高性能计算系统

迟学斌(chi@sccas.cn)
中国科学院计算机网络信息中心

2020年3-6月




Back
Close

目　录










一、 绪论

需要掌握三方面的知识:

- 高性能计算机的最新发展状况
- 并行计算的基本概念与并行算法
- 并行程序实现技术与方法

考核方式: 出勤率、课堂发言、口头报告、课堂开卷考试

1.1、什么是并行计算

1.2、并行计算机的发展

1.3、为什么需要并行计算

1.4、中科院高性能计算环境

1.5、国际上千万亿次计算的应用问题

什么是并行计算

并行计算（parallel computing）是指，在并行机上，将一个应用问题分解成多个子任务，将每个子任务分配给不同的处理器，各个处理器之间相互协同，并行地执行这些子任务，从而达到提高求解速度，或者完成求解大规模应用问题的目的。

开展并行计算，必须具备三个基本条件：

1. 并行机。并行机至少包含两台或两台以上处理机，这些处理机通过互连网络相互连接，相互通信。

2. 应用问题必须具有并行度。也就是说，应用可以分解为多个子任务，这些子任务可以并行地执行。将一个应用分解为多个子任务的过程，




称为并行算法的设计。

3. 并行编程。在并行机提供的并行编程环境上，具体实现并行算法，编制并行程序，并运行该程序，从而达到并行求解应用问题的目的。

例子 1 并行计算求和问题

$$S = \sum_{i=0}^{n-1} a_i \tag{1.1}$$

假设$n = 4 \times m$，记$S_0 = \sum_{i=0}^{m-1} a_i$，$S_1 = \sum_{i=m}^{2m-1} a_i$，$S_2 = \sum_{i=2m}^{3m-1} a_i$，$S_3 = \sum_{i=3m}^{n-1} a_i$，则有$S = S_0 + S_1 + S_2 + S_3$。

因此，计算S可以并行执行，亦即S_i，$i = 0, 1, 2, 3$可以同时计算出。

进一步可以同时计算$S_{00} = S_0 + S_1$，和$S_{01} = S_2 + S_3$。最后再计算$S = S_{00} + S_{01}$

例子 2 流水线并行

汽车生产线，自助餐等。所有这些并行计算问题，其根本是如何设计并行计算方法，下面的示例告诉我们算法的重要性。

例子 3 计算x^n的复杂性。

首先我们需要给出计算x^n的算法，针对算法给出计算复杂性。对于一个问题来说，通常其计算复杂性是确定的，因此我们在算法设计时就应该寻找最佳的计算复杂性算法，从而达到快速计算之目的。那么，怎样计算x^n？比如$n = 13$，可以计算$x^2 = x \times x$，$x^4 = x^2 \times x^2$，$x^8 = x^4 \times x^4$，$x^5 = x^4 \times x$，最后计算$x^{13} = x^8 \times x^5$，一共需要5次计算。我们的算法就是基于这种方式，按照2的幂次进行计算。对于给定的一个整数n，其2进制表示可以记为：$n = 2^k + a_{k-1}2^{k-1} + \cdots + a_1 2 + a_0$，其中$a_i = 0$或者$a_i = 1$, $k = \log_2 n$。据此我们可以给出计算方法如下：

算法 1 快速计算x^n的算法

```
y=1;
for i=0 to k-1 do
  if a[i] = 1 do
    y=y*x;
  end{if}
  x = x*x;
end{for}
y=y*x;
```

因此我们可以得出，当所有的a_i均非零时，这个算法的计算复杂性为$2k+1$，即$2\log_2 n+1$，通常亦称之为计算复杂性为$O(\log n)$。通过此算法我们可以看到，一个简单的问题，其计算方法可以是复杂的，并且此问题不适合并行计算。

并行计算机的发展

并行计算机从70年代开始，到80年代蓬勃发展和百家争鸣，90年代体系结构框架趋于统一，近10年来机群技术的快速发展，并行机技术日趋成熟。本节以时间为线索，简介并行计算机发展的推动力和各个阶段，以及各类并行机的典型代表和它们的主要特征。

1972年，世界上诞生了第一台并行计算机ILLIAC IV，它含32个处理单元，环型拓扑连接，每台处理机拥有局部内存，为SIMD类型机器。对大量流体力学程序，ILLIAC IV获得了2–6倍于当时性能最高的CDC 7600机器的速度。70年代中后期，出现了Cray-1为代表的向量计算机，现在这种计算机也仍在使用，世界上先进的高性能计算机系统日本的地球模拟器的处理器就是采用向量机。

进入80年代，MPP并行计算机开始大量涌现，这种类型的计算机早期的典型代表有iPSC/860, nCUBE-2, Meiko。我国也在这个时期，研制成功了向量计算机银河-1。

从90年代开始，主流的计算机仍然是MPP，例如：IBM SP2, Cray T3D, Cray T3E, Intel Paragon XP/S, 中科院计算所“曙光1000”等。

目前主要采用的计算机系统结构为：

1. 机群系统（参见 3.3）

2. DSM, SMP系统（参见 3.2）

3. MPP系统（参见 3.1）

4. 星群系统

5. GPU与CPU混合集群系统（天河一号）

这里的星群实际上也是一种机群，它包含了异构机群，每个计算结点可以是不同结构的*SMP*、*MPP*等构成。在近年的高性能计算机系统中，以混合结构完成的系统取得了飞速发展。这主要得益于混合结构能够取得很高的峰值速度，若在实际应用中能够发挥作用，需要进行大量艰苦的努力。以下表*1.7*、*1.6*、*1.5*、*1.4*、*1.3*、*1.2* 分别是*2009*年*11*月份、*2011*年*11*月份、*2013*年*11*月份、*2014*年*11*月份、*2015*年*11*月份、*2016*年*11*月份世界*500*强计算机系统的前*10*名情况。表*1.1*是最新世界*500*强前*10*名的计算机系统。

表 1.1 2018年TOP500计算机系统的前10名(TFLOPS)

计算机系统	核数	性能	功耗
Summit - IBM Power System AC922, IBM POWER9 22C 3.07GHz, NVIDIA Volta GV100, Dual-rail Mellanox EDR Infiniband, IBM	2,397,824	143,500.0	9,783
Sierra - IBM Power System S922LC, IBM POWER9 22C 3.1GHz, NVIDIA Volta GV100, Dual-rail Mellanox EDR Infiniband , IBM	1,572,480	94,640.0	7,438
China Sunway TaihuLight - Sunway MPP, Sunway SW26010 260C 1.45GHz, Sunway NRCPC	10,649,600	93,014.6	15,371
China Tianhe-2A - TH-IVB-FEP Cluster, Intel Xeon E5-2692v2 12C 2.2GHz, TH Express-2, Matrix-2000 , NUDT	4,981,760	61,444.5	18,482
Switzerland Piz Daint - Cray XC50, Xeon E5-2690v3 12C 2.6GHz, Aries interconnect , NVIDIA Tesla P100	387,872	21,230.0	2,384
Trinity - Cray XC40, Xeon E5-2698v3 16C 2.3GHz, Intel Xeon Phi 7250 68C 1.4GHz, Aries interconnect , Cray Inc.	979,072	20,158.7	7,578
Japan AI Bridging Cloud Infrastructure (ABCI) - PRIMERGY CX2570 M4, Xeon Gold 6148 20C 2.4GHz, NVIDIA Tesla V100 SXM2, Infiniband EDR , Fujitsu	391,680	19,880.0	1,649
Germany SuperMUC-NG - ThinkSystem SD530, Xeon Platinum 8174 24C 3.1GHz, Intel Omni-Path , Lenovo	305,856	19,476.6	

表 1.2 2016年TOP500计算机系统的前10名(TFLOPS)

计算机系统	核数	性能	功耗
China Sunway TaihuLight - Sunway MPP, Sunway SW26010 260C 1.45GHz, Sunway NRCPC	10,649,600	93,014.6	15,371
China Tianhe-2 (MilkyWay-2), Intel Xeon E5-2692 12C 2.20GHz, Intel Xeon Phi 31S1P NUDT	3,120,000	33,862.7	17,808
Titan - Cray XK7 , Opteron 6274 16C 2.20GHz, NVIDIA K20x Cray Inc.	560,640	17,590.0	8,209
Sequoia - BlueGene/Q, Power BQC 16C 1.60 GHz, IBM	1,572,864	17,173.2	7,890
Cori - Cray XC40, Intel Xeon Phi 7250 68C 1.4GHz, Aries interconnect, Cray Inc.	622,336	14,014.7	3,939
Japan Oakforest-PACS - PRIMERGY CX1640 M1, Intel Xeon Phi 7250 68C 1.4GHz, Intel Omni-Path, Fujitsu	556,104	13,554.6	2,719
Japan K computer, SPARC64 VIIIfx 2.0GHz, Tofu interconnect Fujitsu	705,024	10,510.0	12,660
Switzerland Piz Daint - Cray XC50, Xeon E5-2690v3 12C 2.6GHz, Aries interconnect , NVIDIA Tesla P100	206,720	9,779.0	1,312
Mira - BlueGene/Q, Power BQC 16C 1.60GHz,IBM	786,432	8,586.6	3,945
Trinity - Cray XC40, Xeon E5-2698v3 16C 2.3GHz, Aries interconnect	301,056	8,100.9	4,233

表 1.3 2015年TOP500计算机系统的前10名(TFLOPS)

计算机系统	核数	性能	功耗
China Tianhe-2 (MilkyWay-2), Intel Xeon E5-2692 12C 2.20GHz, Intel Xeon Phi 31S1P NUDT	3,120,000	33,862.7	17,808
Titan - Cray XK7 , Opteron 6274 16C 2.20GHz, NVIDIA K20x Cray Inc.	560,640	17,590.0	8,209
Sequoia - BlueGene/Q, Power BQC 16C 1.60 GHz, IBM	1,572,864	17,173.2	7,890
Japan K computer, SPARC64 VIIIfx 2.0GHz, Tofu interconnect Fujitsu	705,024	10,510.0	12,660
Mira - BlueGene/Q, Power BQC 16C 1.60GHz,IBM	786,432	8,586.6	3,945
Trinity - Cray XC40, Xeon E5-2698v3 16C 2.3GHz, Aries interconnect	301,056	8,100.9	4,233
Switzerland Piz Daint - Cray XC30, Xeon E5-2670 8C 2.60GHz, Aries interconnect , NVIDIA K20x Cray Inc.	115,984	6,271.0	2,325
Germany Hazel Hen - Cray XC40, Xeon E5-2680v3 12C 2.5GHz, Aries interconnect, Cray Inc.	185,088	5,640.2	3,615
Saudi Arabia Shaheen II - Cray XC40, Xeon E5-2698v3 16C 2.3GHz, Aries interconnect, Cray Inc.	196,608	5,537.0	2,834
Stampede - PowerEdge C8220, Xeon E5-2680 8C 2.70GHz, Infiniband FDR, Intel Xeon Phi SE10P Dell	462,462	5,168.1	4,510

Back

Close

表 1.4 2014年TOP500计算机系统的前10名(TFLOPS)

计算机系统	核数	性能	功耗
China Tianhe-2 (MilkyWay-2), Intel Xeon E5-2692 12C 2.20GHz, Intel Xeon Phi 31S1P NUDT	3,120,000	33,862.7	17,808
Titan - Cray XK7 , Opteron 6274 16C 2.20GHz, NVIDIA K20x Cray Inc.	560,640	17,590.0	8,209
Sequoia - BlueGene/Q, Power BQC 16C 1.60 GHz, IBM	1,572,864	17,173.2	7,890
Japan K computer, SPARC64 VIIIfx 2.0GHz, Tofu interconnect Fujitsu	705,024	10,510.0	12,660
Mira - BlueGene/Q, Power BQC 16C 1.60GHz,IBM	786,432	8,586.6	3,945
Switzerland Piz Daint - Cray XC30, Xeon E5-2670 8C 2.60GHz, Aries interconnect , NVIDIA K20x Cray Inc.	115,984	6,271.0	2,325
Stampede - PowerEdge C8220, Xeon E5-2680 8C 2.70GHz, Infiniband FDR, Intel Xeon Phi SE10P Dell	462,462	5,168.1	4,510
Germany JUQUEEN - BlueGene/Q, Power BQC 16C 1.60GHz, Custom Interconnect IBM	458,752	5,008.9	2,301
Vulcan - BlueGene/Q, Power BQC 16C 1.600GHz, Custom Interconnect IBM	393,216	4,293.3	1,972
Cray CS-Storm, Intel Xeon E5-2660v2 10C 2.2GHz, Infiniband FDR, Nvidia K40 Cray Inc.	72,800	3,577.0	1,499

表 1.5 2013年TOP500计算机系统的前10名(TFLOPS)

计算机系统	核数	性能	功耗
Tianhe-2 (MilkyWay-2), Intel Xeon E5-2692 12C 2.20GHz, Intel Xeon Phi 31S1P NUDT	3,120,000	33,862.7	17,808
Titan - Cray XK7 , Opteron 6274 16C 2.20GHz, NVIDIA K20x Cray Inc.	560,640	17,590.0	8,209
Sequoia - BlueGene/Q, Power BQC 16C 1.60 GHz, IBM	1,572,864	17,173.2	7,890
K computer, SPARC64 VIIIfx 2.0GHz, Tofu interconnect Fujitsu	705,024	10,510.0	12,660
Mira - BlueGene/Q, Power BQC 16C 1.60GHz,IBM	786,432	8,586.6	3,945
Switzerland Piz Daint - Cray XC30, Xeon E5-2670 8C 2.60GHz, Aries interconnect , NVIDIA K20x Cray Inc.	115,984	6,271.0	2,325
Stampede - PowerEdge C8220, Xeon E5-2680 8C 2.70GHz, Infiniband FDR, Intel Xeon Phi SE10P Dell	462,462	5,168.1	4,510
Germany JUQUEEN - BlueGene/Q, Power BQC 16C 1.60GHz, Custom Interconnect IBM	458,752	5,008.9	2,301
Vulcan - BlueGene/Q, Power BQC 16C 1.600GHz, Custom Interconnect IBM	393,216	4,293.3	1,972
Germany SuperMUC - iDataPlex DX360M4, Xeon E5-2680 8C 2.70GHz, Infiniband FDR IBM	147,456	2,897.0	3,423

Back

Close

表 1.6 2011年TOP500计算机系统的前10名(TFLOPS)

计算机系统	国家	年份	核数	性能
K computer, SPARC64 VIIIfx 2.0GHz Tofu interconnect	Japan	2011	705024	10510
NUDT TH-1A, X5670 2.93Ghz 6C, NVIDIA GPU, FT-1000 8C	China	2010	186368	2566
Cray XT5-HE Opteron Six Core 2.6 GHz	USA	2009	224162	1759
Dawning TC3600 Blade, X5650 NVidia Tesla C2050 GPU	China	2010	120640	1271
HP ProLiant SL390s G7 X5670 Nvidia GPU, Linux/Win	Japan	2010	73278	1192
Cray XE6, Opteron 6136 8C	USA	2011	142272	1110
SGI Altix ICE 8200/8400EX	USA	2011	111104	1088
Cray XE6 12-core 2.1 GHz	USA	2010	153408	1054
Bull bullx super-node S6010/S6030	France	2010	138368	1050
BladeCenter QS22/LS21 Cluster, PowerXCell 8i 3.2Ghz/Opteron DC 1.8GHz, Voltaire Infiniband	USA	2009	122400	1042

表 1.7 2009年TOP500计算机系统的前10名(GFLOPS)

计算机系统	国家	年份	核数	性能
Cray XT5-HE Opteron Six Core 2.6 GHz	USA	2009	224162	1759000
BladeCenter QS22/LS21 Cluster, PowerXCell 8i 3.2Ghz/Opteron DC 1.8GHz, Voltaire Infiniband	USA	2009	122400	1042000
Cray XT5-HE 6 Core 2.6 GHz	USA	2009	98928	831700
Blue Gene/P Solution	Germany	2009	294912	825500
NUDT TH-1 Cluster, Xeon E5540/E5450, ATI Radeon HD 4870 2,Infiniband	China	2009	71680	563100
SGI Altix ICE 8200EX, Xeon QC 3.0/2.93 GHz	USA	2009	56320	544300
eServer Blue Gene Solution	USA	2007	212992	478200
Blue Gene/P Solution	USA	2007	163840	450300
SunBlade x6420, Opteron QC 2.3 Ghz, Infiniband	USA	2008	62976	433200
Sun Blade x6275, Xeon X55xx 2.93 Ghz, Infiniband	USA	2009	41616	423900

Back

Close

为什么需要并行计算

全球气象预报中天气预报模式要求在24小时内完成48小时天气预测数值模拟，此时，至少需要计算635万个网格点，内存需求大于1TB，计算性能要求高达25万亿次/秒。又如，美国在1996年开始实施ASCI计划，要求分四个阶段，逐步实现万亿次、十万亿次、30万亿次和100万亿次的大规模并行数值模拟，实现全三维、全物理过程、高分辨率的核武器数值模拟。除此之外，在天体物理、流体力学、密码破译、海洋大气环境、石油勘探、地震数据处理、生物信息处理、新药研制、湍流直接数值模拟、燃料燃烧、工业制造、图像处理等领域，以及大量的基础理论研究领域，存在计算挑战性问题，均需要并行计算的技术支持。

HPCC计划提出的背景是一大批巨大挑战性问题需要解决，其中

包括：天气与气候预报，分子、原子与核结构，大气污染，燃料与燃烧，生物学中的大分子结构，新型材料特性，国家安全等有关问题。而近期内要解决的问题包含：磁记录技术，新药研制，高速城市交通，催化剂设计，燃料燃烧原理，海洋模型模拟，臭氧层空洞，数字解剖，空气污染，蛋白质结构设计，金星图象分析和密码破译技术。

中科院高性能计算环境

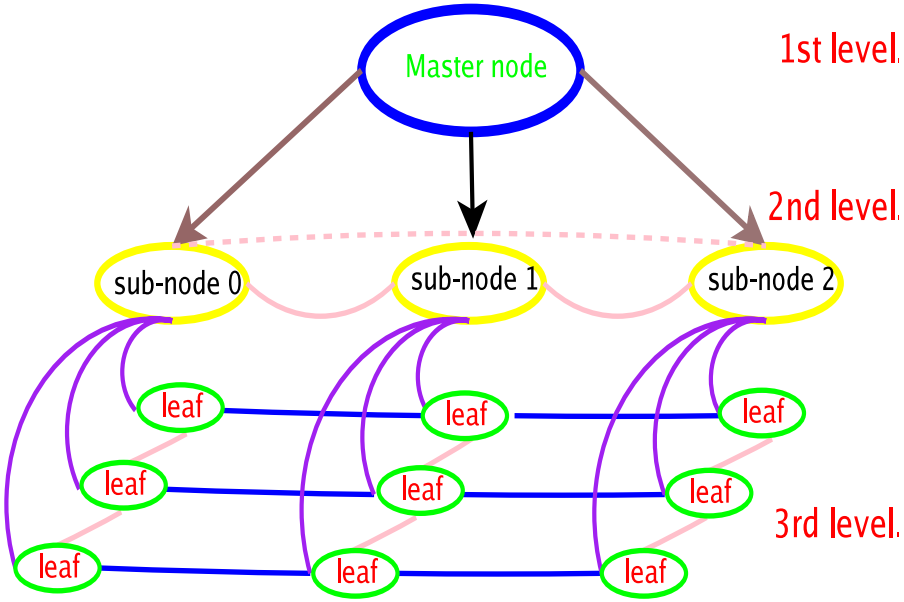


图 1.1 三层网格系统结构

总中心千万亿次计算机系统

元超级计算机系统是混合结构高性能机群系统，其峰值性能$2PFLOPS$，采用$CPU+GPU$，以及$CPU+MIC$。

分中心计算环境

每个分中心计算能力$\geq 10TFLOPS$，分布如下：

- 兰州分中心：寒区旱区环境与工程研究所
- 大连分中心：大连化学物理研究所
- 合肥分中心：合肥物质科学研究院和中国科技大学
- 昆明分中心：昆明植物研究所/昆明动物研究所
- 青岛分中心：海洋研究所/生物能源与过程研究所

