

Программа учебной дисциплины «Введение в суперкомпьютерное моделирование»

Утверждена
Академическим советом ОП¹
Протокол № от __.__.20__

Разработчик	Писарев В.В., доцент, Департамент прикладной математики Смирнов Г.С., научный сотрудник, МЛ САМ и МА ВШЭ Никольский В.П., ассистент, Департамент прикладной математики
Число кредитов	5
Контактная работа (час.)	62
Самостоятельная работа (час.)	128
Курс, Образовательная программа	Образовательная программа «Прикладная математика»
Формат изучения дисциплины	без использования онлайн курса

1. Цель, результаты освоения дисциплины и пререквизиты

Целью дисциплины является ознакомление студентов с архитектурами суперкомпьютерных систем, основами работы с суперкомпьютерами и написания программ для параллельных и распределенных вычислительных систем. Курс предлагает ознакомление с методами параллелизации простейших вычислительных задач.

Для освоения учебной дисциплины студенты должны владеть следующими знаниями и компетенциями:

- Математический анализ
- Языки программирования, Аппаратные средства вычислительной техники

2. Содержание учебной дисциплины

Разработчик ПУД может совместить детализацию тематического содержания в таблице, или разместить темы (разделы дисциплины) отдельно, может избежать табличного отображения и привести разбиение на контактные часы и самостоятельную работу в виде описания.

¹ Для ПУД из общеуниверситетского пула – Руководитель Департамента.

Тема (раздел дисциплины)	Объем в часах ²	Планируемые результаты обучения (ПРО), подлежащие контролю	Формы контроля
	Лк		
	См		
	онл/ср		
Тема 1. Общие концепции производительности и параллельной эффективности вычислительных систем	8	Знает основные понятия: задержка и пропускная способность программы, эффективность распараллеливания и масштабируемость программы, законы Амдала и Густафсона-Барсиса. Умеет вычислять эффективную пропускную способность программы. Понимает отличия понятий CPU-bound и bandwidth-bound программ.	письменная работа 80 минут
	6		
	16		
Тема 2. Параллельное выполнение инструкций в компьютерах с общей памятью: конвейер, SIMD инструкции, многопоточность с OpenMP	10	Знает ключи оптимизации для компилятора языка Си GCC. Знает понятия SIMD инструкций. Может объяснить разницу в производительности программ с регулярным и случайным доступом к памяти. Знает базовые концепции OpenMP. Умеет компилировать и запускать программу, написанную с применением OpenMP. Умеет писать простейшие параллельные циклы с OpenMP.	Домашнее задание: написание собственной компьютерной программы для решения учебной задачи.
	10		
	48		
Тема 3. Гетерогенные вычислительные системы. Программирование	14	Понимает отличия системы с распределенной памятью и общей памятью. Умеет применять библиотеку MPI	Домашнее задание: написание собственной компьютерной
	14		
	64		

2 Не заполняется для ПУД, которые не вошли в УП ОП и не запланированы в расписании учебных занятий

систем с распределенной памятью. Стандарт MPI.		в программах на языке Си. Умеет распараллеливать простейшие численные алгоритмы.	программы для решения учебной задачи.
Часов по видам учебных занятий:			32
			30
			128
Итого часов:			190

Формы учебных занятий:

лк – лекции в аудитории;

см - семинары/ практические занятия/ лабораторные работы в аудитории;

onl – лекции или иные виды работы студента с помощью онлайн-курса;

ср – самостоятельная работа студента.

Содержание разделов дисциплины:

1. Общие концепции производительности и параллельной эффективности вычислительных систем

Понятие суперкомпьютера. Метрики производительности и списки Top500, HPCG Top500, Top500 СНГ. Примеры задач современной физики и инженерных проблем, решаемых с помощью суперкомпьютеров. Типичный набор программного обеспечения для суперкомпьютера. Очереди пользовательских задач. Синхронизация вычислений на многопроцессорных системах; интерконнект, пропускная способность, задержка передачи сообщения. Законы Амдала и Густафсона. Strong scaling и weak scaling. Модель Roofline оценки и оптимизации производительности. Обзор технологий гетерогенных и гибридных вычислений.

