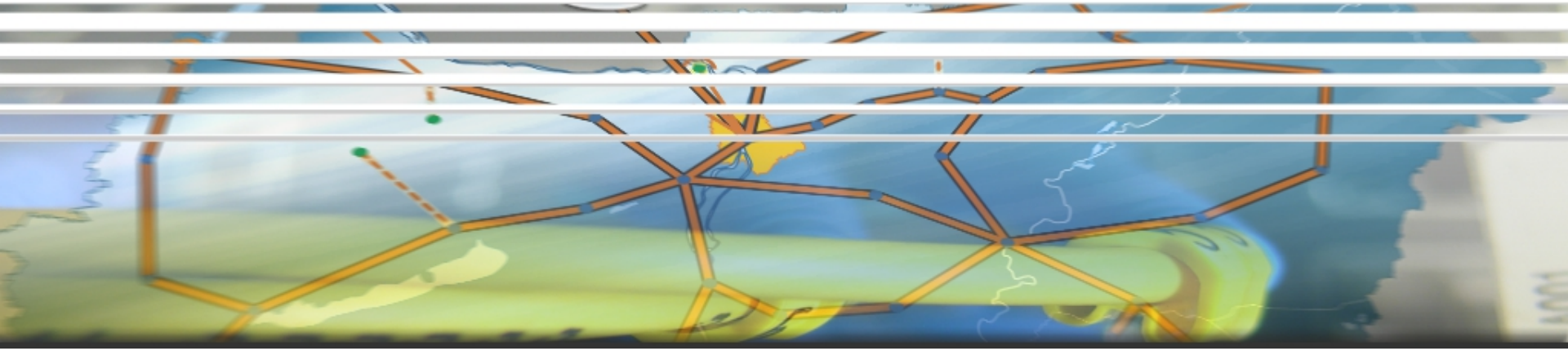
Párhuzamos programok futásának kiértékelése Scalasca profiler segítségével



2014. Április 24.

Pécs, Networkshop 2014

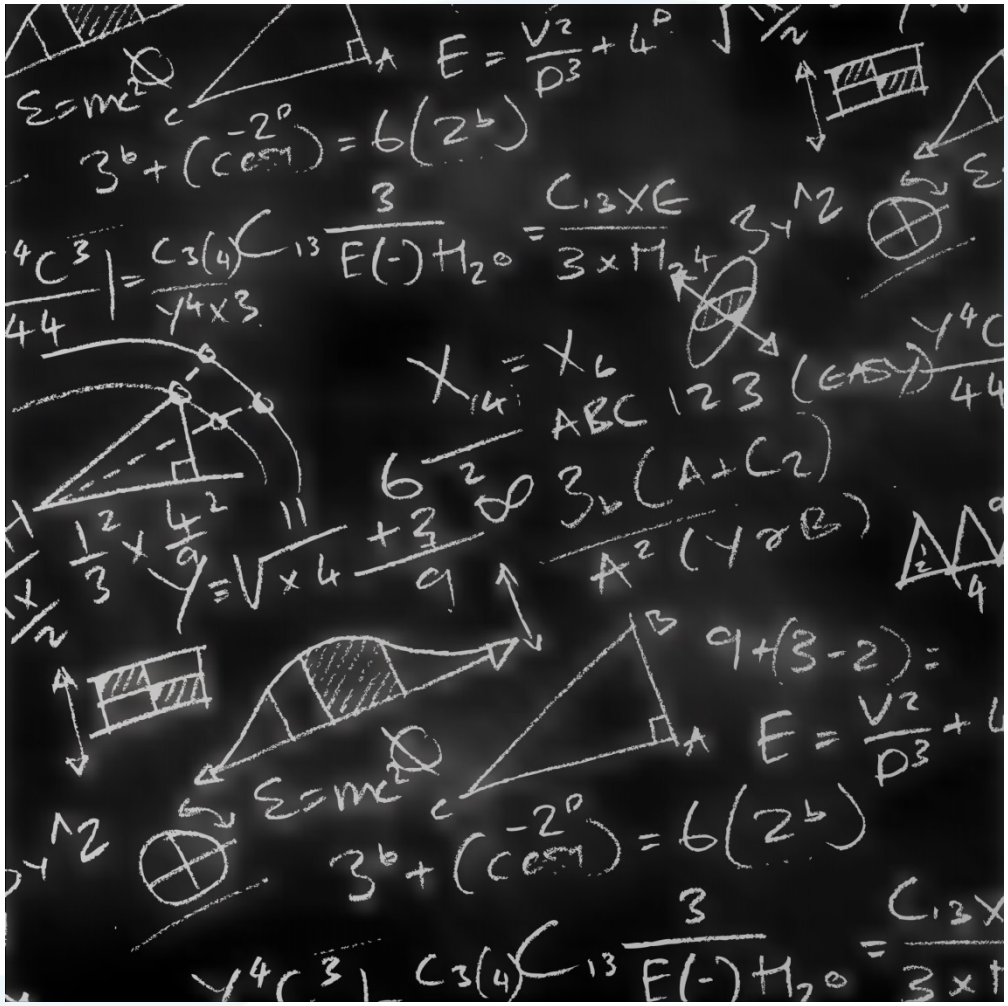
Rőczei Gábor
roczei@niif.hu

Főbb témák

- Miért használjunk szuperszámítógépet?!
- Alapfogalmak
- Miért van szükség profiler programra?!
- Scalasca profiler

Miért használjunk szuperszámítógépet?

