

Ετήσια Τεχνική Έκθεση

Έτος 2012



ΘΑΛΗΣ – Πολυτεχνείο Κρήτης

Πλατφόρμα προηγμένων μαθηματικών μεθόδων και λογισμικού για την επίλυση προβλημάτων πολλαπλών πεδίων (multi physics, multidomain) σε σύγχρονες υπολογιστικές αρχιτεκτονικές: Εφαρμογή σε προβλήματα Περιβαλλοντικής Μηχανικής και Ιατρικής (MATENVMED- MIS 379416)

Δράση 3.1

Υλοποίηση σε Παράλληλες Αρχιτεκτονικές



Περιεχόμενα

| | | |
|----------|--|-----------|
| 1 | Σκοπός | 3 |
| 2 | Μεθοδολογία | 3 |
| 2.1 | Έρευνα Πεδίου | 3 |
| 2.2 | Ανασκόπηση Αρχιτεκτονικών Clusters | 4 |
| 2.3 | Δοκιμαστική εγκατάσταση και λειτουργία πλατφόρμας FEniCS | 7 |
| 3 | Παραδοτέα | 9 |
| 4 | Συνεργασίες | 9 |
| 5 | Μελλοντικές Δράσεις | 10 |

1 Σκοπός

2 Μεθοδολογία

Κατά το παραπάνω χρονικό διάστημα έγινε ανασκόπηση της διεθνούς βιβλιογραφίας και μελέτη των μεθόδων επίλυσης προβλημάτων πολλαπλού πεδίου (Multi Domain) προκειμένου τα μέλη της ΚΕΟ3 να αποκτήσουν το απαραίτητο θεωρητικό υπόβαθρο κατανόησης των αριθμητικών μεθόδων επίλυσης του προβλήματος, οι οποίες θα υλοποιηθούν στα παραπάνω περιβάλλοντα. Επίσης, μελετήθηκαν οι μέθοδοι Collocation και Μετασχηματισμού Φωκά.

Ακολούθησε η ανασκόπηση λογισμικού ανοικτού (ελεύθερου) κώδικα (Open Source) αφενός για γλώσσες προγραμματισμού για παράλληλη υλοποίηση και αφετέρου για πλατφόρμες λογισμικού, που διαθέτουν υλοποιημένα εργαλεία για επίλυση PDEs και άλλες αριθμητικές μεθόδους.

2.1 Έρευνα Πεδίου

Καθώς ο παραλληλισμός σε διαφορετικά επίπεδα υπάρχει σχεδόν παντού στους σημερινούς υπολογιστές, κρίθηκε αναγκαία μια ανασκόπηση των ποικίλων μοντέλων για παράλληλο υπολογισμό, τα οποία έχουν εξελιχθεί τα τελευταία χρόνια. Ένα μοντέλο παράλληλου υπολογισμού αποτελείται από ένα μοντέλο παράλληλου προγραμματισμού και ένα αντίστοιχο μοντέλο κόστους [1]. Το μοντέλο παράλληλου προγραμματισμού περιγράφει μια θεωρητική παράλληλη μηχανή με τις βασικές λειτουργίες της (όπως αριθμητικούς υπολογισμούς, δημιουργία εργασιών, διάβασμα ή εγγραφή σε διαμοιρασμένη μνήμη και αποστολή και λήψη μηνυμάτων και ένα μοντέλο μνήμης, το οποίο περιγράφει πως και πότε η προσπέλαση στη μνήμη μπορεί να γίνει ορατή στα διαφορετικά τμήματα ενός παράλληλου υπολογιστή. Το μοντέλο κόστους συσχετίζει ένα κόστος (το οποίο συνήθως περιγράφει το χρόνο παράλληλου υπολογισμού και την κατανάλωση πόρων) με κάθε βασική λειτουργία. Ένα μοντέλο παράλληλου προγραμματισμού συχνά συσχετίζεται με μία ή περισσότερες γλώσσες προγραμματισμού ή βιβλιοθήκες που υλοποιούν το μοντέλο.

