

Simulation auf Höchstleistungsrechnern

Stefan Lang

Interdisziplinäres Zentrum für Wissenschaftliches Rechnen
Universität Heidelberg
INF 368, Raum 532
D-69120 Heidelberg
phone: 06221/54-8264
email: Stefan.Lang@iwr.uni-heidelberg.de

WS 13/14

Organisatorisches

- Dozent: Stefan Lang, Paralleles Rechnen, IWR, Raum 425
- Veranstaltung: 4 V + 2 Ü
- Termine
 - ▶ Vorlesung: Di 9.00-11.00 (V R532), Do 9.00-11.00 (V R532)
 - ▶ Übungen: Do 14.00-16.00 (Ü im CIP Pool, OMZ, INF 350 U.012)
- Voraussetzungen:
Grundvorlesungen in Informatik und Numerik
- Hilfreich:
Kenntnisse in C/C++

Was ist Wissenschaftliches Rechnen?

Im speziellen Numerische Simulation (NS):

- Ziel der NS ist natürliche oder technische Vorgänge auf Rechnern zu simulieren
- Interdisziplinärer Zugang: Naturwissenschaftler, Ingenieure, Mathematiker und Informatiker arbeiten zusammen
- Praktisch relevante Probleme werden mit formalen Methoden bearbeitet
- NS ermöglicht Erkenntnisgewinn in Bereichen die in Laborexperimenten und Feldstudien schwer zugänglich sind, z.B. Neurowissenschaften, Wasserwirtschaft, Astrophysik

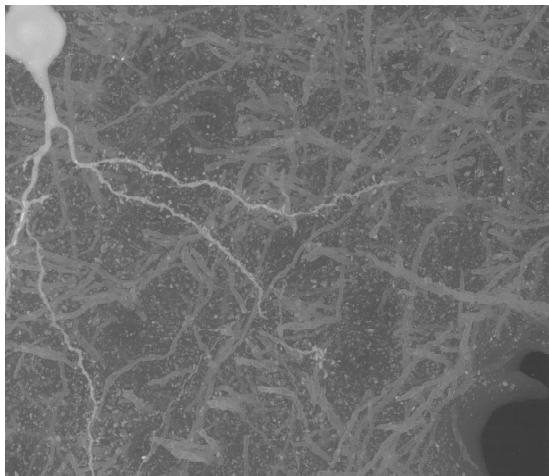
Warum Wissenschaftliches Hochleistungsrechnen?

Trends in der **Numerischen Simulation**:

- Betrachtung von **Globalmodellen** statt lokalen Teilmodellen (Modelle ganzer Hirnbereiche, virtuelle Prototypen im Bauingenieurwesen, Flugzeug-, Schiffs- und Automobilbau)
- Analyse von **gekoppelten Gesamtsystemen** statt isolierter Einzelprozesse (Mehrmedien-, Mehrphasen-, Mehrskalenprozesse, Konvektion-Diffusion-Reaktion)
- Rechner wird zum **wissenschaftlichen Beobachtungsinstrument** (hohes Auflösungsvermögen, Messungen in manchen Bereichen schwierig/unmöglich, Parameterstudien durchführbar)

Computational Neuroscience - Signalverarbeitung

- Ziel: Entwicklung eines Neuronennetzwerks, welches das beobachtete/gemessene Verhalten widerspiegelt.



- Simulation von Neuronennetzwerken, Statistische Analyse von Realisierungen

Ein Superrechner

ASCI Red Storm

Nachfolger des ersten TeraFlop Rechners ASCI Red 1997

Hardware:

