



高性能计算导论

第3讲：消息传递编程模型-1

翟季冬
计算机系

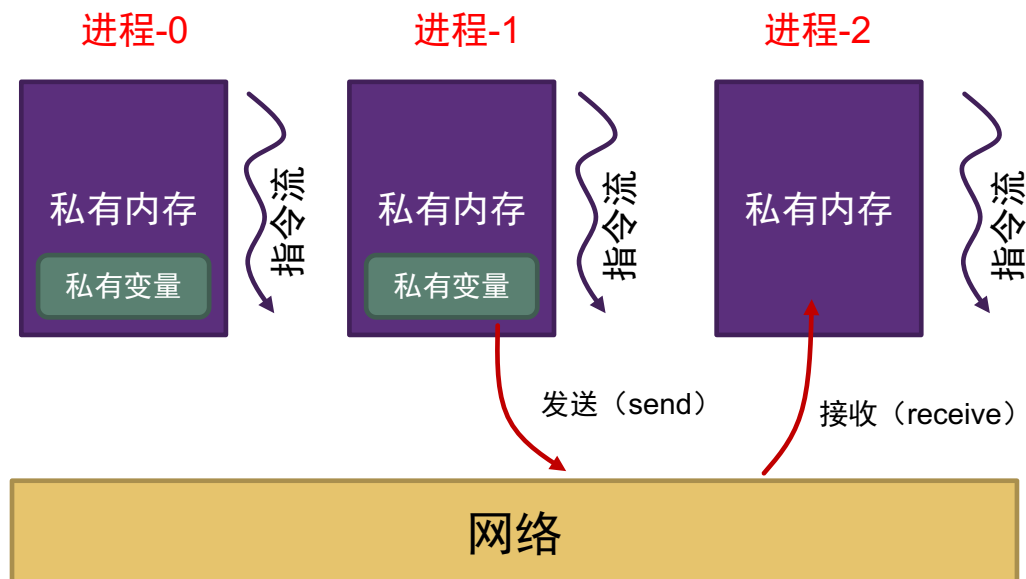
目录

- MPI介绍
- 如何写一个基本MPI程序
- 点对点通信
- 集合通信
- MPI-IO
- MPI程序编译与运行

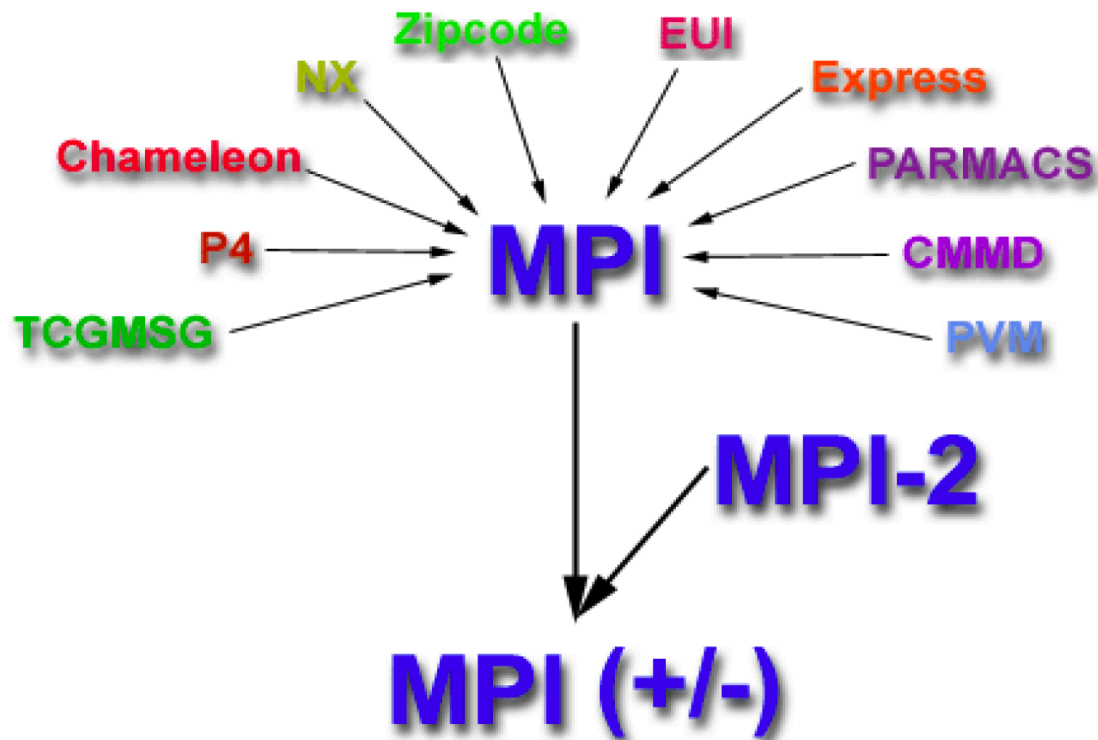
MPI介绍

消息传递模型-回顾

- **指令流**：不同指令流**并发执行**，指令流之间同步基于**通信方式**
- **数据**：不同指令流拥有**独立的地址空间**，相互不可通过地址直接访问
- 适用的硬件模型：**分布式内存架构**
 - 通信采用**消息传递**的方式实现



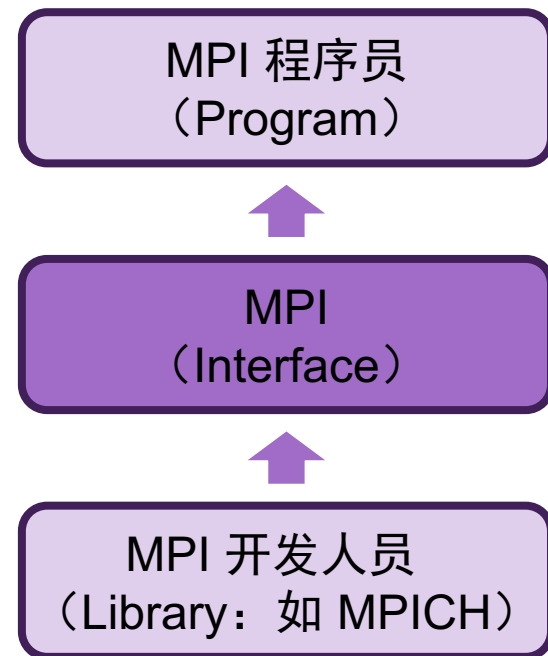
MPI 的历史



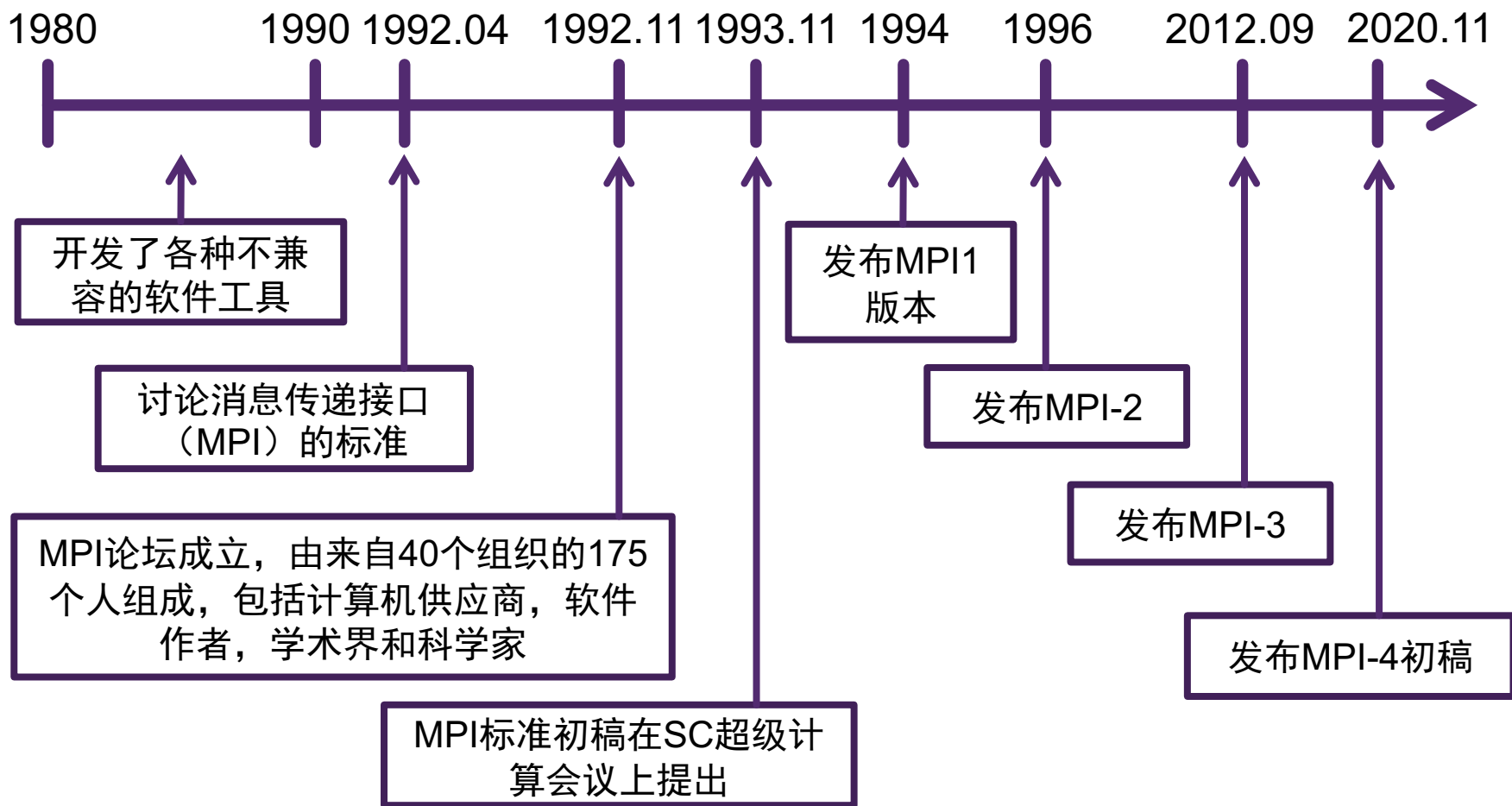
- 消息传递编程模型的发展经历很长历程
- MPI成为最终事实的标准

什么是MPI

- **MPI = Message Passing Interface**
- MPI是基于消息传递库的开发人员和用户的一套规范和标准
 - 就其本身而言，它是一个接口而不是一个库
- 目前是应用最广泛的**消息传递程序标准**
- 常用于**分布式内存系统**
- 设计目标：
 - **可移植性**：在不同的机器或平台上运行
 - **可扩展性**：在数百万个计算节点上运行
 - **灵活性**：将MPI开发人员与MPI程序员（用户）隔离



