第4讲
用MPI进行分布式内存编程

张永东

Roadmap

- 编写第一个MPI程序.
- 常见的MPI函数.
- 用MPI来实现梯形积分法.
- 集合通信.
- MPI的派生数据类型.
- MPI程序的性能评估.
- 并行排序算法.
- MPI程序的安全性.

什么是MPI?

- Massage Passing Interface:是消息传递函数库的标准规范，由MPI论坛开发，支持Fortran和C。
  - 一种新的库描述，不是一种语言
  - 共有上百个函数调用接口，在Fortran和C语言中可以直接对这些函数进行调用
  - 是一种标准或规范，而不是特指某一个对它的具体实现
  - MPI是一种消息传递编程模型，并成为这种编程模型的代表和事实上的标准

为什么要使用MPI?

- 高可移植性
  - MPI已在PC机、MS Windows、Linux以及所有主要的Unix工作站上和所有主流的并行机上得到实现
  - 使用MPI作消息传递的C或Fortran并行程序可不加改变地在上述平台实现

MPI的发展过程

- 发展的三个阶段
  - 1994年5月完成1.0版：MPI-1.0,1.1,1.2,MPI-1.3
    - 支持C和Fortran77
    - 制定大部分并行功能
  - 1997年4月完成2.0版：MPI-2.0, 2.1, MPI-2.2
    - 动态进程
    - 并行I/O
    - 支持Fortran 90和C++
  - 2015年6月完成版本3.1 ： MPI-3.0, MPI-3.1
  - 目前MPI-4.0——下一版本，制定中
  - 参考https://www.mpi-forum.org/docs/
  - 下载MPICH：http://www.mpich.org/ 其中 MPICH-3.2.1支持MPI-3.1
  - 下载openMPI：https://www.open-mpi.org/ 其中Open MPI v3.1.2支持MPI-3.1

常用的MPI版本

- MPICH
  - 是MPI最流行的非专利实现,由Argonne国家实验室和密西西比州立大学联合开发,具有更好的可移植性
  - 当前最新版本有MPICH 3.2.1, 支持MPI-3.1
  - http://www.mpich.org/
- Open MPI
  - MPI标准的一个开源实现，由一些科研机构和企业一起开发和维护
  - https://www.open-mpi.org/ 其中Open MPI v3.1.2支持MPI-3.1
- LAMMPI
  - 美国Indiana 大学Open Systems 实验室实现
  - http://lammps.sandia.gov
- 更多的商业版本MPI
  - HP-MPI，MS-MPI，……
- 所有的版本遵循MPI标准，MPI程序可以不加修改的运行

