Суперкомпьютерное моделирование и технологии.

сентябрь – декабрь 2017 г.

Лекция
4 октября 2017 г.

Обзор технологии MPI

Обзор технологий параллельного программирования.

Основные возможности MPI.

Пример параллельной программы программы (C, OpenMP)

Сумма элементов массива

```
#include <stdio.h>
#define N 1024
int main()
{ double sum;
  double a[N];
  int   i, n =N;
  for (i=0; i<n; i++){
    a[i] = i*0.5;  }
 sum =0;
#pragma omp for reduction (+:sum)
 for (i=0; i<n; i++)
  sum = sum+a[i];
printf (“Sum=%f\n”, sum);
}
```

Пример параллельной программы программы (C, MPI)

```
#include <stdio.h>
#include <mpi.h>
#define N 1024
int main(int argc, char *argv[])
{ double sum, all_sum;
  double a[N];
  int  i, n =N;
  int size, myrank;
MPI_Init(&argc, &argv);
MPI_Comm_rank(MPI_COMM_WORLD,
      &rank);
MPI_Comm_size(MPI_COMM_WORLD,
      &size);
```

```
n= n/ size;
  for (i=rank*n;  i<n; i++){
    a[i] = i*0.5;  }

 sum =0;
for (i=rank*n; i<n; i++)
  sum = sum+a[i];
MPI_Reduce(& sum,& all_sum, 1,
 MPI_DOUBLE, MPI_SUM, 0,
MPI_COMM_WORLD);
If ( !rank)
printf ("Sum =%f\n", all_sum);
MPI_Finalize();
return 0;
}
```

Гибрид: MPI+OpenMP

```
#include <stdio.h>
#include <mpi.h>
#define N 1024
int main(int argc, char *argv[])
{ double sum, all_sum;
  double a[N];
  int  i, n =N;
  int size, myrank;
MPI_Init(&argc, &argv);
MPI_Comm_rank(MPI_COMM_WORLD,
      &rank);
MPI_Comm_size(MPI_COMM_WORLD,
      &size);
```

```
n= n/ size;
  for (i=rank*n;  i<n; i++){
    a[i] = i*0.5;  }

 sum =0;
#pragma omp for reduction (+:sum)
for (i=rank*n; i<n; i++)
  sum = sum+a[i];
MPI_Reduce(& sum,& all_sum, 1,
 MPI_DOUBLE, MPI_SUM, 0,
MPI_COMM_WORLD);
If ( !rank)
printf ("Sum =%f\n", all_sum);
MPI_Finalize();
return 0;
}
```

MPI

- MPI 1.1 Standard разрабатывался 92-94
- MPI 2.0 - 95-97
- MPI 2.1 - 2008
- MPI 3.1 – 2015
- Стандарты
  - **http://mpi-forum.org/docs/**
  - **http://www.mpi-forum.org/docs/docs.html**