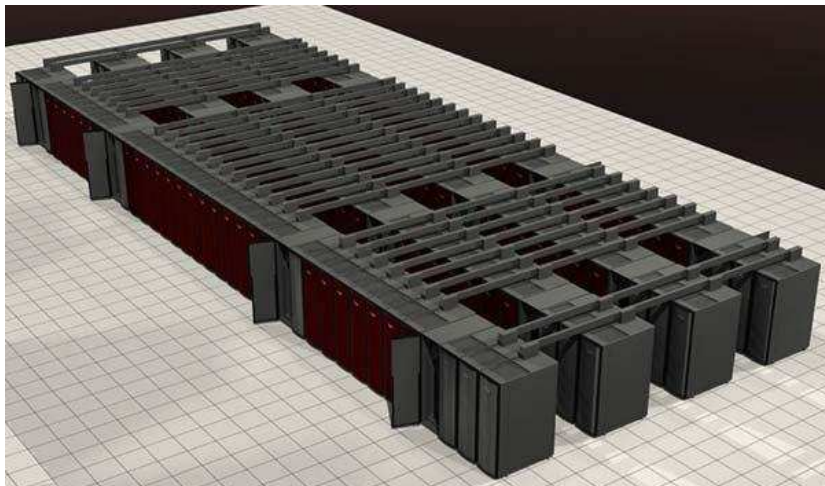
- 11.646 × 2 GHz AMD Opteron CPUs
- CPU boards vertically mounted in 108 cabinets
- 4 GFLOPS per CPU (40 TFLOPS total)
- 1 GB per CPU (10 TB total)
- shared memory inside the node
- 3D mesh full interconnect

Software:

- compute nodes: custom Sandia-developed light-weight OS code-named Catamount
- service and storage nodes SuSE Linux.

Ein Superrechner

ASCI Red Storm



Skalierbarkeit

Algorithmische Komplexität am Beispiel von Lösern
für ein Gleichungssystem der Gestalt

$$Ax = b$$

Dimension	$d = 2$	$d = 3$
Gaussian elimination	$O(N^3)$	$O(N^3)$
Banded Gauss	$O(N^2)$	$O(N^{2.33})$
Nested Dissection Gauss	$O(N^{1.5})$	$O(N^2)$
Richardson, GS, Jacobi	$O(N^2)$	$O(N^{1.67})$
CG, SOR	$O(N^{1.5})$	$O(N^{1.33})$
SSOR-CG	$O(N^{1.25})$	$O(N^{1.17})$
Multigrid	$O(N)$	$O(N)$
Cascadic Iteration	$O(N)$	$O(N)$

Skalierbarkeit

Skalierbarkeit bedeutet vereinfacht

Ein immer größeres Problem lässt sich auf einem immer größeren Computer stets gleichschnell berechnen.

Dies ist selten der Fall (leider)!

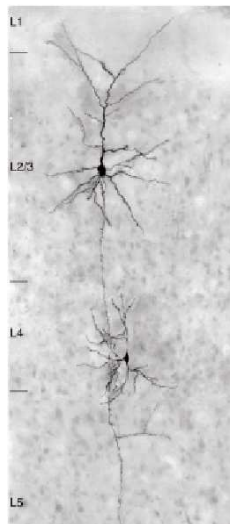
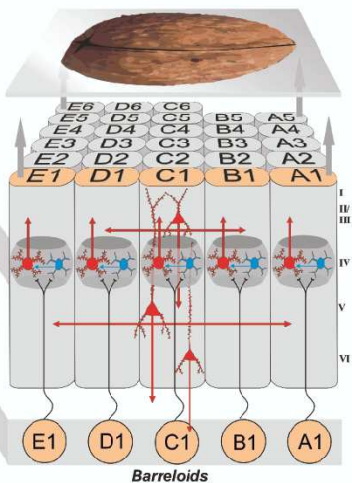
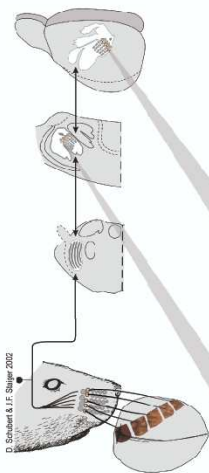
Konsequenz:

Man braucht

- leistungsfähige Software für leistungsfähige Rechner
- skalierbare Algorithmen + skalierbare Implementierungen + skalierbare Architekturen

... allein riesige Rechner zu kaufen reicht nicht aus!!

