

УЧЕБНАЯ ПРОГРАММА

«Многопоточные вычисления на основе технологий MPI и OpenMP»

Лекции: 26 часов

Практические занятия: 22 часа

Самостоятельная работа: 24 часа

Всего часов: 72

Лектор: к.ф.-м.н. Н.И. Хохлов.

Ассистенты: А.Ю. Субботина, А.В. Шевченко.

Лекции.

1. Введение в курс. Основы MPI. Компиляция и запуск программ.

Архитектура вычислительных систем с разделяемой памятью. История суперкомпьютеров. Кластера типа Beowolf. Устройства кластера и основные его компоненты. Высокоскоростные сети. История и стандарты MPI. Существующие реализации MPI. Основные понятия о процессах в MPI. Адресация процессов. Разбор простого примера «Hello world». Компиляция и запуск программ MPI. Запуск на одном и нескольких узлах. Распределение процессов между узлами. Система очередей PBS. Написание скриптов запуска PBS.

2. Виды коммуникаций. Коммуникации типа точка-точка.

Типы коммуникаций в MPI. Коммуникации типа точка-точка. Блокирующие и неблокирующие коммуникации. Особенности использования буфера библиотекой MPI. Очередность получения и передачи сообщений процессорами. Разбор примеров..

3. Распараллеливание сеточных методов.

Основные алгоритмы распараллеливания сеточных методов решения PDE. Структурные и неструктурные сетки. Пакеты для деления неструктурных сеток. Распараллеливание на структурных сетках на примере уравнение теплопроводности в двумерном случае.

4. Групповые коммуникации.

Введение в групповые коммуникации в MPI. Особенности работы групповых коммуникаций. Типы групповых сообщений: синхронизация, сбор и передача данных, коллективные вычисления. Отличия и сходства в вызовах и работе с коммуникациями типа точка-точка. Взаимодействия процессов при групповых коммуникациях. Примеры коммуникаций. Разбор примеров.

5. Распределенные операции с матрицами и векторами.

Алгоритмы распределенных операций над матрицами и векторами. Разбор примера решения СЛАУ методом сопряженных градиентов в MPI. Особенности работы с разреженными матрицами.

6. Собственные типы MPI.

Понятие о типе данных. Виды типов данных в MPI. Создание своих типов. Разбор примеров. Оптимизация распараллеливания задачи теплопроводности используя собственные типы.

7. Группы и коммутаторы. Виртуальные топологии.

Понятие о группе и коммутаторе, их сходства и различия. Основные задачи групп и коммутаторов. Функции для работы с группами и коммутаторами. Разбор примера. Понятие о виртуальных топологиях, зачем они нужны. Пример виртуальной топологии на двумерной декартовой сетке. Модификация примера с задачей теплопроводности, используя декартову виртуальную топологию.

8. Введение в MPI-2.

Основные новшества в MPI-2. Динамическое порождение и уничтожение процессов. Параллельная работа с файлами. Разбор простых примеров. Реализация сохранения в задаче теплопроводности используя MPI-I/O. Исследование производительности и масштабируемости.

9. Введение в OpenMP

Вычислительные системы с общей памятью. Стандарт OpenMP. Сравнение со стандартными реализациями потоков (POSIX Threads, WinAPI и другие реализации). Поддержка современными компиляторами. Особенности компиляции и запуска программ. Модель программирования OpenMP.

10. Основы OpenMP

Директивы PRAGMA и функции исполняющей среды OpenMP. Разбор простого примера «Hello World». Основные принципы программирования в OpenMP. Основные правила применения директив OpenMP, используемых для описания данных и организации параллельных вычислений. Вопросы видимости данных и корректности доступа к данным.

11. Параллельное выполнение циклов, параллельные секции, синхронизация потоков.

Методы распараллеливания циклов и контроля распределения работы между процессорами. Статическое и динамическое распределение итераций между потоками. Способы балансировки работы процессоров с помощью директив OpenMP. Задание внешних переменных окружения с помощью функций OpenMP. Параллельные секции. Синхронизация параллельных потоков.

12. Введение в BLAS

Особенности и история BLAS. Три уровня библиотеки. Обзор существующих реализаций. BLAS в Intel MKL. Разреженные матрицы. Описание форматов. BLAS для разреженных матриц.

13. Решение СЛАУ

Методы решения СЛАУ в библиотеках BLAS и LAPACK. Прямые и итерационные методы решения методов решения СЛАУ. Прямые и итерационные решатели систем в MKL. Обзор библиотек DSS и PARDISO. Другие библиотеки для решения разреженных СЛАУ.

14. Средства создания, профилирования и отладки, предоставляемые Intel. Intel Parallel Studio

Все грани оптимизации. Оптимизация на основе анализа выполнения. Важность профилирования для процессорно-интенсивных приложений (большинство HPC). Создание, профилирование и отладка HPC-приложений в интегрированной среде Intel

Parallel Studio. Parallel Composer - средство для создания параллельных приложений с использованием OpenMP и параллельных библиотек. Поиск ошибок трединга с помощью Parallel Inspector. Анализ и оптимизация работы приложения с помощью Parallel Amplifier. Краткое описание Parallel Advisor.

15. Разбор проектов

Постановка и разбор проектных заданий. Консультации по проектам. Прием заданий и проектов.

Примеры тем проектных работ

1. Клеточные автоматы типа «Жизнь».
2. Клеточные автоматы Кохомото-Ооно.
3. Решение простых двумерных сеточных итерационных задач.

Литература

1. Описание стандарта MPI и спецификация: <http://mpi-forum.org/>
2. Message Passing Interface (MPI): <https://computing.llnl.gov/tutorials/mpi/>
3. OpenMP: <https://computing.llnl.gov/tutorials/openMP/>
4. BLAS: <http://www.netlib.org/blas/>
5. Intel MKL: http://software.intel.com/sites/products/documentation/hpc/composerxe/en-us/mklxe/mkl_manual_win_mac/index.htm
6. В.В. Воеводин, Вл.В. Воеводин. Параллельные вычисления. БХВ, Санкт-Петербург, 2002 г., 599 с.
7. С.А. Немнюгин, О.Л. Стесик. Параллельное программирование для многопроцессорных вычислительных систем. БХВ, Санкт-Петербург, 2002 г., 396 с.
8. В.П. Гергель. Теория и практика параллельных вычислений. ИНТУИТ, Москва, 2008 г., 424 с.
9. Описание стандарта OpenMP и спецификации: <http://openmp.org>