2. Параллельное выполнение инструкций в компьютерах с общей памятью: конвейер, SIMD инструкции, многопоточность с OpenMP

Представление чисел в памяти компьютера. Операции с плавающей точкой, конвейеризация. SIMD вычисления. Ключи оптимизации компилятора языка Си. Автовекторизация и разворачивание циклов. Понятие систем с общей и распределенной памятью. Синхронизация вычислений на многопроцессорных системах. Многопоточные приложения в системах с общей памятью. Применение OpenMP в языке Си. Компиляция OpenMP программ. Синхронизация потоков. Критические секции, атомарные операции. Распараллеливание циклов.

Примеры параллелизуемых и последовательных алгоритмов. Численное интегрирование функций. Метод прогонки и метод Гаусса для решения систем линейных уравнений. Параллельные алгоритмы для задач динамики частиц.

3. Гетерогенные вычислительные системы. Программирование систем с распределенной памятью. Стандарт MPI.

Концепция обмена сообщениями в системах с распределенной памятью. Компиляция и запуск MPI программ. Обмен сообщениями: двухточечные и коллективные обмены. Синхронизация процессов в MPI программах. Реализация отдельных параллельных алгоритмов для систем с распределенной памятью с использованием MPI. Знакомство с технологиями программирования гетерогенных систем: перенос вычислительных алгоритмов на специализированные ускорители.

3. Оценивание

Предусмотрено 4 элемента контроля: контрольная работа по Теме 1, домашняя работа по Теме 2, домашняя работа по Теме 3 и экзамен.

Оценка за контрольную работу по Теме 1 обозначается O_1 .

Оценка за домашнюю работу по Теме 2 обозначается O_2 .

Оценка за домашнюю работу по Теме 3 обозначается O_3 .

Промежуточная оценка рассчитывается по формуле:

$$O_{\text{промежуточ}} = 1/5 (O_1 + 2O_2 + 2 O_3)$$

Экзамен проводится в устной форме

Итоговая оценка по курсу выставляется по следующей формуле:

$$O_{\text{итоговая}} = 1/3 \cdot (2O_{\text{промежуточ}} + O_{\text{экзамен}}) = 2/15O_1 + 4/15O_2 + 4/15 O_3 + 1/3 O_{\text{экзамен}}.$$

Способ округления результирующей оценки по учебной дисциплине: арифметический.

Блокирующие элементы не предусмотрены.

4. Примеры оценочных средств

Блокирующих элементов не предусмотрено.

А) Пример задачи домашнего задания:

Дан набор координат частиц единичной массы. Предполагая гравитационное взаимодействие между частицами $F_{ij} = -r_{ij}/\|r_{ij}\|^3$, рассчитать силы, действующие на каждую из частиц.

1. Написать последовательную версию алгоритма на языке Си и измерить время ее работы без использования оптимизаций (-O 0)
2. Сравните время работы при различных опциях компилятора O1, O2, O3.
3. Оптимизируйте набор инструкций для вашего процессора (-march; -mtune). Улучшилось ли время работы? Почему?
4. Посчитать количество операций с плавающей точкой в алгоритме и сравнить с теоретической производительностью процессора. Какой процент от возможной производительности процессора используется в каждом предыдущем случае?
5. Какие места вашего алгоритма можно распараллелить? Реализуйте параллельную версию с использованием OpenMP. Проверьте, что результаты последовательной и параллельной программ совпадают.
6. Проверьте масштабируемость в слабом и сильном смысле на разных размерах задачи. Наблюдаются ли отклонения от идеальной зависимости, если да, чем они обусловлены?

Б) Пример билета на экзамене

1. Какая должна быть степень параллельности кода, чтобы при запуске его на 32-ядерной системе ускорение было не менее чем в 30 раз по сравнению с однопроцессорным выполнением?

2. На решение вычислительной задачи требуется 100 тыс. операций, из которых 100 должны выполняться последовательно, а остальные могут быть распараллелены.

Процессор выполняет 100 операций за единицу времени. При распараллеливании задачи возникают накладные расходы на коммуникацию, равные $500 + 100 \times N$ операций, где N — число процессоров. За какое минимальное время задача может быть решена на многопроцессорной системе?