- 深圳分中心：深圳先进技术研究院
- 沈阳分中心：沈阳金属研究所
- 武汉分中心：武汉水生生物研究所
- 广州分中心：生物医药与健康研究院




Back
Close

国际上千万亿次计算的应用问题

美国千万亿次应用问题

1. 天体物理

- 恒星的辐射、动力学和核物理;
- 超新星物理、伽玛射线爆发、双黑洞系统和中子星之间的碰撞;
- 地球、巨型气体行星 (*gas giants*)、恒星的电磁场如何产生和演化?
- 冠状物质抛射 (*coronal mass ejections*) 及其对地球电磁场的影响, 包括磁场的重结 (*magnetic reconnection*) 和地磁场次暴 (*geo-magnetic sub-storms*) 的模拟;

- 银河系的形成与演化;
- 低马赫数天体物质流(*Low Mach-number astrophysical flows*),例如形成行星云 (*planetary nebula*) 的恒星外壳的爆炸;
- 早期宇宙结构的演化;
- 分子云 (*molecular clouds*) 和前恒星核 (*pre-stellar cores*) 的形成

2. 流体力学

- 在经典电磁流体、化学反应物中的分层与不分层、有旋涡与无旋涡湍流中的详细结构和性质;
- 在复杂系统中化学反应过程与流体动力学间的相互作用,例如燃烧、大气化学以及化学反应过程;
- 可压缩多相流的性质

3. 环境科学

- 大气系统、气象系统和地球气候之间的非线性相互作用;
- 地球碳、氮、水的耦合循环动力学;
- 通过高分辨率、宽带、全球的地震探测研究地球的内部构造;
- 十年期间的大型江河流域水文动力学;
- 海洋与陆地以及海洋与大气的耦合动力学

4. 生物科学

- 具有大生物分子和生物分子团的反应机理, 例如酶、核糖体和细胞膜;
- 在只给定基本氨基酸序列的条件下预测蛋白质的三维结构;
- 病毒衣壳组装 (*assembly of capsids*) 的理解

5. 材料科学

- 利用第一原理模拟极端条件下物质的块体性质（*bulk properties*）；
- 适应特殊性和高效地运用第一原理设计催化剂、药物和其它分子材料；
- 材料设计；
- 对摩擦和润滑分子层面的理解；
- 精确到*1*卡/摩尔的任何化学反应界面势能，以及在此界面的分子相应的动力学行为的研究；
- 分子电子器件设计；
- 纳米尺度的工程结构的性质；
- 半导体和金属表面的多相催化作用

6. 高能物理

- 强关联系统 (*Strongly correlated systems*);
- 阿秒脉冲激光与多原子分子 (*polyatomic molecules*) 的相互作用;
- 强相互作用主导的高能物理过程;
- 燃烧等离子体的性质和不稳定性，以及主动磁约束技术研究

7. 工业应用

- 工程系统健壮的优化设计;
- 复杂系统的控制;
- 特别巨大的 (天文数字的) 数据集合的分析

欧盟千万亿次应用问题

1. 气象、气候学和地球科学领域

- 气候改变，气象学，水文学和空气质量
- 海洋学和海洋业预报
- 地球科学

2. 天体物理学，高能物理和等离子体物理领域

- 天体物理学，包括从天体的形成，到整个宇宙的起源和演化问题
- 基本粒子物理学
- 等离子体物理，包括建造$ITER$提出的科学和技术问题

3. 材料科学、化学和纳米科学领域

- 复杂材料的理解，包括对各类材料的成核现象、生长、自组织和




Back
Close

聚合的模拟，确定工艺过程、使用条件和构成之间关系的材料力学性质的多尺度描述

- 复杂化学的理解，包括大气化学、软物质化学（例如聚合物）、燃烧的原子层次的描述、超分子装配技术、生物化学
- 纳米科学，包括纳电子学，纳米尺度的机械属性仿真，纳米尺度的流变学、应用流体学和摩擦学的基于原子作用的描述

4. 生命科学领域

- 系统生物学，在未来4年内，欧洲将实现世界上第一个“硅片中的”细胞
- 染色体动力学
- 大尺度蛋白质动力学
- 蛋白质联结和聚合




- 超分子系统
- 医学，例如，确定触发多基因疾病、预测在某些人群中与药物异常代谢相关的次级作用或药物与异于其原始靶点的大分子的交互作用的仿真

5. 工程学领域

- 直升机的完全仿真
- 生物医学流体力学
- 燃气轮机和内燃烧引擎
- 森林火灾
- 绿色飞行器
- 虚拟发电厂




日本千万亿次应用问题

主要目标

1. 瞄准未来的知识发现与创造
2. 在先进科学与技术上的若干突破
3. 在经济与环境上的长久可持续发展
4. 强化经济与工业领域，构建创新型日本
5. 保障贯穿整个生命周期的良好健康状况
6. 建设安全的国家

习题

1. 在主程序中定义了矩阵A和B（比如C语言，$A[50][67]$, $B[73][49]$），请写一个通用子程序完成矩阵相加，使得对于任何$m \times n$的子矩阵A与子矩阵B相加都能调用该子程序，用C或$Fortran$语言（比如，$matradd(m, n, ..., A, ..., B, ..., C)$。

2. 设多项式$P_n(x) = a_n x^n + a_{n-1}x^{n-1} + \cdots + a_1 x + a_0$，请给出计算$P_n(x_0)$的方法并写出计算它的子程序。

