CPA – Computación Paralela

Grado en Ingeniería Informática

S3. Programación con MPI

J. M. Alonso, P. Alonso, F. Alvarruiz, I. Blanquer,
D. Guerrero, J. Ibáñez, E. Ramos, J. E. Román

Departament de Sistemes Informàtics i Computació
Universitat Politècnica de València

Curso 2020/21

etsinf

UNIVERSITAT POLITÈCNICA DE VALÈNCIA

Contenido

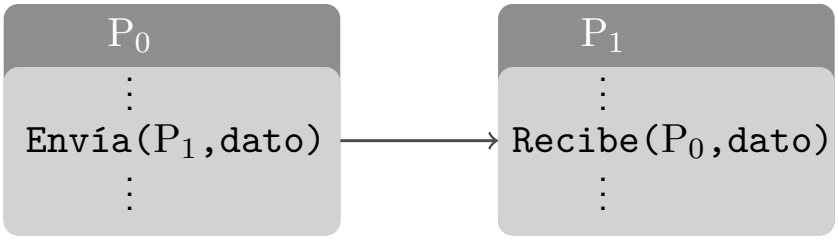
Apartado 1

Conceptos Básicos

- Modelo de Paso de Mensajes
- El Estándar MPI
- Modelo de Programación MPI

Modelo de Paso de Mensajes

Intercambio de información mediante envío y recepción explícitos de mensajes



Modelo más usado en computación a gran escala – Bibliotecas de funciones (aprendizaje más fácil que un lenguaje nuevo)

Ventajas:

- Universalidad
- Fácil comprensión
- Gran expresividad
- Mayor eficiencia

Inconvenientes:

- Programación compleja
- Control total de las comunicaciones

El Estándar MPI

MPI es una especificación propuesta por un comité de investigadores, usuarios y empresas

```
https://www.mpi-forum.org
```

Especificaciones:

- MPI-1.0 (1994), última actualización MPI-1.3 (2008)
- MPI-2.0 (1997), última actualización MPI-2.2 (2009)
- MPI-3.0 (2012), última actualización MPI-3.1 (2015)

Antecedentes:

- Cada fabricante ofrecía su propio entorno (migración costosa)
- PVM (*Parallel Virtual Machine*) fue un primer intento de estandarización

Características de MPI

Características principales:

- Es portable a cualquier plataforma paralela
- Es simple (con tan sólo 6 funciones se puede implementar cualquier programa)
- Es potente (más de 300 funciones)

El estándar especifica interfaz para C y Fortran

Hay muchas implementaciones disponibles:

- Propietarias: IBM, Cray, SGI, ...
- MPICH (`www.mpich.org`)
- Open MPI (`www.open-mpi.org`)
- MVAPICH (`mvapich.cse.ohio-state.edu`)

Modelo de Programación

La programación en MPI se basa en funciones de biblioteca
Para su uso, se requiere una inicialización

Ejemplo

```
#include <mpi.h>
int main(int argc, char* argv[]) {
  int k;       /* rango del proceso  */
  int p;       /* número de procesos */
  MPI_Init(&argc, &argv);
  MPI_Comm_rank(MPI_COMM_WORLD, &k);
  MPI_Comm_size(MPI_COMM_WORLD, &p);
  printf("Soy el proceso %d de %d\n", k, p);
  MPI_Finalize();
  return 0;
}
```

- Es obligatorio llamar a `MPI_Init` y `MPI_Finalize`
- Una vez inicializado, se pueden realizar diferentes operaciones

Modelo de Programación – Operaciones

Las operaciones se pueden agrupar en:

- Comunicación punto a punto
  Intercambio de información entre pares de procesos
- Comunicación colectiva
  Intercambio de información entre conjuntos de procesos
- Gestión de datos
  Tipos de datos derivados (p.e. datos no contiguos en memoria)
- Operaciones de alto nivel
  Grupos, comunicadores, atributos, topologías
- Operaciones avanzadas (MPI-2, MPI-3)
  Entrada-salida, creación de procesos, comunicación unilateral
- Utilidades
  Interacción con el entorno del sistema

La mayoría operan sobre comunicadores

Modelo de Programación – Comunicadores

Un comunicador es una abstracción que engloba los siguientes conceptos:

- *Grupo*: conjunto de procesos
- *Contexto*: para evitar interferencias entre mensajes distintos

Un comunicador agrupa a p procesos

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

Cada proceso tiene un identificador (rango), un número entre 0 y $p-1$

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

MPI_Comm_rank(MPI_COMM_WORLD, &variable int para identificador)

= OMP_GET_THREAD_NUM

Modelo de Ejecución

El modelo de ejecución de MPI sigue un esquema de creación simultánea de procesos al lanzar la aplicación

