РОБОТА З СУПЕРКОМП’ЮТЕРОМ ІНСТИТУТУ КІБЕРНЕТИКИ НАН УКРАЇНИ

підготував студент 402 групи
Сорочан Олександр

Чернівці – 2015

1. Загальні відомості

- Суперкомп’ютер – спеціалізована обчислювальна машина, яка значно переважає за своїми параметрами та швидкістю обрахунків більшість існуючих комп’ютерів.
- Як правило, сучасні суперкомп’ютери насправді є великим числом потужних серверних комп’ютерів – «вузлів», з’єднаних між собою високошвидкісною магістраллю для отримання максимальної продуктивності. Такі суперкомп’ютери називають ще обчислювальними кластерами.
- Найпоширенішим є використання однорідних кластерів, тобто таких, де всі вузли абсолютно однакові за своєю архітектурою й продуктивністю.

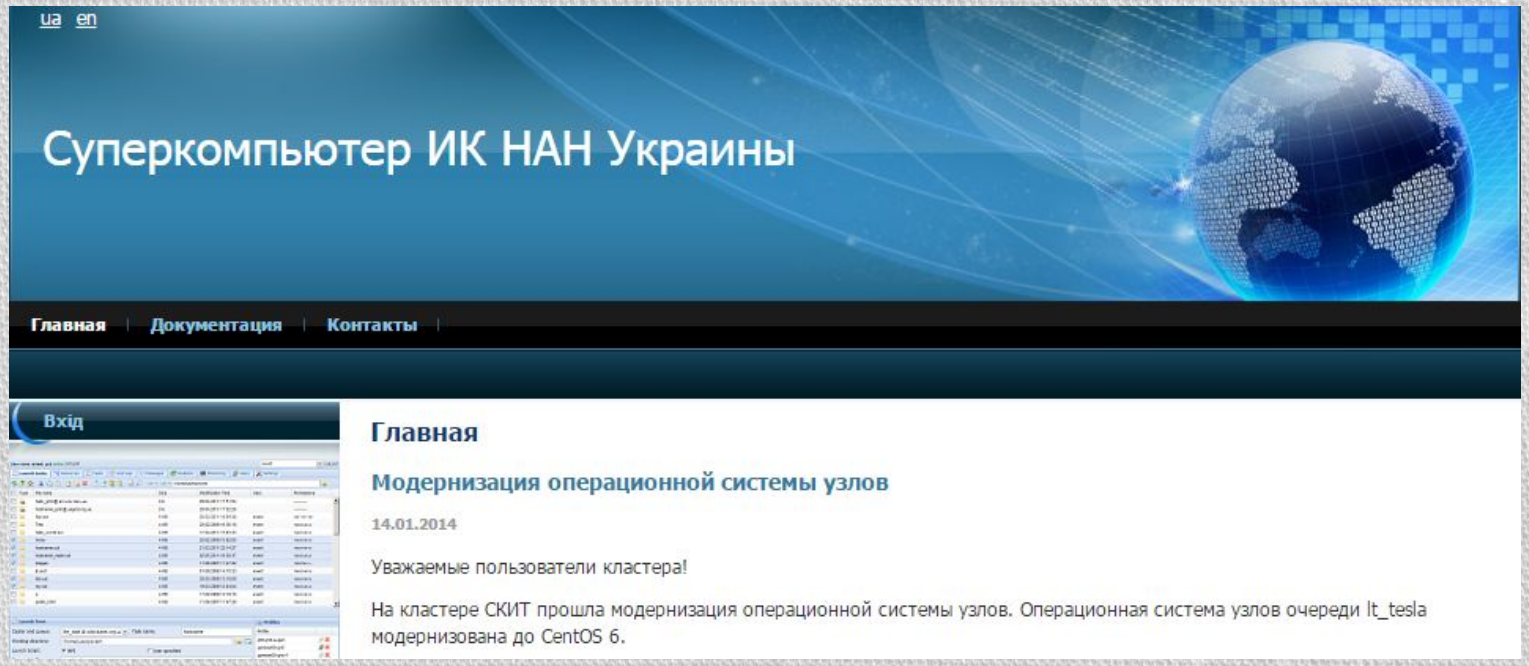
- Основним завданням суперкомп’ютера є запуск на ньому паралельних програм, тобто програм, призначених для запуску одразу на декількох процесорах (ядрах).
- Це може стати корисним у разі проведення великої кількості обчислень. Розділивши набір операцій між декількома процесорами, можна добитися більшої продуктивності, програма працюватиме менше часу.
- У такому разі кажуть, що процес, породжений такою програмою, складається з декількох потоків, які виконуються паралельно, тобто без наперед визначеного порядку за часом.
- Утворення декількох потоків часто призводить до додаткової задачі координації роботи між потоками, однак кінцевий результат виправдовує ці додаткові витрати.

- Сайт суперкомп’ютера Інституту кібернетики НАН України – http://icybcluster.org.ua/

- Різноманітна інформація про обчислювальний кластер знаходиться у розділі «Документація»

- Найбільш корисним є розділ «Інструкція для користувачів»

- На жаль, сайт суперкомп’ютера не є надто зручним, а матеріали сайту часто не дублюються між різними мовами сайту. Деякі додаткові матеріали можна знайти на російськомовній версії сайту: http://icybcluster.org.ua/index.php?lang_id=1 – яка навіть не доступна з україномовної чи англомовної версії.
- Також варто відзначити, що і ця версія сайту не охоплює усі можливості роботи з суперкомп’ютером.



- Суперкомп’ютер Інституту кібернетики складається з чотирьох обчислювальних кластерів: СКІТ-1, СКІТ-2, СКІТ-3, СКІТ-4. З них перші два кластери застаріли і уже не використовуються.
- СКІТ-3 – 127-вузловий кластер на багатоядерних процесорах (75 вузлів на 2-ядерних процесорах Intel Xeon 5160 та 52 вузла на 4-ядерних процесорах Intel Xeon 5345).
- Тактова частота – 3,0 ГГц та 2,2 ГГц відповідно. Число процесорів у вузлі кластера – 2.
- Оперативна пам’ять вузла – 2 ГБ на ядро, відповідно, 8 та 16 ГБ.
- Число ядер процесорів у вузлі – 4 та 8. Всього у кластері 716 ядер.
- СКІТ-3 інтегрований із системою зберігання даних типу RAID5 на основі паралельної файлової системи Lustre обсягом 20 ТБ.
- Продуктивність кластера – 7500 ГФлопс (номінальна), 5317 ГФлопс (підтверджена).

- СКІТ-4 – 28-вузловий кластер на 16-ядерних процесорах Intel Xeon E5-2600.
- Тактова частота – 2,6 ГГц. Число процесорі у вузлі кластера – 1.
- У режимі Hyper-threading відбувається імітація 32-ядерних процесорів.
- Оперативна пам’ять вузла – 64 ГБ.
- Всього у кластері 448 ядер.
- СКІТ-4 інтегрований із високопродуктивним сховищем даних об'ємом 120 ТБ на основі паралельної файлової системи Lustre.
- З 28 вузлів 12 додатково мають по 3 графічні прискорювачі nVidia Tesla M2075.
- Завдяки наявності графічних процесорів nVidia продуктивність кластера становить 30 ТФлопс (номінальна) та 18 ТФлопс (реальна). В той же час на цьому кластері не рекомендується запускати задачі, які не використовують ресурс графічних прискорювачів.

2. Про паралельні технології

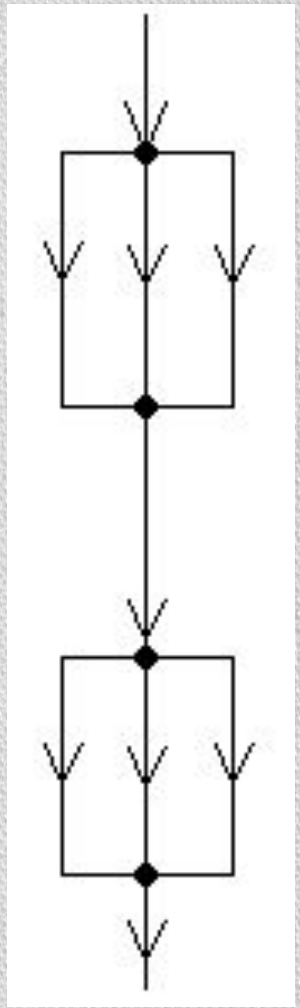
- Існує декілька способів зайняти обчислювальні потужності кластера:
- 1. **Запускання багатьох однопроцесорних завдань.** Це може бути сприятливим варіантом, якщо потрібно провести багато незалежних обчислювальних експериментів з різними вхідними даними, причому час проведення кожного окремого розрахунку не має значення, а всі дані розміщаються в об'ємі пам'яті, доступному одному процесу.
- 2. **Викликати у своїх програмах паралельні бібліотеки.** Для деяких областей, наприклад, лінійна алгебра, доступні бібліотеки, які дозволяють вирішувати широке коло стандартних підзадач з використанням можливостей паралельної обробки.

- Якщо звертання до таких підзадач становить більшу частину обчислювальних операцій програми, то використання такої паралельної бібліотеки дозволить одержати паралельну програму практично без написання власного паралельного коду. Прикладом такої бібліотеки є ScaLAPACK, яка доступна для використання на кластері.
- 3. **Створювати власні паралельні програми.** Це найбільш трудомісткий, але й найбільш універсальний спосіб. Існує кілька варіантів такої роботи, зокрема , вставляти паралельні конструкції в готові паралельні програми або створювати з "нуля" паралельну програму.
- Надалі розглядатиметься саме останній варіант.

- На суперкомп’ютері встановлені компілятори мов C, C++ та Fortran.
- Можна встановлювати компілятори й інших мов, але тільки у свій домашній каталог. Варто відзначити також слабку підтримку паралельних технологій, встановлених на суперкомп’ютері, іншими мовами. Також не гарантується стабільність роботи таких компіляторів на обчислювальному кластері.
- Для усіх вищезазначених мов встановлені відкриті компілятори GCC та комерційні Intel.
- Версії компіляторів GCC: 3.4.6, 4.1.2, 4.4.7
- Версії компіляторів Intel: 10.1, 12.1.6, 13.0.1, 13.1.1, 13.1.3

- Суперкомп’ютер підтримує такі паралельні технології:
- 1. **MPI.** Програмний інтерфейс для передачі інформації, який дозволяє обмінюватися повідомленнями між процесами, які виконують одну задачу.
- 2. **CUDA.** Програмно-апаратна архітектура паралельних обчислень, яка дозволяє суттєво збільшити продуктивність обрахунків завдяки використанню графічних процесорів nVidia.
- 3. **OpenCL.** Фреймворк для написання паралельних програм на різноманітних графічних та центральних процесорах.
- 4. **OpenMP.** Відкритий стандарт для розпаралелювання програм на системах з загальною пам’яттю.
- Надалі буде розглянуто такі класичні технології, як OpenMP та MPI.

2.1. OpenMP



- OpenMP використовується на системах із загальною пам’яттю, тобто коли різні потоки можуть звертатися до однієї і тієї самої ділянки пам’яті.
- За допомогою директив OpenMP можна вказати компілятору, що деякі ділянки коду необхідно виконувати паралельно, декількома потоками (див. мал.).
- Перевагою цієї технології є те, що програму, написану для виконання на одному процесорі, можна легко перетворити на паралельну, дописавши лише декілька рядків коду.

- OpenMP підтримується, зокрема, такими компіляторами:
  - компілятори GCC, починаючи з версії 4.2;
  - Visual C++ 2005 та 2008 у редакціях Professional та Team System; 2010 – у редакціях Professional, Premium та Ultimate; починаючи з 2012 – у всіх версіях;
  - комерційні компілятори Intel, починаючи з версії 10.1 – зараз надаються у складі продукту Intel Parallel Studio.
- Щоби скомпілювати програму, написану з допомогою OpenMP, компілятором GCC, необхідно додати ключ /fopenmp; у випадку Visual C++ - /openmp; Intel – /Qopenmp
- Для останніх двох компіляторів, у разі використання середовища Microsoft Visual Studio (Intel Parallel Studio інтегровується у склад Microsoft Visual Studio) цю опцію можна ввімкнути у налаштуваннях проекту.

- Для демонстрації роботи OpenMP наведемо програму обчислення числа π на мові C++ за наступною формулою:

$$\pi \approx \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\frac{4}{1+x_i{}^2}, \quad x_i = \frac{i-0.5}{n}$$

```
    double x = 0;
    double sum = 0;
    const int num_steps = 1000;
    double step = 1.0 / num_steps;
#pragma omp parallel for private(x) reduction(+:sum)
    for (int i = 0; i < num_steps; i++) {
        x = ( (double)i + 0.5) * step;
        sum += 4.0 / (1.0 + x * x);
    }
    sum *= step;
```

- У код послідовної програми вставлено лише одну стрічку:

#pragma omp parallel for private(x) reduction(+:sum) –

і вона стає паралельною.

- Деякі пояснення:
  - Усі директиви OpenMP включаються у C та C++ за допомогою директиви препроцесора #pragma з подальшою інструкцією omp
  - Усі змінні, оголошені до директив OpenMP вважаються глобальними для усіх потоків; всередині – локальними для кожного потоку.
  - Область видимості змінної можна змінити. Наприклад, за допомогою інструкції private змінна x стала локальною для кожного потоку.
  - Інструкція parallel for вказує на те, що ітерації циклу розділяються між декількома потоками, наприклад, дії для i = 0 .. 249 виконуватимуться першим потоком, i = 250 .. 499 – другим потоком і т. д.
  - Існують й окремі інструкції parallel та for.

- Інструкція parallel вказує на те, що код, записаний у наступному блоці виконуватиметься одночасно усіма потоками.
- Інструкція for працює лише у вкладеному блоці parallel і означає розділення ітерацій циклу між різними потоками.
- Оператор редукції reduction робить одразу декілька речей. Так, у цьому прикладі, змінна sum стає локальною для кожного потоку, а після виконання циклу (як і паралельного блоку) усі локальні значення змінної додаються (+), а результат зберігається у тій же змінній.

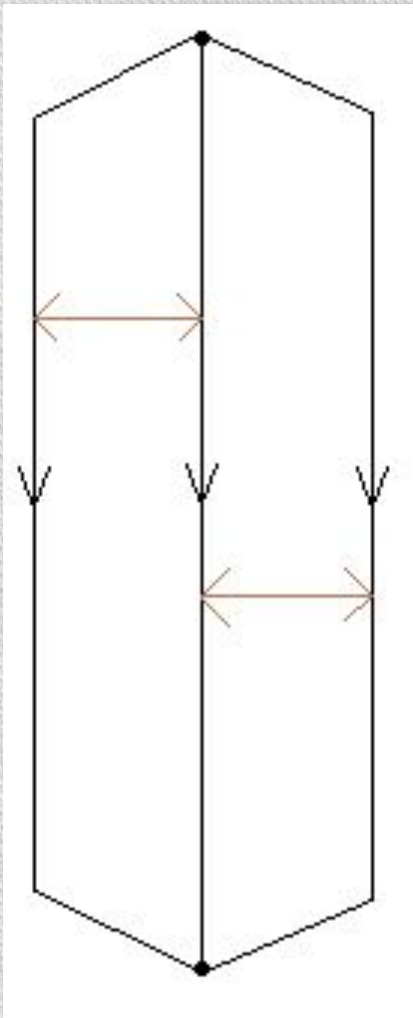
- Кількість потоків можна визначити змінною середовища OMP_NUM_THREADS, яка встановлюється у командному рядку:

```
set OMP_NUM_THREADS=4,
```

- або викликом функції omp_set_num_threads із заголовного файлу omp.h:

```
omp_set_num_threads(4);
```

2.2. MPI



- Message Passing Interface (MPI) використовується на системах з роздільною пам’яттю, коли кожному процесору виділено свою область пам’яті.
- На відміну від OpenMP, MPI передбачає існування декількох потоків з самого початку роботи програми. Протягом роботи програми потоки можуть комунікувати між собою за допомогою механізму «повідомлень» (див. мал.).
- Така особливість роботи MPI не дозволяє переробити послідовну програму у паралельну, натомість доводиться повністю змінювати логіку програми.

- MPI є найбільш розповсюдженим стандартом інтерфейсу обміну даними в паралельному програмуванні та є найбільш природною технологією для суперкомп'ютера Інституту кібернетики. Багато паралельних бібліотек, встановлених на суперкомп'ютері, базуються саме на MPI.
- Сам по собі MPI не є готовим програмним продуктом, а є лише набором правил, за якими мають працювати реалізації цієї технології. Серед її реалізацій виділяють відкриті MPICH та OpenMPI, безкоштовну Microsoft MPI та комерційну Intel MPI.
- Компіляція та запуск програм, написаних з допомогою MPI, зазвичай супроводжується великими труднощами: необхідно підключати додаткові заголовні файли та файли бібліотек, а запуск програми виконується через додатковий файл, наприклад з іменем mpiexec.exe, де скомпільована програма передається одним із параметрів. Про ці налаштування найкраще прочитати в офіційних документаціях відповідних реалізацій.