Η ανασκόπηση της βιβλιογραφίας έδειξε ότι έχουν υλοποιηθεί δύο βασικές εκδόσεις στην παράλληλη εκτέλεση προγραμμάτων: Fork-Join Style (που επιτυγχάνει και Nested Parallelism) και SPMD style (Single program, multiple data).

Τα βασικά μοντέλα παράλληλου προγραμματισμού, για τα οποία υπάρχουν διαθέσιμες υλοποιήσεις ελεύθερου λογισμικού, είναι τα ακόλουθα: Parallel Random Access Machine, Unrestricted Message Passing, Asynchronous Shared Memory and Partitioned Global Address Space, Data Parallel Models, Task Parallel Models and Task Graphs.



Τέλος έχει αναπτυχθεί και υλοποιηθεί, μια πληθώρα από γλώσσες προγραμματισμού, για αρχιτεκτονικές παράλληλης επεξεργασίας, όπως η C*, Occam, PVM, HPF, Linda, αλλά και πολλές ερευνητικές προτάσεις όπως Orca, PCN, CC++, P3L, BSP language. Μεταξύ των γλωσσών ελεύθερου λογισμικού, είναι η OpenCL, η οποία έχει καθιερωθεί σαν το Open Standard για παράλληλο υπολογισμό σε ετερογενή συστήματα. Επίσης η OpenCL μπορεί να χρησιμοποιηθεί σε μια μεγάλη ποικιλία από πολύ-πύρνα συστήματα και έχει τη δυνατότητα κλιμάκωσης (scaling). Μια νέα γλώσσα παράλληλου προγραμματισμού είναι η ParaSail, που μοιάζει με μια τροποποίηση της Java ή της C#. Η διαφορά είναι ότι διαμερίζει αυτόματα ένα πρόγραμμα σε χιλιάδες άλλες εργασίες, οι οποίες μπορούν τότε να διαχυθούν σε διάφορους πυρήνες, ένα τέχνασμα που λέγεται *rico-threading*, το οποίο μεγιστοποιεί τον αριθμό των εργασιών που μπορούν να εκτελεστούν παράλληλα, ανεξάρτητα από τον αριθμό των πυρήνων. Η ParaSail κάνει επίσης αυτόματη αποσφαλμάτωση (debugging), που κάνει τον κώδικα πιο ασφαλής. Παρόλα αυτά είναι σχετικά νέα έκδοση και στην ανασκόπηση εντοπίστηκε ότι έχει ακόμη κάποια bugs.

Συνοψίζοντας, το μέλλον του υπολογισμού σε παράλληλα περιβάλλοντα υπογορεύεται από τις φυσικές και τεχνικές ανάγκες. Οι παράλληλοι υπολογιστές γίνονται περισσότερο υβριδικοί, συνδυάζοντας πολυνηματικό υλικό, πολλαπλούς πυρήνες, μονάδες SIMD, επιταχυντές και on-chip συστήματα επικοινωνίας.

Η τελική επιλογή του μοντέλου θα γίνει σε συνδυασμό με την πολυπλοκότητα των λύσεων του προβλήματος πολλαπλών πεδίων, αλλά και τη μεταφερσιμότητα σε περιβάλλοντα Clusters, GRIDS και Cloud Computing.

2.2 Ανασκόπηση Αρχιτεκτονικών Clusters

Ο συνδυασμός ιδεών από τα παράλληλα συστήματα, όπως η ομαδοποίηση πόρων υλικού (συχνά γενικού σκοπού), με έννοιες από τα κατανεμημένα συστήματα, όπως το αφαιρετικό μοντέλο περάσματος μηνυμάτων και η χρήση των υπολογιστικών δυνατοτήτων χαμηλού κόστους που προσφέρει η βιομηχανία των προσωπικών υπολογιστών και των δικτύων, οδήγησαν στην ανάπτυξη των clusters. Οι εμπορικές συστάδες σταθμών εργασίας και τα συστήματα της τάξης Beowulf αποτελούν σήμερα μια ταχύτατα αναπτυσσόμενη κατηγορία υπολογιστικών συστημάτων υψηλής επίδοσης.