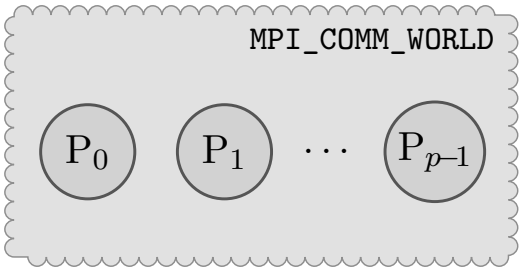
La ejecución de una aplicación suele hacerse con

```
mpiexec -n p programa [argumentos]
```

Al ejecutar una aplicación:

- Se lanzan p copias del mismo ejecutable
- Se crea un comunicador `MPI_COMM_WORLD` que engloba a todos los procesos

MPI-2 ofrece un mecanismo para crear nuevos procesos



Apartado 2

Comunicación Punto a Punto

- Semántica
- Primitivas Bloqueantes
- Otras Primitivas
- Ejemplos

Comunicación Punto a Punto – el Mensaje

Los mensajes deben ser enviados explícitamente por el emisor y recibidos explícitamente por el receptor

Envío estándar:

```
MPI_Send(buf, count, datatype, dest, tag, comm)
```

Recepción estándar:

```
MPI_Recv(buf, count, datatype, src, tag, comm, stat)
```

El contenido del mensaje viene definido por los 3 primeros argumentos:

- Un *buffer* de memoria donde está almacenada la información
- El número de elementos que componen el mensaje
- El tipo de datos de los elementos (p.e. `MPI_INT`)

Comunicación Punto a Punto – el Sobre

Para efectuar la comunicación, es necesario indicar el destino (`dest`) y el origen (`src`)

- La comunicación está permitida sólo dentro del mismo comunicador, `comm`
- El origen y el destino se indican mediante identificadores de procesos
- En la recepción se permite utilizar `src=MPI_ANY_SOURCE`

Se puede utilizar un número entero (etiqueta o `tag`) para distinguir mensajes de distinto tipo

- En la recepción se permite utilizar `tag=MPI_ANY_TAG`

En la recepción, el estado (`stat`) contiene información:

- Proceso emisor (`stat.MPI_SOURCE`), etiqueta (`stat.MPI_TAG`)
- Longitud del mensaje (explicado en p. 43)

Nota: pasar `MPI_STATUS_IGNORE` si no se requiere

Modos de Envío Punto a Punto

Existen los siguientes modos de envío:

- Modo de envío síncrono
- Modo de envío con memoria intermedia (buffer)
- Modo de envío estándar

El modo estándar es el más utilizado

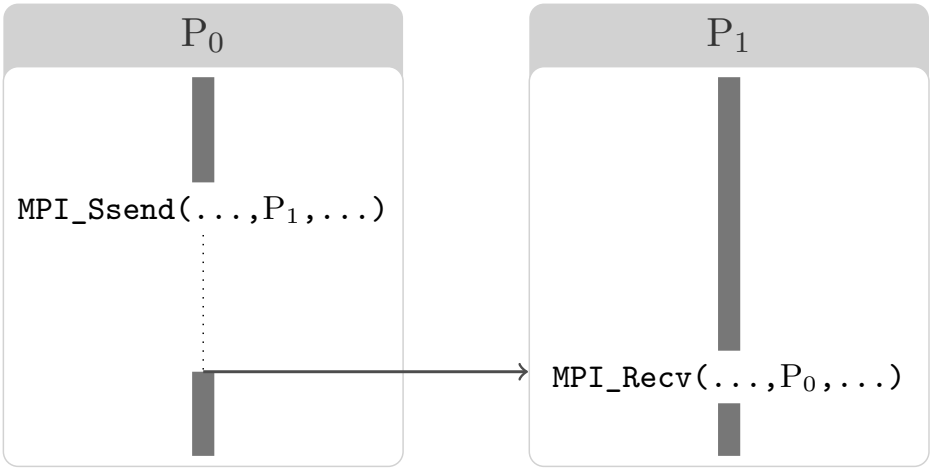
El resto de modos pueden ser útiles para obtener mejores prestaciones o mayor robustez

Para cada modo, existen primitivas bloqueantes y no bloqueantes

Modo de Envío Síncrono

```
MPI_Ssend(buf, count, datatype, dest, tag, comm)
```

Implementa el modelo de envío con "rendezvous": el emisor se bloquea hasta que el receptor desea recibir el mensaje