消息传递并行程序设计MPI

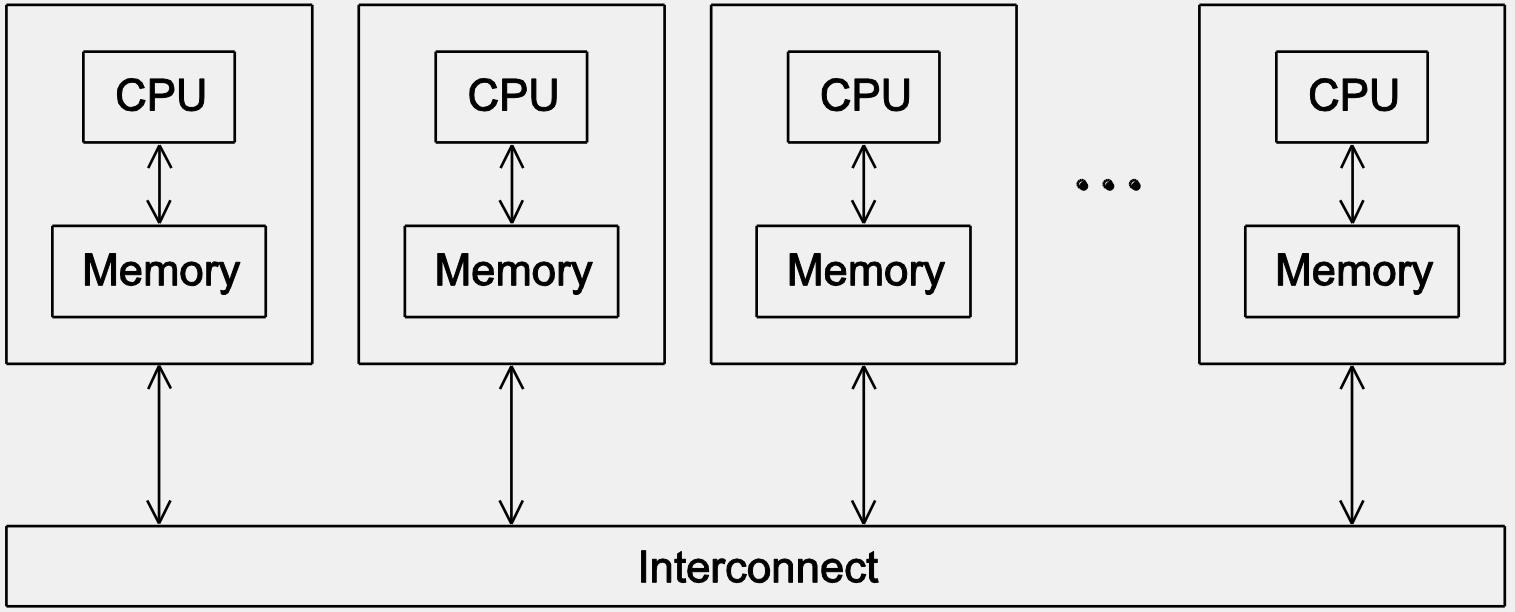
消息传递并行程序设计

- 所有并行任务由多进程协作完成
- 每个并行进程均有自己独立的地址空间，相互之间访问不能直接进行，必须通过显式的消息传递来实现
- 用户必须通过显式地发送和接收消息来实现处理机间的数据交换
- 适用于大规模并行处理机（MPP）和机群（Cluster）
- 并行计算粒度大，适合大规模可扩展并行算法
  - 消息传递程序设计要求用户很好地分解问题,组织不同进程间的数据交换,并行计算粒度大,特别适合于大规模可扩展并行算法