Ein biologisches System: Der Barrel Cortex der Ratte



Ziel: Mechanistisches Verständnis von einfachen Entscheidungsfindungsprozessen

Modellierung von Neuronaler Aktivität

Hodgkin-Huxley Gleichung:

Das elektr. Potential $v(\mathbf{x}, t)$ und Zustandspartikel

$\mathbf{c}(\mathbf{x}, t) = (m(\mathbf{x}, t), h(\mathbf{x}, t), n(\mathbf{x}, t))^T$ obey

$$c_m \partial_t v = \partial_{\mathbf{x}} g_a \partial_{\mathbf{x}} v + i_{inj} - \sum_{\nu \in \mathcal{C}} i_{\nu}(v, \mathbf{c}) - i_s(v)$$

$$\partial_t c_{\mu} = \alpha_{\mu}(v) \cdot (1 - c_{\mu}) - \beta_{\mu}(v) \cdot c_{\mu},$$

wobei $\nu \in \mathcal{C} =: \{Na, L, K\}$ and $\mu \in \{m, h, n\}$.
Rand- und Anfangsbedingungen sind gegeben durch

$$g_a \partial_{\mathbf{x}} v = g_N \quad \text{on } \partial\Omega_N,$$

$$v = g_D \quad \text{on } \partial\Omega_D,$$

$$(v, \mathbf{c})(\mathbf{x}, 0) = (v^0, \mathbf{c}^0) \text{ for } t = 0.$$

Die Ionenströme werden mit den Zustandspartikeln modelliert und sind gegeben durch

$$i_{Na}(v) = \overline{g_{Na}} \cdot m^3 h \cdot (v - E_{Na}),$$

$$i_K(v) = \overline{g_K} \cdot n^4 \cdot (v - E_K),$$

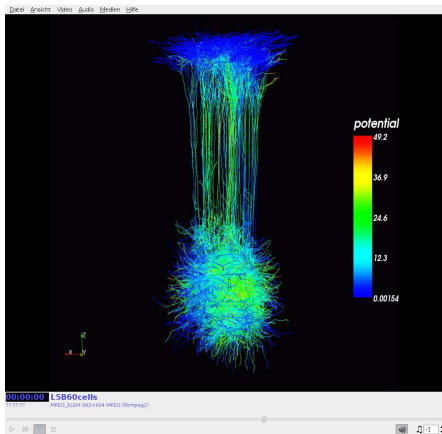
$$i_L(v) = \overline{g_L} \cdot (v - E_L)$$

Darüberhinaus werden Ströme von Synapsen modelliert durch

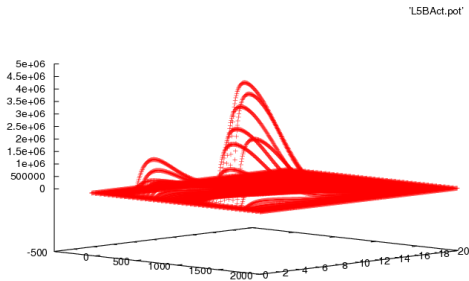
$$i_s(v, t) = g_s(t) \cdot (v - E_s)$$

mit zeitabhängiger synaptischer Stärke g_s .

Simulationsstudie: Passive Auslenkung des Barthaars

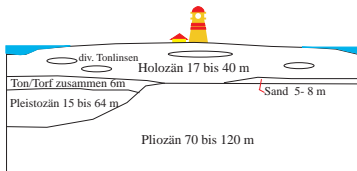
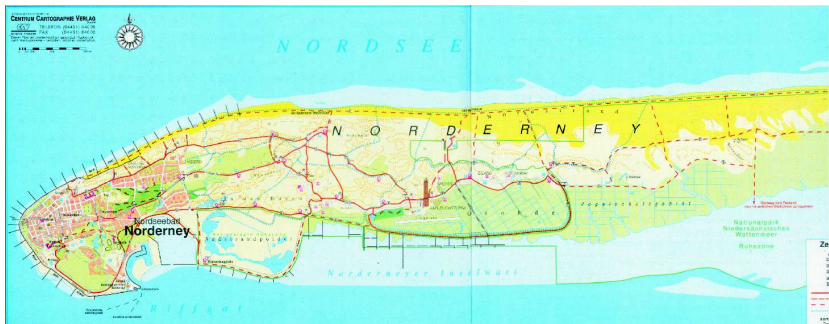