3. Каков результат выполнения программы?

```
int i, j, a=0;
#pragma omp parallel for num_threads(4) private(a)
for (i = 0; i < 4; i++) {
    for (j = 0; j < 4; j++) {
        a++;
    }
}
printf("%d", a);
}
```

4. Объяснить, что здесь происходит и будет ли работоспособным такой код?

```
if (rank == 0) {
    MPI_Send(&buffer0, 10, MPI_INT, 1, tag, MPI_COMM_WORLD);
    MPI_Recv(&buffer1, 10, MPI_INT, 1, tag, MPI_COMM_WORLD, &status);
} else if (rank == 1) {
    MPI_Recv(&buffer0, 10, MPI_INT, 0, tag, MPI_COMM_WORLD,
&status);
    MPI_Send(&buffer1, 10, MPI_INT, 0, tag, MPI_COMM_WORLD);
}
```

5. Ресурсы

5.1. Рекомендуемая основная литература

№п/п	Наименование
1	Язык программирования Си / Б. Керниган, Д. Ритчи; Пер. с англ. под ред. В. С. Штаркмана. – Изд. 3-е, испр. – СПб.: Невский Диалект, 2001. – 351 с.

5.2. Рекомендуемая дополнительная литература

№п/п	Наименование
1	Гергель, В. П. Современные языки и технологии параллельного программирования. М. Изд-во Моск. ун-та, 2012. - 406 с.
2	Антонов, А. С. Технологии параллельного программирования MPI и OpenMP. М. Изд-во Моск. ун-та, 2012. - 339 с.
3	MPI: A Message-Passing Interface Standard. Version 2.2. электронный документ: https://www.mpi-forum.org/docs/mpi-2.2/mpi22-report.pdf

5.3. Программное обеспечение

№п/п	Наименование	Условия доступа/скачивания

1	ОС Ubuntu GNU/Linux 18.04 LTS	<i>свободное лицензионное соглашение</i>
2	Компилятор языка Си GCC	<i>свободное лицензионное соглашение; поставляется с ОС семейства GNU/Linux</i>
3	Библиотеки MPI	<i>свободное лицензионное соглашение; есть в репозиториях ПО Ubuntu GNU/Linux</i>
4	Текстовый редактор Microsoft Visual Studio Code	<i>свободное лицензионное соглашение; доступно для скачивания с https://code.visualstudio.com/</i>
5	SSH-клиент PuTTY для ОС Windows	<i>свободное лицензионное соглашение; доступно для скачивания с https://www.putty.org/</i>
6	SCP клиент WinSCP для ОС Windows	<i>свободное лицензионное соглашение; доступно для скачивания с https://winscp.net/</i>
7	SCP клиент Cyberduck для ОС Windows, MacOS	<i>свободное лицензионное соглашение; доступно для скачивания с https://cyberduck.io/</i>

5.4. Профессиональные базы данных, информационные справочные системы, интернет-ресурсы (электронные образовательные ресурсы)

№п/п	Наименование	Условия доступа/скачивания
1	Сайт Лаборатории параллельных вычислительных технологий НИВЦ МГУ	https://parallel.ru/
2	OpenMP Architecture Review Boards	https://www.openmp.org/

5.5. Материально-техническое обеспечение дисциплины

Семинары по дисциплине проводятся в компьютерном классе. На компьютеры должен быть установлен SSH-клиент (PuTTY для ОС Microsoft Windows, ssh для ОС GNU/Linux) и SCP-клиент (WinSCP для ОС Windows). Для выполнения заданий требуется доступ к суперкомпьютерному кластеру МИЭМ.

Лекции проводятся с использованием мультимедийного проектора.

6. Особенности организации обучения для лиц с ограниченными возможностями здоровья и инвалидов

В случае необходимости, обучающимся из числа лиц с ограниченными возможностями здоровья (по заявлению обучающегося) а для инвалидов также в

соответствии с индивидуальной программой реабилитации инвалида, могут предлагаться следующие варианты восприятия учебной информации с учетом их индивидуальных психофизических особенностей, в том числе с применением электронного обучения и дистанционных технологий:

6.1.1. *для лиц с нарушениями зрения:* в печатной форме увеличенным шрифтом; в форме электронного документа; в форме аудиофайла (перевод учебных материалов в аудиоформат); в печатной форме на языке Брайля; индивидуальные консультации с привлечением тифлосурдопереводчика; индивидуальные задания и консультации.

6.1.2. *для лиц с нарушениями слуха:* в печатной форме; в форме электронного документа; видеоматериалы с субтитрами; индивидуальные консультации с привлечением сурдопереводчика; индивидуальные задания и консультации.

6.1.3. *для лиц с нарушениями опорно-двигательного аппарата:* в печатной форме; в форме электронного документа; в форме аудиофайла; индивидуальные задания и консультации.

7. Дополнительные сведения

Домашние задания по дисциплине предоставляются в виде исходных кодов на языке Си. Выполнение домашних заданий на других языках программирования, включая C++, – по согласованию с преподавателем дисциплины.