MPI对系统的假设

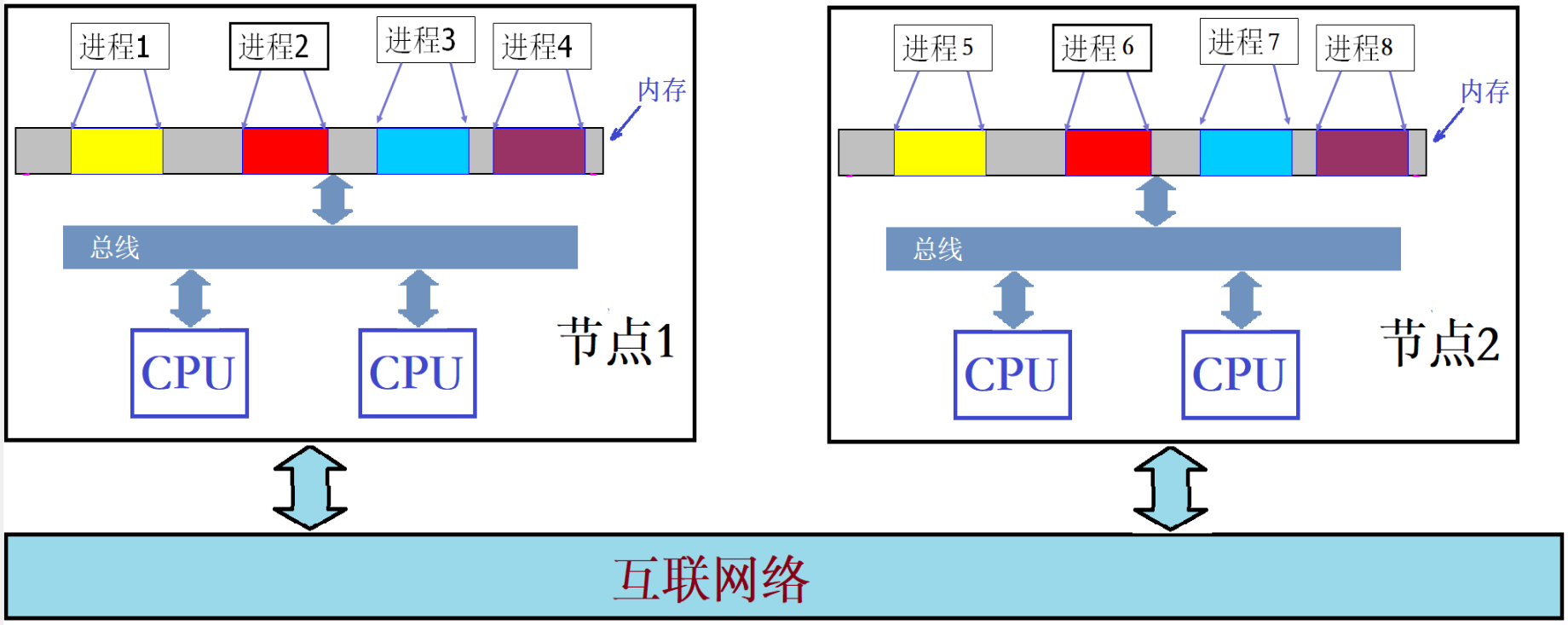
- 系统中的任何处理器之间可以通信
  - 把它们看作是全连接的
- 因此，系统中任意两个进程都可以通信
  - 也它们当做是全连接的
- 在时间复杂度分析时，除特别指出，一般不考虑进程之间通信的差异
  - 通信时间是同一个常数
    - 延迟时间和带宽是常数
- 这个假设下的系统是分布式内存系统和共享内存系统的抽象
  - 处理器是全连接的