MPI 的历史与演变



MPI 相关引用

- MPI 官方标准

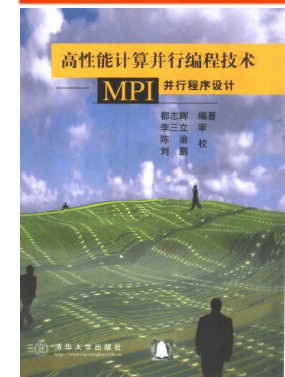
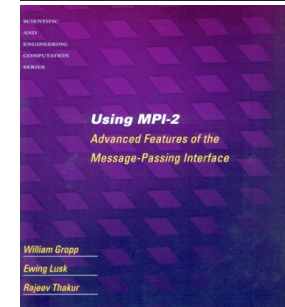
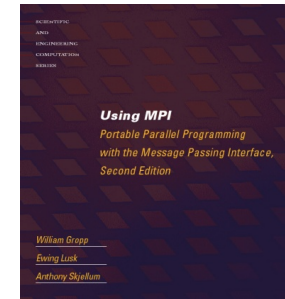
- <http://www.mpi-forum.org>
- 所有 MPI 官方发行版，包括 Postscript 和 HTML
- 最新版本 MPI 3.1，2015年6月发布

- 网络相关材料

- <https://computing.llnl.gov/tutorials/mpi/>
- <https://mpitutorial.com/tutorials/>
- MPI相关内容和资料

MPI 相关教材

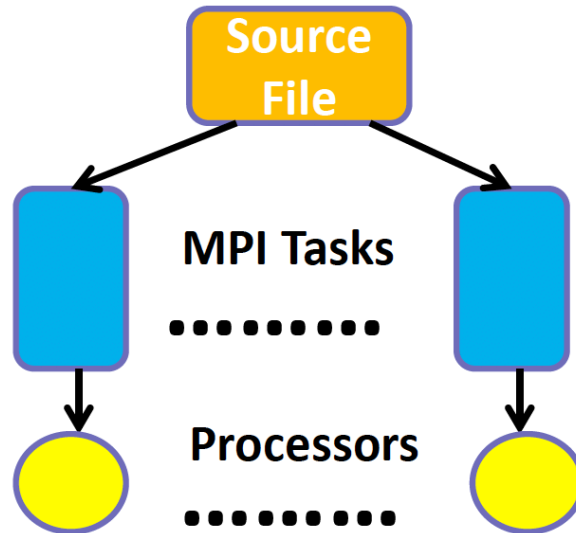
- Using MPI: Portable Parallel Programming with the Message-Passing Interface (2nd edition), by Gropp, Lusk, and Skjellum, MIT Press, 1999.
- Using MPI-2: Portable Parallel Programming with the Message-Passing Interface, by Gropp, Lusk, and Thakur, MIT Press, 1999.
- MPI: The Complete Reference - Vol 1 The MPI Core, by Snir, Otto, Huss-Lederman, Walker, and Dongarra, MIT Press, 1998.
- MPI: The Complete Reference - Vol 2 The MPI Extensions, by Gropp, Huss-Lederman, Lumsdaine, Lusk, Nitzberg, Saphir, and Snir, MIT Press, 1998.
- Designing and Building Parallel Programs, by Ian Foster, Addison-Wesley, 1995.
- 高性能计算并行编程技术-MPI并行程序设计, 都志辉 编著, 2001.



如何写一个基本MPI程序

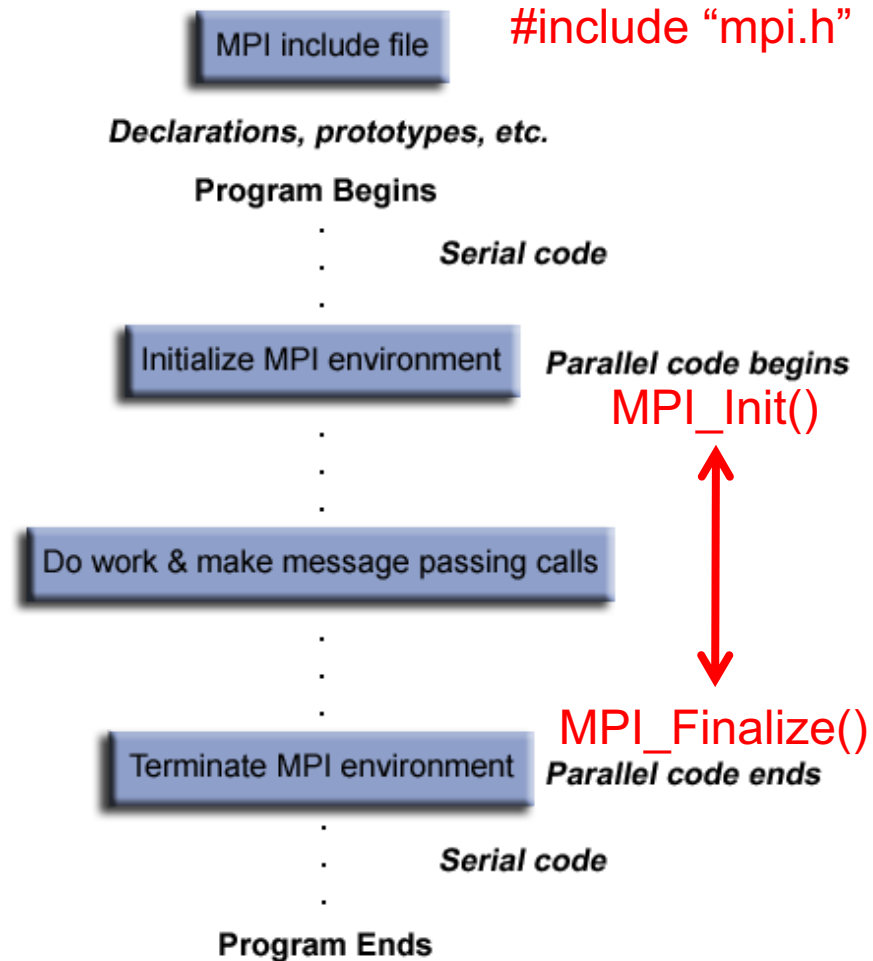
SPMD 编程风格

- **单程序多数据** (Single Program Multiple Data, SPMD)
 - 单个程序、多份数据
 - 允许任务**分支执行**用户指定的**部分程序片段**
 - SPMD: 从**程序级**上看的, 一类典型并行编程风格
 - SIMD: 从**指令级**上看的, 一类常见硬件体系结构



MPI编程基础

- 头文件: "mpi.h"
 - 所有使用MPI库的程序都必需包含
- MPI调用
 - **格式**: `rc = MPI_Xxx (参数, ...)`
 - **示例**: `rc = MPI_Bcast(&buffer, count, datatype, root, comm)`
 - **错误代码**: 返回为 `rc`
如果正确执行 `rc = MPI_SUCCESS`
- MPI通用程序结构
 - 如右图所示

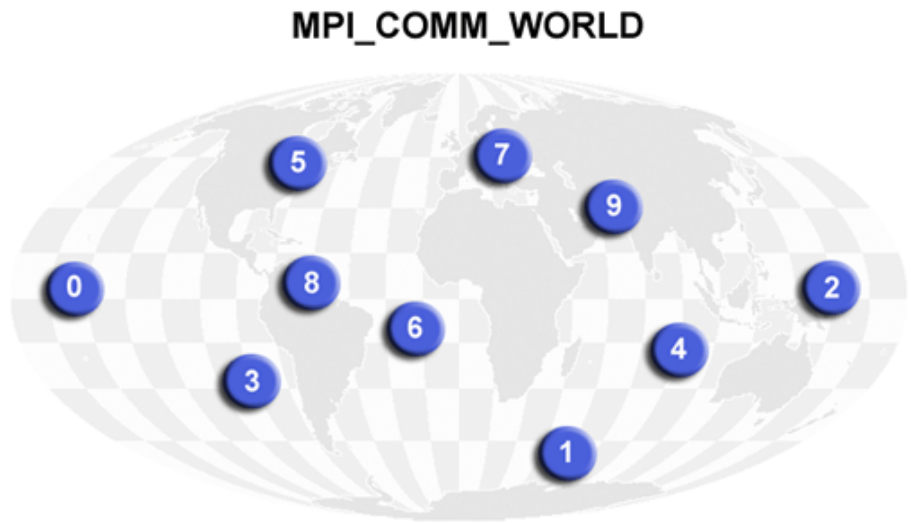


MPI编程基础

- 在并行程序开始有**两个重要问题**
 - 有多少个进程参与此计算？
 - 我是哪一个进程？
- MPI提供了回答以上问题的**函数**：
 - MPI_Comm_size 报告进程数
 - size
 - MPI_Comm_rank 报告进程ID
 - 介于 0 和 size - 1 之间的数字
 - 以唯一识别每个进程

MPI编程基础

- **通信域和组**（Communicator and group）：
 - 组：定义了哪些进程之间可以相互通信
 - 每个组与一个通信域关联，以执行其通信函数调用
 - MPI_COMM_WORLD 是为所有进程预先定义的通信域
- **任务ID**（Rank）
 - 一个通信域中每个进程有唯一标识符（任务ID）
 - 初始化时由系统分配
 - 连续并从零开始



MPI环境配置函数

- MPI_Init ()
 - 初始化MPI运行环境
 - 必须在任何其他MPI函数之前调用
 - 在MPI程序中只能调用一次
- MPI_Finalize ()
 - 终止MPI运行环境
 - 之后不能再调用其他MPI函数
- MPI_Comm_size (comm, &size)
 - 确定与通信域关联的组中的进程数量
- MPI_Comm_rank (comm, &rank)
 - 确定通信域内的Rank
 - Rank通常称为任务ID

示例程序 Hello - C

```
#include "mpi.h"
#include <stdio.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( "I am %d of %d!\n", rank, size );
    MPI_Finalize();
    return 0;
}
```

某次运行输出-5个进程

```
I am 3 of 5!
I am 2 of 5!
I am 0 of 5!
I am 1 of 5!
I am 4 of 5!
```


示例程序 Hello - C++

```
#include "mpi.h"
#include <iostream>

int main( int argc, char *argv[] )
{
    int rank, size;
    MPI::Init( argc, argv );
    rank = MPI::COMM_WORLD.Get_rank();
    size = MPI::COMM_WORLD.Get_size();
    std::cout << "I am " << rank << " of " << size << "\n";
    MPI::Finalize();
    return 0;
}
```