  Описание функций
  - **http://www-unix.mcs.anl.gov/mpi/www/**

Реализации MPI

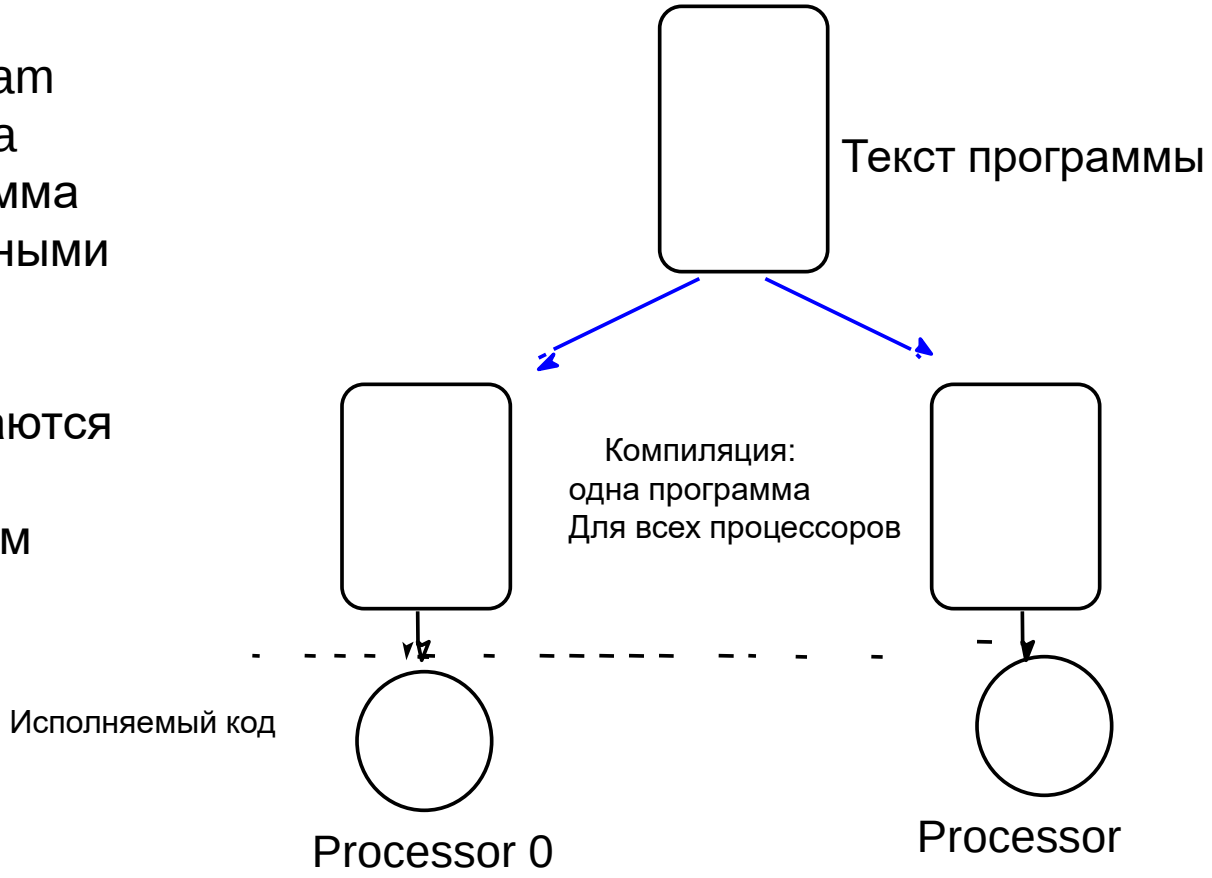
- MPICH
- LAM/MPI
- Mvapich
- OpenMPI
- Коммерческие реализации Intel,IBM и др.

Модель MPI

- Параллельная программа состоит из процессов, процессы могут быть многопоточными.
- MPI реализует передачу сообщений между процессами.
- Межпроцессное взаимодействие предполагает:
  - синхронизацию
  - перемещение данных из адресного пространства одного процесса в адресное пространство другого процесса.

Модель MPI-программ

- SPMD – Single Program Multiple Data
- Одна и та же программа выполняется различными процессорами
- Управляющими операторами выбираются различные части программы на каждом процессоре.

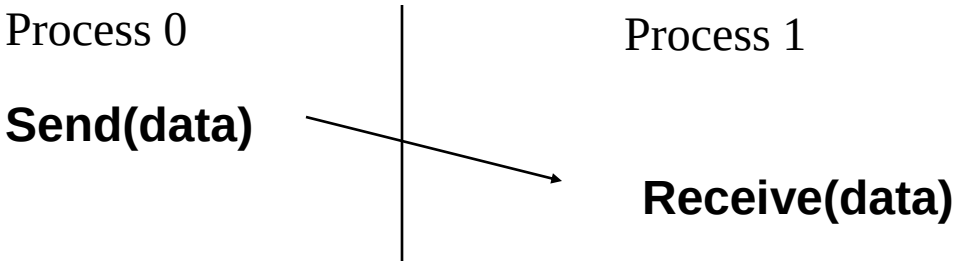


Модель выполнения MPI- программы

- Запуск: ***mpirun***
- При запуске указываем число требуемых процессоров **np** и название программы: пример: ***mpirun –np 3 prog***
- Каждый процесс MPI-программы получает два значения:
  - ***np –*** *число процессов*
  - ***rank*** из диапазона [0 … ***np-1***] – номер процесса
- Любые два процесса могут непосредственно обмениваться данными с помощью функций передачи сообщений

Основы передачи данных в MPI

- Технология передачи данных MPI предполагает кооперативный обмен.
- Данные посылаются одним процессом и принимаются другим.
- Передача и синхронизация совмещены.