分布式内存系统



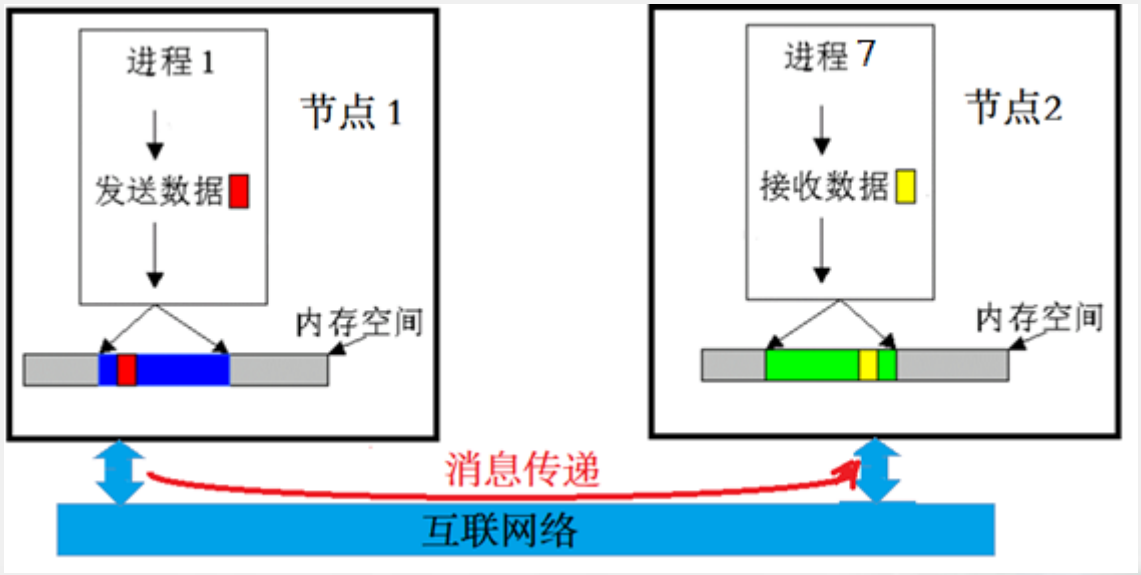
MPI适合在分布式内存系统上开发并行程序：处理器是全连接的

MPI并行程序在分布式内存系统的运行方式

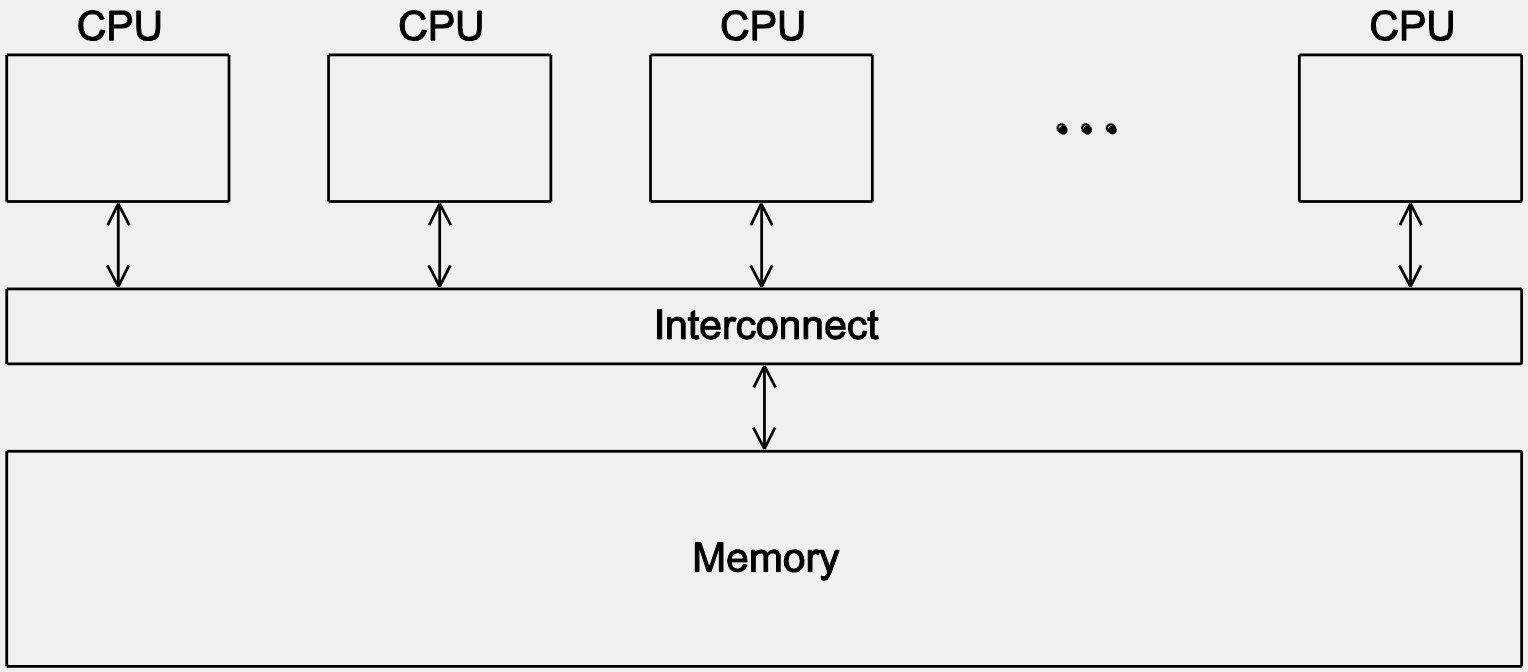


在分布式内存系统的MPI程序

- 最基本的消息传递操作：发送消息（send）、接受消息（receive）、进程同步（barrier）、规约（reduction）。
  - 消息传递的实现：通过互联网络，用户不必关心。
- 进程间可以相互交换信息：例如数据交换、同步等待，消息是这些交换信息的基本单位，消息传递是指这些信息在进程间的相互交换，是实现进程间通信的唯一方式。