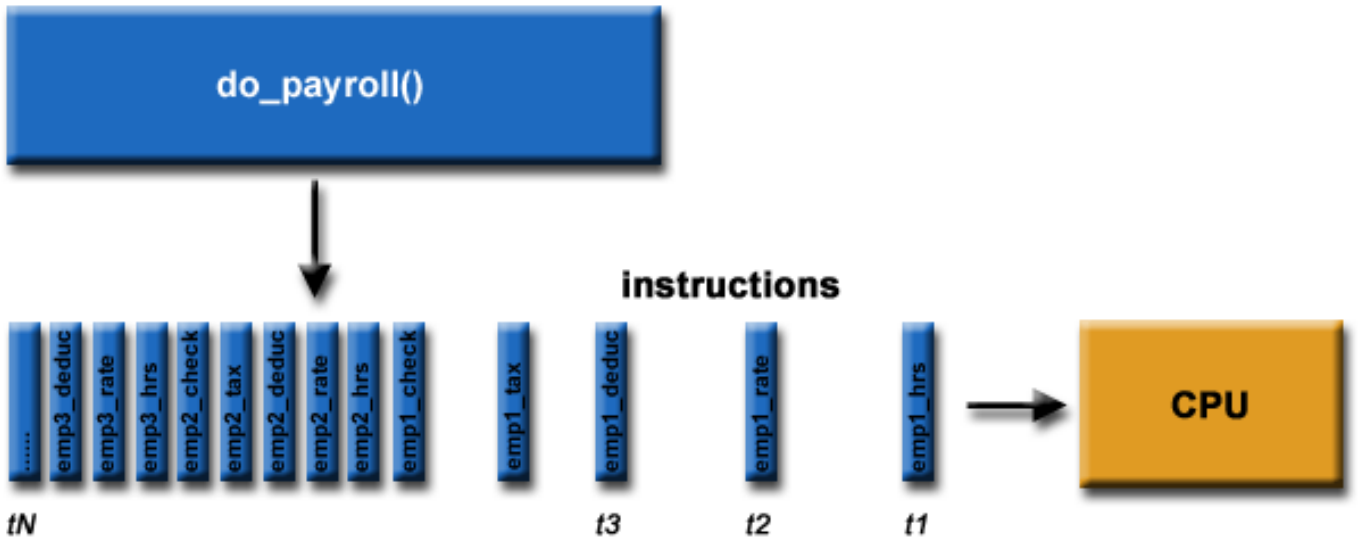
- **Költség csökkentés**
- **Gyors eredmények**



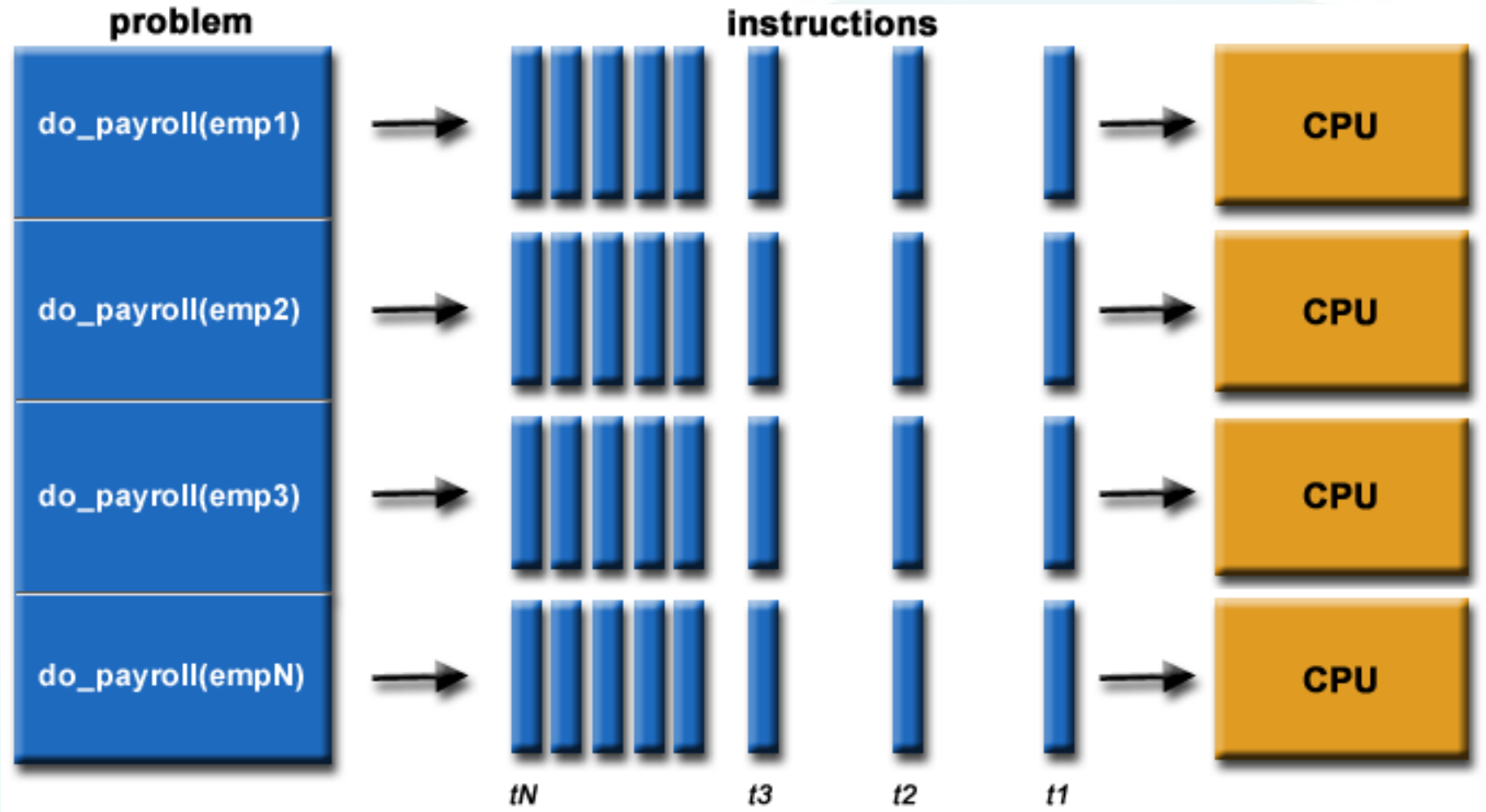
Miért fontos, hogy gyorsak legyünk?

