



РОСАТОМ

ГОСУДАРСТВЕННАЯ КОРПОРАЦИЯ ПО АТОМНОЙ ЭНЕРГИИ «РОСАТОМ»

Р Ф Я Ц
ВНИИЭФ

Тестирование многопроцессорных Супер-ЭВМ с гетерогенной и гибридной архитектурой

Докладчик: А. В. Алексеев.

**Соавторы: Н. Р. Антипина, А. В. Ветчинников, А. Н. Залялов,
Д. И. Липов, А. В. Ломтев, А. А. Нуждин, И. С. Сапронов**

**НСКФ-2013
Переславль-Залесский
26 ноября 2013 г.**

Цели тестирования

- ❑ **Определение общей производительности мультипроцессорной вычислительной системы (МВС)**
- ❑ **Исследование характеристик отдельных подсистем и компонент**
- ❑ **Оценка производительности и эффективности распараллеливания на характерных классах задач**
- ❑ **Оценка работоспособности и надёжности МВС**
- ❑ **Подтверждение соответствия характеристик МВС заявленным параметрам**
- ❑ **Сравнение характеристик МВС с аналогичными системами**
- ❑ **Анализ характеристик МВС в ходе разработки (co-design)**

Специальные тесты

| | |
|--------|---|
| b_eff | (Effective Bandwidth Benchmark) производительность коммуникационной среды |
| IMB | (Intel MPI Benchmark) производительность коммуникационной среды |
| Stream | производительность памяти вычислительного узла |
| HPL | производительность вычислительного узла и системы в целом |
| sPPm | производительность системы хранения |

Международные прикладные тесты

| | |
|------|---|
| NAS | производительность мультипроцессорных систем на примере различных алгоритмов (EP, MG, CG, FT, IS, LU, SP, BT) |
| sPPM | производительность МВС и эффективности распараллеливания задачи решения 3D уравнений газовой динамики Эйлера |

Методические прикладные тесты (разработка ВНИИЭФ)

| | |
|------------|---|
| TDU | эффективность распараллеливания при решении 3D уравнения диффузии нейтронов |
| GD2 | эффективность распараллеливания при решении 3D газовой динамики |
| PAUK | эффективность распараллеливания при решении 3D уравнения переноса нейтронов DSn-методом |
| C-МК | эффективность распараллеливания при решении 3D уравнения переноса нейтронов методом Монте-Карло |
| Egida-Test | эффективность распараллеливания при решении 3D уравнений газовой динамики и теплопроводности |
| MoDyS | эффективность распараллеливания при решении 3D уравнений молекулярной динамики |

Тестовая программа TDU



| | |
|-------------------------------|--|
| Год создания: | 1995 |
| Физическая постановка: | Перенос нейтронов в трёхмерном многогрупповом диффузионном приближении. |
| Численные методы: | Неполное разложение Холецкого, метод сопряжённых градиентов. |
| Распараллеливание: | 1D декомпозиция по третьему пространственному направлению. MPI. |
| Аппаратная платформа: | Универсальные процессоры, Intel Xeon Phi. |
| Язык: | Фортран 77. |
| Особенности: | Интенсивная работа с оперативной памятью. |
| Параметры теста: | Размер пространственной сетки. Число итераций 3-х уровней, определяющих соотношение между вычислительной работой и количеством обменов данными. |
| Развитие: | 3D декомпозиция, OpenMP. |

Тестовая программа ГД2

| | |
|-------------------------------|--|
| Год создания: | 1999 |
| Физическая постановка: | Расчёт движений сплошной среды путём решения системы многомерных уравнений газовой динамики в лагранжево-эйлеровой постановке. |
| Численные методы: | Неявная разностная схема с расщеплением по пространственным направлениям. Решение СЛАУ с трёхдиагональной матрицей методом прогонок. |
| Распараллеливание: | 2D декомпозиция по двум пространственным (эйлеровым) направлениям. MPI. Работа с гетерогенными системами. Массово-параллельно-конвейерное распараллеливание решения потоков прогонок. |
| Аппаратная платформа: | Универсальные процессоры. |
| Язык: | Фортран 90. |
| Особенности: | Интенсивная работа с оперативной памятью. Экономичные численные методы. |
| Параметры теста: | Размер пространственной сетки, «вес» уравнения состояния газа, число порций прогонок. |
| Развитие: | 3D декомпозиция, OpenMP, распараллеливание с использованием GP-GPU. |