60 L5B Neuronen aktiviert vom VPM



Räumliche und zeitliche
Aktivitätsverteilung

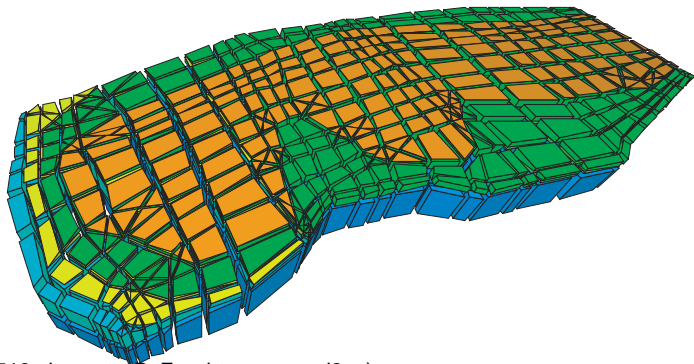
Problemfall Norderney



- Projekt "Küstenschutz"
- Inseltypische Süßwasserlinse (-85m)
- Simulation des Linsenaufbaus und der Wasserförderung aus zwei Pumpen
- Strategie zur Erhaltung der Wasserqualität

Problemfall Norderney

10km x 4km
x 150m



- Anfangsgitter (1516 elements, D. Feuchter, geomod2ng)
- 6 geologische Schichten mit variierender Permeabilität 10^{-10} – 10^{-15}
- Randbedingungen: Einfluß von Süßwasser am oberen Rand Quellen sind Senken, Ein/Ausfluß in Küstenbereichen, hydrostatischer Druck

Dichtegetriebene Grundwasserströmung

Gleichungen der dichtegetriebenen Grundwasserströmung abgeleitet aus Erhaltungssätzen.

Formulierung verwendet **Salzmassenbruch** ω und **Druck** p

$$\partial_t(n\rho) + \nabla \cdot (\rho\mathbf{v}) = Q\rho, \quad (\text{f low})$$

$$\partial_t(n\rho\omega) + \nabla \cdot (\rho\mathbf{v}\omega - \rho D\nabla\omega) = Q\rho\omega \quad (\text{transp.})$$

mit

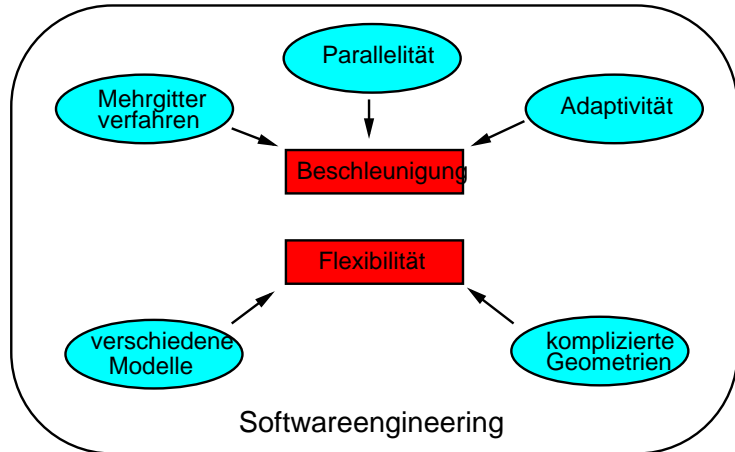
$$\mathbf{v} = -K/\mu(\nabla p - \rho\mathbf{g}), \quad (\text{Darcy's law})$$

$$D = (\alpha_L - \alpha_T)\mathbf{v}/|\mathbf{v}| + \alpha_T|\mathbf{v}| \quad (\text{Scheidegger})$$

Passende Anfangs- und Randwerte müssen definiert werden.

Methoden- und Softwareentwicklung

Zusätzlich sind realistische Probleme schwer zu bearbeiten

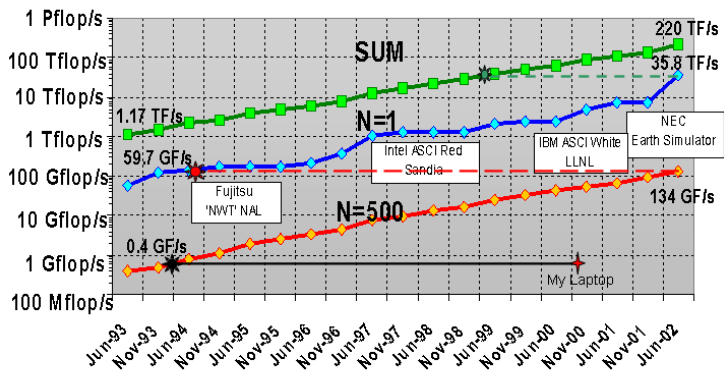


All dies zusammen zu realisieren ist eine schwierige Aufgabe!
Softwareengineering nicht Gegenstand der Vorlesung (Prof. Paech)