Основные группы функций MPI

- Определение среды
- ***Передачи «точка-точка»***
- ***Коллективные операции***
- Производные типы данных
- Группы процессов
- Виртуальные топологии
- ***Односторонние передачи***
- Параллельный ввод-вывод

Основные понятия

- Процессы объединяются в ***группы***.
- Каждое сообщение посылается в рамках некоторого контекста и должно быть получено в том же контексте.
- Группа и контекст вместе определяют ***коммуникатор***.
- Процесс идентифицируется своим ***номером*** в группе, ассоциированной с коммуникатором.

Понятие коммуникатора MPI

- **Все** обращения к MPI функциям содержат коммуникатор, как параметр.
- Наиболее часто используемый коммуникатор **`MPI_COMM_WORLD:`**
  - определяется при вызове **`MPI_Init`**
  - содержит ВСЕ процессы программы
- Другие предопределенные коммуникаторы:
  - **MPI_COMM_SELF** – только один (собственный) процесс
  - **MPI_COMM_NULL** – пустой коммуникатор

Типы данных MPI

- Данные в сообщении описываются тройкой: (***address, count, datatype***), где
- ***datatype*** определяется рекурсивно как :
  - предопределенный базовый тип, соответствующий типу данных в базовом языке (например, MPI_INT, MPI_DOUBLE_PRECISION)
  - Непрерывный массив MPI типов
  - Векторный тип
  - Индексированыый тип
  - Произвольные структуры
- MPI включает функции для построения пользовательских типов данных, например, типа данных, описывающих пары (int, float).

Базовые MPI-типы данных

MPI datatype	C datatype
MPI_CHAR	signed char
MPI_SHORT	signed short int
MPI_INT	signed int
MPI_LONG	signed long int
MPI_UNSIGNED_CHAR	unsigned char
MPI_UNSIGNED_SHORT	unsigned short int
MPI_UNSIGNED	unsigned int
MPI_UNSIGNED_LONG	unsigned long int
MPI_FLOAT	float
MPI_DOUBLE	double
MPI_LONG_DOUBLE	long double

Специальные типы MPI

- MPI_Comm
- MPI_Status
- MPI_datatype

Понятие тэга

- Сообщение сопровождается определяемым пользователем признаком – целым числом – ***тэгом*** для идентификации принимаемого сообщения

- Теги сообщений у отправителя и получателя должны быть согласованы. Можно указать в качестве значения тэга константу **`MPI_ANY_TAG`**.

MPI helloworld.c

```
#include <stdio.h>
#include <mpi.h>
int main(int argc, char **argv){
    MPI_Init(&argc, &argv);
    printf("Hello, MPI world\n");
    MPI_Finalize();
    return 0; }
```

Функции определения среды

```
int MPI_Init(int *argc, char ***argv)
```

должна первым вызовом, вызывается только один раз

```
int MPI_Comm_size(MPI_Comm comm, int *size)
```

число процессов в коммуникаторе

```
int MPI_Comm_rank(MPI_Comm comm, int *rank)
```

номер процесса в коммуникаторе (нумерация с 0)

```
int MPI_Finalize()
```

завершает работу процесса

```
int MPI_Abort (MPI_Comm_size(MPI_Comm comm,
int*errorcode)
```

завершает работу программы

Инициализация MPI

- **`MPI_Init`** должна быть первым вызовом, вызывается только один раз

```
int MPI_Init(int *argc, char ***argv)
```

Обработка ошибок MPI-функций

Определяется константой ***MPI_SUCCESS***

```
|
int error;
……
error = MPI_Init(&argc, &argv));
If (error != MPI_SUCCESS)
{
 fprintf (stderr, “ MPI_Init error \n”);
return 1;

}
```

MPI_Comm_size
Количество процессов в коммуникаторе

- **Размер коммуникатора**

```
int MPI_Comm_size(MPI_Comm comm, int *size)
```

Результат – число процессов

MPI_Comm_rank
номер процесса (process rank)

