

Лекція 1

Основні поняття про паралельні обчислення

План лекції

1. Вступ. Місце дисципліни в навчальній програмі
2. Сучасні задачі обчислювальних систем. Проблеми та перспективи.
3. Області застосування і задачі паралельної обробки.
4. Короткий огляд сучасних обчислювальних систем
5. Поняття паралельних обчислень

Нормативна дисципліна циклу професійної та практичної підготовки

Паралельні та розподілені обчислення:

Предмет вивчення – паралельні та розподілені обчислення, що застосовуються для опрацювання й подання даних електронно-обчислювальними методами.

Мета – засвоєння основних методів та алгоритмів організації паралельних та розподілених обчислень, принципів побудови відповідних обчислювальних систем, набуття початкових практичних навиків проектування таких засобів для розв'язання типових задач прикладної математики.

Кількість кредитів, відповідних ECTS: **5 кредитів**

Кількість змістових модулів: **3 модулі**

Загальний обсяг дисципліни – **150 годин.**

Аудиторні
заняття

- Лекції (24 год).
- Практичні заняття (32 год.)

Контроль

- Модульний контроль (8 год.)
- Екзамен

Самостійна
робота

- Самостійна робота (56 год.)

1

**Паралельні та розподілені
обчислювальні системи**

2

**Паралельна обробка даних.
Технології паралельного
програмування**

3

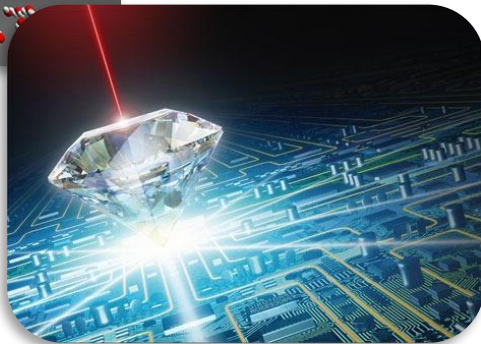
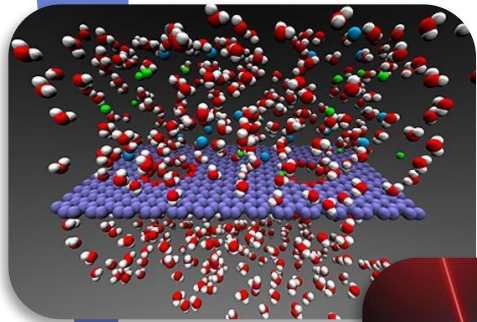
**Паралельні методи
розв'язування прикладних задач**

**Технологія паралельних
обчислень актуальна,
бо...**

Є засобом розв'язання задач,
які знаходяться на передовому
фронті сучасної науки.

Легкодоступна для досліджень:
досить мати базові знання, щоб
можна було розвиватись самому і
розвивати галузь

Є дуже широкою сферою діяльності: розробка
числових методів, вивчення структурних
властивостей алгоритмів, створення нових мов
програмування, конструювання унікальних
технічних рішень тощо.



Звіт Джона фон Неймана, 1946 р.:

1. Комп'ютер складається з процесора, пам'яті і зовнішніх пристроїв.
2. Єдиним джерелом активності у комп'ютері є процесор, яким керує програма, що знаходиться в пам'яті.
3. Пам'ять комп'ютера складається з комірок, кожна з яких має свою унікальну адресу. Кожна з комірок зберігає команду програми або елемент даних.
4. У будь-який момент процесор виконує одну команду програми, адреса якої знаходиться в лічильнику команд.
5. Інформація надходить у процесор з пам'яті або від зовнішніх пристроїв. Перетворення інформації відбувається тільки в регістрах процесора.
6. Кожна команда програми містить такі розпорядження:
 - з яких комірок взяти інформацію;
 - які операції виконати з цією інформацією;
 - в які комірки пам'яті помістити отриманий результат;
 - як змінити вміст лічильника команд.

Процесор виконує команди програми відповідно до зміни вмісту лічильника команд, поки не дістане команду зупинитися.

базові принципи побудови
«фон-нейманівської» ЕОМ

двійкове кодування

однорідність пам'яті

програмне управління

адресність

Для яких задач

є зміст застосовувати паралельні обчислення?

Там, де треба забезпечити:

- ❖ надвисоку швидкодію,
- ❖ великий об'єм оперативної пам'яті,
- ❖ велику кількість інформації, що передається,
- ❖ обробку і зберігання великого об'єму інформації,
- ❖ висока відмовостійкість.