示例程序 Hello - Fortran

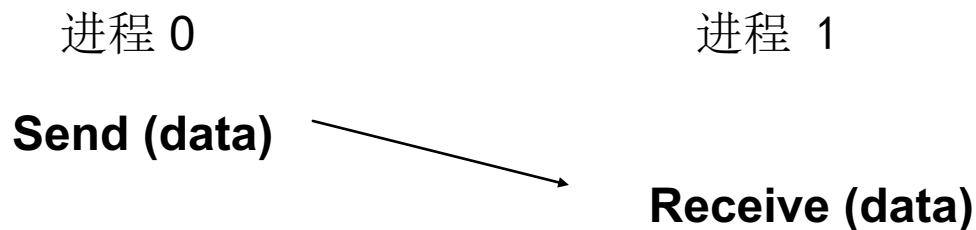
```
program main
include 'mpif.h'
integer ierr, rank, size

call MPI_INIT( ierr )
call MPI_COMM_RANK( MPI_COMM_WORLD, rank, ierr )
call MPI_COMM_SIZE( MPI_COMM_WORLD, size, ierr )
print *, 'I am ', rank, ' of ', size
call MPI_FINALIZE( ierr )
end
```

点对点通信

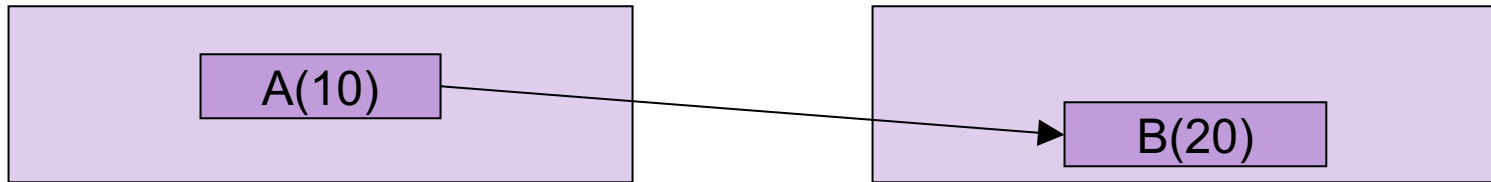
点对点通信：MPI_Send & MPI_Recv

- 需要在其中填写详细信息：



- 需要指定的信息：
 - 如何描述“数据”（data）？
 - 如何确定发送和接收进程？
 - 接收者如何识别/屏蔽不同消息？
 - 这些操作完成意味着什么？

点对点通信：MPI_Send（阻塞）



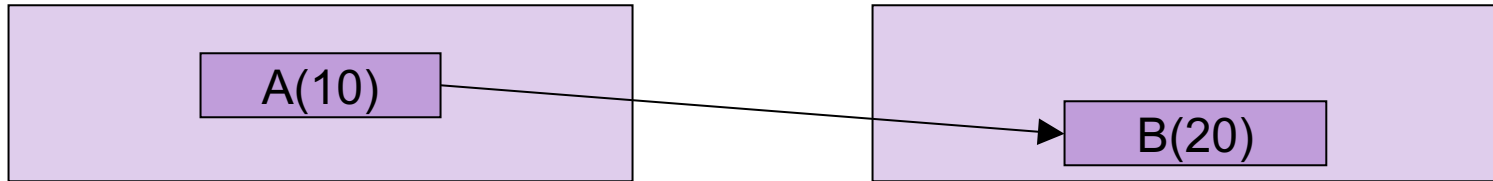
`MPI_Send(A, 10, MPI_DOUBLE, 1, ...)`

`MPI_Recv(B, 20, MPI_DOUBLE, 0, ...)`

MPI_Send (buffer, count, type, dest, tag, comm)

- 发送的数据内容由 (**buffer, count, type**) 描述
- 接收进程由 **dest** 指定，**dest** 是 **comm** 指定的通信域中目标进程的 rank
- 当此函数返回时，数据已转发到系统中，并且消息发送缓冲区**可以被复用**
- **但是**，目标进程可能尚未收到该消息

点对点通信: MPI_Recv (阻塞)



`MPI_Send(A, 10, MPI_DOUBLE, 1, ...)`

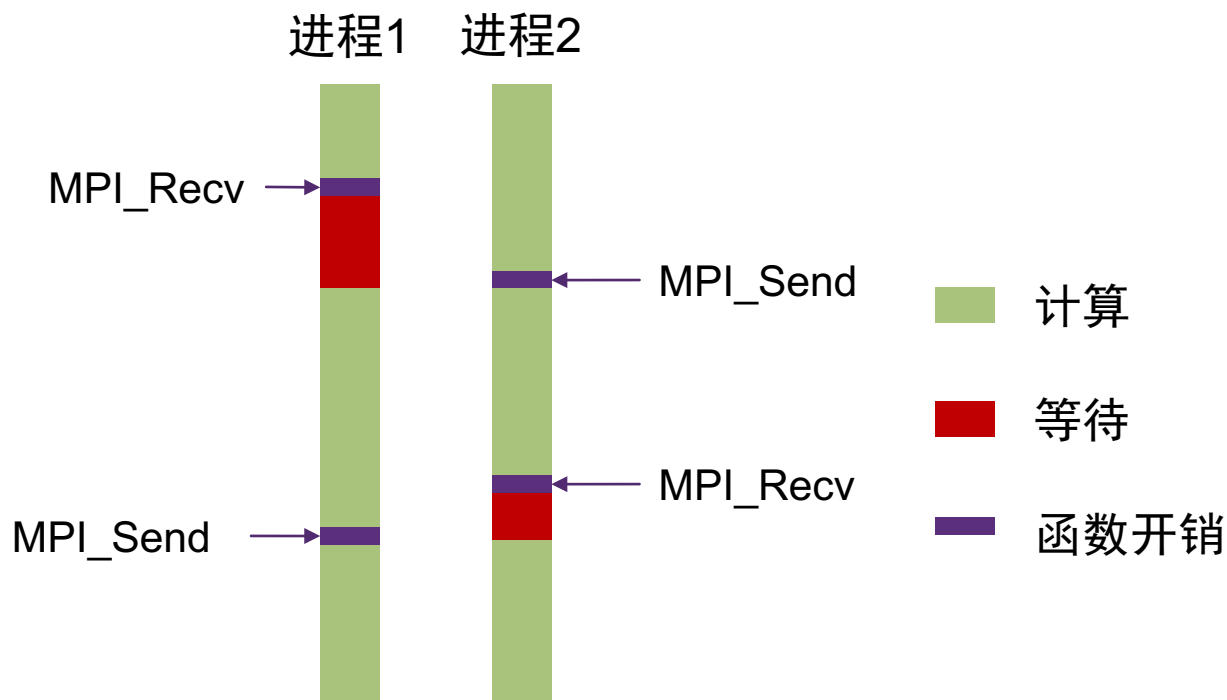
`MPI_Recv(B, 20, MPI_DOUBLE, 0, ...)`

MPI_Recv (buffer, count, type, source, tag, comm, status)

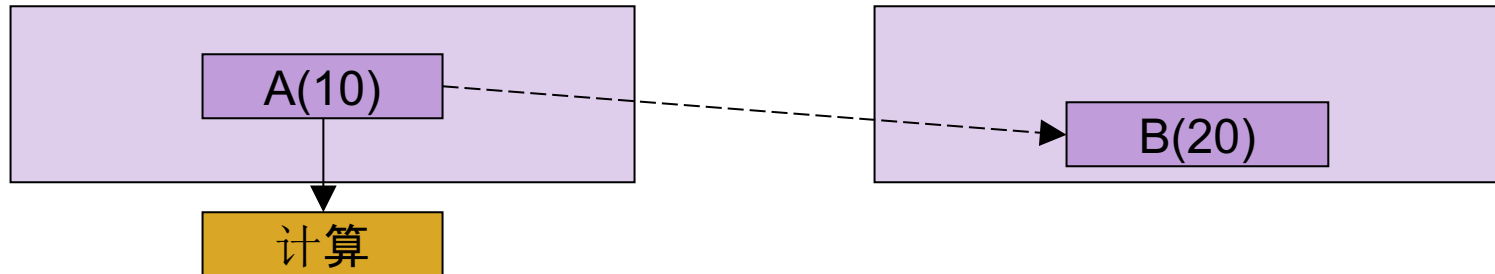
- 接收进程等待，直到从系统收到**匹配的消息**（包括 **source** 和 **tag**），然后接收缓冲区可以被复用
- **source** 是在 **comm** 指定的通信域中的rank（或**MPI_ANY_SOURCE**）
- **tag** 是要匹配的标签（或 **MPI_ANY_TAG**）
- 接收量**少于** **count** 的 **type** 是可以的，但接收量**超出**会导致错误
- **status** 包含更多信息（例如消息大小）

消息传递模型中的通信类型

- 两种基本通信类型
 - 阻塞式通信
 - 非阻塞式通信
- 阻塞式通信
 - 命令发出需通信完成后才返回



点对点通信: MPI_Isend (非阻塞)



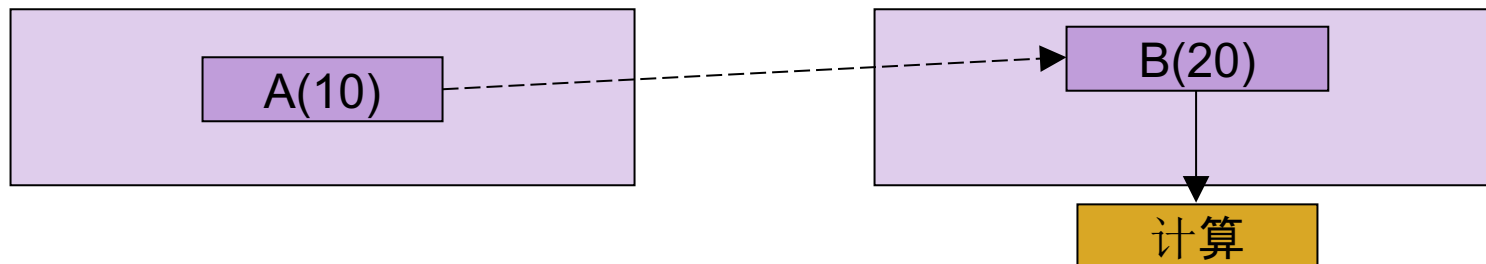
`MPI_Isend(A, 10, MPI_DOUBLE, 1, ...)`

`MPI_Recv(B, 20, MPI_DOUBLE, 0, ...)`

MPI_Isend(buffer, count, type, dest, tag, comm, request)

- **request** 为返回的**非阻塞通信对象**（句柄），用以查询非阻塞发送是否完成
- 该函数启动一个标准的非阻塞发送操作，它**调用后立即返回**，其调用返回并**不意味消息已经成功发送**，只表示该消息可以被发送