Μία εμπορική συστάδα (commodity cluster) είναι ένα τοπικό υπολογιστικό σύστημα που αποτελείται από μία ομάδα ανεξάρτητων υπολογιστών και ένα δίκτυο που τους διασυνδέει. Μια συστάδα είναι τοπική, με την έννοια ότι όλα τα επί μέρους συστήματα που την αποτελούν επιτηρούνται εντός μιας διαχειριστικής περιοχής. Οι υπολογιστικοί αυτοί κόμβοι είναι εμπορικοί και άμεσα διαθέσιμοι (commercial off the shelf – COTS), και είναι ικανοί να λειτουργούν ανεξάρτητα και αυτόνομα για συνήθεις λειτουργίες. Ο κάθε κόμβος μπορεί να αποτελείται



είτε από έναν μικροεπεξεργαστή είτε από πολλούς σε μία συμμετρική πολυεπεξεργαστική σύνθεση (symmetric multiprocessor - SMP). Το διασυνδεδετικό δίκτυο χρησιμοποιεί εμπορικές και άμεσα διαθέσιμες τεχνολογίες δικτύων, τοπικών (local area network - LAN) ή περιοχές συστήματος (systems area network - SAN), οι οποίες απαρτίζουν πολλές ανεξάρτητες δικτυακές δομές ή μία ιεραρχία τέτοιων. Το δίκτυο του cluster ενοποιεί τους υπολογιστικούς του κόμβους και είναι διαχωρισμένο από το εξωτερικό του περιβάλλον.

Ένα cluster μπορεί να είναι ρυθμισμένο έτσι ώστε να εξυπηρετεί διάφορους σκοπούς, όπως υψηλή υπολογιστική επίδοση για την επίλυση ενός προβλήματος, υψηλή χωρητικότητα, διαμεταγωγή για ένα φορτίο διεργασιών, υψηλή διαθεσιμότητα (μέσω πλεονασμού κόμβων) ή υψηλό εύρος ζώνης (μέσω μεγάλου αριθμού δίσκων και καναλιών εισόδου/ εξόδου). Ένα σύστημα της τάξης Beowulf (Beowulf class system) είναι μία συστάδα με κόμβους οι οποίοι είναι προσωπικοί υπολογιστές ή μικροί συμμετρικοί πολυεπεξεργαστικοί προσωπικοί υπολογιστές, ενοποιημένοι με εμπορικά και άμεσα διαθέσιμα δίκτυα και διαθέτουν ένα λειτουργικό σύστημα ανά κόμβο, συνήθως ανοικτού κώδικα και τύπου Unix.

Στην πλειοψηφία των συστημάτων τέτοιου τύπου υπάρχει ένας κόμβος υπεύθυνος για την επαφή με τον υπόλοιπο κόσμο (front end node) μέσω του οποίου πραγματοποιείται και η πρόσβαση στους υπόλοιπους υπολογιστές. Μία πλειάδα (constellation) διαφέρει από μία εμπορική συστάδα στο γεγονός ότι ο αριθμός των επεξεργαστών στους συμμετρικούς πολυεπεξεργαστές των κόμβων υπερβαίνει τον αριθμό των συμμετρικών πολυεπεξεργαστών που αποτελούν το σύστημα, καθώς και στο γεγονός ότι το διασυνδεδετικό τους δίκτυο είναι πιθανά ειδικής τεχνολογίας και σχεδιασμού. Όταν οι διασυνδεδεμένοι υπολογιστές είναι σταθμοί εργασίας, τότε μιλάμε για Δίκτυο Σταθμών Εργασίας (Network Of Workstations - NOW). Τέλος, αναφερόμενοι στην χρήση υπολογιστικών πόρων διαθέσιμων μέσω του διαδικτύου μιλάμε για πλέγματα (grids) υπολογιστών