Актуальні напрямки, в яких необхідна паралелізація процесів:

- 1) чисельне розв'язання задач великої розмірності із багатьма змінними;**
- 2) моделювання об'єктів і проведення аналізу поведінки складних систем різної природи;**
- 3) управління складними промисловими та технологічними процесами в режимі реального часу і в умовах невизначеності;**
- 4) обробка великих об'ємів інформації.**

Сучасні задачі обчислювальних систем:

- генна інженерія,
- створення лікарських препаратів,
- розрахунки в квантовій фізиці, хімії,
- обробка даних прямих спостережень в астрофізиці,
- моделювання клімату,
- криптографія та шифрування,
- моделювання економічних систем,
- он-лайн ігри,
- інтелектуальний аналіз даних,
- соціальні мережі,
- потік запитів в пошукових або клієнт-серверних системах та ін.
- розрахунок та проектування електронних структур,
- моделювання і прогнозування соціальних процесів,
- 3D анімація, рендерінг, обробка відео та аудіо.

- Рубін Ю.В., Белоус Л.Ф., Якуба А.А. Молекулярна і електронна структури фрагмента металізованої ДНК - пари аденін-тимін з іоном цинку
- Afanasieva T.V., Koval I.F., Nakhodkin N.G. Адсорбція елементів V групи та кисню на поверхні Si(001)2x1
- Кречківська О.М., Косач Д.А., Судаков О.О., Говорун Д.М. Неемпіричне квантово-хімічне дослідження коплементарності основ ДНК іманентною фізико-хімічною властивістю самих основ.
- Сахнік А.М. Обчислення **ab initio** методами квантової хімії спектрів коливальних частот протонів, що беруть участь в утворенні водневих зв'язків між гуаніном та цитозином у їх кето-/ацето- та аміно-/іміно-формах.
- Залізник М. Розрахунки прогнозу погоди
- Довбешко Г. Молекулярна динаміка нуклеїнових кислот і протеїнів.
- Казанцев А. М. Моделювання руху малих небесних тіл сонячної системи за довгий період часу з врахуванням релятивістських ефектів.

Стимули розвитку паралельних обчислень та техніки для їх реалізації:

необхідність підвищення
ефективності процесів
розв'язку великих і дуже
великих задач за рахунок
збільшення продуктивності
комп'ютера

теоретичне обмеження
росту продуктивності
послідовних ЕОМ

здешевлення
багатопроцесорних
обчислювальних систем

Основна мета паралельних обчислень – зменшення часу рішення задачі (у випадку рішень в реальному часі або при необхідності дуже великого обсягу обчислень).

Ще:

- Забезпечити при розв'язання великих задач:
 - збільшення деталізації;
 - підвищення точності.
- Організувати велике інформаційне навантаження:
 - розподілити вхідний потік запитів;
 - розподілити місце збереження даних.
- Використовувати усі доступні вільні ресурси.

Задача паралельних обчислень - створення ресурсу паралелізму (одержання паралельного алгоритму) в процесах вирішення завдань і управління реалізацією цього паралелізму з метою досягнення найбільшої ефективності використання відповідної обчислювальної техніки.

1. **Забезпечення надвисокої швидкодії** – складні, багатовимірні задачі, які необхідно розв'язати на протязі досить обмеженого часу.

Приклад: задачі прогнозу погоди.

Прогноз погоди з передбачуваністю **10 днів** з **10-ти хвилинним кроком**:

- продуктивність системи 100 Mflops – витрачений час 10^7 секунд (~ 100 дн.).
- продуктивність 1.7 Tflops – витрачений час 10 хв.

The screenshot shows the Gismeteo website interface. At the top, there is a navigation bar with links for 'Головна', 'Карти', 'Погодні новини', 'Прогноз на місяць', 'Інформери', and 'Додатки'. Below the navigation bar, there are three main sections: 'Погода' (Weather), 'У Києві' (In Kyiv), and 'Астрономія' (Astronomy).

The 'Погода' section displays the current weather in Kyiv, Ukraine, with a temperature of +26°C, wind speed of 3 m/s, and humidity of 49%. It also shows a 10-day forecast with a 10-hour interval.

The 'У Києві' section provides a list of weather-related services, such as 'Стилий прогноз погоди', 'Погодинний прогноз погоди', and 'Погода на 2 тижні'.

The 'Астрономія' section shows the sun and moon positions, including sunrise and sunset times, moon phase, and moonrise/moonset times.

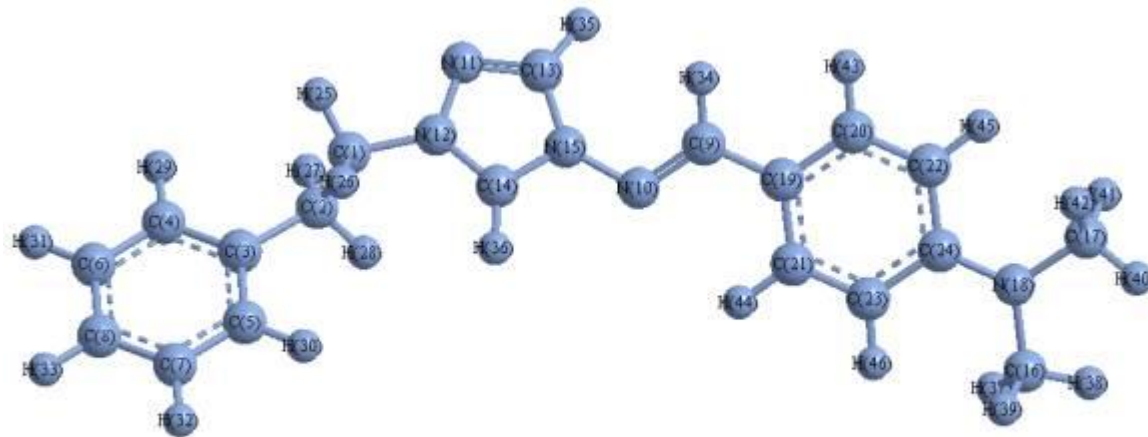
The main forecast table shows the following data:

Time	Weather	Temp (°C)	Wind (m/s)	Humidity (%)	Pressure (mm Hg)	Visibility (km)
0:00	Ясно	+18	2	81	750	+18
3:00	Ясно	+17	2	77	750	+17
6:00	Ясно	+16	2	86	749	+16
9:00	Ясно	+22	1	59	750	+20
12:00	Ясно	+28	3	32	750	+26
15:00	Ясно	+29	3	28	749	+28
18:00	Ясно	+27	1	38	749	+26
21:00	Ясно	+22	2	47	749	+21

2. Необхідність великого об'єму оперативної пам'яті:

- багатовимірні задачі гідро- і газодинаміки з розрахунку течій з врахуванням різних фізичних і хімічних процесів. Розрахунок одного напрямку вимагає оперативної пам'яті **понад 10 Гбайт**),
- задачі квантової хімії.

Неемпіричні (*Ab initio*) розрахунки електронної структури молекул вимагають обчислювальних затрат, пропорційних $N^4 - N^5$, де N - кількість молекул.



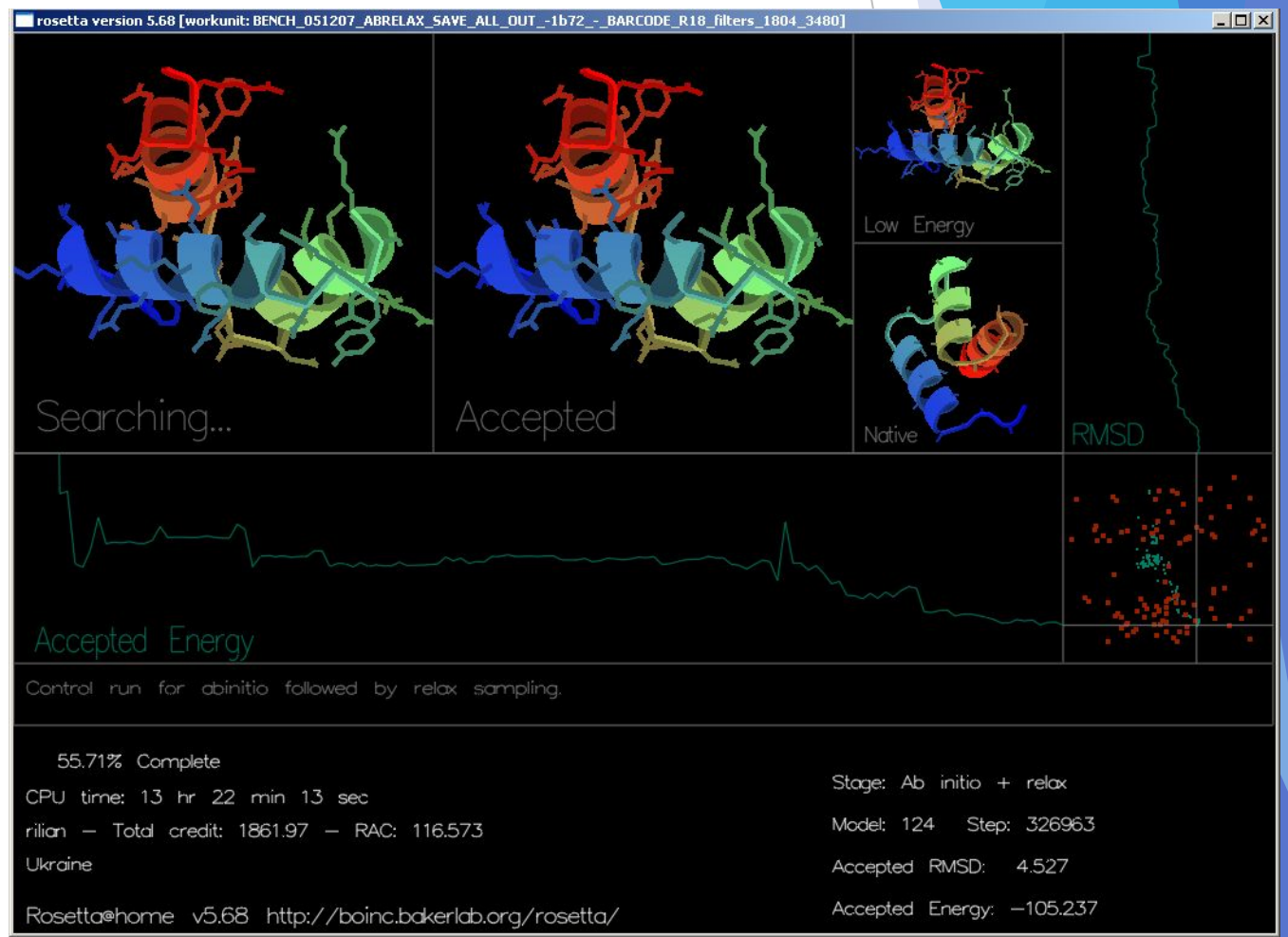
Молекула кардіотрилу, 46 атомів, $46^4 = 4\,477\,456$

