

*Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова
Факультет Вычислительной математики и кибернетики*

*Межфакультетский курс
“Сложные процессы с точки зрения квантовой физики”*

СУПЕРКОМПЬЮТЕРЫ И ПАРАЛЛЕЛЬНЫЕ ВЫЧИСЛЕНИЯ

Вл.В.Воеводин

**Зав.кафедрой Суперкомпьютеров и квантовой информатики ВМК МГУ
Директор НИВЦ МГУ,
чл.-корр. РАН, д.ф.-м.н., профессор**

voevodin@parallel.ru

ВМК МГУ – ноябрь, 2019

Важные сокращения

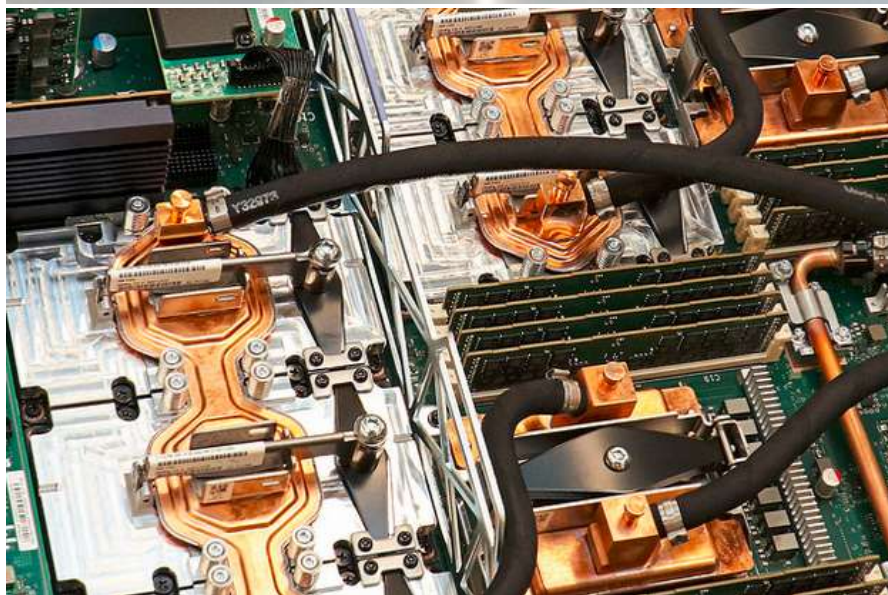
Мега (Mega)	$- 10^6$	(миллион)
Гига (Giga)	$- 10^9$	(биллион / миллиард)
Тера (Tera)	$- 10^{12}$	(триллион)
Пета (Peta)	$- 10^{15}$	(квадриллион)
Экса (Exa)	$- 10^{18}$	(квинтиллион)

Флоп/с, *Flop/s* – *F*loating point *o*perations
per *s*econd

15 Tflor/s = 15 * 10¹² *арифметических* операций
в секунду над *вещественными* числами,
представленными в форме *с плавающей точкой*.

Суперкомпьютер IBM Summit, США

(#1 Top500 в 2018-2019 г.)



4 608 вычислительных узлов,
в каждом узле:
2 x CPUs (IBM Power9, 22 ядра)
6 x GPU (NVIDIA Tesla V100)

Производительность:
Пик (теория): 200.8 Pflop/s
Тест Linpack: 148.6 Pflop/s (74%)

Оперативная память = 10 Пбайт
HDD = 250 Пбайт

Суперкомпьютеры... Зачем?

Неужели есть настолько **сложные задачи**, что для их решения хорошего сервера не хватает ?

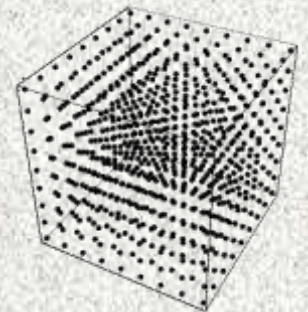
Неужели есть настолько **важные задачи**, которые оправдывают крайне высокую стоимость суперкомпьютеров ?



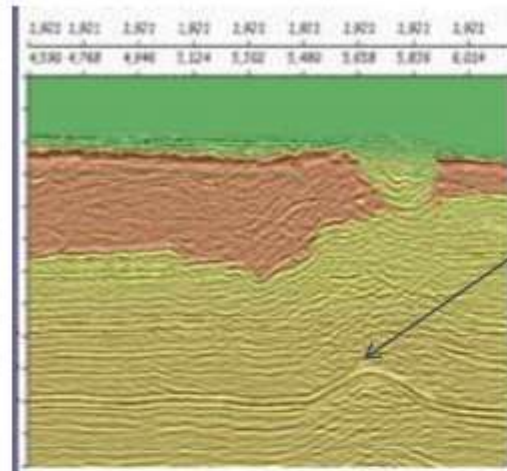
Сверхвысокая производительность - зачем?

Моделирование нефтяных резервуаров:

- нефтеносная область – $100*100*100$ точек
- в каждой точке вычисляется от 5 до 20 функций (скорость, давление, концентрация, температура, ...)
- 200-1000 операций для вычисления каждой функции в каждой точке
- 100-1000 шагов по времени
- Итого: 10^6 (точек сетки) * 10 (функций) *
* 500 (операций) * 500 (шагов) =
= 2500 млрд. операций



Суперкомпьютеры для добычи нефти и газа (Во ВСЕХ добывающих компаниях!)



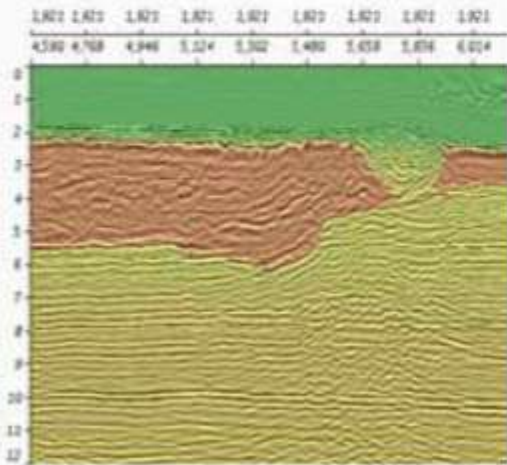
Seismic profiles of a region of the Gulf of Mexico.

The top image, in 2003 , on **64 processors**,
At the bottom right-hand side , a structure shaped like a bowler hat,
typical of a petroleum zone.

Based on this image, ready to install boring equipment on this site.

Fresh data analysis, on a **13 000 cores** supercomputer revealed
that the structure was an artefact.

Thanks to HPC, 80 M\$ saved



In the **mid-90's**, **only 40%** of deposits fulfilled their promises.
Numerical simulations that analyse data obtained by seismic
echography have radically changed the playing field. Armed with
the new supercomputer ... , the Total engineers are **now** hitting
the bull's eye **in 60-70% of cases.**"

Journal La Recherche, special HPC, July 2009,

Acknowledgements: H. Calandra, Ph. Ricoux (TOTAL)

Суперкомпьютеры для добычи нефти и газа (Во ВСЕХ добывающих компаниях!)

HPC | **wire**

Since 1987 - Covering the Fastest Computers in
the World and the People Who Run Them

- Home
- Technologies
- Sectors
- AI/ML/DL
- Exascale
- Specials
- Resource Library
- Events
- Job Bank
- About



January 23, 2018

No sooner had one system, used by BP, been declared the most powerful supercomputer in the industrial sphere than it quickly has been displaced. Last Thursday (Jan. 18) it was Italian energy company Eni's turn to take the lead with the launch of its latest petawhopper. At 18.6 petaflops (peak) the new cluster, HPC4, becomes the world's most powerful commercial system (that we know of) and quadruples the company's computing capacity to an aggregate peak performance of 22.4 petaflops.

#13(!) в Top500
(июнь 2018)

Автомобилестроение

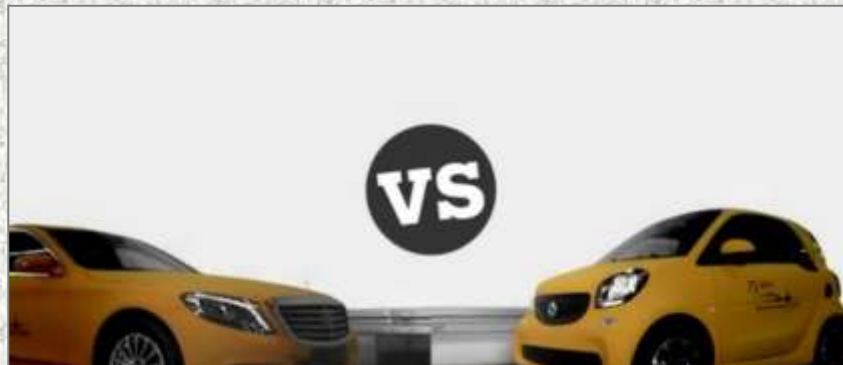
(BMW, Audi, Ford, Chevrolet, Renault,... – BCE!)



Автомобилестроение

(BMW, Audi, Ford, Chevrolet, Renault,... – BCE!)

