

Проект комиссии Президента
по модернизации и технологическому развитию экономики России
«Создание системы подготовки высококвалифицированных кадров
в области суперкомпьютерных технологий и
специализированного программного обеспечения»

УТВЕРЖДАЮ
Председатель экспертного совета
системы НОЦ СКТ, член-корр. РАН
В.В. Воеводин

" _____ " _____ 201__ г.

Программа дисциплины

«Многопоточные вычисления на основе технологий MPI и OpenMP»

«010900 -- Прикладные математика и физика»

Разработчик: ассистент Н.И. Хохлов
ассистент А.Ю. Субботина

Москва

Учебно-методический план курса лекций

«МНОГОПОТОЧНЫЕ ВЫЧИСЛЕНИЯ НА ОСНОВЕ ТЕХНОЛОГИЙ MPI И OPENMP» ХОХЛОВ Н.И., СУББОТИНА А.Ю.

1. Аннотация курса

В курсе «МНОГОПОТОЧНЫЕ ВЫЧИСЛЕНИЯ НА ОСНОВЕ ТЕХНОЛОГИЙ MPI И OPENMP» излагаются основы технологий параллельного программирования MPI и OpenMP. В рамках MPI рассматриваются виды коммуникаций, собственные типы MPI, группы и коммутаторов. В OpenMP изучаются параллельное выполнение циклов, параллельные секции, синхронизация потоков. Рассматривается создание, профилирование и отладка HPC-приложений в интегрированной среде Intel Parallel Studio.

Целями освоения дисциплины «МНОГОПОТОЧНЫЕ ВЫЧИСЛЕНИЯ НА ОСНОВЕ ТЕХНОЛОГИЙ MPI И OPENMP» является ознакомление слушателей, специализирующихся в области параллельного программирования, с современными высокопроизводительными вычислительными системами и основами многопоточного программирования.

Курс разработан на кафедре информатики Московского физико-технического института (государственный университет).

Авторы программы ассистенты Н.И. Хохлов, А.Ю. Субботина. При чтении лекций используются компьютерные презентации.

2. Место дисциплины в учебном плане.

В результате изучения дисциплины слушатель должен:

- Знать суперкомпьютерную сущность проблем, возникающих в ходе профессиональной деятельности (в области параллельного программирования), и применять соответствующий физико-математический аппарат для их формализации, анализа и выработки решения;
- эффективно использовать технологии параллельного программирования при проведении экспериментально-исследовательских работ;
- уметь применять математический аппарат с использованием суперкомпьютерной техники для решения профессиональных задач.

3. Содержание дисциплины.

В курсе «МНОГОПОТОЧНЫЕ ВЫЧИСЛЕНИЯ НА ОСНОВЕ

ТЕХНОЛОГИЙ MPI И OPENMP» излагаются основы технологий параллельного программирования MPI и OpenMP. В рамках MPI рассматриваются виды коммуникаций, собственные типы MPI, группы и коммунитаторов. В OpenMP изучаются параллельное выполнение циклов, параллельные секции, синхронизация потоков. Рассматривается создание, профилирование и отладка HPC-приложений в интегрированной среде Intel Parallel Studio.

4. Перечень разделов курса

Многопоточные вычисления на основе технологий MPI и OpenMP

1. Введение в курс. Основы MPI. Компиляция и запуск программ
 - 1.1. Виды коммуникаций. Коммуникации типа точка-точка
 - 1.2. Распараллеливание сеточных методов
 - 1.3. Групповые коммуникации
 - 1.4. Распределенные операции с матрицами и векторами
 - 1.5. Собственные типы MPI
 - 1.6. Группы и коммунитаторы. Виртуальные топологии. Собственные типы MPI
 - 1.7. Введение в MPI-2
2. Введение в OpenMP
 - 2.1. Основы OpenMP
 - 2.2. Параллельное выполнение циклов, параллельные секции, синхронизация потоков
 - 2.3. Введение в BLAS
 - 2.4. Решение СЛАУ
3. Средства создания, профилирования и отладки, предоставляемые Intel. Intel Parallel Studio
4. Разбор проектов

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.

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.

Распараллеливание сеточных методов. Основные алгоритмы распа-

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

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.

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.

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

Группы и коммутаторы. Виртуальные топологии. Собственные типы MPI. 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.

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.

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.

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

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.

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.

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.

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.

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

5. Тематический план курса.

Распределение часов курса по темам и видам работ представлено в таблице 1

Таблица 1

№№ п/п	Наименование модулей, разделов, дисциплин	Трудоемкость	Всего часов				Форма контроля
			в том числе				
			Аудиторные занятия			Самостоятельная работа	
Всего	Лекции	Практические занятия					
1.	Основы MPI	32	32	16	16	0	Тест
1.1.	Архитектура вычислительных систем с разделяемой памятью. Компиляция и запуск программ MPI.	4	4	2	2	0	
1.2.	Виды коммуникаций. Коммуникации типа точка-точка.	4	4	2	2	0	
1.3.	Распараллеливание сеточных методов	4	4	2	2	0	
1.4.	Групповые коммуникации	4	4	2	2	0	

№№ п/п	Наименование модулей, разделов, дисциплин	Всего часов					Форма контроля
		Трудоемкость	в том числе				
			Аудиторные занятия			Самостоятельная работа	
		Всего	Лекции	Практические занятия			
1.5.	Распределенные операции с матрицами и векторами	4	4	2	2	0	
1.6.	Собственные типы MPI	4	4	2	2	0	
1.7.	Группы и коммутаторы. Виртуальные топологии.	4	4	2	2	0	
1.8.	Введение в MPI-2.	4	4	2	2	0	
2.	Основы OpenMP	14	14	8	6	0	Тест
2.1.	Вычислительные системы с общей памятью. Стандарт OpenMP.	4	4	2	0	0	
2.2.	Основные принципы программирования в OpenMP.	4	4	2	2	0	
2.3.	Параллельное выполнение циклов, параллельные секции, синхронизация потоков.	4	4	2	2	0	
2.4.	Методы решения СЛАУ в библиотеках BLAS и LAPACK.	4	4	2	2	0	
3.	Intel Parallel Studio	4	4	2	2	0	Тест
3.1.	Создание, профилирование и отладка НПС-приложений в интегрированной среде Intel Parallel Studio.	4	4	2	2	0	
4.	Курсовой проект	24	24	0	0	24	Тест
	ИТОГО:	72	72	26	22	24	

Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы слушателей.

Темы проектных заданий для слушателей:

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

6. 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 много-процессорных 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>