- Elsők szeretnénk lenni
- Új gyógyszerek felfedezése (életek múlhatnak rajta)

Soros (serial) feldolgozás



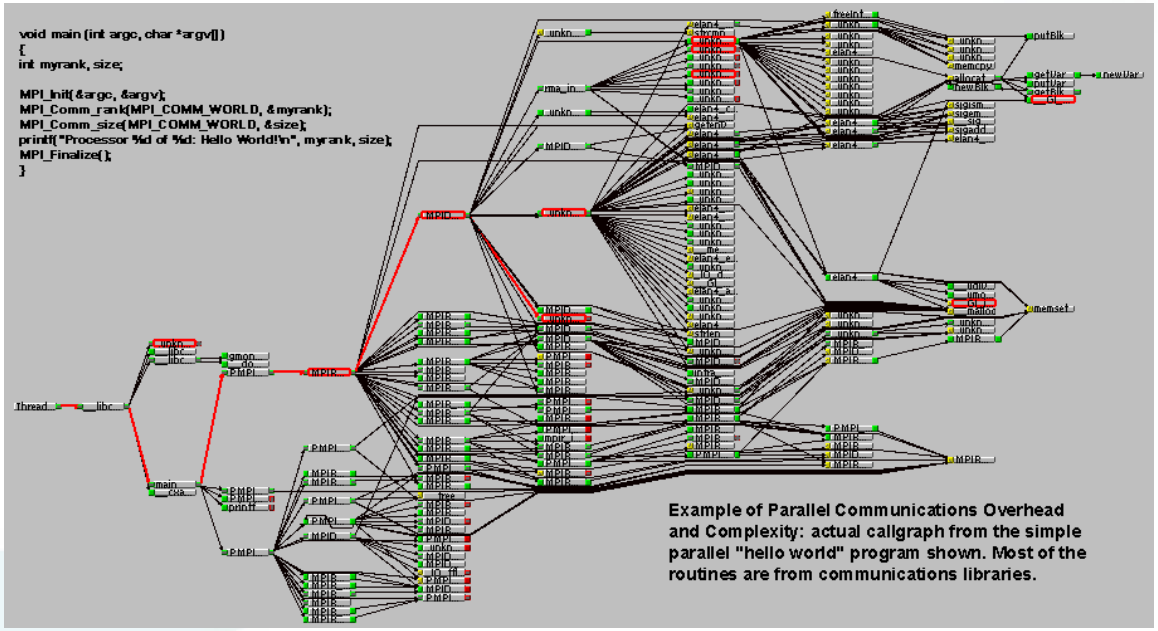
Párhuzamos (parallel) feldolgozás



Alapfogalmak (5/1)

Párhuzamosítási „költség” (Parallel Overhead)

- Feladat elindítása
- Szinkronizáció
- Kommunikáció
- Szoftver „költség” (párhuzamosítási nyelv, matematikai könyvtár, stb.)
- Feladat befejezése



Alapfogalmak (5/2)

Komplexitás

Alapfogalmak (5/3)

Skálázódás

Több erőforrás, nagyobb sebesség

Elsősorban ezek befolyásolják :

- Hálózat (sávszélesség, késleltetés)
- Algoritmus
- Memória (sávszélesség, összesen mennyi memória / node)
- CPU órajel
- Matematikai könyvtár
- Fordító

Alapfogalmak (5/4)

Gyorsulás (speedup)

- Maximális gyorsulás (Amdahl törvény)

$$S(N) = \frac{1}{(1-P)+P/N}$$

$$S(8) = \frac{1}{(1-0)+0/8} = 1$$

$$S(8) = \frac{1}{(1-1)+1/8} = 8$$

$$S(8) = \frac{1}{(1-0{,}9)+0{,}9/8} = 4{,}706$$

P: párhuzamosítható kód (0-1), valós szám
S: nem párhuzamosítható kód (0-1), valós szám
N: processzor magok száma (1-), egész szám

Alapfogalmak (5/5)

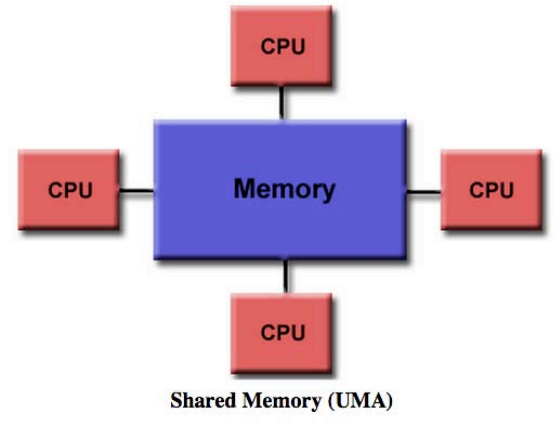
Portolhatóság

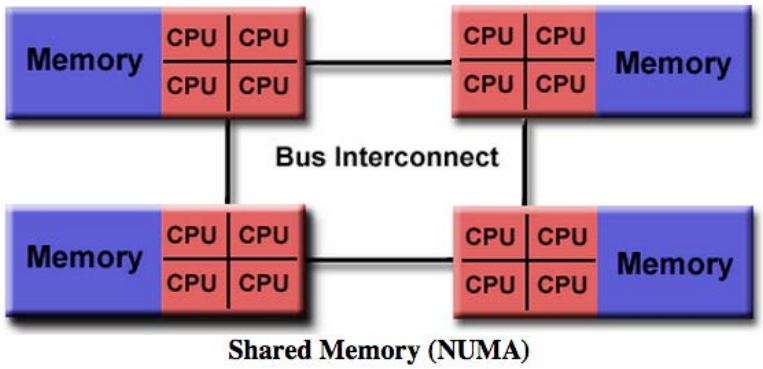
- Párhuzamos API-k (szabványok): MPI, POSIX threads, OpenMP, stb.
- Architektúra
- Operációs rendszer

Párhuzamosítási megoldások

Közös memóriás (Shared memory)

- POSIX threads
  - https://computing.llnl.gov/tutorials/pthreads
- OpenMP
  - https://computing.llnl.gov/tutorials/openMP