Πλεονεκτήματα και μειονεκτήματα των clusters

Λαμβάνοντας υπ' όψιν τις παραδοσιακές προσεγγίσεις από τους χώρους της παράλληλης επεξεργασίας και των παράλληλων αρχιτεκτονικών μπορούμε να εντοπίσουμε αρκετά μειονεκτήματα των clusters [2]. Από την εμπειρία μας, έχουμε διαπιστώσει πόσο κρίσιμοι παράγοντες είναι η καθυστέρηση και το εύρος ζώνης του διασυνδεδετικού δικτύου, πόσο χρήσιμη είναι η κοινόχρηστη μνήμη και πόσο αναγκαίο το ελαφρύ λογισμικό ελέγχου. Σε αυτά τα σημεία, τα clusters υστερούν συγκριτικά με τα συμβατικά παράλληλα συστήματα, όπου το διασυνδεδετικό δίκτυο είναι υψηλότερων επιδόσεων, η κοινή μνήμη, ο καθολικός συγχρονισμός και η διατήρηση της συνοχής της κρυφής μνήμης υλοποιούνται με υλικό, υπερτερώντας σε σχέση με την αντίστοιχη υλοποίηση με λογισμικό, ενώ τέλος το ειδικού τύπου λογισμικό που μπορεί να ελέγχει κάθε κόμβο καταναλώνει λιγότερη μνήμη και αντιδρά πιο γρήγορα από το πλήρες και αυτόνομο



λειτουργικό σύστημα που ελέγχει κάθε κόμβο του cluster. Λόγω των παραπάνω μειονεκτημάτων, τα clusters αποδεικνύονται ακατάλληλα για ορισμένες εφαρμογές. Σε πολλές ωστόσο περιπτώσεις, χρησιμοποιώντας νέες αλγοριθμικές τεχνικές που δεν εξαρτώνται τόσο από την γρήγορη επικοινωνία των κόμβων, τα clusters μπορούν να ανταγωνιστούν σε επιδόσεις παράλληλα συστήματα πολύ υψηλότερου κόστους. Το σημαντικότερο πλεονέκτημα των clusters είναι ότι χρησιμοποιούνται τεχνολογίες υλικού και λογισμικού ευρείας χρήσης. Τόσο τα δίκτυα σταθμών εργασίας, όσο και οι συστάδες προσωπικών υπολογιστών της τάξης Beowulf άνθισαν διότι δεν απαιτούσαν δαπανηρά και μακροπρόθεσμα σχέδια μέχρι να αρχίσουν να αποδίδουν. Το χαρακτηριστικό αυτό οδηγεί προφανώς και σε ένα σαφές πλεονέκτημα κόστους. Συνεπώς ο λόγος κόστους προς απόδοση των clusters μπορεί να υπερτερεί του αντίστοιχου των παραδοσιακών υπερυπολογιστών για εφαρμογές που δεν απαιτούν επικοινωνία υψηλού εύρους ζώνης και χαμηλής καθυστέρησης.

Ένα άλλο σημείο υπεροχής των εμπορικών συστάδων υπολογιστών σε σχέση με τις κλασικές παράλληλες μηχανές, είναι η ευελιξία και η παραμετροποιησιμότητά τους. Ο αριθμός των κόμβων, η χωρητικότητα μνήμης ανά κόμβο, ο αριθμός των επεξεργαστών ανά κόμβο και η τοπολογία του διασυνδεδεμένου δικτύου είναι δομικές παράμετροι που μπορούν να καθοριστούν με μεγάλη λεπτομέρεια και για κάθε cluster ξεχωριστά. Επιπλέον, η δομή του συστήματος μπορεί να αλλάξει ή να επεκτείνεται αξιοποιώντας την ήδη υπάρχουσα υποδομή. Ο εκτεταμένος αυτός έλεγχος στη δομή του συστήματος ωφελεί τόσο τους χρήστες, που μπορούν να έχουν κάθε στιγμή αυτό που επιθυμούν, όσο και τους κατασκευαστές, που μπορούν να καλύπτουν ένα ευρύ φάσμα απαιτήσεων επιδόσεων ή κόστους.

