

Bibliotheken

Hochleistungs-Ein-/Ausgabe

Michael Kuhn

Wissenschaftliches Rechnen
Fachbereich Informatik
Universität Hamburg

2016-05-27

- 1 Bibliotheken
 - Orientierung
 - Einführung
 - SIONlib
 - NetCDF
 - HDF
 - ADIOS
 - Leistungsbetrachtung
 - Zusammenfassung

- 2 Quellen

Überblick...

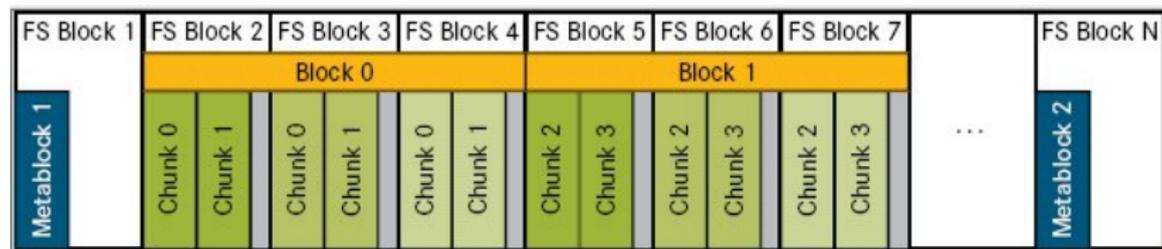


Abbildung: SIONlib-Dateiformat [2]

- Metablock 1: Statische Metadaten (beim Öffnen geschrieben)
- Metablock 2: Dynamische Metadaten (beim Schließen geschrieben)
- Jeder Block enthält Daten eines Prozesses (unterteilt in Chunks)

- `numfiles` gibt die Anzahl der zu verwendenden Dateien an (-1 für automatische Bestimmung)
- `chunksize` gibt die maximale Größe eines Schreibaufrufs an
- `fsblocksiz` gibt die Größe eines Dateisystemblocks/-streifens an (-1 für automatische Bestimmung)

Datenformate

- Es existieren drei Formate
 - 1 Klassisches Format (CDF-1)
 - 2 Klassisches Format mit 64-Bit-Offsets (CDF-2)
 - 3 NetCDF-4-Format
- Datenformate sind offene Standards
- Klassisches und 64-Bit-Format sind internationale Standards des Open Geospatial Consortiums

Datenformate...

- Das klassische und 64-Bit-Format sind eigenständig
 - NetCDF-4 nutzt HDF5
- Mehrere Optionen für parallele E/A
 - NetCDF-4 unterstützt parallele E/A für NetCDF-4-Dateien
 - Parallele E/A für das klassische und 64-Bit-Format mit aktuellen NetCDF-Versionen (4.1.1+) oder Parallel-NetCDF
- Parallel-NetCDF hat eine inkompatible Schnittstelle

Funktionsweise

- 1 Datei anlegen mit `nc_create`
 - Paralleler Zugriff mit `nc_create_par`
- 2 Dimensionen definieren mit `nc_def_dim`
- 3 Gruppen definieren mit `nc_def_grp`
- 4 Variablen definieren mit `nc_def_var`
- 5 Attribute schreiben mit `nc_put_att_*`
- 6 Variablen schreiben mit `nc_put_var_*`
- 7 Datei schließen mit `nc_close`

Funktionsweise...

- Lesen unterscheidet zwei Fälle
 - 1 Dateistruktur ist bekannt
 - 2 Dateistruktur ist unbekannt
- 1 Öffnen der Datei mit `nc_open`
 - Paralleler Zugriff mit `nc_open_par`
- 2 Gruppen-IDs auslesen mit `nc_inq_ncid`
- 3 Variablen-IDs auslesen mit `nc_inq_varid`
- 4 Variablen auslesen mit `nc_get_var`
- 5 Datei schließen mit `nc_close`

Funktionsweise...

- Unterschiedliche Modi
 - Nach dem Anlegen im Define Mode
 - Nach dem Öffnen im Data Mode
- Bei NetCDF-4 automatischer Moduswechsel
 - Ansonsten `nc_redef` bzw. `nc_enddef` notwendig
- Data Mode erlaubt das Speichern von Daten

Funktionsweise...

- Define Mode erlaubt das Ändern der Dateistruktur
 - Hinzufügen von Dimensionen, Attributen und Variablen
- Einige Einstellungen nur direkt nach Definition änderbar
 - Unter anderem Kompression, Byte-Reihenfolge, Fehlerkorrektur und Füllwert

Parallel-NetCDF

- Alternativer Ansatz für parallele E/A
 - Unterstützt das klassische und 64-Bit-Formate
- Entwickelt durch Northwestern University und Argonne National Laboratory
 - Teilweise dieselben Entwickler wie MPI-IO und OrangeFS
- Schnittstelle ist inkompatibel
 - NetCDF-4 kann aber Parallel-NetCDF nutzen

Überblick

- Besteht aus Dateiformaten und Bibliotheken
 - Erlaubt Verwaltung selbstbeschreibender Daten
- Aktuelle Version ist HDF5
 - HDF4 wird immer noch aktiv unterstützt
- Probleme mit Vorversionen
 - Komplizierte API
 - Einschränkungen wie z.B. 32-Bit-Adressierung

Überblick

- Unterstützt Gruppen und Datensätze
 - Datensätze speichern Daten
 - Gruppen strukturieren den Namensraum
 - Analog zu Dateien und Verzeichnissen
- Gruppen können Datensätze und Gruppen enthalten
 - Hierarchischer Namensraum
- Attribute für Datensätze und Gruppen
 - Beispielsweise Minimum und Maximum

Überblick...