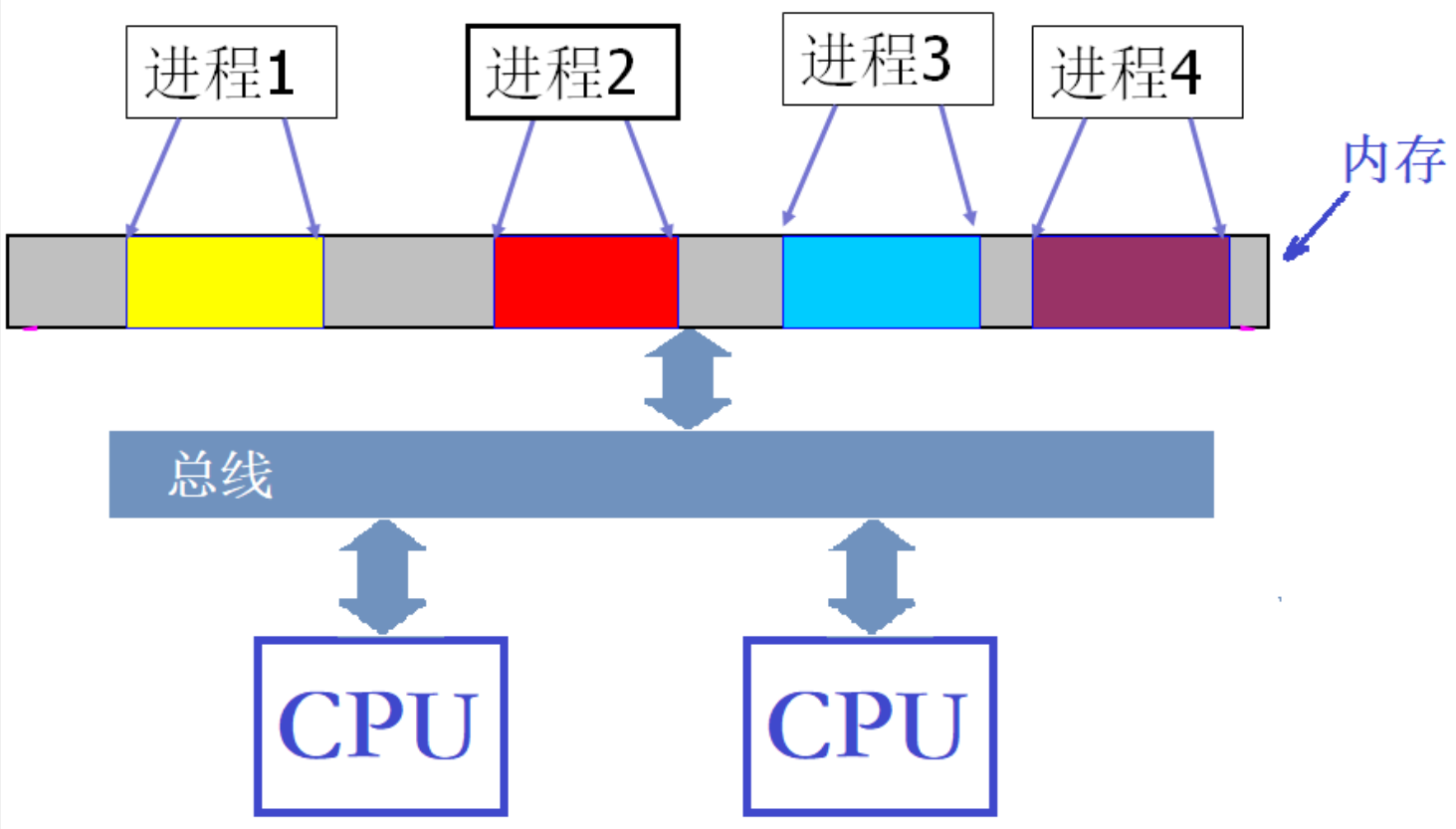


共享内存系统



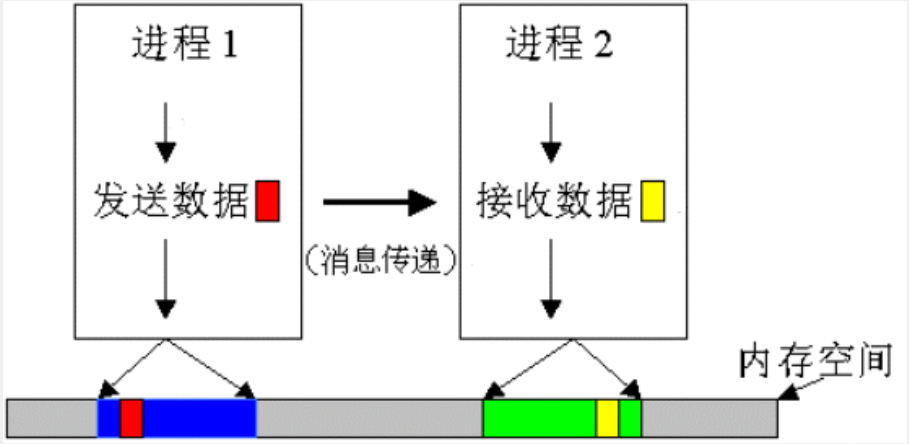
MPI适合在共享内存系统上开发并行程序：处理器是全连接的

MPI并行程序在共享内存系统的运行方式



在共享内存系统的MPI程序

- 最基本的消息传递操作：发送消息（send）、接受消息（receive）、进程同步（barrier）、规约（reduction）。
  - 消息传递的实现：共享内存或信号量，用户不必关心。
- 进程间可以相互交换信息：例如数据交换、同步等待，消息是这些交换信息的基本单位，消息传递是指这些信息在进程间的相互交换，是实现进程间通信的唯一方式。



Hello World!

```
#include <stdio.h>

int main(void) {
    printf("hello, world\n");

    return 0;
}
```

(a classic)

从简单入手

- 下面我们首先分别以C语言的形式给出一个最简单的MPI并行程序 Hello

- 该程序在终端打印出Hello World!字样.

识别 MPI 进程

- 在并行编程中，常见的是将进程按照非负整数来进行标注.
- *p* 个进程被编号为*0, 1, 2, .. p-1*

第一个 MPI 程序

```
1  #include <stdio.h>
2  #include <string.h>  /* For strlen             */
3  #include <mpi.h>     /* For MPI functions, etc */
4
5  const int MAX_STRING = 100;
6
7  int main(void) {
8     char        greeting[MAX_STRING];
9     int         comm_sz;  /* Number of processes */
10    int         my_rank;  /* My process rank     */
11
12    MPI_Init(NULL, NULL);
13    MPI_Comm_size(MPI_COMM_WORLD, &comm_sz);
14    MPI_Comm_rank(MPI_COMM_WORLD, &my_rank);
15
16    if (my_rank != 0) {
17       sprintf(greeting, "Greetings from process %d of %d!",