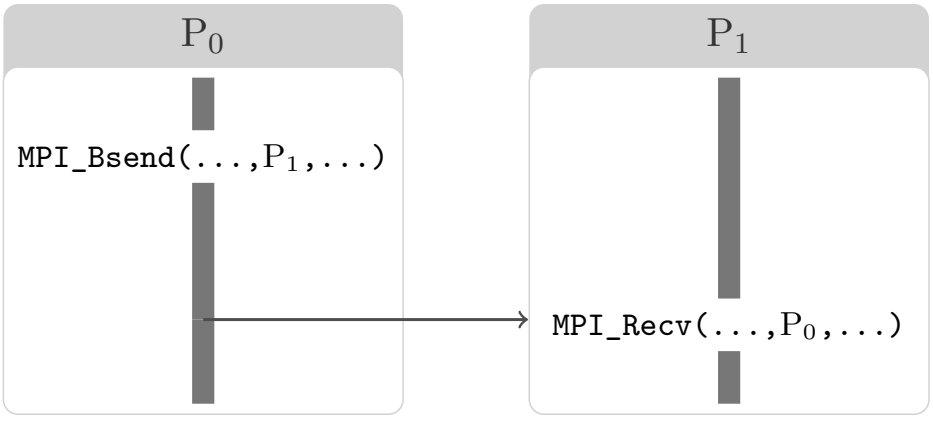


- Ineficiente: el emisor queda bloqueado sin hacer nada útil

Modo de Envío con Buffer

```
MPI_Bsend(buf, count, datatype, dest, tag, comm)
```

El mensaje se copia a una memoria intermedia y el proceso emisor continúa su ejecución



- Inconvenientes: copia adicional y posibilidad de fallo
- Se puede proporcionar un buffer (`MPI_Buffer_attach`)

Modo de Envío Estándar

& si no es vector

```
MPI_Send(buf, count, datatype, dest, tag, comm)
```

MPI_Send(&variable a enviar, nº de datos a enviar, MPI_tipo_dato, nº de proceso, etiqueta (cualquiera), MPI_COMM_WORLD);

Garantiza el funcionamiento en todo tipo de sistemas ya que evita problemas de almacenamiento

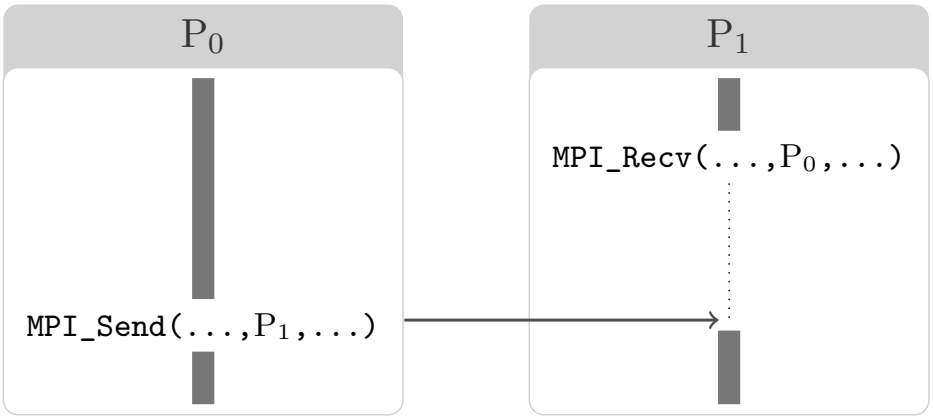
- Los mensajes cortos son enviados generalmente con `MPI_Bsend`
- Los mensajes largos son enviados generalmente con `MPI_Ssend`

Recepción Estándar

```
MPI_Recv(buf, count, datatype, src, tag, comm, stat)
```

MPI_Recv(&dirección donde se va a almacenar el dato, nº datos a recibir, MPI_tipo_dato, fuente, etqueta_fuente, MPI_COMM_WORLD,&status);

Implementa el modelo de recepción con "rendezvous": el receptor se bloquea hasta que el mensaje llega



- Ineficiente: el proceso receptor queda bloqueado sin hacer nada útil

Primitivas de Envío No Bloqueantes

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

Se inicia el envío, pero el emisor no se bloquea

- Tiene un argumento adicional (`req`)
- Para reutilizar el buffer es necesario asegurarse de que el envío se ha completado

Ejemplo

```
MPI_Isend(A, n, MPI_DOUBLE, dest, tag, comm, &req);
...
/* Comprobar que el envío ha terminado,
   con MPI_Test o MPI_Wait */
A[10] = 2.6;
```