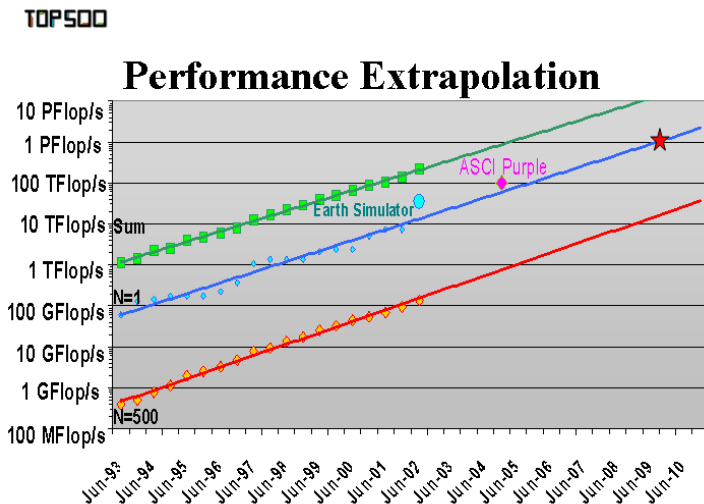
TOP500 - Liste der SuperComputer

TOP500

TOP500 - Performance



TOP500 - Entwicklung



Petaflop Rechner in 2010! Exaflop bis 2015?

Parallelisierung: Ein Einführungsbeispiel

Skalarprodukt zweier Vektoren

- Einführung einer geeigneten Notation
- Interaktion über gemeinsame Variable
- Interaktion über Nachrichten
- Bewertung paralleler Algorithmen

Ein einfaches Problem: Skalarprodukt bilden

Skalarprodukt zweier Vektoren der Länge N :

$$s = \mathbf{x} \cdot \mathbf{y} = \sum_{i=0}^{N-1} x_i y_i.$$

Parallelisierungsidee:

- 1 Summanden $x_i y_i$ unabhängig
- 2 $N \geq P$, bilde $I_p \subseteq \{0, \dots, N-1\}$, $I_p \cap I_q = \emptyset \forall p \neq q$
Jeder Prozessor berechnet dann die Teilsumme $s_p = \sum_{i \in I_p} x_i y_i$
- 3 Summation der Teilsummen z.B. für $P = 8$:

$$s = \underbrace{s_0 + s_1}_{s_{01}} + \underbrace{s_2 + s_3}_{s_{23}} + \underbrace{s_4 + s_5}_{s_{45}} + \underbrace{s_6 + s_7}_{s_{67}}$$
$$\underbrace{\hspace{10em}}_{s_{0123}} \quad \underbrace{\hspace{10em}}_{s_{4567}}$$
$$\underbrace{\hspace{15em}}_s$$

Grundlegende Begriffsbildungen

Sequentielles Programm: Folge von Anweisungen die der Reihe nach abgearbeitet werden.

Sequentieller Prozess: Aktive Ausführung eines sequentiellen Programmes.

Parallele Berechnung: Menge interagierender sequentieller Prozesse.

Paralleles Programm: Beschreibt parallele Berechnung. Gegeben durch Menge von sequentiellen Programmen.