3. Забезпечення передавання великої кількості інформації.

Приклад: задачі гідро- і газодинаміки із змінними граничними умовами, коли обчислювальний алгоритм постійно вимагає підведення нової інформації.

4. Збільшення деталізації і підвищення точності

Приклад: обчислення тривимірної структури білків з їх амінокислотних послідовностей / Ab initio (проект Розетта).



Спеціальні проекти розподілених обчислень, створені з метою вільними обчислювальними ресурсами звичайних комп'ютерів допомогти вченим світу вирішувати задачі в різноманітних областях науки і техніки.

В проекті беруть участь власники персональних комп'ютерів, на яких виконуються невеличкі порції-завдання (*ПК належать особисто вам, або ви маєте згоду власника на запуск програм проектів на них!*)

Програми є безкоштовними, компоненти, які виконують безпосередні розрахунки, базуються на відкритому коді. Участь у програмі безкоштовна та неоплатна.

Обчислення проводяться у фоновому режимі з мінімальним пріоритетом, займаючи 10-20 Мб пам'яті, тому не заважають нормальній роботі з комп'ютером.

Інтернет потрібен лише для отримання завдань і відправки результатів в автоматичному режимі без участі користувача.

Категорії

проектів:



Медико-біологічні – біомолекулярні моделювання, вивчення взаємодій білків, пошук ліків від хвороб, засобів захисту від епідемій, дослідження ракових клітин.



Математика - рішення проблем теорії чисел, пошук лінійок Голомба, чисел Серпінського, Вайферіха, Рамсея, простих дільників Мерсена, створення матриць цілочисленних векторів.



Криптографія - тестування методів криптозахисту, пошук колізій в алгоритмах шифрування, створення Rainbow-таблиць, розшифровка повідомлень шифрувальної машини «Енігма».



Фізика - обробка даних, отриманих з Великого адронного колайдера, вивчення поведінки рідини в невагомості, моделювання мікромолекулярних магнітних матеріалів, способи компоновки базової структури прискорювача



Хімія - дослідження нових технологій виробництва та зберігання водню, розвиток методу Монте-Карло в квантовій хімії, моделювання твердих частинок



Космос - пошук нейтронних зірок, випромінюючих гравітаційні хвилі, вивчення процесу злиття галактик, створення точної моделі нашого Всесвіту, пошук позаземного розуму



Еволюція - вплив людини на планету, вимирання видів, еволюція патогенних бактерій і сенс геномних послідовностей



Планета Земля - вивчення клімату на нашій планеті і прогнозування його на майбутнє (наприклад, на 50 років вперед), дослідження клонових стратегії в складних екологічних системах, створення бази даних сейсмологічних активних місць на планеті



Штучний інтелект - моделювання роботи мозку і суміжні питання



Інтернет - вивчення структури і топології всесвітньої мережі інтернет, створення нової пошукової машини, індексування сторінок



Рендеринг - розробка розподіленої системи для отримання комп'ютерних зображень, 3D анімації, рендеринг зображень, відео



Ігрові проекти – розв'язання задач, наприклад задача про N ферзів, опрацювання ходів в швидких шахах, "задача комівояжера", рішення японської головоломки судоку

Українська команда розподілених

обчислень:

Проект Folding@Home – проект розподілених обчислень, що проводиться під егідою Стенфордського університету.

В проекті беруть участь більш ніж 165 тис. власників персональних комп'ютерів. Загальна обчислювальна потужність близько 38 Pflops.

Суть проекту полягає в моделюванні процесу фолдінга (*згортання у тривимірну структуру*) білків з метою виявлення потенційних помилок у природній конформації (*просторовому розміщення атомів у молекулі*).

Помилки конформації спричиняють ряд клінічних синдромів, серед яких: хвороба Альцгеймера, хвороба Паркінсона, діабет типу II, склероз і деякі типи раку.