二、 并行计算机体系结构

这章主要以互连网络的结构为介绍内容，它是并行计算机体系结构的核心

2.1、网络的分类

2.2、网络的基本概念

2.3、间接网络

2.4、直接网络

本章图片来源于中科院计算技术研究所唐志敏研究员

网络的分类

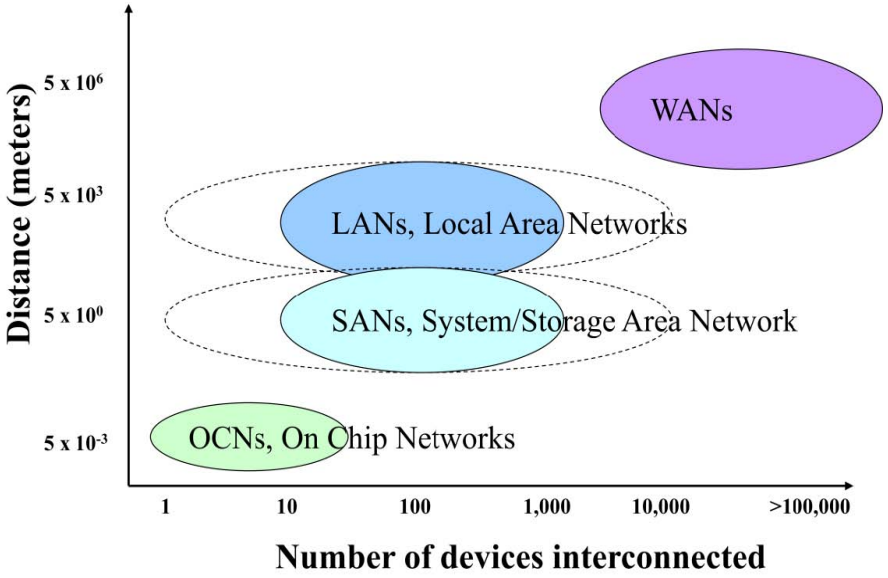


图 2.1 网络的分类

网络的基本概念

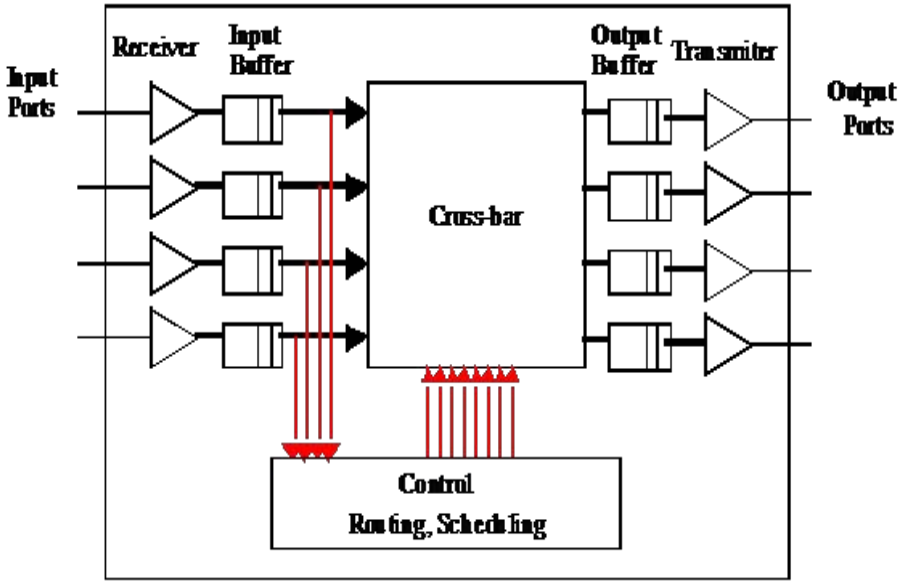


图 2.2 开关

定义 1 链路 (*link*) 是节点或者开关与节点或开关之间的连接线

定义 2 网络是由链路和开关构成的一个图

如果记所有开关为V，所有链路为E，则显然有$E \subset V \times V$；进一步对于全连接网络，则有$E = V \times V$。

网络连接有直接连接和间接连接两种，接下来就分别介绍一些典型的网络代表。

间接网络

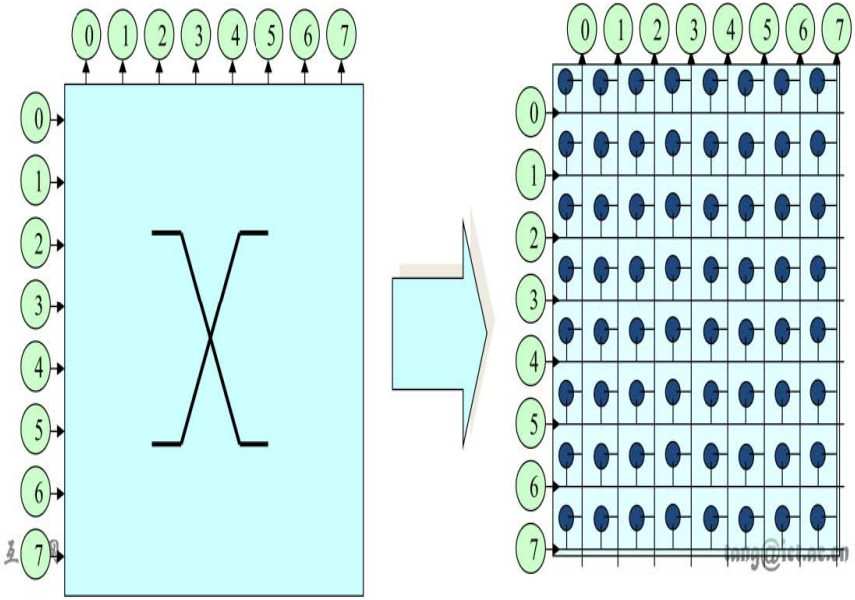


图 2.3 交叉开关

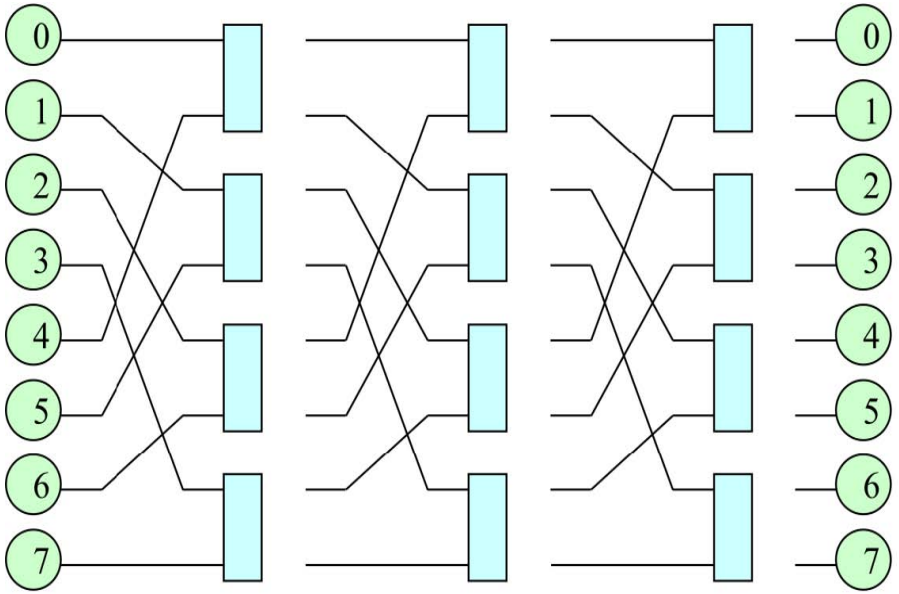


图 2.4 8口Ω网络

连接方式: $x_{n-1}x_{n-2}\cdots x_0 \Rightarrow x_{n-2}\cdots x_0x_{n-1}$，亦称为完美洗牌。

这样构造的互连网络与交叉开关网络在一般情况之下是可以媲美

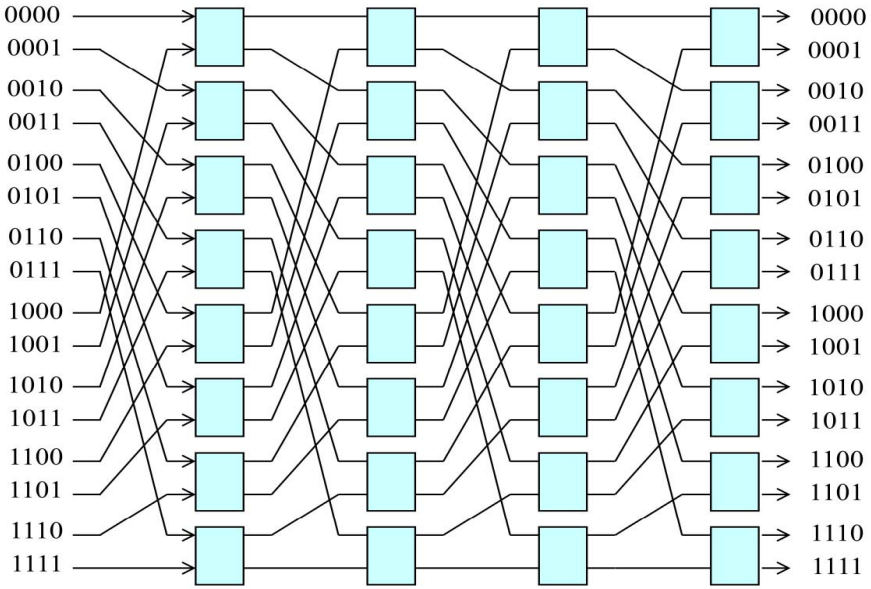


图 2.5 16口Ω网络

的，能够完成任意两点之间的信息通讯

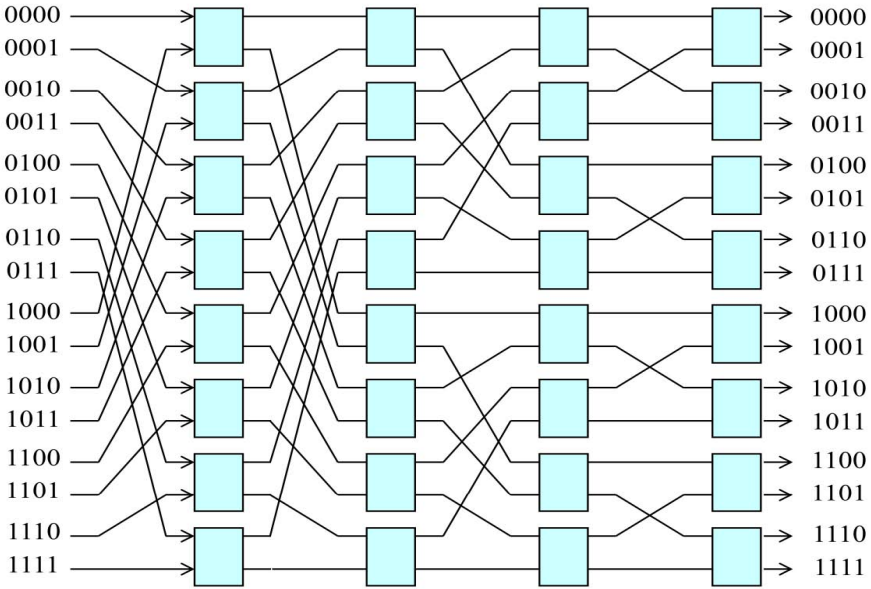


图 2.6 16口baseline网络

连接方式: $x_{n-1}x_{n-2}\cdots x_0 \Rightarrow x_{n-2}\cdots x_0x_{n-1}$

$x_{n-1}x_{n-2}\cdots x_0 \Rightarrow x_0x_{n-1}\cdots x_1$

Back
Close

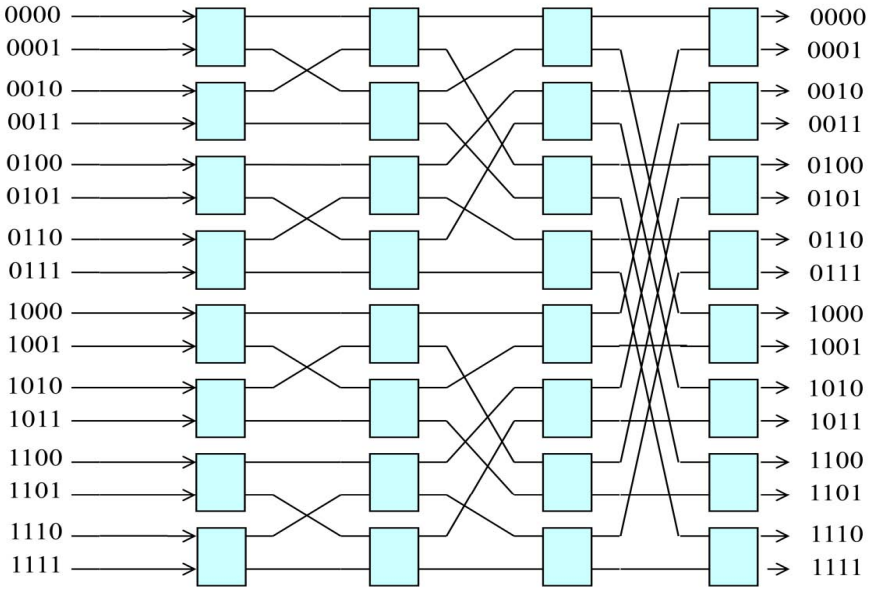


图 2.7 16口butterfly网络

连接方式: $x_{n-1}x_{n-2}\cdots x_0 \Rightarrow x_0x_{n-1}\cdots x_1$

$x_{n-1}x_{n-2}\cdots x_1x_0 \Rightarrow x_0x_{n-2}\cdots x_1x_{n-1}$ ，蝶式置换

直接网络

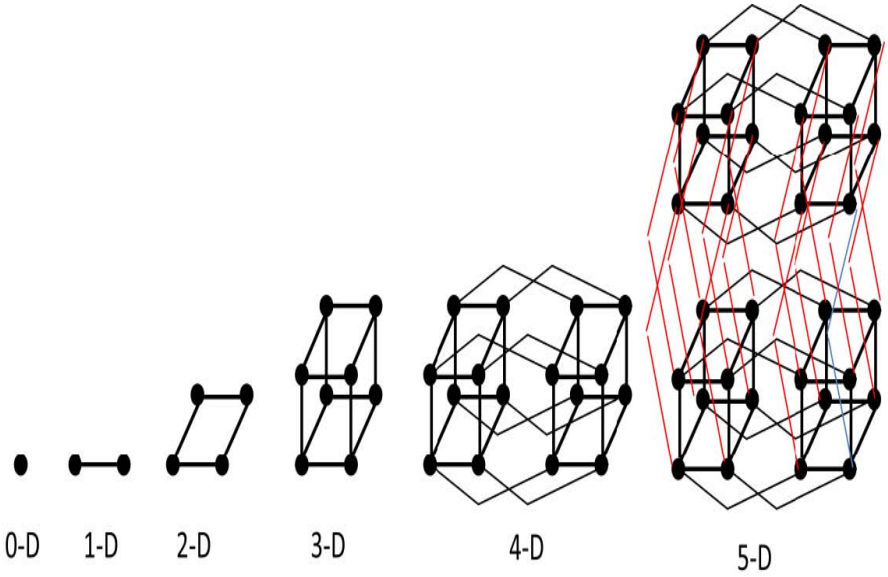


图 2.8 超立方互连

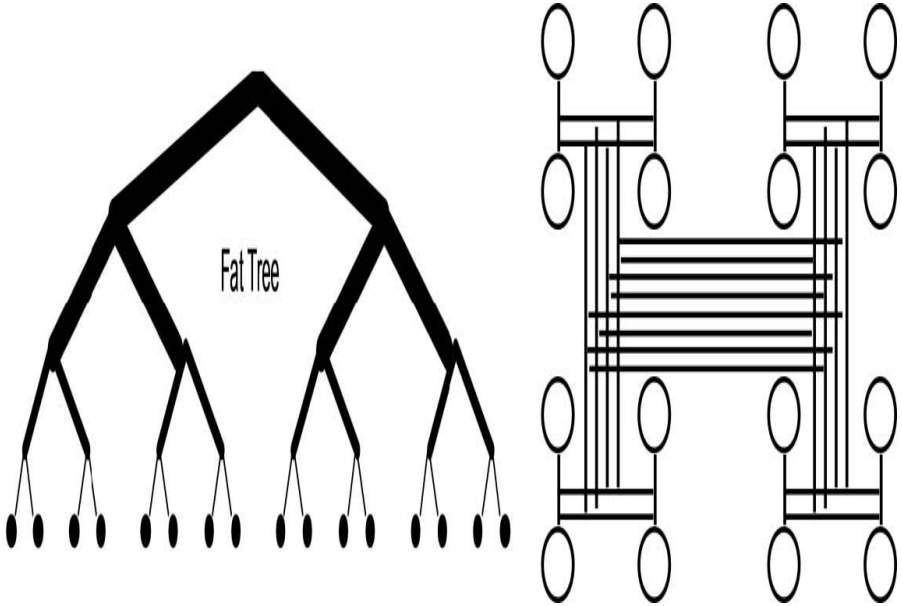


图 2.9 胖树互连

- 树的自然形态
- 叶子是节点
- 环形互连

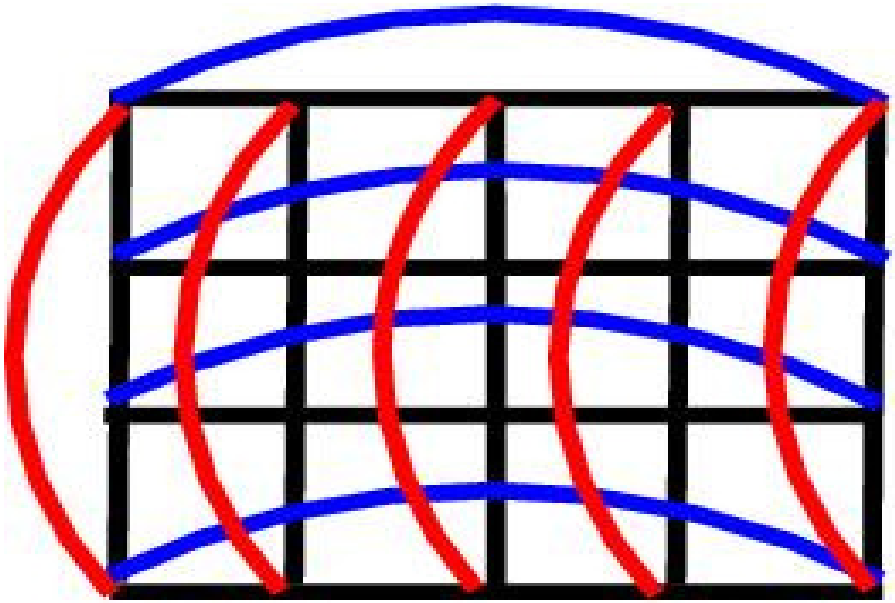


图 2.10 2D Torus

- *2D网格互连*

习题

1. 设n是环形结构的节点数，记节点之间消息通讯的长度为l，证明$l < n/2$

2. 如果是$n \times n$ 的$2D$环形互连结构，则$l < n$

三、 并行计算的基本概念

3.1、并行计算机系统-*MPP*

3.2、并行计算机系统-*SMP*

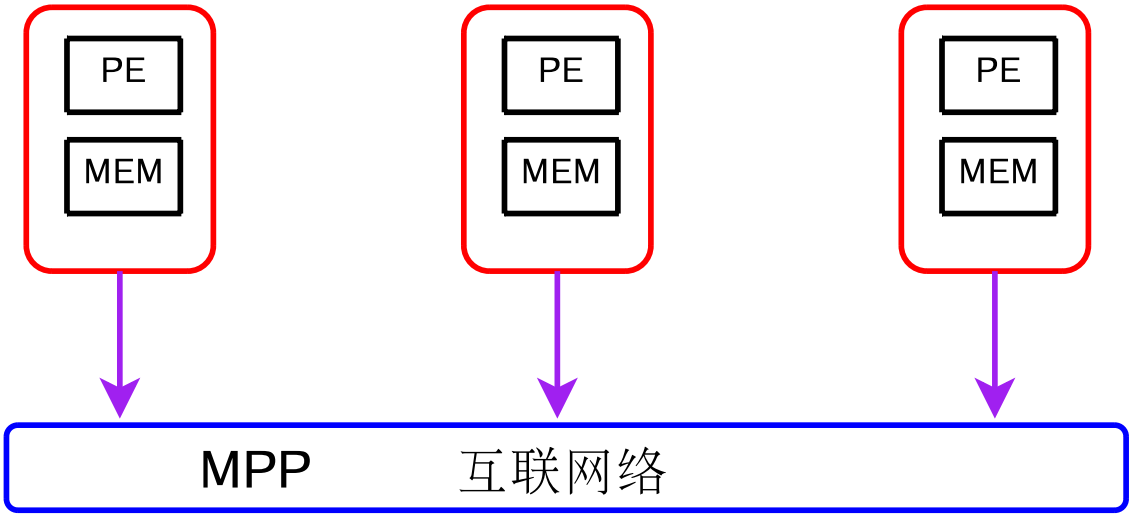
3.3、并行计算机系统-*Cluster*

3.4、并行计算机系统的分类

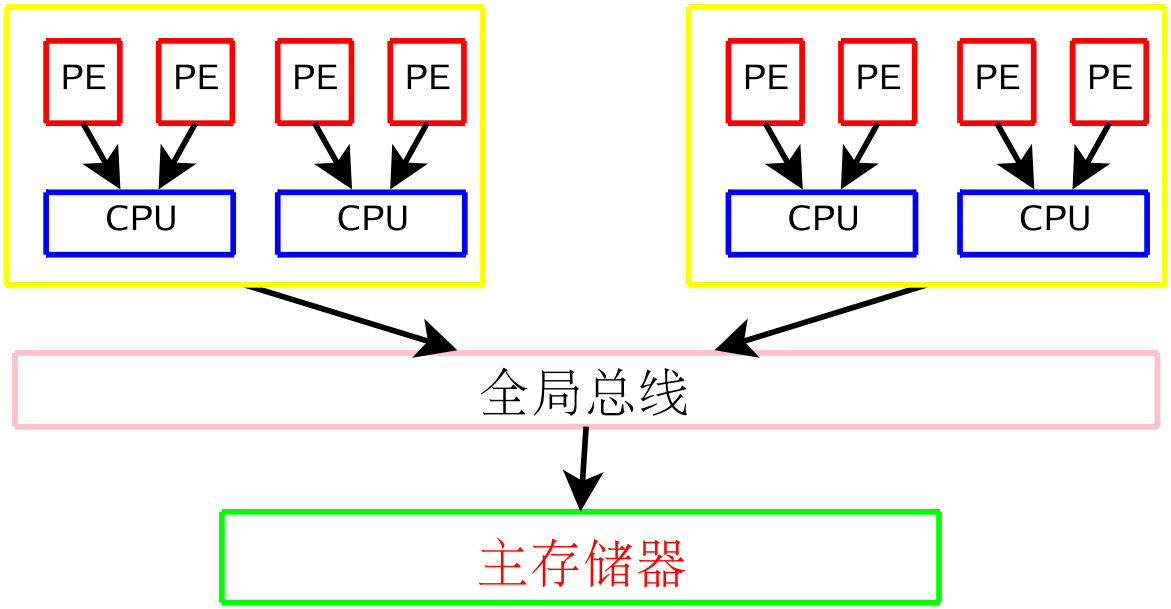
3.5、并行计算的程序结构

3.6、并行计算的基本定义

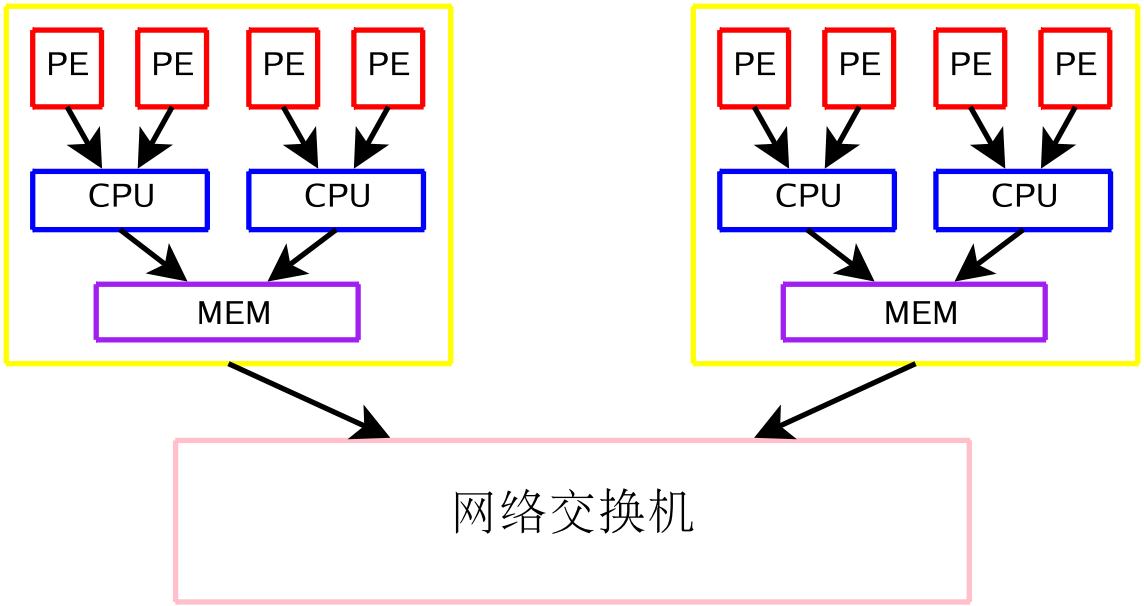
并行计算机系统-*MPP*



并行计算机系统-*SMP*



并行计算机系统-*Cluster*

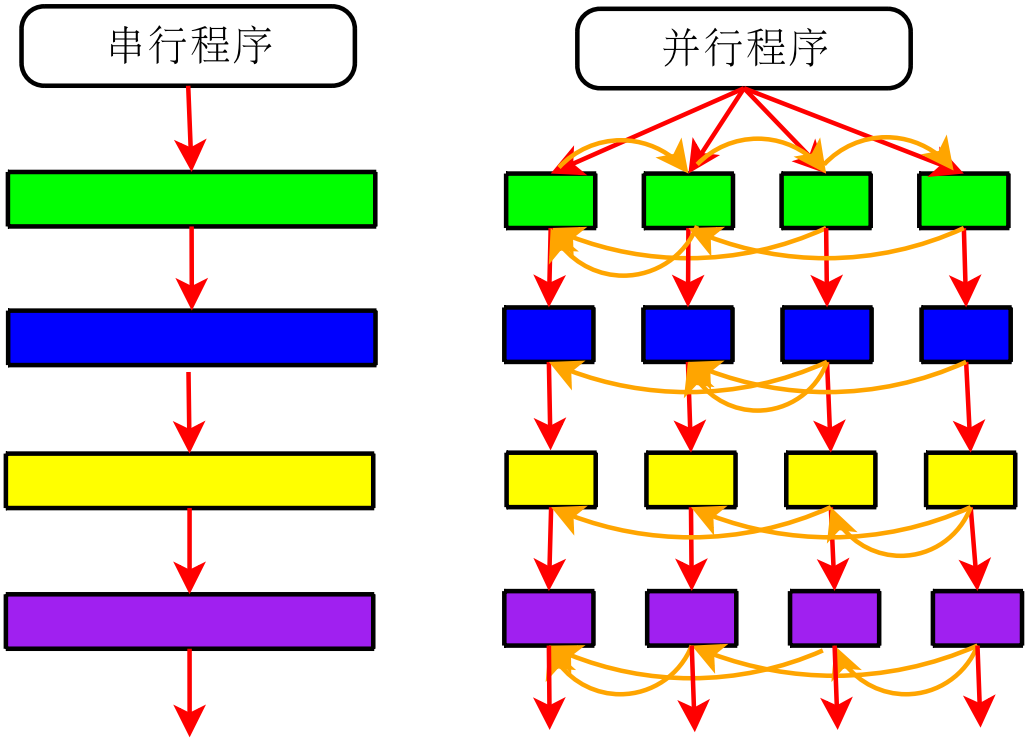


并行计算机系统的分类

1. 单指令流单数据流(SISD)，现今普通计算机
2. 多指令流单数据流(MISD)，没有实际的计算机
3. 单指令流多数据流(SIMD)，向量计算机、共享存储计算机（参见3.2）
4. 多指令流多数据流(MIMD)，大规模并行处理系统、机群（参见3.1、3.3）




并行计算的程序结构



并行计算的基本定义

粒度：在并行执行过程中，二次通讯之间每个处理机计算工作量大小的一个粗略描述。分为粗粒度、细粒度。

复杂性：在不考虑通讯开销的前提下，每个处理机上的计算量最大者，即为并行计算复杂性。$\log_2 n$

并行度：算法可以并行的程度。

加速比：

$$S_p(q) = \frac{T_s}{T_p(q)} \tag{3.1}$$

效率：

$$E_p(q) = \frac{S_p(q)}{q} \tag{3.2}$$

*Amdahl*定律：假设串行计算所需要的时间$T_s = 1$，α是执行该计算所必需的串行部分所占的百分比，则有

$$S_p(q) = \frac{1}{\alpha + (1-\alpha)/q} \tag{3.3}$$

$$\lim_{q\to\infty} S_p(q) = \frac{1}{\alpha} \tag{3.4}$$

*Gustafson*定律：假设并行计算所需要的时间$T_p = 1$，α是执行该并行计算所需的串行部分所占的百分比，则有

$$S_p(q) = \frac{\alpha + (1-\alpha) \times q}{1} \tag{3.5}$$

习题

1. 从加速比的基本定义出发，证明$Amdahl$定律和$Gustafson$定律；

2. 你所了解的并行计算的基本方法（在学习的过程中查阅资料，了解一些基本并行计算方法）。

四、 矩阵乘并行计算

矩阵卷帘（$wrap$）存储方式

$$\begin{pmatrix} A_{00} & A_{01} & A_{02} & A_{03} & A_{04} & A_{05} & A_{06} & A_{07} \\ A_{10} & A_{11} & A_{12} & A_{13} & A_{14} & A_{15} & A_{16} & A_{17} \\ A_{20} & A_{21} & A_{22} & A_{23} & A_{24} & A_{25} & A_{26} & A_{27} \\ A_{30} & A_{31} & A_{32} & A_{33} & A_{34} & A_{35} & A_{36} & A_{37} \\ A_{40} & A_{41} & A_{42} & A_{43} & A_{44} & A_{45} & A_{46} & A_{47} \\ A_{50} & A_{51} & A_{52} & A_{53} & A_{54} & A_{55} & A_{56} & A_{57} \\ A_{60} & A_{61} & A_{62} & A_{63} & A_{64} & A_{65} & A_{66} & A_{67} \\ A_{70} & A_{71} & A_{72} & A_{73} & A_{74} & A_{75} & A_{76} & A_{77} \end{pmatrix} \tag{4.1}$$




Back
Close

在一个3×2的处理机网格上，8×8矩阵的存储方式如下：

$$\left(\begin{array}{cccc|cccc} A_{00} & A_{02} & A_{04} & A_{06} & A_{01} & A_{03} & A_{05} & A_{07} \\ A_{30} & A_{32} & A_{34} & A_{36} & A_{31} & A_{33} & A_{35} & A_{37} \\ A_{60} & A_{62} & A_{64} & A_{66} & A_{61} & A_{63} & A_{65} & A_{67} \\ \hline A_{10} & A_{12} & A_{14} & A_{16} & A_{11} & A_{13} & A_{15} & A_{17} \\ A_{40} & A_{42} & A_{44} & A_{46} & A_{41} & A_{43} & A_{45} & A_{47} \\ A_{70} & A_{72} & A_{74} & A_{76} & A_{71} & A_{73} & A_{75} & A_{77} \\ \hline A_{20} & A_{22} & A_{24} & A_{26} & A_{21} & A_{23} & A_{25} & A_{27} \\ A_{50} & A_{52} & A_{54} & A_{56} & A_{51} & A_{53} & A_{55} & A_{57} \end{array}\right) \tag{4.2}$$

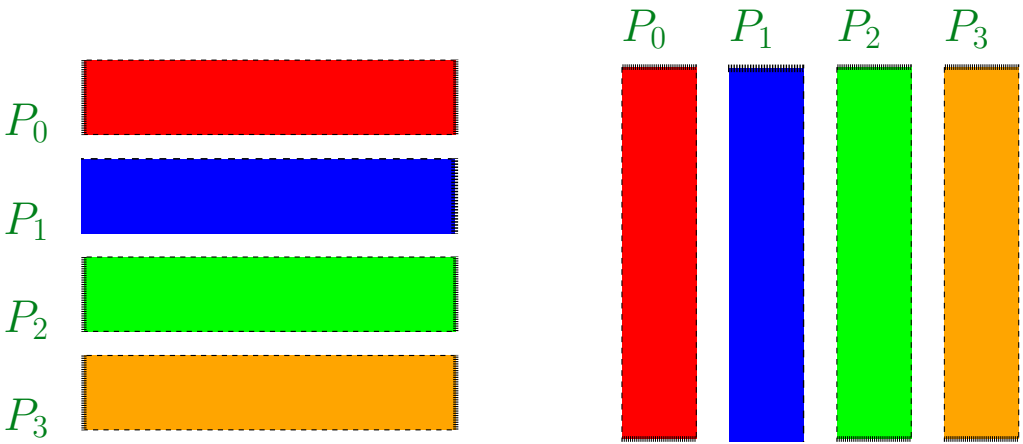
对于一般$m \times n$分块矩阵和一般的处理机阵列$p \times q$，小块A_{ij}存放在处理机P_{kl} $(k = i \mod p,\ l = j \mod q)$中。

串行矩阵乘法

串行矩阵乘积子程序(*i*-*j*-*k*形式)

```
do i=1, M
  do j=1, L
    do k=1, N
      c(i, j) = c(i, j) + a(i, k) * b(k, j)
    enddo
  enddo
enddo
```

行列分块算法



$$A = \left[\begin{array}{cccc} A_0^T & A_1^T & \cdots & A_{p-1}^T \end{array} \right]^T, \quad B = \left[\begin{array}{cccc} B_0 & B_1 & \cdots & B_{p-1} \end{array} \right] \tag{4.3}$$