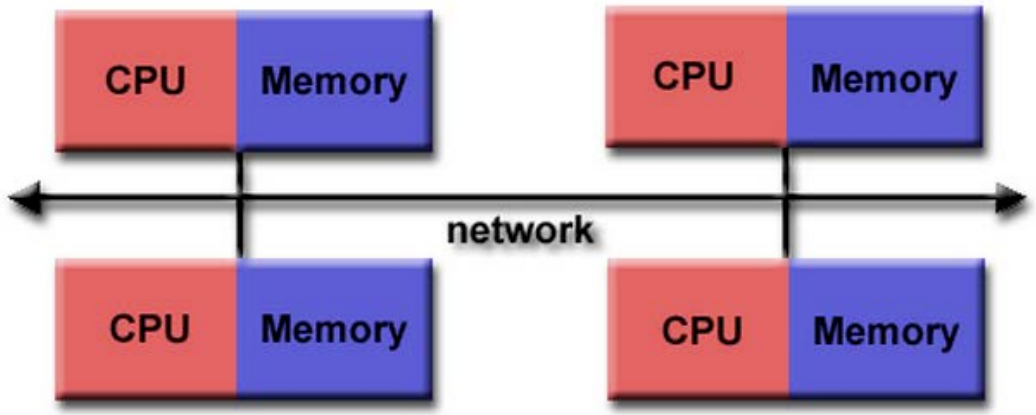




Párhuzamosítási megoldások

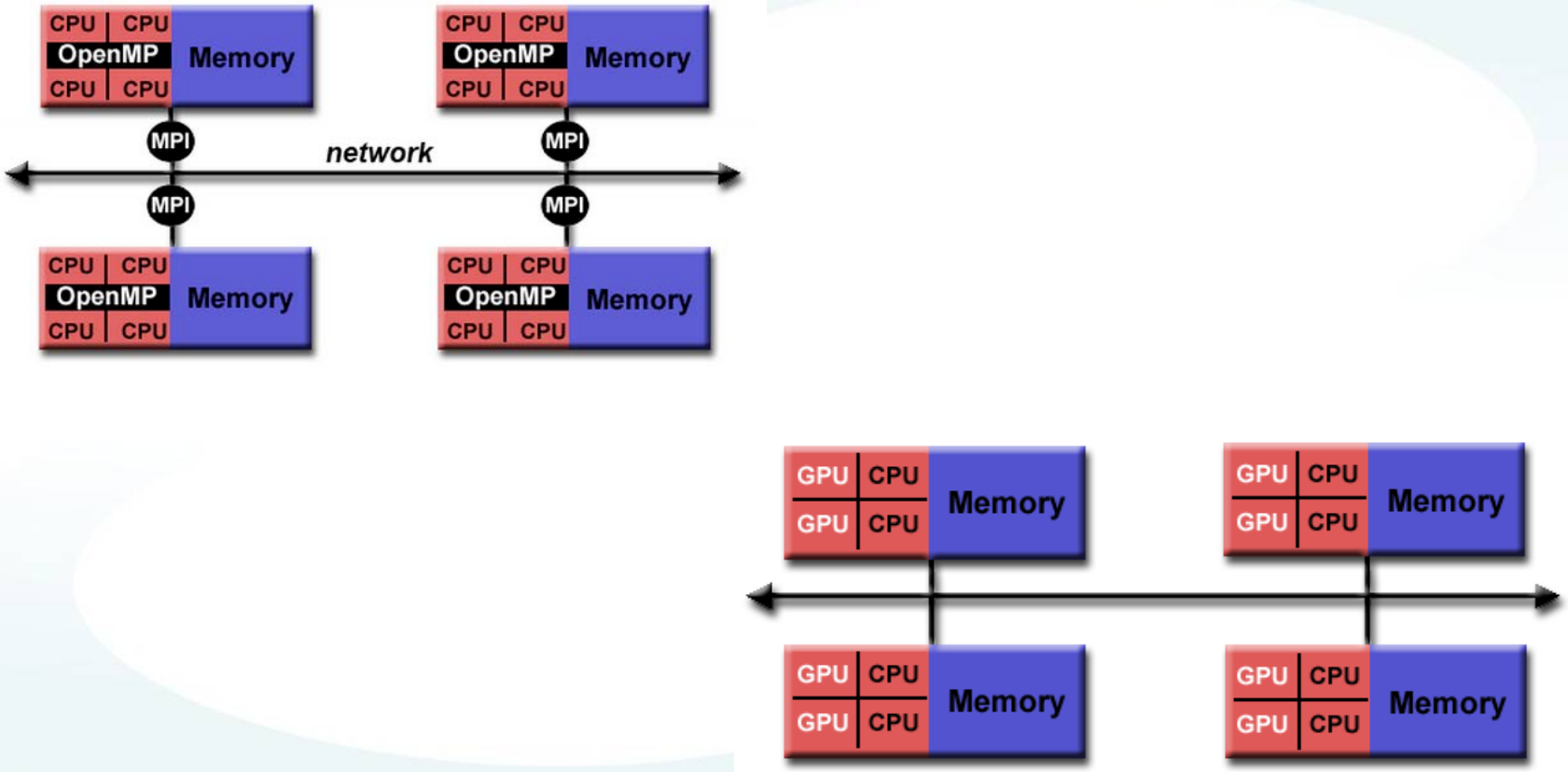
Elosztott memóriás (Distributed memory)

- MPI 1994
- MPI-2 1996
- MPI-3 2012
- https://computing.llnl.gov/tutorials/mpi



Párhuzamosítási megoldások

Hybrid model



Párhuzamosítás

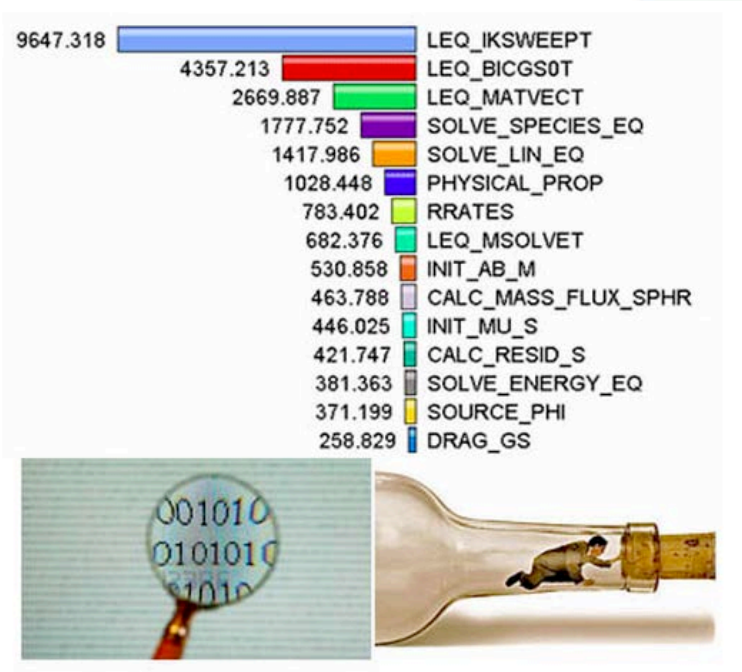
Automatikus

- A fordító analizálja a forráskódot
  - Nem biztos hogy jó lesz
  - Elsősorban ciklusok