- Для порівняння технологій знову наводиться програма обчислення числа π, але вже з використанням MPI.

```
#include "mpi.h"
#include <iostream>
using namespace std;
int main(int argc, char *argv[]) {
    int num_steps, myid, numprocs, i;
    double pi, step, sum, x;
    MPI_Init(&argc, &argv);
    MPI_Comm_size(MPI_COMM_WORLD, &numprocs);
    MPI_Comm_rank(MPI_COMM_WORLD, &myid);
    if (myid == 0) {
        num_steps = 1000;
    }
    MPI_Bcast(&num_steps, 1, MPI_INT, 0, MPI_COMM_WORLD);
```

```
    step = 1.0 / num_steps;
    sum = 0.0;
    for (int i = myid; i < num_steps; i += numprocs) {
        x = step * ( (double)i + 0.5);
        sum += 4.0 / (1.0 + x * x);
    }
    sum *= step;
    MPI_Reduce(&sum, &pi, 1, MPI_DOUBLE, MPI_SUM, 0, MPI_COMM_WORLD);
    if (myid == 0) {
        cout << pi;
    }
    MPI_Finalize();
    return 0;
}
```

- Деякі пояснення:
  - Абсолютно усі команди MPI мають знаходитися між функціями MPI_Init, у яку передаються параметри командного рядка, та MPI_Finalize. Знову відкрити секцію MPI після MPI_Finalize неможливо.

- Після виконання функції MPI_Init створюється група потоків, кожний з яких виконуватиме один і той самий код, написаний після цієї функції.
- Майже в усіх функціях MPI присутній параметр зі значенням MPI_COMM_WORLD. Це спеціальний об'єкт MPI, який називається комунікатором. Комунікатори об'єднують у собі певні групи потоків. Комунікатори дозволяють контролювати, щоби повідомлення передавалися лише між процесами з одного комунікатора. Після виклику функції MPI_Init автоматично створюється комунікатор MPI_COMM_WORLD, який об'єднує у собі усі доступні потоки.
- Функція MPI_Comm_size дозволяє визначити кількість потоків у комунікаторі, а MPI_Comm_rank – порядковий номер потоку. Нумерація починається з 0.
- Функція MPI_Bcast є функцією широкомовного обміну. Після її проведення у всіх потоках з деякого комунікатора (останній параметр) буде однакове значення деякої змінної (1-ий параметр). Значення береться з потоку, номер якого задається 4-им параметром. Другий та третій параметри визначають кількість і тип даних (у формі MPI_INT, MPI_DOUBLE тощо), що передаються.

- На відміну від OpenMP, де компілятор сам забезпечував розподіл ітерацій циклу між потоками, у MPI контроль за цим покладається на користувача. Розповсюдженою є така схема: початковим значенням змінної циклу є номер потоку, зміна йде не на 1, а на кількість потоків у програмі. Таким чином, у випадку чотирьох потоків потоку з порядковим номером 0 відповідатимуть значення 0, 4, 8, … ; 1: 1, 5, 9, … ; 2: 2, 6, 10, … ; 3: 3, 7, 11, … Як бачимо, така схема забезпечує відсутність повторень індексу циклу між потоками.
- Так само, як і в OpenMP, у MPI визначено операцію редукції. За це відповідає функція MPI_Reduce. В якості параметрів передаються змінна, значення якої збиратимуться з потоків; змінна, куди запишеться результат, кількість і тип даних; операція збору даних (MPI_SUM – сума, MPI_PROD – добуток тощо); номер потоку, куди запишеться результат, та комунікатор.

- У цьому прикладі механізм передачі повідомлень застосовано неявно – у функціях MPI_Bcast та MPI_Reduce. Стандарт MPI передбачає значно ширші можливості, як наприклад, передача даних між двома конкретними потоками (з'єднання «точка–точка»), розсилка та збір даних від кількох потоків тощо.
- Запуск скомпільованої програми, написаної за допомоги MPI, може запускатися таким чином:

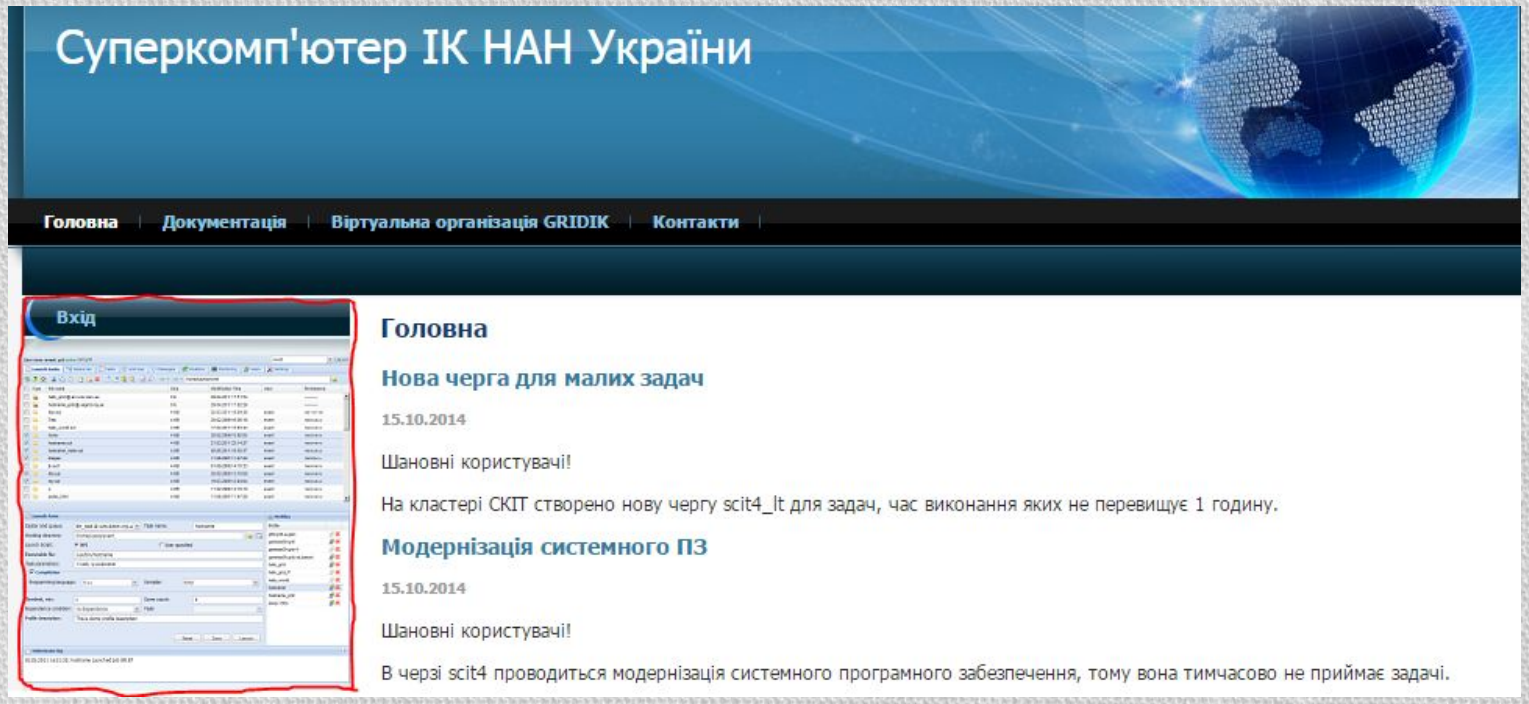
<шлях до папки з mpiexec>\mpiexec.exe –np <кількість потоків> <шлях до скомпільованої програми>

- Більше про MPI можна дізнатися, наприклад, у наступній книзі:

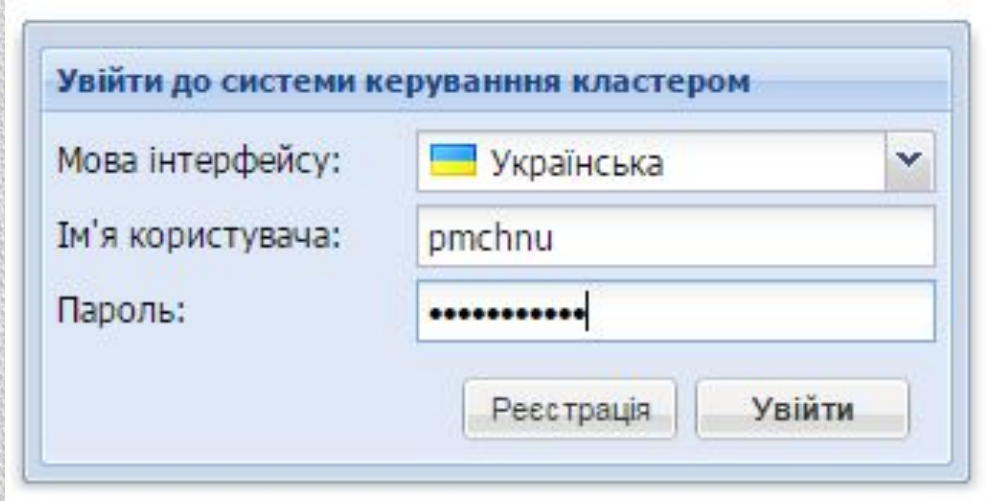
Г.И. Шпаковский, Н.В. Серикова «Программирование для многопроцессорных систем в стандарте MPI»

3. Робота з суперкомп’ютером

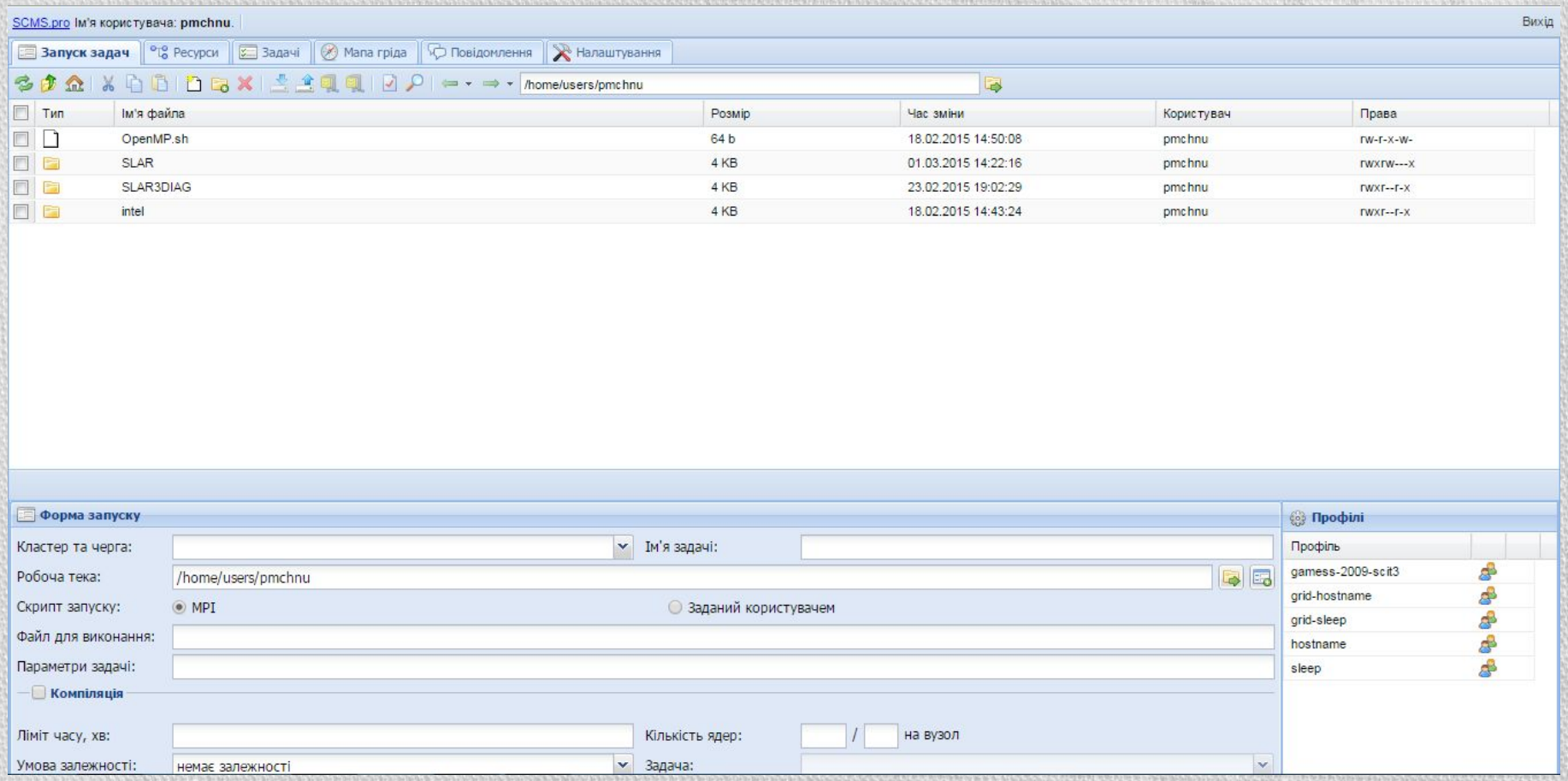
- Для роботи із суперкомп’ютером доступні 2 інтерфейси: графічний через веб-браузер та консольний.
- Щоби зайти на суперкомп’ютер із веб-браузера, необхідно зайти за посиланням «Вхід» на сайті суперкомп’ютера http://icybcluster.org.ua/



- Необхідно буде ввести облікові дані:



- Відкриється наступна сторінка:



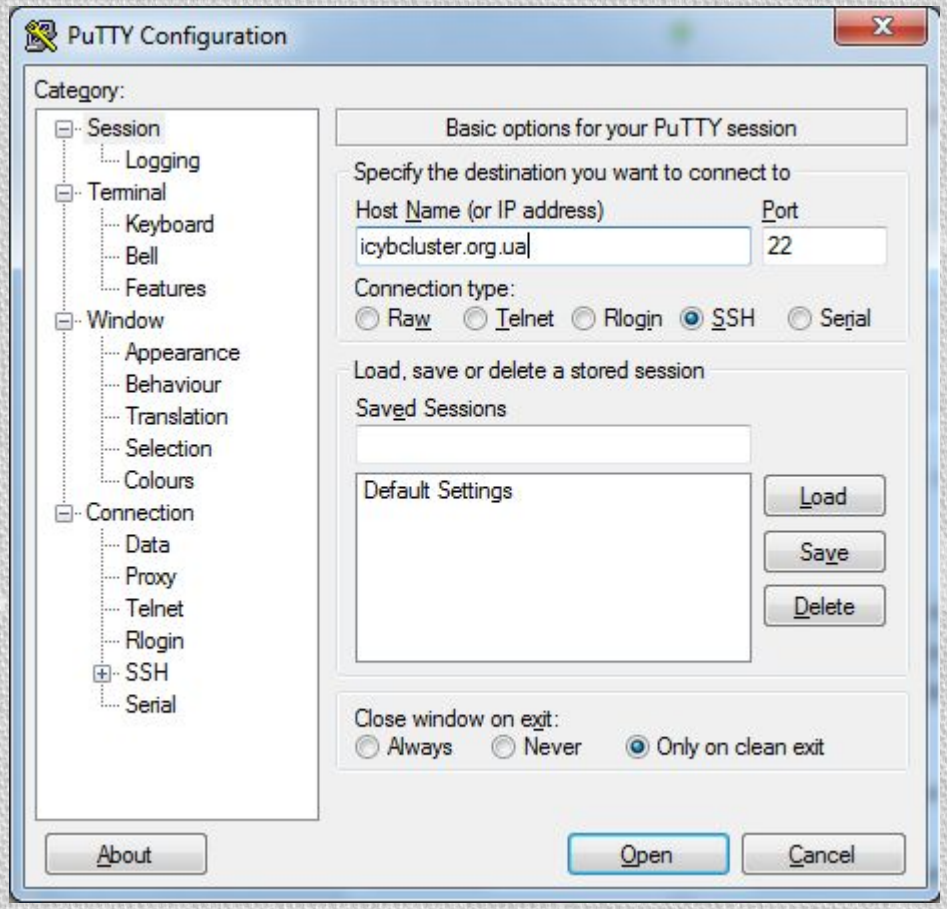
- Зверху розташоване меню, звідки можна перемикатися між різними вікнами стану суперкомп'ютера.
- На відкритій закладці «Запуск задач» розташовано деяку подібність «Провідника», форму запуску задач та журнал запусків.
- Відкривати папки і файли можна натисканням на відповідну піктограму у другому стовпчику.