- Objekte werden über POSIX-ähnliche Pfade zugegriffen
 - Beispielsweise `/path/to/dataset`
 - Pfad kann Informationen über Daten enthalten
- HDF-Dateien sind selbstbeschreibend
 - Können ohne vorheriges Wissen über Struktur und Inhalt geöffnet und interpretiert werden

Überblick...

- Datensätze können mehrdimensionale Arrays eines Basisdatentypen speichern
 - Integer, Float, Character, Bitfield, Opaque, Enumeration, Reference, Array, Variable-length, Compound
- Datensätze haben Eigenschaften
 - Größe, Genauigkeit, Byte-Reihenfolge etc.
- Beliebig viele unbeschränkte Dimensionen

Sprachspezifische Datenspeicherung

- Sprachspezifische Datenspeicherung
 - Daten werden nach C-Konvention zeilenweise gespeichert
 - Fortran-Daten werden automatisch umgewandelt

1	2	3
4	5	6
7	8	9

Abbildung: 3x3-Matrix

1	2	3	4	5	6	7	8	9
---	---	---	---	---	---	---	---	---

(a) C-Speicherlayout

1	4	7	2	5	8	3	6	9
---	---	---	---	---	---	---	---	---

(b) Fortran-Speicherlayout

Chunking

- Chunking erlaubt Daten in allen Dimensionen zu erweitern
 - Bei zusammenhängender Speicherung nicht möglich
- Mögliche Optimierungen
 - Anpassung an Streifenbreite
 - Effizienter spaltenweiser Zugriff
- Zusatzaufwand
 - Üblicherweise geringere Leistung

Chunking...

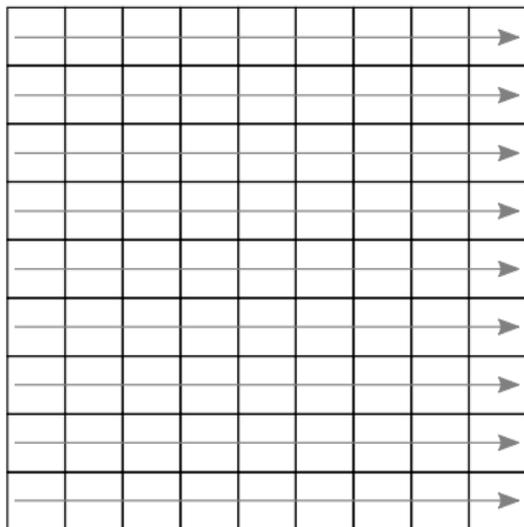


Abbildung: Zusammenhängender Datensatz

- Daten können nur in eine Dimension wachsen

Sonstiges

- Unterstützung für mehrere Backends
 - POSIX und MPI-IO
 - MPI-IO erlaubt parallelen Zugriff auf gemeinsame HDF-Dateien
- Diverse Werkzeuge verfügbar
 - Beispielsweise h5dump um Daten auszugeben
- Zusätzliche Funktionen
 - Transparente Kompression
 - Benutzerdefinierte Filter

Überblick

- ADIOS ist stark abstrahiert
 - Kein byte- oder element-orientierter Zugriff
 - Direkte Unterstützung für Anwendungsdatenstrukturen
- Entworfen für hohe Leistung
 - Insbesondere von wissenschaftlichen Anwendungen
 - Caching, Zusammenfassen von Operationen etc.

Überblick...

- E/A-Konfiguration wird in XML-Datei ausgelagert
 - Beschreibt relevante Datenstrukturen
 - Wird benutzt um automatisch Code zu erzeugen
- Entwickler spezifizieren E/A auf hoher Abstraktionsstufe
 - Kein Kontakt mit Middleware oder Dateisystem
 - Änderungen ohne Neukompilation möglich

- 1 Bibliotheken
 - Orientierung
 - Einführung
 - SIONlib
 - NetCDF
 - HDF
 - ADIOS
 - Leistungsbetrachtung
 - Zusammenfassung

2 Quellen



Quellen I

- [1] Christopher Bartz, Konstantinos Chasapis, Michael Kuhn, Petra Nerge, and Thomas Ludwig. A Best Practice Analysis of HDF5 and NetCDF-4 Using Lustre. In Julian Martin Kunkel and Thomas Ludwig, editors, *High Performance Computing*, number 9137 in Lecture Notes in Computer Science, pages 274–281, Switzerland, 06 2015. Springer International Publishing.
- [2] SIONlib. File Format. https://apps.fz-juelich.de/jsc/sionlib/docu/fileformat_page.html.