Párhuzamosítás

Manuális

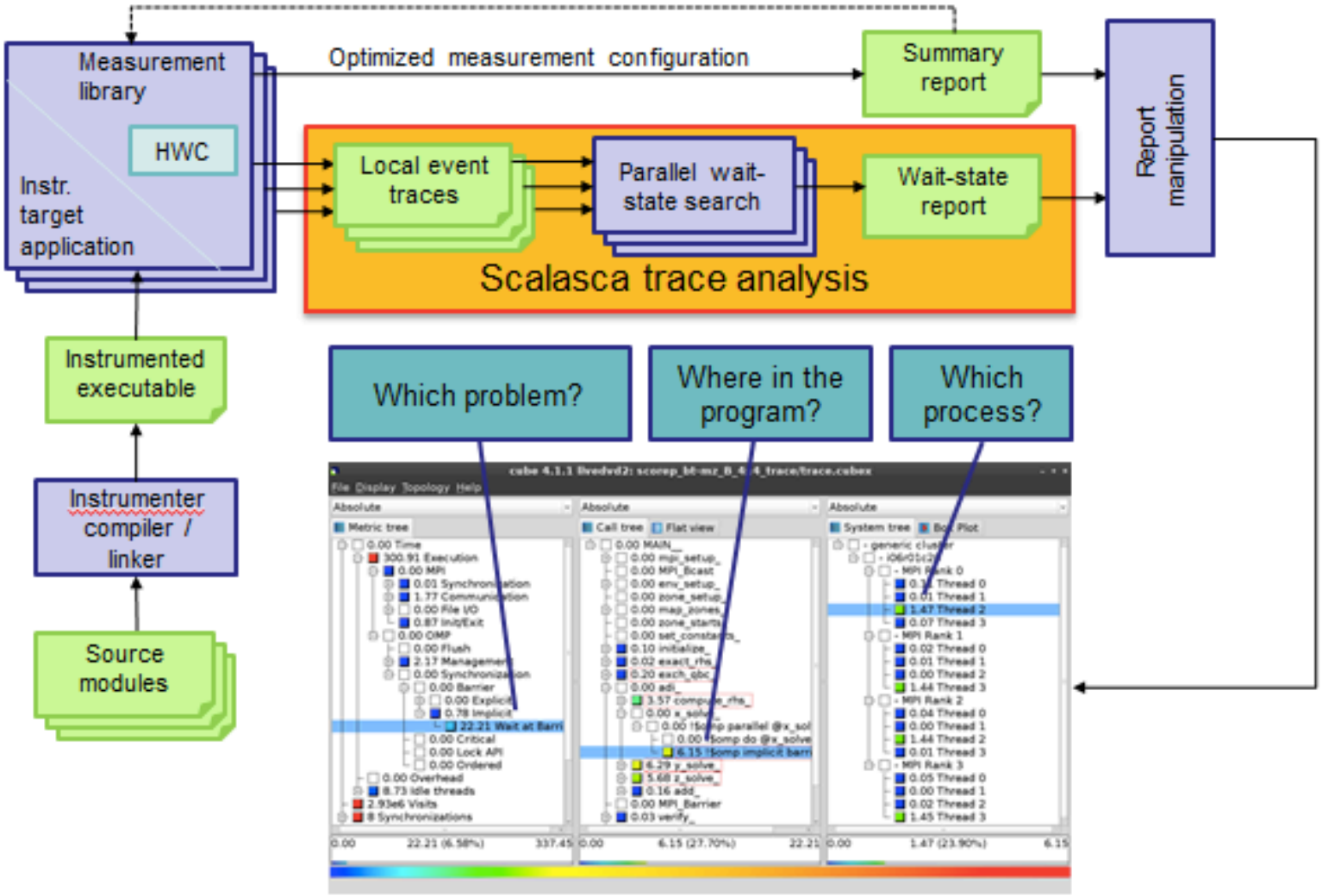
- Meg kell érteni azt a problémát amit meg szeretnénk oldani
- Meg kell találni a fontosabb részeket
  - Mi lassú?!
  - Miért lassú?!
  - I/O probléma?!
- Profiler programok segítenek
  - Képesek vagyunk szűrni



Scalasca profiler

- 1998 KOJAK projekt
- Jülich Supercomputing Centre
- German Research School for Simulation Sciences
- Futási adatok mérése, analizálása
- Több párhuzamosítás megoldást támogat
  - OpenMP, MPI, Hibrid
  - C, C++, Fortran
- Nyílt forráskódú, új BSD licensz
- Nagy rendszerekhez tervezték (több mint 1000 CPU core)
- Integrált mérés, instrumentation, analizálás, trace

Scalasca munkafolyamat



Scalasca használata (9/1)

Gyakorlati példa (Szegedi szuperszámítógépen)

```
SZEGED[loginnode] ~ (0)$ module load scalasca
```

/opt/nce/packages/global/scalasca/tutorial/NPB-MZ.tar.gz

http://www.training.prace-ri.eu/uploads/tx_pracetmo/BT-Tutorial-Scalasca.pdf

Scalasca használata (9/2)

```
SZEGED[loginnode] NPB3.3-MZ-MPI (1)$ diff -u config/make.def.orig
config/make.def
--- config/make.def.orig    2014-04-24 13:36:35.000000000 +0200
+++ config/make.def         2014-04-24 13:37:04.000000000 +0200
@@ -29,7 +29,7 @@
 #---------------------------------------------------------------------
 # This is the fortran compiler used for fortran programs
 #---------------------------------------------------------------------
-F77 = mpif77
+F77 = scalasca -instrument mpif77
 #F77 = mpiifort
 # This links fortran programs; usually the same as ${F77}
 FLINK    = $(F77)
SZEGED[loginnode] NPB3.3-MZ-MPI (1)$
```