点对点通信：MPI_Irecv（非阻塞）



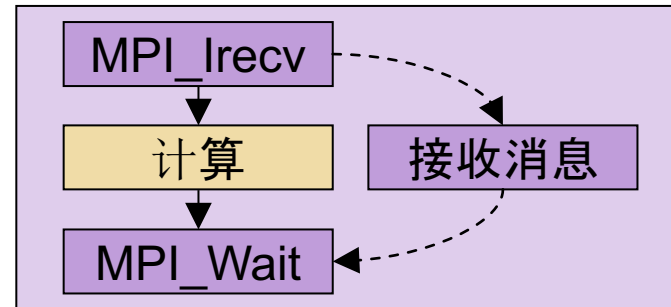
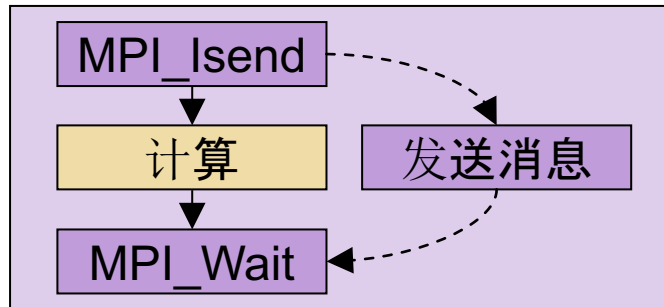
`MPI_Send(A, 10, MPI_DOUBLE, 1, ...)`

`MPI_Irecv(B, 20, MPI_DOUBLE, 0, ...)`

MPI_Irecv (buffer, count, type, source, tag, comm, request)

- **request** 为返回的**非阻塞通信对象**（句柄），用以查询非阻塞接收是否完成
- 该函数启动一个标准的非阻塞接收操作，它**调用后立即返回**
- 其调用返回并**不意味已经接收到相应的消息**，只表示符合要求的消息可以被接收

点对点通信：MPI_Wait / MPI_Waitall



MPI_Wait(request, status)

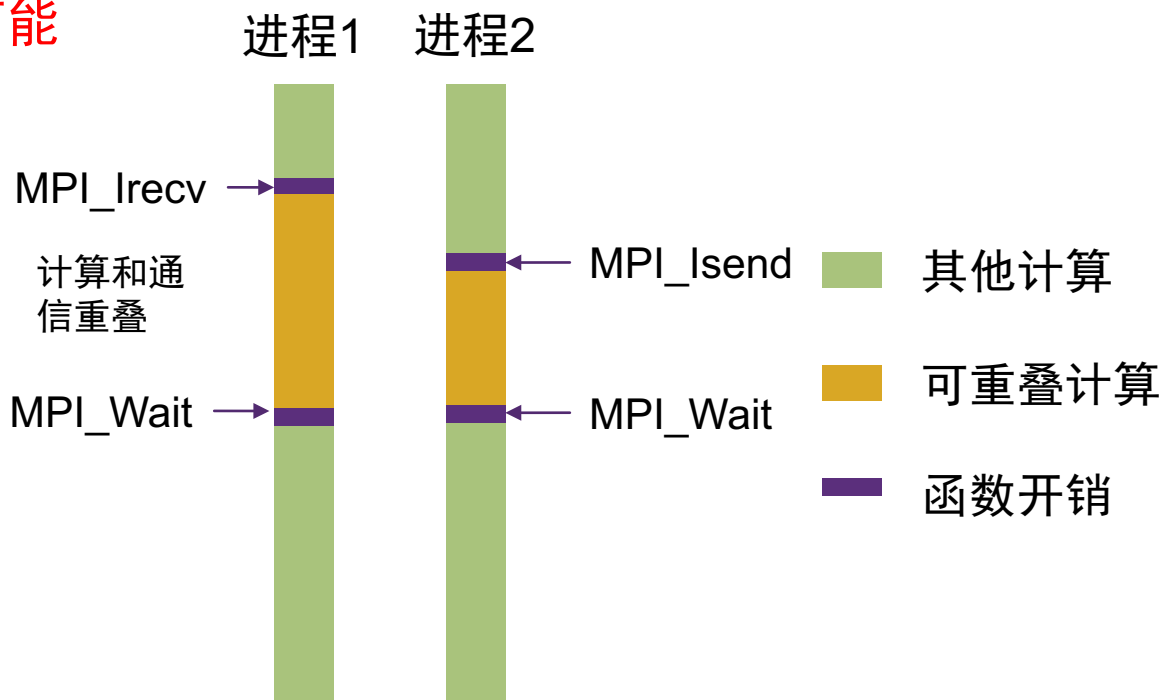
- 该函数以非阻塞通信对象（**request**）为参数，一直等到与该非阻塞通信对象**相应的非阻塞通信完成后才返回**，同时释放该阻塞通信对象

MPI_Waitall(count, array_of_requests, array_of_statuses)

- 该函数必须等到非阻塞通信对象表中**所有的非阻塞通信对象相应的非阻塞操作都完成后才返回**
- count** 表示非阻塞通信对象的个数

消息传递模型中的通信类型

- 两种基本通信类型
 - 阻塞式通信
 - 非阻塞式通信
- 非阻塞式通信
 - 命令发出后，无需通信完成，立即返回
- 提供了计算通信重叠的可能



点对点通信参数

阻塞发送	<code>MPI_Send(buffer, count, type, dest, tag, comm)</code>
非阻塞发送	<code>MPI_Isend(buffer, count, type, dest, tag, comm, request)</code>
阻塞接收	<code>MPI_Recv(buffer, count, type, source, tag, comm, status)</code>
非阻塞接收	<code>MPI_Irecv(buffer, count, type, source, tag, comm, request)</code>

- **buffer** : 表示发送/接收数据的地址空间
- **type** : 表示发送数据的类型, 包括 **MPI_CHAR**, **MPI_SHORT**, **MPI_INT**, **MPI_LONG**, **MPI_DOUBLE**, ...
- **count** : 表示要发送或接收的特定类型的数据元素的数量
- **comm** : 表示通信域
- **source/dest** : 表示发送者/接收者的rank (任务ID)
- **tag** : 是程序员分配的用于唯一标识消息的任意非负整数。发送和接收操作必须匹配相同的消息标签。**MPI_ANY_TAG** 是通配符
- **status** : 操作后状态
- **request** : 用于非阻塞的发送和接收操作

MPI数据类型：MPI_datatype

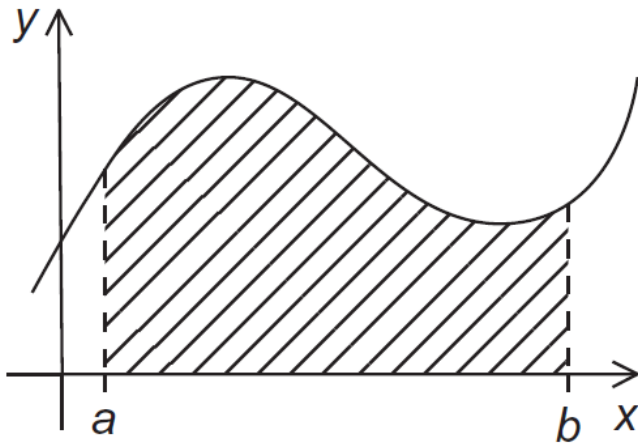
MPI中预定义的数据类型

MPI（C语言）	C语言	MPI（Fortran语言）	Fortran语言
MPI_CHAR	char	MPI_INTEGER	INTEGER
MPI_SHORT	short int	MPI_REAL	REAL
MPI_INT	int	MPI_DOUBLE_PRECISION	DOUBLE_PRECISION
MPI_LONG	long int	MPI_COMPLEX	COMPLEX
MPI_UNSIGNED_CHAR	unsigned char	MPI_DOUBLE_COMPLEX	DOUBLE_COMPLEX
MPI_UNSIGNED_SHORT	unsigned short	MPI_LOGICAL	LOGICAL
MPI_UNSIGNED_INT	unsigned int	MPI_CHARACTER	CHARACTER(1)
MPI_UNSIGNED_LONG	unsigned long	MPI_BYTE	
MPI_FLOAT	float	MPI_PACKED	
MPI_DOUBLE	double		
MPI_LONG_DOUBLE	long double		
MPI_BYTE			
MPI_PACKED			

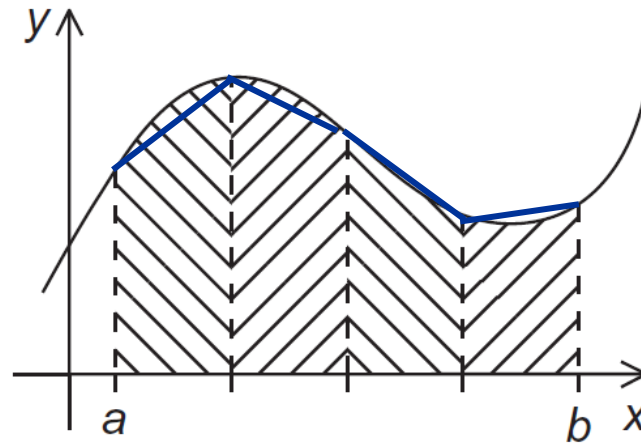
MPI并行编程示例

示例程序：The Trapezoidal Rule（梯形法则）

- 用复合梯形法则来计算积分



(a)



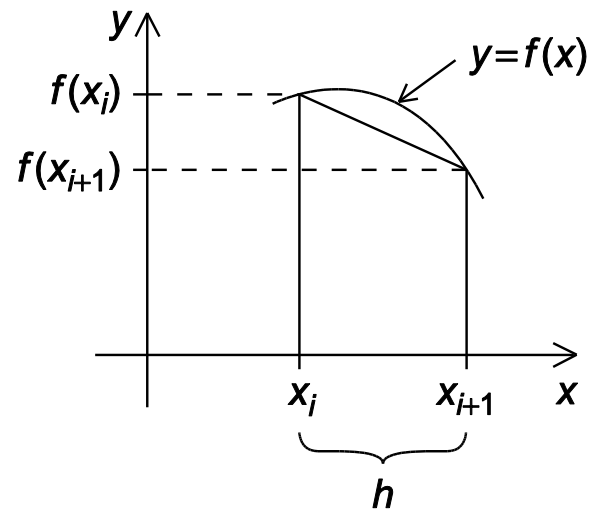
(b)

示例程序：The Trapezoidal Rule（梯形法则）

区间 $[a, b]$ 分为 n 个子区间

一个梯形的面积 = $\frac{h}{2} [f(x_i) + f(x_{i+1})]$

$$h = \frac{b - a}{n}$$



$$x_0 = a, x_1 = a + h, x_2 = a + 2h, \dots, x_{n-1} = a + (n-1)h, x_n = b$$

所有梯形面积的总和 =

$$h \left[\frac{f(x_0)}{2} + f(x_1) + f(x_2) + \dots + f(x_{n-1}) + \frac{f(x_n)}{2} \right]$$

