc: The Portable, Extensible Toolkit for Scientific Computation)

PETSc v.3.3 от 05.06.2012 г.

<http://www.mcs.anl.gov/petsc/>

Библиотека PETSc предназначена для численного решения систем дифференциальных уравнений в частных производных на многопроцессорных вычислительных системах с распределенной памятью. Она представляет собой набор структур данных и процедур, являющихся строительными блоками для реализации крупномасштабных параллельных приложений. Для осуществления взаимодействия параллельных процессов через обмен сообщениями PETSc использует стандарт MPI.

Достоинства:

- Мощные и надежные решатели;
- Поддержка Windows, Linux;
- Параллелизм MPI, pthreads, NVIDIA GPU, а также комбинированный MPI-pthreads и MPI-GPU.

UNIX vrs. Windows

- Windows (DOS)
 - XP
 - Vista
 - Win7
 - ...
- UNIX (Linux)
 - Red Hat
 - Ubuntu
 - ...

UNIX команды

| | | |
|------------------|----------------|---------|
| % mkdir dir | | [mkdir] |
| % cd dir | (. ..) | [cd] |
| % ls | (-lart) | [dir] |
| % cp file1 file2 | (cp file1 dir) | [copy] |
| % rm file | (rm -f file) | [del] |
| % ps | (ps -axu) | |
| % vi file | | |

Файловые команды

ls – список файлов и каталогов

ls -al – форматированный список со скрытыми каталогами и файлами

cd dir – сменить директорию на dir

cd – сменить на домашний каталог

pwd – показать текущий каталог

mkdir dir – создать каталог dir

rm file – удалить file

rm -rf dir – удалить форсированно каталог dir

cp file1 file2 – скопировать file1 в file2

cp -r dir1 dir2 – скопировать dir1 в dir2; создаст каталог dir2, если он не существует

mv file1 file2 – переименовать или переместить file1 в file2. если file2

существующий каталог - переместить file1 в каталог file2

ln -s file link – создать символическую ссылку link к файлу file

touch file – создать file

cat > file – направить стандартный ввод в file

more file – вывести содержимое file

head file – вывести первые 10 строк file

tail -f file – вывести содержимое file по мере роста, начинает с последних 10 строк

Управление процессами

ps – вывести ваши текущие активные процессы

top – показать все запущенные процессы

kill pid – убить процесс с id pid

killall proc – убить все процессы с именем proc

bg – список остановленных и фоновых задач; продолжить выполнение остановленной задачи в фоне

fg – выносит на передний план последние задачи

fg n – вынести задачу n на передний план

Права доступа на файлы

chmod octal file – сменить права file на octal, отдельно для пользователя, группы и для всех добавлением:

4 – чтение (r)

2 – запись (w)

1 – исполнение (x)

Примеры:

chmod 777 – чтение, запись, исполнение для всех

chmod 755 – rwx для владельца, rx для группы и остальных.

Дополнительные опции: **man chmod**

Системная информация

date – вывести текущую дату и время

cal – вывести календарь на текущий месяц

whoami – имя, под которым вы залогинены

finger user – показать информацию о user

uname -a – показать информацию о ядре

cat /proc/cpuinfo – информация ЦПУ

cat /proc/meminfo – информация о памяти

man command – показать мануал для command

df – показать инф. о использовании дисков

du – вывести “вес” текущего каталога

which app – какая app будет запущена по умолчанию

UNIX редактор vi

% vim file

| | |
|-------|--------------------|
| <Esc> | «обычный режим» |
| i | «режим ввода» |
| : | «командный режим» |
| / | «режим поиска» |
| v | «визуальный режим» |

vi: перемещение по файлу

h j k l <стрелочки>

0 ("ноль") — в начало текущей строки;

^ — в начало текущей строки (к первому непробельному символу);

\$ — в конец текущей строки

w — на слово вправо (см. W)

b — на слово влево (см. B)

<Ctrl-f> — на страницу (экран) вниз

<Ctrl-b> — на страницу (экран) вверх

<number>G — перейти на конкретную строку <number>

/<text><CR> — перейти к <text> (? — назад)

n — повторить поиск (N — назад)

* — найти следующее слово (# — предыдущее)

vi: редактирование файла

r R - замена

i I - вставка

a A - вставка после

o O - вставка строки

x X - удалить символ

d D - удалить символ

dd - удалить строки

y Y - копировать в буфер

p P - вставка из буфера

J - соединить две строки

u - отмена последней команды

. - повтор последней команды

vi: другие команды

<n> - множитель перед командой

^G - показать информацию о файле

:sy[ntax] on/off - подсветка синтаксиса

:set ic - игнорировать регистр при поиске

:3,+.5s/text1/text2/g - «продвинутая» замена

ZZ - выход с записью файла

:q! - выход БЕЗ записи файла

Запуск MPI программ

```
% mpicc file.c -o prog
```

```
% mpirun -np 4 -machinefile hosts.txt prog
```

```
% qsub file.qs
```

```
% qstat
```

```
% qdel <n>
```

Пример MPI программы

```
#include "mpi.h"
#include "stdio.h"
int main(int argc, char** argv)
{
    int np, myid, namelen;
    char proc_name[MPI_MAX_PROCESSOR_NAME];
    MPI_Init(&argc, &argv);
    MPI_Comm_size(MPI_COMM_WORLD, &np);
    MPI_Comm_rank(MPI_COMM_WORLD, &myid);
    MPI_Get_processor_name(proc_name, &namelen);
    printf("I am %d of %d with name: %s\n",
           myid, np, proc_name);
    MPI_Finalize();
}
```