Mercedes
E-class

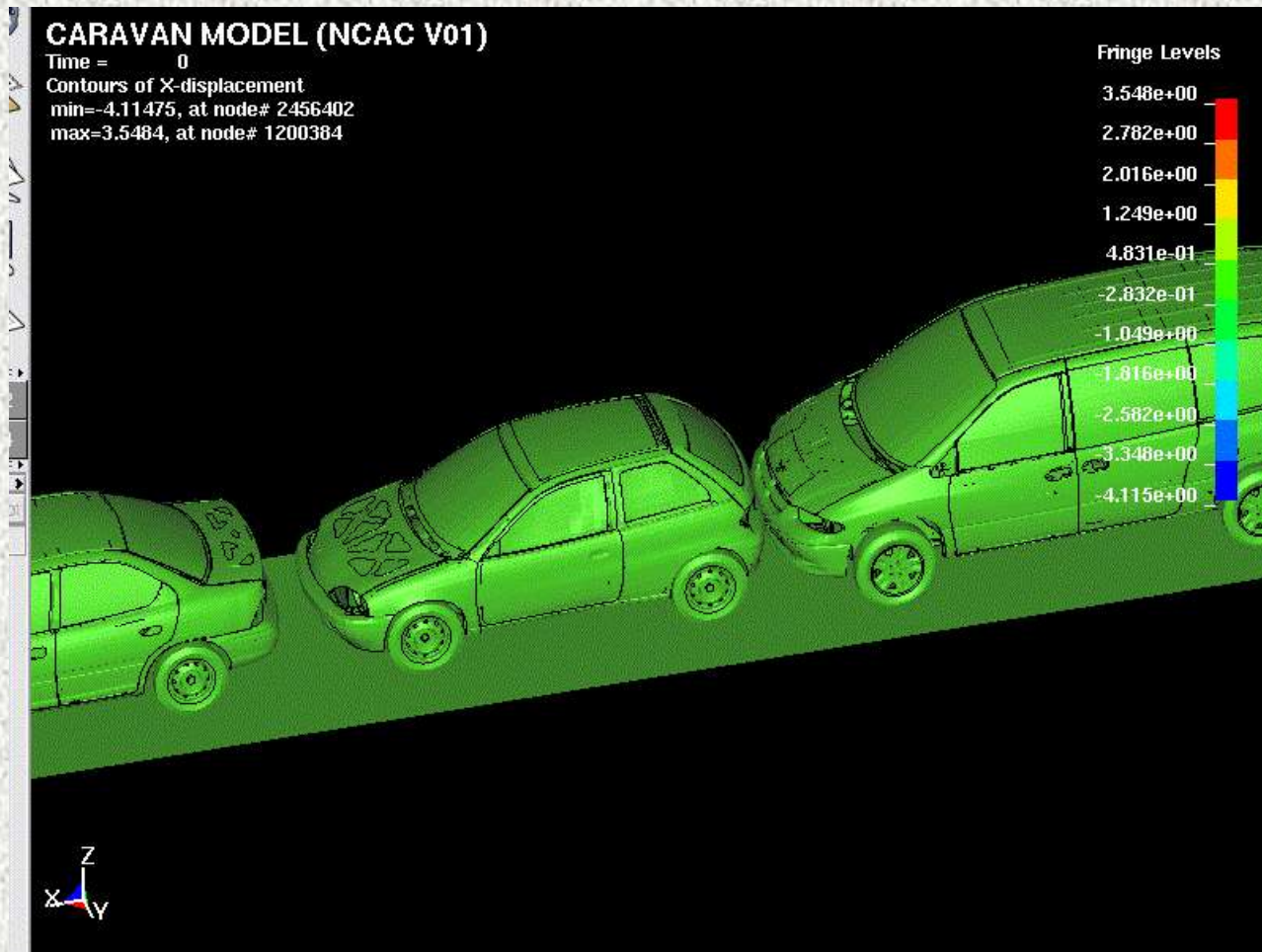


Smart



Автомобилестроение

(BMW, Audi, Ford, Chevrolet, Renault,... – BCE!)





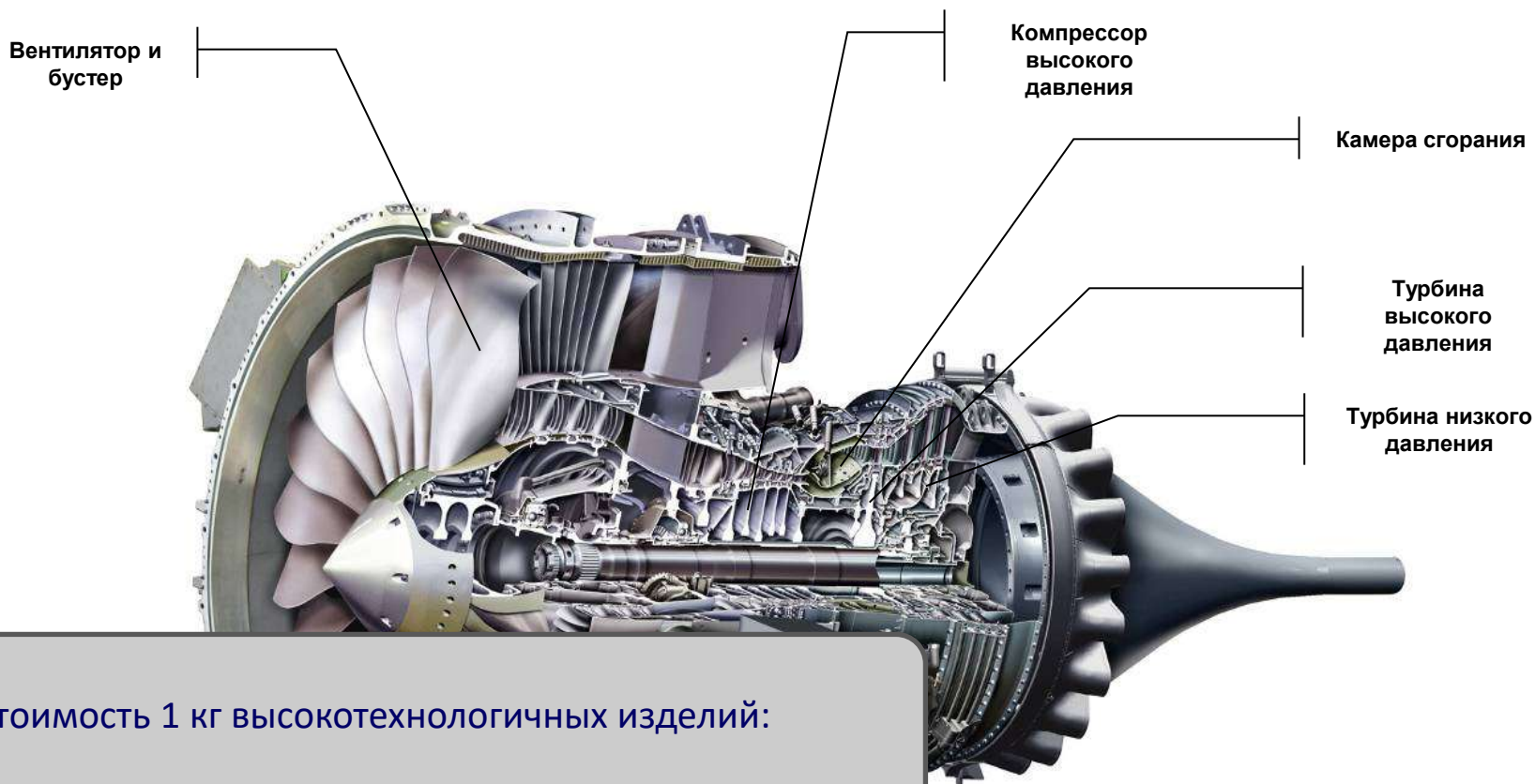
*BMW, 2006 г. – 12 Tflop/s
Williams, 2007 г. – 8 Tflop/s
Renault, 2008 г. – 38 Tflop/s
BMW, 2009 г. – 50 Tflop/s*

НПО "САТУРН"

(авиационные двигатели и газовые турбины)



Основные узлы ГТД



Стоимость 1 кг высокотехнологичных изделий:

Автомобиль: \$25

Истребитель пятого поколения: \$1000

Двигатель истребителя пятого поколения: \$5000

Суперкомпьютер: \$400-500

Объем расчетов

Стационарные режимы

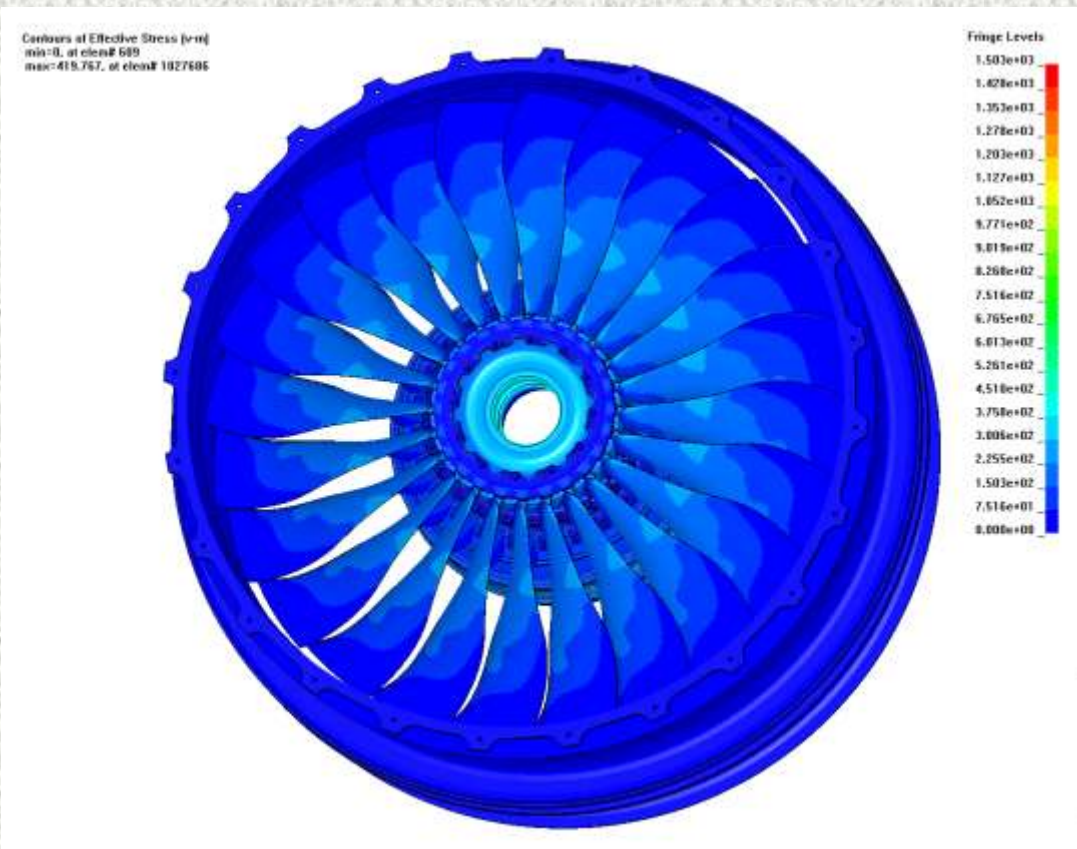
Узел	Размер задачи (млн. ячеек)	Кол-во операций с плавающей точкой для расчета узла
Вентилятор	10	$2,5 * 10^{16}$
Компрессор низкого давления	8	$1,5 * 10^{16}$
Компрессор высокого давления	10	$4,5 * 10^{16}$
Камера сгорания	20	$2,4 * 10^{17}$
Турбина высокого давления	8	$1,1 * 10^{17}$
Турбина низкого давления	8	$1,1 * 10^{16}$

10^{12} – Тера, 10^{15} – Пета, 10^{18} - Экса

Для нестационарных режимов объем расчетов увеличивается в ~ 10 раз.

