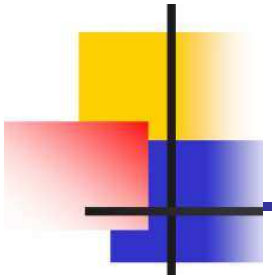


Параллельное программирование на основе MPI

3 часть

Содержание

- Управление группами процессов и коммуникаторами
- Виртуальные топологии
  - Декартовы топологии (решетки)
  - Топологии типа граф
- Дополнительные сведения о MPI
  - Разработка параллельных программ с использованием MPI на языке Fortran
  - Общая характеристика среды выполнения MPI программ
  - Дополнительные возможности стандарта MPI-2
- Заключение

Управление группами процессов и коммуникаторами...

- **Группы процессов…**
  - Процессы параллельной программы объединяются в *группы*. В группу могут входить все процессы параллельной программы или в группе может находиться только часть имеющихся процессов. Один и тот же процесс может принадлежать нескольким группам,
  - Управление группами процессов предпринимается для создания на их основе коммуникаторов,
- Группы процессов могут быть созданы только из уже существующих групп. В качестве исходной группы может быть использована группа, связанная с предопределенным коммуникатором MPI_COMM_WORLD:

```
int MPI_Comm_group ( MPI_Comm comm, MPI_Group *group )
```

  - **comm** — коммуникатор;
  - **group** — группа, связанная с коммуникатором

Управление группами процессов и коммуникаторами...

- **Группы процессов…**
  - На основе существующих групп, могут быть созданы новые группы
    - создание новой группы ***newgroup*** из существующей группы ***oldgroup***, которая будет включать в себя ***n*** процессов, ранги которых перечисляются в массиве ***ranks***:

```
int MPI_Group_incl(MPI_Group oldgroup,int n, int *ranks,
                   MPI_Group *newgroup);
```

    - создание новой группы ***newgroup*** из группы ***oldgroup***, которая будет включать в себя ***n*** процессов, ранги которых не совпадают с рангами, перечисленными в массиве ***ranks***:

```
int MPI_Group_excl(MPI_Group oldgroup,int n, int *ranks,
                   MPI_Group *newgroup);
```

Управление группами процессов и коммуникаторами…

- ***Группы процессов…***
  - На основе существующих групп, могут быть созданы новые группы
    - создание новой группы ***newgroup*** как объединения групп ***group1*** и ***group2***:

```
int MPI_Group_union(MPI_Group group1, MPI_Group group2,
        MPI_Group *newgroup);
```

    - создание новой группы ***newgroup*** как пересечения групп ***group1*** и ***group2***:

```
int MPI_Group_intersection ( MPI_Group group1,
      MPI_Group group2, MPI_Group *newgroup );
```

    - создание новой группы ***newgroup*** как разности групп ***group1*** и ***group2***:

```
int MPI_Group_difference ( MPI_Group group1,
      MPI_Group group2, MPI_Group *newgroup );
```

Управление группами процессов и коммуникаторами...

- **Группы процессов**
  - Получение информации о группе процессов:
    - получение количества процессов в группе:

```
int MPI_Group_size ( MPI_Group group, int *size );
```

    - получение ранга текущего процесса в группе:

```
int MPI_Group_rank ( MPI_Group group, int *rank );
```

  - После завершения использования группа должна быть удалена:

```
int MPI_Group_free ( MPI_Group *group );
```

Управление группами процессов и коммуникаторами...

- **Коммуникаторы…**
  - Под *коммуникатором* в MPI понимается специально создаваемый служебный объект, объединяющий в своем составе группу процессов и ряд дополнительных параметров (*контекст*), используемых при выполнении операций передачи данных,
  - Будем рассматривать управление *интракоммуникаторами*, используемыми для операций передачи данных внутри одной группы процессов.

Управление группами процессов и коммуникаторами...