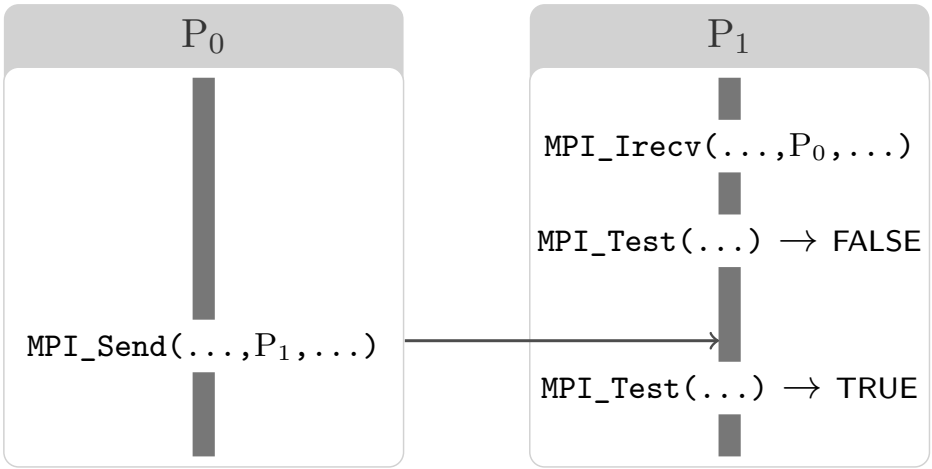
- Solapamiento de comunicación y cálculo sin copia extra
- Inconveniente: programación más difícil

Recepción No Bloqueante

```
MPI_Irecv(buf, count, type, src, tag, comm, req)
```

Se inicia la recepción, pero el receptor no se bloquea

- Se sustituye el argumento `stat` por `req`
- Es necesario comprobar después si el mensaje ha llegado



- Ventaja: solapamiento de comunicación y cálculo
- Inconveniente: programación más difícil

Operaciones Combinadas

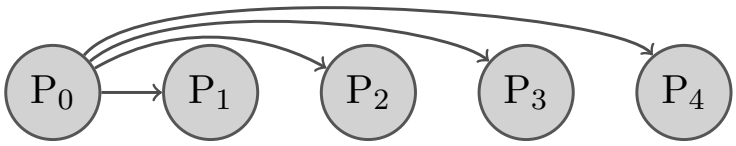
```
MPI_Sendrecv(sendbuf, sendcount, sendtype, dest, sendtag,
  recvbuf, recvcount, recvtype, source, recvtag, comm,
                        status)
```

Realiza una operación de envío y recepción al mismo tiempo (no necesariamente con el mismo proceso)

```
MPI_Sendrecv_replace(buf, count, datatype, dest, sendtag,
              source, recvtag, comm, status)
```

Realiza una operación de envío y recepción al mismo tiempo sobre la misma variable

Ejemplo – Difusión



Difusión de un valor numérico desde P_0

```
double val;
MPI_Status status;
int p, rank, i;

MPI_Comm_size(MPI_COMM_WORLD, &p);
MPI_Comm_rank(MPI_COMM_WORLD, &rank);
if (rank == 0) {
  read_value(&val);     /* valor a difundir */
  for (i=1; i<p; i++)
    MPI_Send(&val,1,MPI_DOUBLE,i,0,MPI_COMM_WORLD);
} else {
  MPI_Recv(&val,1,MPI_DOUBLE,0,0,MPI_COMM_WORLD,&status);
}
```

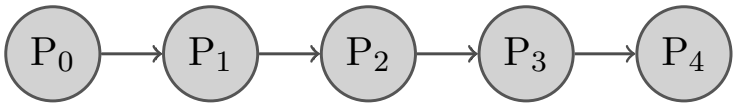
Ejemplo – Desplazamiento en Malla 1-D (1)

Cada proceso ha de enviar su dato al vecino derecho y sustituirlo por el dato que recibe del vecino izquierdo

Desplazamiento en Malla 1-D – versión trivial

```
if (rank == 0) {
  MPI_Send(&val, 1, MPI_DOUBLE, rank+1, 0, comm);
} else if (rank == p-1) {
  MPI_Recv(&val, 1, MPI_DOUBLE, rank-1, 0, comm, &status);
} else {
  MPI_Send(&val, 1, MPI_DOUBLE, rank+1, 0, comm);
  MPI_Recv(&val, 1, MPI_DOUBLE, rank-1, 0, comm, &status);
}
```

Inconveniente: Secuencialización - las comunicaciones se realizan (probablemente) secuencialmente, sin concurrencia



Ejemplo – Desplazamiento en Malla 1-D (2)