18             my_rank, comm_sz);
19       MPI_Send(greeting, strlen(greeting)+1, MPI_CHAR, 0, 0,
20             MPI_COMM_WORLD);
21    } else {
22       printf("Greetings from process %d of %d!\n", my_rank, comm_sz);
23       for (int q = 1; q < comm_sz; q++) {
24          MPI_Recv(greeting, MAX_STRING, MPI_CHAR, q,
25             0, MPI_COMM_WORLD, MPI_STATUS_IGNORE);
26          printf("%s\n", greeting);
27       }
28    }
29
30    MPI_Finalize();
31    return 0;
32 }  /* main */
```

编译，生成hello的可执行代码

C语言编译器的包装脚本

源文件

```
mpicc  -g  -Wall  -o  mpi_hello  mpi_hello.c
```

加入调试信息

创建编译后的输出文件(默认为a.out)

打印警告信息

注：若程序采用**C99**标准，添加编译选项：**-std=C99**

执行——单机上执行

mpirun -n <number of processes> <executable>

或

mpiexec -n <number of processes> <executable>

以mpiexec为例

mpiexec -n 1 ./mpi_hello

用1个进程运行程序

mpiexec -n 4 ./mpi_hello

用4个进程运行程序

Execution

```
mpiexec  -n  1  ./mpi_hello

    Greetings from process 0 of 1 !
```

```
mpiexec  -n  4  ./mpi_hello

    Greetings from process 0 of 4 !
    Greetings from process 1 of 4 !
    Greetings from process 2 of 4 !
    Greetings from process 3 of 4 !
```