Складність паралельних обчислень

1. Проблема «знайти» паралелелізм в послідовності вирішенні задачі.
2. Необхідність перебудови традиційної послідовної технології розв'язання задач на ЕОМ. Використовувані методи, алгоритми і системне програмне забезпечення повинні забезпечувати створення паралельних програм, організувати синхронізацію тощо.
3. Не всі задачі можуть бути розпаралелені на конкретній архітектурі. Залежність ефективності паралелізму від характеристик паралельної обчислювальної системи на відміну від послідовної. Відтак перенесення паралельних алгоритмів і програм між різними типами систем деколи буває взагалі неможливим.



Суперкомп'ютер – обчислювальна машина, яка значно перевищує за своїми технічними параметрами більшість існуючих комп'ютерів.

Кластер – група незалежних гетерогенних обчислювальних машин із типовими апаратними та програмними рішеннями, об'єднаних в локальну обчислювальну мережу, що використовуються спільно і працюють як єдиний обчислювальний ресурс.



Суперкомп'ютер Titan,
[Oak Ridge National Laboratory](#), (США)



Кластер [Хемніцького технологічного університету](#) (Німеччина)



Кластер [Головної астрономічної обсерваторії НАН України](#)

Вимірювання обчислювальної потужності* комп'ютерів:

Флопс, FLOPS (FLoating-point Operations Per Second) – кількість операцій з плаваючою крапкою в секунду, яку виконує дана обчислювальна система.

IPS (Instruction Per Second) – швидкість виконання команд за одиницю часу, тобто, відношення кількості команд в програмі до часу її виконання.

Мега	10^6	мільйон
Гіга	10^9	більйон/мільярд
Тера	10^{12}	трильйон
Пета	10^{15}	квадрильйон
Екса	10^{18}	квінтильйон

Вимірювання продуктивності комп'ютерів

Тестовий пакет LINPACK - пакет фортран-програм для рішення систем лінійних алгебраїчних рівнянь. Оцінює обчислювальну потужність системи. (Jack Dongarra, 1979)

Тестовий пакет «High Performance Conjugate Gradients» (HPCG) - єдиний код для рішення спеціальних видів систем симетричних лінійних рівнянь за допомогою методу сполучених градієнтів (conjugate gradient method). Вимірює продуктивність системи: не тільки обчислювальну потужність, а й оптимальність балансу між обчислювальною потужністю, швидкістю роботи пам'яті і комунікаційних магістралей. (Jack Dongarra, 2012)



Топ-1 на Червень 2018: Суперкомп'ютер Summit, розроблений IBM для Національної лабораторії Oak Ridge Департаменту енергетики США (ORNL)

- ядер – 2 282 544 (IBM POWER9, NVIDIA Volta GV100),
- реальна обчислювальна потужність – 122,3 Pflops на тесті LINPACK,
- 2,926 Pflops на тесті HPCG,
- споживана енергія – 8 806 кВт,

Порівняємо (1946-2018 рр.)

Кластер Tianhe-2 (MilkyWay-2),

Китайський національний університет оборонних технологій, **Топ-1 2015:**

- ядер – 3 120 000,
- реальна обч. потужність – 33,863 Pflops на тесті LINPACK,
- енергоспоживання – 17 808 кВт,
- складається з 170 шаф
- займає площу - 720 м².

Процесор Intel Core i7-975 XE 3,33 ГГц (2012 р.) – 53,28 Gflops (4 ядра).

Комп'ютер ENIAC (Electronic Numerical Integrator and Computer), 1946 р., маса 27 т:

- енергоспоживання - 150 кВт,
- реальна обч. потужність - 3000 оп./сек.

Список **TOP10** найпотужніших обчислювальних систем у світі

Червень 2015 рік

Червень 2019 рік

Rank	Site	System	Cores	Rmax (TFlop/s)	Rpeak (TFlop/s)	Power (kW)
1	National Super Computer Center in Guangzhou China	Tianhe-2 (MilkyWay-2) - TH-IVB-FEP Cluster, Intel Xeon E5-2692 12C 2.200GHz, TH Express-2, Intel Xeon Phi 31S1P NUDT	3,120,000	33,862.7	54,902.4	17,808
2	DOE/SC/Oak Ridge National Laboratory United States	Titan - Cray XK7 , Opteron 6274 16C 2.200GHz, Cray Gemini interconnect, NVIDIA K20x Cray Inc.	560,640	17,590.0	27,112.5	8,209
3	DOE/NNSA/LLNL United States	Sequoia - BlueGene/Q, Power BQC 16C 1.60 GHz, Custom IBM	1,572,864	17,173.2	20,132.7	7,890
4	RIKEN Advanced Institute for Computational Science (AICS) Japan	K computer, SPARC64 VIIIfx 2.0GHz, Tofu interconnect Fujitsu	705,024	10,510.0	11,280.4	12,660
5	DOE/SC/Argonne National Laboratory United States	Mira - BlueGene/Q, Power BQC 16C 1.60GHz, Custom IBM	786,432	8,586.6	10,066.3	3,945
6	Swiss National Supercomputing Centre (CSCS) Switzerland	Piz Daint - Cray XC30, Xeon E5-2670 8C 2.600GHz, Aries interconnect , NVIDIA K20x Cray Inc.	115,984	6,271.0	7,788.9	2,325
7	King Abdullah University of Science and Technology Saudi Arabia	Shaheen II - Cray XC40, Xeon E5-2698v3 16C 2.3GHz, Aries interconnect Cray Inc.	196,608	5,537.0	7,235.2	2,834
8	Texas Advanced Computing Center/Univ. of Texas United States	Stampede - PowerEdge C8220, Xeon E5-2680 8C 2.700GHz, Infiniband FDR, Intel Xeon Phi SE10P Dell	462,462	5,168.1	8,520.1	4,510
9	Forschungszentrum Juelich (FZJ) Germany	JUQUEEN - BlueGene/Q, Power BQC 16C 1.600GHz, Custom Interconnect IBM	458,752	5,008.9	5,872.0	2,301
10	DOE/NNSA/LLNL United States	Vulcan - BlueGene/Q, Power BQC 16C 1.600GHz, Custom Interconnect IBM	393,216	4,293.3	5,033.2	1,972