Τέλος, οι εμπορικές συστάδες υπολογιστών μπορούν να ενσωματώνουν γρήγορα τεχνολογικές εξελίξεις που χρησιμοποιούνται μαζικά. Νέοι τύποι επεξεργαστών, μνημών, δίσκων και δικτύων κατασκευάζονται διαρκώς για τους προσωπικούς υπολογιστές, επιτρέποντας και στα clusters να επωφελούνται από τις προόδους αυτές. Τα clusters επιπλέον επωφελούνται από πτώσεις τιμών λόγω της μαζικής παραγωγής των εξαρτημάτων προσωπικών υπολογιστών. Συνολικά θα λέγαμε ότι αν και τα clusters υπολογιστών δεν επιτυγχάνουν πάντα επιδόσεις αντάξιες κορυφαίων παράλληλων μηχανών, το χαμηλό τους κόστος και η ευελιξία που προσφέρουν τα καθιστά σαφώς ανταγωνιστικά.

Cluster of blades

Ένας blade server [3],[4] είναι ένας απογυμνωμένος server με τμηματική σχεδίαση βελτιστοποιημένος για να ελαχιστοποιήσει τη χρήση φυσικού χώρου και ενέργειας. Ενώ ένας τυπικός rack-mount server μπορεί να λειτουργήσει τουλάχιστον με ένα καλώδιο ρεύματος και ένα καλώδιο ισχύος, στους blade servers έχουν αφαιρεθεί πολλά συστατικά για να εξοικονομήσουν χώρο, να ελαχιστοποιήσουν την κατανάλωση ισχύος, αλλά εξακολουθούν να έχουν όλα εκείνα τα



λειτουργικά συστατικά για να θεωρούνται υπολογιστές. Ένα blade enclosure που μπορεί να στηρίζει πολλαπλούς blade servers παρέχει υπηρεσίες, όπως ρεύμα, ψύξη, δικτύωση και διαχείριση.

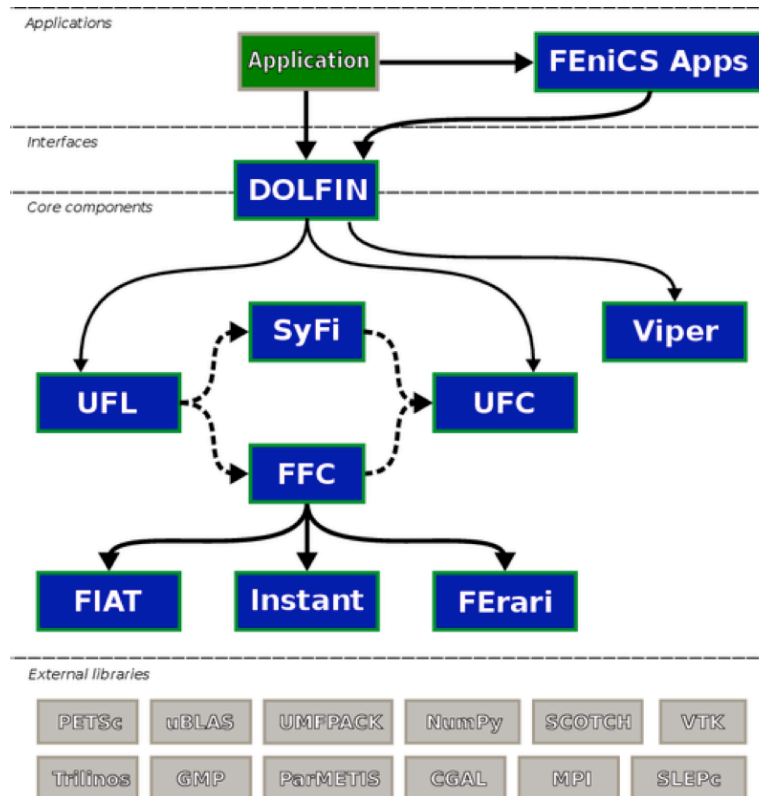
2.3 Δοκιμαστική εγκατάσταση και λειτουργία πλατφόρμας FEniCS