En algunos casos, la programación se puede simplificar utilizando procesos nulos

Desplazamiento en Malla 1-D – procesos nulos

```
if (rank == 0) prev = MPI_PROC_NULL;
else prev = rank-1;
if (rank == p-1) next = MPI_PROC_NULL;
else next = rank+1;

MPI_Send(&val, 1, MPI_DOUBLE, next, 0, comm);
MPI_Recv(&val, 1, MPI_DOUBLE, prev, 0, comm, &status);
```

El envío al proceso `MPI_PROC_NULL` finaliza enseguida; la recepción de un mensaje del proceso `MPI_PROC_NULL` no recibe nada y finaliza enseguida

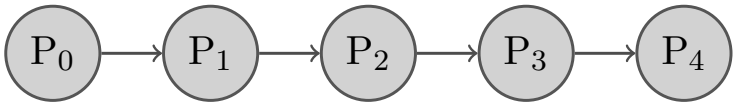
Esta versión no resuelve el problema de la secuencialización

Ejemplo – Desplazamiento en Malla 1-D (3)

Solución a la secuencialización: Protocolo Pares-Impares

Desplazamiento en Malla 1-D – pares-impares

```
if (rank == 0) prev = MPI_PROC_NULL;
else prev = rank-1;
if (rank == p-1) next = MPI_PROC_NULL;
else next = rank+1;

if (rank%2 == 0) {
  MPI_Send(&val, 1, MPI_DOUBLE, next, 0, comm);
  MPI_Recv(&val, 1, MPI_DOUBLE, prev, 0, comm, &status);
} else {
  MPI_Recv(&tmp, 1, MPI_DOUBLE, prev, 0, comm, &status);
  MPI_Send(&val, 1, MPI_DOUBLE, next, 0, comm);
  val = tmp;
}
```

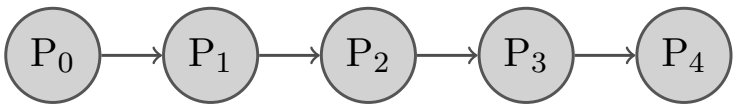


Ejemplo – Desplazamiento en Malla 1-D (4)

Solución a la secuencialización: Operaciones Combinadas

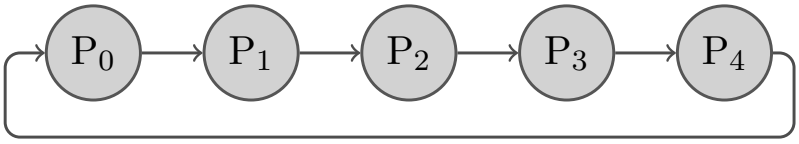
Desplazamiento en Malla 1-D – sendrecv

```
if (rank == 0) prev = MPI_PROC_NULL;
else prev = rank-1;
if (rank == p-1) next = MPI_PROC_NULL;
else next = rank+1;

MPI_Sendrecv_replace(&val, 1, MPI_DOUBLE, next, 0, prev, 0,
                     comm, &status);
```



Ejemplo – Desplazamiento en Anillo

En el caso del anillo, todos los procesos han de enviar y recibir



Desplazamiento en Anillo – versión trivial

```
if (rank == 0) prev = p-1;
else prev = rank-1;
if (rank == p-1) next = 0;
else next = rank+1;

MPI_Send(&val, 1, MPI_DOUBLE, next, 0, comm);
MPI_Recv(&val, 1, MPI_DOUBLE, prev, 0, comm, &status);
```

Se producirá interbloqueo en el caso de envío síncrono
Soluciones: protocolo pares-impares u operaciones combinadas

Apartado 3

Comunicación Colectiva

- Sincronización
- Difusión
- Reparto
- Reducción

Operaciones de Comunicación Colectiva

Involucran a todos los procesos de un grupo (comunicador) – todos ellos deben ejecutar la operación

Operaciones disponibles:

- Sincronización (*Barrier*)
- Difusión (*Bcast*)
- Reparto (*Scatter*)
- Recogida (*Gather*)
- Multi-recogida (*Allgather*)
- Todos a todos (*Alltoall*)
- Reducción (*Reduce*)
- Prefijación (*Scan*)

Estas operaciones suelen tener como argumento un proceso (`root`) que realiza un papel especial

Prefijo "`All`": Todos los procesos reciben el resultado

Sufijo "`v`": La cantidad de datos en cada proceso es distinta

Sincronización

```
MPI_Barrier(comm)
```

Operación pura de sincronización

- Todos los procesos de `comm` se detienen hasta que todos ellos han invocado esta operación