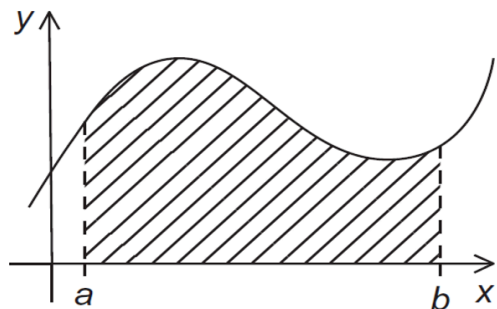
示例程序：The Trapezoidal Rule（梯形法则）

■ 串行伪代码

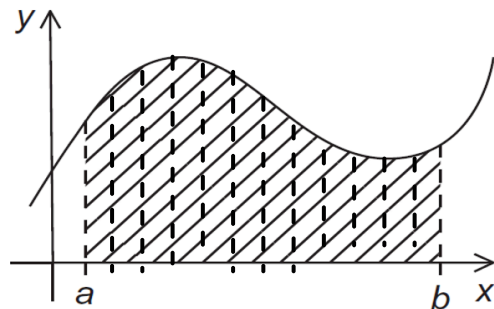
```
/** 输入 a, b, n */  
Get a, b, n;  
h = (b - a) / n;  
approx = (f(a) + f(b)) / 2.0;  
for (i = 1; i <= n-1; i++) {  
    x_i = a + i * h;  
    approx += f(x_i);  
}  
approx = h * approx;
```

梯形法则的并行化策略

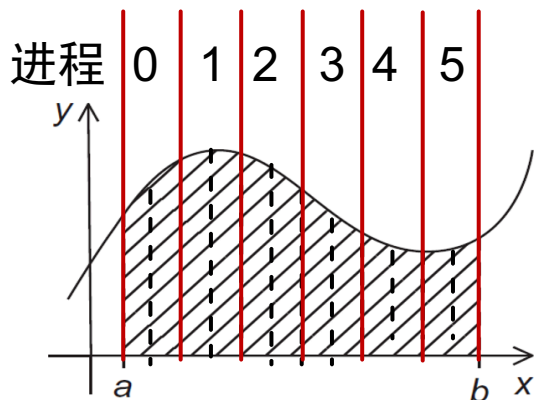
- 将问题划分为子任务并确定子任务之间的关系
- 将子任务映射到不同的计算进程
- 各进程并行计算各自任务并将结果汇总



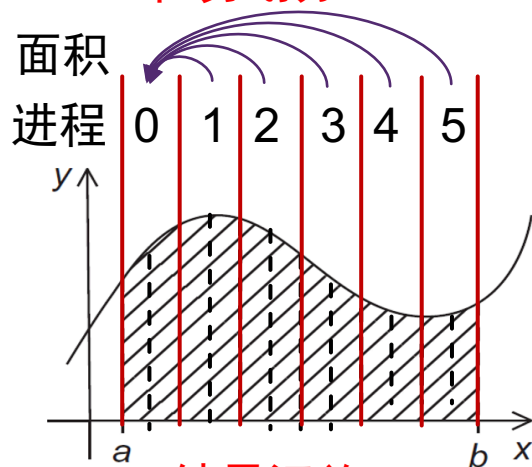
初始问题



任务划分



并行计算



结果汇总

示例程序：The Trapezoidal Rule（梯形法则）

■ 并程序伪代码

```
Get a, b, n;
/** 将计算任务划分至各个进程中 */
h = (b - a) / n;
local_n = n / comm_size; /** local_n 是每个进程计算的梯形数 */
local_a = a + my_rank * local_n * h; /** 计算起点 */
local_b = local_a + local_n * h; /** 计算终点 */

/** 每个进程分别计算对应的计算任务 */
local_integral = Trap(local_a, local_b, local_n, h);

/** 将各个进程的 local_integral 汇总至 0号进程 */
if (my_rank != 0)
    Send local_integral to process 0;
else
    total_integral = local_integral;
    for (proc = 1; proc < comm_size; proc++)
        Receive local_integral from proc;
        total_integral += local_integral;

/** 0号进程输出汇总结果 */
if (my_rank == 0)
    print result;
```

示例程序：The Trapezoidal Rule（梯形法则）

```
int main() {  
    int my_rank, comm_size, n = 1024, local_n;  
    double a = 0.0, b = 3.0, h, local_a, local_b;  
    double local_integral, total_integral;  
    int source;
```

```
    MPI_Init(NULL, NULL);  
    MPI_Comm_rank(MPI_COMM_WORLD, &my_rank);  
    MPI_Comm_size(MPI_COMM_WORLD, &comm_size);
```

```
    /** 将计算任务划分至各个进程中 */
```

```
    h = (b - a) / n;  
    local_n = n / comm_size; /** local_n 是每个进程计算的梯形数 */  
    local_a = a + my_rank * local_n * h;  
    local_b = local_a + local_n * h;
```

```
    /** 每个进程分别计算对应的计算任务 */
```

```
    local_integral = Trap(local_a, local_b, local_n, h);
```

示例程序：The Trapezoidal Rule（梯形法则）

```
/** 将各个进程的 local_integral 汇总至 0号进程 */
```

```
if (my_rank != 0) {  
    MPI_Send(&local_integral, 1, MPI_DOUBLE, 0, 0,  
                                                     MPI_COMM_WORLD);  
} else {  
    total_integral = local_integral;  
    for (source = 1; source < comm_size; source++) {  
        MPI_Recv(&local_integral, 1, MPI_DOUBLE, source, 0,  
                MPI_COMM_WORLD, MPI_STATUS_IGNORE);  
        total_integral += local_integral;  
    }  
}
```

从每个进程接收消息

```
/** 0号进程输出汇总结果 */
```

```
if (my_rank == 0) {  
    printf("With n = %d trapezoids, our estimate\n", n);  
    printf("of the integral from %f to %f = %.15e\n", a, b,  
                                                    total_integral);  
}  
MPI_Finalize();  
return 0;  
} /** main */
```

0号进程输出结果

示例程序：The Trapezoidal Rule（梯形法则）

/ 每个进程的本地运算 */**

```
double Trap (  
    double left_endpt, /* in */  
    double right_endpt, /* in */  
    int trap_count, /* in */  
    double base_len /* in */) {  
    double estimate, x;  
    int i;  
  
    estimate = (f(left_endpt) + f(right_endpt)) / 2.0;  
    for (i = 1; i <= trap_count-1; i++) {  
        x = left_endpt + i * base_len;  
        estimate += f(x);  
    }  
    estimate = estimate * base_len;  
  
    return estimate;  
} /** Trap */
```

集合通信

集合通信（Collective）

- 集合通信提供了一种更高级的方法以表示多个进程间的通信
- 集合通信由通信域中的所有进程共同调用，每个进程执行相同的通信操作
- MPI提供了一系列丰富的集合通信操作
 - 包含: **Allgather, Allgatherv, Allreduce, Alltoall, Alltoallv, Bcast, Gather, Gatherv, Reduce, Reduce_scatter, Scan, Scatter, Scatterv**
 - **All** 前缀的操作表示将数据转发至所有进程中，而不只是单个进程
 - **v** 后缀的操作支持不同进程收发不同大小的数据
- 在许多数值算法中，可以用 **Bcast / Reduce** 代替点对点通信 **Send / Recv**，从而提高简便性和运行效率
 - 很多MPI版本的集合通信底层通过点对点通信实现
 - 典型集合通信实现算法-下节课详细介绍

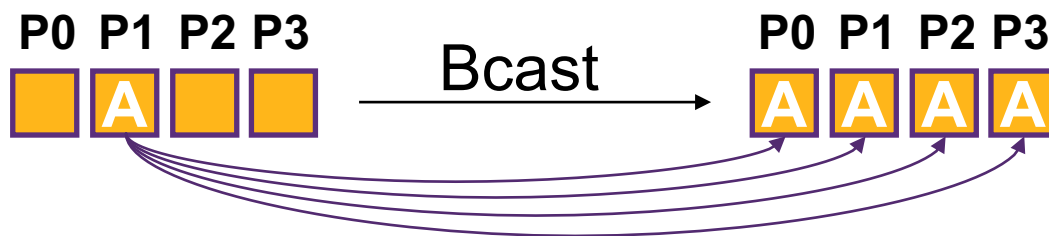
MPI集合通信

集合通信	操作内容
MPI_Bcast	将一个进程的消息广播至组内所有进程
MPI_Reduce	将组内所有进程的消息归约至一个进程
MPI_Gather	将组内每个进程的不同消息收集到一个目标进程
MPI_Scatter	将一个进程的不同消息分发到组内所有进程
MPI_Scan	将一个进程的消息分散至组内所有进程
MPI_Allgather	将消息串联到组内所有进程
MPI_Allreduce	执行归约操作并将结果存在组内所有进程中
MPI_Alltoall	将所有进程的数据转发至所有进程

MPI集合通信：MPI_Bcast（广播）

- MPI_Bcast (&buffer, count, datatype, root, comm)
 - 从rank为**root**的进程广播（发送）消息到**组内所有其他进程**

root = 1; count = 1;



MPI集合通信：MPI_Bcast（广播）

```
int main(int argc, char **argv) {
    int rank, value;
    MPI_Init(&argc, &argv);
    MPI_Comm_rank(MPI_COMM_WORLD, &rank);
    do {
        /** 进程 0 读入需要广播的数据 */
        if (rank == 0)
            scanf("%d", &value);

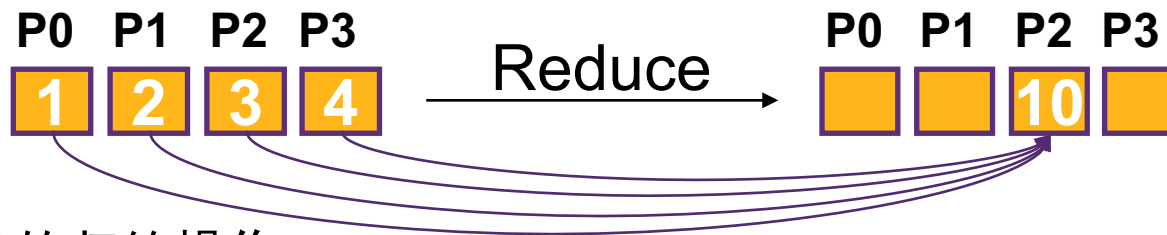
        /** 将该数据广播出去 */
        MPI_Bcast(&value, 1, MPI_INT, 0, MPI_COMM_WORLD);

        /** 各进程打印收到的数据 */
        printf("Process %d got %d\n", rank, value);
    } while (value >= 0);
    MPI_Finalize();
    return 0;
}
```