- Process ID в коммуникаторе
  - Начинается с 0 до (*n*-1), где *n* – число процессов
- Используется для определения номера процесса-отправителя и получателя

```
int MPI_Comm_rank(MPI_Comm comm, int *rank)
```

Результат – номер процесса

Завершение MPI-процессов

- Никаких вызовов MPI функций после *MPI_Finalize.*

int MPI_Finalize()

int MPI_Abort (MPI_Comm_size(MPI_Comm comm, int*errorcode)

Hello, MPI world!

```
#include <stdio.h>
#include "mpi.h"
int main(int argc, char **argv){
   int rank, size;
     MPI_Init(&argc, &argv);
     MPI_Comm_rank(MPI_COMM_WORLD, &rank);
     MPI_Comm_size(MPI_COMM_WORLD, &size);
     printf("Hello, MPI world! I am %d of %d\n“,rank,size);
     MPI_Finalize();
     return 0; }
```

Взаимодействие «точка-точка»

- Самая простая форма обмена сообщением
- Один процесс посылает сообщения другому
- Несколько вариантов реализации того, как пересылка и выполнение программы совмещаются

Функции MPI передачи «точка-точка»

Point-to-Point Communication Routines		
MPI_Bsend	MPI_Bsend_init	MPI_Buffer_attach
MPI_Buffer_detach	MPI_Cancel	MPI_Get_count
MPI_Get_elements	MPI_Ibsend	MPI_Iprobe
MPI_Irecv	MPI_Irsend	MPI_Isend
MPI_Issend	MPI_Probe	MPI_Recv
MPI_Recv_init	MPI_Request_free	MPI_Rsend
MPI_Rsend_init	MPI_Send	MPI_Send_init
MPI_Sendrecv	MPI_Sendrecv_replace	MPI_Ssend
MPI_Ssend_init	MPI_Start	MPI_Startall
MPI_Test	MPI_Test_cancelled	MPI_Testall
MPI_Testany	MPI_Testsome	MPI_Wait
MPI_Waitall	MPI_Waitany	MPI_Waitsome

Блокирующие и неблокирующие передачи

- Определяют, при каких условиях операции передачи завершаются:

  - **Блокирующие**: возврат из функций передачи сообщений только по завершению передачи
  - **Неблокирующие** : немедленный возврат из функций, пользователь должен контролировать завершение передач

Основа 2-точечных обменов

*int MPI_Send(void *buf,int count, MPI_Datatype datatype,int dest, int tag,*
MPI_Comm comm)

*int MPI_Recv(void *buf,int count, MPI_Datatype datatype,int source, int tag,*
*MPI_Comm comm, MPI_Status **status**)*

MPI_Send

*int MPI_Send(void *buf,int count, MPI_Datatype datatype,int dest,*
int tag, MPI_Comm comm)

buf		адрес буфера
count	–	число пересылаемых элементов
Datatype	–	MPI datatype
dest	-	rank процесса-получателя
tag	-	определяемый пользователем параметр,
comm	–	MPI-коммуникатор

Пример:

```
MPI_Send(data,500,MPI_FLOAT,6,33,MPI_COMM_WORLD)
```

MPI_Recv

*int MPI_Recv(void *buf,int count, MPI_Datatype datatype,int source, int tag, MPI_Comm comm,* ***MPI_Status *status****)*

buf		адрес буфера
count	–	число пересылаемых элементов
Datatype	–	MPI datatype
source	-	rank процесса-отправителя
tag	-	определяемый пользователем параметр,
comm	–	MPI-коммуникатор,
status	-	статус

Пример:

```
MPI_Recv(data,500,MPI_FLOAT,0,33,MPI_COMM_WORLD,&stat)
```

Wildcarding (джокеры)

- Получатель может использовать джокер
  для получения сообщения от **ЛЮБОГО** процесса
  `MPI_ANY_SOURCE`

- Для получения сообщения с ЛЮБЫМ тэгом
  `MPI_ANY_TAG`

- Реальные номер процесса-отправителя и тэг возвращаются через параметр ***`status`***

Информация о завершившемся приеме сообщения

- Возвращается функцией **`MPI_Recv`** через параметр **`status`**

- Содержит:
  - Source: ***`status.MPI_SOURCE`***
  - Tag: ***`status.MPI_TAG`***
  - Count: ***`MPI_Get_count`***

Полученное сообщение

- Может быть меньшего размера, чем указано в функции MPI_Recv
- `count` – число реально полученных элементов

C:

```
int MPI_Get_count  (MPI_Status *status,
        MPI_Datatype datatype, int *count)
```

MPI_Probe

int MPI_Probe(int *source*, int *tag*, MPI_Comm *comm*, MPI_Status* *status*)

Проверка статуса операции приема сообщения.