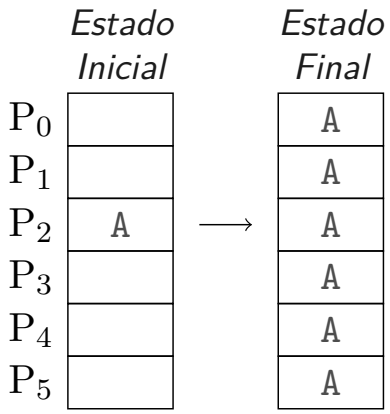
Ejemplo – medición de tiempos

```
MPI_Barrier(comm);
t1 = MPI_Wtime();
/*
    ...
*/
MPI_Barrier(comm);
t2 = MPI_Wtime();

if (!rank) printf("Tiempo transcurrido: %f s.\n", t2-t1);
```

Difusión

```
MPI_Bcast(buffer, count, datatype, root, comm)
```

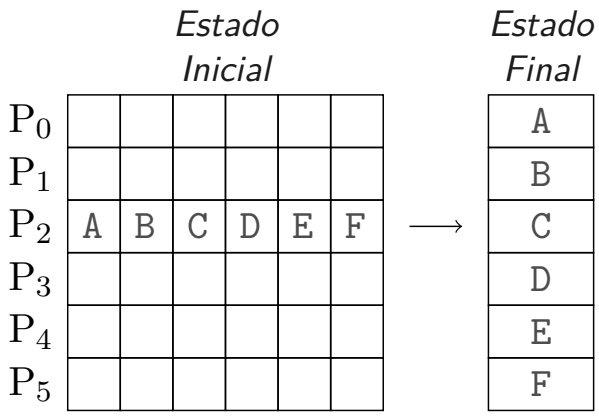
El proceso `root` difunde al resto de procesos el mensaje definido por los 3 primeros argumentos



Reparto

```
MPI_Scatter(sendbuf, sendcount, sendtype, recvbuf,
        recvcount, recvtype, root, comm)
```

El proceso `root` distribuye una serie de fragmentos consecutivos del buffer al resto de procesos (incluyendo él mismo)



Versión asimétrica: `MPI_Scatterv`

Reparto: Ejemplo

El proceso P_0 reparte un vector de 15 elementos (a) entre 3 procesos que reciben los datos en el vector b

Ejemplo de reparto

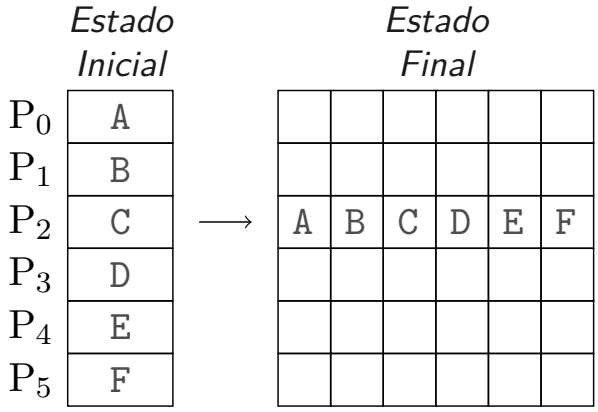
```
int main(int argc, char *argv[])
{
  int i, myproc;
  int a[15], b[5];

  MPI_Init(&argc, &argv);
  MPI_Comm_rank(MPI_COMM_WORLD, &myproc);
  if (myproc==0) for (i=0;i<15;i++) a[i] = i+1;

  MPI_Scatter(a, 5, MPI_INT, b, 5, MPI_INT, 0, MPI_COMM_WORLD);

  MPI_Finalize();
  return 0;
}
```


Recogida

Para vectores

```
MPI_Gather(sendbuf, sendcount, sendtype, recvbuf,
           recvcount, recvtype, root, comm)
```

Es la operación inversa de `MPI_Scatter`: Cada proceso envía un mensaje a `root`, el cual lo almacena de forma ordenada de acuerdo al índice del proceso en el buffer de recepción

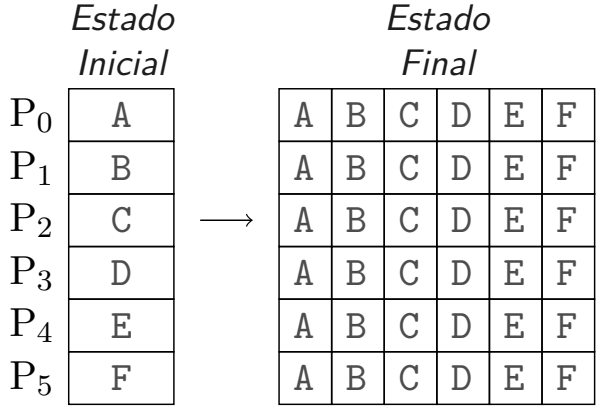


Versión asimétrica: `MPI_Gatherv`

Multi-Recogida

```
MPI_Allgather(sendbuf, sendcount, sendtype, recvbuf,
              recvcount, recvtype, comm)
```