Тестовая программа ПАУК



| | |
|-------------------------------|---|
| Год создания: | 2006 |
| Физическая постановка: | Стационарный перенос нейтронов в трёхмерном одногрупповом кинетическом приближении. |
| Численные методы: | Схема типа DSn-метода, метод простых итераций, алгоритм бегущего счета. |
| Распараллеливание: | 3D пространственная декомпозиция. Метод увеличения. MPI. Алгоритм конвейерного типа (аналог КВА-алгоритма). Аналитическая формула эффективности. Работа с гетерогенными системами. |
| Аппаратная платформа: | Универсальные процессоры, Intel Xeon Phi. |
| Язык: | Фортран 90. |
| Особенности: | Интенсивные двухточечные межпроцессорные обмены с «соседями». |
| Параметры теста: | Размер пространственной сетки. Число направлений полета частиц. Число рассчитываемых слоев между обменами. Параметры пространственной декомпозиции. Число итераций. |
| Развитие: | Смешанное распараллеливание MPI+OpenMP, векторизация вычислений. |

Тестовая программа С-МК



| | |
|-------------------------------|---|
| Год создания: | Вариант 1: 1995 (С-95,С-МК), Вариант 2: 2011 (СМК-У версия для GPU) |
| Физическая постановка: | Перенос нейтронов в трёхмерном приближении. |
| Численные методы: | Метод Монте-Карло |
| Распараллеливание: | С-МК: MPI, асинхронное, по траекториям частиц. СМК-У : Векторное распараллеливание для арифметических ускорителей |
| Аппаратная платформа+ | |
| Язык : | С-МК: Универсальные процессоры, Фортран 90 СМК-У : GPU (NVIDIA), C++ и CUDA |
| Особенности: | Нет программных ограничений на число процессоров. На гетерогенном поле могут использоваться одновременно разные процессоры и арифметические ускорители. |
| Параметры теста: | Заказные результаты – работа с памятью, Время записи результатов – нагрузка на файловую систему Время межпроцессорного обмена – нагрузка на коммуникации |
| Развитие: | Арифметические ускорители (CUDA), OpenMP. |