НПО "САТУРН"

(авиационные двигатели и газовые турбины)



Расчет



Эксперимент

BENCHMARKS AUTRES INDUSTRIES



Wing prototypes: 77

Boeing From 767 to 787

- 40% less wind-tunnel days
- 25% saving in aerodynamics development time
- 20% saving on wind-tunnel tests cost

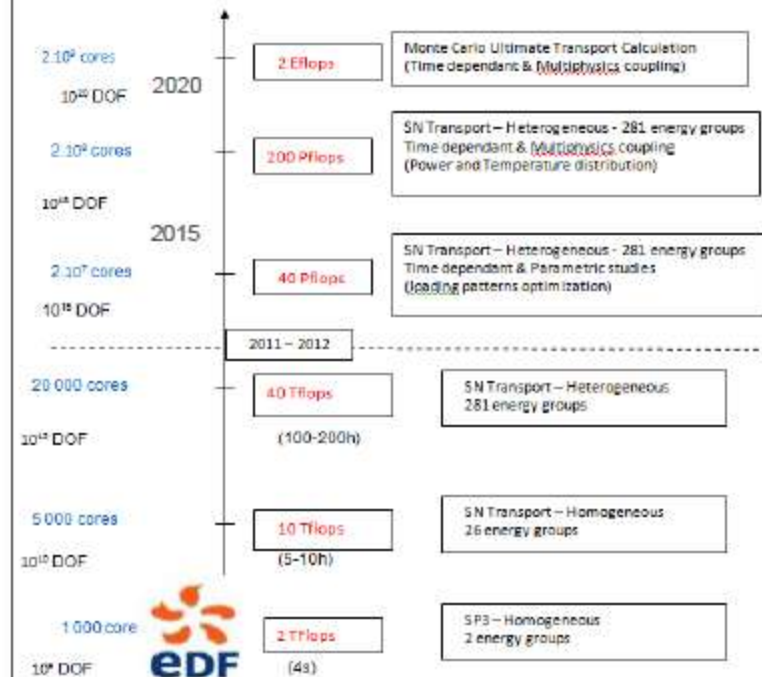
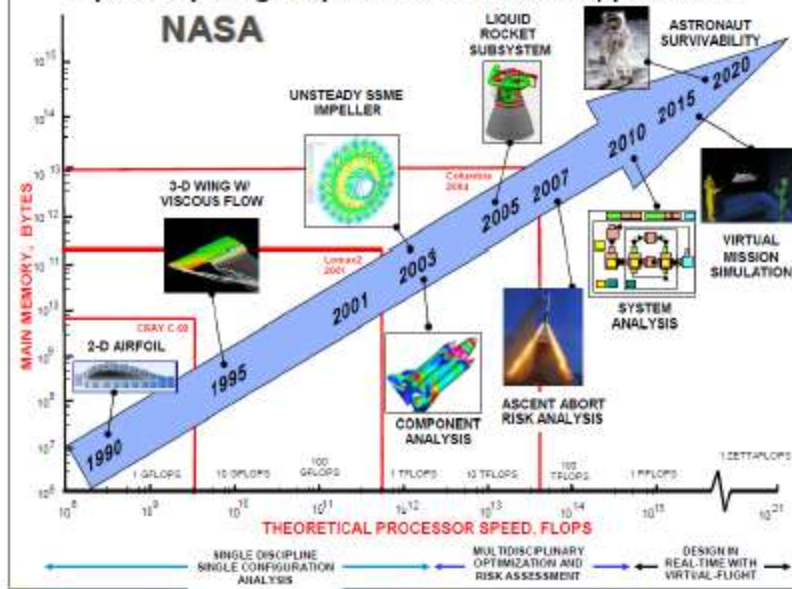
Thanks to HPC-enabled CFD runs, especially in high-speed regime, even providing better representation of aerodynamics phenomenon turned into better design choices.

But ... Digital Aircraft will require at least 1 ZetaFlop !



Wing prototypes: 11 (2008)
→ 5 by new methods and HPC (2015)

Supercomputing Requirements: Mission Applications



Задачи аэродинамики и аэроакустики

Моделирование простых элементов летательного аппарата: крыло без механизации, отдельной области механизации или шасси, несущего винта вертолета, отсека вооружения и т.д.:

Сетка: около 50 млн.ячеек,

Трудоемкость на ячейку: 10-30 тыс.операций,

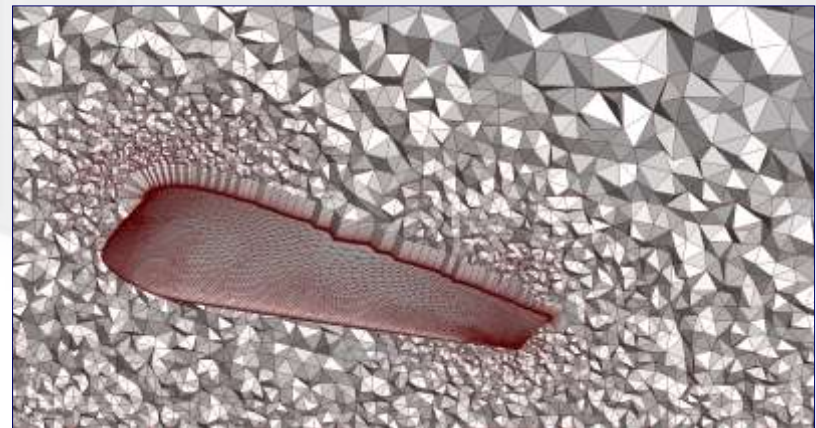
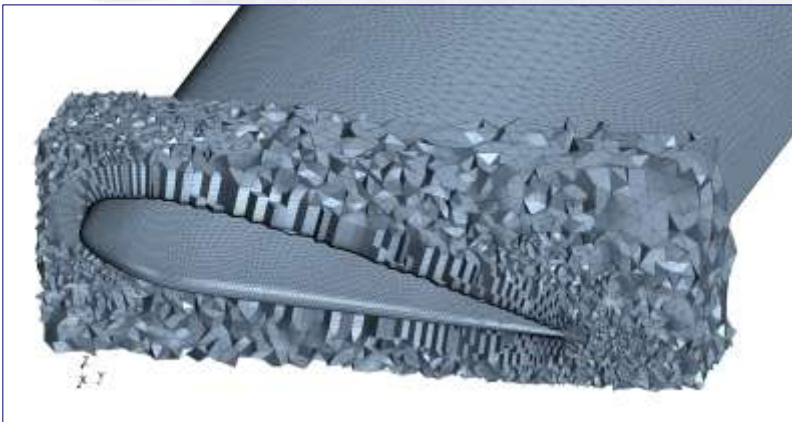
Шагов по времени: около 250 тыс.,

Итого: $50 \cdot 10^6 \cdot 20 \cdot 10^3 \cdot 250 \cdot 10^3 = 2.5 \cdot 10^{16}$ операций.

Несколько режимов: разные углы атаки, разная скорость потока, итого – 10^{17} операций.

Расчет сложных конфигураций: крыло с механизацией, крыло с двигателем, несущий винт с учетом фюзеляжа вертолета и т.д.:

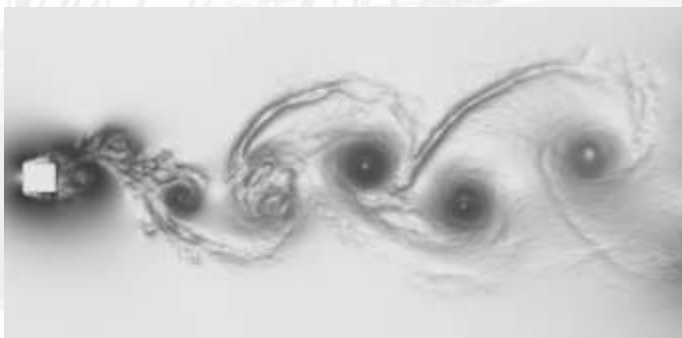
Минимальная сетка порядка 100-200 млн.ячеек, итого – 10^{18} операций.



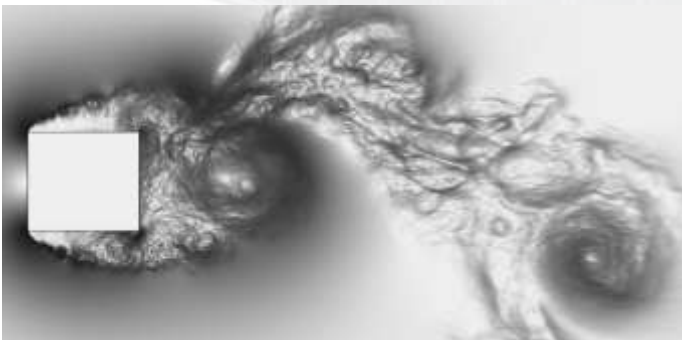
Моделирование течения вокруг лопасти несущего винта вертолета

Расчет турбулентных течений методом прямого численного моделирования (DNS)

Течение вокруг бесконечного цилиндра квадратного сечения
Сетка 300 млн. ячеек, схема 4-го порядка
0.7 млн. шагов по времени
Стоимость расчета: около 10^{18} операций.



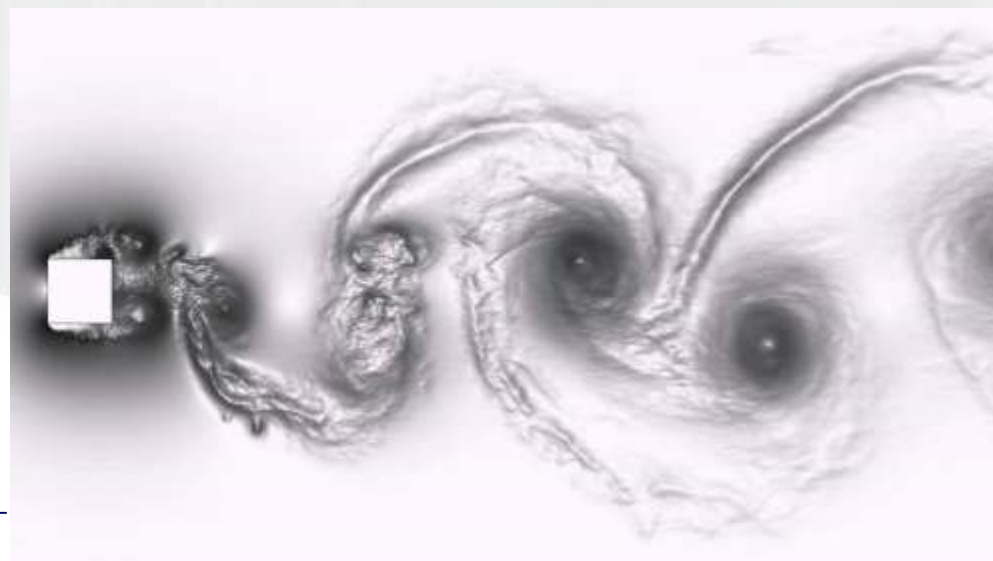
Турбулентный след за цилиндром (дорожка Кармана)



Увеличение в области препятствия. Развитие неустойчивости Кельвина–Гельмгольца (тонкие вихревые дорожки от передних углов цилиндра)



Ламинарное (на переднем плане) и турбулентное течение вокруг подлодки



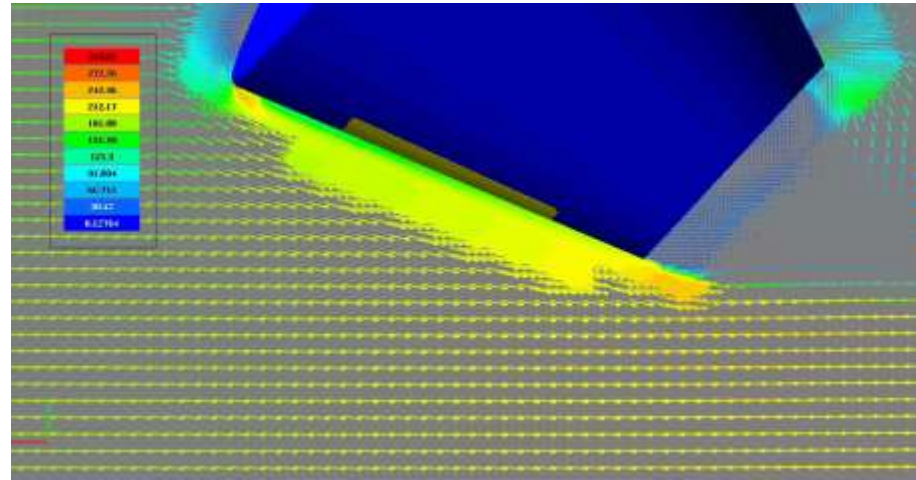
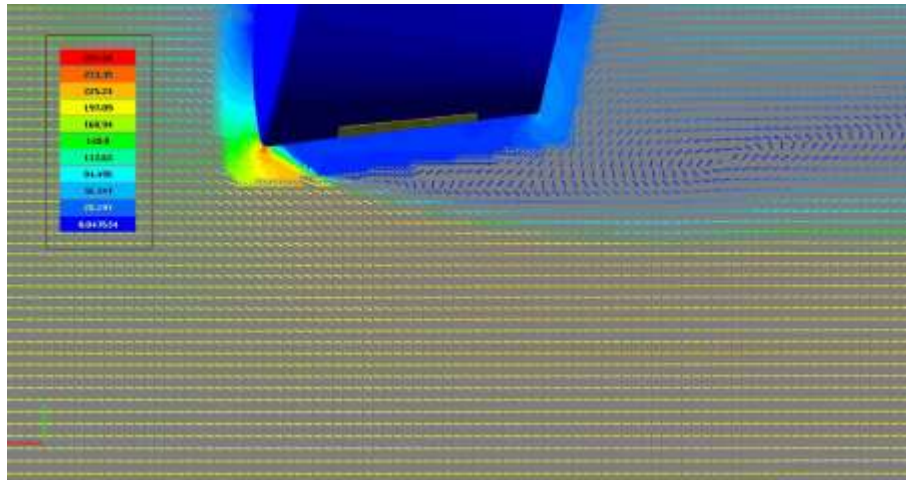
Предоставлено сектором вычислительной аэроакустики ИПМ им М.В.Келдыша РАН.