Notation für parallele Programme

- Möglichst einfach, losgelöst von praktischen Details
- Erlaubt verschiedene Programmiermodelle

Programm (Muster eines parallelen Programmes)

parallel <Programmname>

```
{  
  //Sektion mit globalen Variablen (von allen Prozessen zugreifbar)  
  process <Prozessname-1> [<Kopienparameter>]  
  {  
    //lokale Variablen, die nur von Prozess <Prozessname-1>  
    //gelesen und geschrieben werden können  
    //Anwendungen in C-ähnlicher Syntax. Mathematische  
    //Formeln oder Prosa zur Vereinfachung erlaubt.  
  }  
  ...  
  process <Prozessname-n> [<Kopienparameter>]  
  {  
    ...  
  }  
}
```

Notation für parallele Programme II

Variablendeklaration

```
double x, y[P];
```

Initialisieren

```
int n[P] = {1[P]};
```

lokale/globale Variablen

Bemerkungen zum Prozessbegriff

Skalarprodukt mit zwei Prozessen

Programm (Skalarprodukt mit zwei Prozessen)

```
parallel two-process-scalar-product
{
    const int N=8;                //Problemgröße
    double x[N], y[N], s=0;       //Vektoren, Resultat
    process P1
    {
        int i;
        double ss=0;
        for (i = 0; i < N/2; i++)
            ss += x[i]*y[i];
        s=s+ss;                    //Gefahr!
    }
    process P2
    {
        int i;
        double ss=0;
        for (i = N/2; i < N; i++)
            ss += x[i]*y[i];
        s=s+ss;                    //Gefahr!
    }
}
```

- Variablen sind global, jeder Prozess bearbeitet Teil der Indizes
- Kollision bei schreibendem Zugriff!

Kritischer Abschnitt I

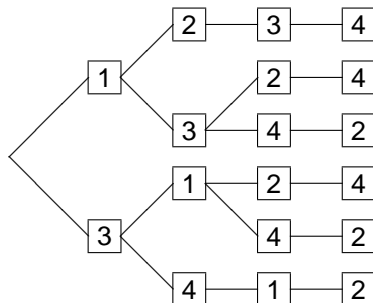
- Hochsprachenanweisung $s = s + ss$ wird zerlegt in Maschinenbefehle:

	Prozess Π_1		Prozess Π_2
1	lade s in R1 lade ss in R2 add R1 und R2 Ergebnis in R3	3	lade s in R1 lade ss in R2 add R1 und R2 Ergebnis in R3
2	speichere R3 nach s	4	speichere R3 nach s

- Ausführungsreihenfolge der Anweisungen verschiedener Prozesse ist nicht festgelegt.

Kritischer Abschnitt II

- Mögliche Ausführungsreihenfolgen sind:



Ergebnis der Berechnung

$$S = SS_{\Pi_1} + SS_{\Pi_2}$$

$$S = SS_{\Pi_2}$$

$$S = SS_{\Pi_1}$$

$$S = SS_{\Pi_2}$$

$$S = SS_{\Pi_1}$$

$$S = SS_{\Pi_1} + SS_{\Pi_2}$$

- Nur die Reihenfolgen 1-2-3-4 oder 3-4-1-2 sind korrekt.

Kritischer Abschnitt III

- Anweisungsblock bildet *kritischen Abschnitt*, der unter *wechselseitigem Ausschuß* bearbeitet werden muss.
- Wir notieren dies *zunächst* mit eckigen Klammern
$$[\langle \text{Anweisung 1} \rangle; \dots; \langle \text{Anweisung } n \rangle;]$$
- Das Symbol „[“ wählt einen Prozess aus der den kritischen Abschnitt bearbeiten darf, alle anderen warten.
- Effiziente Umsetzung erfordert Hardwareinstruktionen, die wir später besprechen.

Parametrisieren von Prozessen

- Prozesse enthalten teils identischen Code (auf unterschiedlichen Daten)
- Parametrisiere den Code mit einer Prozessnummer, wähle zu bearbeitende Daten mit dieser Nummer aus
- SPMD = single program multiple data

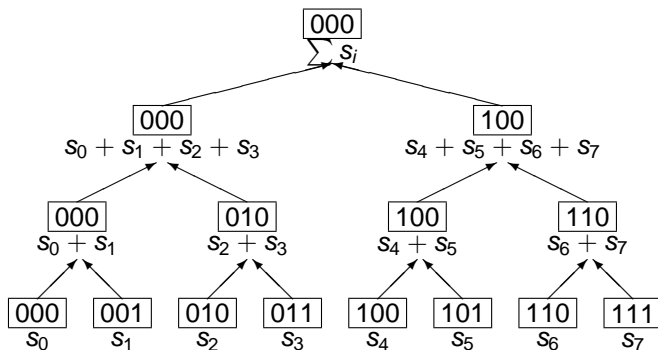
Programm (Skalarprodukt mit P Prozessoren)