亦即A_i、B_i存放在处理机P_i中。$C_{ij} = A_i \times B_j$

算法 2 行列分块算法

mp1 $\equiv$ (myid+1) mod p, mm1 $\equiv$ (myid$-1+p$) mod p

for $i = 0$ to $p-1$ do

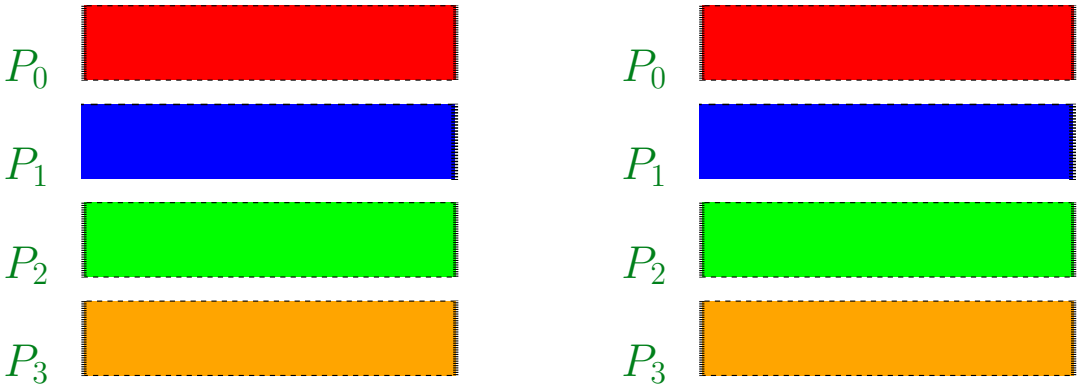
$l \equiv (i+\text{myid}) \bmod p$

$C_l = A \times B$

if $i \neq p-1$, send(B, mm1), recv(B, mp1)

end$\{for\}$

行行分块算法



$$B = \begin{bmatrix} B_0^{\mathrm{T}} & B_1^{\mathrm{T}} & \cdots & B_{p-1}^{\mathrm{T}} \end{bmatrix}^{\mathrm{T}}, \quad A_i = \begin{bmatrix} A_{i0} & A_{i1} & \ldots & A_{i,p-1} \end{bmatrix} \quad (4.4)$$

算法 3 行行分块算法

mp1 $\equiv$ (myid+1) mod p, mm1 $\equiv$ (myid$-1+p$) mod p

for $i = 0$ to $p-1$ do

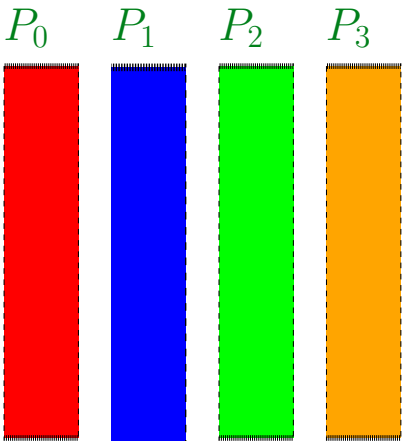
$l \equiv (i+\text{myid}) \bmod p$

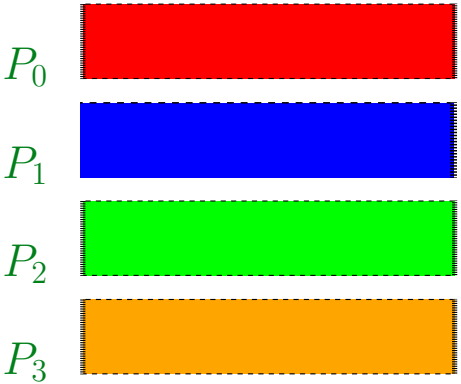
$C = C + A_l \times B$

if $i \neq p-1$, send(B, mm1), recv(B, mp1)

end$\{for\}$

列行分块算法





$$A = \begin{bmatrix} A_0 & A_1 & \cdots & A_{p-1} \end{bmatrix}, \quad B_i = \begin{bmatrix} B_{i0} & B_{i1} & \ldots & B_{i,p-1} \end{bmatrix} \tag{4.5}$$

从而有$C = \sum_{i=0}^{p-1} A_i \times B_i$。

算法 4 列行分块算法

$C = A \times B_{\text{myid}}$

for $i = 1$ to $p - 1$ do

$l \equiv (i+\text{myid}) \bmod p$, $k \equiv (p - i+\text{myid}) \bmod p$

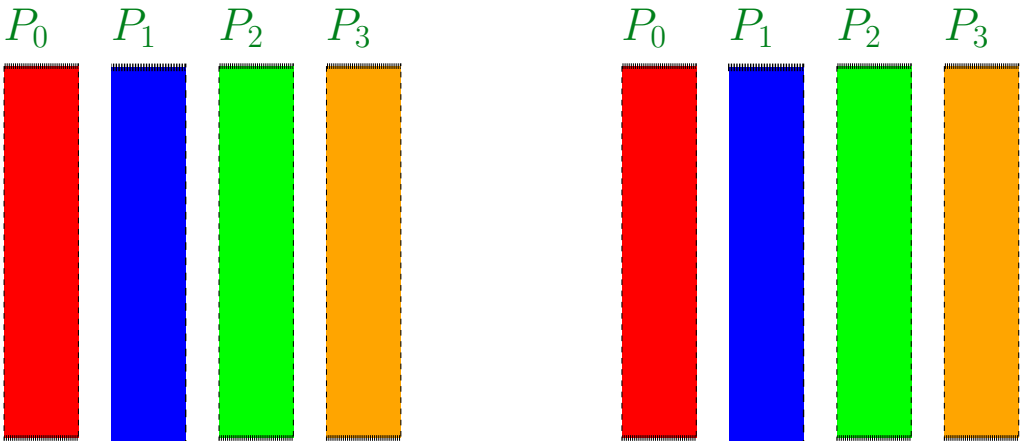
$T = A \times B_l$

send(T, l), recv(T, k)

$C = C + T$

end$\{for\}$

列列分块算法



$$B_i = \left[\begin{array}{cccc} B_{i0}^{\mathrm{T}} & B_{i1}^{\mathrm{T}} & \cdots & B_{i,p-1}^{\mathrm{T}} \end{array} \right]^{\mathrm{T}}$$

算法 5 列列分块算法

mp1 $\equiv$ (myid+1) mod p, mm1 $\equiv$ (myid$-1+p$) mod p

for $i = 0$ to $p-1$ do

$l \equiv (i+\text{myid}) \bmod p$

$C = C + A \times B_l$

if $i \neq p-1$, send(A, mm1), recv(A, mp1)

end$\{for\}$

Cannon算法

$$\begin{array}{ccc|ccc} A_{00} & A_{01} & A_{02} & B_{00} & B_{01} & B_{02} \\ A_{10} & A_{11} & A_{12} & B_{10} & B_{11} & B_{12} \\ A_{20} & A_{21} & A_{22} & B_{20} & B_{21} & B_{22} \end{array}$$

$$\begin{array}{ccc|ccc} A_{00} & A_{00} & A_{00} & B_{00} & B_{01} & B_{02} \\ A_{11} & A_{11} & A_{11} & B_{10} & B_{11} & B_{12} \\ A_{22} & A_{22} & A_{22} & B_{20} & B_{21} & B_{22} \end{array}$$

$$\begin{array}{ccc|ccc} A_{01} & A_{01} & A_{01} & B_{10} & B_{11} & B_{12} \\ A_{12} & A_{12} & A_{12} & B_{20} & B_{21} & B_{22} \\ A_{20} & A_{20} & A_{20} & B_{00} & B_{01} & B_{02} \end{array}$$

$$\begin{array}{ccc|ccc} A_{02} & A_{02} & A_{02} & B_{20} & B_{21} & B_{22} \\ A_{10} & A_{10} & A_{10} & B_{00} & B_{01} & B_{02} \\ A_{21} & A_{21} & A_{21} & B_{10} & B_{11} & B_{12} \end{array}$$

算法 6 *Cannon*算法

$C = 0$

mpc1 $\equiv$ (mycol+1) mod m; mmc1 $\equiv$ (m+mycol-1) mod m;

mpr1 $\equiv$ (myrow+1) mod m; mmr1 $\equiv$ (m+myrow-1) mod m;

for $i = 0$ to $m - 1$ do

$k \equiv$ (myrow+i) mod m;

$r \equiv (m + k - i)$ mod m;

if mycol=k & myrow=r then

send(A, (myrow, mpc1)); copy(A, tmpA);

else if myrow=r

recv(tmpA, (myrow, mmc1));

if k $\neq$ mpc1, send(tmpA, (myrow, mpc1));

end$\{if\}$

$C = C$+tmpA $\times B$;

if $i \neq m - 1$ then

send(B, (mmr1, mycol)); recv(B, (mpr1, mycol));

end$\{if\}$

end$\{for\}$

习题

1. 假设若把$m \times n$的矩阵A按照循环方式存放在$p \times q$的处理机系统中，在每个处理机P_{kl}上所得到的矩阵为A^{kl}，请建立矩阵A与矩阵A^{kl}的关系式，即$\forall a_{ij}$，$\exists k, l, s, t$，使得$a_{ij} = a_{st}^{kl}$；
2. 假设矩阵A和向量b是按行分块存储在p个处理机中的，请给出并行计算$x^+ = Ax + b$的方法；
3. 请分析矩阵乘法的列列分块算法和Cannon算法的复杂性（假设传输长度为N的数据的复杂性为$\alpha + N\beta$，广播数据按照树型方式进行）；
4. 请用自己的理解给出Cannon算法的描述。

五、 线性代数方程组的并行求解

5.1、串行LU分解算法

5.2、分布式系统的并行LU分解算法

5.3、三角方程组的并行求解

5.4、经典迭代法-Jacobi

5.5、经典迭代法-Gauss-Seidel

串行LU分解算法

$$Ax = b \tag{5.1}$$

$PA = LU$，$Ly = Pb$，$Ux = y$。

$P(i,j)$是由单位矩阵交换第i行和第j行得到的矩阵，记单位矩阵I的第i列为e_i，则有

$$\begin{aligned} P(i,j) &= \begin{pmatrix} e_1 & \cdots & e_{i-1} & e_j & e_{i+1} & \cdots & e_{j-1} & e_i & e_{j+1} & \cdots & e_n \end{pmatrix} \\ &= I + e_i(e_j - e_i)^T + e_j(e_i - e_j)^T \end{aligned} \tag{5.2}$$




Back
Close

容易验证矩阵$P(i,j)$是对称矩阵，并且有

$$\begin{aligned} P(i,j)^2 &= I + e_i(e_j - e_i)^T + e_j(e_i - e_j)^T + e_i(e_j - e_i)^T \\ &+e_i(e_j - e_i)^T e_i(e_j - e_i)^T + e_j(e_i - e_j)^T e_i(e_j - e_i)^T \\ &+e_j(e_i - e_j)^T + e_i(e_j - e_i)^T e_j(e_i - e_j)^T \\ &+e_j(e_i - e_j)^T e_j(e_i - e_j)^T \qquad (5.3) \\ &= I + 2e_i(e_j - e_i)^T + 2e_j(e_i - e_j)^T \\ &-e_i(e_j - e_i)^T + e_j(e_j - e_i)^T \\ &+e_i(e_i - e_j)^T - e_j(e_i - e_j)^T = I \end{aligned}$$

记$\tilde{l}_i$是分量小于等于i均为0的一个n维向量，l_i是$n-i$维向量，亦即

$$\tilde{l}_i^T = (0, \cdots, 0, l_{i+1,i}, \cdots, l_{n,i})^T = (0, \cdots, 0, l_i^T)^T$$

如果矩阵A的元素$a_{11} \neq 0$，一定存在一个矩阵$L_1 = I + \tilde{l}_1 e_1^T$，使得矩阵$L_1 A$的第1列为$a_{11}e_1$。

算法 7 部分选主元的$Guass$消去算法

for $j = 0$ to $n - 2$ do

find l: $|a_{lj}| = \max\{|a_{ij}|, i = j, \ldots, n-1\}$

if $l \neq j$, swap A_j and A_l

if $a_{jj} = 0$, A is singular and return

$a_{ij} = a_{ij}/a_{jj}$, $i = j+1, \ldots, n-1$

for $k = j + 1$ to $n - 1$ do

$a_{ik} = a_{ik} - a_{ij} \times a_{jk}$, $i = j+1, \ldots, n-1$

end$\{for\}$

end$\{for\}$

分布式系统的并行LU分解算法

icol= 0

for $j = 0$ to $n - 2$ do

if myid=j mod p then

find l: $|a_{l,\text{icol}}| = \max\{|a_{i,\text{icol}}|, i = j, \ldots, n-1\}$

if $l \neq j$, swap $a_{j,\text{icol}}$ and $a_{l,\text{icol}}$

if $a_{j,\text{icol}} = 0$, A is singular and kill all processes

$a_{i,\text{icol}} = a_{i,\text{icol}}/a_{j,\text{icol}}$, $f_{i-j-1} = a_{i,\text{icol}}$, $i = j+1, \ldots, n-1$

send(l, myid+1) and send(f, myid+1), icol+1 $\rightarrow$ icol

else

recv(l, myid-1) and recv(f, myid+1)

if myid+1 $\neq j$ mod pi then

send(l, myid+1) and send(f, myid+1)

end$\{if\}$

end$\{if\}$

if $l \neq j$, swap A_j and A_l

for k=icol to $m-1$ do

$a_{ik} = a_{ik} - f_i \times a_{jk}$, $i = j+1, \ldots, n-1$

end$\{for\}$

end$\{for\}$

三角方程组的并行解法

$k = 0$

if myid=0, then

$u_i = b_i,\ i = 0, \ldots, n-1,\ v_i = 0,\ i = 0, \ldots, p-2$

else

$u_i = 0,\ i = 0, \ldots, n-1$

for $i = myid$ step p to $n-1$ do

if $i > 0$, recv(v, $i - 1 \bmod p$)

$x_k = (u_i + v_0)/l_{ik}$

$v_j = v_{j+1} + u_{i+1+j} - l_{i+1+j,k} \times x_k,\ j = 0, \ldots, p-3$

$v_{p-2} = u_{i+p-1} - l_{i+p-1,k} \times x_k$

$\text{send}(v,\ i+1 \bmod p)$

$u_j = u_j - l_{jk} \times x_k,\ j = i+p, \ldots, n-1$

$k+1 \rightarrow k$

$\text{end}\{for\}$

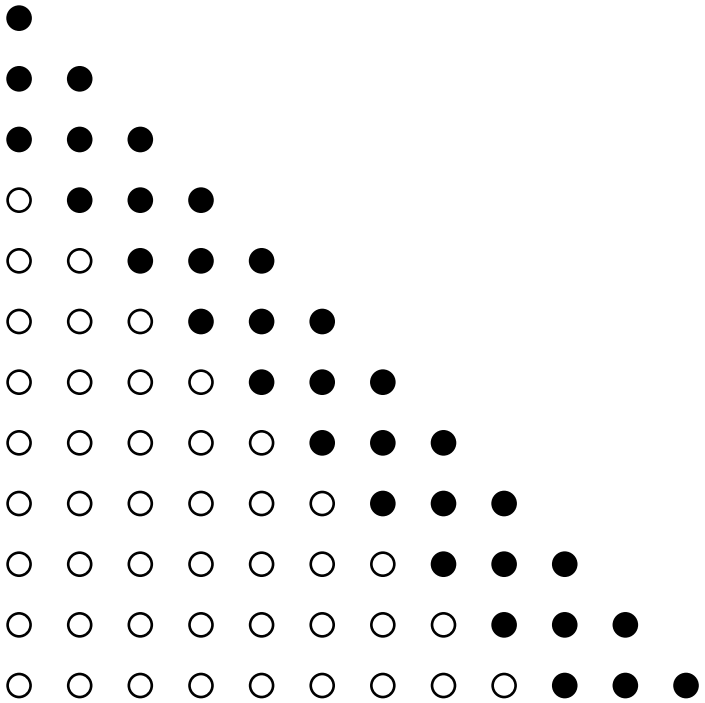


图 5.1 使用3个处理机求解下三角线性代数方程组

经典迭代法-Jacobi

考虑求解线性代数方程组

$$Ax = b \tag{5.4}$$

其中A是$m \times m$矩阵，记D、$-L$、$-U$分别是A的对角、严格下三角、严格上三角部分构成的矩阵，即$A = D - L - U$。这时方程组(5.4)可以变为

$$Dx = b + (L + U)x \tag{5.5}$$

如果方程组(5.5)右边的x已知，由于D是对角矩阵，可以很容易求得左边的x，这就是Jacobi迭代法的出发点。因此，对于给定的初值$x^{(0)}$，Jacobi

迭代法如下：

$$x^{(k+1)} = D^{-1}(L+U)x^{(k)} + D^{-1}b \tag{5.6}$$

记$G = D^{-1}(L+U) = I - D^{-1}A$，$g = D^{-1}b$。则每次迭代就是做矩阵向量乘，然后是向量加。亦即：

$$x^{+} = Gx + g \tag{5.7}$$

关于这个迭代法的并行计算问题，在习题4.8中对一种情况进行考虑，其它矩阵存储方式下的并行也同样可以完成，这里不再赘述。

经典迭代法-Gauss-Seidel

Gauss-Seidel迭代法是逐个分量进行计算的一种方法，考虑线性代数方程组(5.4)的分量表示

$$\sum_{j=1}^{n} a_{ij}x_j = b_i, \qquad i = 1, \ldots, n \tag{5.8}$$

对于给定的初值$x^{(0)}$，Gauss-Seidel迭代法如下：

算法 8 *Gauss-Seidel迭代算法*

$k = 0$

$x_1^{(k+1)} = (b_1 - \sum_{j=2}^{n} a_{1j}x_j^{(k)})/a_{11}$

$x_2^{(k+1)} = (b_2 - a_{21}x_1^{(k+1)} - \sum_{j=3}^{n} a_{2j}x_j^{(k)})/a_{22}$

Back

Close

$\cdots$

$x_{n-1}^{(k+1)} = (b_{n-1} - \sum_{j=1}^{n-2} a_{n-1,j} x_j^{(k+1)} - a_{n-1,n} x_n^{(k)})/a_{n-1,n-1}$

$x_n^{(k+1)} = (b_n - \sum_{j=1}^{n-1} a_{nj} x_j^{(k+1)})/a_{nn}$

$\|x^{(k+1)} - x^{(k)}\|_2 < \epsilon \|x^{(k+1)} - x^{(0)}\|_2 ?\ k = k+1$

经典迭代法-Gauss-Seidel的并行化

记$s_i = \sum_{j=i+1}^{n} a_{ij} x_j^{(0)}$，$i = 1, \ldots, n-1$，$s_n = 0$。并行计算方法如下：

算法 9 *并行Gauss-Seidel迭代算法*

$k = 0$

for $i = 1, n$ do

$x_i^{(k+1)} = (b_i - s_i)/a_{ii},\ s_i = 0$

for $j = 1, n, j \neq i$ do

$s_j = s_j + a_{ji}x_i^{(k+1)}$

end{for}

end{for}

$\|x^{(k+1)} - x^{(k)}\|_2 < \epsilon\|x^{(k+1)} - x^{(0)}\|_2 ?\ k = k + 1$

在算法9中，每次并行计算s_j，之后可以并行计算截止条件是否满足。

习题

1. 如果矩阵是按照列循环方式存放在处理机中的，请问是否可以设计一个并行计算Gauss-Seidal的方法；
2. 请用自己的理解，对三角矩阵方程组的并行求解方法进行描述和解释。




六、 FFT并行算法

在科学与工程计算中快速富氏变换应用非常广泛，自上个世纪60年代提出以来，已经被认为是上个世纪最伟大的算法之一。这里我们考虑FFT的并行算法以及如何实现。FFT考虑快速计算

$$y_k = \sum_{j=0}^{n-1} x_j e^{-\frac{2\pi ijk}{n}}, \qquad k = 0, 1, \ldots, n-1. \tag{6.1}$$