MPI集合通信：MPI_Reduce（归约）

- MPI_Reduce (&sendbuf, &recvbuf, count, datatype, **op**, dest, comm)
 - 对组中的所有进程**执行归约**操作并将结果汇总在一个进程中

dest = 2; count = 1; op = MPI_SUM



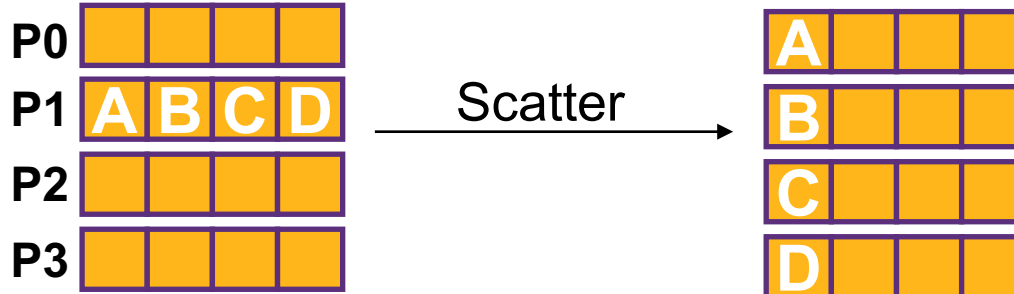
- 预定义的归约操作 - **op**

MPI_MAX	Maximum	MPI_MIN	Minimum
MPI_SUM	Sum	MPI_PROD	Product
MPI_LAND	Logical AND	MPI_BAND	Bit-wise AND
MPI_LOR	Logical OR	MPI_BOR	Bit-wise OR
MPI_LXOR	Logical XOR	MPI_BXOR	Bit-wise XOR

MPI集合通信：MPI_Scatter（分散）

- MPI_Scatter (&sendbuf, sendcnt, sendtype, &recvbuf, recvcnt, recvtype, root, comm)
 - 将不同的消息从root进程分发到组内所有进程

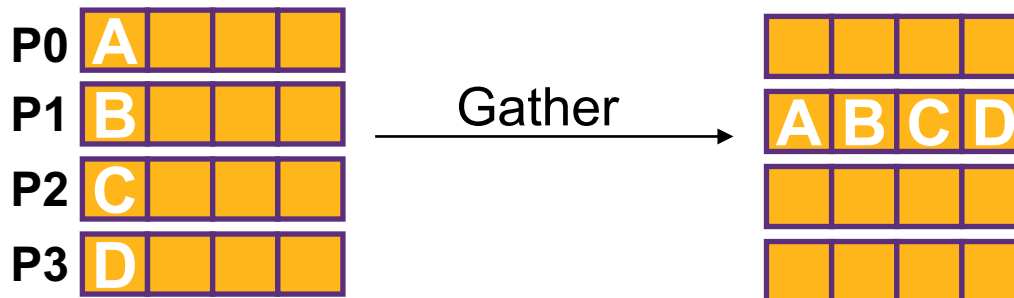
root = 1; sendcnt = recvcnt = 1;



MPI集合通信：MPI_Gather（收集）

- MPI_Gather (&sendbuf, sendcnt, sendtype, &recvbuf, recvcnt, recvtype, root, comm)
 - 收集组中的每个进程的不同消息到一个目标进程的操作
 - 此操作是MPI_Scatter的反向操作

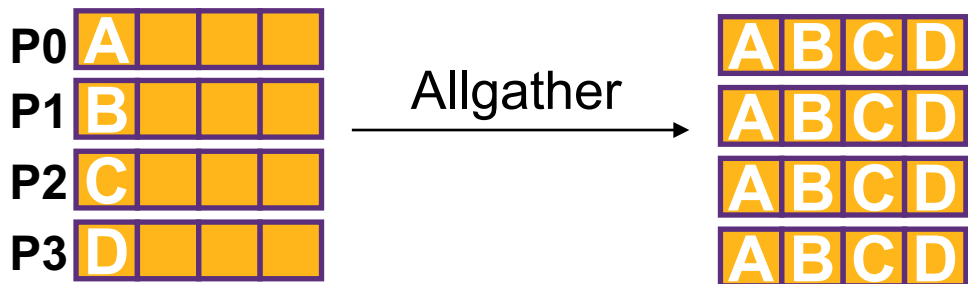
root = 1; sendcnt = recvcnt = 1;



MPI集合通信：MPI_Allgather

- MPI_Allgather (&sendbuf, sendcount, sendtype, &recvbuf, recvcount, recvtype, comm)
 - 将数据串联到所有进程
 - 等效于MPI_Gather操作后再进行MPI_Bcast操作

sendcnt = recvcnt = 1;



MPI集合通信：MPI_Allreduce

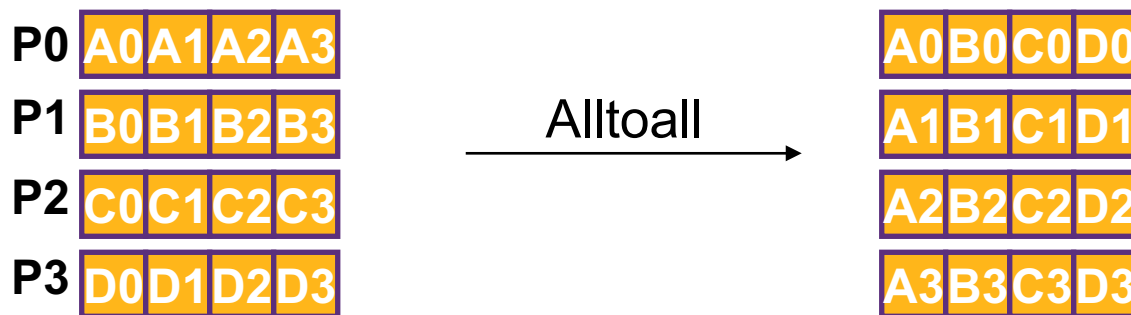
- `MPI_Allreduce(&sendbuf, &recvbuf, count, datatype, op, comm)`
 - 执行归约操作并将结果存至所有进程
 - 等效于MPI_Reduce操作后再进行MPI_Bcast操作

`count = 1; op = MPI_SUM`

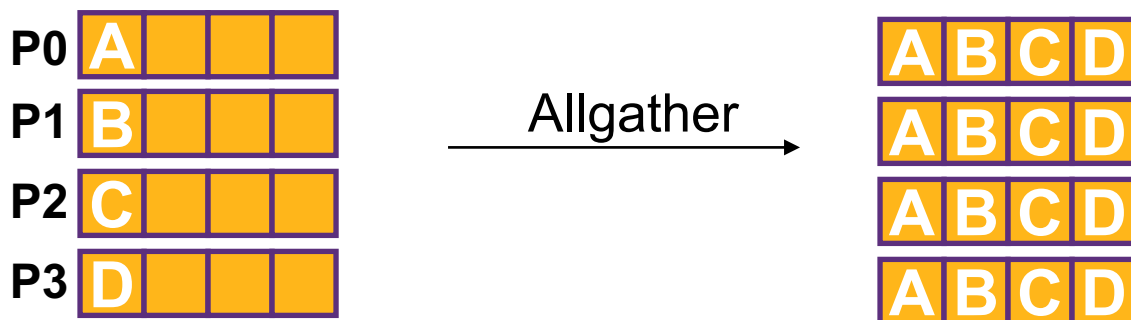


MPI集合通信：MPI_Alltoall

- `MPI_Alltoall`((&sendbuf, sendcount, sendtype, &recvbuf, recvcount, recvtype, comm))
 - 将组内所有进程的数据转发至组内所有进程
 - 等效于n次MPI_Gather操作（n为组内进程数）

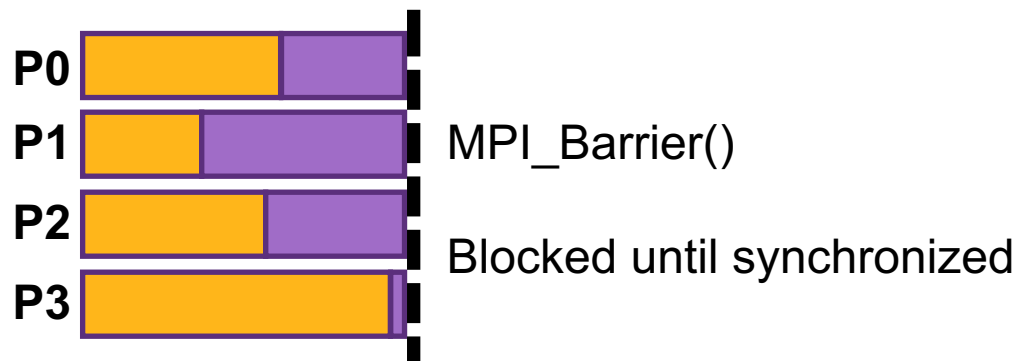


- 与MPI_Allgather的区别如下



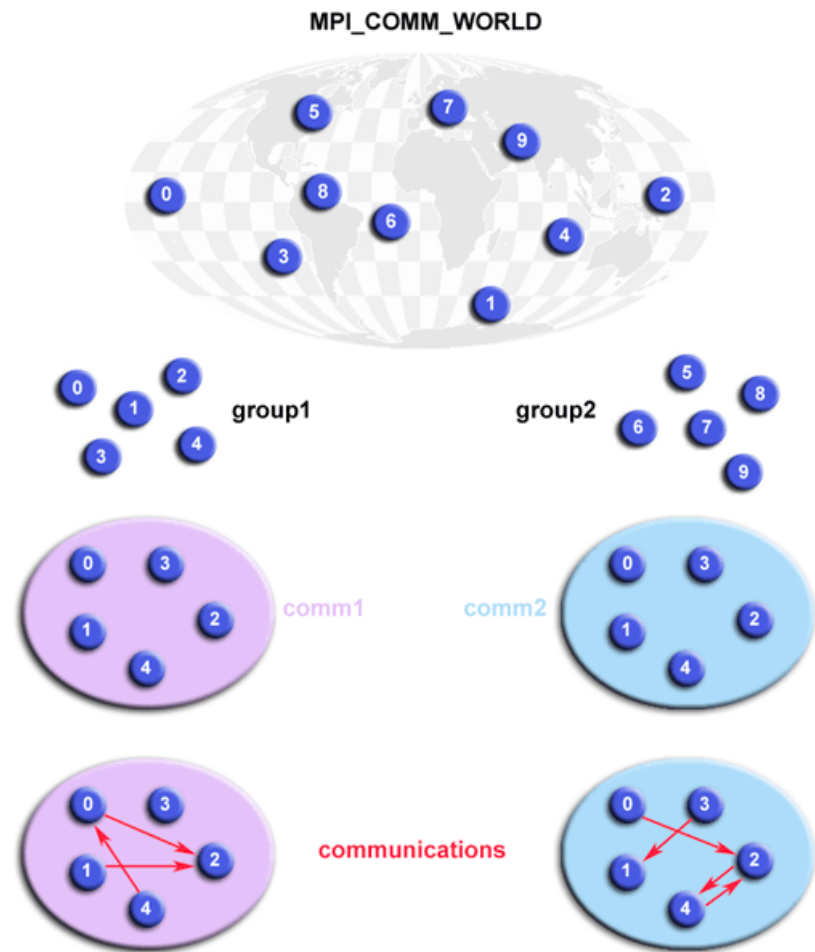
MPI集合通信：MPI_Barrier

- MPI_Barrier (comm)
 - 在组内创建barrier同步
 - 阻塞直到组内所有进程到达相同的MPI_Barrier调用
 - 并行程序中执行同步操作使用



