

Wstęp

Obliczenia z wykorzystaniem komputerów są nieodłączną częścią współczesnej nauki. Natomiast, podstawą obliczeń komputerowych są obliczenia równoległe. Gdy korzystamy z 1 komputera, nawet bardzo mocnego, jesteśmy ograniczeni do około 32 procesorów (obecnie) i kilkuset Gb pamięci RAM. Co więcej, czas obliczeń spada (przynajmniej tego byśmy sobie życzyli) jak $1/(\text{liczba procesorów})$. Dlatego z reguły potrzebujemy i chcemy wykorzystać ich jak najwięcej.

Obliczenia równoległe

Każdy program przygotowany do pracy równoległej oprócz podstawowego algorytmu, potrzebuje mechanizmu komunikacji. W naszym przypadku będzie to standard MPI czyli Message Passing Interface. Biblioteka OpenMPI dostarcza nam narzędzi niezbędnych do uruchamiania i komunikacji między poszczególnymi procesami składającymi się na nasz “program”.

Ćwiczenie 1

Przygotuj plik `program.cpp` o poniższej treści. Następnie skompiluj go za pomocą programu `mpic++`:

```
#include <stdio.h>
#include <mpi.h>
#include <unistd.h>

int main(int argc, char *argv[]) {
    int numprocs, rank, namelen;
    char processor_name[MPI_MAX_PROCESSOR_NAME];
    MPI_Init(&argc, &argv);
    MPI_Comm_size(MPI_COMM_WORLD, &numprocs);
    MPI_Comm_rank(MPI_COMM_WORLD, &rank);
    MPI_Get_processor_name(processor_name, &namelen);
    printf("Hello World! from process %d out of %d on %s\n",
           rank, numprocs, processor_name);
    MPI_Finalize();
}
```

Powyższy program można skompilować i uruchomić używając komend:

```
mpic++ -o program program.cpp
mpirun -np 4 program
```

gdzie 4 to liczba procesorów, na których ma zostać uruchomiony program.

Przeanalizujemy teraz program. Funkcje `MPI_Init` i `MPI_Finalize` służą do odpowiednio inicjalizacji i zakończenia komunikacji pomiędzy procesami. Powinny one być odpowiednio na początku i na końcu programu, ponieważ tylko pomiędzy nimi można wykonać jakiekolwiek wywołanie biblioteki MPI i komunikować się z innymi procesami w grupie. Wywołanie `MPI_Comm_size` zwróci nam liczbę procesów (np. 4), zaś `MPI_Comm_rank` zwróci nam numer *naszego* procesu (np. 0,1,2 lub 3). Zmienna `rank` jest więc jedną z najważniejszych w kodzie, ponieważ odróżnia nasze procesy. Jeśli jej nigdzie nie użyjemy, to wszystkie nasze procesy zrobią dokładnie to samo.

Ćwiczenie 2

Rozszerz program tak, by każdy proces losował pewne liczby i wypisywał pewne statystyki:

1. Zaalokuj tablicę liczb rzeczywistych `a` o rozmiarze $n = 10000 * (\text{rank} + 1)$
2. Wypełnij ją liczbami losowymi z przedziału $[0, 1]$
3. Wypisz komunikat o wylosowaniu i wypisz pierwszą liczbę `a[0]`
4. Oblicz $S_1 = \sum_i a_i$
5. Wyświetl średnią: $\mu = \frac{1}{n} S_1$
6. Oblicz $S_2 = \sum_i (a_i - \mu)^2$
7. Wyświetl wariancję: $\sigma^2 = \frac{1}{n-1} S_2$