- На жаль, графічний інтерфейс суперкомп'ютера недосконалий. Досить часто легше працювати з суперкомп'ютером у консольному режимі.
- Встановлення із суперкомп'ютером здійснюється через протокол SSH.
- У Linux досить виконати команду

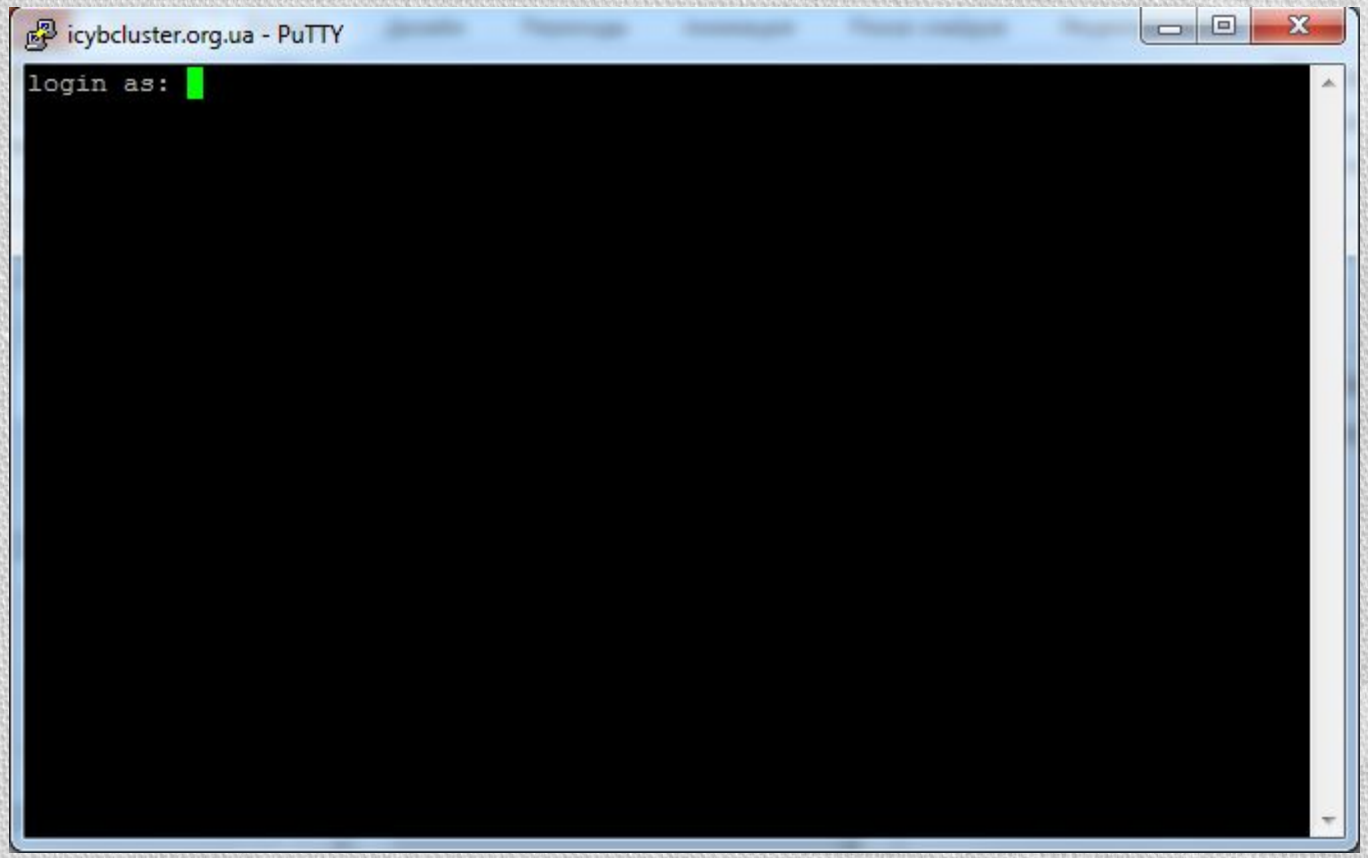
ssh pmchnu@icybcluster.org.ua

- та ввести пароль для з'єднання із суперкомп'ютером.

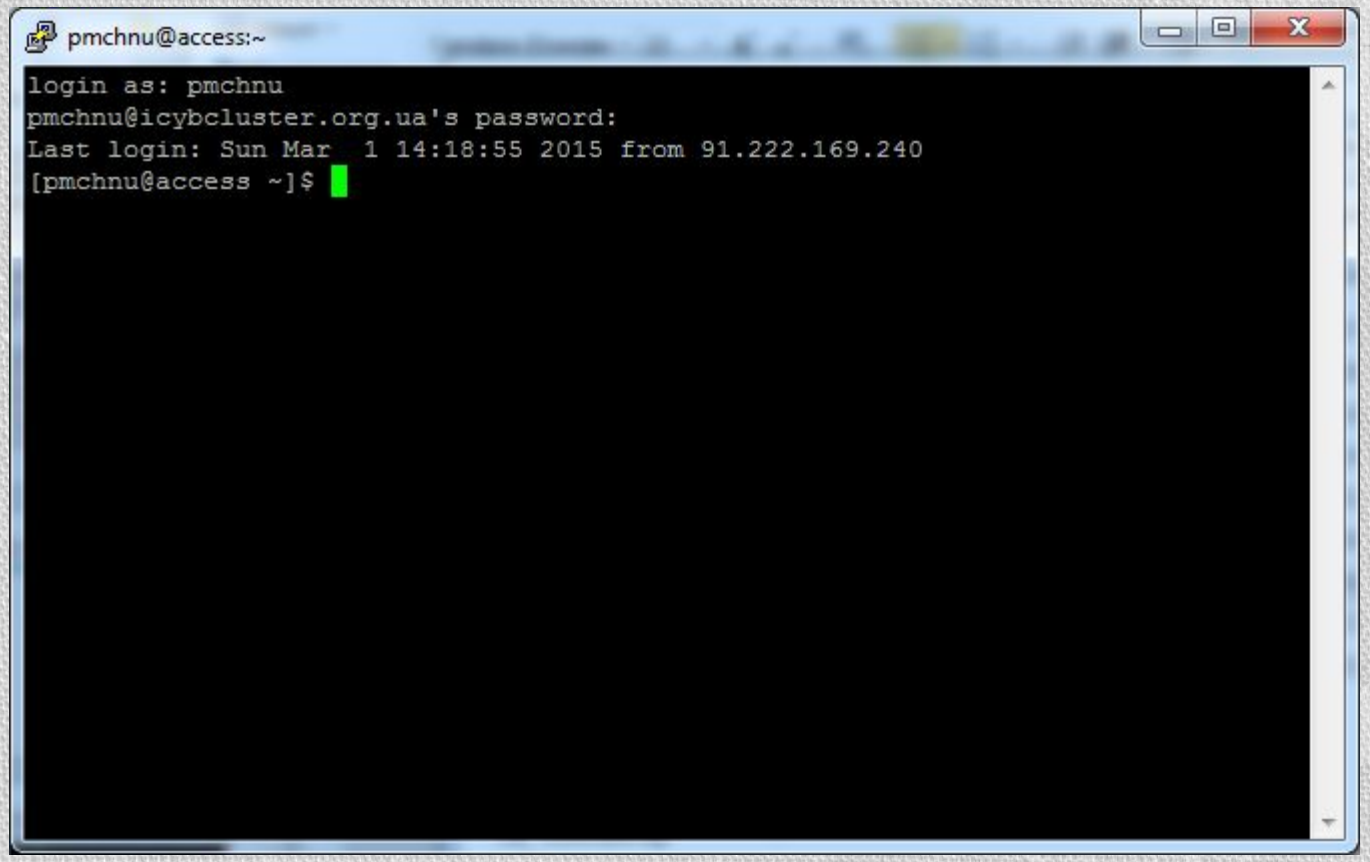
- У Windows доводиться користуватися сторонніми програмними засобами, наприклад, PuTTY (http://www.chiark.greenend.org.uk/~sgtatham/putty/download.html)



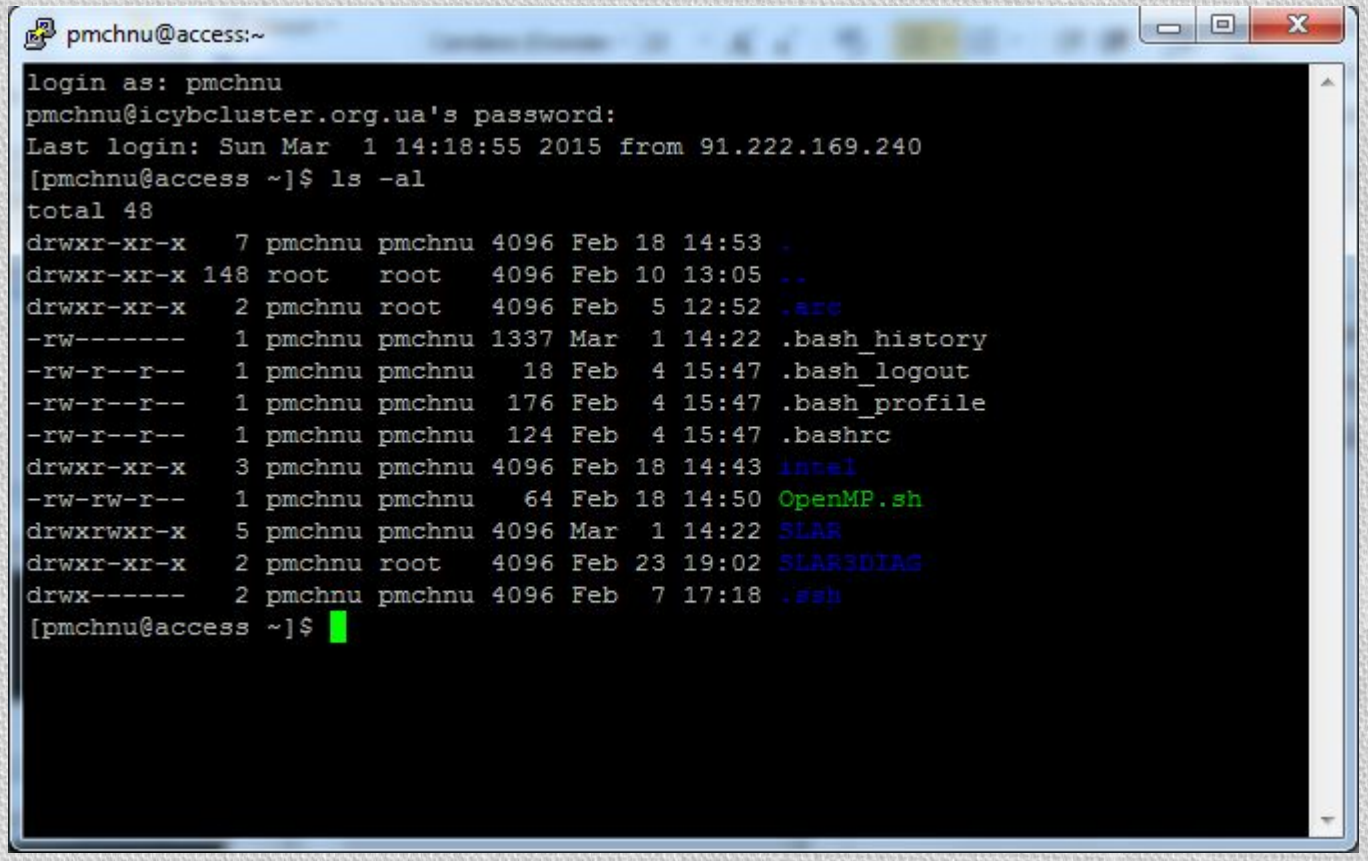
- У полі Host Name необхідно ввести адресу icybcluster.org.ua та натиснути кнопку Open, після чого відкриється наступне вікно:



- Необхідно ввести логін та пароль, після чого можна буде працювати із суперкомп’ютером:



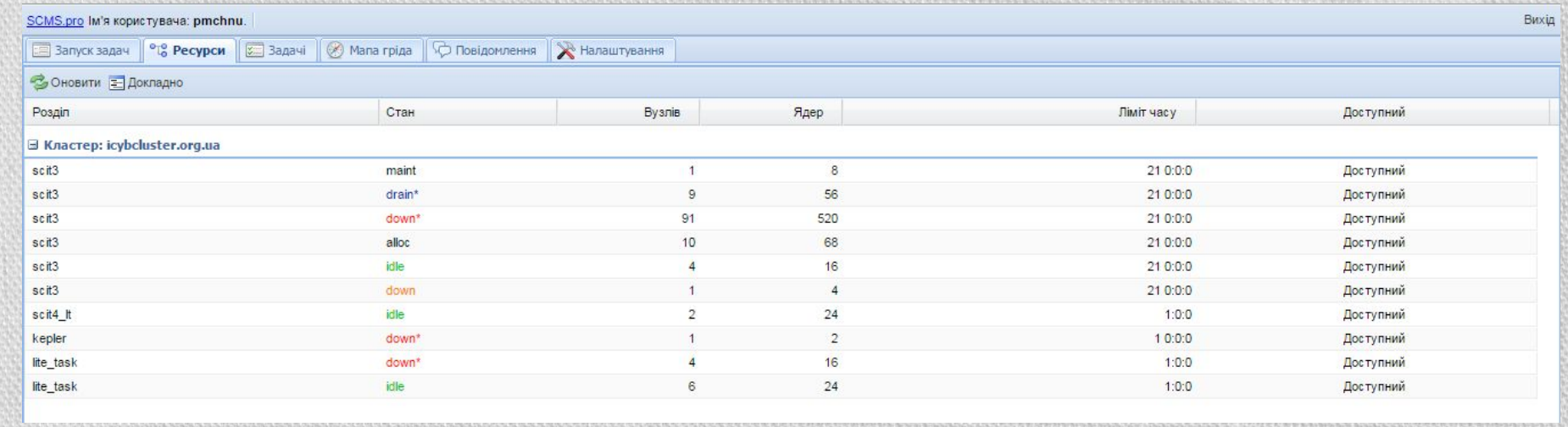
- На суперкомп’ютері встановлена операційна система CentOS Linux, тому у консольному режимі працюють усі стандартні команди Linux, наприклад, команда ls -al виведе вміст поточної папки:



- Папка /home/users/pmchnu є домашньою, тобто зайшовши під іменем pmchnu, користувач отримує повний доступ над файлами у цій папці (читання і запис), над іншими папками можна здійснювати лише операцію читання.
- До домашньої папки можна звертатися через символ ~, як і будь-якому Linux.

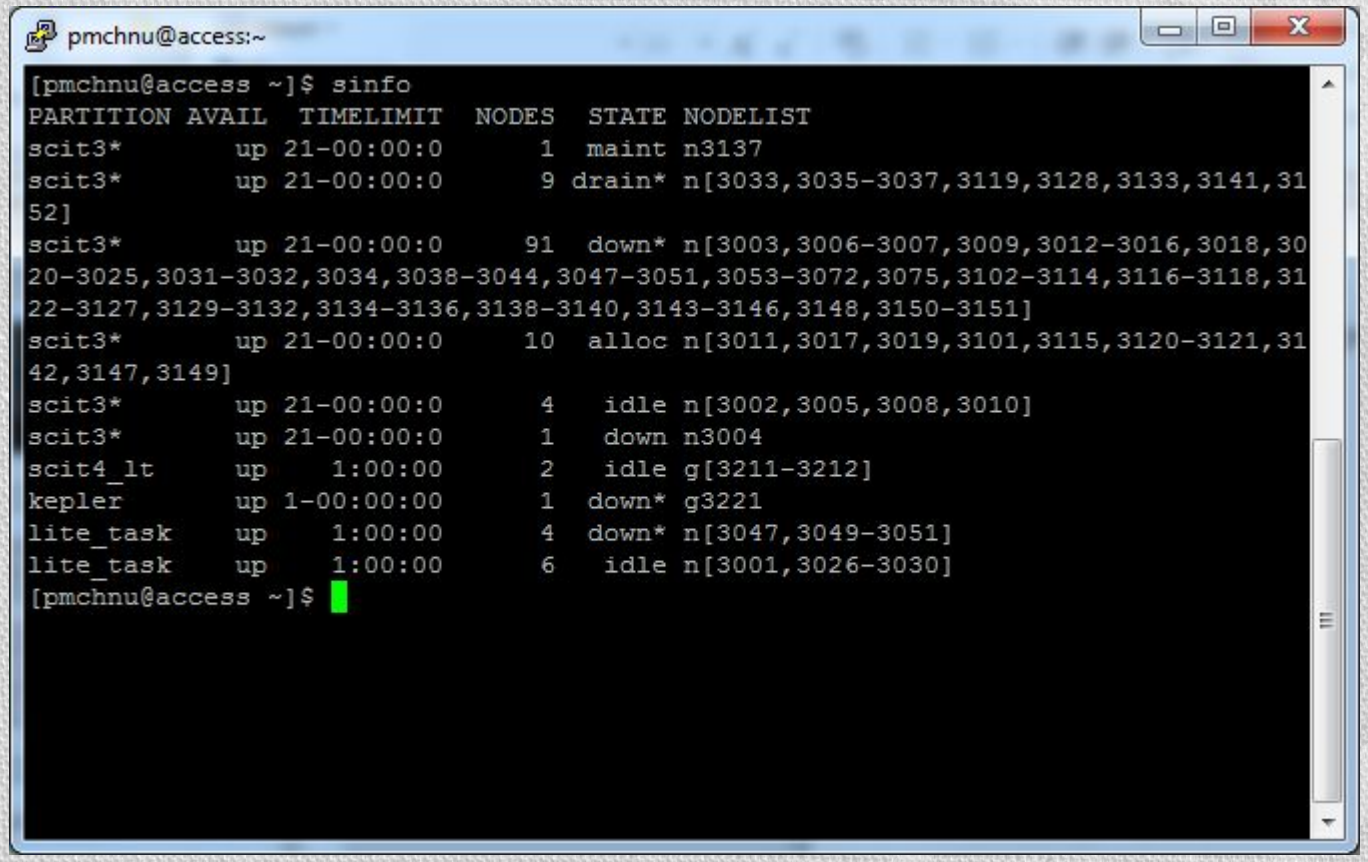
- Основним програмним компонентом суперкомп'ютера є менеджер ресурсів SLURM. Саме за допомогою нього контролюється набір задач, запущених на комп'ютері, та надається необхідна для задачі кількість процесорів.
- Задачі виконуються на суперкомп'ютері за принципом черги, причому на СКІТ-3 та СКІТ-4 організовано по 2 черги: lite_task та scit3 на СКІТ-3; scit4_lt та scit4 на СКІТ-4. Черги scit3 та scit4 призначені для виконання довготермінових задач. Ліміт часу виконання на них складає 21 день. Черги lite_task та scit4_lt призначені для легких завдань. Ліміт часу складає 1 годину.