Использование суперкомпьютера “Ломоносов” в проектировании космической техники

Задача: найти минимальный импульс отстрела крышки парашютного отсека пиропатронами, при котором крышка не ударит по корпусу корабля при отстреле.



**Эта задача не может быть отработана экспериментально.
Только численное моделирование!**

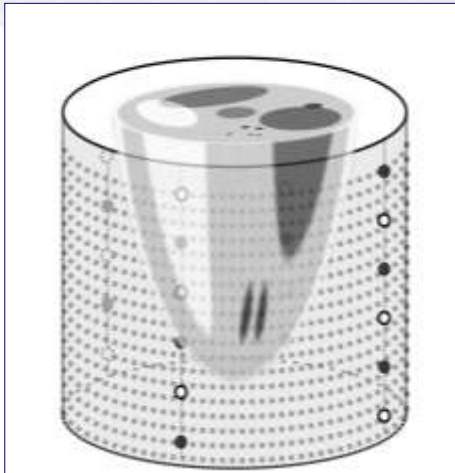


3D ультразвуковая томография в медицине

Одно из основных приложений — диагностика онкологических заболеваний на ранних стадиях.

- Сетка: $500*500*500$ точек.
- Количество источников ультразвука: около 100.
- Количество положений приёмников: около 10000.
- Обратная задача восстановления внутренней структуры 3D объекта является нелинейной и решается с помощью итерационного процесса. Количество итераций — около 100.
- В каждой точке сетки необходимо выполнить порядка 100 операций.
- Количество шагов по времени — 1000.

Итого: $2.5*10^8$ точек сетки * 10^2 операций * 10^3 шагов * 10^2 источников * 10^2 итераций = **$2.5*10^{17}$ операций.**



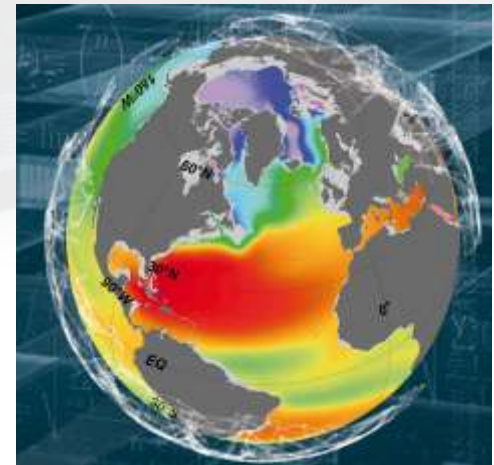
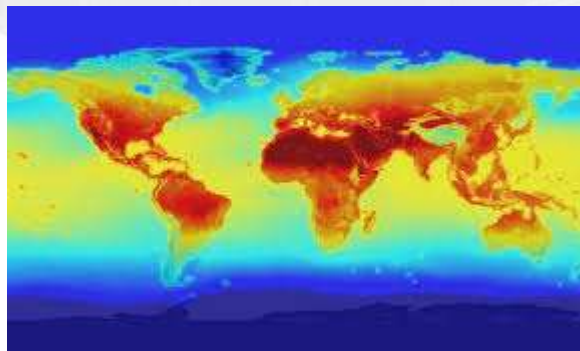
Современные модели климата

Воспроизведение субмезомасштабных вихрей в океане: вихри с размерами от нескольких сотен метров до нескольких километров.

- Сетка: $2000 \times 1000 \times 50$ точек.
- Несколько десятков прогностических переменных (три компоненты скорости, температура, соленость в океане, переменные описывающие взаимодействие химических веществ...).
- Порядка 100 операций на каждую переменную.
- Для расчета одного года — 10^5 шагов по времени.
- Климатические расчеты выполняются на сотни лет.

Итого: 10^8 точек сетки * 10 переменных * 10^2 операций * 10^5 шагов * 10^2 лет расчета = 10^{18} операций.

- Близкие оценки для моделей атмосферной циркуляции.

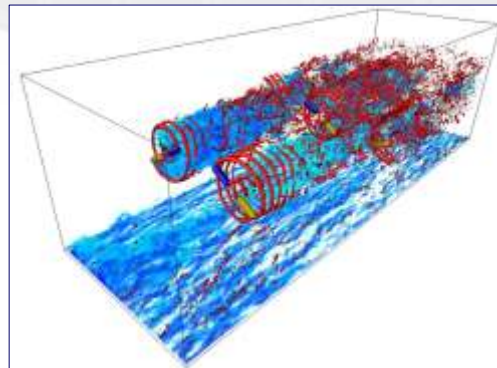


Моделирование параметров течения в ветропарке

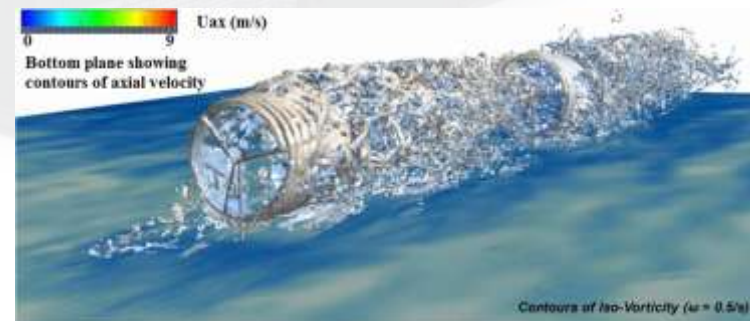
Цель: определение физических параметров течения, эффективного расположения ветроэнергетических установок (ВЭУ) и оценка генерируемой мощности ветропарка.

- Габариты расчетной области ветропарка: 4 км * 4 км * 1 км.
- Общее число ВЭУ мощностью от 2 до 5 МВт: от 20 до 50 (высота 90м, диаметр лопастей около 126м).
- Сетка: 572*572*144 точек = $47 \cdot 10^6$ (примерно 7м между точками).
- В каждой точке сетки вычисляется от 25 до 40 функций в зависимости от выбранной модели турбулентности.
- Порядка 100 операций на каждую функцию.
- Шагов по времени: 56000 (около 3 часов физического времени).

Итого: $47 \cdot 10^6$ точек сетки * 25 функций * 10^2 операций * $56 \cdot 10^3$ шагов = $6.5 \cdot 10^{15}$ операций.

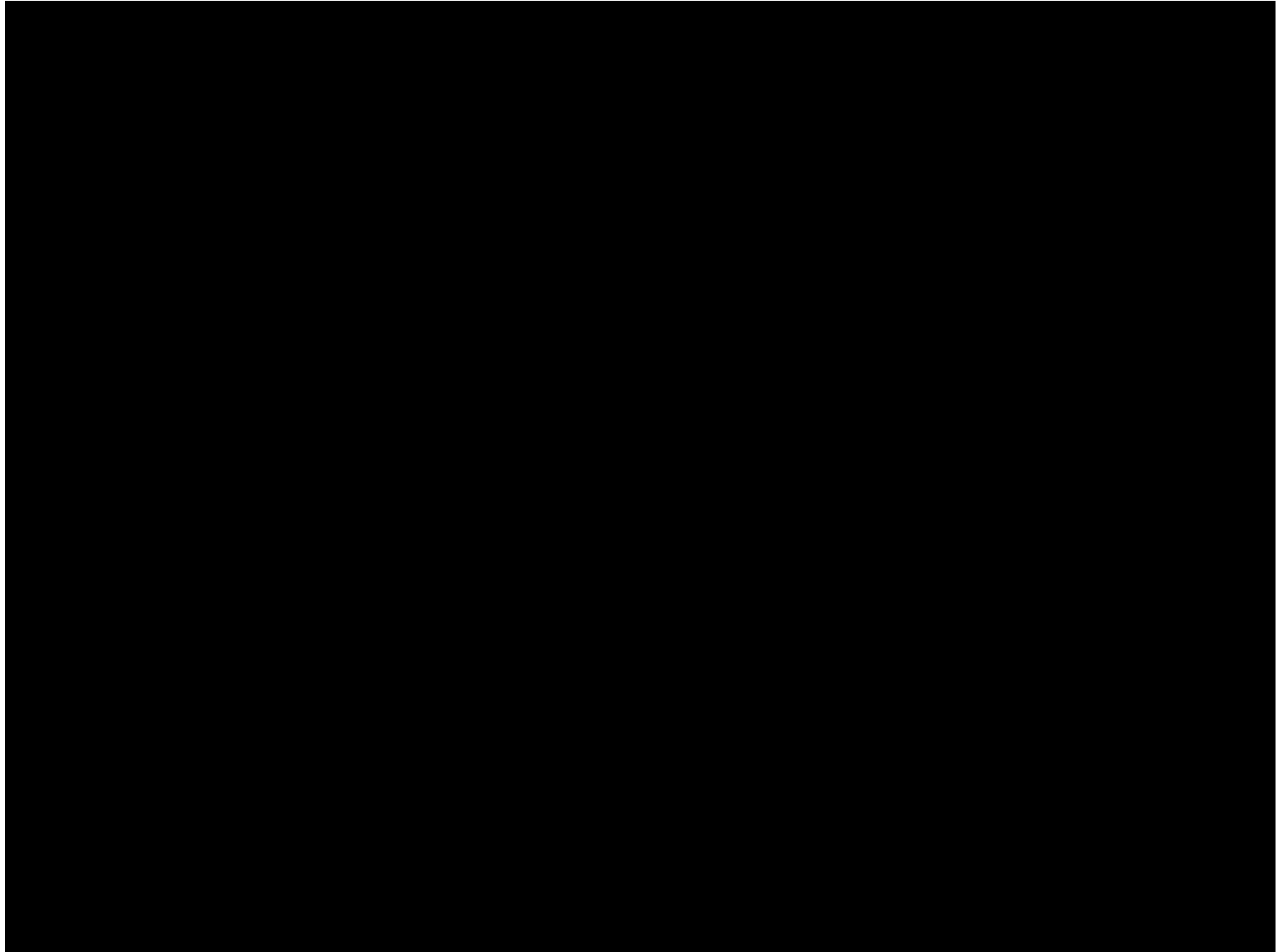


Поперечное расположение 2 ВЭУ



Продольное расположение 2 ВЭУ

Суперкомпьютеры в спорте





Суперкомпьютеры и анимация (“Книга Джунглей”, 2016 год)

- 24 кадра в секунду,
 - более 152 000 кадров в фильме,
 - кадр обрабатывается одним процессором,
 - в среднем 19 часов на рендеринг одного кадра,
 - всего: 30 млн. процессорочасов
(потребовалось бы 3400 лет работы одного процессора).
- Бюджет: \$175 млн. Сборы в мире: \$966 млн.