- **Коммуникаторы…**
  - Создание коммуникатора:
    - дублирование уже существующего коммуникатора:

```
int MPI_Comm_dup ( MPI_Comm oldcom, MPI_comm *newcomm );
```

    - создание нового коммуникатора из подмножества процессов существующего коммуникатора:

```
int MPI_comm_create (MPI_Comm oldcom, MPI_Group group,
       MPI_Comm *newcomm);
```

Операция создания коммуникаторов является коллективной и, тем самым, должна выполняться всеми процессами исходного коммуникатора,
После завершения использования коммуникатор должен быть удален:

```
int MPI_Comm_free ( MPI_Comm *comm );
```

Управление группами процессов и коммуникаторами

- Для пояснения рассмотренных функций можно привести пример создания коммуникатора, в котором содержатся все процессы, кроме процесса, имеющего ранг 0 в коммуникаторе MPI_COMM_WORLD (такой коммуникатор может быть полезен для поддержки схемы организации параллельных вычислений "менеджер – исполнители"

Управление группами процессов и коммуникаторами

```
MPI_Group WorldGroup, WorkerGroup;
MPI_Comm Workers;
int ranks[1];
ranks[0] = 0;
// Получение группы процессов в MPI_COMM_WORLD
MPI_Comm_group(MPI_COMM_WORLD, &WorldGroup);
// Создание группы без процесса с рангом 0
 MPI_Group_excl(WorldGroup, 1, ranks, &WorkerGroup);
// Создание коммуникатора по группе
MPI_Comm_create(MPI_COMM_WORLD, WorkerGroup, &Workers);
...
MPI_Group_free(&WorkerGroup);
MPI_Comm_free(&Workers);
```

Управление группами процессов и коммуникаторами

- **Коммуникаторы**
  - Одновременное создание нескольких коммуникаторов :

```
int MPI_Comm_split ( MPI_Comm oldcomm, int split, int key,
  MPI_Comm *newcomm ),
где
- oldcomm – исходный коммуникатор,
- split   – номер коммуникатора, которому должен принадлежать
            процесс,
- key     – порядок ранга процесса в создаваемом
коммуникаторе,
- newcomm – создаваемый коммуникатор
```

Вызов функции ***MPI_Comm_split*** должен быть выполнен в каждом процессе коммуникатора ***oldcomm,***

Процессы разделяются на непересекающиеся группы с одинаковыми значениями параметра ***split.*** На основе сформированных групп создается набор коммуникаторов**.** Порядок нумерации процессов соответствует порядку значений параметров ***key*** ***(***процесс с большим значением параметра ***key*** будет иметь больший ранг**).**

Управление группами процессов и коммуникаторами

В качестве примера можно рассмотреть задачу представления набора процессов в виде двумерной решетки. Пусть p=q*q есть общее количество процессов; следующий далее фрагмент программы обеспечивает получение коммуникаторов для каждой строки создаваемой топологии:

```
MPI_Comm comm;
int rank, row;
MPI_Comm_rank(MPI_COMM_WORLD, &rank);
row = rank / q;
MPI_Comm_split(MPI_COMM_WORLD, row, rank, &comm);
```

При выполнении данного примера, например, при p=9, процессы с рангами (0, 1, 2) образуют первый коммуникатор, процессы с рангами (3, 4, 5) – второй и т. д.

Виртуальные топологии…

- Под *топологией* вычислительной системы понимают структуру узлов сети и линий связи между этими узла. Топология может быть представлена в виде графа, в котором вершины есть процессоры (процессы) системы, а дуги соответствуют имеющимся линиям (каналам) связи.
- Парные операции передачи данных могут быть выполнены между любыми процессами коммуникатора, в коллективной операции принимают участие все процессы коммуникатора. Следовательно, логическая топология линий связи между процессами в параллельной программе имеет структуру *полного графа.*
- Возможно организовать логическое представление любой необходимой *виртуальной топологии*. Для этого достаточно сформировать тот или иной механизм дополнительной адресации процессов.

Виртуальные топологии…

- **Декартовы топологии (решетки)…**
  - *В декартовых топологиях* множество процессов представляется в виде прямоугольной *решетки*, а для указания процессов используется декартова системы координат,
  - Для создания декартовой топологии (решетки) в MPI предназначена функция:

```
int MPI_Cart_create(MPI_Comm oldcomm, int ndims, int *dims,
 int *periods, int reorder, MPI_Comm *cartcomm),
где:
- oldcomm  - исходный коммуникатор,
- ndims    - размерность декартовой решетки,
- dims     - массив длины ndims, задает количество процессов в
             каждом измерении решетки,
- periods  - массив длины ndims, определяет, является ли
             решетка периодической вдоль каждого измерения,
 - reorder  - параметр допустимости изменения нумерации процессов,
 - cartcomm – создаваемый коммуникатор с декартовой топологией
              процессов.
```

Управление группами процессов и коммуникаторами

- Для пояснения назначения параметров функции MPI_Cart_create рассмотрим пример создания двумерной решетки 4x4, в которой строки и столбцы имеют кольцевую структуру (за последним процессом следует первый процесс):

```
// Создание двумерной решетки 4x4
MPI_Comm GridComm;
int dims[2], periods[2], reorder = 1;
dims[0]        = dims[1]      = 4;
periods[0]     = periods[1]   = 1;
MPI_Cart_create(MPI_COMM_WORLD, 2, dims, periods, reorder,
   &GridComm);
```

- Следует отметить, что в силу кольцевой структуры измерений сформированная в рамках примера топология является тором.