parallel *many-process-scalar-product*

```
{
  const int N;           // Problemgröße
  const int P;           // Anzahl Prozesse
  double x[N], y[N];    // Vektoren
  double s = 0;         // Resultat
  process  $\Pi$  [int p  $\in$  {0, ..., P - 1}]
  {
    int i; double ss = 0;
    for (i = N * p/P; i < N * (p + 1)/P; i++)
      ss += x[i] * y[i];
    [s = s + ss];        // Hier warten dann doch wieder alle
  }
}
```

Kommunikation in hierarchischer Struktur

Baumartige Organisation der Kommunikationsabfolge mit $\log P$ Stufen



In Stufe $i = 0, 1, \dots$

- Prozesse, deren letzte $i + 1$ Bits 0 sind, holen
- Ergebnisse von den Prozessoren deren letzte i Bits 0 und deren Bit i 1 ist

```
parallel parallel-sum-scalar-product
```

```
{
  const int d = 4;
  const int N = 100; // Problemgröße
  const int P = 2d; // Anzahl Prozesse
  double x[N], y[N]; // Vektoren
  double s[P] = {0[P]}; // Resultat
  int flag[P] = {0[P]}; // Prozess p ist fertig

  process Π [int p ∈ {0, ..., P - 1}]
  {
    int i, r, m, k;

    for (i = N * p/P; i < N * (p + 1)/P; i++)
      s[p] += x[i] * y[i];

    for (i = 0; i < d; i++)
    {
      r = p & [ ~ ( ∑k=0i 2k ) ]; // lösche letzten i + 1 bits
      m = r | 2i; // setze Bit i
      if (p == m) flag[m]=1;
      if (p == r)
      {
        while(!flag[m]); // Bedingungssynchronisation
        s[p] = s[p] + s[m];
      }
    }
  }
}
```

Parallelisieren der Summe II

- Neue globale Variablen: $s[P]$ Teilergebnisse $flag[P]$ zeigt an, dass Prozessor fertig ist
- Das Warten nennt man *Bedingungssynchronisation*
- In diesem Beispiel konnte wechselseitiger Ausschluß durch eine Bedingungssynchronisation ersetzt werden. Dies geht nicht immer!
- Liegt daran, dass wir hier die Reihenfolge vorab festgelegt haben

Lokalisieren

Ziel: Vermeiden globaler Variablen

Wir gehen zweistufig vor: (I) Mache Vektoren x, y lokal, (II) mache Ergebnis s lokal

Programm (Skalarprodukt mit lokalen Daten)

```
parallel local-data-scalar-product
```

```
{
```

```
  const int P, N;
```

```
  double s = 0;
```

```
  process  $\Pi$  [ int  $p \in \{0, \dots, P - 1\}$  ]
```

```
  {
```

```
    double x[N/P], y[N/P]; // Annahme N durch P teilbar  
                           // Lokaler Ausschnitt der Vektoren
```

```
    int i;
```

```
    double ss=0;
```

```
    for (i = 0, i < (p + 1) * N/P - p * N/P; i++) ss = ss + x[i] * y[i];  
    [s = s + ss;]
```

```
  }
```

```
}
```

Jeder speichert nur N/P Indizes (einer mehr falls nicht exakt teilbar), *diese beginnen immer mit der lokalen Nummer 0*

Jeder lokale Index entspricht einem globalen Index im sequentiellen Programm:

$$i_{\text{global}}(p) = i_{\text{lokal}} + p * N/P$$

Nachrichtenaustausch I

Um völlig auf globale Variablen verzichten zu können brauchen wir ein neues Konzept: *Nachrichten*

Syntax:

send(<Process>,<Variable>)

receive(<Process>,<Variable>)

Semantik: **send** schickt den Inhalt der Variablen an den angegebenen Prozess, **receive** wartet auf Nachricht von dem angegebenen Prozess und füllt diese in die Variable

send wartet bis die Nachricht erfolgreich empfangen wurde, **receive** blockiert den Prozess bis eine Nachricht empfangen wurde

Blockierende, oder synchrone Kommunikation (später andere)