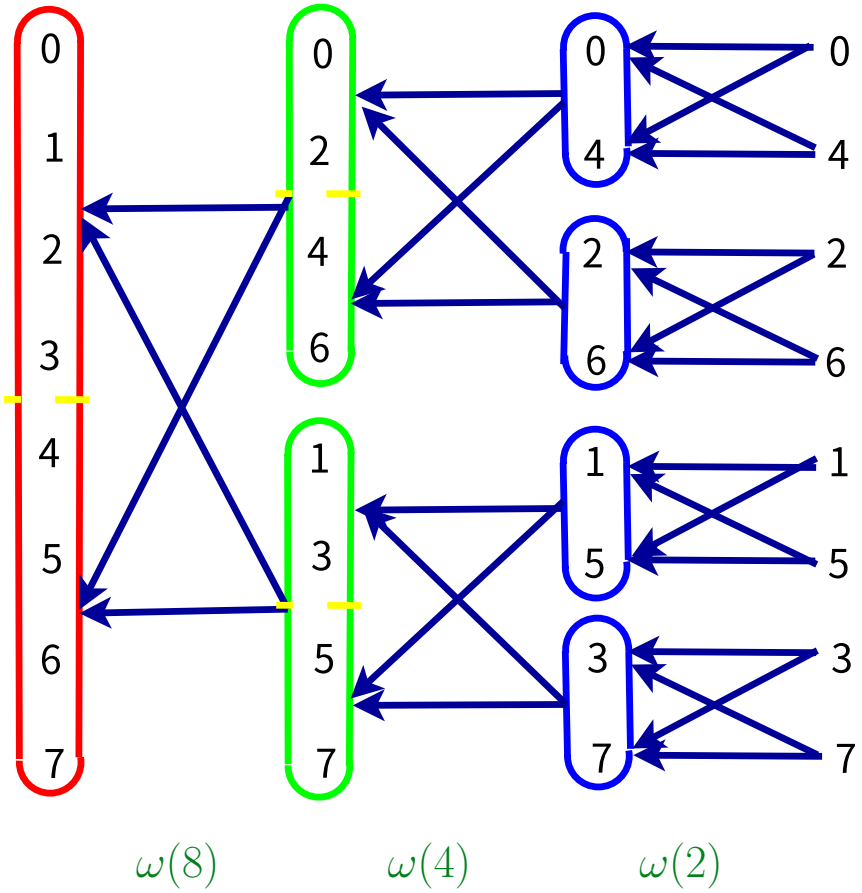
的问题，其中$i^2 = -1$。记$\omega(n) = e^{-\frac{2\pi i}{n}}$，则$\omega(n)^k$是方程$x^n = 1$的根。下面的性质显然成立：

1. $(\omega(n)^k)^n = 1$
2. $\omega(n)^2 = \omega(n/2)$
3. $\omega(n)^{n/2} = -1$

记$Y = (y_0, y_1, \ldots, y_{n-1})^{\mathrm{T}}$，$X = (x_0, x_1, \ldots, x_{n-1})^{\mathrm{T}}$，$\Omega_{kj} = \omega(n)^{kj}$，则式(6.1)的计算过程可以写成矩阵乘向量的形式$Y = \Omega X$。因此，直接计算式(6.1)需要$O(n^2)$个浮点运算。由于$\omega(n)$具有特殊性，假设$n = 2m$，式(6.1)可以分成如下的计算过程

$$\begin{cases} y_k = \sum_{j=0}^{m-1} x_{2j}\omega(m)^{kj} + \omega(n)^k \sum_{j=0}^{m-1} x_{2j+1}\omega(m)^{kj} \\ y_{k+m} = \sum_{j=0}^{m-1} x_{2j}\omega(m)^{kj} - \omega(n)^k \sum_{j=0}^{m-1} x_{2j+1}\omega(m)^{kj} \\ k = 0, 1, \ldots, m-1 \end{cases} \tag{6.2}$$

假设T_n是计算所有y_k的计算量，由式(6.2)有$T_n = 2T_{n/2} + 3/2n$，也即$T_n = 3/2n \log_2 n + n$。在这里讨论的计算方法中，假定数据的长度是$n = 2^m$。


0
1
2
3
4
5
6
7
0
2
4
6
1
3
5
7
0
4
2
6
1
5
3
7
0
4
2
6
1
5
3
7
$\omega(8)$
$\omega(4)$
$\omega(2)$

一维串行FFT算法

公式(6.2)是FFT的一种计算方法基础，可以通过递推的方式来完成其计算任务。在进行FFT算法的执行过程中，需要对原始数据进行重排序，以利于计算。数据重新排列的规则是按位倒置（bit reverse）方式进行的，以$n = 16$为例，按位倒置变换如表6.1所示。

假设$n = 2^m$，所有x_j按照按位倒置规则进行重新排序，记为y_j。令$D(2k)$是k阶对角矩阵，对角线上的元素为$\omega(2k)^j$，$j = 0, \ldots, k-1$。按照公式(6.2)，在时间上进行大幅度减少（decimation in time，DIT）的FFT算法如下：

算法 10 *FFT计算方法*

1. 置$s = 1$, $t = 1$, $l = n/2$

表 6.1　按位倒置变换

原始顺序	第一次	第二次	第三次	十进制
0000	0000	0000	0000	0
0001	1000	1000	1000	8
0010	0001	0100	0100	4
0011	1001	1100	1100	12
0100	0010	0001	0010	2
0101	1010	1001	1010	10
0110	0011	0101	0110	6
0111	1011	1101	1110	14
1000	0100	0010	0001	1
1001	1100	1010	1001	9
1010	0101	0110	0101	5
1011	1101	1110	1101	13
1100	0110	0011	0011	3
1101	1110	1011	1011	11
1110	0111	0111	0111	7
1111	1111	1111	1111	15

2. 计算所有长度为$2t$的变换l个，其中每个变换的形式为

$$Y = \begin{pmatrix} I & D(2t) \\ I & -D(2t) \end{pmatrix} Y$$

3. 如果$s < m$，置$s = s + 1$，$t = 2t$，$l = l/2$，重复上一步计算。

在这个算法中，其计算过程是从计算长度为2的一些变换开始，然后是长度为4的一些变换，最后得到长度为2^m的变换。每次的计算是非常简单的，比如已经有了2个长度为2的FFT的序列分别记为u，v，则由它们产生的长度为4的序列z的计算公式如下：

$$\begin{cases} z_0 &= u_0 + \omega(4)^0 v_0 \\ z_1 &= u_1 + \omega(4)^1 v_1 \\ z_2 &= u_0 - \omega(4)^0 v_0 \\ z_3 &= u_1 - \omega(4)^1 v_1 \end{cases} \tag{6.3}$$

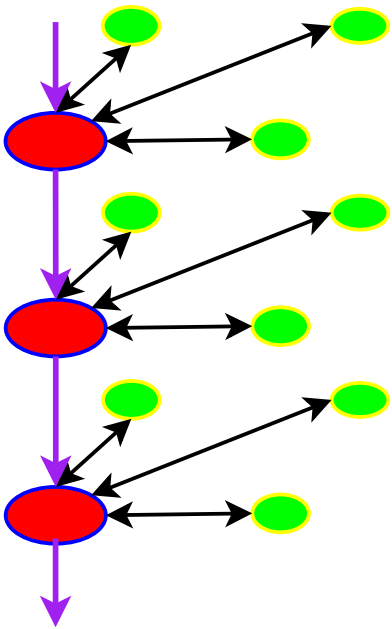
二维串行FFT算法

$$\begin{cases} y_{k_x k_y} & = \sum_{j_x=0}^{n_x-1} \sum_{j_y=0}^{n_y-1} x_{j_x j_y} e^{-\frac{2\pi i j_x k_x}{n_x}} e^{-\frac{2\pi i j_y k_y}{n_y}} \\ & = \sum_{j_y=0}^{n_y-1} (\sum_{j_x=0}^{n_x-1} x_{j_x j_y} e^{-\frac{2\pi i j_x k_x}{n_x}}) e^{-\frac{2\pi i j_y k_y}{n_y}} \\ & = \sum_{j_y=0}^{n_y-1} z_{k_x j_y} e^{-\frac{2\pi i j_y k_y}{n_y}} \\ & k_x = 0, 1, \ldots, n_x - 1, k_y = 0, 1, \ldots, n_y - 1 \end{cases} \tag{6.4}$$

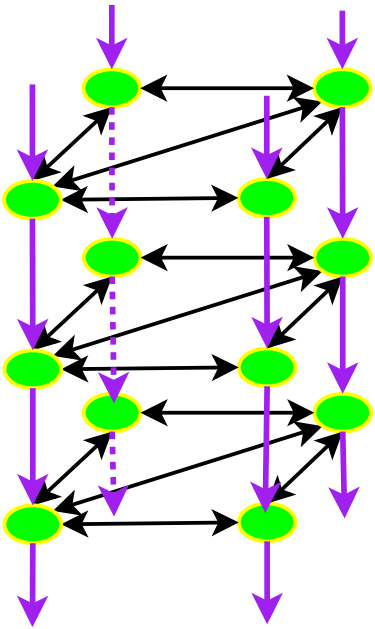
从公式(6.4)不难得出，$y_{k_x k_y}$的计算过程可以由两个方向的一维FFT来完成。

七、 MPI并行程序设计

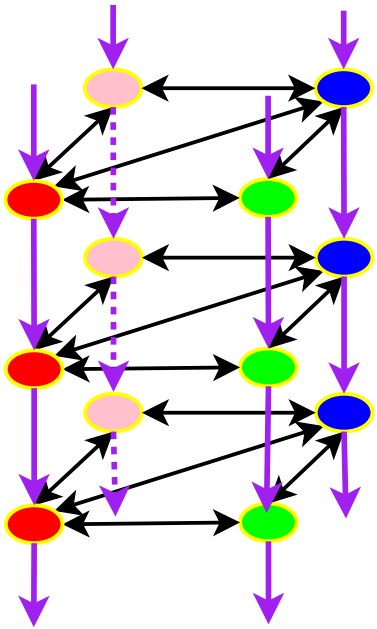
并行程序类型、MPI-SPMD并行程序结构



主从式M-S



对称式SPMD



自主式MPMD

MPI并行程序的基本结构

1. 进入MPI环境。产生通讯子(communicator)、进程序号、进程数；

2. 程序主体。实现计算的全部内容；

3. 退出MPI环境。不能再使用MPI环境

记iam表示进程序号，那么如下一段FORTRAN程序：

```
m = iam + 2
if ( iam .eq. 0 ) then
  m = 10
endif
```

或者是：

```
if ( iam .eq. 0 ) then
```




```
    m = 10
  else
    m = iam + 2
  endif
```

产生了m的值，0进程是10，1进程是3，2进程是4，· · · 。




MPI并行环境管理函数

MPI_INIT

C	`int MPI_Init( int *argc, char ***argv )`
Fortran	`MPI_INIT( IERROR )`
	`INTEGER IERROR`

MPI_FINALIZE

C	`int MPI_Finalize( void )`
Fortran	`MPI_FINALIZE( IERROR )`
	`INTEGER IERROR`

MPI_INITIALIZED

C	`int MPI_Initialized( int flag )`
Fortran	`MPI_INITIALIZED( FLAG, IERROR )`
	`LOGICAL FLAG`
	`INTEGER IERROR`

MPI通信子操作

MPI_COMM_SIZE

C	`int MPI_Comm_size( MPI_Comm comm, int *size )`
Fortran	`MPI_COMM_SIZE( COMM, SIZE, IERROR )` `INTEGER COMM, SIZE, IERROR`

MPI_COMM_RANK

C	`int MPI_Comm_rank( MPI_Comm comm, int *rank )`
Fortran	`MPI_COMM_RANK( COMM, RANK, IERROR )` `INTEGER COMM, RANK, IERROR`

MPI_COMM_DUP

C	`int MPI_Comm_dup( MPI_Comm comm, MPI_Comm *newcomm )`
Fortran	`MPI_COMM_DUP( COMM, NEWCOMM, IERROR )` `INTEGER COMM, NEWCOMM, IERROR`




Back
Close

MPI_COMM_SPLIT

C	int MPI_Comm_split(MPI_Comm comm, int color, int key, MPI_Comm *newcomm)
Fortran	MPI_COMM_SPLIT(COMM, COLOR, KEY, NEWCOMM, IERROR) INTEGER COMM, COLOR, KEY, NEWCOMM, IERROR

在MPI_COMM_SPLIT函数中，COLOR和KEY都是非负整数。KEY是确定新通信子中成员的顺序，COLOR相同的构成一个通信子，如果其取值为MPI_UNDEFINED，所得到的通信子为MPI_COMM_NULL。

目前我们介绍的这几个MPI函数是并行程序中极其重要的，有了第 7.2和第 7.3 节的函数，我们就可以编写简单的并行程序。

例子 4 简单并行程序

```
#include "myhead.h"
/*Start the main program*/
void main(argc, argv)
```

```
int argc; char **argv;
{
  int iam, np;  MPI_Comm comm;
/*Start MPI environment*/
  MPI_Init( &argc, &argv );
  MPI_Comm_dup( MPI_COMM_WORLD, &comm );
  MPI_Comm_rank( comm, &iam );
  MPI_Comm_size( comm, &np );
/*MAIN work here */
  printf("\nThe process %d of %d is running!\n", iam, np);
/*finished*/
  MPI_Finalize( );
}
```

点到点通信函数

阻塞式SEND和RECV

这2个函数是MPI通讯函数的基础，也是编写并行计算程序的实质性函数。可以说，了解了通讯的要求，几乎所有并行算法的实现都可以由这2个最基本的通讯函数来完成。

MPI_SEND

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

Fortran	`MPI_SEND(BUF, COUNT, DATATYPE, DEST, TAG, COMM, IERROR )`
	`<type> BUF(*)`
	`INTEGER COUNT, DATATYPE, DEST, TAG, COMM, IERROR`




MPI_RECV

C	int MPI_Recv(void* buf, int count, MPI_Datatype datatype, int source, int tag, MPI_Comm comm, MPI_Status *status)
Fortran	MPI_RECV(BUF, COUNT, DATATYPE, SOURCE, TAG, COMM, STATUS, IERROR) <type> BUF(*) INTEGER COUNT, DATATYPE, SOURCE, TAG,COMM, STATUS(MPI_STATUS_SIZE), IERROR

MPI_STATUS的三个成员是MPI_SOURCE，MPI_TAG和MPI_ERROR。

SNED和RECV函数的基本数据类型

Fortran程序可以使用的数据类型:

MPI_INTEGER	MPI_REAL	MPI_DOUBLE_PRECISION
MPI_COMPLEX	MPI_LOGICAL	MPI_CHARACTER
MPI_PACKED	MPI_BYTE	




Back
Close

C程序可以使用的数据类型：

MPI_CHAR	MPI_SHORT	MPI_INT
MPI_LONG	MPI_UNSIGNED_CHAR	MPI_UNSIGNED_SHORT
MPI_UNSIGNED_INT	MPI_UNSIGNED_LONG	MPI_FLOAT
MPI_DOUBLE	MPI_LONG_DOUBLE	MPI_PACKED
MPI_BYTE		

在使用SEND和RECV函数时，需要注意发送和接收的数据类型的一致性，避免运行错误。

例子 5 *传送数据至下一个进程*

```
void ring_s_r( m, iam, np, commi, n )
int m, iam, np *n;
MPI_Comm comm;
{
  int next=(iam+1) % np, front=(np+iam-1) % np, \
```




```
        tag = 1;
    MPI_Status st;

    if( iam == 0 ) {
      MPI_Send( &m, 1, MPI_INT, next, tag, comm );
      MPI_Recv( n, 1, MPI_INT, front, tag, comm, &st );
    }
    else {
      MPI_Recv( n, 1, MPI_INT, front, tag, comm, &st );
      MPI_Send( &m, 1, MPI_INT, next, tag, comm );
    }
    return;
}
```

此程序可以完成从本进程向下一个进程传送数据的作用，同时，接收从前面进程发来的数据。然而，我们不难发现，如此做法是顺序执行的，没有并行执行消息传递，因此可以说不是一个好的并行程序设计方案。是否存在一个优秀设计方案，使得实现过程尽可能优化？

例子 6 *数值求解二维泊松方程*

$$\begin{aligned} -\Delta u(x,y) &= f(x,y), (x,y) \in \Omega = [0,\pi] \times [0,\pi] \\ u(x,y)|_{\partial\Omega} &= 0 \end{aligned} \tag{7.1}$$

这里我们采用5点中心差分格式，记$h = \pi/(n+1)$，$x_0 = 0$，$y_0 = 0$，$x_i = x_0 + ih$，$y_i = y_0 + ih$，$u_{ij} = u(x_i, y_j)$，$f_{ij} = f(x_i, y_j)$。则有如下方程组：

$$4u_{ij} - u_{i-1,j} - u_{i+1,j} - u_{i,j-1} - u_{i,j+1} = h^2 f_{ij}, i, j = 1, n \tag{7.2}$$

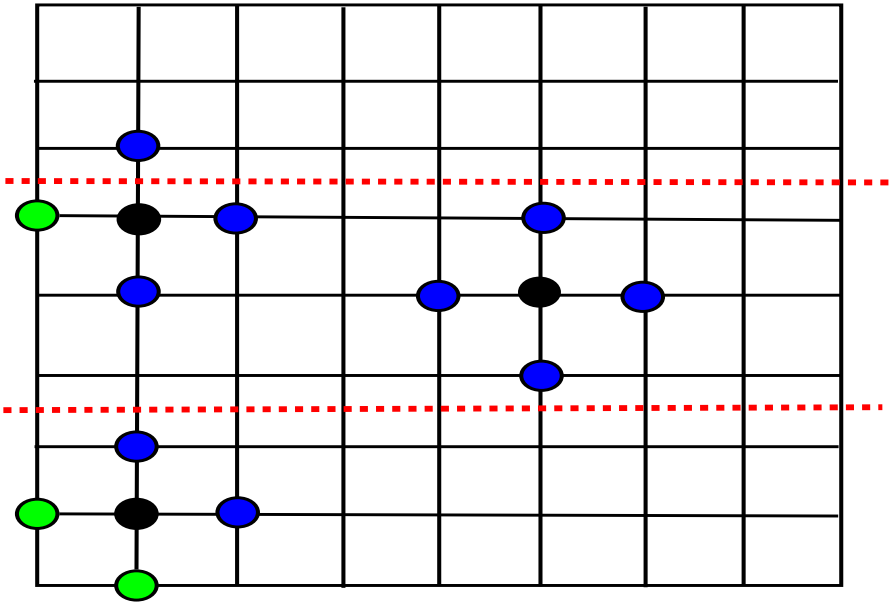


图 7.1 strip partitioning domain

根据（7.1）提供的边界条件，进一步可以有：

$$\begin{aligned} 4u_{11} - u_{2,1} - u_{1,2} &= h^2 f_{11} \\ 4u_{1j} - u_{2,j} - u_{1,j-1} - u_{1,j+1} &= h^2 f_{1j}, j = 2, n-1 \\ 4u_{1n} - u_{2,n} - u_{1,n-1} &= h^2 f_{1n} \end{aligned} \tag{7.3}$$