MPI通信域和组的管理

- 组（group）和通信域（communicator）数据类型
 - MPI_Group
 - MPI_Comm
- MPI_Comm_group (Comm, &Group)
 - 访问通信域关联的组
- MPI_Group_incl (Group, size, ranks[], &NewGroup)
 - 通过包含现有组的成员子集来创建组
- MPI_Comm_create (Comm, NewGroup, &NewComm)
 - 创建一个新的通信域
 - 新的通信域必须是原始组的子集



示例程序：MPI 进程分为两个组

```
int rank, numtasks;
MPI_Group orig_group, new_group;
MPI_Comm new_comm;

MPI_Init();
MPI_Comm_rank(MPI_COMM_WORLD, &rank);
MPI_Comm_size(MPI_COMM_WORLD, &numtasks);

/** 提取原始组的 group handler: orig_group */
MPI_Comm_group(MPI_COMM_WORLD, &orig_group);
```

```
/** 根据任务 ID (rank) 将进程分为两组 */
int rank1[4] = {0,1,2,3}, rank2[4] = {5,6,7,8};
if (rank < numtasks/2)
    MPI_Group_incl(orig_group, numtasks/2, rank1, &new_group);
else
    MPI_Group_incl(orig_group, numtasks/2, rank2, &new_group);
```

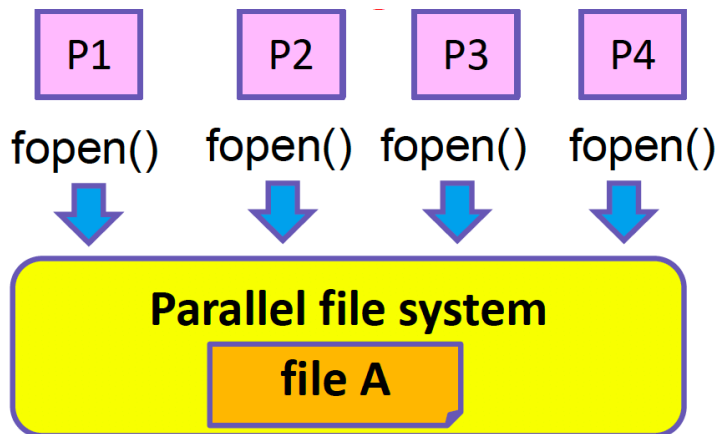
```
/** 创建新的通信域 & 在新的组内广播 */
MPI_Comm_create(MPI_COMM_WORLD, new_group, &new_comm);
MPI_Bcast(new_comm);
MPI_Finalize();
```

MPI-IO

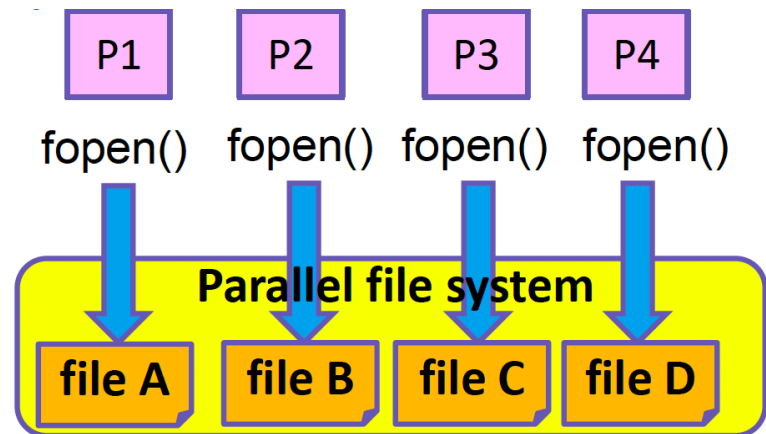
POSIX 文件访问限制

- POSIX文件系统调用 `fopen()`:
 - 不同进程打开同一个文件 -- MPI进程中**包含多个文件句柄**
 - 以**读取权限**打开同一个文件是**可行**的（左下图）
 - 以**写入权限**打开同一个文件是**不可行**的；文件系统锁定机制保证数据一致性
 - 同时写入，则必须创建多个文件（**无法发挥底层并行文件系统性能且难以管理**）（右下图）

以读取权限打开

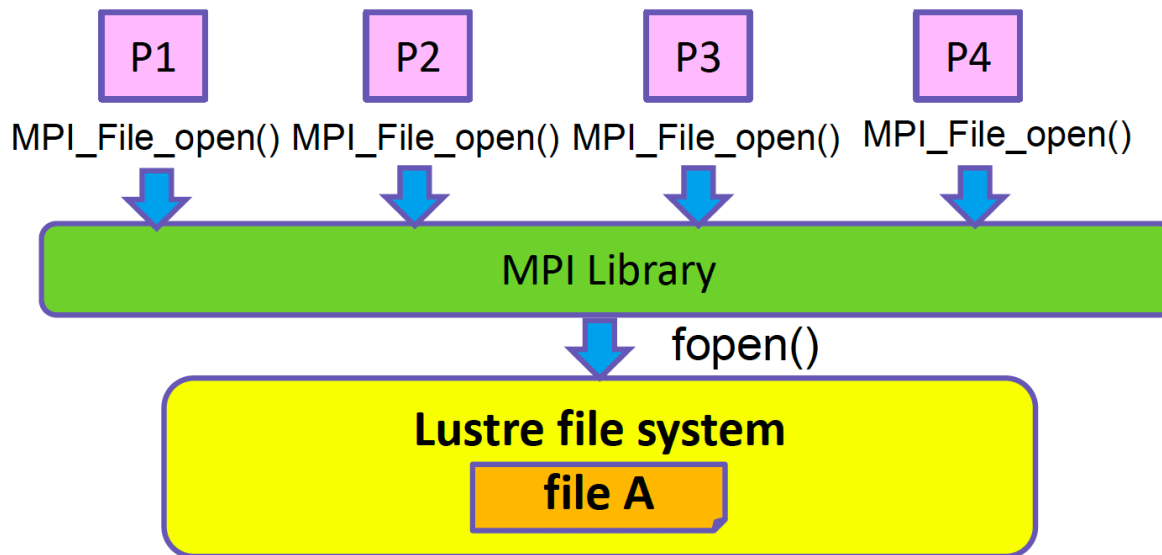


以写入权限打开



MPI-IO 文件访问操作

- MPI-IO调用 `MPI_File_open()`
 - 不同进程文件仅在底层**打开一次**
 - MPI库将共享并彼此同步以使用**相同的文件句柄**
 - 可以**同时进行读写操作**