Виртуальные топологии…

- **Декартовы топологии (решетки)…**
  - Для определения декартовых координат процесса по его рангу можно воспользоваться функцией:

```
int MPI_Card_coords(MPI_Comm comm,int rank,int ndims,int *coords),
 - comm  – коммуникатор с топологией решетки,
 - rank  - ранг процесса, для которого определяются декартовы
координаты,
 - ndims - размерность решетки,
 - coords- возвращаемые функцией декартовы координаты процесса.
```

  - Обратное действие – определение ранга процесса по его декартовым координатам – обеспечивается при помощи функции:

```
int MPI_Cart_rank(MPI_Comm comm, int *coords, int *rank),
где
 - comm   – коммуникатор с топологией решетки,
 - coords - декартовы координаты процесса,
 - rank   - возвращаемый функцией ранг процесса.
```

Виртуальные топологии…

- **Декартовы топологии (решетки)…**
  - процедура разбиения решетки на подрешетки меньшей размерности обеспечивается при помощи функции:

```
int MPI_Card_sub(MPI_Comm comm, int *subdims, MPI_Comm
*newcomm),
где:
 - comm    - исходный коммуникатор с топологией решетки,
 - subdims – массив для указания, какие измерения должны
остаться              в создаваемой подрешетке,
 - newcomm - создаваемый коммуникатор с подрешеткой.
```

В ходе своего выполнения функция *MPI_Cart_sub* определяет коммуникаторы для каждого сочетания координат фиксированных измерений исходной решетки.

Виртуальные топологии…

- **Декартовы топологии (решетки)…**
  - **Пример**: создание двухмерной решетки *4x4*, в которой строки и столбцы имеют кольцевую структуру (за последним процессом следует первый процесс). Определяются коммуникаторы с декартовой топологией для каждой строки и столбца решетки в отдельности. Создаются 8 коммуникаторов, по одному для каждой строки и столбца решетки. Для каждого процесса определяемые коммуникаторы *RowComm* и *ColComm* соответствуют строке и столбцу процессов, к которым данный процесс принадлежит

Программа

Управление группами процессов и коммуникаторами

```
// Создание коммуникаторов для каждой строки и столбца
    решетки
MPI_Comm RowComm, ColComm;int subdims[2];
// Создание коммуникаторов для строк
subdims[0] = 0;  // фиксации измерения
subdims[1] = 1;  // наличие данного измерения в подрешетке
MPI_Cart_sub(GridComm, subdims, &RowComm);
// Создание коммуникаторов для столбцов
subdims[0] = 1;
subdims[1] = 0;
MPI_Cart_sub(GridComm, subdims, &ColComm);.
```

Виртуальные топологии…

- **Декартовы топологии (решетки)…**
  - Дополнительная функция *MPI_Cart_shift* обеспечивает поддержку *операции сдвига данных*:
    - *Циклический сдвиг* на ***k*** элементов вдоль измерения решетки – в этой операции данные от процесса ***i*** пересылаются процессу ***(i+k) mod dim***, где ***dim*** есть размер измерения, вдоль которого производится сдвиг,
    - *Линейный сдвиг* на ***k*** позиций вдоль измерения решетки – в этом варианте операции данные от процессора *i* пересылаются процессору ***i+k*** (если таковой существует),
  - Функция *MPI_Cart_shift* только определяет ранги процессов, между которыми должен быть выполнен обмен данными в ходе операции сдвига. Непосредственная передача данных, может быть выполнена, например, при помощи функции *MPI_Sendrecv*.