Тестовая программа ЭГИДА-ТЕСТ



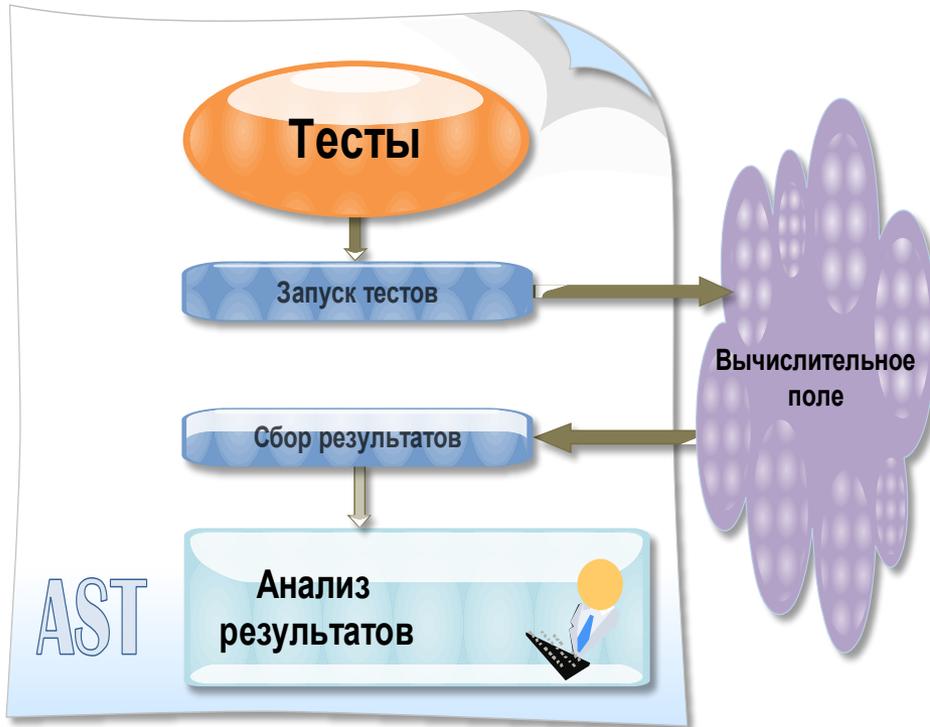
РОСАТОМ

| | |
|------------------------------|--|
| Год создания: | 2012 |
| Назначение: | Решение трёхмерных задач газовой динамики и теплопроводности. |
| Схемы, методы: | явные (газодинамика) и неявные (теплопроводность) разностные схемы, метод прогонок. |
| Распараллеливание: | 3D геометрическая декомпозиция с 2-х слойным наложением. Нерегулярное поточечное распараллеливание. Совмещение вычислений с межпроцессорными обменами. MPI. Работа с гетерогенными системами. |
| Аппаратная платформа: | Многопроцессорные вычислительные системы с многоядерными универсальными процессорами. |
| Язык: | C++. |
| Особенности: | Интенсивная работа с оперативной памятью. |
| Параметры теста: | Размер пространственной сетки. Количество процессоров. |
| Развитие: | Использование адаптивно-встраиваемых дробных сеток. Работа с процессорами типа Intel Xeon Phi. Двухуровневое MPI+OpenMP распараллеливание. Динамическая балансировка. |

Тестовая программа MoDyS



| | |
|-------------------------------|---|
| Год создания: | 2003 |
| Физическая постановка: | Установление термодинамического равновесия в кластере меди. |
| Численные методы: | Уравнения движения классической динамики Гамильтона системы материальных точек, находящихся в потенциальном поле сил межчастичного взаимодействия. |
| Распараллеливание: | MPI. С использованием технологии CUDA . Гибридный вариант –совместная работа АРУ и универсальных процессоров (часть MPI процессов работает на ядрах универсальных процессорах совместно с АРУ, а оставшая часть работает на оставшихся ядрах ЦП узла без АРУ) |
| Аппаратная платформа: | Универсальные процессоры, АРУ, Intel Xeon Phi. |
| Язык: | С++, Nvidia CUDA, Фортран 90. |
| Особенности: | Динамическая балансировка. |
| Параметры теста: | Автоматическое масштабирование задачи на заданное число процессоров. Возможность задания различного количества ячеек для процессоров разной производительности. |
| Развитие: | Распараллеливание на OpenMP. |



Назначение: упростить работу по запуску тестов, дальнейшему сбору результатов и их размещению в специальных структурированных хранилищах данных.

Язык программирования: Python.

Графический интерфейс: да.

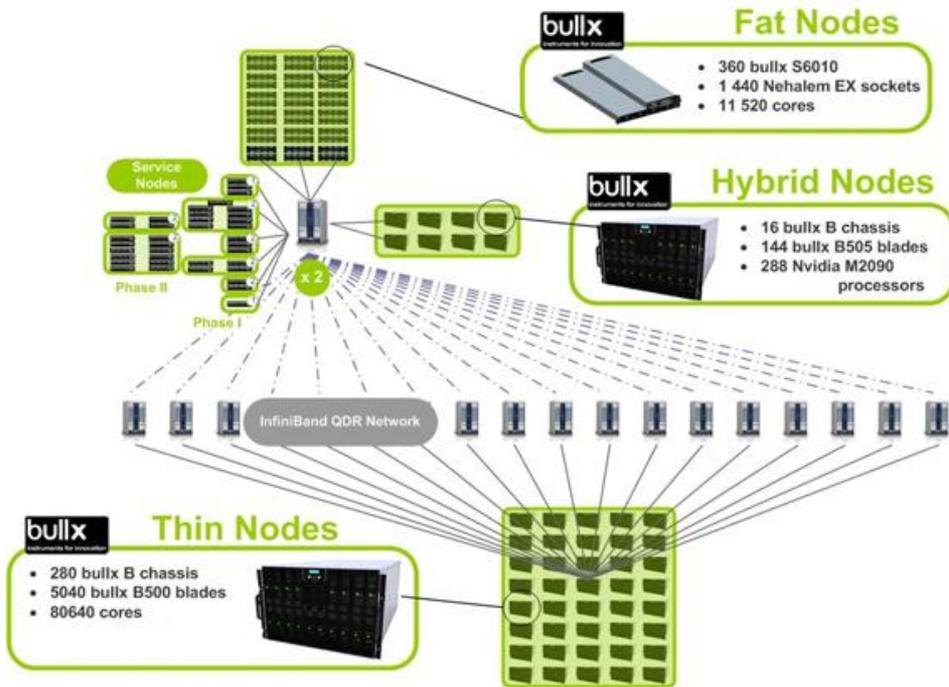
Состав пакета: тесты разработки ВНИИЭФ (tdu, rauc, gd2 и др.) и тесты сторонних разработчиков (sppm, nas, hpl и др.).