Параметры аналогичны функции MPI_Recv

Пример

```
if (rank == 0) {
// Send size  of integers to process 1
    MPI_Send(buf, size, MPI_INT, 1, 0,
      MPI_COMM_WORLD);
    printf("0 sent %d numbers to 1\n",
      size);
 } else if (rank == 1) {
    MPI_Status status;
    // Probe for an incoming message from
      process
    MPI_Probe (0, 0, MPI_COMM_WORLD,
      &status);
    MPI_Get_count (&status, MPI_INT,
      &size);
```

```
int* number_buf =
(int*)malloc(sizeof(int) * size);
 // Now receive the message with the
allocated buffer
 MPI_Recv (number_buf, size, MPI_INT,
                0, 0, MPI_COMM_WORLD,
                 MPI_STATUS_IGNORE);
printf("1 dynamically received %d
numbers from 0.\n",
          number_amount);
    free(number_buf);
 }
```

Совмещение передач типа «отсылка-прием»

```
int MPI_Sendrecv (void *sendbuf,
        int sendcount, MPI_Datatype sendtype,
        int dest, int sendtag,
        void *rcvbuf, int rcvcount, MPI_Datatype rcvtype,
         int source, int rcvtag,
        MPI_Comm comm,
        MPI_Status *status)
```

Обмен данными одного типа с замещением

```
int MPI_Sendrecv_replace
(void* buf, int count,
MPI_Datatype datatype,
int dest, int sendtag,
 int source, int recvtag,
 MPI_Comm comm, MPI_Status *status)
```

Неблокирующие коммуникации

Цель – уменьшение времени работы параллельной программы за счет совмещения вычислений и обменов.

Неблокирующие операции завершаются, не дожидаясь окончания передачи данных.

Проверка состояния передач и ожидание завершение передач выполняются специальными функциями.

Форматы неблокирующих функций

```
MPI_Isend(buf,count,datatype,dest,tag,comm,request)
```

```
MPI_Irecv(buf,count,datatype,source,tag,comm, request)
```

Проверка завершения операций `MPI_Wait()` and `MPI_Test()`.

`MPI_Wait()` ожидание завершения.

`MPI_Test()` проверка завершения. Возвращается флаг, указывающий на результат завершения.

Замер времени **MPI_Wtime**

- Время замеряется в секундах
- Выделяется интервал в программе

```
double MPI_Wtime(void);
```

Пример.

```
double start, finish, elapsed, time ;
start=-MPI_Wtime;
MPI_Send(…);
finish = MPI_Wtime();
time= start+finish;
```

Коллективные передачи

Collective Communication Routines		
MPI_Allgather	MPI_Allgatherv	MPI_Allreduce
MPI_Alltoall	MPI_Alltoallv	MPI_Barrier
MPI_Bcast	MPI_Gather	MPI_Gatherv
MPI_Op_create	MPI_Op_free	MPI_Reduce
MPI_Reduce_scatter	MPI_Scan	MPI_Scatter
MPI_Scatterv		

Характеристики коллективных передач

- Коллективные операции не являются помехой операциям типа «точка-точка» и наоборот
- Все процессы коммуникатора должны вызывать коллективную операцию
- Синхронизация не гарантируется (за исключением барьера)
- Нет неблокирующих коллективных операций
- Нет тэгов
- Принимающий буфер должен точно соответствовать размеру отсылаемого буфера