Виртуальные топологии…

- **Декартовы топологии (решетки)**
  - Функция *MPI_Cart_shift* обеспечивает получение рангов процессов, с которыми текущий процесс (процесс, вызвавший функцию *MPI_Cart_shift*) должен выполнить обмен данными:

```
int MPI_Card_shift(MPI_Comm comm, int dir, int disp, int *source,
  int *dst),
где:
 - comm   – коммуникатор с топологией решетки,
 - dir    - номер измерения, по которому выполняется сдвиг,
 - disp   - величина сдвига (<0 – сдвиг к началу измерения),
 - source – ранг процесса, от которого должны быть получены
данные,
 - dst    - ранг процесса которому должны быть отправлены данные.
```

Виртуальные топологии…

- **Топология графа…**
  - Создание коммуникатора с топологией типа граф:

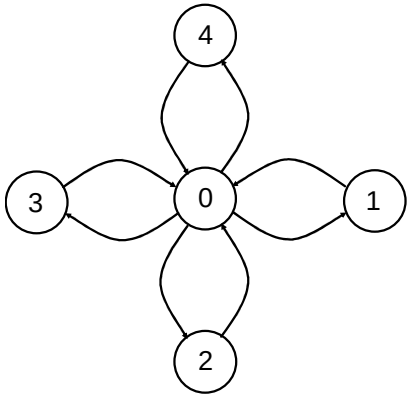
```
int MPI_Graph_create(MPI_Comm oldcomm, int nnodes, int *index,
  int *edges, int reorder, MPI_Comm *graphcomm),
где:
 - oldcomm  - исходный коммуникатор,
 - nnodes   - количество вершин графа,
 - index    - количество исходящих дуг для каждой вершины,
 - edges    - последовательный список дуг графа,
 - reorder  - параметр допустимости изменения нумерации
процессов,
 - cartcomm – создаваемый коммуникатор с топологией типа граф.
```

Операция создания топологии является коллективной и, тем самым, должна выполняться всеми процессами исходного коммуникатора.

Виртуальные топологии…

- **Топология графа (пример)…**

  Граф для топологии звезда, количество процессоров равно **5**, порядки вершин принимают значения **(4,1,1,1,1)**, а матрица инцидентности имеет вид:



Процессы	Линии связи
0	**1,2,3,4**
1	**0**
2	**0**
3	**0**
4	**0**

Для создания топологии с графом данного вида необходимо выполнить следующий программный код:

```
int index[] = { 4,1,1,1,1 };
int edges[] = { 1,2,3,4,0,0,0,0 };
MPI_Comm StarComm;
MPI_Graph_create(MPI_COMM_WORLD, 5, index, edges, 1, &StarComm);
```

Виртуальные топологии

- **Топология графа**
  - Количество соседних процессов, в которых от проверяемого процесса есть выходящие дуги, может быть получено при помощи функции:

```
int MPI_Graph_neighbors_count(MPI_Comm comm,int rank,
      int *nneighbors);
```

Получение рангов соседних вершин обеспечивается функцией:

```
int MPI_Graph_neighbors(MPI_Comm comm,int rank,
      int mneighbors, int *neighbors);
```

Дополнительные сведения о MPI…

- **Разработка параллельных программ с использованием MPI на языке Fortran…**
  - Подпрограммы библиотеки MPI являются процедурами и, тем самым, вызываются при помощи оператора вызова процедур CALL,
  - Коды завершения передаются через дополнительный параметр целого типа, располагаемый на последнем месте в списке параметров процедур,
  - Переменная ***status*** является массивом целого типа из *MPI_STATUS_SIZE* элементов,
  - Типы *MPI_Comm* и *MPI_Datatype* представлены целых типом INTEGER.

Дополнительные сведения о MPI…

- **Разработка параллельных программ с использованием MPI на языке Fortran**

```
PROGRAM MAIN
  include 'mpi.h'
  INTEGER PROCNUM, PROCRANK, RECVRANK, IERR
  INTEGER STATUS(MPI_STATUS_SIZE)
  CALL MPI_Init(IERR)
  CALL MPI_Comm_size(MPI_COMM_WORLD, PROCNUM, IERR)
  CALL MPI_Comm_rank(MPI_COMM_WORLD, PROCRANK IERR)
  IF ( PROCRANK.EQ.0 )THEN
    ! Действия, выполняемые только процессом с рангом 0
    PRINT *,"Hello from process ", PROCRANK
    DO i = 1, PROCNUM-1
      CALL MPI_RECV(RECVRANK, 1, MPI_INT, MPI_ANY_SOURCE,
        MPI_ANY_TAG, MPI_COMM_WORLD, STATUS, IERR)
      PRINT *,"Hello from process ", RECVRANK
    END DO
  ELSE ! Сообщение, отправляемое всеми процессами,  кроме процесса с
рангом 0
    CALL MPI_SEND(PROCRANK,1,MPI_INT,0,0,MPI_COMM_WORLD,IERR)
  END IF
  CALL MPI_FINALIZE(IERR)
  STOP
END
```