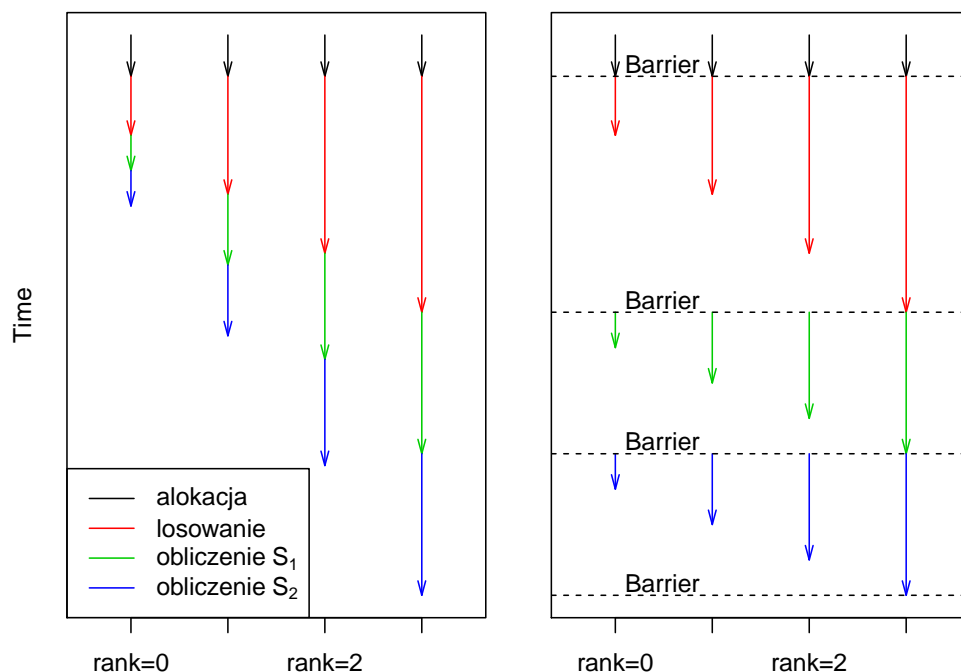
Pamiętaj aby we wszystkich komunikatach umieszczać zmienną `rank`, tak by było wiadomo, który komunikat pochodzi, od którego procesu. By mieć pewność, że komunikaty wypisywane są rzeczywiście wtedy, kiedy występują w kodzie (a nie są buforowane przez system), dodaj komendę `fflush(stdout)`; zaraz po każdym wywołaniu `printf`. Instrukcja ta powoduje, że cały buforowany tekst zostanie wyświetlony na ekran od razu.

Aktualnie, losowanie jest bardzo niedoskonałe. Wszystkie procesy wylosowały ten sam ciąg losowy (można zobaczyć to już po pierwszym elemencie, który jest identyczny we wszystkich procesach. Żeby tego uniknąć przekaż np. wartość `time(NULL)`

+ `rank` jako *ziarno* do funkcji `srand`, tak aby ciąg losowy był zainicjalizowany inną liczbą na każdym procesorze.

Ćwiczenie 3

Zaobserwuj, że różne procesy dochodzą do różnych etapów algorytmu w różnych momentach. Np. średnia dla procesu 0 może być wyznaczona przed wypełnieniem liczbami tablicy w procesie 1. Możemy wymusić aby procesy czekały na siebie nawzajem dodając instrukcję `MPI_Barrier(MPI_COMM_WORLD)`; po wywołaniach `printf/flush`. Bariera w programach wielowątkowych powoduje, że wszystkie procesy czekają w tym miejscu kodu, aż reszta procesów dojdzie do tego miejsca, a następnie wszystkie razem ruszają dalej. Zauważ, że powoduje to iż program działa tak wolno, jak jego najwolniejszy element. Przebieg programu we wszystkich procesach jest pokazany poglądowo na poniższym obrazku:



Ćwiczenie 4

Użyj funkcji wykonującej redukcję aby obliczyć średnią globalną (po wszystkich procesach) i wariancję z a . Redukcja w programowaniu równoległym polega na wykonaniu jakiejś operacji, np. sumowania czy wzięcia maximum, na danych ze wszystkich procesów. W bibliotece MPI mamy do dyspozycji funkcję:

```
MPI_Reduce(source, destination, count, datatype, operation, root,
            MPI_COMM_WORLD);
```

- `source` to **wskaźnik** do danych, które mamy np. zsumować.
- `destination` to wskaźnik do miejsca, gdzie ma być umieszczony wynik.
- `count` to liczba elementów danych do zsumowania. Czyli np. 1 jeśli dane to jedna liczba.
- `datatype` to typ danych, które sumujemy: `MPI_INT` lub `MPI_DOUBLE`.
- `operation` to operacja, którą wykonujemy, np: `MPI_SUM` lub `MPI_MAX`.
- `root` to numer procesu, do którego przesyłamy wynik, np: 0.
- Ostatni argument to uchwyt komunikatora, na którym ma zostać wykonana redukcja. W naszym wypadku to domyślny komunikator `MPI_COMM_WORLD`

Użyj tej funkcji aby obliczyć globalne statystyki, a następnie wyświetl je (pamiętaj, że mają one sens tylko na węźle `root`). Weź pod uwagę, że globalne n jest inne niż n lokalne.