Scalasca használata (9/3)

```
SZEGED[loginnode] NPB3.3-MZ-MPI (0)$ mkdir bin
SZEGED[loginnode] NPB3.3-MZ-MPI (0)$ make bt-mz CLASS=B NPROCS=4
  ========================================
  =     NAS PARALLEL BENCHMARKS 3.3      =
  =     MPI+OpenMP Multi-Zone Versions   =
  =     F77                              =
  ========================================

cd BT-MZ; make CLASS=B NPROCS=4 VERSION=
make[1]: Entering directory `/fs01/home/roczei/scalasca/NPB3.3-MZ-MPI/BT-MZ'
make[2]: Entering directory `/fs01/home/roczei/scalasca/NPB3.3-MZ-MPI/sys'
cc  -o setparams setparams.c -lm
make[2]: Leaving directory `/fs01/home/roczei/scalasca/NPB3.3-MZ-MPI/sys'
../sys/setparams bt-mz 4 B
make[2]: Entering directory `/fs01/home/roczei/scalasca/NPB3.3-MZ-MPI/BT-MZ'
scalasca -instrument mpif77 -c  -O3 -fPIC -fopenmp  bt.f

...

scalasca -instrument mpif77 -c  -O3 -fPIC -fopenmp  verify.f
scalasca -instrument mpif77 -c  -O3 -fPIC -fopenmp  mpi_setup.f
cd ../common; scalasca -instrument mpif77 -c  -O3 -fPIC -fopenmp  print_results.f
cd ../common; scalasca -instrument mpif77 -c  -O3 -fPIC -fopenmp  timers.f
scalasca -instrument mpif77 -O3 -fopenmp -o ../bin/bt-mz.B.4 bt.o  initialize.o exact_solution.o
exact_rhs.o set_constants.o adi.o  rhs.o zone_setup.o x_solve.o y_solve.o  exch_qbc.o solve_subs.o
z_solve.o add.o error.o verify.o mpi_setup.o ../common/print_results.o ../common/timers.o
INFO: Instrumented executable for OMP+MPI measurement
make[2]: Leaving directory `/fs01/home/roczei/scalasca/NPB3.3-MZ-MPI/BT-MZ'
make[1]: Leaving directory `/fs01/home/roczei/scalasca/NPB3.3-MZ-MPI/BT-MZ'
SZEGED[loginnode] NPB3.3-MZ-MPI (0)$
```

Scalasca használata (9/4)

```
SZEGED[loginnode] bin (0)$ cat job.sh
#!/bin/bash
#$ -pe mpi 16
#$ -q test.q

module load scalasca

OMP_NUM_THREADS=4 scalasca -analyze mpirun -np 4 ./bt-mz.B.4
SZEGED[loginnode] bin (0)$ qsub job.sh
Your job 722071 ("job.sh") has been submitted
SZEGED[loginnode] bin (0)$
```

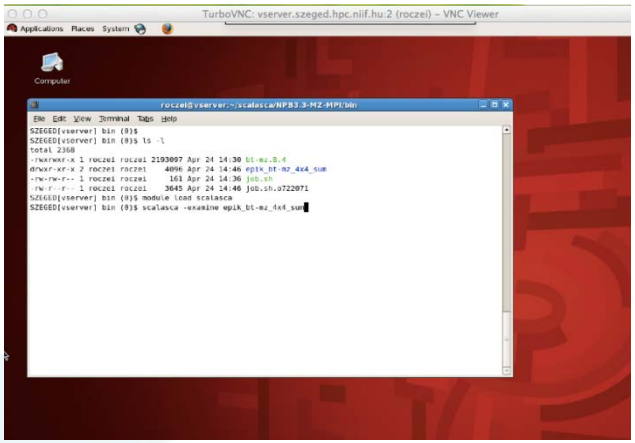
Scalasca használata (9/5)

```
SZEGED[loginnode] bin (0)$ head -n 15 job.sh.o722071
S=C=A=N: Scalasca 1.4.3 runtime summarization
S=C=A=N: ./epik_bt-mz_4x4_sum experiment archive
S=C=A=N: Thu Apr 24 14:43:58 2014: Collect start
/opt/nce/packages/global/openmpi/1.6.3-gcc-4.7.2/bin/mpirun -np 4
/home/roczei/scalasca/NPB3.3-MZ-MPI/bin/bt-mz.B.4
[00000.0]EPIK: Created new measurement archive ./epik_bt-
mz_4x4_sum
[00000.0]EPIK: Activated ./epik_bt-mz_4x4_sum [NO TRACE] (0.225s)
[00000.0]EPIK: MPI-2.1 initialized 4 ranks


 NAS Parallel Benchmarks (NPB3.3-MZ-MPI) - BT-MZ MPI+OpenMP
Benchmark

 Number of zones:   8 x   8
 Iterations: 200    dt:   0.000300
 Number of active processes:     4

SZEGED[loginnode] bin (0)$
```