- Щоби подивитися на завантаженість черг у графічному режимі, треба зайти на закладку «Ресурси»:

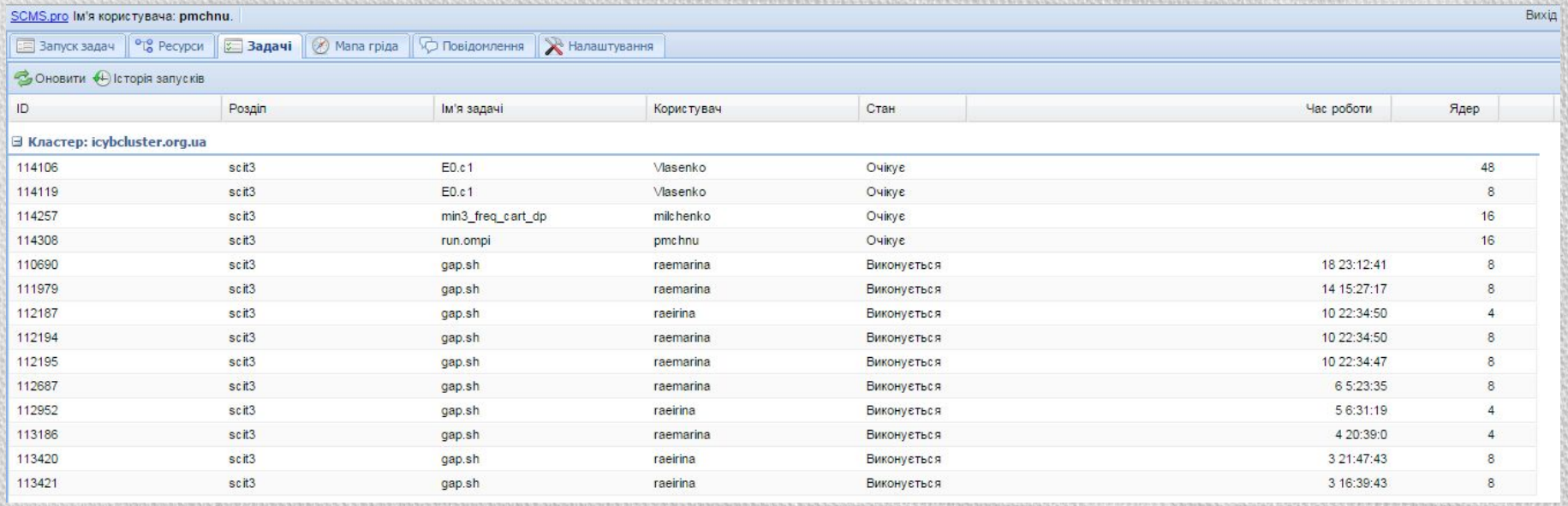


Розділ	Стан	Вузлів	Ядер	Ліміт часу	Доступний
Кластер: icybcluster.org.ua					
scit3	maint	1	8	21 0:0:0	Доступний
scit3	drain*	9	56	21 0:0:0	Доступний
scit3	down*	91	520	21 0:0:0	Доступний
scit3	alloc	10	68	21 0:0:0	Доступний
scit3	idle	4	16	21 0:0:0	Доступний
scit3	down	1	4	21 0:0:0	Доступний
scit4_lt	idle	2	24	1:0:0	Доступний
kepler	down*	1	2	1 0:0:0	Доступний
lite_task	down*	4	16	1:0:0	Доступний
lite_task	idle	6	24	1:0:0	Доступний

- У консольному режимі треба виконати команду sinfo:

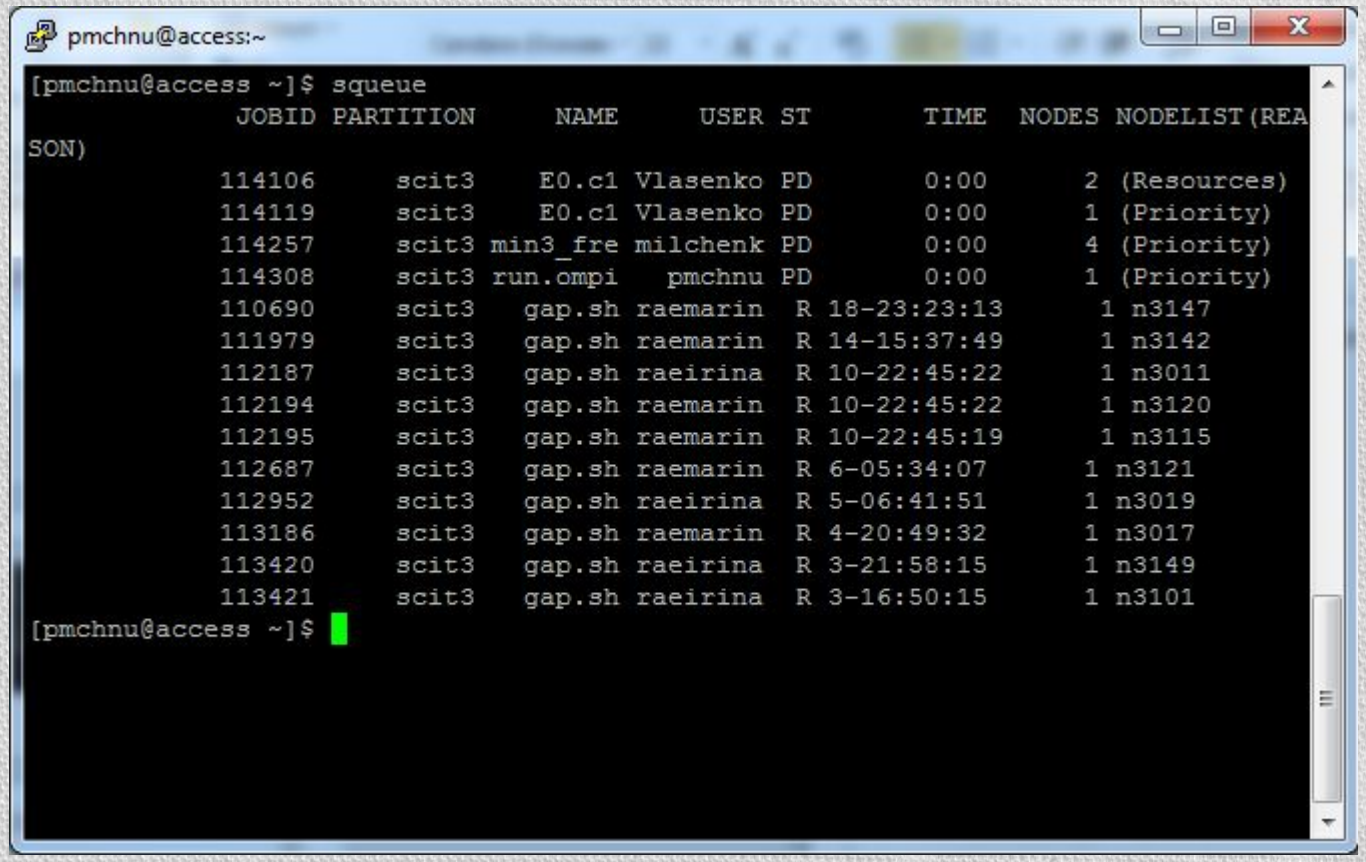


- Щоби подивитися на список задач, які чекають своєї черги, треба зайти на закладку «Задачі»:



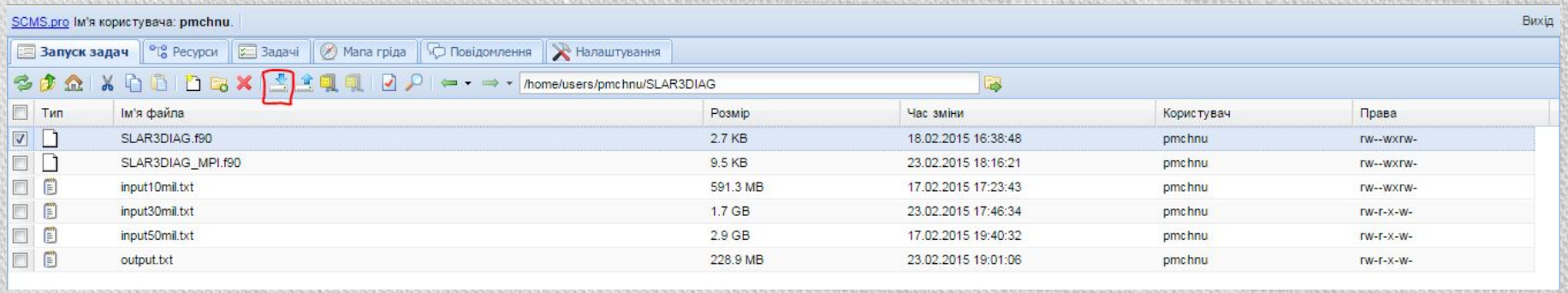
ID	Розділ	Ім'я задачі	Користувач	Стан	Час роботи	Ядер
Кластер: icybcluster.org.ua						
114106	scit3	E0.c1	Vlasenko	Очікує		48
114119	scit3	E0.c1	Vlasenko	Очікує		8
114257	scit3	min3_freq_cart_dp	milchenko	Очікує		16
114308	scit3	run.ompi	pmchnu	Очікує		16
110690	scit3	gap.sh	raemarina	Виконується	18 23:12:41	8
111979	scit3	gap.sh	raemarina	Виконується	14 15:27:17	8
112187	scit3	gap.sh	raeirina	Виконується	10 22:34:50	4
112194	scit3	gap.sh	raemarina	Виконується	10 22:34:50	8
112195	scit3	gap.sh	raemarina	Виконується	10 22:34:47	8
112687	scit3	gap.sh	raemarina	Виконується	6 5:23:35	8
112952	scit3	gap.sh	raeirina	Виконується	5 6:31:19	4
113186	scit3	gap.sh	raemarina	Виконується	4 20:39:0	4
113420	scit3	gap.sh	raeirina	Виконується	3 21:47:43	8
113421	scit3	gap.sh	raeirina	Виконується	3 16:39:43	8

- У консольному режимі цьому відповідає команда squeue:



3.1. Обмін файлами

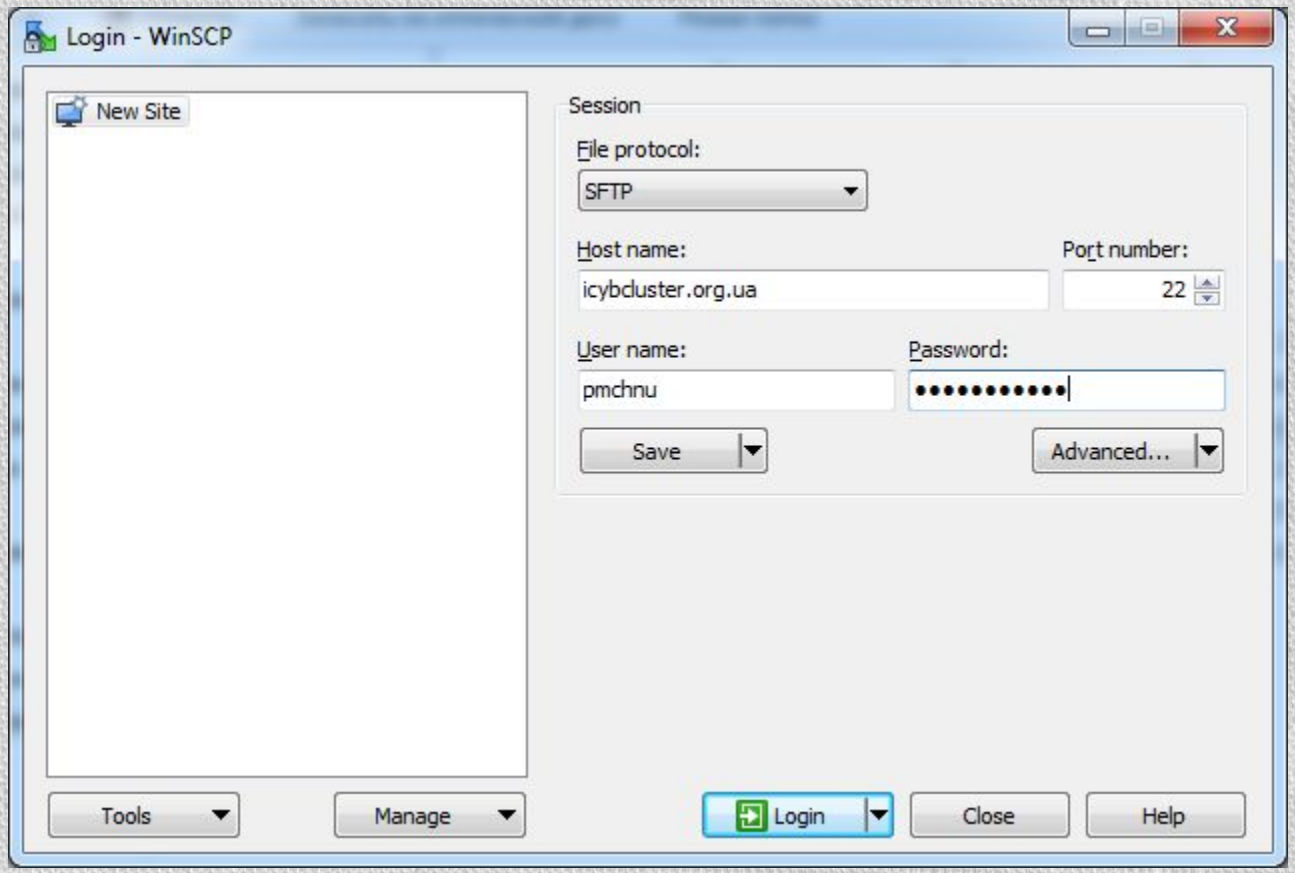
- Щоби завантажити деякий файл із сервера у графічному режимі, потрібно виділити необхідні файли і натиснути на кнопку «Скачати файл»:



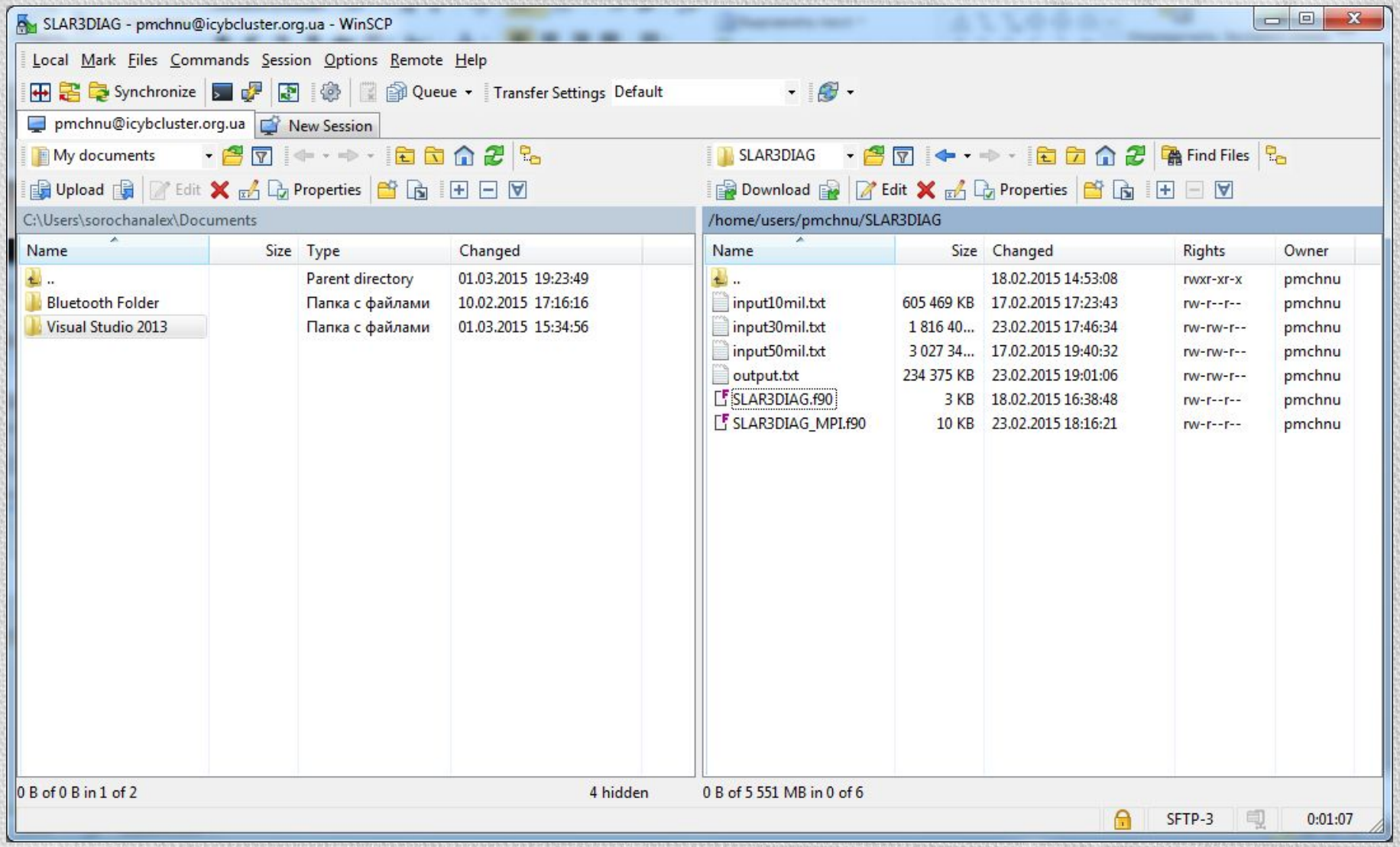
- У Linux за копіювання файлів відповідає утиліта scp. Так, щоби завантажити той самий файл засобами Linux, треба виконати команду:

```
scp pmchnu@icybcluster.org.ua:/home/users/pmchnu/SLAR3DIAG/SLAR3DIAG.f90 SLAR3DIAG.f90
```

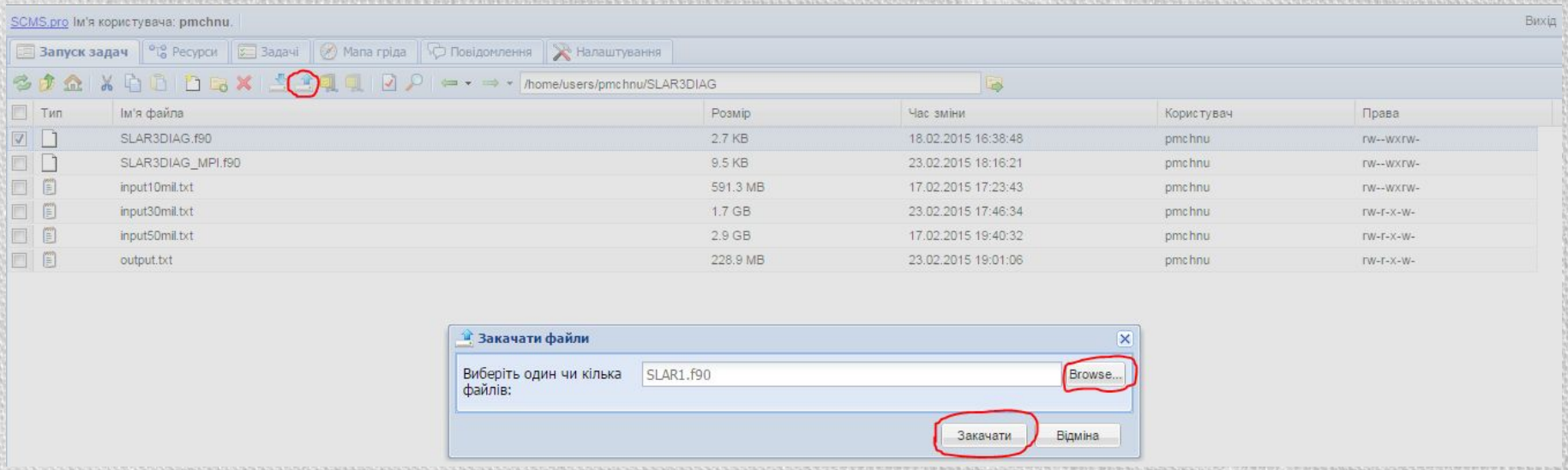
- У Windows необхідно встановити додатковий SCP-клієнт, наприклад, WinSCP:



- Відкриється наступне вікно:



- WinSCP відкриває одразу два дерева вибору файлів: на локальному комп’ютері та на суперкомп’ютері. За допомогою кнопок «Download» та «Upload» можна здійснювати обмін файлами.
- Якщо ж користуватися веб-браузером, то необхідно натиснути на кнопку «Закачування», та вибрати відповідні файли:



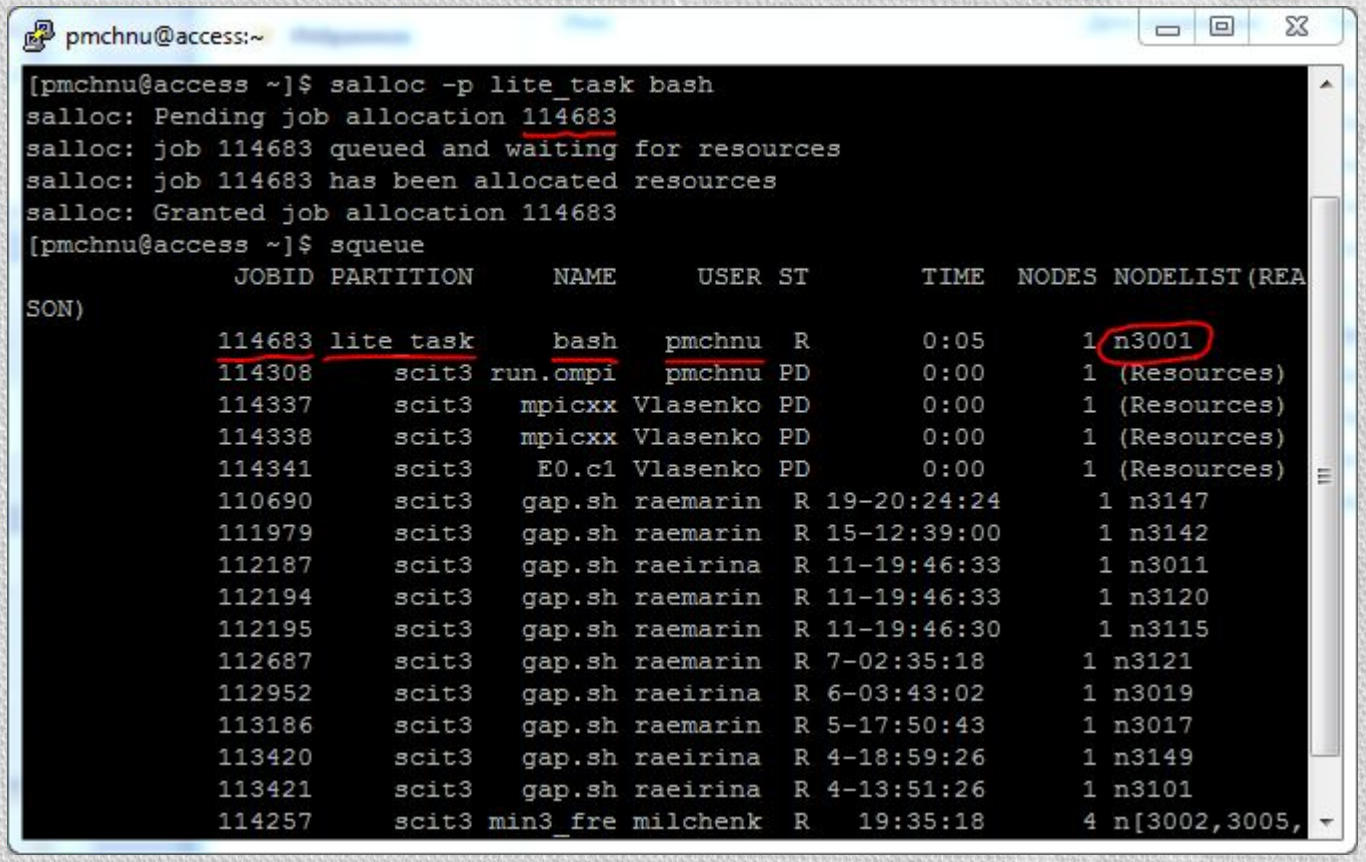
3.2. Запуск MPI-програм

- Щоби запускати свої завдання на суперкомп'ютері, необхідно зробити 3 речі:
  - Завантажити на сервер програмний код на мові C, C++ чи Fortran.
  - Провести компіляцію файлу у бінарний файл.
  - Запустити бінарний файл на виконання.
- Розпочнемо з запуску MPI-програм, як найбільш природного засобу для розпаралелювання на суперкомп'ютері Інституту кібернетики.
- На суперкомп'ютері встановлені 2 реалізації MPI: OpenMPI та MVAPICH2. OpenMPI вважається стандартною, а MVAPICH2 призначений для інтеграції з технологією CUDA, хоча її можна використовувати й замість OpenMPI.

- Спочатку розглянемо запуск програм у консольному режимі.
- На жаль, на керуючому вузлі, який одразу доступний для користувача, не встановлено жодних компіляторів. Компілятори встановлені безпосередньо на вузлах, на яких виконуються завдання. Тому необхідно з’єднатися із цими вузлами.
- Спочатку необхідно здійснити запит на ресурси до якої-небудь черги. Найоптимальнішим варіантом є черга lite_task, у якої малий ліміт часу і яка найшвидше надасть ресурси. Запит здійснюється наступною командою:

```
salloc -p lite_task bash
```

- Після виконання команди необхідно здійснити команду squeue, щоби дізнатися номер вузла, на якому були виділені ресурси.



- По виділенні ресурсів необхідно з’єднатися із цим вузлом за допомогою команди ssh. У наведеному вище випадку необхідно виконати команду:

ssh n3001

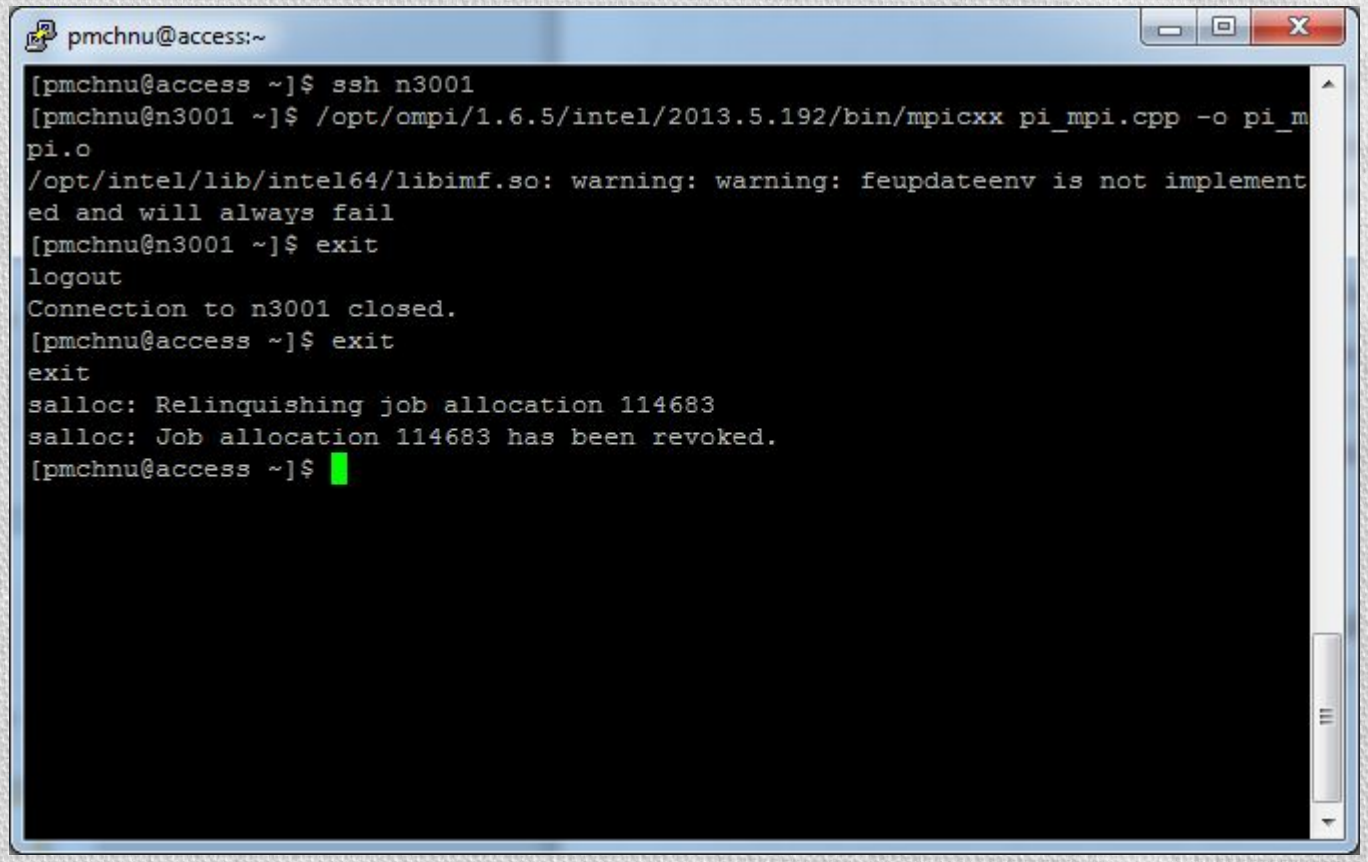
- Для того щоб підтягнути усі необхідні заголовні файли та файли бібліотек, адміністраторами суперкомп'ютера були розроблені спеціальні скрипти для компіляції MPI-програм. Для будь-яких комбінацій бібліотек MPI та компіляторів ці скрипти називаються:
  - mpicc для мови C
  - mpicxx для мови C++
  - mpif77 для мови FORTRAN 77
  - mpif90 для мови Fortran 90
- Для уникнення конфліктів між різними версіями, шляхи до папки зі скриптами формуються наступним чином:

/opt/<назва реалізації MPI>/<версія MPI>/<назва компілятора>/

<версія компілятора>/bin

- Скрипти для бібліотеки OpenMPI треба шукати у папці /opt/ompi
- Скрипти для бібліотеки MVAPICH2 треба шукати у папці /opt/mvapich2
- Замість <назва компілятора> необхідно писати gcc або intel – залежно, який саме компілятор буде використовуватися.
- Наводимо шляхи з останніми версіями бібліотек та компіляторів на момент оформлення презентації:
  - OpenMPI, GCC: /opt/ompi/1.6.5/gcc/4.4/bin
  - OpenMPI, Intel: /opt/ompi/1.6.5/intel/2013.5.192/bin
  - MVAPICH2, GCC: /opt/mvapich2/1.9a/gcc/4.4/bin
  - MVAPICH2, Intel: /opt/mvapich2/1.9a/intel/current/bin
- Компіляція відбувається наступним чином:

<шлях до скрипта> <файл з програмним кодом> -o <бінарний файл>



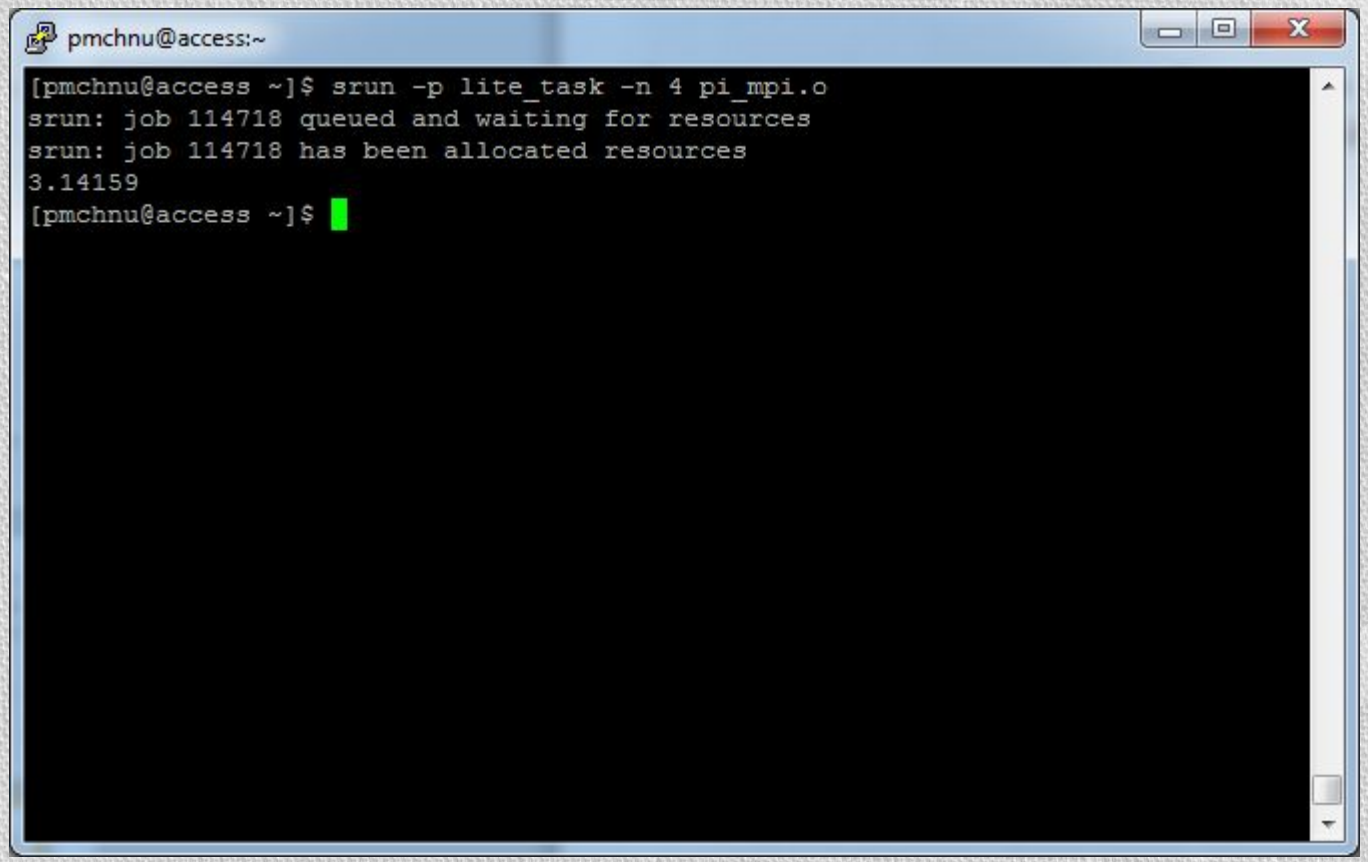
- Як бачимо, у нашому прикладі компілятор видав попередження, яке втім ніяк не позначається на подальшій роботі програми.
- Після компіляції необхідно двічі виконати команду exit, щоби звільнити ресурси.

- Скомпільований бінарний файл можна ставити у чергу виконання. Для цього можна виконати команду srun з наступним синтаксисом:

srun -p <черга> -n <кількість ядер> <шлях до скомпільованої програми>

- Ця команда запускає програму у діалоговому режимі. Водночас, якщо необхідних ресурсів на суперкомп'ютері немає, то очікування виконання може зайняти досить довго часу.
- Для того щоб зупинити виконання програми, необхідно натиснути комбінацію клавіш Ctrl + C.
- Також необхідно зазначити, що при використанні OpenMPI команда srun поводитиме себе некоректно.

- Приклад запуску програми обчислення числа π у черзі lite_task з чотирма процесорами. Використано бібліотеку MVAPICH2 з компілятором Intel.



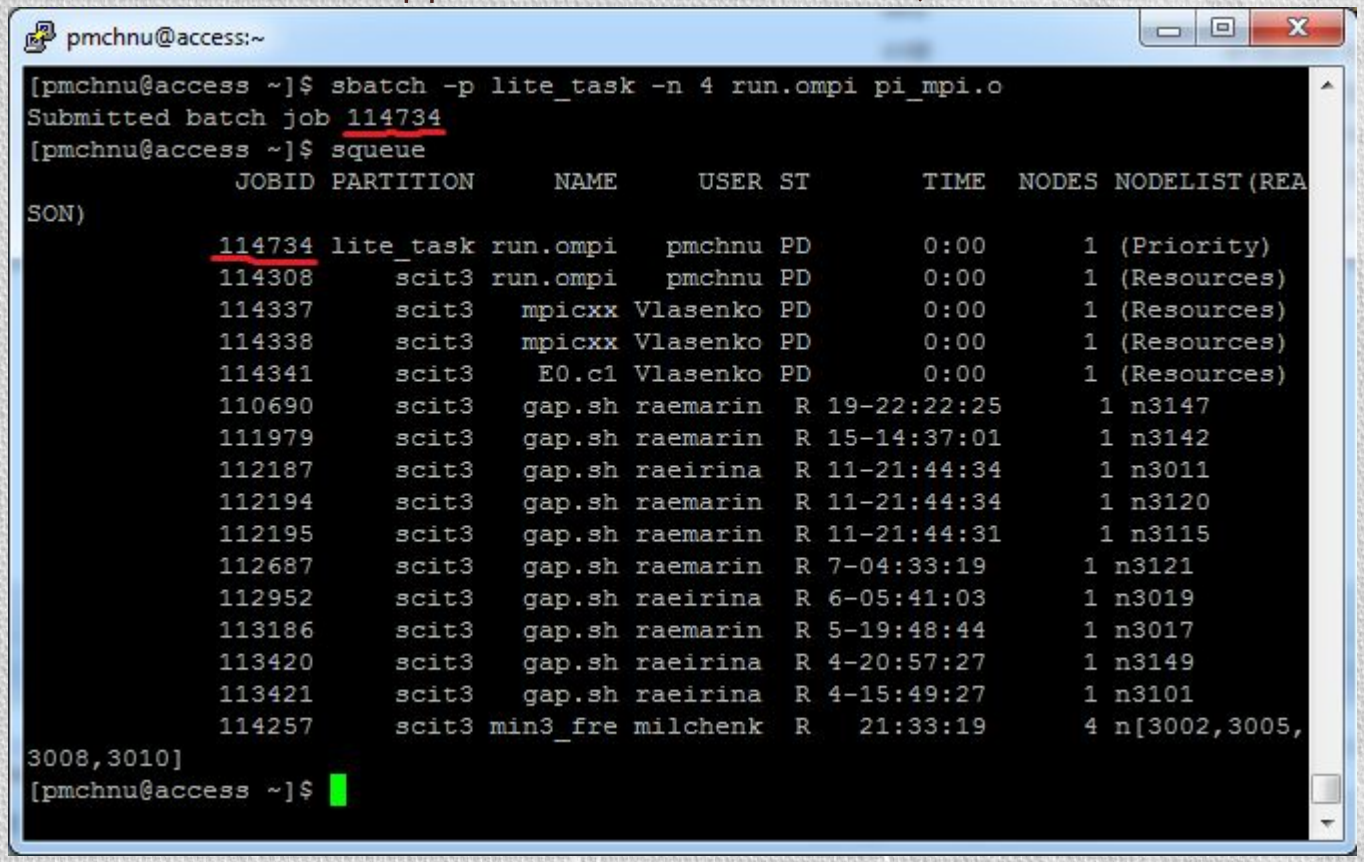
- Більш розповсюдженим варіантом запуску задач є використання команди sbatch, яка виконує задачу у фоновому режимі. Синтаксис команди:

sbatch -p <черга> -n <кількість ядер> <скрипт запуску>

- Так як задача виконується у фоновому режимі, то програма не має очікувати якихось додаткових дій від користувача, наприклад, введення значення змінних.
- На відміну від srun, sbatch потребує в якості одного з параметрів не бінарний файл програми, а bash-скрипт, всередині якого має бути звернення, наприклад, до команди srun.
- Адміністраторами суперкомп'ютера уже розроблені додаткові скрипти для запуску програм. Щоби запустити OpenMPI-програму необхідно запустити скрипт run.ompi, в якості параметрів якого передається бінарний файл програми з її параметрами. Для MVAPICH2 розроблено скрипт run.mvapich2, який, щоправда, нічого не виконує, окрім прямого запуску програми на суперкомп'ютері.

- Приклад запуску програми обчислення числа π у черзі lite_task з чотирма процесорами. Використано бібліотеку OpenMPI з компілятором Intel.

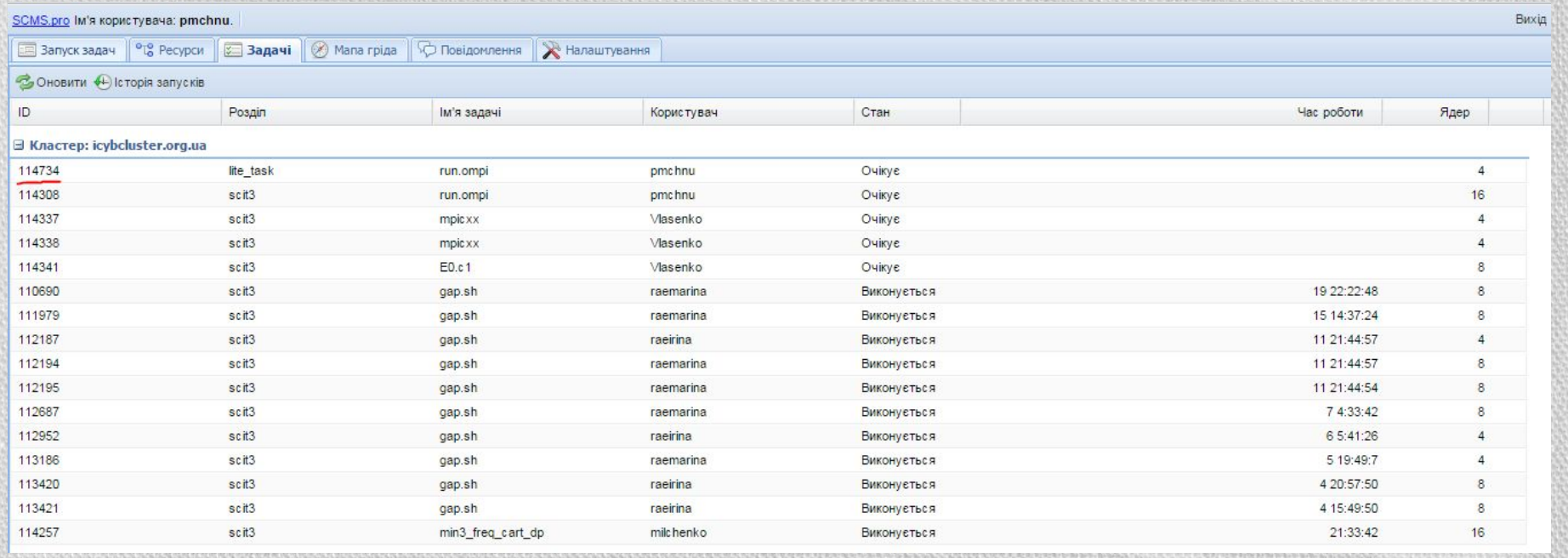
- За станом виконання задачі можна стежити, виконавши команду squeue:



- Якщо треба відмінити завдання, то виконується команда scancel, наприклад:

scancel 114734

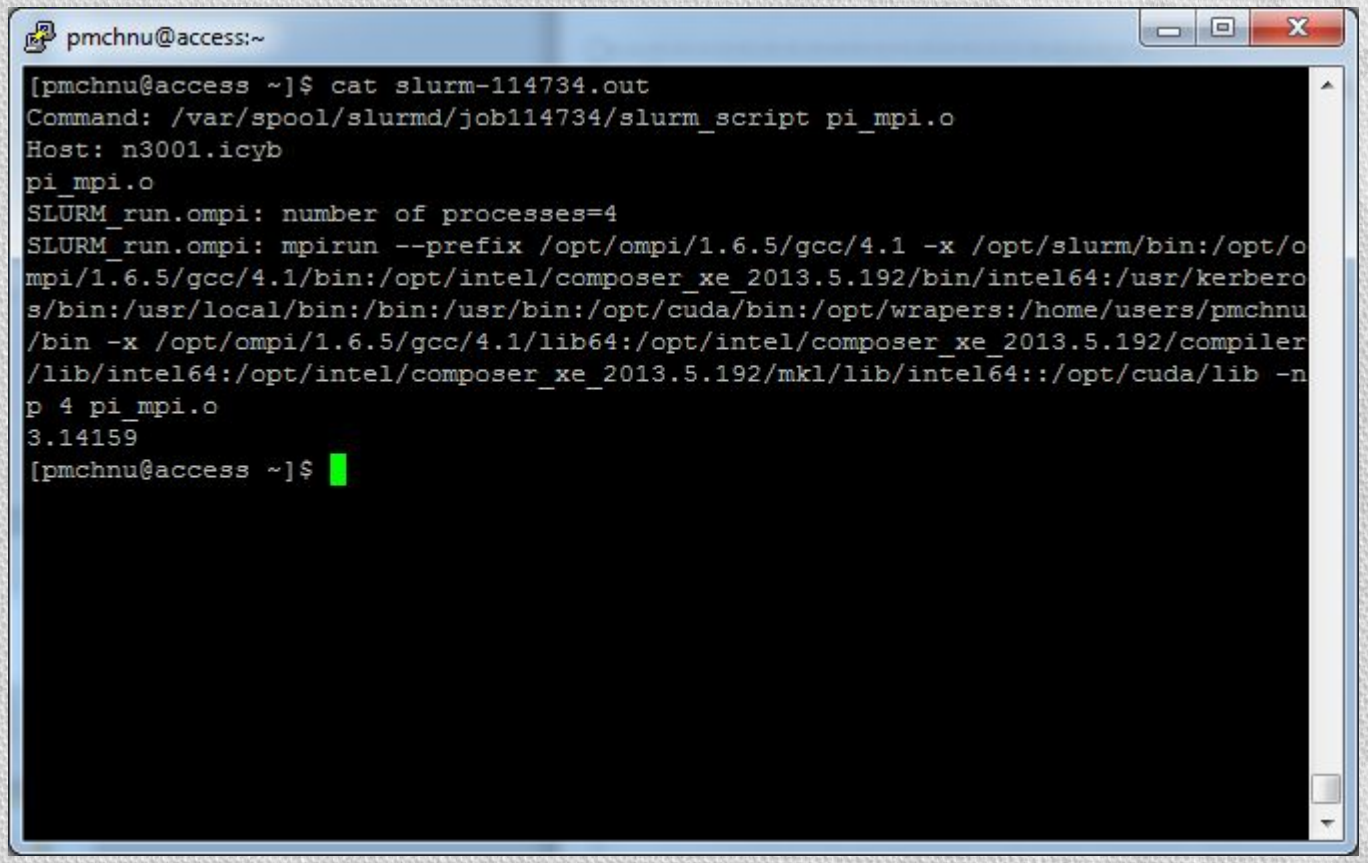
- Також слідкувати за цим можна на сайті, попередньо натиснувши на кнопку «Оновити» у третьому зверху рядку:



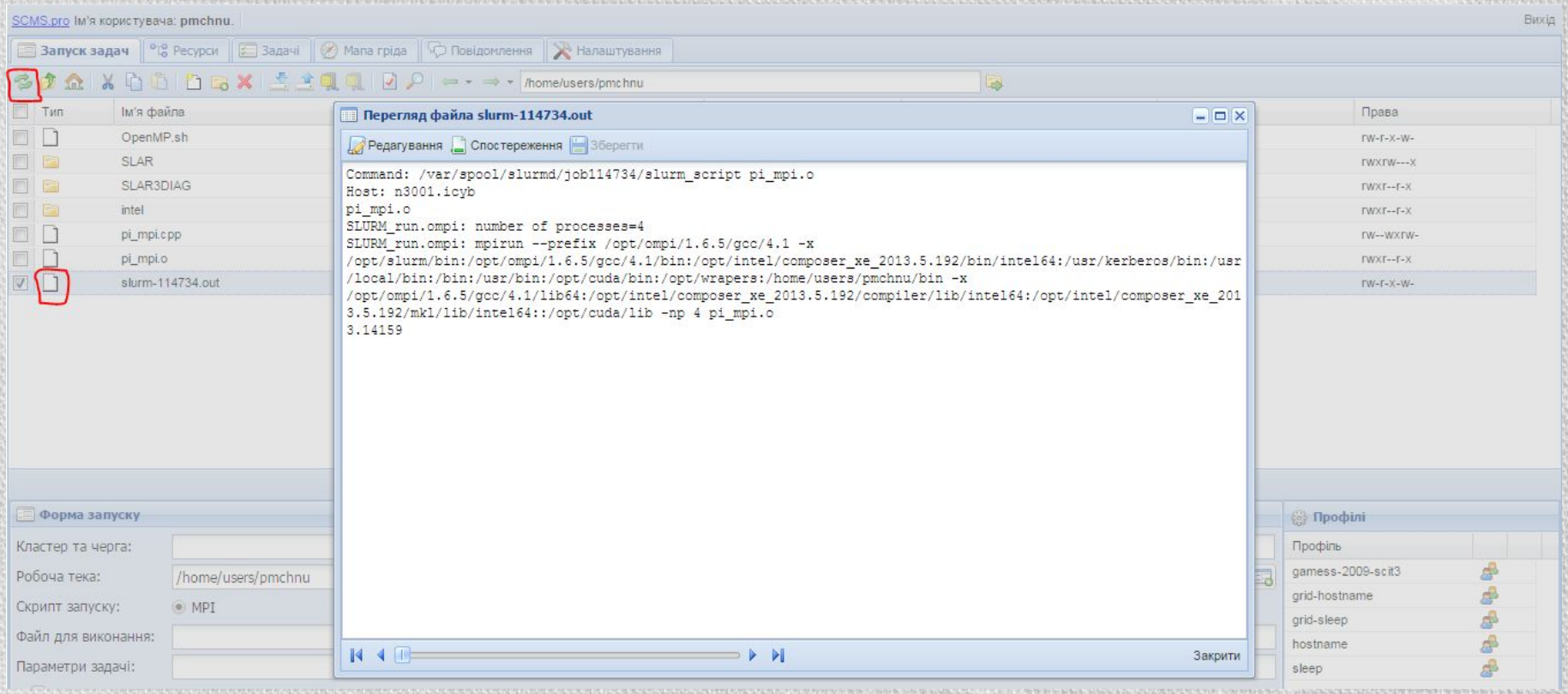
ID	Розділ	Ім'я задачі	Користувач	Стан	Час роботи	Ядер
Кластер: icybcluster.org.ua						
114734	lite_task	run.ompi	pmchnu	Очікує		4
114308	scit3	run.ompi	pmchnu	Очікує		16
114337	scit3	mpicxx	Vlasenko	Очікує		4
114338	scit3	mpicxx	Vlasenko	Очікує		4
114341	scit3	E0.c1	Vlasenko	Очікує		8
110690	scit3	gap.sh	raemarina	Виконується	19 22:22:48	8
111979	scit3	gap.sh	raemarina	Виконується	15 14:37:24	8
112187	scit3	gap.sh	raeirina	Виконується	11 21:44:57	4
112194	scit3	gap.sh	raemarina	Виконується	11 21:44:57	8
112195	scit3	gap.sh	raemarina	Виконується	11 21:44:54	8
112687	scit3	gap.sh	raemarina	Виконується	7 4:33:42	8
112952	scit3	gap.sh	raeirina	Виконується	6 5:41:26	4
113186	scit3	gap.sh	raemarina	Виконується	5 19:49:7	4
113420	scit3	gap.sh	raeirina	Виконується	4 20:57:50	8
113421	scit3	gap.sh	raeirina	Виконується	4 15:49:50	8
114257	scit3	min3_freq_cart_dp	milchenko	Виконується	21:33:42	16

- Після того, як задача виконається (а сама вона зникне зі списку запущених задач), у папці звідки була запущена команда sbatch, з'явиться файл з назвою slurm-<номер задачі>.out, у якому буде записано все, що мало записуватися у стандартний потік виводу.

- Дослідити вміст цього файлу можна за допомогою команди cat:

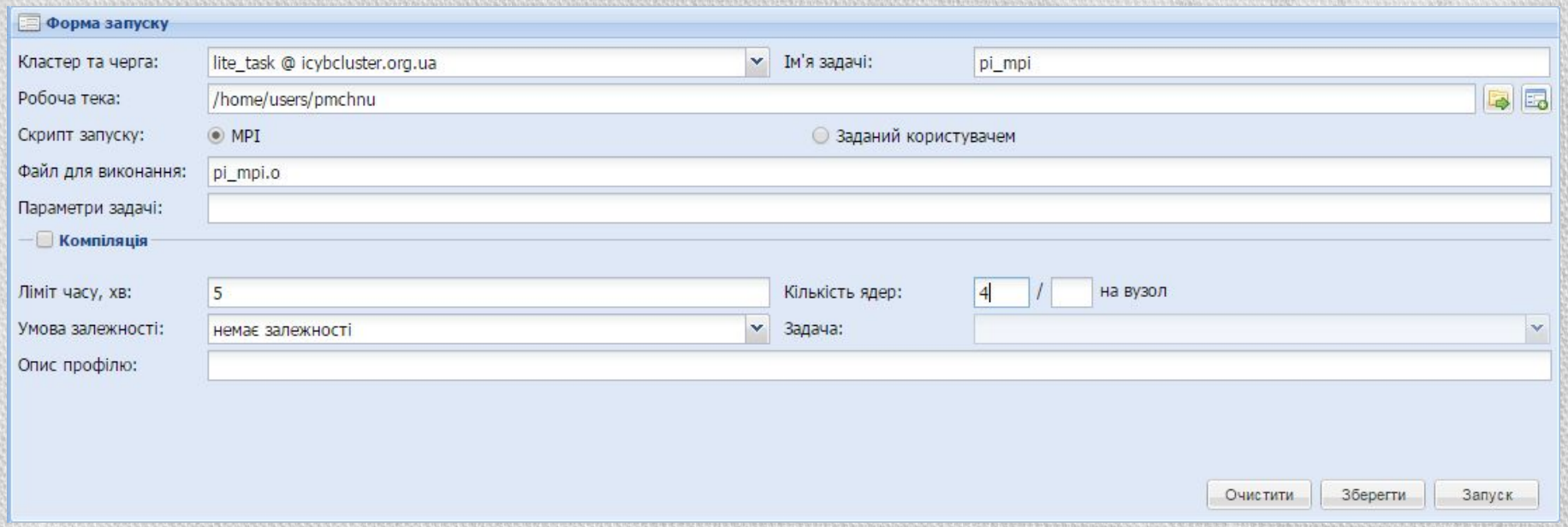


- З сайту також можна подивитись на вміст цього файлу, попередньо натиснувши кнопку «Оновити»



- Запускати задачу можна і з веб-інтерфейсу. Форма запуску на закладці «Запуск задач» є оболонкою для команди sbatch. Форма дозволяє автоматично застосувати скрипт run.ompi або задати свій скрипт. Серед недоліків форми є обов'язкове заповнення майже усіх полів форми.
- Компіляція файлів формою передбачено, але потребує наявності файлу Makefile для Linux-івської утиліти make та виконується одночасно з запуском задачі, що далеко не завжди є прийнятним через неузгодженість між параметрами SLURM для цих двох задач.

- Запуск з форми відбувається таким чином:



- При цьому у каталозі, звідки було запущено задачу, створюється папка <ім'я задачі>.out, де буде розташовано 2 файли: файл з розширенням .err для відображення помилок і .out з вмістом стандартного потоку виводу.

3.3. Запуск OpenMP-програм

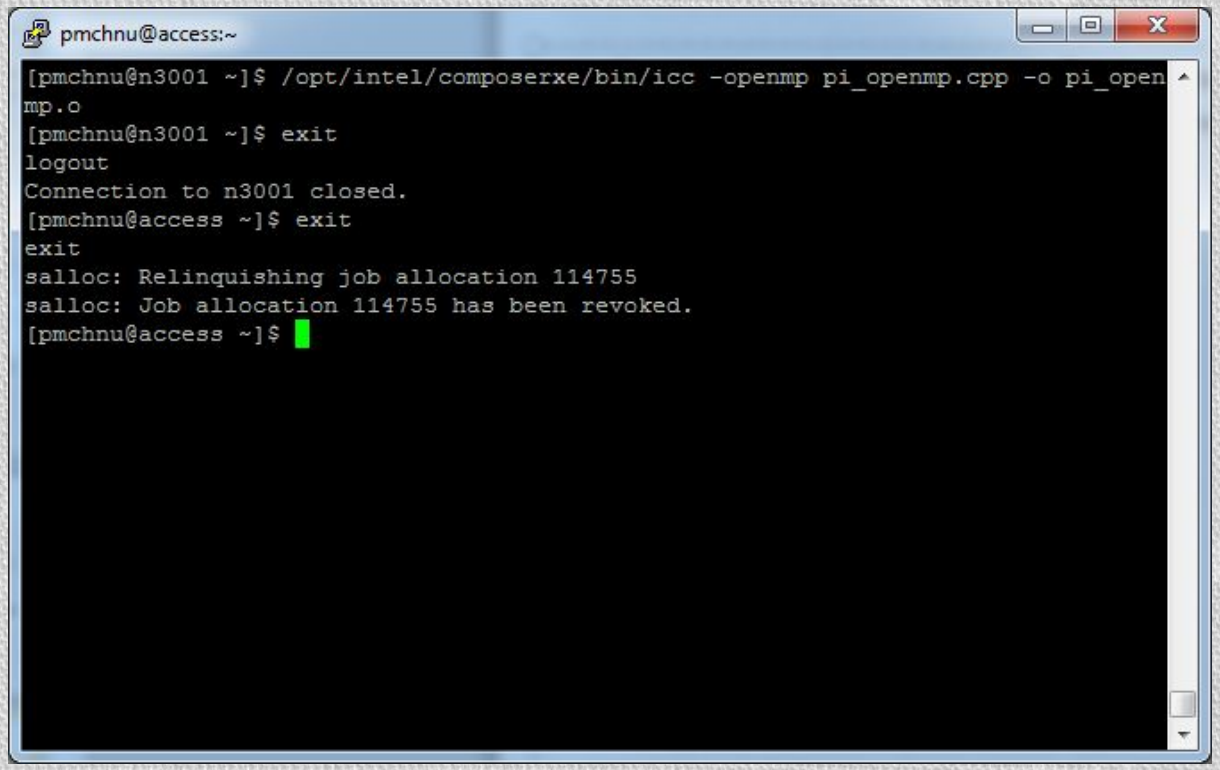
- Щоби скомпілювати OpenMP-програму, як і у випадку з MPI, необхідно з’єднатися з додатковим вузлом.
- Компіляція здійснюється наступним чином:

<шлях до компілятора> -fopenmp <файл з програмним кодом> -o <бінарний файл>

для компіляторів GCC з заміною fopenmp на openmp у компіляторах Intel.

- Компілятори GCC можна викликати без вказання їхнього повного шляху, їхні найновіші версії мають такі назви:
  - gcc44 для мови C
  - g++44 для мови C++
  - g77 для мови FORTRAN 77
  - gfortran44 для мови Fortran 90

- Найновіші компілятори Intel зберігаються у папці /opt/intel/composerxe/bin і мають такі назви:
  - icc для мов C++ та C
  - ifort для мови Fortran
- Приклад компіляції:

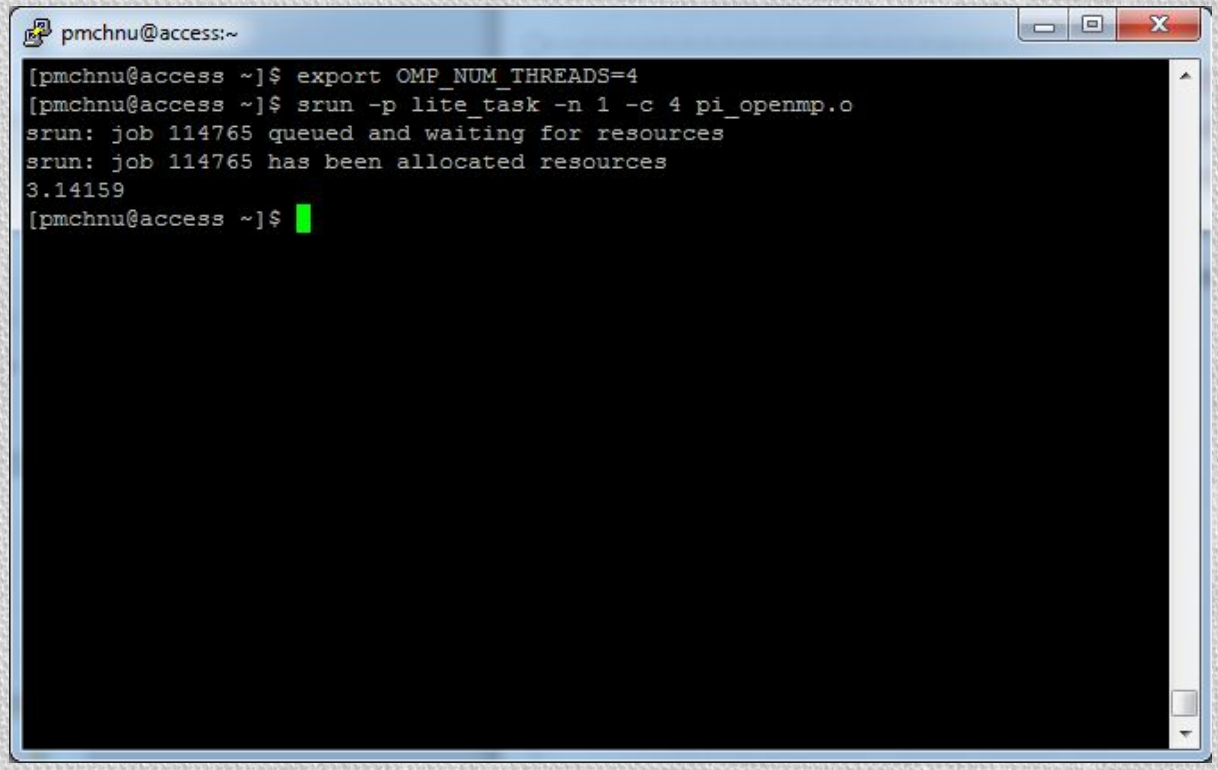


- Виконання за допомогою команди srun виконується в 2 етапи:
  - Спочатку встановлюється значення змінної середовища:

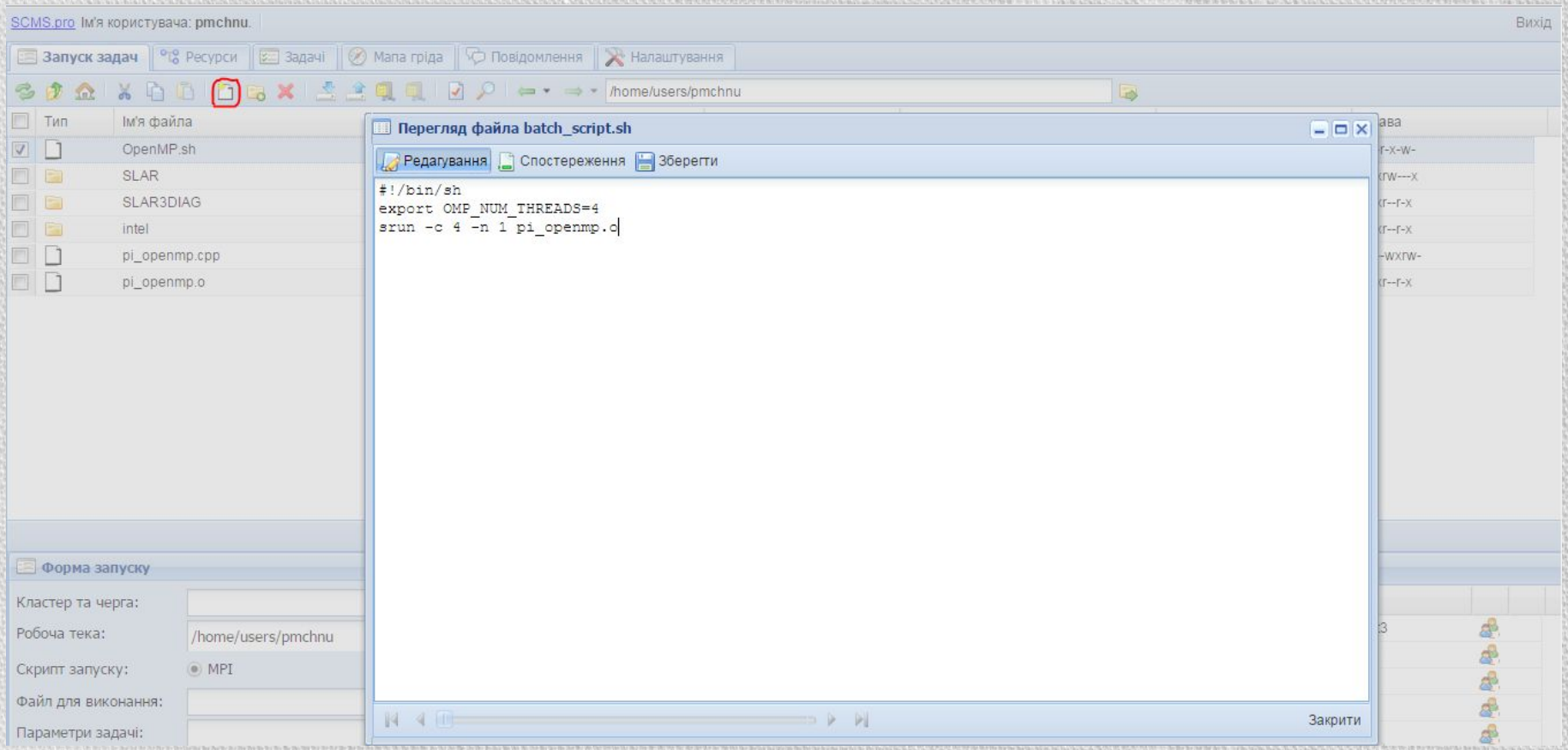
export OMP_NUM_THREADS=<кількість ядер>

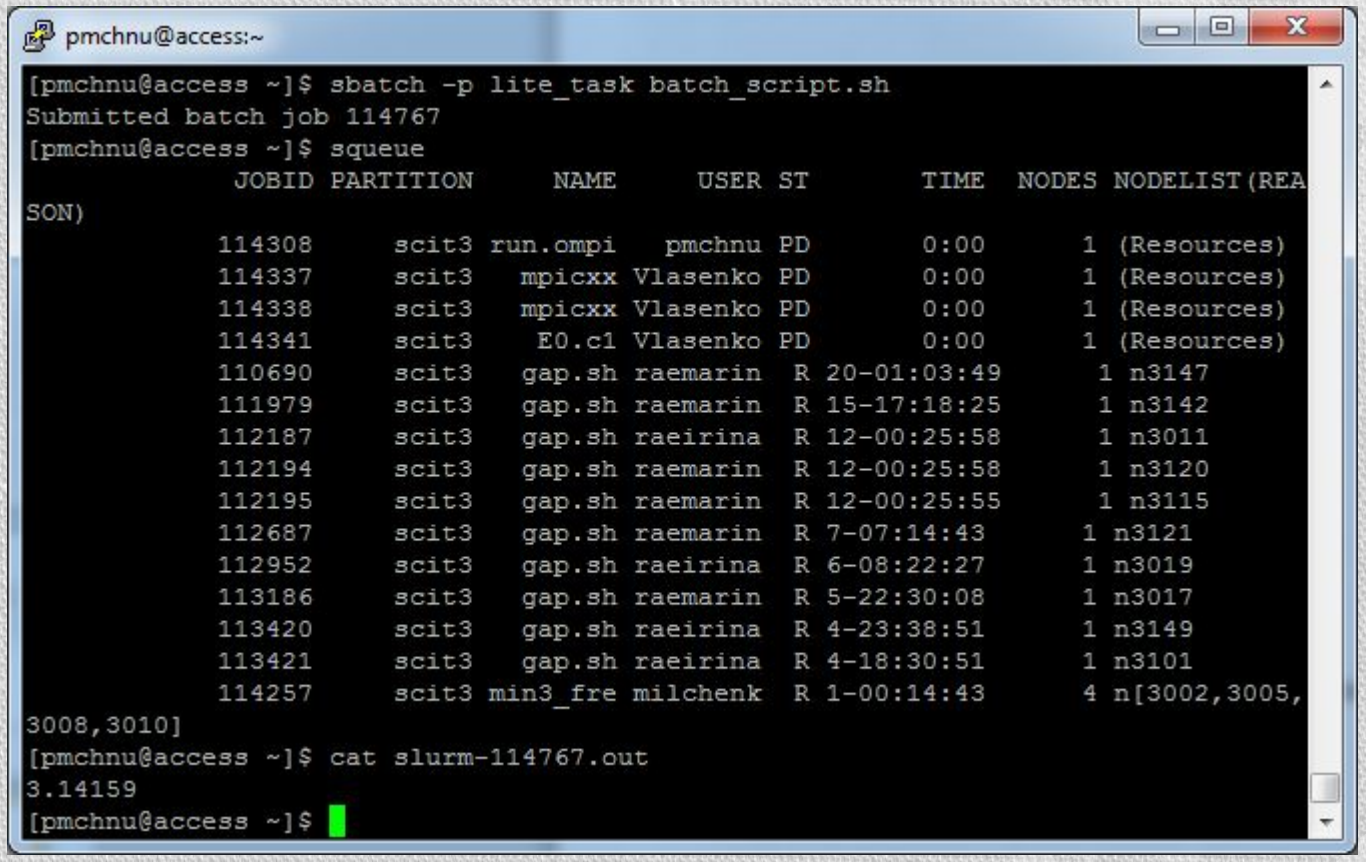
  - Потім виконується команда наступного вигляду:

srun -p <черга> -n 1 -c <кількість ядер> <шлях до скомпільованої програми>



- Виконання за допомогою команди sbatch потребує скрипта, який треба написати вручну. Найпростіше це зробити з веб-інтерфейсу. Треба натиснути на кнопку «Створити файл», ввести ім’я файлу, записати ті ж команди, що потребувала команда srun, і зберегти:

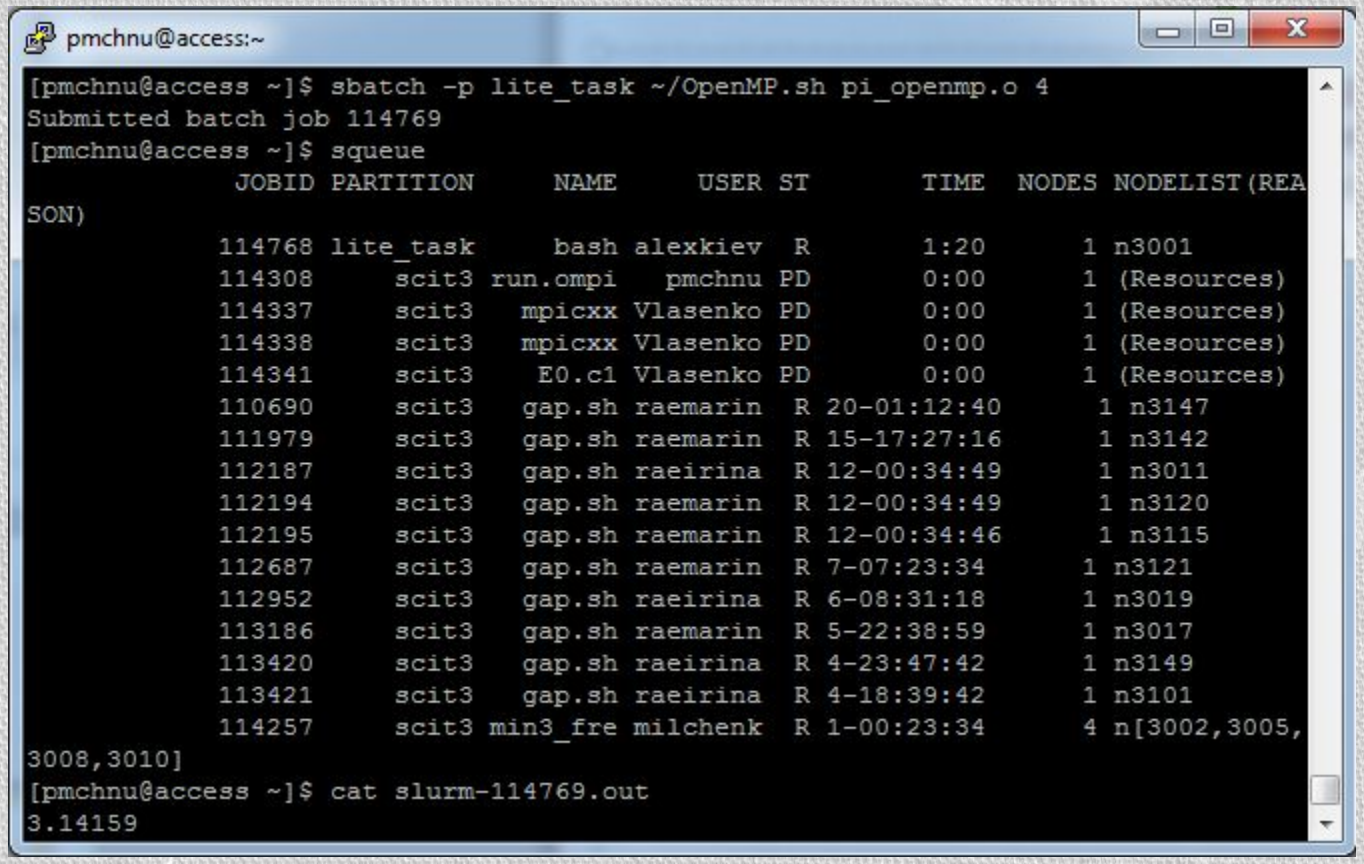




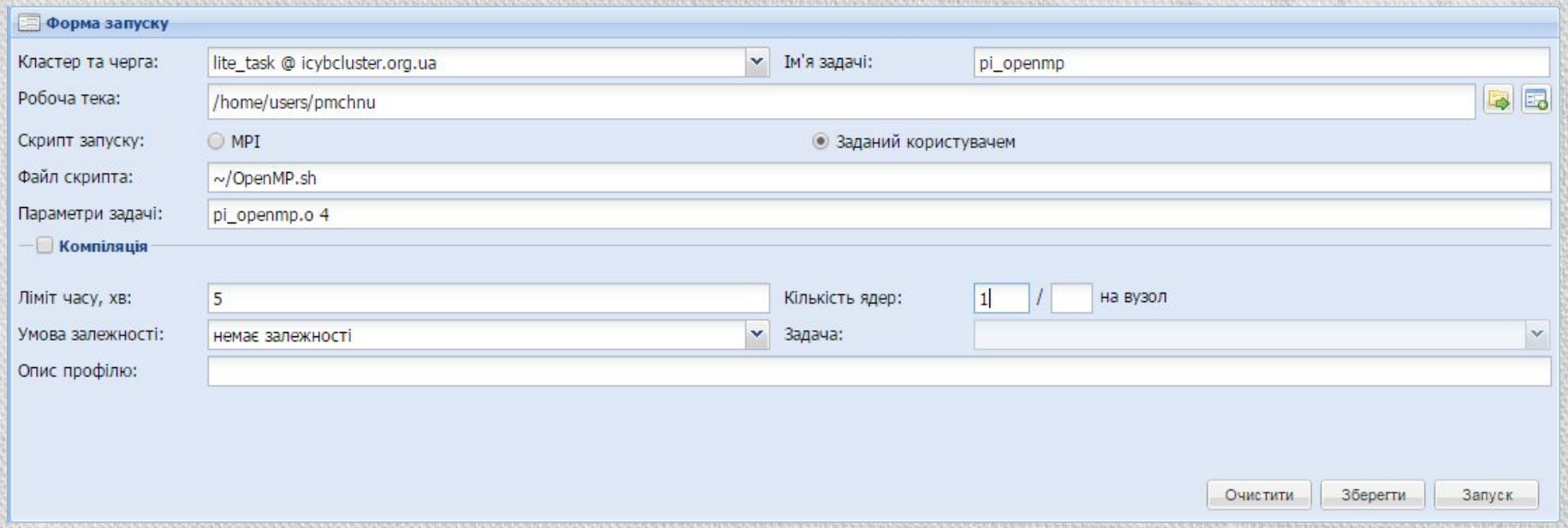
- Параметри c і n визначені у скрипті, тому залишилося вказати лише чергу завдань.

- Для полегшення запуску OpenMP-програм можна написати нижченаведений скрипт. Наразі він зберігається у домашньому каталозі. Тоді виклик здійснюватиметься наступним чином:

sbatch -p <черга> ~/OpenMP.sh <шлях до скомпільованої програми> <кількість ядер>



- Відповідним чином заповнюється і форма запуску:



4. Деякі результати тестування

- Тестування проводились на комп'ютері з 4-ядерним процесором Intel Core i3-2310M та на суперкомп'ютері Інституту кібернетики.
- Програми були написані на мові Fortran.
- На звичайному комп'ютері використовувався компілятор Intel з продукту Intel Parallel Studio XE 2015 Cluster Edition та, відповідно, бібліотека Intel MPI 5.
- На суперкомп'ютері теж використовувався компілятор Intel з бібліотекою OpenMPI.
- Замірявся лише «корисний» час – сам час виконання алгоритму.
- Час замірявся у секундах.
- Тестування проводилися на випадково згенерованих даних.

- Програма розв’язування СЛАР з квадратною матрицею із застосуванням паралельного алгоритму LU-розкладу.

			Звичайний комп'ютер			
	Р-ть матриць	1000*1000			2000*2000	
К-ть потоків		OpenMP	MPI		OpenMP	MPI
1		13,45	10,28		105,06	80,45
2		7,55*	5,43		61,37**	41,25
3		8,92	7,13		65,6	54,32
4		7,21	5,61		54,38	41,5

**зустрічалися дані з проміжку [7,19; 8,18]* ***зустрічалися дані з проміжку [57,51; 67,89]*

			Суперкомп'ютер			
	Р-ть матриць	1000*1000			2000*2000	
К-ть потоків		OpenMP	MPI		OpenMP	MPI
1		0,82	0,86		12,04	12,07
2		0,17	0,22		9,99	10,13
3		0,27	0,32		9,87	10,12
4		0,11	0,16		9,94	10,28

- Програма розв’язування СЛАР з тридіагональною матрицею із застосуванням паралельного алгоритму редукції. Використовувалась бібліотека OpenMP.

			Звичайний комп'ютер		
	Р-ть матриць	10 млн.			30 млн.
К-ть потоків					
1		1,61			4,74
2		1,1			3,23
3		1,06			3,13
4		0,94			2,75
			Суперкомп'ютер		
	Р-ть матриць	10 млн.			30 млн.
К-ть потоків					
1		1,69			5,06
2		1,67			5,03
3		1,67			5,02
4		1,67			5,02

- Як видно, цей алгоритм не дав виграшу при запуску на суперкомп’ютері.

- Програма розв’язування СЛАР з тридіагональною матрицею із застосуванням паралельного алгоритму прогонки. Використовувалась бібліотека MPI.

			Звичайний комп'ютер		
	Р-ть матриць	10 млн.			30 млн.
К-ть потоків					
1		1,41			4,49
2		0,73			2,33
3		0,83			2,64
4		0,63			2
			Суперкомп'ютер		
	Р-ть матриць	10 млн.			30 млн.
К-ть потоків					
1		0,54			1,58
2		0,42			1,25
3		0,36			1,1
4		0,35			1,06

- Програма розв’язування СЛАР з квадратною матрицею із застосуванням паралельного алгоритму LU-розкладу. Більша кількість тестів на суперкомп’ютері з бібліотекою MPI.

К-ть потоків	Р-ть матриць	1000*1000	2000*2000	3000*3000	4000*4000	5000*5000
1		0,86	12,07	42,12	100,78	196,34
2		0,22	10,13	39,77	97,6	191,78
3		0,32	10,12	39,74	97,62	192,34
4		0,16	10,28	40,09	98,03	192,51
5		0,19	4,8	22,38	57,16	114,07
6		0,21	3,54	17,97	46,99	94,56
7		0,23	4,54	21,51	54,78	109
8		0,26	3,64	18,36	47,65	95,33
9		...	1,88	10,71	29,98	61,94
10			2,44	13,75	37,18	75,19
11			2,18	12,29	33,63	68,56
12			1,97	11,17	30,96	63,4
13			1,74	10,02	28,19	58,03
14			1,77	9,27	26,28	54,37
15			1,78	8,69	24,59	51,1
16			1,98	8,24	23,19	48,3
17			...	7,37	21,17	44,46
18				6,97	20,1	42,3
19				6,7	19,35	40,27
20				6,4	18,12	38,19
21				5,94	16,86	35,76
22				5,8	16,23	34,2
23				5,74	15,56	32,86
24				5,86	15,25	31,97

Дякую за увагу!