Το project FEniCS [5] είναι μια συλλογή από δωρεάν, ανοιχτού κώδικα, στοιχεία λογισμικού με κοινό στόχο να καταστεί δυνατή αυτοματοποιημένη επίλυση των διαφορικών εξισώσεων. Τα στοιχεία που το απαρτίζουν παρέχουν εργαλεία επιστημονικού υπολογισμού για εργασία με υπολογιστικά πλέγματα, πεπερασμένων στοιχείων μεταβολικές διατυπώσεις για διαφορικές εξισώσεις και μερικές διαφορικές εξισώσεις καθώς επίσης για αριθμητική γραμμική άλγεβρα. Η τρέχουσα σταθερή έκδοση του FEniCS Project είναι η 1.1 η οποία και κυκλοφόρησε τον 7 Ιανουαρίου του 2013. Το FEniCS project έχει σχεδιαστεί ως ένα έργο ομπρέλα για μια συλλογή των διαλειτουργικών συστατικών. Τα βασικά στοιχεία είναι :

- **UFL (Unified Form Language)**, μια γλώσσα προγραμματισμού η οποία είναι ειδικά σχεδιασμένη για έναν συγκεκριμένο τομέα προβλημάτων η οποία έχει ενσωματωθεί στην γλώσσα προγραμματισμού Python και η οποία καθορίζει πεπερασμένα στοιχεία διακριτοποίησης των διαφορικών εξισώσεων σε όρους των πεπερασμένων στοιχείων μεταβλητών τύπων.
- **FIAT (Finite Element Automatic Tabulator)**, μια βιβλιοθήκη Python για την αυτόματη σηλοθέτηση λειτουργιών πεπερασμένων στοιχείων βάσης που εφαρμόζονται σε πολυωνυμικούς χώρους μίας, δύο ή τριών διαστάσεων. Η FIAT παράγει τετραγωνισμένα σημεία τυχαίας σειράς στο πλεγμα αναφοράς και στοιχειοθετεί τις λειτουργίες βάσης και τα αποτελέσματα τους σε οποιοδήποτε δεδομένο ζευγάρι σημείων.
- **FFC (FEniCS Form Compiler)**, ένας μεταγλωττιστής για πεπερασμένων στοιχείων μεταβλητούς τύπους που δέχεται σαν είσοδο κώδικα σε UFL και παράγει UFC έξοδο.
- **UFC (Unified Form-assembly Code)**, μια διεπαφή C++ η οποία και αποτελείται από χαμηλού επιπέδου λειτουργίες για την αξιολόγηση και την δημιουργία πεπερασμένων στοιχείων μεταβλητών τύπων.
- **Instant**, ένα στοιχείο της Python για να ενσωματώνεται C και C++ κώδικας στην γλώσσα προγραμματισμού Python.
- **DOLFIN**, μια C++/Python βιβλιοθήκη η οποία παρέχει δομές δεδομένων και αλγορίθμους για πεπερασμένων στοιχείων πλέγματα, αυτόματη δημιουργία πεπερασμένων στοιχείων και αριθμητική γραμμική άλγεβρα.