Bliźniaczą do funkcji `MPI_Reduce` jest funkcja `MPI_Allreduce`. Przesyła ona wynik do wszystkich procesów, a nie tylko do procesu `root`.

```
MPI_Allreduce(source, destination, count, datatype, operation,
              MPI_COMM_WORLD);
```

Ćwiczenie *

Stwórz nowy program równoległy `program2.cpp`, który będzie obliczał powyższą średnią i wariancję, używając tylko jednej pętli, bez alokowania tablicy a (tzn., będzie liczył średnią i wariancję bez przechowywania pojedynczych elementów). By to zrobić przekształć wzór na wariancję:

$$\sigma^2 = \frac{1}{n-1} \sum_i \left(a_i - \frac{1}{n} \sum_j a_j \right)^2$$

tak aby był wyrażony za pomocą S_1 i nowego $\hat{S}_2 = \sum_i a_i^2$, który da się obliczyć bez znajomości średniej μ . Użyj we wszystkich procesach tego samego (bardzo wysokiego) n . Porównaj czas wykonania wykonując:

```
time mpirun -np 1 program2
time mpirun -np 2 program2
time mpirun -np 4 program2
```

Kolejka PBS

W przypadku każdego dużego systemu komputerowego potrzebny jest jakiś mechanizm zarządzania zasobami: 2 osoby nie mogą naraz korzystać z tego samego procesora/rdzenia. W prawdziwym systemie komputer centralny służy do zlecania zadań, pozostałe, tzw. węzły obliczeniowe, przyjmują i wykonują zadania. Na `info3` jest tylko jeden węzeł który spełnia obie role.

Ćwiczenia

Sprawdź co zrobi komenda `qsub -I` (wielka litera i). To program do wysyłania zadań do wykonania. Opcja `-I` oznacza tryb interaktywny: zostaniemy zalogowani na wolny węzeł przez ssh. Wpisz teraz `qstat`, sprawdź opcje `-n` i `-f`. Zobacz, że twoje 'zadanie' jest uruchomione w kolejce. Wyloguj się teraz, bo blokujesz zasoby kolejki. Jednocześnie mogą być wykorzystywane tylko 4 rdzenie. Ilością pobieranych zasobów można sterować poprzez flagę `-l`, np.:

```
qsub -l nodes=1:ppn=4 -I
qsub -l nodes=1:ppn=2 -l walltime=00:00:10 -I
```

Parametr `walltime=00:00:10` mówi nam o maksymalnym czasie trwania zadania. Po upływie tego czasu zadanie zostanie automatycznie przerwane.

Zadania nieinteraktywne

W większości przypadków czas trwania zadania interaktywnego jest mocno ograniczony. Bardziej użyteczne są zadania nieinteraktywne. Aby zlecić takie zadanie potrzebny jest nam plik zadania `plik.sh`:

```
#!/bin/bash
cd $PBS_O_WORKDIR
mpirun --hostfile $PBS_NODEFILE --display-map ./program
```

Zlecamy jego wykonanie przez

```
qsub plik.sh
```

Obejrzyj zawartość katalogu, znajdź pliki o rozszerzeniu `.oXX` i `.eXX`. Czym one są? Dodaj do skryptu `plik.sh` komendę `sleep 8`, która spowoduje że zadanie *zaśnie* na 8 sekund, tak by w liście wypisywanej przez `qstat` dało się je zobaczyć. Jako grupa możecie dodać wiele takich zadań i zobaczyć jak są po kolei realizowane przez kolejkę PBS.

Ćwiczenie

Spróbuj wykonać któryś z wcześniejszych skryptów konwertujących obrazki (np konwersje `.jpg` na `.gif`) jako nieinteraktywne zadanie w kolejce.