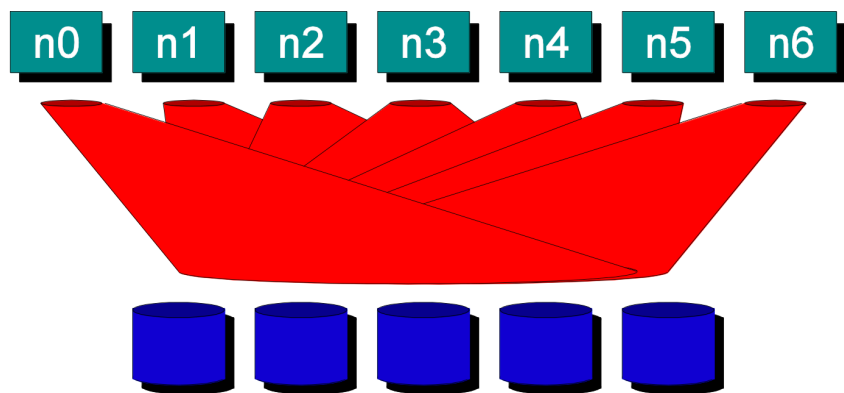
MPI-IO Independent & Collective I/O

■ Independent I/O

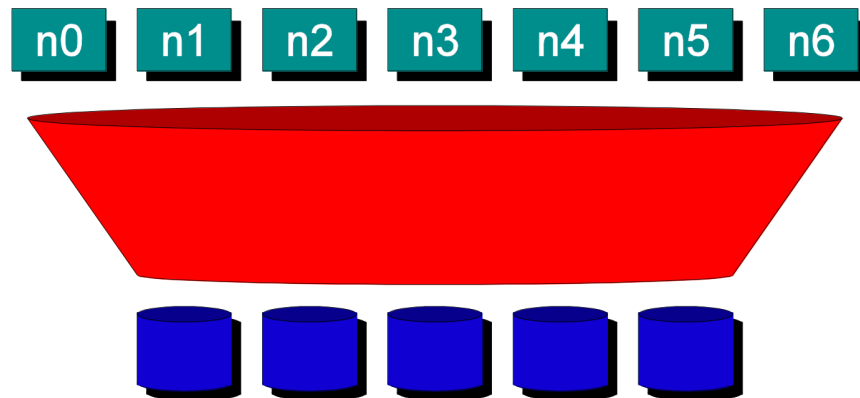
- 每个进程独立访问I/O
- 没有明显的顺序或存取结构

■ Collective I/O

- 一组进程以协调方式进行I/O访问
- 需要所有参与进程一起调用
- 底层并行文件系统能够进行更多的性能优化



Independent I/O

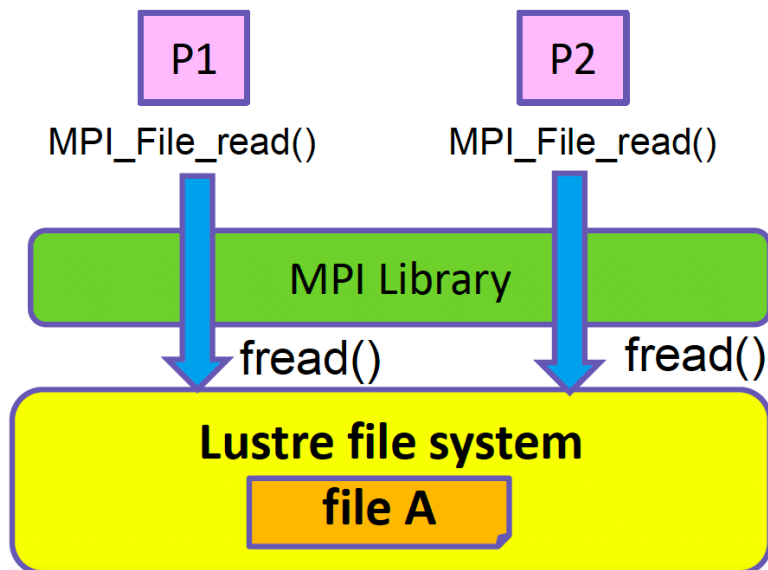


Collective I/O

MPI-IO Independent & Collective I/O

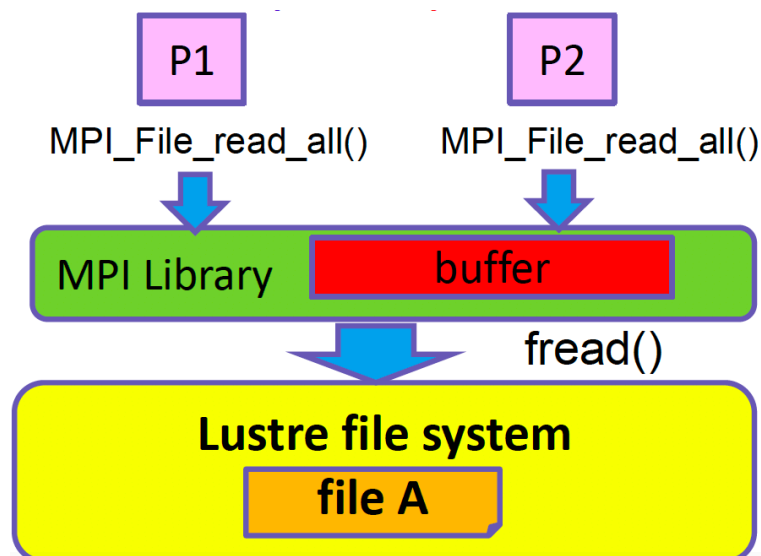
■ Independent I/O

- 单独读/写、无需同步
- 每个进程一个文件请求
- 如果访问相同的OST（存储服务器），则请求被**串行处理**
- 适合**大 I/O 请求**



■ Collective I/O

- 读/写共享内存缓冲区，然后发出**一个文件请求**
- 减少I/O请求个数
 - 适合**小 I/O 请求**
- 不同进程**需要同步**



MPI-IO API

- **MPI_File_open** (MPI_Comm comm, char *filename, int amode, MPI_Info info, MPI_File *fh)
 - 打开一个文件
- **MPI_File_close** (MPI_File *fh)
 - 关闭一个文件
- **MPI_File_read/write** (MPI_File fh, void *buf, int count, MPI_Datatype datatype, MPI_Status *status)
 - Independent 读/写操作
- **MPI_File_read/write_all** (MPI_File fh, void *buf, int count, MPI_Datatype datatype, MPI_Status *status)
 - Collective 读/写操作
- **MPI_File_sync** (MPI_File fh)
 - 将所有新的写操作刷新至存储设备中

MPI-IO API

- **MPI_File_seek** (MPI_File fh, MPI_Offset offset, int whence)
 - 该函数中的 whence 通过以下参数更新文件指针 fh：
 - MPI_SEEK_SET: 指针被设为**偏移量**
 - MPI_SEEK_CUR: 指针被设为**当前指针位置**加偏移量
 - MPI_SEEK_END: 指针被设为**文件末尾位置**加偏移量
- **MPI_File_read_at** (MPI_File fh, MPI_Offset offset, void *buf, int count, MPI_Datatype datatype, MPI_Status *status)
 - 从偏移量 offset 开始读取文件
 - 等效于 MPI_File_seek 加上 MPI_File_read

示例程序：用 MPI-IO 读文件

```
#include <stdio.h>
#include <mpi.h>
#define FILESIZE 80
int main(int argc, char **argv){
    int rank, size, bufsz, nints;
    MPI_File fh;
    MPI_Status status;
    MPI_Init(&argc, &argv);
    MPI_Comm_rank(MPI_COMM_WORLD, &rank);
    MPI_Comm_size(MPI_COMM_WORLD, &size);

    /** 计算每个进程读入数据的大小 */
    bufsz = FILESIZE / size;
    nints = bufsz / sizeof(int);
    int buf[nints];

    /** 打开文件 */
    MPI_File_open(MPI_COMM_WORLD, "file", MPI_MODE_RDONLY, MPI_INFO_NULL, &fh);

    /** 定位指针并读取数据 */
    MPI_File_seek(fh, rank * bufsz, MPI_SEEK_SET);
    MPI_File_read(fh, buf, nints, MPI_INT, &status);
    printf("rank: %d, buf[%d]: %d", rank, rank * bufsz, buf[0]);

    /** 关闭文件 */
    MPI_File_close(&fh);
    MPI_Finalize();
    return 0;
}
```

示例程序：用 MPI-IO 读文件

```
#include <stdio.h>
#include <mpi.h>
#define FILESIZE 80
int main(int argc, char **argv){
    int rank, size, bufszie, nints;
    MPI_File fh;
    MPI_Status status;
    MPI_Init(&argc, &argv);
    MPI_Comm_rank(MPI_COMM_WORLD, &rank);
    MPI_Comm_size(MPI_COMM_WORLD, &size);

    /** 计算每个进程读入数据的大小 */
    bufszie = FILESIZE / size;
    nints = bufszie / sizeof(int);
    int buf[nints];

    /** 打开文件 */
    MPI_File_open(MPI_COMM_WORLD, "file", MPI_MODE_RDONLY, MPI_INFO_NULL, &fh);

    /** 定位指针并读取数据 */
    MPI_File_read_at(fh, rank * bufszie, buf, nints, MPI_INT, &status);
    printf("rank: %d, buf[%d]: %d", rank, rank * bufszie, buf[0]);

    /** 关闭文件 */
    MPI_File_close(&fh);
    MPI_Finalize();
    return 0;
}
```

MPI程序编译与运行

基于Linux系统安装使用OpenMPI

- 以 Ubuntu / Debian 系统为例
- 安装：
 - `sudo apt install openmpi-bin`
- 无需任何配置即可使用
- 编译命令：
 - 使用 `mpicc/mpicxx/mpifort` 编译程序
 - 分别对应 C / C++ / Fortran
- 较为简单，推荐在本地尝试时使用
- 在实验集群上请严格按照手册指示操作

基于Linux系统安装Intel MPI

- **需要先下载**对应的 Intel oneAPI Base Toolkit

- <https://software.intel.com/content/www/us/en/develop/tools/oneapi/base-toolkit/download.html>

- 建议选择 local 版本

- **再下载** oneAPI HPC Toolkit

- <https://software.intel.com/content/www/us/en/develop/tools/oneapi/hpc-toolkit/download.html>

- **安装**

- 先安装 Base Toolkit（文件名以实际下载为准）

- `sudo ./l_BaseKit_p_2021.1.0.2659_offline.sh`

- 使用默认选项，一路选择下一步即可

- 再安装HPC Toolkit

- `sudo ./l_HPCKit_p_2021.1.0.2684_offline.sh`

Select options below to download

Operating System:

Select operating system
Linux

Distribution:

Select distribution
Web & Local (recommended)

Installer Type:

Select installer
Local

基于Linux系统使用Intel MPI

■ 加载 MPI 环境

- `source /opt/intel/oneapi/mpi/latest/env/vars.sh`
- 可以将上述语句加入 `~/.bashrc` 以在登录时自动加载

■ MPI 程序的编译

- 使用 `mpiicpc/mpiicc/mpiifort/mpiifort` 编译程序
- 分别对应 C++ / C / F77 / F90

■ 注意：不同 MPI 实现编译的文件不能混用

- OpenMPI 编译的文件只能用 OpenMPI 运行
- Intel MPI 编译的文件只能用 Intel MPI 运行
- 可以使用 `ldd ./exec_files` 的方式确认
 - 根据 `libmpi.so` 的路径确认使用的 MPI 实现

示例程序

```
int main() {
    char greeting[MAX_STRING];
    int comm_sz, my_rank;

    MPI_Init();
    MPI_Comm_rank(MPI_COMM_WORLD, &my_rank);
    MPI_Comm_size(MPI_COMM_WORLD, &comm_sz);
    if (my_rank != 0) {
        sprintf(greeting, "Greetings from process %d of %d!",
                                   my_rank, comm_sz);
        MPI_Send(greeting, strlen(greeting)+1, MPI_CHAR, 0, 0,
                                   MPI_COMM_WORLD);
    } else {
        printf("Greetings from process %d of %d!", my_rank,
                                   comm_sz);

        for (int s = 1; s < comm_sz; s++) {
            MPI_Recv(greeting, MAX_STRING, MPI_CHAR, s, 0,
                                   MPI_COMM_WORLD, MPI_STATUS_IGNORE);
            printf("%s\n", greeting);
        }
    }
    MPI_Finalize();
    return 0;}
```

MPI 程序的编译与运行

■ 编译命令

- `mpiicc/mpicc -g -o mpi_hello mpi_hello.c`

■ 运行命令

- `mpirun -n <number of processes> <executable>`
- `mpirun -n 1 ./mpi_hello` (运行1个进程)
- `mpirun -n 4 ./mpi_hello` (运行4个进程)

■ 运行结果

```
mpirun -n 1 ./mpi_hello
```

```
Greetings from process 0 of 1 !
```

```
mpirun -n 4 ./mpi_hello
```

```
Greetings from process 0 of 4 !
```

```
Greetings from process 1 of 4 !
```

```
Greetings from process 2 of 4 !
```

```
Greetings from process 3 of 4 !
```

MPI典型实现

MPI的典型实现

■ 常见的 MPI 实现:

- MPICH 阿贡国家实验室
- Intel MPI Intel (Based on MPICH)
- MVAPICH Ohio州立大学 (Based on MPICH)
- OpenMPI Indiana 大学

■ MPICH是MPI在各种机器上的可移植实现

- 可以安装在几乎所有平台上
- 台式机、工作站、SMP服务器等

■ OpenMPI 是目前较有影响力的开源实现

- 版本更新快、采用技术新

总结

- MPI背景
- SPMD
- MPI编程基础
- 点对点通信
- 集合通信
- MPI-IO
- MPI程序编译与运行
- 《高性能计算并行编程技术-MPI并行程序设计》