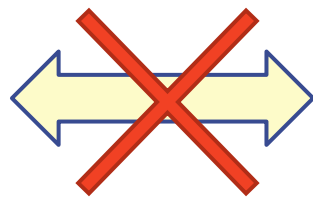
Rank	Site	System	Cores	Rmax (TFlop/s)	Rpeak (TFlop/s)	Power (kW)
1	DOE/SC/Oak Ridge National Laboratory United States	Summit - IBM Power System AC922, IBM POWER9 22C 3.07GHz, NVIDIA Volta GV100, Dual-rail Mellanox EDR Infiniband IBM	2,414,592	148,600.0	200,794.9	10,096
2	DOE/NNSA/LLNL United States	Sierra - IBM Power System S922LC, IBM POWER9 22C 3.1GHz, NVIDIA Volta GV100, Dual-rail Mellanox EDR Infiniband IBM / NVIDIA / Mellanox	1,572,480	94,640.0	125,712.0	7,438
3	National Supercomputing Center in Wuxi China	Sunway TaihuLight - Sunway MPP, Sunway SW26010 260C 1.45GHz, Sunway NRCCPC	10,649,600	93,014.6	125,435.9	15,371
4	National Super Computer Center in Guangzhou China	Tianhe-2A - TH-IVB-FEP Cluster, Intel Xeon E5-2692v2 12C 2.2GHz, TH Express-2, Matrix-2000 NUDT	4,981,760	61,444.5	100,678.7	18,482
5	Texas Advanced Computing Center/Univ. of Texas United States	Frontera - Dell C6420, Xeon Platinum 8280 28C 2.7GHz, Mellanox InfiniBand HDR Dell EMC	448,448	23,516.4	38,745.9	
6	Swiss National Supercomputing Centre (CSCS) Switzerland	Piz Daint - Cray XC50, Xeon E5-2690v3 12C 2.6GHz, Aries interconnect , NVIDIA Tesla P100 Cray Inc.	387,872	21,230.0	27,154.3	2,384
7	DOE/NNSA/LANL/SNL United States	Trinity - Cray XC40, Xeon E5-2698v3 16C 2.3GHz, Intel Xeon Phi 7250 68C 1.4GHz, Aries interconnect Cray Inc.	979,072	20,158.7	41,461.2	7,578
8	National Institute of Advanced Industrial Science and Technology (AIST) Japan	AI Bridging Cloud Infrastructure (ABCI) - PRIMERGY CX2570 M4, Xeon Gold 6148 20C 2.4GHz, NVIDIA Tesla V100 SXM2, Infiniband EDR Fujitsu	391,680	19,880.0	32,576.6	1,649

Паралельні обчислення – це:

- 1) спосіб організації комп'ютерних обчислень, при якому програми розробляються, як набір взаємодіючих обчислювальних процесів, що працюють асинхронно і при цьому одночасно.
- 2) використання декількох або багатьох обчислювальних пристроїв для одночасного виконання різних частин однієї програми (одного проекту).
- 3) обчислення, які можна реалізувати на багатопроцесорних системах з використанням можливості одночасного виконання багатьох дій, породжуваних процесом вирішення однієї або багатьох завдань (*Словник з кібернетики*).
- 4) форма обчислень, в яких кілька дій проводяться одночасно (*Вікіпедія*).

Паралельні обчислення – це обчислення, що підтримуються на математичному, алгоритмічному, програмному чи апаратному рівні (на всіх або декількох) і забезпечують можливість паралельного виконання задачі.

Паралельні
обчислення



Багатопроцесорні
системи

Паралельні
обчислення



Багатозадачні
режими

Паралельні
обчислення



Одночасне виконання операцій
для вирішення спільного
загального завдання



Хмарні
обчислення

Розподілені
обчислення

Паралельні
обчислення

Хмарні обчислення – технологія обробки даних, в якій комп'ютерні ресурси і потужності надаються як інтернет-сервіс.