如果采用Jacobi（参见 5.4）迭代法求解，使残量相对误差小于ϵ。对于给定的初始值x^0，记$r^k = b - Ax^k$，迭代终止条件为：

$$\|r^k\|_2 / \|r^0\|_2 < \epsilon \tag{7.4}$$

从而有：

$$x^{k+1} = D^{-1}(b + (L+U)x^k) = D^{-1}r^k + x^k \tag{7.5}$$

使用Jacobi迭代法的并行程序如下：

```
#include "myhead.h"
#include <math.h>
```

```
/* solving Poisson equations with zero boundary values,
 * partitioning in row direction */

float sqnorm2(a, lda, m, n)
int lda, m, n;
float *a;
{
  int i, j;
  float r=0.0;

  for(i=0; i<m; i++)
    for(j=0;j<n; j++)
```




```
      r += a[i*lda+j]*a[i*lda+j];

  return r;
}

/* f = 2*sin(x)*sin(y) */
void righths( h, frhs, lds, m, n, iam, np)
int lds, m, n, iam, np;
float h, *frhs;
{
  int i, j, ioff, ir;

  ir = n % np;
```

```
  ioff = n / np;
  ioff = iam*ioff;
  if( iam < ir ) ioff += iam;
  else ioff += ir;

  for(i=1; i<=m; i++)
    for(j=1; j<n; j++)
      frhs[i*lds+j]= 2.0*sinf((i+ioff)*h)*sinf(j*h);

  return;
}

void laplace(comm, iam, np, h, work, lds, m, n, frhs, sol)
```




```
MPI_Comm comm;
int iam, np, lds, m, n;
float h, *work, *frhs, *sol;
{
  int i, j, k, front, next, max_iter=200;
  float sh=h*h, epsilon=1.0e-3, residual, r0, rt;
  MPI_Status st;

  front = (np+iam-1)%np;
  next = (iam+1)%np;
  if( iam == 0 ) front = MPI_PROC_NULL;
  if( iam == np-1 ) next = MPI_PROC_NULL;
  /* initialize the solver values */
```




```
for(i=0; i<m+2; i++)
  for(j=0;j<n+2; j++)
    sol[i*lds+j] = 0.0;
/* initial residual value */
rt = sqnorm2( &frhs[lds+1], lds, m, n );
MPI_Allreduce( &rt, &r0, 1, MPI_FLOAT, MPI_SUM, comm );
r0 = sqrtf( r0 )*sh;

/* iterate for solving discretized equations */
for(k=0; k<max_iter; k++) {

  /* calculate the residual in 5 point DS*/
  for(i=1; i<=m; i++)
```

```
  for(j=1; j<=n; j++)
    work[i*lds+j]=sh*frhs[i*lds+j]+sol[i*lds+j-1]+ \
                  sol[i*lds+j+1]+sol[(i-1)*lds+j]+ \
                  sol[(i+1)*lds+j]-4.0*sol[i*lds+j];

rt = sqnorm2( &work[lds+1], lds, m, n );
MPI_Allreduce( &rt, &residual, 1, MPI_FLOAT,\
               MPI_SUM, comm );
residual = sqrtf( residual )/r0;
if( epsilon < residual ) break;

/* update the new solution */
for(i=1; i<=m; i++)
```




Back

Close

```
    for(j=1; j<=n; j++)
      sol[i*lds+j]+=0.25*work[i*lds+j];

  /* send the sol 1st row to front process */
  MPI_Sendrecv( &sol[lds+1], n, MPI_FLOAT, front, 1, \
                &sol[(m+1)*lds+1], n, MPI_FLOAT, \
                next, 1, comm, &st );
  /* send the sol last row to next process */
  MPI_Sendrecv( &sol[m*lds+1], n, MPI_FLOAT, next, 2, \
                &sol[1], n, MPI_FLOAT, front, 2, \
                comm, &st );
}
```

```
  return;
}
```

合成函数SENDRECV

MPI_SENDRECV

C	int MPI_Sendrecv(void *sendbuf, int sendcount, MPI_Datatype sendtype, int dest, int sendtag, void *recvbuf, int recvcount, MPI_Datatype recvtype, int source,int recvtag,MPI_Comm comm,MPI_Status *status)
Fortran	MPI_SENDRECV(SENDBUF, SENDCOUNT, SENDTYPE, DEST, SENDTAG, RECVBUF, RECVCOUNT, RECVTYPE, SOURCE, RECVTAG, COMM, STATUS, IERROR) <type> SENDBUF(*), RECVBUF(*) INTEGER SENDCOUNT, SENDTYPE, DEST, SENDTAG, RECVCOUNT, RECVTYPE, SOURCE, RECVTAG, COMM, STATUS(MPI_STATUS_SIZE), IERROR

值得注意的是，函数SEND、RECV、SENDRECV互相兼容，即SEND发送的消息可以用SENDRECV来接收，而SENDRECV发送的消息也可以用RECV接收。

合成函数SENDRECV_Replace

MPI_SENDRECV_REPLACE

C	int MPI_Sendrecv_replace(void *buf, int count, MPI_Datatype type, int dest, int sendtag, int source,int recvtag,MPI_Comm comm,MPI_Status *status)
Fortran	MPI_SENDRECV_REPLACE(BUF, COUNT, TYPE, DEST, SENDTAG, SOURCE, RECVTAG, COMM, STATUS, IERROR) <type> BUF(*) INTEGER COUNT, TYPE, DEST, SENDTAG, SOURCE, RECVTAG, COMM, STATUS(MPI_STATUS_SIZE), IERROR

在使用此函数时，最好与6节定义的函数进行比较，通常来说，MPI_SENDRECV_REPLACE效率低下。

在MPI接收消息时，不需要指明消息是从哪个进程来的，可以采用通配符的方式，即source = MPI_ANY_SOURCE，tag = MPI_ANY_TAG。同时为方便使用MPI_SENDRECV函数，MPI还定义了一个空进程，用MPI_PROC_NULL来表示。




Back
Close

消息查询函数

MPI_PROBE

C	`int MPI_Probe(int source, int tag, MPI_Comm comm, MPI_Status *status )`
Fortran	`MPI_PROBE( SOURCE, TAG, COMM, STATUS, IERROR )` `INTEGER SOURCE, TAG, COMM, STATUS(MPI_STATUS_SIZE), IERROR`

MPI_IPROBE

C	`int MPI_Iprobe(int source, int tag, MPI_Comm comm, int* flag, MPI_Status *status )`

Fortran	`MPI_IPROBE( SOURCE, TAG, COMM, FLAG, STATUS, IERROR )`
	`LOGICAL FLAG`
	`INTEGER SOURCE, TAG, COMM, STATUS(MPI_STATUS_SIZE), IERROR`




Back
Close

MPI_GET_COUNT

C	`int MPI_Get_count( MPI_Status *status, MPI_Datatype type, int *count )`
Fortran	`MPI_GET_COUNT( STATUS, TYPE, COUNT, IERROR )` `INTEGER STATUS(MPI_STATUS_SIZE), TYPE, COUNT, IERROR`

在MPI中，还有一个与之类似的函数MPI_GET_ELEMENT，一般情况下，二者相同，只有在特殊的情况下，只能使用MPI_GET_ELEMENT才能得到所需要的数据类型的个数。这二个函数的参数是完全一致的，意义相同。

以上是点到点阻塞式通讯的一些基本函数，是MPI程序的基础。现在我们来看一下例子 5的通讯部分，可以改写成如下：

```
MPI_Sendrecv( &m, 1, MPI_INT, next, tag, n, 1, \
              MPI_INT, front, tag, comm, &st );
```




非阻塞式ISEND和IRECV

MPI_ISEND

C	`int MPI_Isend( void* buf, int count, MPI_Datatype datatype, int dest, int tag, MPI_Comm comm, MPI_Request *request )`

Fortran	`MPI_ISEND(BUF, COUNT, DATATYPE, DEST, TAG, COMM, REQUEST, IERROR )`
	`<type> BUF(*)`
	`INTEGER COUNT, DATATYPE, DEST, TAG, COMM, REQUEST, IERROR`

MPI_IRECV

C	`int MPI_Irecv( void* buf, int count, MPI_Datatype datatype, int source, int tag, MPI_Comm comm, MPI_Request *request )`

Fortran	`MPI_IRECV( BUF, COUNT, DATATYPE, SOURCE, TAG, COMM, REQUEST, IERROR )`
	`<type> BUF(*)`
	`INTEGER COUNT, DATATYPE, SOURCE, TAG, COMM, REQUEST, IERROR`




Back
Close

消息请求完成函数

MPI_WAIT

C	`int MPI_Wait( MPI_Request *request, MPI_Status *status )`
Fortran	`MPI_WAIT(REQUEST, STATUS, IERROR )` `INTEGER REQUEST, STATUS(*), IERROR`

MPI_WAITANY

C	`int MPI_Waitany( int count, MPI_Request *requests,` `int *index, MPI_Status *status )`
Fortran	`MPI_WAITANY( COUNT, REQUESTS, INDEX, STATUS, IERROR )` `INTEGER COUNT, REQUESTS(*), INDEX, STATUS(*), IERROR`

MPI_WAITALL

C	`int MPI_Waitall( int count, MPI_Request *requests,` `MPI_Status *statuses )`
Fortran	`MPI_WAITALL( COUNT, REQUESTS, STATUSES, IERROR )` `INTEGER COUNT, REQUESTS(*), STATUS(*, *), IERROR`




Back
Close

MPI_WAITSOME

C	int MPI_Waitsome(int incount, MPI_Request *requests, int *outcount,int *indices, MPI_Status *statuses)
Fortran	MPI_WAITSOME(INCOUNT, REQUESTS, OUTCOUNT, INDICES, STATUSES, IERROR) INTEGER INCOUNT, REQUESTS(*), OUTCOUNT, INDICES(*), STATUS(MPI_STATUS_SIZE, *), IERROR

以上这些请求完成函数需要与非阻塞式通讯函数相结合使用，保障所请求的消息在一定时候必须完成。

消息请求检查函数

MPI_TEST

C	int MPI_Test(MPI_Request *request, int *flag, MPI_Status *status)
Fortran	MPI_TEST(REQUEST, FLAG, STATUS, IERROR) INTEGER REQUEST, STATUS(*), IERROR LOGICAL FLAG




MPI_TESTANY

C	`int MPI_Testany( int count, MPI_Request *requests, int *index, int *flag, MPI_Status *status )`

Fortran	`MPI_TESTANY( COUNT, REQUESTS, INDEX, FLAG, STATUS, IERROR )`
	`INTEGER COUNT, REQUESTS(*), INDEX, STATUS(*), IERROR`
	`LOGICAL FLAG`

MPI_TESTALL

C	`int MPI_Testall( int count, MPI_Request *requests, int *flag, MPI_Status *statuses )`

Fortran	`MPI_TESTALL( COUNT, REQUESTS, FLAG, STATUSES, IERROR )`
	`INTEGER COUNT, REQUESTS(*), STATUS(*, *), IERROR`
	`LOGICAL FLAG`




Back
Close

MPI_TESTSOME

C	`int MPI_Testsome( int incount, MPI_Request *requests, int *outcount,int *indices, MPI_Status *statuses )`
Fortran	`MPI_TESTSOME( INCOUNT, REQUESTS, OUTCOUNT, INDICES, STATUSES, IERROR )` `INTEGER INCOUNT, REQUESTS(*), OUTCOUNT, INDICES(*), STATUS(MPI_STATUS_SIZE, *), IERROR`




Back
Close

持久通讯函数SEND_INIT和RECV_INIT

MPI_SEND_INIT

C	int MPI_Send_INIT(void* buf, int count, MPI_Datatype type, int dest, int tag, MPI_Comm comm, MPI_Request *request)
Fortran	MPI_SEND_INIT(BUF,COUNT,TYPE,DEST,TAG,COMM,REQUEST,IERROR) <type> BUF(*) INTEGER COUNT, TYPE, DEST, TAG, COMM, REQUEST, IERROR

MPI_RECV_INIT

C	int MPI_Recv_init(void* buf, int count, MPI_Datatype type, int src, int tag, MPI_Comm comm, MPI_Request *request)
Fortran	MPI_RECV_INIT(BUF,COUNT,TYPE,SRC,TAG,COMM,REQUEST,IERROR) <type> BUF(*) INTEGER COUNT, TYPE, SRC, TAG, COMM, REQUEST, IERROR

MPI_START

C	int MPI_Start(MPI_Request *request)
Fortran	MPI_START(REQUEST, IERROR) INTEGER REQUEST, IERROR




Back
Close

MPI_STARTALL

C	`int MPI_Startall( int count, MPI_Request *requests )`
Fortran	`MPI_STARTALL(COUNT, REQUESTS, IERROR )` `INTEGER COUNT, REQUESTS(*), IERROR`

消息请求的释放与取消

消息请求完成之后，需要将请求句柄赋值为MPI_REQUEST_NULL。

MPI_REQUEST_FREE

C	`int MPI_Request_free( MPI_Request *request )`
Fortran	`MPI_REQUEST_FREE(REQUEST, IERROR )` `INTEGER REQUEST, IERROR`

MPI_CANCEL

C	`int MPI_Cancel( MPI_Request *request )`
Fortran	`MPI_CANCEL(REQUEST, IERROR )` `INTEGER REQUEST, IERROR`




取消一个消息的操作是局部性的，它将立即返回。因此，需要结合MPI_Wait或者MPI_Test。这2个函数返回的STATUS 将被用在下面的函数中。

MPI_TEST_CANCELLED

C	`int MPI_Test_cancelled( MPI_Status *status, int *flag )`

Fortran	`MPI_TEST_CANCELLED(STATUS, FLAG, IERROR )`
	`LOGICAL FLAG`
	`INTEGER STATUS(*), IERROR`




Back
Close

高维进程

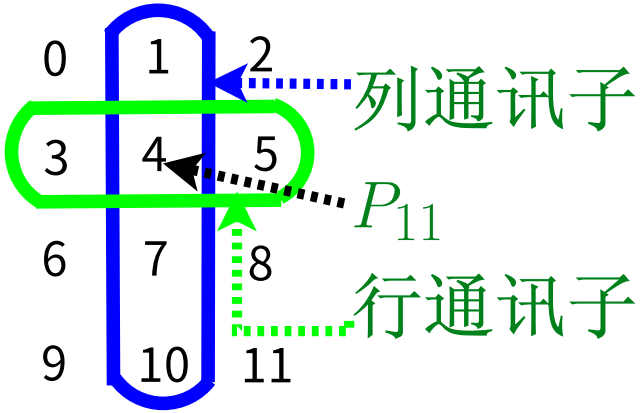
我们知道在进入MPI环境之后，系统对每个进程进行编号，想知道自己是哪个进程，可以通过MPI_Comm_rank获得。由于这样产生的进程是1维的，对于绝大部分MPI并行程序是能够满足需要的，然而还有些并行程序只用1维进程就非常不方便，比如我们之前讲到的Cannon 4.7算法。因此，在实际并行程序中，对于进程的高维表示是不可或缺的。如何能够做到这一点？下面仅以怎样获得2维进程表示为例加以阐述。

假设我们需要p行q列的进程表示，那么，在进入MPI并行环境时所产生的进程数np必须大于等于$p \times q$，不然无法产生所需要的2维进

程。按照行优先的方式P_{iam}与P_{ij}之间的映射为：

$$i = \text{iam}/q \qquad j = \text{iam} \mod q$$

这个映射是一对一的。



仅有这样的映射关系难以满足程序实现的需求，通常需要利用2维表示的优势，亦即在行方向和列方向进行通信，这就是每个P_{ij}进程具备行和列通讯的便利条件，为此需要行通讯子以及列通讯子。哪里可以获得这2个通讯子？在前面第 7.3节中，我们介绍了`MPI_Comm_split`，现在正是发挥此函数作用的时机，是否已经清楚和知道怎么实现？

```
void mesh( iam,  np, comm, p, q, myrow, mycol, \
           rowcom, colcom )
int iam, np, p, q, *myrow, *mycol;
MPI_Comm comm, *rowcom, *colcom;
{
  int color, key;

  if( np < p*q ) return;

  if( iam < p*q ) color = iam / q;
  else color = MPI_UNDEFINED;
  key = iam;
  MPI_Comm_split( comm, color, key, rowcom );
```




Back

Close

```
/*column communicator*/
if( iam < p*q ) color = iam % q;
else color = MPI_UNDEFINED;
key = iam;
MPI_Comm_split( comm, color, key, colcom );

if( iam <p*q ) {
  MPI_Comm_rank( *colcom, myrow );
  MPI_Comm_rank( *rowcom, mycol );
}

return;
```




Back
Close

```
}
```

自定义数据类型

数据类型的基本结构：

$$\text{Typemap}= \{(type_0, disp_0), \ldots, (type_{n-1}, disp_{n-1})\}$$

$$\text{Typemap}= \{(type_0, disp_0, len_0), \ldots, (type_{n-1}, disp_{n-1}, len_{n-1})\}$$

自定义数据类型是MPI的重要组成部分，也是最能发挥用户的主观能动性。同时对于发挥MPI程序的性能至关重要，能够充分体现设计水平。

CONTIGUOUS数据类型

MPI_TYPE_CONTIGUOUS

C	int MPI_Type_contiguous(int count,MPI_Datatype oldtype, MPI_Datatype *newtype)
Fortran	MPI_TYPE_CONTIGUOUS(COUNT, OLDTYPE, NEWTYPE, IERROR) INTEGER COUNT, OLDTYPE, NEWTYPE, IERROR

例子 7 如果我们定义连续的2个实数为一个新的数据类型NEWTYPE，FORTRAN程序如下：

```
call mpi_type_contiguous(2,mpi_real,newtype,ierr)
```

因此，如果原程序是：

```
call mpi_send(a, 10, mpi_real, 1, 99, comm, ierr)
```

则可以用如下程序替换：

```
call mpi_send( a, 5, newtype, 1, 99, comm, ierr )
```

可以用这个函数构造双精度复数。




Back
Close

数据类型辅助函数

MPI_TYPE_COMMIT

C	`int MPI_Type_commit( MPI_Datatype *datatype )`
Fortran	`MPI_TYPE_COMMIT( DATATYPE, IERROR )` `INTEGER DATATYPE, IERROR`

MPI_TYPE_FREE

C	`int MPI_Type_free( MPI_Datatype *datatype )`
Fortran	`MPI_TYPE_FREE( DATATYPE, IERROR )` `INTEGER DATATYPE, IERROR`

MPI_TYPE_EXTENT

C	`int MPI_Type_extent(MPI_Datatype datatype,MPI_Aint *extent)`
Fortran	`MPI_TYPE_EXTENT( DATATYPE, EXTENT, IERROR )` `INTEGER DATATYPE, EXTENT, IERROR`




Back
Close

MPI_ADDRESS

C	`int MPI_Address( void* location, MPI_Aint *address )`

Fortran	`MPI_ADDRESS( LOCATION, ADDRESS, IERROR )`
	`<type> LOCATION(*)`
	`INTEGER ADDRESS, IERROR`




Back
Close

VECTOR数据类型

MPI_TYPE_VECTOR

C	`int MPI_Type_vector( int count, int blocklength, int stride, MPI_Datatype oldtype, MPI_Datatype *newtype )`
Fortran	`MPI_TYPE_VECTOR( COUNT, BLOCKLENGTH, STRIDE, OLDTYPE, NEWTYPE, IERROR )` `INTEGER COUNT,BLOCKLENGTH,STRIDE,OLDTYPE,NEWTYPE,IERROR`

MPI_TYPE_HVECTOR

C	`int MPI_Type_hvector(int count, int blocklength, int stride, MPI_Datatype oldtype, MPI_Datatype *newtype )`
Fortran	`MPI_TYPE_HVECTOR( COUNT, BLOCKLENGTH, STRIDE, OLDTYPE, NEWTYPE, IERROR )` `INTEGER COUNT,BLOCKLENGTH,STRIDE,OLDTYPE,NEWTYPE,IERROR`

这2个函数的参数是一样的，只是在HVECTOR中的STRIDE是按照字节数为单位。这个数据类型可以用来定义一个新的传输矩阵的数据类，




Back
Close

如果没有这个数据类型的支持，传输矩阵将带来许多麻烦。下面是一个矩阵数据类型的定义示例：

```
void typevector(m, n, lda, vector)
int m, n, lda; MPI_Datatype *vector;
{
  MPI_Type_vector( m, n, lda, MPI_INT, vector );
}
```

此函数定义了一个传输$m \times n$的矩阵数据类型，lda是矩阵的主维数的大小。

INDEX数据类型

MPI_TYPE_INDEXED

C

```
int MPI_Type_indexed(int count,int *array_of_blocklengths,
                     int *array_of_displacements,
                     MPI_Datatype oldtype,
                     MPI_Datatype *newtype )
```