Similar a la operación `MPI_Gather`, pero todos los procesos obtienen el resultado

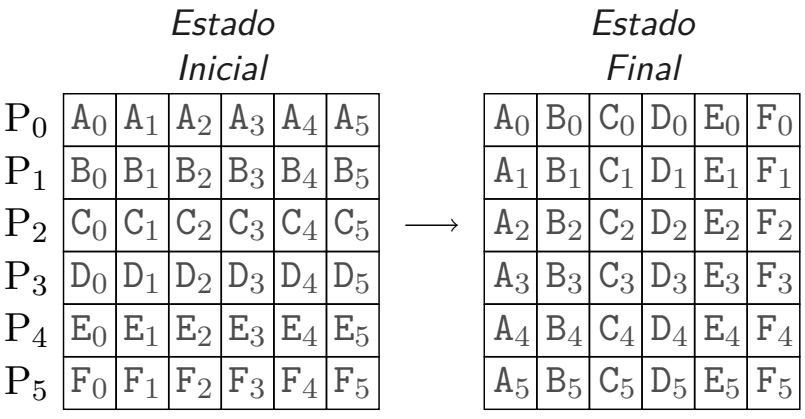


Versión asimétrica: `MPI_Allgatherv`

Todos a Todos

```
MPI_Alltoall(sendbuf, sendcount, sendtype, recvbuf,
             recvcount, recvtype, comm)
```

Es una extensión de la operación `MPI_Allgather`, cada proceso envía unos datos distintos y recibe datos del resto



Versión asimétrica: `MPI_Alltoallv`

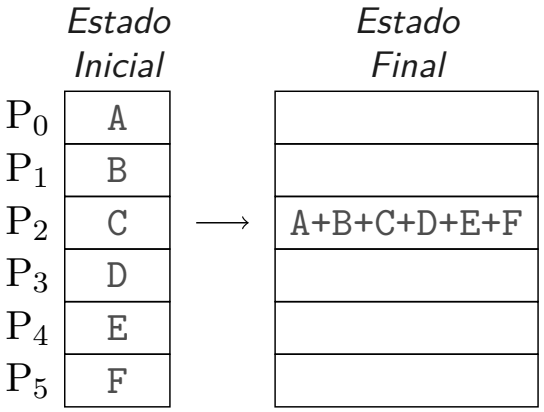
Reducción

Para escalares

```
MPI_Reduce(sendbuf, recvbuf, count, datatype, op, root,
                                                comm)
```

Similar a `MPI_Gather`, pero en lugar de concatenación, se realiza una operación aritmética o lógica (suma, max, and, ..., o definida por el usuario)

El resultado final se devuelve en el proceso `root`



Multi-Reducción

```
MPI_Allreduce(sendbuf, recvbuf, count, type, op, comm)
```

Extensión de `MPI_Reduce` en que todos reciben el resultado

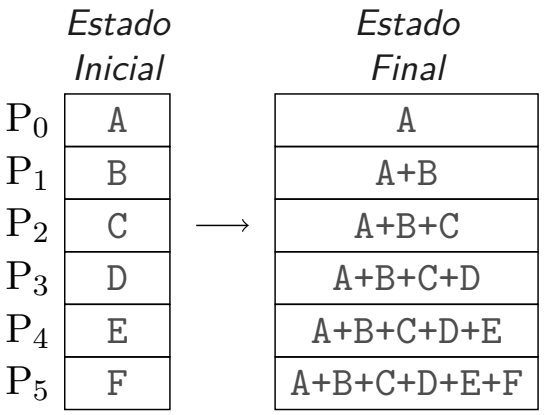
Producto escalar de vectores

```
double par_dot(double local_x[],double local_y[],int local_n)
{
  double local_dot;
  double dot;

  local_dot = seq_dot(local_x, local_y, local_n);
  MPI_Allreduce(&local_dot, &dot, 1, MPI_DOUBLE,
                MPI_SUM, MPI_COMM_WORLD);
  return dot;
}
```

Prefijación

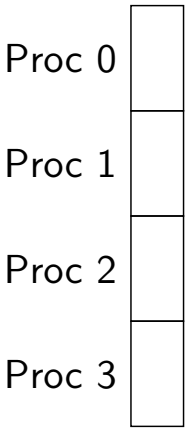
```
MPI_Scan(sendbuf, recvbuf, count, datatype, op, comm)
```

Extensión de las operaciones de reducción en que cada proceso recibe el resultado del procesamiento de los elementos de los procesos desde el 0 hasta él mismo