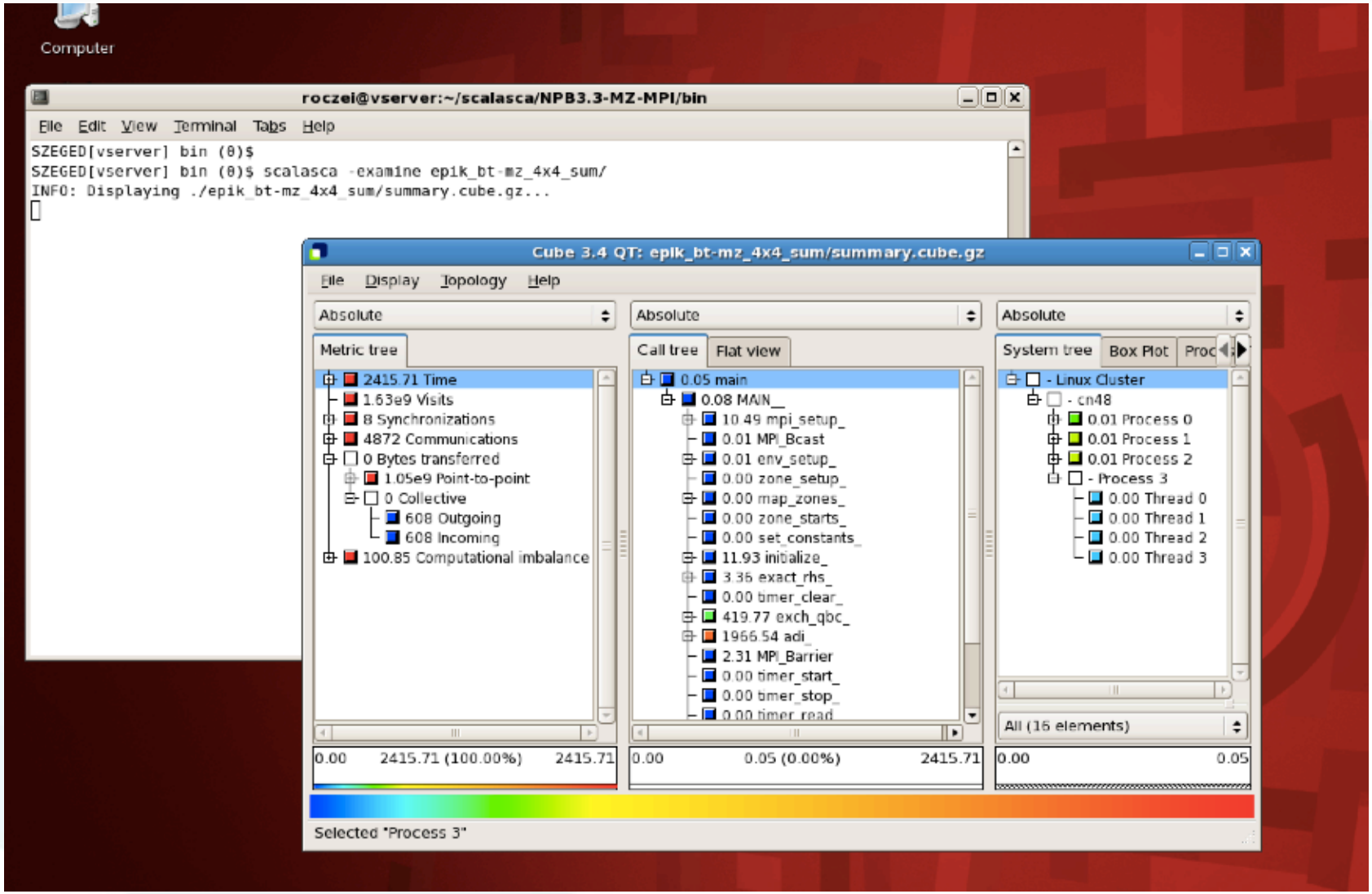
Scalasca használata (9/6)

TurboVNC használata: http://www.niif.hu/node/674

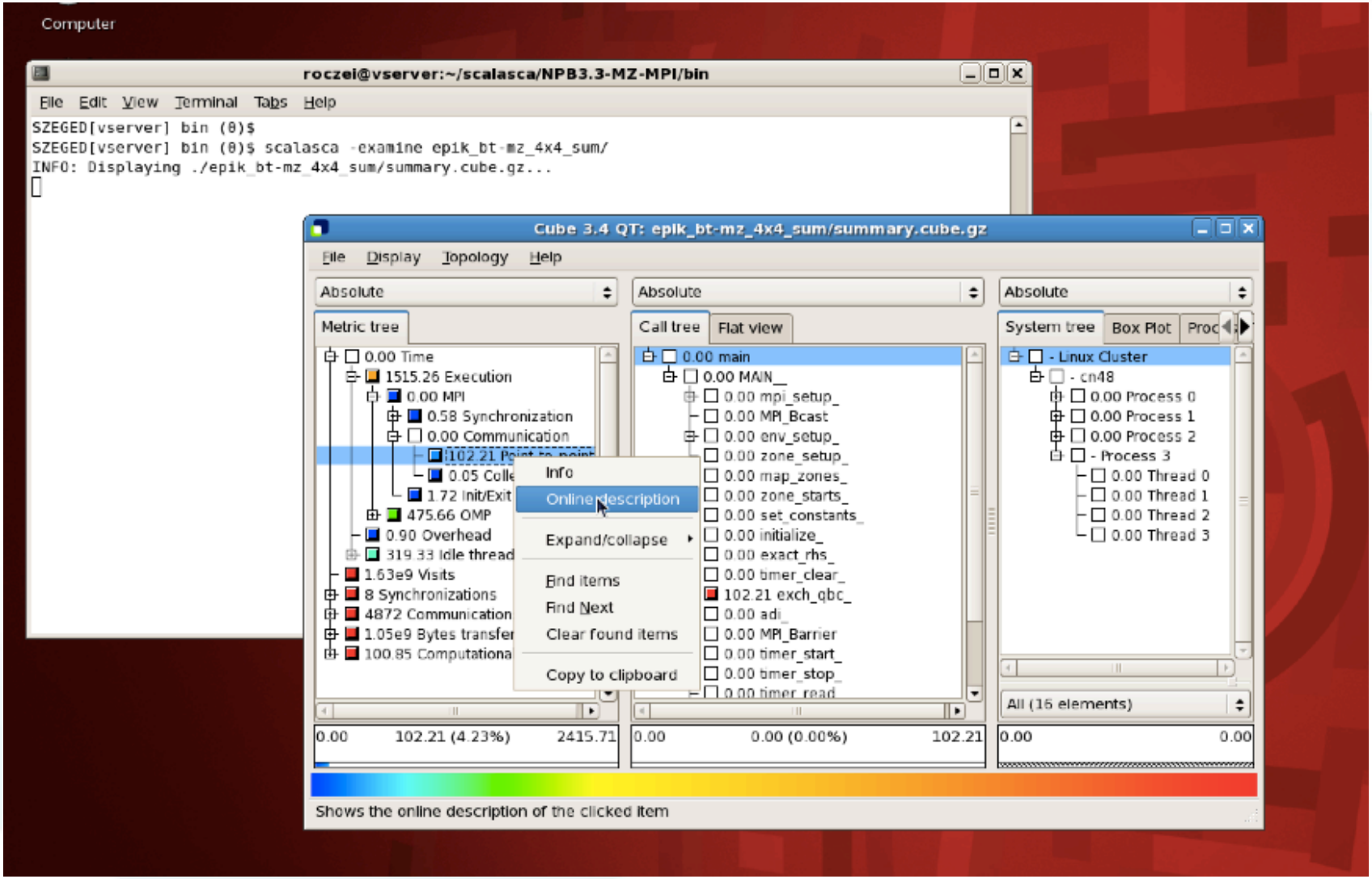
```
SZEGED[vserver] bin (0)$ ls -l
total 2368
-rwxrwxr-x 1 roczei roczei 2193097 Apr 24 14:30 bt-mz.B.4
drwxr-xr-x 2 roczei roczei    4096 Apr 24 14:46 epik_bt-mz_4x4_sum
-rw-rw-r-- 1 roczei roczei     161 Apr 24 14:36 job.sh
-rw-r--r-- 1 roczei roczei    3645 Apr 24 14:46 job.sh.o722071
SZEGED[vserver] bin (0)$ module load scalasca
SZEGED[vserver] bin (0)$ scalasca -examine epik_bt-mz_4x4_sum
```