Широковещательная рассылка

- One-to-all передача: один и тот же буфер отсылается от процесса root всем остальным процессам в коммуникаторе
- ```
  int MPI_Bcast (void *buffer, int, count,
    MPI_Datatype datatype,int root, MPI_Comm comm)
  ```
- Все процессы должны указать один тот же root и communicator
  ```

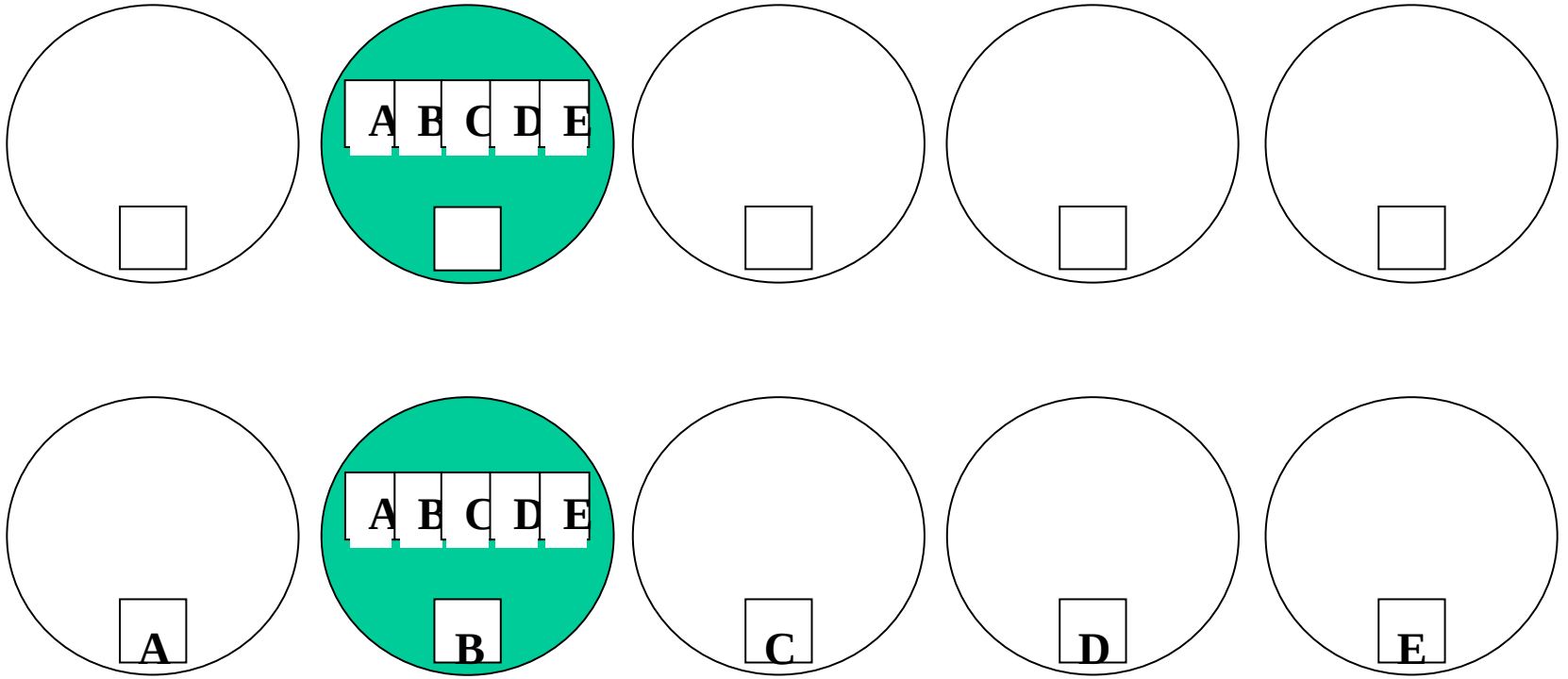
Scatter

- One-to-all communication: различные данные из одного процесса рассылаются всем процессам коммуникатора (в порядке их номеров)

```
int MPI_Scatter(void* sendbuf, int sendcount,
    MPI_Datatype sendtype, void* recvbuf,
    int recvcount,MPI_Datatype recvtype, int root,
    MPI_Comm comm)
```

- *sendcount* – число элементов, посланных каждому процессу, не общее число отосланных элементов;
- send параметры имеют смысл только для процесса root

Scatter – графическая иллюстрация



Глобальные операции редукции

- Операции выполняются над данными, распределенными по процессам коммуникатора
- Примеры:
  - Глобальная сумма или произведение
  - Глобальный максимум (минимум)
  - Глобальная операция, определенная пользователем

Общая форма