Ejemplo de Prefijación

Dado un vector de longitud N, distribuido entre los procesos, donde cada proceso tiene n_{local} elementos consecutivos del vector, se quiere obtener la posición inicial del subvector local



Cálculo del índice inicial de un vector paralelo

```
int rstart, nlocal, N;

calcula_nlocal(N,&nlocal);    /* por ejemplo, nlocal=N/p */
MPI_Scan(&nlocal,&rstart,1,MPI_INT,MPI_SUM,comm);
rstart -= nlocal;
```

Apartado 4

Otras Funcionalidades

- Tipos de Datos Derivados

Tipos de Datos Básicos

Los tipos de datos básicos en lenguaje C son los siguientes:

`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`

- Para Fortran existen definiciones similares
- Además de los anteriores, están los tipos especiales `MPI_BYTE` y `MPI_PACKED`

Datos Múltiples

Se permite el envío/recepción de múltiples datos:

- El emisor indica el número de datos a enviar en el argumento `count`
- El mensaje lo componen los `count` elementos contiguos en memoria
- En el receptor, el argumento `count` indica el tamaño del buffer – para saber el tamaño del mensaje:

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

Este sistema no sirve para:

- Componer un mensaje con varios datos de diferente tipo
- Enviar datos del mismo tipo pero que no estén contiguos en memoria

Tipos de Datos Derivados

En MPI se permite definir tipos nuevos a partir de otros tipos

El funcionamiento se basa en las siguientes fases:

1. El programador define el nuevo tipo, indicando
   - Los tipos de los diferentes elementos que lo componen
   - El número de elementos de cada tipo
   - Los desplazamientos relativos de cada elemento
2. Se registra como un nuevo tipo de datos MPI (`commit`)
3. A partir de entonces, se puede usar para crear mensajes como si fuera un tipo de datos básico
4. Cuando no se va a usar más, el tipo se destruye (`free`)

Ventajas:

- Simplifica la programación cuando se repite muchas veces
- No hay copia intermedia, se compacta sólo en el momento del envío

Tipos de Datos Derivados Regulares

```
MPI_Type_vector(count, length, stride, type, newtype)
```

Crea un tipo de datos homogéneo y regular a partir de elementos de un *array* equiespaciados

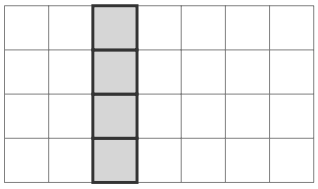
1. De cuántos bloques se compone (`count`)
2. De qué longitud son los bloques (`length`)
3. Qué separación hay entre un elemento de un bloque y el mismo elemento del siguiente bloque (`stride`)
4. De qué tipo son los elementos individuales (`type`)

Constructores relacionados:

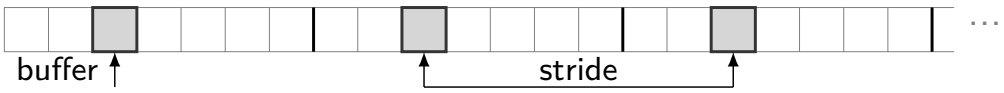
- `MPI_Type_contiguous`: elementos contiguos
- `MPI_Type_indexed`: longitud y desplazamiento variable

Tipos de Datos Derivados Regulares: Ejemplo

Queremos enviar una *columna* de una matriz `A[4][7]`



En C, los *arrays* bidimensionales se almacenan por filas




```
double A[4][7];
MPI_Datatype columna;
MPI_Type_vector(4, 1, 7, MPI_DOUBLE, &columna);
MPI_Type_commit(&columna);
if (my_rank == 0) {          /* envía la 3ª columna */
  MPI_Send(&A[0][2], 1, columna, 1, 0, comm);
} else {
  MPI_Recv(&A[0][2], 1, columna, 0, 0, comm, &status);
}
```

Tipos de Datos Derivados Irregulares

```
MPI_Type_struct(count, lens, displs, types, newtype)
```

Crea un tipo de datos heterogéneo (p.e. un `struct` de C)

```
struct {
  char c[5];
  double x,y,z;
} miestruc;
MPI_Datatype types[2] = {MPI_CHAR,MPI_DOUBLE}, newtype;
int lengths[2] = { 5, 1 }; /* solo queremos enviar c y z */
MPI_Aint ad1,ad2,ad3,displs[2];

MPI_Get_address(&miestruc, &ad1);
MPI_Get_address(&miestruc.c[0], &ad2);
MPI_Get_address(&miestruc.z, &ad3);
displs[0] = ad2 - ad1;
displs[1] = ad3 - ad1;
MPI_Type_struct(2, lengths, displs, types, &newtype);
MPI_Type_commit(&newtype);
```