Дополнительные сведения о MPI…

- **Общая характеристика среды выполнения MPI программ…**
  - Для проведения параллельных вычислений в вычислительной системе должна быть установлена среда выполнения MPI программ:
    - Для разработки, компиляции и компоновки, как правило, достаточно обычных средств разработки программ (например, Microsoft Visual Studio) и той или иной библиотеки MPI,
    - Для выполнения параллельных программ от среды выполнения требуется наличие средств указания используемых процессоров, операций удаленного запуска программ и т.п.,
    - Желательно наличие в среде выполнения средств профилирования, трассировки и отладки параллельных программ.

Дополнительные сведения о MPI…

- **Общая характеристика среды выполнения MPI программ**
  - Запуск MPI программы зависит от среды выполнения, в большинстве случаев выполняется при помощи команды **mpirun**. Возможные параметры команды:
    - *Режим выполнения* – локальный или многопроцессорный. Локальный режим обычно указывается при помощи ключа – localonly,
    - *Количество процессов*, которые необходимо создать при запуске параллельной программы,
    - *Состав используемых процессоров*, определяемый тем или иным конфигурационным файлом,
    - *Исполняемый файл* параллельной программы,
    - *Командная строка* с параметрами для выполняемой программы.

Дополнительные сведения о MPI

- **Дополнительные возможности стандарта MPI-2**
  - *Динамическое порождение процессов*, при котором процессы параллельной программы могут создаваться и уничтожаться в ходе выполнения,
  - *Одностороннее взаимодействие процессов*, что позволяет быть инициатором операции передачи и приема данных только одному процессу,
  - *Параллельный ввод/вывод*, обеспечивающий специальный интерфейс для работы процессов с файловой системой,
  - *Расширенные коллективные операции*, в числе которых, например, процедуры для взаимодействия процессов из нескольких коммуникаторов одновременно,
  - *Интерфейс для алгоритмического языка C++*.

Заключение

- В третьей презентации раздела обсуждаются вопросы управления группами процессов и коммуникаторами.
- Изложены возможности MPI по использованию виртуальных топологий.
- Приведены дополнительные сведения о стандарте MPI: принципы разработки параллельных программ на языке Fortran, краткая характеристика сред выполнения MPI программ и обзор дополнительных возможностей стандарта MPI-2.

Ссылки

- Информационный ресурс Интернет с описанием стандарта MPI: http://www.mpiforum.org
- Одна из наиболее распространенных реализаций MPI библиотека MPICH представлена на http://www-unix.mcs.anl.gov/mpi/mpich
- Библиотека MPICH2 с реализацией стандарта MPI-2 содержится на http://www-unix.mcs.anl.gov/mpi/mpich2
- Русскоязычные материалы о MPI имеются на сайте http://www.parallel.ru

Литература…

- **Гергель В.П.** (2007). Теория и практика параллельных вычислений. – М.: Интернет-Университет, БИНОМ. Лаборатория знаний.
- **Воеводин** В.В., Воеводин Вл.В. (2002). Параллельные вычисления. – СПб.: БХВ-Петербург.
- **Немнюгин** С., Стесик О. (2002). Параллельное программирование для многопроцессорных вычислительных систем – СПб.: БХВ-Петербург.
- **Group**, W., Lusk, E., Skjellum, A. (1994). Using MPI. Portable Parallel Programming with the Message-Passing Interface. – MIT Press.
- **Group**, W., Lusk, E., Skjellum, A. (1999a). Using MPI - 2nd Edition: Portable Parallel Programming with the Message Passing Interface (Scientific and Engineering Computation). - MIT Press.

Литература

- **Group**, W., Lusk, E., Thakur, R. (1999b). Using MPI-2: Advanced Features of the Message Passing Interface (Scientific and Engineering Computation). - MIT Press.
- **Pacheco,** P. (1996). Parallel Programming with MPI. - Morgan Kaufmann.
- **Quinn**, M. J. (2004). Parallel Programming in C with MPI and OpenMP. – New York, NY: McGraw-Hill.
- **Snir**, M., Otto, S., Huss-Lederman, S., Walker, D., Dongarra, J. (1996). MPI: The Complete Reference. - MIT Press, Boston, 1996.