Fortran

```
MPI_TYPE_INDEXED( COUNT, ARRAY_OF_BLOCKLENGTHS,
                  ARRAY_OF_DISPLACEMENTS, OLDTYPE,
                  NEWTYPE, IERROR )
INTEGER COUNT, ARRAY_OF_BLOCKLENGTHS(*),
        ARRAY_OF_DISPLACEMENTS(*),OLDTYPE,NEWTYPE,IERROR
```

Back

Close

MPI_TYPE_HINDEXED

C

```
int MPI_Type_hindexed(int count,int *array_of_blocklengths,
                      int *array_of_displacements,
                      MPI_Datatype oldtype,
                      MPI_Datatype *newtype )
```

Fortran

```
MPI_TYPE_HINDEXED( COUNT, ARRAY_OF_BLOCKLENGTHS,
                   ARRAY_OF_DISPLACEMENTS, OLDTYPE,
                   NEWTYPE, IERROR )
INTEGER COUNT, ARRAY_OF_BLOCKLENGTHS(*),
        ARRAY_OF_DISPLACEMENTS(*),OLDTYPE,NEWTYPE,IERROR
```

这2个函数的参数是一样的，只是ARRAY_OF_DISPLACEMENTS在HINDEX中是按照字节数为单位的。




Back
Close

STRUCT数据类型

MPI_TYPE_STRUCT

C

```
int MPI_Type_struct(int count,int *array_of_blocklengths,
                    int *array_of_displacements,
                    MPI_Datatype *array_of_types,
                    MPI_Datatype *newtype)
```

Fortran

```
MPI_TYPE_STRUCT( COUNT, ARRAY_OF_BLOCKLENGTHS,
                 ARRAY_OF_DISPLACEMENTS,
                 ARRAY_OF_TYPES, NEWTYPE, IERROR )
INTEGER COUNT, ARRAY_OF_BLOCKLENGTHS(*),
        ARRAY_OF_DISPLACEMENTS(*),
        ARRAY_OF_TYPES(*), NEWTYPE, IERROR
```

在自定义数据类型中，MPI_TYPE_STRUCT是一个万能函数，其它几个函数都可以通过MPI_TYPE_STRUCT 来产生。比如，

ARRAY_OF_BLOCKLENGTHS(i) =BLOCKLENGTH

ARRAY_OF_DISPLACEMENTS(i) =i*STRIDE*SIZEOF(OLDTYPE)

ARRAY_OF_TYPES(i) =OLDTYPE

则由MPI_TYPE_STRUCT构造的数据类型与MPI_TYPE_VECTOR是相同的。

Back

Close

特殊数据类型与绝对原点

为丰富自定义数据类型的使用，MPI提供了MPI_LB和MPI_UB2个数据类型，同时也提供了一个绝对原点MPI_BOTTOM，以下用具体实例进行说明。在自定义数据类型中，矩阵应用是最广泛的，比如我们希望传输下面的红色矩阵块，其中矩阵元素是实型的

$$A = \begin{pmatrix} a_{00} & a_{01} & a_{02} & a_{03} & a_{04} & a_{05} & a_{06} \\ a_{10} & a_{11} & a_{12} & a_{13} & a_{14} & a_{15} & a_{16} \\ a_{20} & a_{21} & a_{22} & a_{23} & a_{24} & a_{25} & a_{26} \\ a_{30} & a_{31} & a_{32} & a_{33} & a_{34} & a_{35} & a_{36} \\ a_{40} & a_{41} & a_{42} & a_{43} & a_{44} & a_{45} & a_{46} \end{pmatrix}$$

我们可以用MPI_Type_vector定义一个由红色元素组成的小块矩阵的

数据类型submat，具体为：

```
MPI_Type_vector( 2, 3, 7, MPI_FLOAT, &submat )
```

如果在进程0和进程1中都是这样定义的矩阵数据类型，则可以将进程0中红色小块数据发送给进程1，即在进程0中有：

```
MPI_Send( A, 1, submat, 1, 3, comm )
```

进程1中相应有：

```
MPI_Recv( A, 1, submat, 0, 3, comm, &st )
```

假如发送的不是1块，而是2块，那么送出去的是哪些数据？

$$\begin{pmatrix} a_{00} & a_{01} & a_{02} & a_{03} & a_{04} & a_{05} & a_{06} \\ a_{10} & a_{11} & a_{12} & a_{13} & a_{14} & a_{15} & a_{16} \\ a_{20} & a_{21} & a_{22} & a_{23} & a_{24} & a_{25} & a_{26} \\ a_{30} & a_{31} & a_{32} & a_{33} & a_{34} & a_{35} & a_{36} \\ a_{40} & a_{41} & a_{42} & a_{43} & a_{44} & a_{45} & a_{46} \end{pmatrix}$$

为什么会是如此，这是因为数据类型submat的延伸尺寸（extent）为40，下一个数据块就是从这里开始的。那如果我们希望传送的是对角块矩阵，就是下面的红兰块，怎么处理？

$$\begin{pmatrix} a_{00} & a_{01} & a_{02} & a_{03} & a_{04} & a_{05} & a_{06} \\ a_{10} & a_{11} & a_{12} & a_{13} & a_{14} & a_{15} & a_{16} \\ a_{20} & a_{21} & a_{22} & a_{23} & a_{24} & a_{25} & a_{26} \\ a_{30} & a_{31} & a_{32} & a_{33} & a_{34} & a_{35} & a_{36} \\ a_{40} & a_{41} & a_{42} & a_{43} & a_{44} & a_{45} & a_{46} \end{pmatrix} \tag{7.6}$$

其实也容易理解，只需要把submat的延伸尺寸放到这里的a_{23}之前即可。正是因为有这样的需求，MPI 提供了二个0字节的数据类型，一个是MPI_LB，另一个是MPI_UB，此即为我们所称之的特殊数据类型。使用这二个数据类型构造的新类型不增加数据的真实尺寸，只是起到改变延伸尺寸的作用。




对于前述(7.6)的二块数据，我们可以对submat进行改造，从而用

```
MPI_Send( A, 2, submat2, 1, 3, comm )
```

实现传送所需数据的目的。如何能够做到?就是用数据类型MPI_UB和submat一起构成一个新的数据类型submat2，其中submat的位移是0，MPI_UB的位移是$(2 \times 7 + 3) \times \text{sizeof(float)}$。如此构造的数据类型submat2在传送1块数据时，与数据类型submat是一致的。

在MPI_Address中返回的地址是相对于MPI_BOTTOM，如果数据类型定义中不使用相对位移，则可以使用MPI_BOTTOM作为发送和接收数据的首地址，此即为MPI_BOTTOM的作用。

MPI的数据打包与拆包

MPI_PACK

C	int MPI_Pack(void* inbuf,int incount,MPI_Datatype datatype, void* outbuf, int outsize, int *position, MPI_Comm comm)
Fortran	MPI_PACK(INBUF, INCOUNT, DATATYPE, OUTBUF, OUTSIZE, POSITION, COMM, IERROR) <type> INBUF(*), OUTBUF(*) INTEGER INCOUNT, DATATYPE, OUTSIZE, POSITION, COMM, IERROR

MPI_UNPACK

C
```
int MPI_Unpack( void* inbuf, int insize, int *position,
                void* outbuf, int outcount,
                MPI_Datatype datatype, MPI_Comm comm )
```

Fortran
```
MPI_UNPACK( INBUF, INSIZE, POSITION, OUTBUF, OUTCOUNT,
            DATATYPE, COMM, IERROR )
<type> INBUF(*), OUTBUF(*)
INTEGER INSIZE, POSITION, OUTCOUNT, DATATYPE, COMM, IERROR
```

MPI_PACK_SIZE

C
```
int MPI_Pack_size( int incount, MPI_Datatype datatype,
                   MPI_Comm comm, int *size )
```

Fortran
```
MPI_PACK_SIZE( INCOUNT, DATATYPE, COMM, SIZE, IERROR )
INTEGER INCOUNT, DATATYPE, COMM, SIZE, IERROR
```




Back
Close

MPI聚合通信

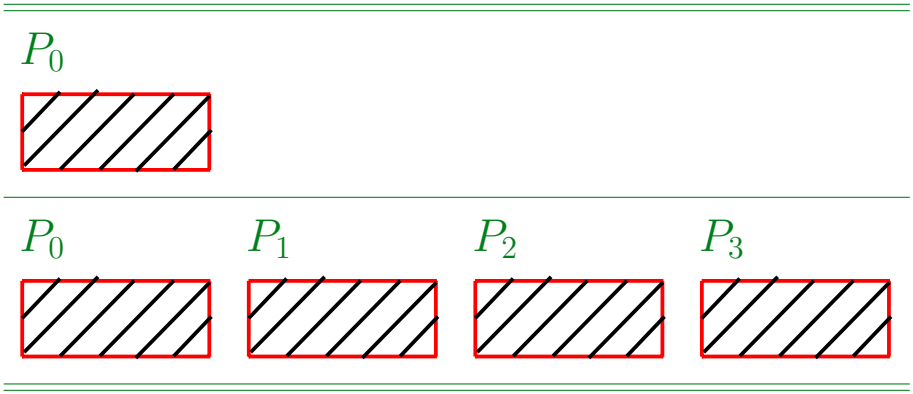
这部分包括MPI_Barrier，MPI_Bcast，MPI_Gather，MPI_Scatter，MPI_Alltoall

障碍同步MPI_Barrier

MPI_BARRIER	
C	`int MPI_Barrier( MPI_Comm comm )`
Fortran	`MPI_BARRIER( COMM, IERROR )` `INTEGER COMM, IERROR`




广播MPI_Bcast



MPI_BCAST

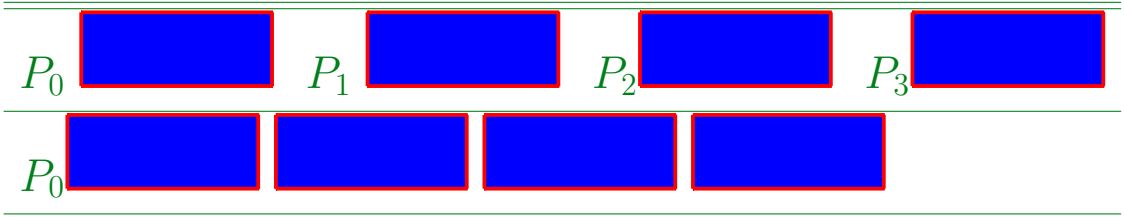
C	`int MPI_Bcast(void* buffer,int count,MPI_Datatype datatype, int root, MPI_Comm comm )`

Fortran	`MPI_BCAST( BUFFER, COUNT, DATATYPE, ROOT, COMM, IERROR )`
	`<type> BUFFER(*)`
	`INTEGER COUNT, DATATYPE, ROOT, COMM, IERROR`




Back
Close

收集MPI_Gather



MPI_GATHER

C

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

Fortran

```
MPI_GATHER( SENDBUF, SENDCOUNT, SENDTYPE, RECVBUF,
            RECVCOUNT, RECVTYPE, ROOT, COMM, IERROR )
<type> SENDBUF(*), RECVBUF(*)
INTEGER SENDCOUNT, SENDTYPE, RECVCOUNT, RECVTYPE, ROOT,
        COMM, IERROR
```




Back
Close

MPI_ALLGATHER

C

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

Fortran

```
MPI_ALLGATHER( SENDBUF, SENDCOUNT, SENDTYPE, RECVBUF,
               RECVCOUNT, RECVTYPE, COMM, IERROR)
<type> SENDBUF(*), RECVBUF(*)
INTEGER SENDCOUNT, SENDTYPE, RECVCOUNT, RECVTYPE,
        COMM, IERROR
```

Back

Close

收集MPI_Gatherv

MPI_GATHERV

C	`int MPI_Gatherv( void* sendbuf, int sendcount, MPI_Datatype sendtype, void* recvbuf, int *recvcounts, int *displs, MPI_Datatype recvtype, int root, MPI_Comm comm )`

Fortran	`MPI_GATHERV( SENDBUF, SENDCOUNT, SENDTYPE, RECVBUF, RECVCOUNTS, DISPLS, RECVTYPE, ROOT, COMM, IERROR )`
	`<type> SENDBUF(*), RECVBUF(*)`
	`INTEGER SENDCOUNT, SENDTYPE, RECVCOUNTS(*), DISPLS(*), RECVTYPE, ROOT, COMM, IERROR`

Back

Close

MPI_ALLGATHERV

C

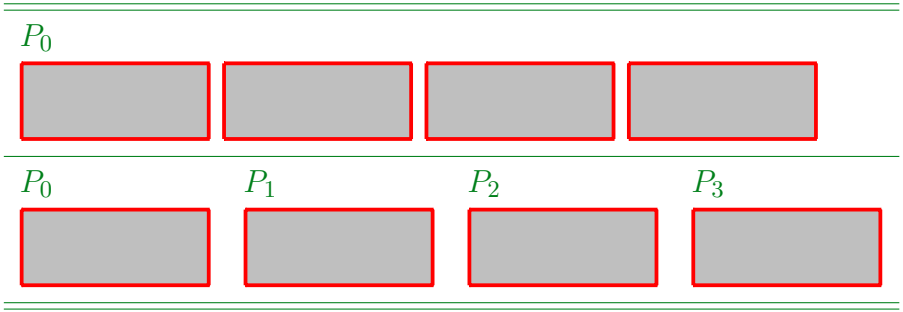
```
int MPI_Allgatherv( void* sendbuf, int sendcount,
                    MPI_Datatype sendtype, void* recvbuf,
                    int *recvcounts, int *displs,
                    MPI_Datatype recvtype, MPI_Comm comm)
```

Fortran

```
MPI_ALLGATHERV( SENDBUF, SENDCOUNT, SENDTYPE, RECVBUF,
                RECVCOUNTS, DISPLS, RECVTYPE,COMM,IERROR)

<type> SENDBUF(*), RECVBUF(*)
INTEGER SENDCOUNT, SENDTYPE, RECVCOUNTS(*), DISPLS(*),
        RECVTYPE, COMM, IERROR
```

散播MPI_Scatter



MPI_SCATTER

C

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

Fortran

```
MPI_SCATTER(SENDBUF, SENDCOUNT, SENDTYPE,
            RECVBUF, RECVCOUNT, RECVTYPE, ROOT,
            COMM, IERROR )
<type> SENDBUF(*), RECVBUF(*)
INTEGER SENDCOUNT, SENDTYPE, RECVCOUNT,
        RECVTYPE, ROOT, COMM, IERROR
```



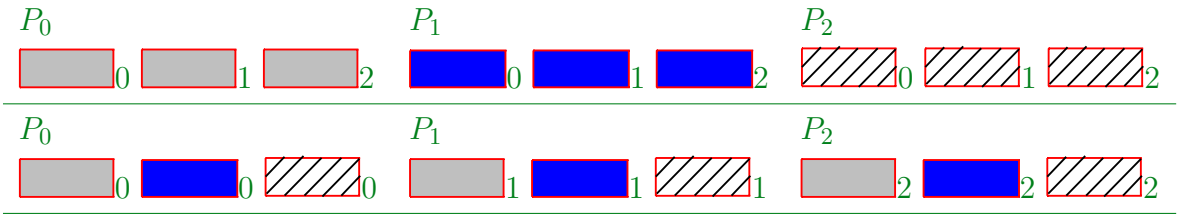

Back
Close

MPI_SCATTERV

C
```
int MPI_Scatterv(void* sendbuf, int *sendcounts,
                 int *displs, MPI_Datatype sendtype,
                 void* recvbuf, int recvcount,
                 MPI_Datatype recvtype, int root,
                 MPI_Comm comm )
```

Fortran
```
MPI_SCATTERV(SENDBUF, SENDCOUNTS, DISPLS, SENDTYPE,
             RECVBUF, RECVCOUNT, RECVTYPE, ROOT,
             COMM, IERROR )
<type> SENDBUF(*), RECVBUF(*)
INTEGER SENDCOUNTS(*), DISPLS(*), SENDTYPE, RECVCOUNT,
        RECVTYPE, ROOT, COMM, IERROR
```

全交換MPI_Alltoall



MPI_ALLTOALL

C

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

Fortran

```
MPI_ALLTOALL(SENDBUF, SENDCOUNT, SENDTYPE,
             RECVBUF, RECVCOUNT, RECVTYPE,
             COMM, IERROR )
<type> SENDBUF(*), RECVBUF(*)
INTEGER SENDCOUNT, SENDTYPE, RECVCOUNT,
        RECVTYPE, COMM, IERROR
```

MPI_ALLTOALLV

C

```
int MPI_Alltoallv(void* sendbuf, int *sendcounts,
                  int *sdispls, MPI_Datatype sendtype,
                  void* recvbuf, int *recvcounts,
                  int *rdispls, MPI_Datatype recvtype,
                  MPI_Comm comm )
```

Fortran

```
MPI_ALLTOALLV(SENDBUF, SENDCOUNTS, SDISPLS, SENDTYPE,
              RECVBUF, RECVCOUNTS, RDISPLS, RECVTYPE,
              COMM, IERROR )
<type> SENDBUF(*), RECVBUF(*)
INTEGER SENDCOUNTS(*), SDISPLS(*), SENDTYPE,RECVCOUNTS(*),
        RDISPLS(*), RECVTYPE, COMM, IERROR
```

算法 11 *all2all*

1. 假设有p个进程, 第i个进程上的数据划分为: $A_{i0}\ \ A_{i1}\ \cdots\ A_{i,p-1}$, 最后第i个进程上的结果是: $A_{0i}\ \ A_{1i}\ \cdots\ A_{p-1,i}$;
2. 记$f = iam$, $n = iam$, $B_f = A_f$;

3. $n = (n+1) \mod p$，$f = (f+p-1) \mod p$，发送A_n给进程n，从f进程接收$B_f = A_f$

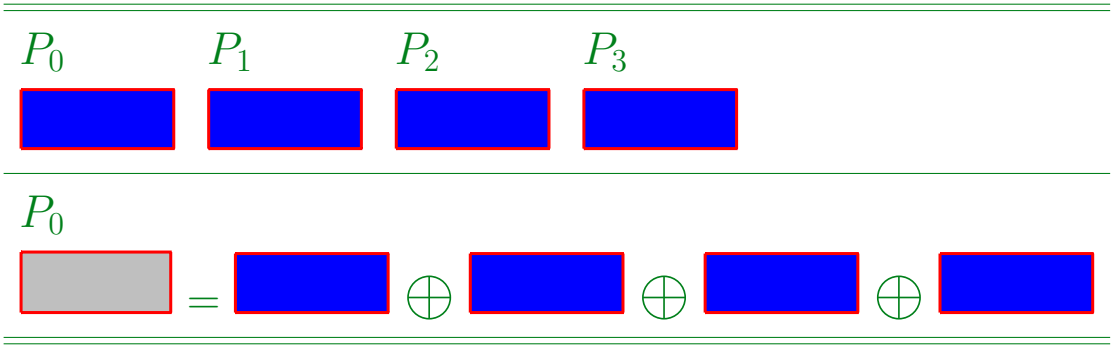



Back
Close

MPI归约操作

主要函数有：MPI_Reduce，MPI_Scan，MPI_Reduce_scatter

归约MPI_Reduce



MPI_REDUCE

C

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

Fortran

```
MPI_REDUCE( SENDBUF, RECVBUF, COUNT, DATATYPE,
            OP, ROOT, COMM, IERROR )
<type> SENDBUF(*), RECVBUF(*)
INTEGER COUNT, DATATYPE, OP, ROOT, COMM, IERROR
```

MPI_ALLREDUCE

C

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

Fortran

```
MPI_ALLREDUCE( SENDBUF, RECVBUF, COUNT, DATATYPE,
               OP, COMM, IERROR )
<type> SENDBUF(*), RECVBUF(*)
INTEGER COUNT, DATATYPE, OP, COMM, IERROR
```

Back

Close

运算种类与可用数据类型

操作名	意义	操作名	意义
MPI_MAX	求最大	MPI_LOR	逻辑或
MPI_MIN	求最小	MPI_BOR	按位或
MPI_SUM	求和	MPI_LXOR	逻辑与或
MPI_PROD	求积	MPI_BXOR	按位与或
MPI_LAND	逻辑与	MPI_MAXLOC	求最大和位置
MPI_BAND	按位与	MPI_MINLOC	求最小和位置