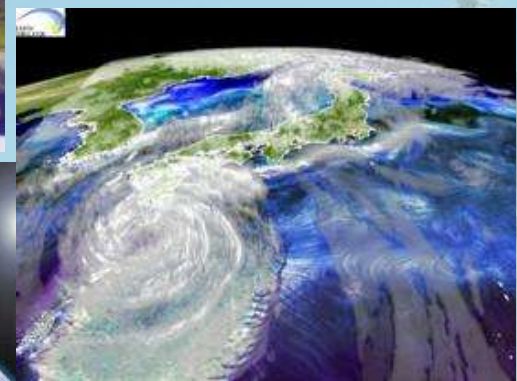
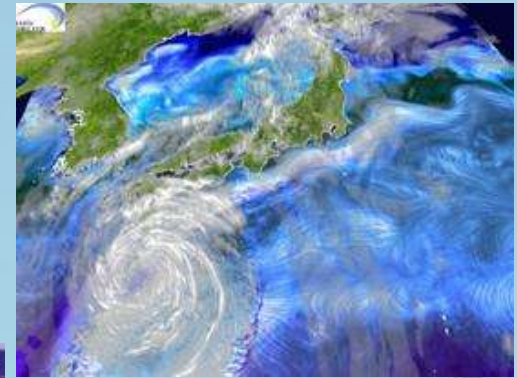
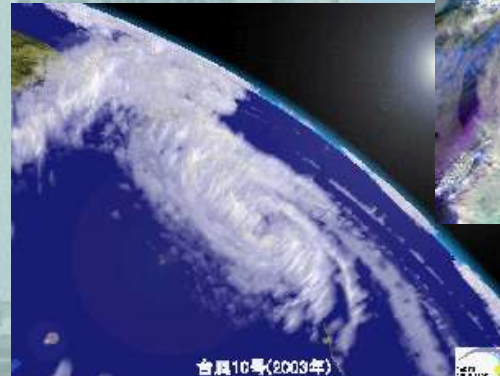
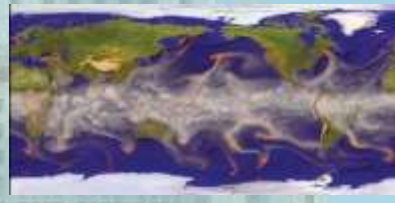
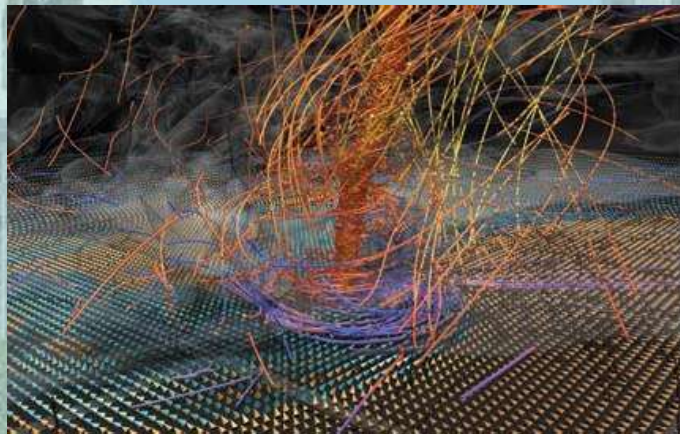
Выступление компании Whirlpool на научной конференции



Суперкомпьютерные технологии и наука

Наука:

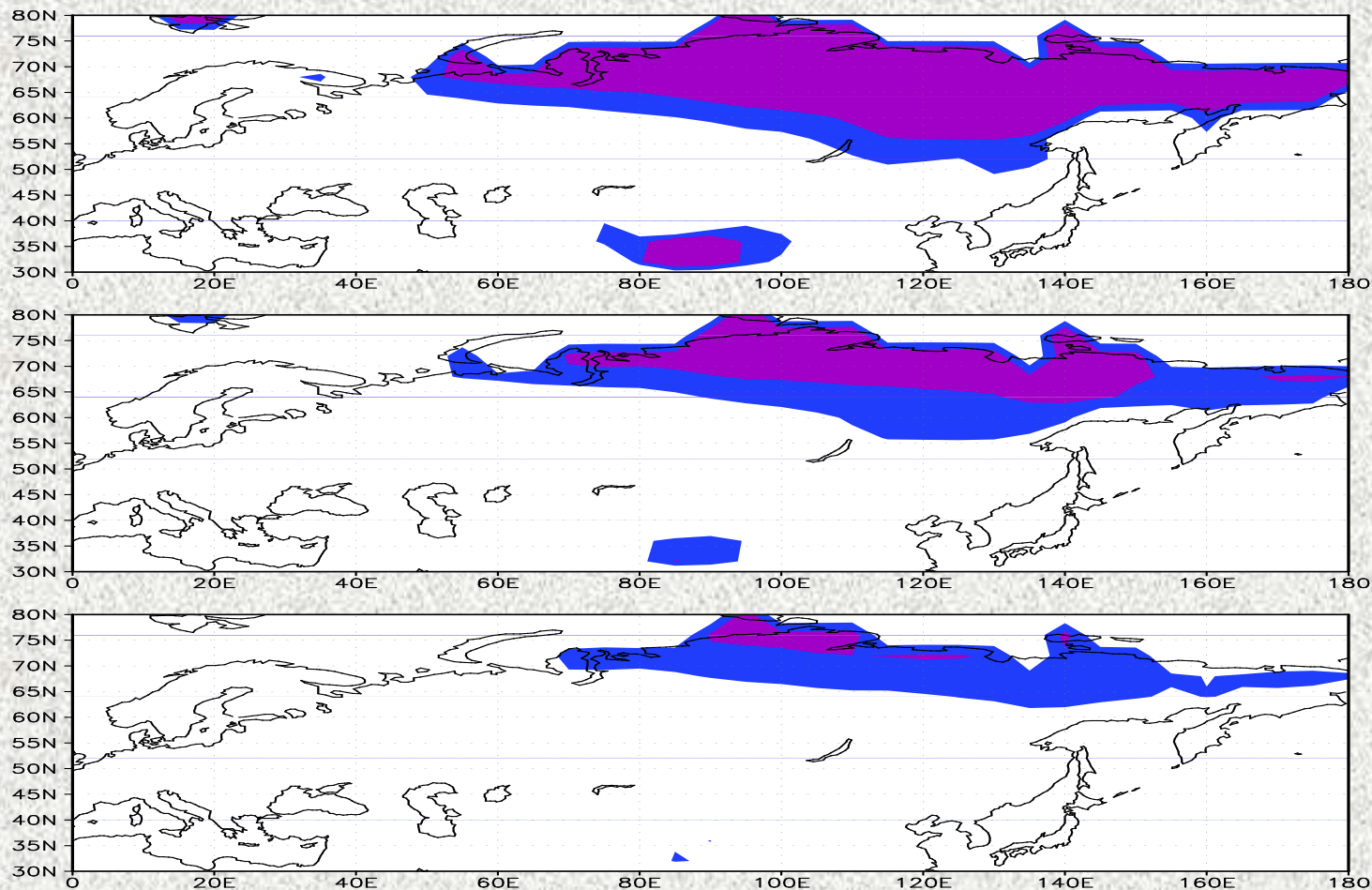
- теоретическая
- экспериментальная
- **вычислительная**



От моделирования к полному воспроизведению ...



Суперкомпьютеры – инструмент моделирования климатических изменений



Верхняя картинка – распределение вечной мерзлоты на территории России.

Средняя и нижняя картинки – прогноз распределения вечной мерзлоты на будущее при двух сценариях воздействия человека на климат.

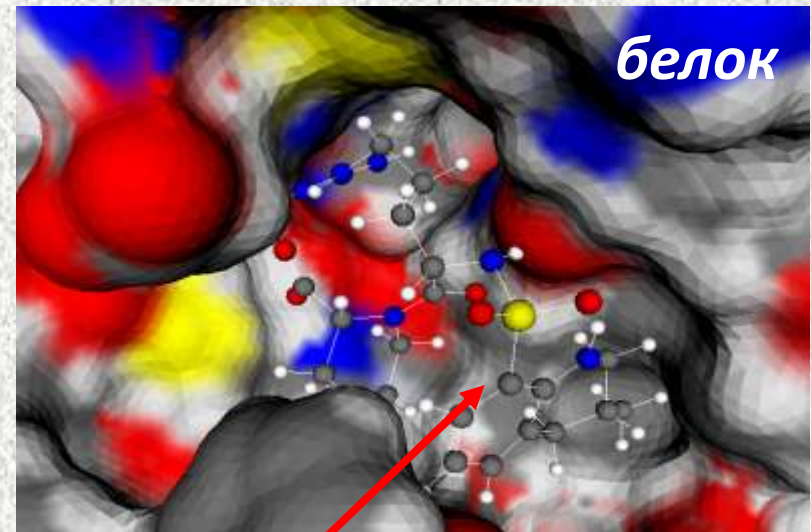
Компьютерный дизайн лекарств

Разработка нового лекарства требует 10-15 лет и до \$500 млн.

Действие лекарства:

*блокировка ингибитором
активного центра белка,
пораженного болезнью.*

*Поиск ингибиторов – это ключевой
этап разработки.*



ингибитор

Суперкомпьютеры и грид-технологии позволяют ускорить разработку лекарств в несколько раз и удешевить в сотни раз.

Теоретико-числовые задачи, ориентированные на криптографические приложения

Факторизация больших целых чисел требует решения огромных разреженных систем линейных уравнений над конечными полями и компьютеров с петафлопсной производительностью.

Факторизация: $N = p q$, где p и q – простые числа.