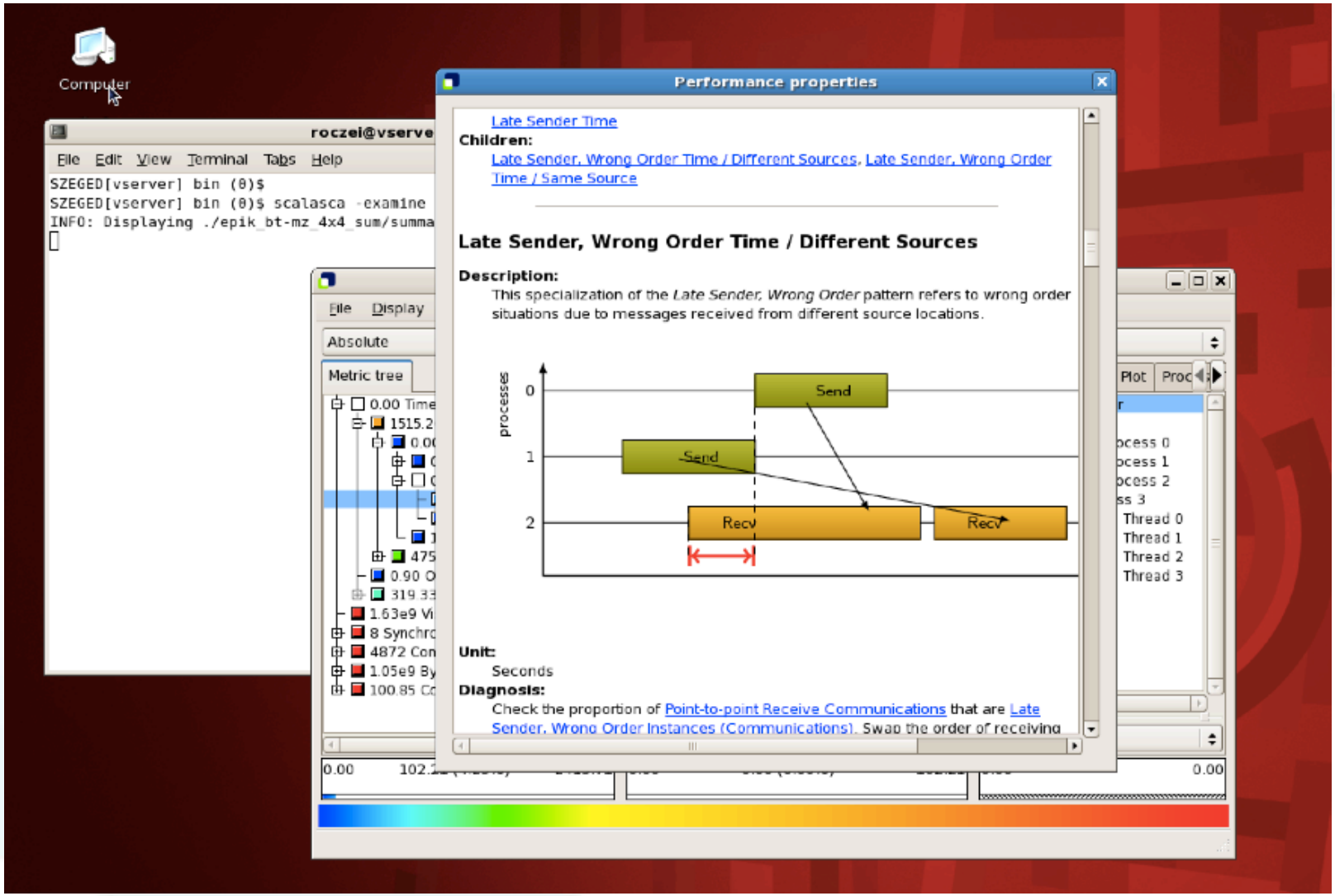
Scalasca használata (9/7)



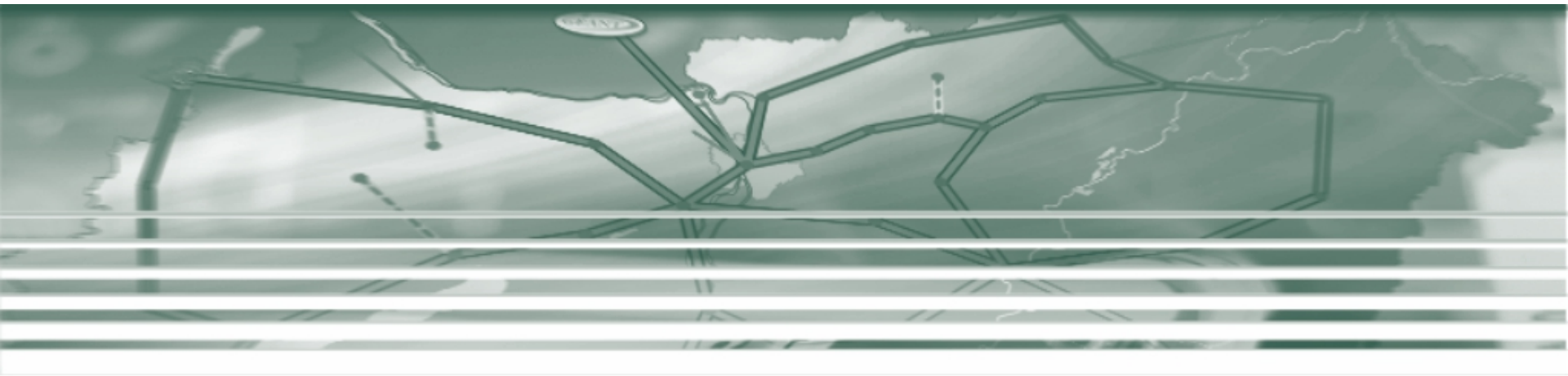
Scalasca használata (9/8)



Scalasca használata (9/9)



Köszönöm a figyelmet!



Rőczei Gábor
roczei@niif.hu