Розподілені обчислення – технологія обробки даних, в якій велике трудомістке завдання (в основному, обчислювальні задачі) розподіляється для виконання між кількома комп'ютерами, об'єднаних в паралельну обчислювальну систему локальною або глобальною мережею.



Паралельні обчислення на мультипроцесорній системі:

- об'єднання спеціалізованих процесорів;
- спеціальне програмне забезпечення;
- спільна пам'ять;
- надшвидке з'єднання.

Розподілені обчислення на мультикомп'ютерній системі:

- мережа універсальних (стандартних) комп'ютерів із високою швидкістю;
- розподілена пам'ять (у кожного своя);
- один або кілька керуючих вузлів.

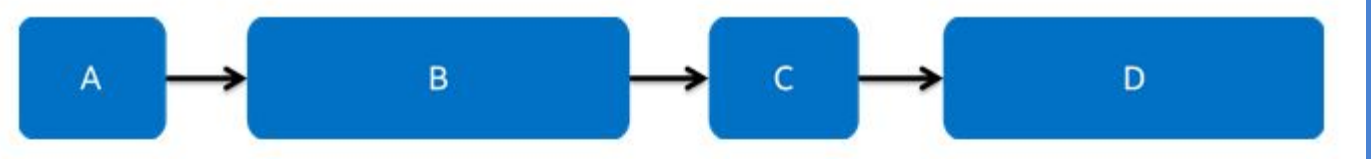
Паралельні завдання – завдання, що допускають одночасне (НЕ обов'язково незалежне) виконання.

Паралельний алгоритм – алгоритм, операції якого можуть виконуватися одночасно (не обов'язково незалежно); мається на увазі, що в явному або неявному вигляді вказані одночасно виконувані операції або набір операцій.

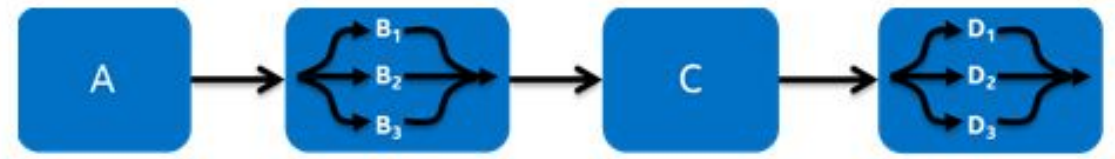
Паралельна програма – паралельний алгоритм, записаний в деякому середовищі програмування, орієнтованому на обчислювальні системи паралельної архітектури. Відповідно, техніка створення паралельних програм називається **паралельним програмуванням** (є підмножиною більш широкого поняття багатопотоковості - *multithreading*).

Паралельна система – це паралельна програма + паралельна архітектура. Паралельна програма невід'ємна від паралельної архітектури.

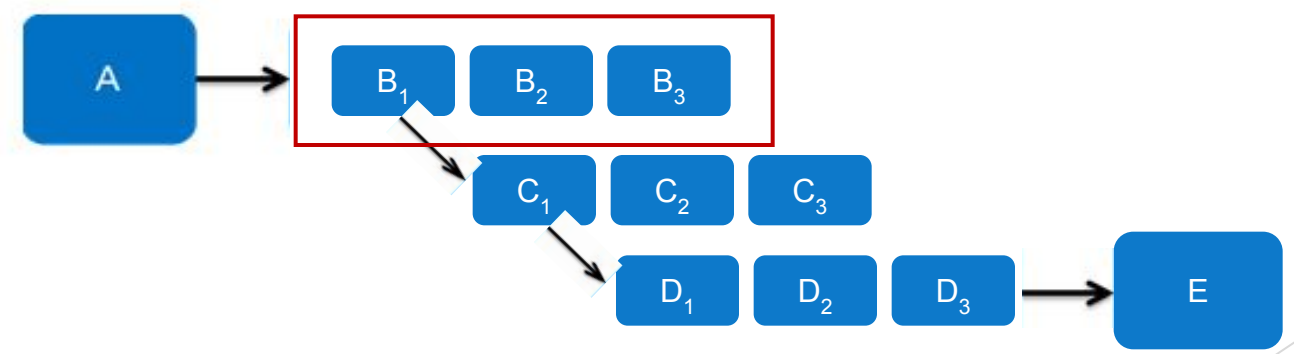
Способи паралельної обробки:



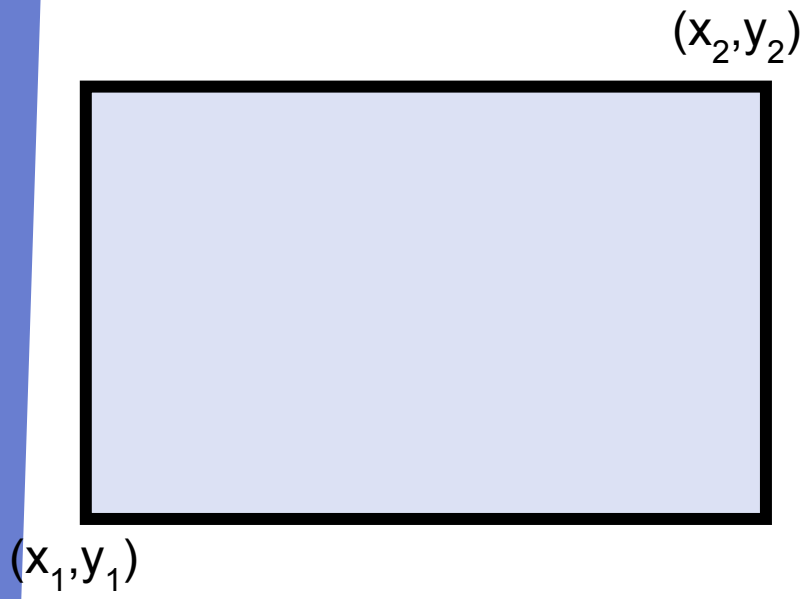
1. **Чистий паралелізм** – технологія, що забезпечує виконання задач (функцій) шляхом їх розбиття на підзадачі (підфункції) з одночасним виконанням останніх в часі. Характеризується повторним використанням однакових елементів, об'єктів, модулів і дає прямопропорційне зростання продуктивності:



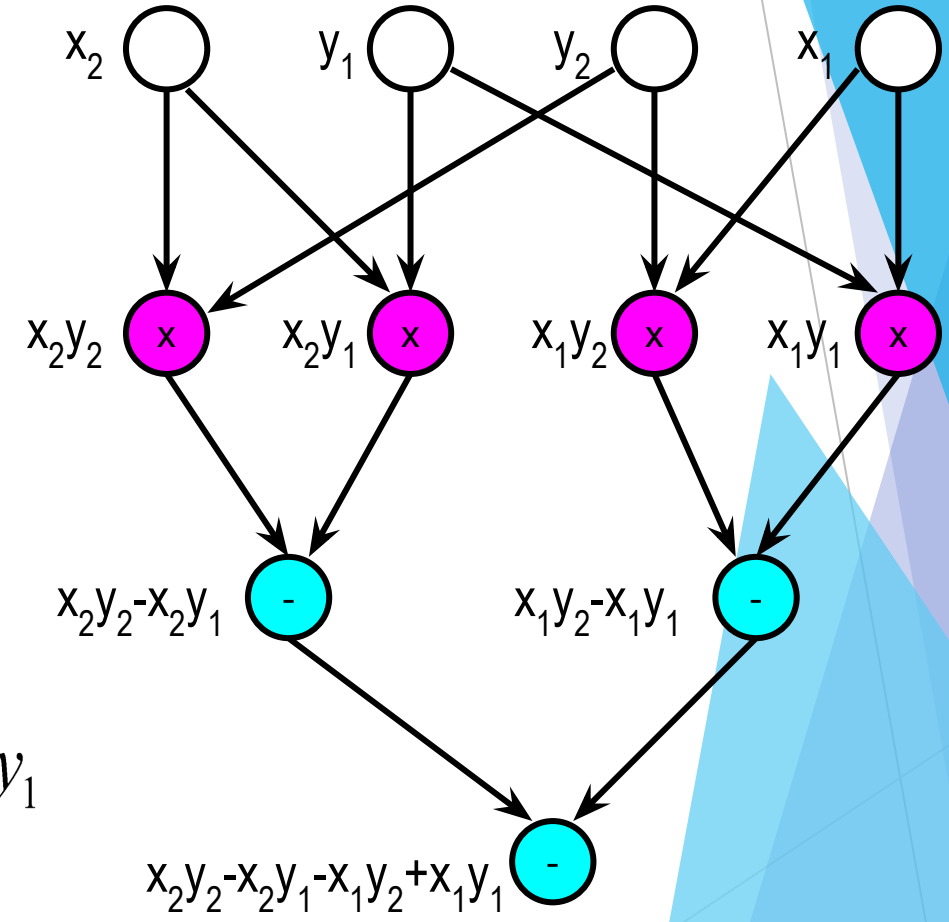
2. **Конвеєризація** – метод, що забезпечує сукупність різних дій за рахунок їх розбиття на підфункції зі зміщеним в часі виконанням – кожна мікрооперація задачі виділяється в окремий пристрій (крок або ступінь конвеєра), які розташовуються у порядку виконання відповідних операцій.



Приклад: обчислення площі прямокутника.



$$S = (x_2 - x_1)(y_2 - y_1) = x_2y_2 - x_2y_1 - x_1y_2 + x_1y_1$$



Приклад: сума значень у масиві

Послідовний алгоритм

```
for(i=0; i<N; i++)  
    sum+=data[i];
```

Паралельний алгоритм (нехай N - парне)

```
for(i=0; i<N/2; i++) {  
    sum1+=data[2*i];  
    sum2+=data[2*i+1];  
}  
sum=sum1+sum2;
```