RSA232=12301866845301177551304949583849627207728535695953347921973
224521517264005072636575187452021997864693899564749427740638459251
925573263034537315482685079170261221429134616704292143116022212404
79274737794080665351419597459856902143413

p=33478071698956898786044169848212690817704794983713768568912431388
982883793878002287614711652531743087737814467999489

q=36746043666799590428244633799627952632279158164343087642676032283
815739666511279233373417143396810270092798736308917

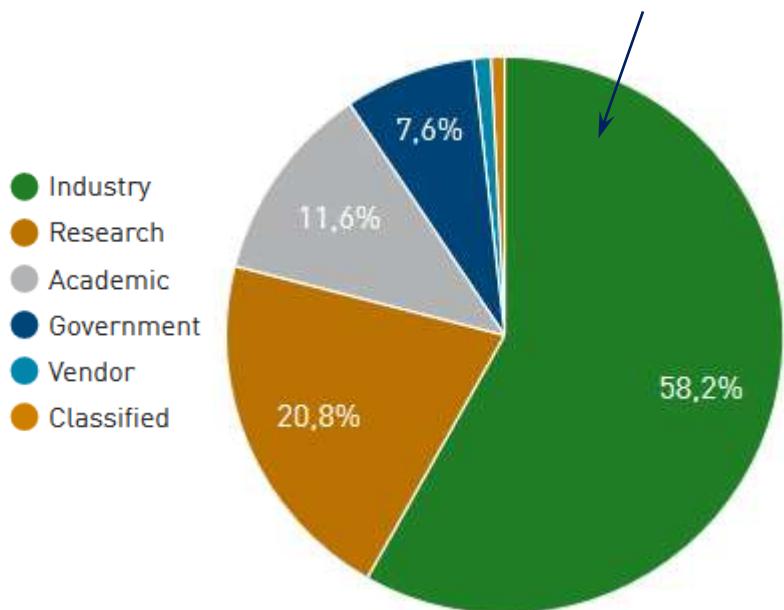
Этап просеивания: 2 года на 800 компьютерах.

Размерность системы уравнений: $1.9 \cdot 10^9$. Вычислительная сложность: 10^{20} операций.

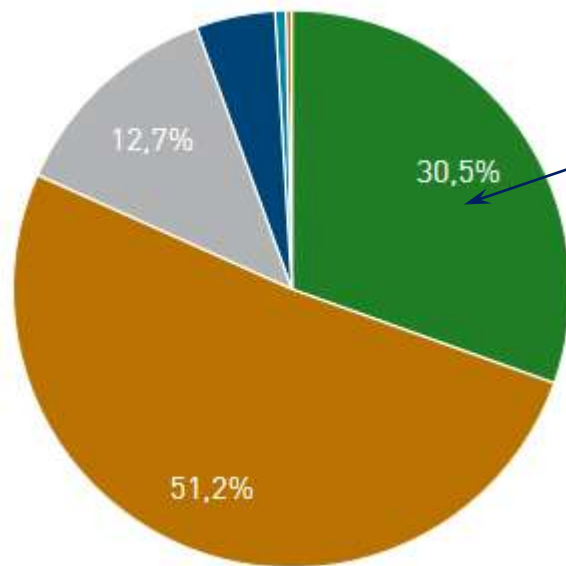


Top500 самых мощных суперкомпьютеров мира. Распределение по областям применения

Свидетельство целесообразности использования суперкомпьютерных технологий в производстве: более половины (58,2%) самых мощных суперкомпьютеров мира **установлены в промышленности.**

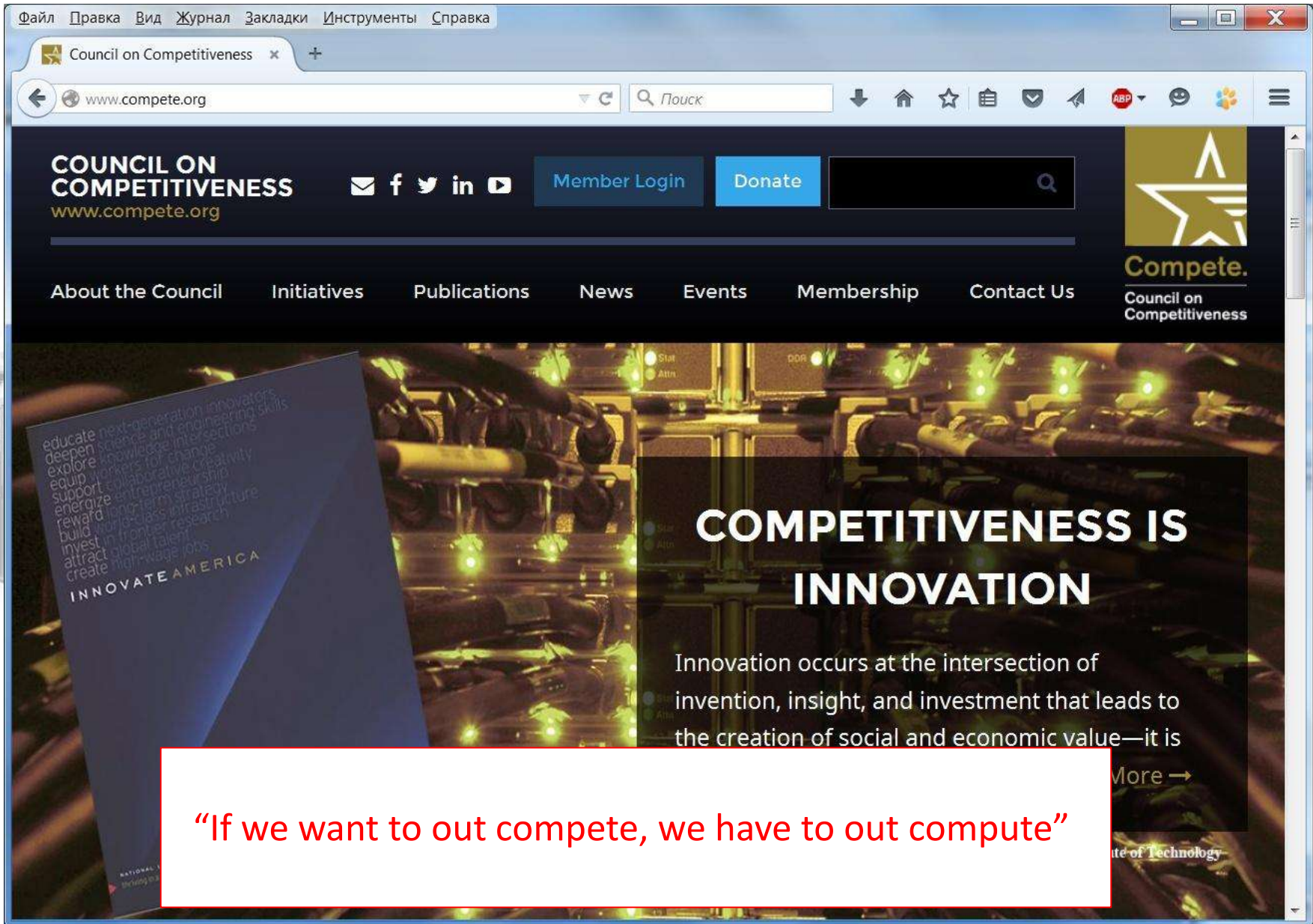


По числу суперкомпьютеров



По суммарной производительности суперкомпьютеров

Свидетельство экономической обоснованности использования суперкомпьютерных технологий в промышленности.



“If we want to out compete, we have to out compute”

Суперкомпьютеры... Зачем?

И в промышленности, и в науке есть большое число задач, для решения которых необходимы именно суперкомпьютеры.



*Почему суперкомпьютеры имеют
столь высокую
производительность ?*

*Прогресс в элементной базе ?
Архитектура суперкомпьютеров ?*

Увеличение производительности компьютеров: за счет чего?

EDSAC, 1949 год

такт: $2 \cdot 10^{-6}$ с

произв.: 10^2 оп/с

Увеличение производительности компьютеров: за счет чего?

EDSAC, 1949 год

*такт: $2 * 10^{-6}$ с*

произв.: 10^2 оп/с

Cray Titan, #1, 2012

*$4.5 * 10^{-10}$ с (2.2 GHz)*

*$1.7 * 10^{16}$ оп/с*

Время такта = $1/(\text{тактовая частота})$

Увеличение производительности компьютеров: за счет чего?

EDSAC, 1949 год

Cray Titan, #1, 2012

изменение

такт: $2 \cdot 10^{-6}$ с

$\approx 4.4 \cdot 10^3$

$4.5 \cdot 10^{-10}$ с (2.2 GHz)

произв.: 10^2 оп/с

$\approx 1.7 \cdot 10^{14}$

$1.7 \cdot 10^{16}$ оп/с

Время такта = $1/(\text{такты́вая частота})$

Увеличение производительности компьютеров: за счет чего?

EDSAC, 1949 год

TaihuLight, #1, 2017

изменение

такт: $2 \cdot 10^{-6}$ с

$\approx 2.9 \cdot 10^3$ ↓

$6.9 \cdot 10^{-10}$ с (1.45 GHz)

произв.: 10^2 оп/с

$\approx 9.3 \cdot 10^{14}$ ↑

$9.3 \cdot 10^{16}$ оп/с

Время такта = $1/(\text{тактовая частота})$

Почему суперкомпьютеры имеют столь высокую производительность ?

Два вывода.

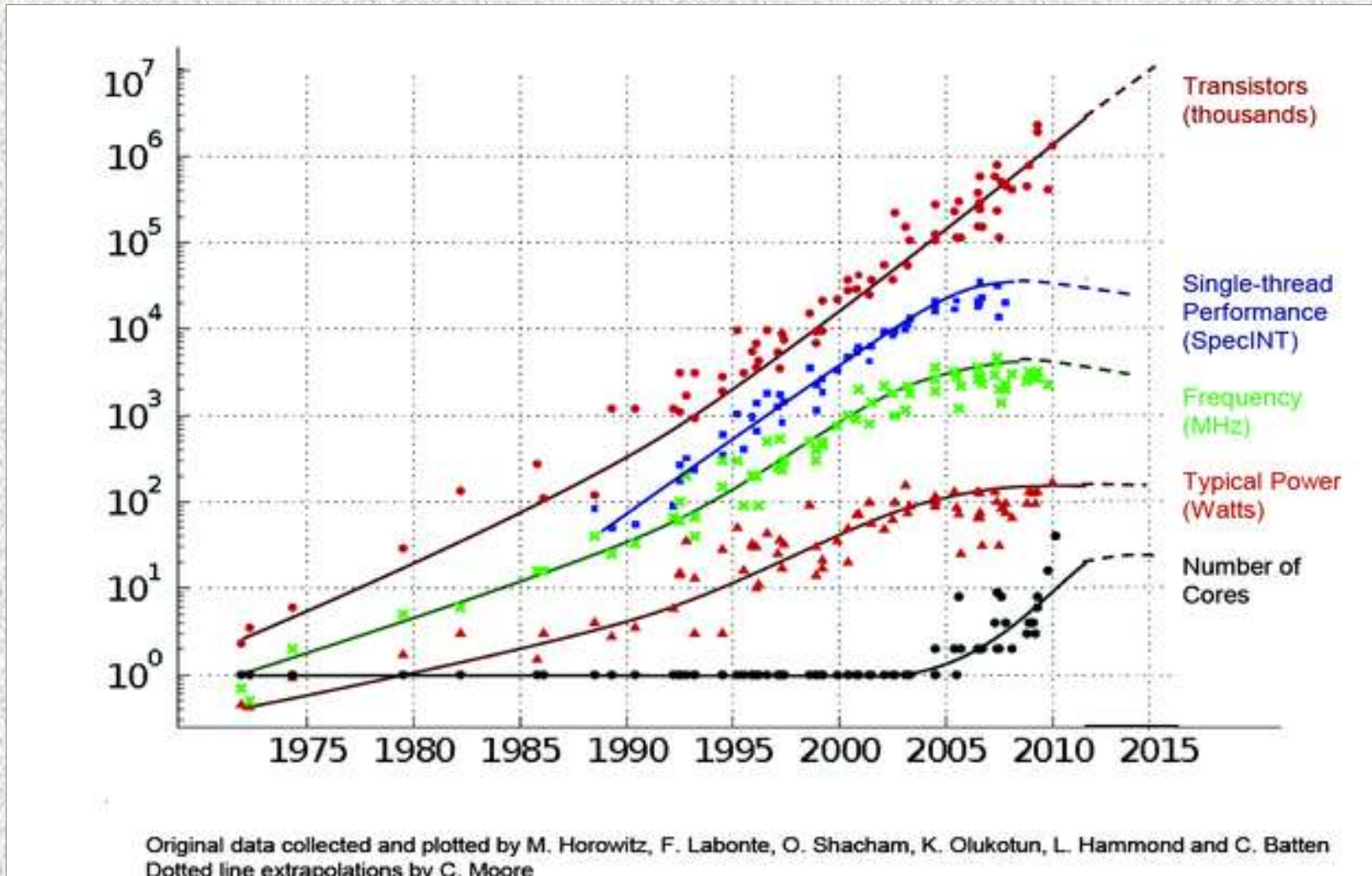
- 1. Безусловно, без развития элементной базы не было бы такого прогресса в развитии компьютеров.*
- 2. Но основной вклад в увеличении производительности компьютеров – это развитие архитектуры, и прежде всего, за счет глубокого внедрения идей параллелизма.*