Поддерживаемые системы управления заданиями: pbs, slurm, jam.

Хранение данных: XML-файл или БД.

Проблемы тестирования гетерогенных и гибридных супер-ЭВМ

Архитектура гибридной гетерогенной супер-ЭВМ Curie



- ❑ Наличие узлов с универсальными процессорами различной производительности
- ❑ Наличие узлов с ускорителями или сопроцессорами
- ❑ Большое количество вычислительных устройств
- ❑ Относительно небольшое время наработки на сбой

Необходимо разрабатывать универсальные тестовые программы и соответствующую методику тестирования

HPL. Методические прикладные тесты.

❑ HPL (High Performance Linpack), недостатки:

- ориентирован на однородные системы
- невозможно использовать на графических ускорителях (GPU)
- требуются десятки часов бессбойной работы всей машины

❑ *HPL-MAX (Multi Architecture eXtension), разработка ВНИИЭФ:*

- разработан на базе HPL-2.0 (оригинальная версия), HPL-GPU-1.1.0 (Франкфуртский университет), HPL-CUDA (Nvidia)
- работает на гетерогенных и гибридных системах (узлы разной производительности, включая GPU или Intel Xeon Phi), используя перераспределение нагрузки
- включает реализацию механизма контрольных точек (сохранения промежуточного результата с возможностью восстановления счёта после аппаратного сбоя)

- Результат:** Эффективность распараллеливания, E (%)
- Декомпозиция:** Пространственная на параобласти с равным числом ячеек
- Метод:** Метод увеличения задачи (weak scaling)

Процедура тестирования:

- Расчёт на одном ядре - время T_1
- Увеличение задачи в n раз (пространственных ячеек)
- Расчёт на n ядрах - время $T_n = T_1 \cdot n + T_{\text{накл}}$
- Вычисление коэффициента ускорения - $Sp = \frac{T_{\text{посл}}}{T_n} = \frac{T_1 \cdot n}{T_n}$
- Вычисление эффективности распараллеливания - $E_n = Sp/n \cdot 100\%$

Проблема: с какого ядра (быстрого или медленного) начинать процедуру?

Два фрагмента, «быстрый» (f) и «медленный» (s)

$$T_{\text{посл}} = T_{s1} \cdot n_s + T_{f1} \cdot n_f = T_{s1} \cdot n_s + T_{s1} \cdot P_s / P_f \cdot n_f$$

$$Sp = \frac{T_{s1} \cdot (n_s + P_s / P_f \cdot n_f)}{T_n}$$

Модификация Метода увеличения задачи

Статическая балансировка.

Помещаем на ядра разной производительности параобласти с различным количеством ячеек

$$T_{\text{посл}} = T_{s1} \cdot n_s + T_{f1} \cdot n_f = T_{s1} \cdot n_s + T_{s1} \cdot P_s / P_f \cdot N_f / N_s \cdot n_f$$

$$Sp = \frac{T_{s1} \cdot (n_s + P_s / P_f \cdot N_f / N_s \cdot n_f)}{T_n}$$

Произвольное количество гомогенных фрагментов

$$T_{\text{посл}} = \sum_{i=1}^M T_1^i \cdot n_i = T_1^b \cdot n_b + \sum_{i=1, i \neq b}^M T_1^i \cdot n_i \quad T_1^i = T_1^b \cdot P_b / P_i \cdot N_i / N_b$$

$$Sp = \frac{T_1^b \cdot \left(n_b + \sum_{i=1, i \neq b}^M (P_b / P_i \cdot N_i / N_b \cdot n_i) \right)}{T_n}$$