Η DOLFIN λειτουργεί ως το κύριο περιβάλλον επίλυσης προβλημάτων και διεπαφή χρήστη. Η λειτουργία της ενσωματώνει τα άλλα συστατικά του FEniCS και διαχειρίζεται την επικοινωνία με τις εξωτερικές βιβλιοθήκες όπως η PETSc, Trilinos, MTL4, και uBLAS για αριθμητική γραμμική άλγεβρα, ParMETIS και SCOTCH για τον διαμερισμό πλεγμάτων και MPI και OpenMP για κατανομημένα συστήματα πληροφορικής.



Αυτόματη εγκατάσταση με την χρήση του Dodsai

Το DORSAL είναι ένα απλό πρόγραμμα το οποίο αυτοματοποιεί την διαδικασία της ανάκτησης, μεταγλώττισης και εγκατάστασης των πολλών υπο-εργών του FEniCS και τις αλληλεπιδράσεις τους σε UNIX λειτουργικά συστήματα. Οι ακόλουθες πλατφόρμες υποστηρίζονται από το Dorsal:

- Debian GNU/Linux 6.0, Unstable
- Fedora 13, 14, 15
- Gentoo Linux
- Mac OS X 10.6, 10.7 (with MacPorts)



- openSUSE 11.3, 11.4
- Red Hat Enterprise Linux 6
- Ubuntu 10.04 LTS, 10.10, 11.04, 11.10

Για να γίνει η εγκατάσταση του FEniCS με την χρήση του DORSAL απλώς πρέπει να ακολουθηθούν τα εξής βήματα:

1. Να προμηθευτούμε με την πιο πρόσφατη έκδοση του DORSAL από την ακόλουθη σελίδα download page.
2. Αποσυμπίεση του αρχείου σε μια αξιόπιστη τοποθεσία.
3. Προσπέλαση του φακέλου αυτού και τροποποίηση του dorsal.cfg.
4. Ξεκινήστε την διαδικασία για την δημιουργία με την ακόλουθη εντολή: `./dorsal.sh`
5. Σε αυτό το σημείο το DORSAL αναγνωρίζει το λειτουργικό σύστημα και παρέχει μια λίστα από εντολές για να επιβεβαιώσουμε πως το σύστημα είναι έτοιμο για να γίνει εγκατάσταση το FEniCS
6. Όταν έχουν ολοκληρωθεί αυτά τα βήματα τότε μπορεί να ξεκινήσει η εγκατάσταση.

Με το που ξεκινήσει η διαδικασία τότε θα εμφανίζονται σε διάφορα σημεία κείμενα σχετικά με την μεταγλώττιση τα οποία και θα πρέπει να ακολουθήσουμε για να έχουμε μια σωστή εγκατάσταση του FEniCS.

3 Παραδοτέα

Η παρούσα Ετήσια Τεχνική Έκθεση του Προγράμματος που αφορά τη Δράση 3.1 για το έτος 2012.

4 Συνεργασίες

Η τρέχουσα δραστηριότητα απασχόλησε όλα τα μέλη και τους συνεργάτες της ΚΕΟ 3.



5 Μελλοντικές Δράσεις

Επεξεργασία μαθηματικών μεθόδων, και ιδιαίτερος μεθόδων Επαναληπτικής Χαλάρωσης στις Διεπαφές, για απεικόνιση και υπολογισμό σε παράλληλες αρχιτεκτονικές.

Αναφορές

- [1] C. Kessler and J. Keller, *Models for Parallel Computing: Review and Perspectives*, PARS – Mitteilungen 24:Dec.2007, ISSN 0177-0454, GI/ITG PARS.
- [2] M. Baker, A. Apon, R. Bayya and H. Jin, " Cluster Computing and Applications", 2000, <http://www.buyya.com/papers/encyclopedia.pdf>.
- [3] <http://searchdatacenter.techtarget.com/definition/server-blade>.
- [4] <http://searchitchannel.techtarget.com/feature/Using-blade-servers-for-virtualization-clustering>.
- [5] <http://http://fenicsproject.org>.