Годы, флопсы и степень параллелизма

(когда и как был достигнут очередной 'X'flops)

10^6	Mflops	1964 г.	CDC 6600	10 MHz	1 CPUs
10^9	Gflops	1985 г.	Cray 2	125 MHz	8 CPUs
10^{12}	Tflops	1997 г.	ASCI Red	200 MHz	9152 CPUs
10^{15}	Pflops	2008 г.	Roadrunner	3,2 GHz	122400 Cores
10^{18}	Eflops	2020-2022			$10^8 - 10^9$

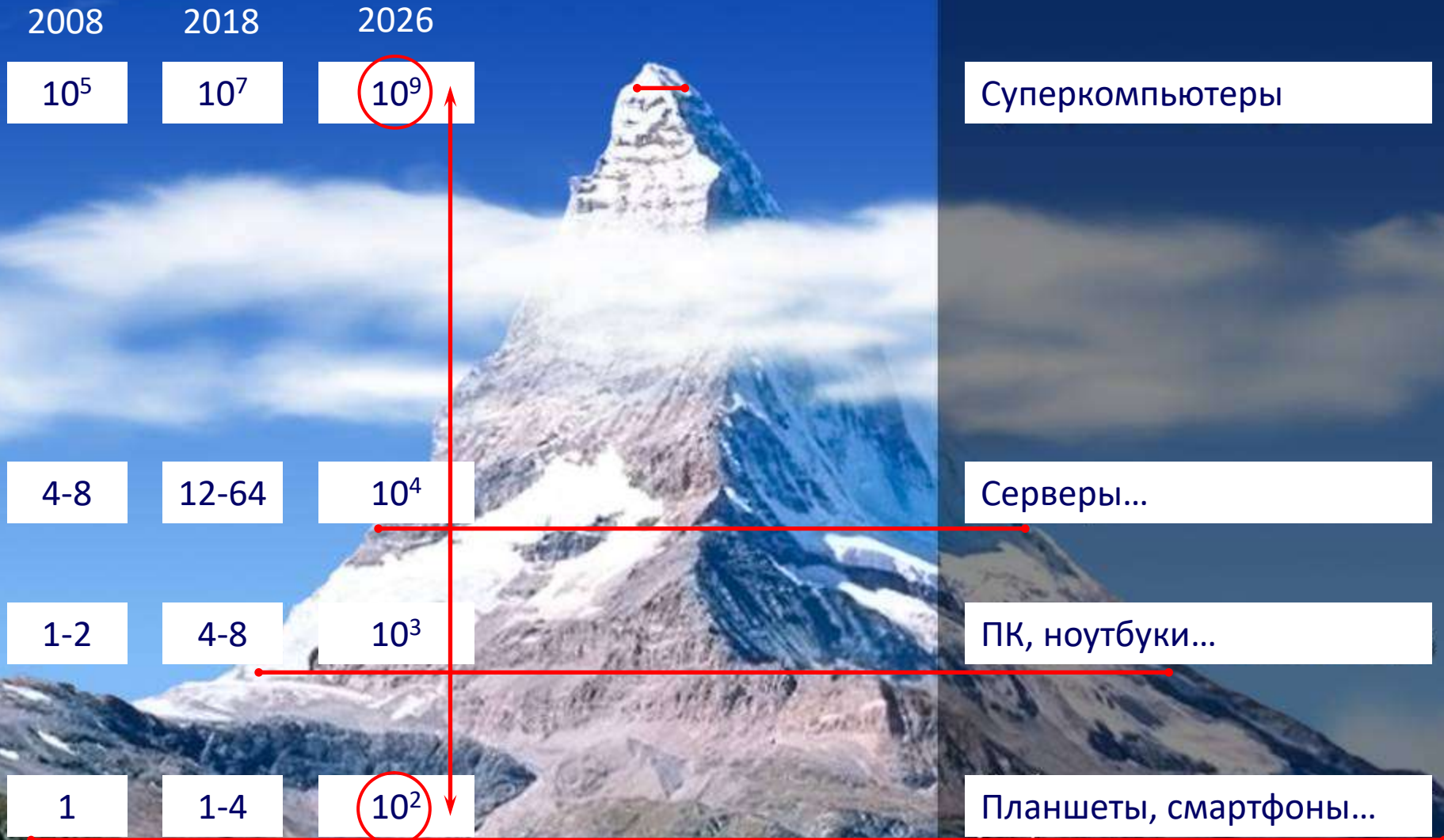
Изменение параметров микропроцессоров (остановка роста тактовой частоты)



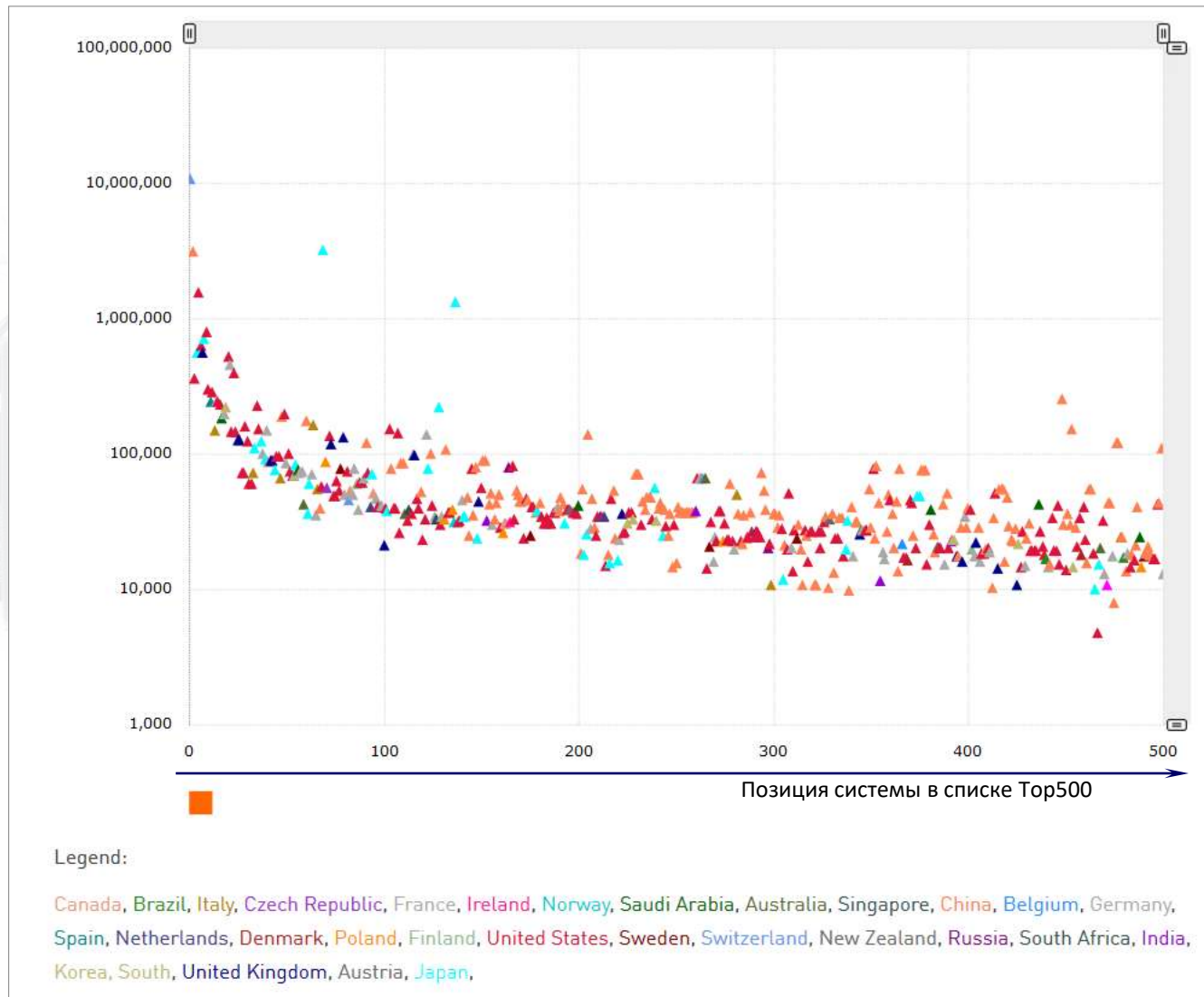
Сегодня основной резерв для роста производительности процессоров – это увеличение числа ядер.