Nachrichtenaustausch II

Programm (Skalarprodukt mit Nachrichtenaustausch)

```
parallel message-passing-scalar-product
```

```
{  
  const int d, P= 2d, N;           // Konstanten!  
  
  process  $\Pi$  [int p  $\in$  {0, ..., P - 1}]  
  {  
    double x[N/P], y[N/P];       // Lokaler Ausschnitt der Vektoren  
    int i, r, m;  
    double s, ss = 0;  
  
    for (i = 0, i < (p + 1) * N/P - p * N/P; i++) s = s + x[i] * y[i];  
    for (i = 0, i < d, i++)       // d Schritte  
    {  
      r = p & [  $\sim \left( \sum_{k=0}^i 2^k \right)$  ];  
      m = r | 2i;  
      if (p == m)  
        send( $\Pi_r$ , s);  
      if (p == r)  
      {  
        receive( $\Pi_m$ , ss);  
        s = s + ss;  
      }  
    }  
  }  
}
```

Bewertung paralleler Algorithmen I

Hier: asymptotisches Verhalten in Abhängigkeit der Problemgröße und Prozessorzahl

Sequentielle Laufzeit:

$$T_s(N) = 2Nt_a,$$

t_a : Zeit für arithmetische Operation

Parallele Laufzeit für message-passing Variante:

$$T_p(N, P) = \underbrace{2 \frac{N}{P} t_a}_{\text{lokales Skalarprodukt}} + \underbrace{\text{ld } P(t_m + t_a)}_{\text{parallele Summe}},$$

t_m : Zeit für Senden einer Zahl

Speedup:

$$\begin{aligned} S(N, P) &= \frac{T_s(N)}{T_p(N, P)} = \frac{2Nt_a}{2 \frac{N}{P} t_a + \text{ld } P(t_m + t_a)} \\ &= \frac{P}{1 + \frac{P}{N} \text{ld } P \frac{t_m + t_a}{2t_a}} \end{aligned}$$

Es gilt $S(N, P) \leq P$!

Bewertung paralleler Algorithmen II

Effizienz:

$$E(N, P) = \frac{S(N, P)}{P} = \frac{1}{1 + \frac{P}{N} \text{ld} P \frac{t_m + t_a}{2t_a}}$$

Es gilt $E \leq 1$

asymptotische Aussagen:

- festes N , wachsendes P : $\lim_{P \rightarrow \infty} E(N, P) = 0$
- festes P , wachsendes N : $\lim_{N \rightarrow \infty} E(N, P) = 1$
Für welches Verhältnis $\frac{P}{N}$ „akzeptable“ Effizienzwerte erreicht werden, regelt der Faktor $\frac{t_m + t_a}{t_a}$, das Verhältnis von Kommunikations- zu Rechenzeit.
- Skalierbarkeit bei gleichzeitigem Anwachsen von N und P in der Form $N = kP$:

$$E(kP, P) = \frac{1}{1 + \text{ld} P \frac{t_m + t_a}{2t_a k}}$$

Fällt sehr langsam mit P ab \rightarrow gut skalierbar.

Beispielhaft für viele Algorithmen

Themen

Hardware

- (Parallele) Rechnerarchitekturen: SMP, Vektorrechner, Parallelrechner
- Realisierungen: einige Architekturen im Detail (Paragon, ASCI Red Storm, IBM Blue Gene)

Programmiermodelle

- Programmiermodelle: OpenMP, MPI, PThreads
- Grundlegende Numerische Algorithmen: Matrixmultiplikation

Algorithmen

- Leistungsbewertung: Effizienz, Beschleunigung, Skalierbarkeit
- Paralleles Sortieren
- Dicht- und dünnbesetzte Gleichungssysteme

Anwendungen

- Parallele (Numerische) Anwendungen (Neurowissenschaften, Biologie, Bodenphysik, Astrophysik)

Die Themen sind unverbindlich.

Organisatorisches

- Do 14.00-16.00 sind Übungen im IWR, 532
Thema: Einführung in (Advanced) C++
sonst: CIP Pool, OMZ, INF 350, U.012
- Scheinvergabe: Regelmässige Teilnahme, 50% Punkte
- Prüfungen: nach Rücksprache