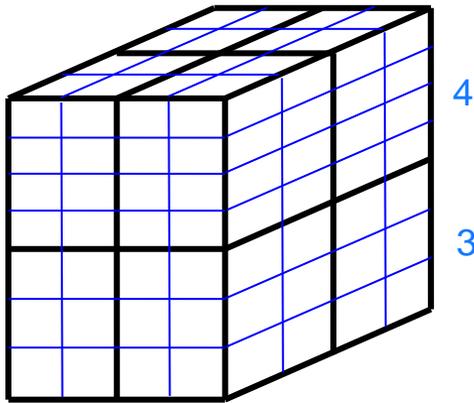
Процедура тестирования начинается с гомогенного фрагмента «b»

$$E_n = Sp/n * 100\%$$

Инвариантность результата относительно выбора начального фрагмента

Процедура тестирования

Статическая балансировка



$$P_b / P_i = 3/4 = N_i / N_b$$

- Сохранение топологии межпроцессорных обменов
- Сохранение регулярности пространственной сетки

- Запуск тестов на одном вычислительном узле из каждого гомогенного фрагмента вычислительного поля. Определение P_i
- Выбор начального гомогенного фрагмента b
- Определение коэффициента балансировки (отношение числа ячеек в параобластях) $N_i / N_b \approx P_b / P_i$
- Запуск теста на начальном (b) фрагменте. Затем задействование остальных фрагментов. Результат – T_i
- Вычисление Sp и E

$$Sp = \frac{T_1^b \cdot \left(n_b + \sum_{i=1, i \neq b}^M (P_b / P_i \cdot N_i / N_b \cdot n_i) \right)}{T_n}$$

$$E_n = Sp/n * 100\%$$

Проблемы

- Сложная гетерогенная структура гибридных супер-ЭВМ.
- Большая разница в производительности узлов с АрУ и узлов с универсальными ядрами
- Отсутствие устоявшихся критериев оценки эффективности АрУ в составе узлов супер-ЭВМ и гибридной вычислительной системы в целом.
- Большая разница в архитектуре АрУ и универсальных ядер (SIMD и MIMD дисциплины), численных алгоритмах решения задачи, а также программной реализации.
- Совместное, как правило, использование прикладными программами в ходе счета универсального ядра (функции управления и вычислителя) и АрУ (функции основного вычислителя)

Решение

- Создание универсальных тестов (ЦПУ+АрУ+MIC).
Разработаны во ВНИИЭФ: HPL, Методические прикладные тесты
- Применение модифицированного Метода увеличения задачи.
- Квант вычислительного устройства – узел Супер-ЭВМ (а не ядро).

Традиционные параметры

- Общая производительность (HPL, другие тесты). 70-80%
- Эффективность распараллеливания (Методические прикладные тесты) 40-60%

Новые параметры

- Производительность к энергопотреблению.
- Производительность к цене.
- Производительность к размерам.
- Время сохранения и восстановления контрольной точки
- Время наработки на сбой
- ???

Проблемы

- Определение критериев.
- Новая методология тестирования.