Параллельный компьютерный мир

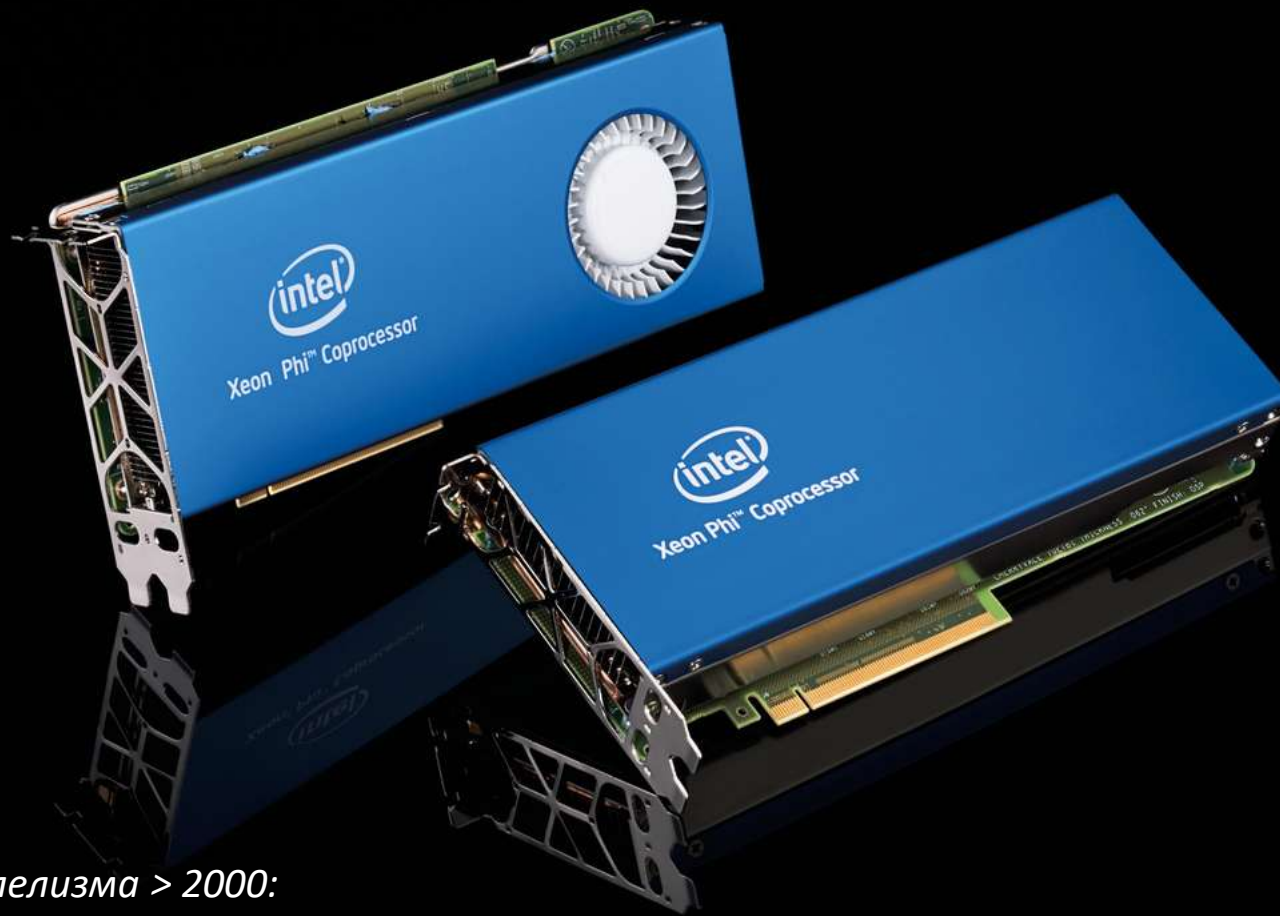
Степень параллелизма



Число ядер в системах списка Top500



Доступный параллелизм: Intel Phi (Knights Landing)

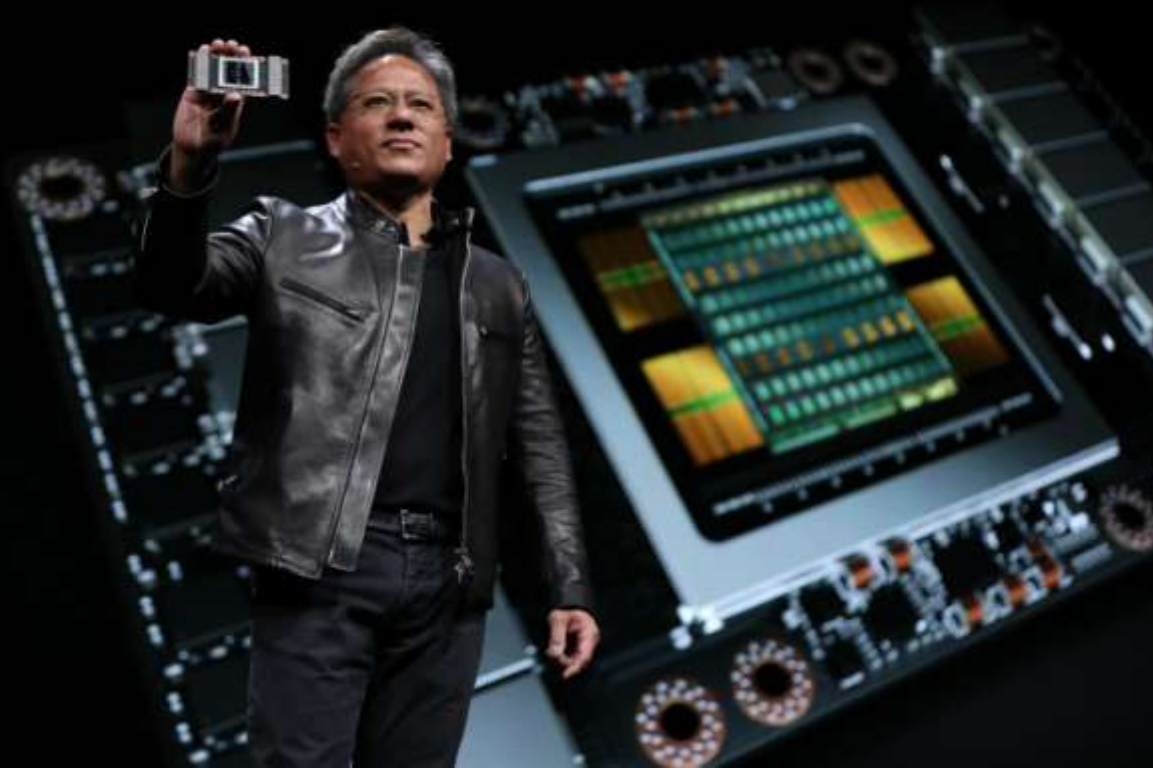


Степень параллелизма > 2000:

- 72 ядра,
- 4 нити на ядро,
- AVX-512 инструкции (8 операций * 64 разряда)

Доступный параллелизм: NVIDIA GPU

(Tesla V100, Volta)



- 5120 ядер,
- 7.5 Тфлопс на двойной точности,
- 15 Тфлопс на одинарной точности,
- 120 Тфлопс (tensor flops, FP16)

Простые, но фундаментальные вопросы параллельных вычислений

Как решить задачу быстрее?



Параллелизм, конвейерность...

Как решить задачу **намного быстрее?**

эффективную миллионов

Как организовать работу нескольких человек/ядер/процессоров...?



Теория / Практика...



SMP



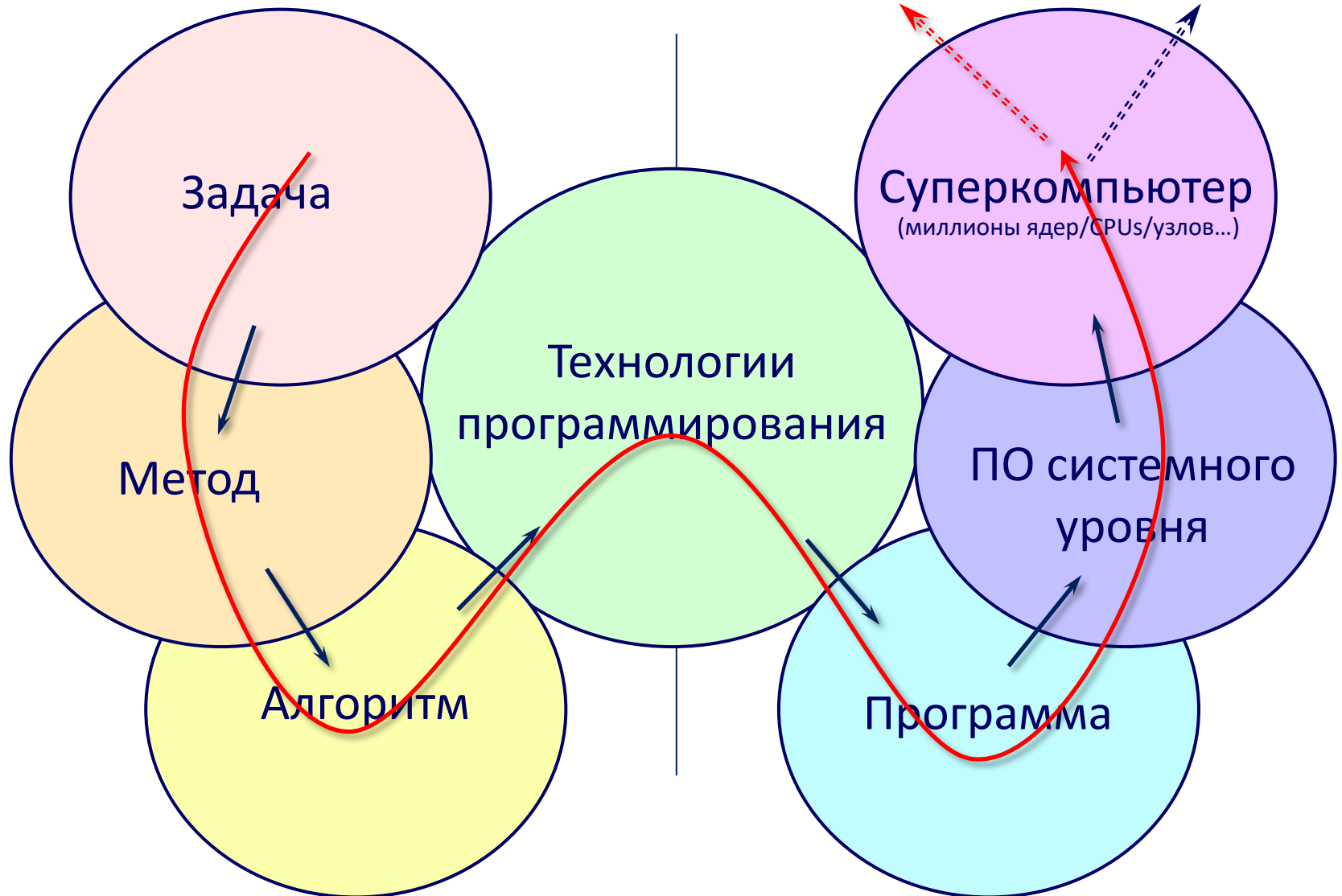
MPP



Синхронность / Асинх-ть / Модели...

Решение задач и вычислительные системы

(Реальность) Реальная производительность $\xleftrightarrow{\text{Огромный разрыв!}}$ (Ожидания) Пиковая производительность



Алгоритмическая сторона

Компьютерная сторона

Особенность современных компьютеров – это высокая степень параллельности.

Решение задачи на параллельной вычислительной системе будет эффективным только в том случае, если на всем пути от Задачи до Компьютера нет ни одного “узкого места”!

*Центральная проблема:
отображение программ и алгоритмов на архитектуру
параллельных вычислительных систем
(co-design, кодизайн)*

*Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова
Факультет Вычислительной математики и кибернетики*

*Межфакультетский курс
“Сложные процессы с точки зрения квантовой физики”*

СУПЕРКОМПЬЮТЕРЫ И ПАРАЛЛЕЛЬНЫЕ ВЫЧИСЛЕНИЯ

Вл.В.Воеводин

**Зав.кафедрой Суперкомпьютеров и квантовой информатики ВМК МГУ
Директор НИВЦ МГУ,
чл.-корр. РАН, д.ф.-м.н., профессор**

voevodin@parallel.ru

ВМК МГУ – ноябрь, 2019