```
int MPI_Reduce(void* sendbuf, void* recvbuf,
int count, MPI_Datatype datatype, MPI_Op op,
int root,MPI_Comm comm)
```

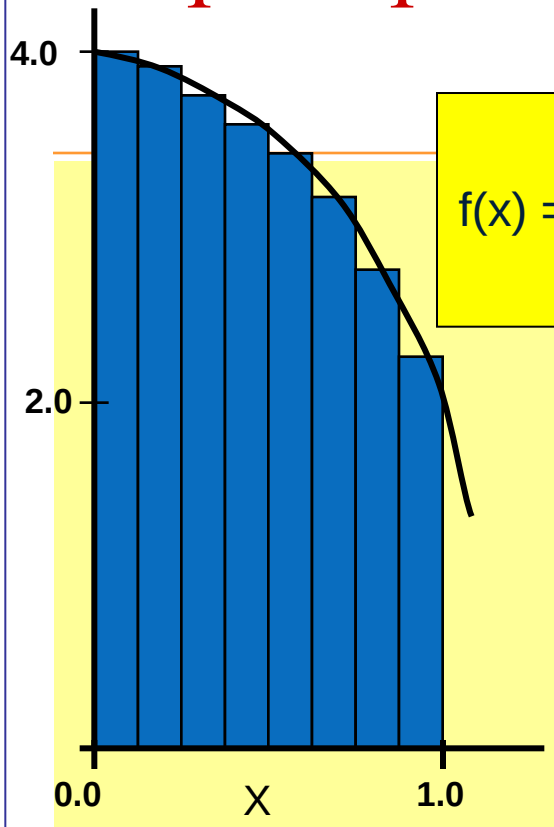
- **count** число операций “*op*” выполняемых над последовательными элементами буфера **sendbuf**
- (также размер **recvbuf**)

- **op** является ассоциативной операцией, которая выполняется над парой операндов типа **datatype** и возвращает результат того же типа

Предопределенные операции редукции

MPI Name	Function
MPI_MAX	Maximum
MPI_MIN	Minimum
MPI_SUM	Sum
MPI_PROD	Product
MPI_LAND	Logical AND
MPI_BAND	Bitwise AND
MPI_LOR	Logical OR
MPI_BOR	Bitwise OR
MPI_LXOR	Logical exclusive OR
MPI_BXOR	Bitwise exclusive OR
MPI_MAXLOC	Maximum and location
MPI_MINLOC	Minimum and location

Пример: численное интегрирование



$$f(x) = \frac{4.0}{(1+x^2)}$$

```
static long num_steps=100000;
 double step, pi;

void main()
{   int i;
    double x, sum = 0.0;

    step = 1.0/(double) num_steps;
    for (i=0; i< num_steps; i++){
        x = (i+0.5)*step;
        sum = sum + 4.0/(1.0 + x*x);
    }
    pi = step * sum;
    printf("Pi = %f\n",pi);
}
```

Вычисление числа π с использованием MPI

```
#include "mpi.h"
#include <stdio.h>
int main (int argc, char *argv[])
{
    int n =100000, myid, numprocs, i;
    double mypi, pi, h, sum, x;
    MPI_Init(&argc,&argv);
    MPI_Comm_size(MPI_COMM_WORLD,&numprocs);
    MPI_Comm_rank(MPI_COMM_WORLD,&myid);
    h   = 1.0 / (double) n;
    sum = 0.0;
```

Вычисление числа π с использованием MPI

```
  for (i = myid + 1; i <= n; i += numprocs)
    {
                x = h * ((double)i - 0.5);
                sum += (4.0 / (1.0 + x*x));
     }
     mypi = h * sum;
     MPI_Reduce(&mypi, &pi, 1, MPI_DOUBLE, MPI_SUM,
0, MPI_COMM_WORLD);
     if (myid == 0) printf("pi is approximately
%.16f”, pi);
     MPI_Finalize();
     return 0;
}
```