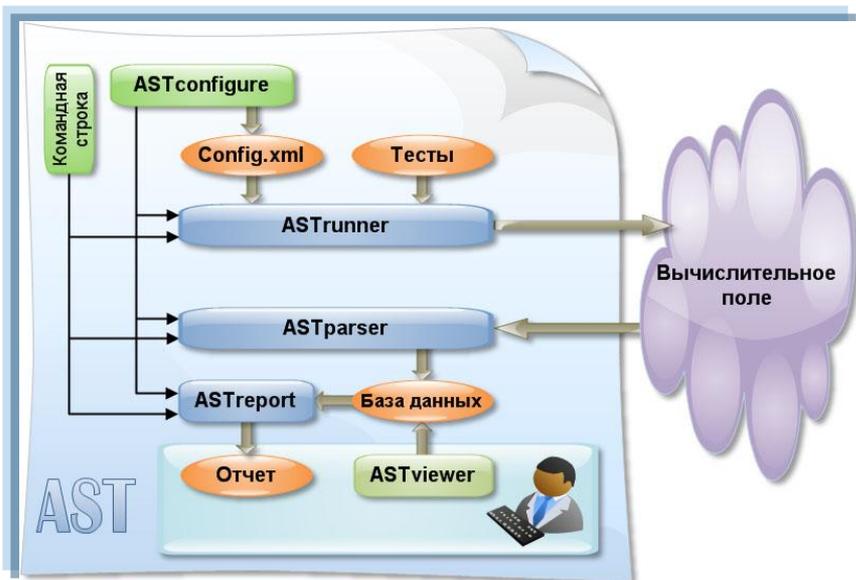
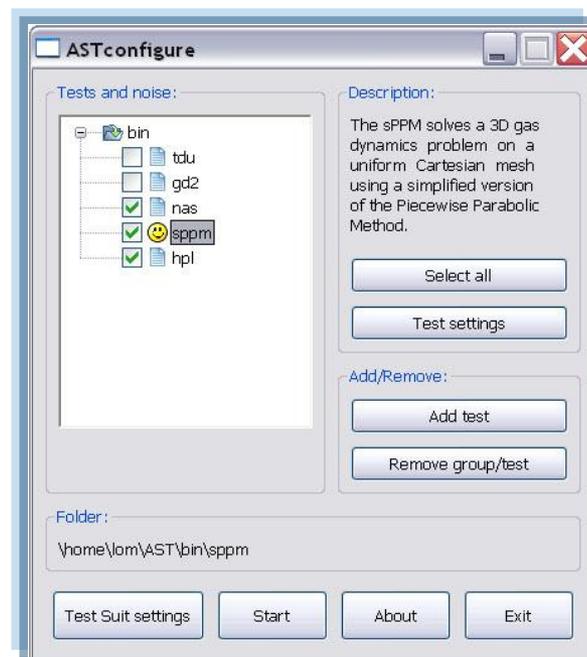
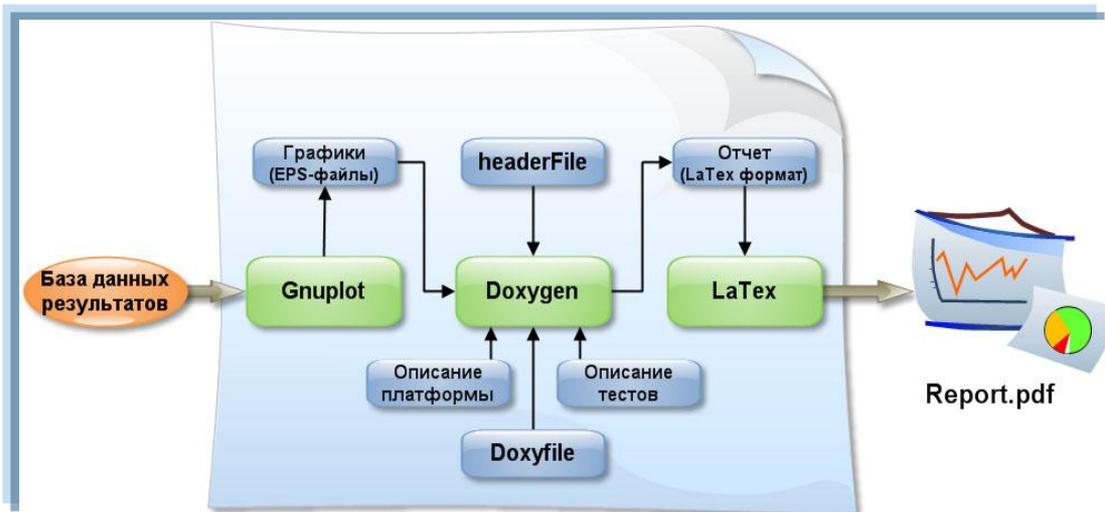


Спасибо за внимание

ВОПРОСЫ?



Дополнительные слайды



Тестовая программа C-MK



| | СМК | СМК-У |
|------------------------|--|---|
| Год создания | 1995 (С-95) | 2011 |
| Физическая постановка: | Перенос нейтронов и гамма-квантов в трёхмерном приближении | |
| Численный метод | Метод Монте-Карло | |
| Распараллеливание | MPI, асинхронное по траекториям частиц | Векторное распараллеливание |
| Аппаратная платформа | Универсальные процессоры | Универсальные процессоры GPU (NVIDIA) |
| Язык | Фортран-90 | C++ и CUDA |
| Особенности | Нет программных ограничений на число процессоров. Использование на гетерогенном поле одновременно разных универсальные процессоры | На гетерогенном поле могут использоваться одновременно универсальные процессоры и арифметические ускорители |
| Параметры теста | Заказные результаты – работа с памятью. Время записи результатов – нагрузка на файловую систему Время межпроцессорного обмена – нагрузка на коммуникации | |
| Развитие | Арифметические ускорители (CUDA), OpenMP. | |