常用的运算是MPI_MAX、MPI_MIN和MPI_SUM，有时也可能用到MPI_MAXLOC和MPI_MINLOC。

操作名	允许的数据类型
MPI_MAX, MPI_MIN	integer, Floating point
MPI_SUM, MPI_PROD	integer, Floating point, Complex
MPI_LAND, MPI_LOR, MPI_LXOR	C integer, Logical
MPI_BAND, MPI_BOR, MPI_BXOR	integer, Byte

复合数据类型

对于MPI_MAXLOC和MPI_MINLOC两种运算，MPI对Fortran程序和C程序使用的复合数据类型规定如下：



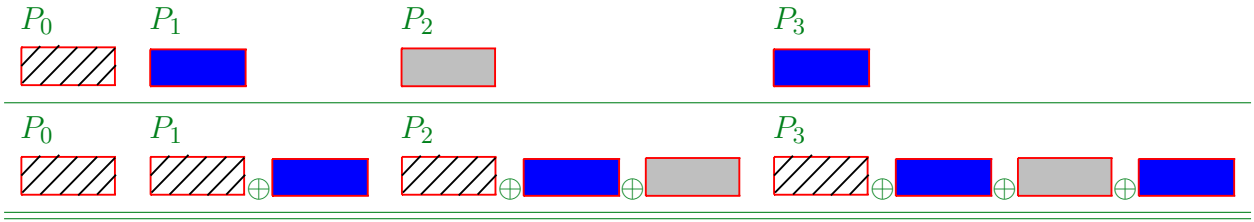

Fortran 程序

复合数据类型	类型描述
MPI_2REAL	pair of REALs
MPI_2DOUBLE_PRECISION	pair of DOUBLE PRECISIONs
MPI_2INTEGER	pair of INTEGERs

C 程序

复合数据类型	类型描述
MPI_FLOAT_INT	float and int
MPI_DOUBLE_INT	double and int
MPI_LONG_INT	long and int
MPI_SHORT_INT	short and int
MPI_LONG_DOUBLE_INT	long double and int
MPI_2INT	pair of ints

前缀MPI_Scan

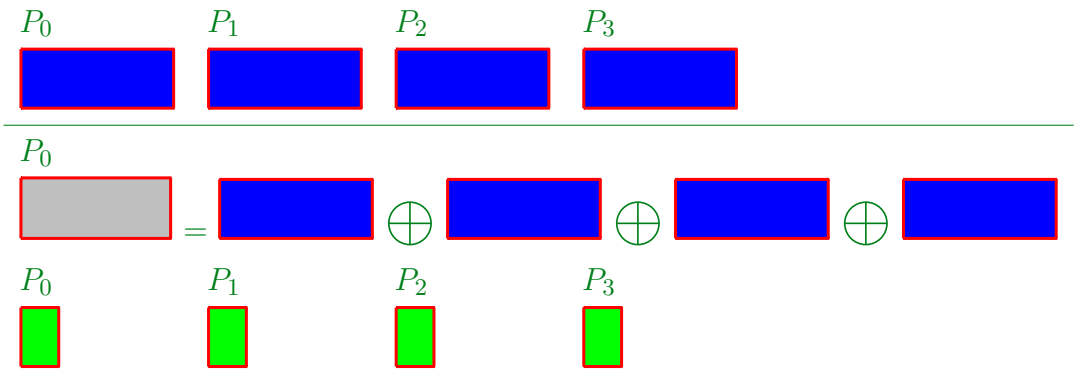


MPI_SCAN

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

Fortran	`MPI_SCAN( SENDBUF, RECVBUF, COUNT, DATATYPE, OP, COMM, IERROR )`
	`<type> SENDBUF(*), RECVBUF(*)`
	`INTEGER COUNT(*), DATATYPE, OP, COMM, IERROR`

归约散播MPI_Reduce_scatter



MPI_REDUCE_SCATTER

C

```
int MPI_Reduce_scatter(void* sendbuf, void* recvbuf,
                       int *recvcounts,
                       MPI_Datatype datatype, MPI_Op op,
                       MPI_Comm comm )
```

Fortran

```
MPI_REDUCE_SCATTER( SENDBUF, RECVBUF, RECVCOUNTS, DATATYPE,
                    OP, COMM, IERROR )
<type> SENDBUF(*), RECVBUF(*)
INTEGER RECVCOUNTS(*), DATATYPE, OP, COMM, IERROR
```

自定义运算

对于归约操作函数中的运算，用户根据自己的需要，可以自行定义满足要求的算子。为达到此目的，需要借助以下的一些函数来完成。

MPI_OP_CREATE

C	`int MPI_Op_create( MPI_User_fuction *function, int commute, MPI_Op *op )`

Fortran	`MPI_OP_CREATE( FUNCTION, COMMUTE, OP, IERROR )`
	`EXTERNAL FUNCTION`
	`LOGICAL COMMUTE`
	`INTEGER OP, IERROR`

MPI_OP_FREE

C	`int MPI_Op_free( MPI_Op *op )`
Fortran	`MPI_OP_FREE( OP, IERROR )` `INTEGER OP, IERROR`

用户自定义函数是有严格要求的，具有如下形式：

使用C语言时，用户自定义函数为：

```
typedef void MPI_User_function( void *invec, void *inoutvec,
                    int *len, MPI_Datatype *datatype);
```

使用FORTRAN语言时，其函数定义为：

```
FUNCTION USER_FUNCTION( INVEC(*), INOUTVEC(*), LEN, TYPE)
```

MPI组操作

进程组的创建

MPI_COMM_GROUP

C	`int MPI_Comm_group( MPI_Comm comm, MPI_Group *group )`
Fortran	`MPI_COMM_GROUP( COMM, GROUP, IERROR )` `INTEGER COMM, GROUP, IERROR`

MPI_GROUP_UNION

C	`int MPI_Group_union( MPI_Group group1, MPI_Group group2, MPI_Group *group )`
Fortran	`MPI_GROUP_UNION( GROUP1, GROUP2, GROUP, IERROR )` `INTEGER GROUP1, GROUP2, GROUP, IERROR`




Back
Close

MPI_GROUP_INTERSECTION

C	`int MPI_Group_intersection( MPI_Group group1, MPI_Group group2, MPI_Group *group )`
Fortran	`MPI_GROUP_INTERSECTION( GROUP1, GROUP2, GROUP, IERROR )` `INTEGER GROUP1, GROUP2, GROUP, IERROR`

MPI_GROUP_DIFFERENCE

C	`int MPI_Group_difference( MPI_Group group1, MPI_Group group2, MPI_Group *group )`
Fortran	`MPI_GROUP_DIFFERENCE( GROUP1, GROUP2, GROUP, IERROR )` `INTEGER GROUP1, GROUP2, GROUP, IERROR`

MPI_GROUP_INCL

C	`int MPI_Group_incl( MPI_Group group1, int n, int *ranks, MPI_Group *group )`
Fortran	`MPI_GROUP_INCL( GROUP1, N, RANKS, GROUP, IERROR )` `INTEGER GROUP1, N, RANKS(*), GROUP, IERROR`




Back

Close

MPI_GROUP_EXCL

C	`int MPI_Group_excl( MPI_Group group1, int n, int *ranks, MPI_Group *group )`
Fortran	`MPI_GROUP_EXCL( GROUP1, N, RANKS, GROUP, IERROR )` `INTEGER GROUP1, N, RANKS(*), GROUP, IERROR`

MPI_GROUP_RANGE_INCL

C	`int MPI_Group_range_incl( MPI_Group group1, int n, int ranges[][3], MPI_Group *group )`
Fortran	`MPI_GROUP_RANGE_INCL( GROUP1, N, RANGES, GROUP, IERROR )` `INTEGER GROUP1, N, RANGES(3, *), GROUP, IERROR`

MPI_GROUP_RANGE_EXCL

C	`int MPI_Group_range_excl( MPI_Group group1, int n, int ranges[][3], MPI_Group *group )`
Fortran	`MPI_GROUP_RANGE_EXCL( GROUP1, N, RANGES, GROUP, IERROR )` `INTEGER GROUP1, N, RANGES(3, *), GROUP, IERROR`

Back

Close

MPI_GROUP_SIZE

C	`int MPI_Group_size( MPI_Group group, int *size )`
Fortran	`MPI_GROUP_SIZE( GROUP, SIZE, IERROR )` `INTEGER GROUP, SIZE, IERROR`

MPI_GROUP_RANK

C	`int MPI_Group_rank( MPI_Group group, int *rank )`
Fortran	`MPI_GROUP_RANK( GROUP, RANK, IERROR )` `INTEGER GROUP, RANK, IERROR`

MPI_GROUP_TRANSLATE_RANKS

C	`int MPI_Group_translate_ranks( MPI_Group group1, int n, int *ranks1, MPI_Group group2, int *ranks2 )`
Fortran	`MPI_GROUP_TRANSLATE_RANKS( GROUP1, N, RANKS1, GROUP2, RANKS2, IERROR )` `INTEGER GROUP1, N, RANKS1(*), GROUP2, RANKS2(*), IERROR`




Back

Close

MPI_COMM_CREATE

C	`int MPI_Comm_create( MPI_Comm comm, MPI_Group group, MPI_comm *newcomm )`
Fortran	`MPI_COMM_CREATE( COMM, GROUP, NEWCOMM, IERROR )` `INTEGER COMM, GROUP, NEWCOMM, IERROR`

MPI_GROUP_FREE

C	`int MPI_Group_free( MPI_Group group )`
Fortran	`MPI_GROUP_FREE( GROUP, IERROR )` `INTEGER GROUP, IERROR`

MPI_GROUP_COMPARE

C	`int MPI_Group_compare( MPI_Group group1, MPI_Group group2, int *result )`
Fortran	`MPI_GROUP_COMPARE( GROUP1, GROUP2, RESULT, IERROR )` `INTEGER GROUP1, GROUP2, RESULT, IERROR`

RESULT的值为：MPI_IDENT，MPI_SIMILAR，MPI_UNEQUAL。




Back
Close

习题

1. 用MPI_SEND和MPI_RECV实现MPI_ALLTOALL的并行数据传输方法与程序；
2. 假设分块下三角矩阵的对角块矩阵都是$m \times m$阶的下三角矩阵，构造一个下三角矩阵的数据类型，使得这个数据类型可以用于传送这个矩阵的连续多个对角块矩阵。




Back
Close

八、 并行程序实例

8.1、π值近似计算程序

8.2、数据广播并行程序

8.3、数据分散并行程序

π值近似计算程序

例子 8 π**值近似计算:**

由三角函数和定积分公式可知:

$$\frac{\pi}{4} = \arctan(1) = \int_0^1 \frac{1}{1+x^2} dx \tag{8.1}$$

假设将区间$[0,\ 1]$**分成**n**等份，记**$h = 1/n$**,** $x_i = ih$**,** $i = 0, 1, \ldots, n$**，则采用梯形积分公式计算积分(8.1)如下:**

$$\int_0^1 \frac{1}{1+x^2} dx = \sum_{i=0}^{n-1} \left[\frac{h}{2} \left(\frac{1}{1+x_i^2} + \frac{1}{1+x_{i+1}^2} \right) - \frac{h^3}{12} \left(\frac{1}{1+\xi_i^2} \right)'' \right] \tag{8.2}$$

Back
Close

对于给定的精度ε，可以确定一个$N = \lceil\sqrt{4/3\varepsilon}\rceil$，使得当$n \geq N$时，有：

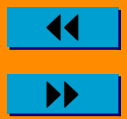
$$|\int_0^1 \frac{4}{1+x^2}dx - \sum_{i=0}^{n-1}\left[\frac{h}{2}(\frac{4}{1+x_i^2}+\frac{4}{1+x_{i+1}^2})\right]| < \varepsilon \tag{8.3}$$

可以将

$$\sum_{i=0}^{n-1}\left[\frac{h}{2}(\frac{4}{1+x_i^2}+\frac{4}{1+x_{i+1}^2})\right] \tag{8.4}$$

作为计算π的近似值。

```
      program computing_pi
*The header file for using MPI parallel environment,
* which must be included for all mpi programs.
      include 'mpif.h'
```



Back
Close

```
*Variables declaration
      integer iam, np, comm, ierr
      integer n, i, num, is, ie
      real*8 pi, h, eps, xi, s

*Enroll in MPI environment and get the MPI parameters
      call mpi_init(ierr)
      call mpi_comm_dup(mpi_comm_world, comm, ierr)
      call mpi_comm_rank(comm, iam, ierr)
      call mpi_comm_size(comm, np, ierr)

*Read the number of digits you want for value of Pi.
      if(iam .eq. 0) then
```




Back
Close

```
      write(*, *) 'Number of digits(1-16)= '
      read(*, *) num
    endif
    call mpi_bcast(num,1,mpi_integer,0,comm,ierr)

    eps = 1
    do 10 i=1, num
      eps = eps * 0.1
10  continue

    n = sqrt(4.0/(3.0*eps))
    h = 1.0/n
    num = n/np
```

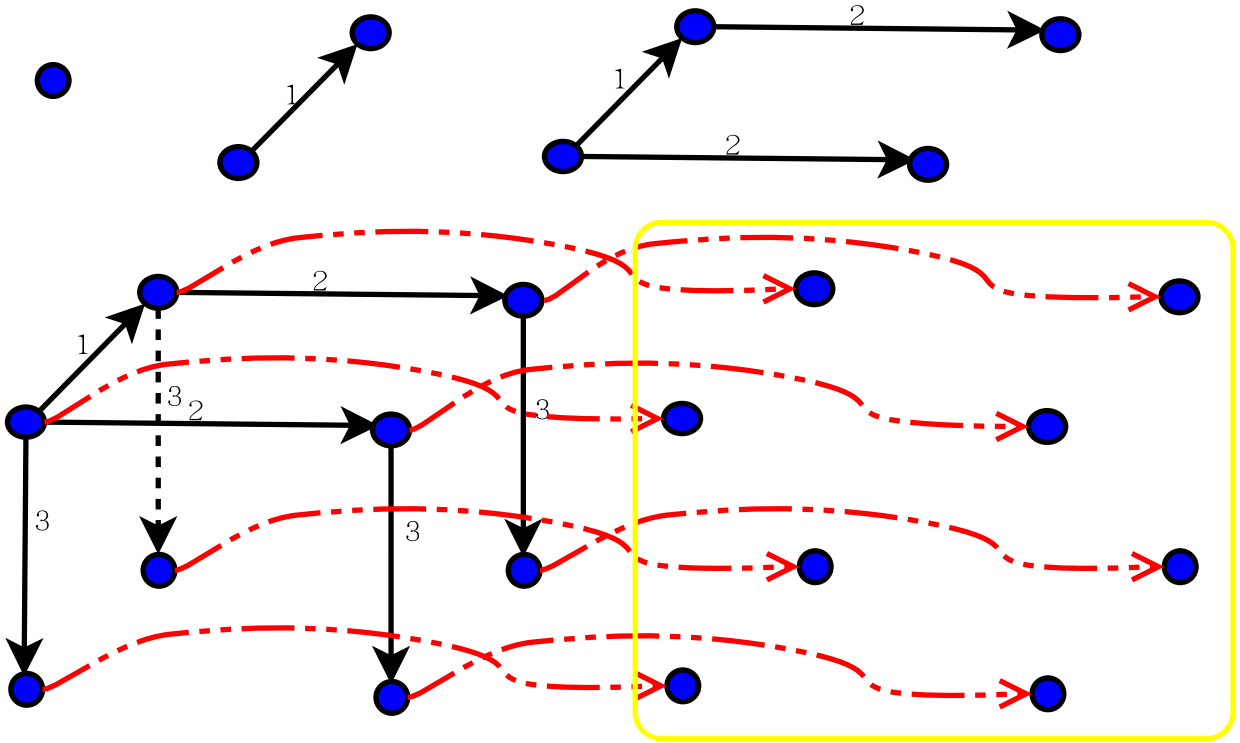
```
if(iam .eq. 0) then
  s = 3.0
  xi = 0
  is = 0
  ie = num
elseif(iam .eq. np-1) then
  s = 0.0
  is = iam*num
  ie = n - 1
  xi = is * h
else
  s = 0.0
  is = iam*num
```

```
        ie = is + num
        xi = is * h
      endif

      if(np .eq. 1) ie = ie - 1
      do 20 i=is+1, ie
        xi = xi + h
        s = s + 4.0/(1.0+xi*xi)
20    continue
      call mpi_reduce(s, pi, 1, mpi_double_precision,
     &                mpi_sum, 0, comm, ierr)
      if(iam .eq. 0) then
        pi = h*pi
```

```
        write(*, 99) pi
      endif
      call mpi_finalize(ierr)
99    format('The pi= ', f16.13)
      end
```

数据广播并行程序



例子 9 数据广播

在使用q个处理机的系统上，对数据进行广播，则其MPI程序如何实现？

```
      subroutine mpibcastr( b, n, root, comm, iam, np )
      include 'mpif.h'
      integer n, root, comm, iam, np
      real b(*)
      integer ierr, newid, i, des, src, left,
     &        status(mpi_status_size), mlen, iter

      newid = mod( np+iam-root, np )
      iter = alog(real(np))/alog(2.0)+1.0e-16
      mlen = 1
```




```
      do 20 i=1, iter
        des = mod( iam + mlen, np )
        src = mod( np + iam - mlen, np )
        if( newid .lt. mlen) then
          call mpi_send( b, n, mpi_real, des, 1, comm,
     &                   ierr )
        elseif( newid .lt. 2*mlen ) then
          call mpi_recv( b, n, mpi_real, src, 1, comm,
     &                   status, ierr )
        endif
        mlen = 2*mlen
20    continue
      left = np - mlen
```

```
 if ( left .le. 0 ) return
 des = mod( iam + mlen, np )
 src = mod( np + iam - mlen, np )
 if( newid .lt. left) then
   call mpi_send( b, n, mpi_real, des, 1, comm,
&                 ierr )
 elseif( newid .ge. mlen .and.
&        newid .lt. mlen+left ) then
   call mpi_recv( b, n, mpi_real, src, 1, comm,
&                 status, ierr )
 endif

 return
```

```
end
```

数据分散并行程序

例子 10 数据分散

这里我们考虑如何实现MPI_Scatter，类似于8.2节关于广播函数的实现，在此也可以看出MPI_Comm_dup以及MPI_Comm_split的作用。

```
void scatter( comm, blk, a )
MPI_Comm comm; int blk; float *a;
{
  int iam, np;
  MPI_Comm tcom, scom;
  MPI_Status st;
```





```
int len, color, key;

MPI_Comm_size( comm, &np );
MPI_Comm_rank( comm, &iam );
MPI_Comm_dup( comm, &tcom );

while ( np > 1 ) {
  len = np / 2;
  if( iam == 0 ) MPI_Send( &a[len*blk], \
    (np-len)*blk, MPI_FLOAT, len, 1, tcom );
  if( iam == len ) MPI_Recv( &a[0], \
    (np-len)*blk, MPI_FLOAT, 0, 1, tcom, &st );
  if ( iam < len ) color = 0;
```

```
    else color = 1;
    key = iam;
    MPI_Comm_split( tcom, color, key, &scom );

    MPI_Comm_dup( scom, &tcom );
    MPI_Comm_size( tcom, &np );
    MPI_Comm_rank( tcom, &iam );
  }
  MPI_Comm_free( &tcom );
  MPI_Comm_free( &scom );

  return;
}
```

参考文献

[1] 张林波、迟学斌、莫则尧、李若，≪并行计算导论≫，清华大学出版社，2006

[2] 陈国良，≪并行计算－－结构•算法•编程≫，高等教育出版社，2003

[3] 莫则尧、 袁国兴， ≪消息传递并行编程环境MPI≫， 科学出版社，2001

[4] 基本要求： 熟悉Fortran或C程序设计语言，了解数值计算方法