MPI 程序头文件和标识符

- C语言.
  - 包含了main函数.
  - 标准头文件 stdio.h, string.h, etc.
- 包含 mpi.h 头文件.
- 所有MPI定义的标识符都由字符串 “MPI_”开始.
  - 下划线后的第一字母大写。
    - 表示函数名和MPI定义的类型
    - 避免混淆

MPI程序的框架结构

头文件	包含**MPI**库
相关变量的声明	定义与通信有关的变量
程序开始	调用**MPI**初始化函数
程序体 计算与通信	调用**MPI**其它函数
程序结束	调用**MPI**结束函数

用C+MPI实现hello world!

```
#include "mpi.h"
#include <stdio.h>     #include <math.h>                                  第一部分
void main(int argc,char* argv[])
{     int myid, numprocs namelen;                                         第二部分
    char processor_name[MPI_MAX_PROCESSOR_NAME];
    MPI_Init(&argc,&argv);/*程序初始化*/                                  第三部分
    MPI_Comm_rank(MPI_COMM_WORLD,&myid);
                                    /*得到当前进程号*/
   MPI_Comm_size(MPI_COMM_WORLD,&numprocs);
                                    /*得到总的进程数*/
   MPI_Get_processor_name(processor_name,&namelen);
                                    /*得到机器名*/                        第四部分
   printf("hello world! Process %d of %d on %s\n",
          myid, numprocs, processor_name);
   MPI_Finalize();              /*结束*/                                  第五部分

}
```

执行结果

命令提示符

```
C:\Program Files\MPICH\mpd\bin>mpirun -localonly 4 hello_world_c
hello world! Process 3 of 4 on cumtbhebingshou.
hello world! Process 2 of 4 on cumtbhebingshou.
hello world! Process 1 of 4 on cumtbhebingshou.
hello world! Process 0 of 4 on cumtbhebingshou.

C:\Program Files\MPICH\mpd\bin>_
```

MPI基本调用

- MPI为程序员提供一个并行环境库，程序员通过调用MPI的库程序来达到程序员所要达到的并行目的
- 可以只使用其中的6个最基本的函数就能编写一个完整的MPI程序去求解很多问题。
  - 6个基本函数：启动和结束MPI环境，识别进程以及发送和接收消息

MPI的6个基本函数

从理论上说，MPI所有的通信功能可以用它的6个基本的调用来实现:

MPI_Init:	启动MPI环境
MPI_Comm_size:	确定进程数
MPI_Comm_rank:	确定自己的进程标识符
MPI_Send:	发送一条消息
MPI_Recv:	接收一条消息
MPI_Finalize:	结束MPI环境

最简单的hello.c

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

main( int argc, char *argv[] )
{
    MPI_Init( &argc, &argv );
    printf("Hello World!\n");
    MPI_Finalize();
}
```

MPI初始化- MPI_INIT

- int MPI_Init(int *argc, char **argv)

  MPI_INIT(IERROR)
  - MPI_INIT是MPI程序的第一个调用，完成MPI程序的所有初始化工作。所有的MPI程序的第一条可执行语句都是这条语句
  - 启动MPI环境，标志并行代码的开始
  - 并行代码之前，第一个mpi函数(除MPI_Initialize外)
  - 要求main必须带参数运行。否则出错

```
int MPI_Init(
      int*      argc_p  /* in/out */,
      char***   argv_p  /* in/out */);
```

MPI结束- MPI_FINALIZE

- int MPI_Finalize(void)

  MPI_ Finalize(IERROR)
  - MPI_INIT是MPI程序的最后一个调用，它结束MPI程序的运行，它是MPI程序的最后一条可执行语句，否则程序的运行结果是不可预知的。
  - 标志并行代码的结束,结束除主进程外其它进程
  - 之后串行代码仍可在主进程(rank = 0)上运行(如果必须), 但其后的运行结果难以预测，所以原则上MPI_Finalize后面只执行return

```
int MPI_Finalize(void);
```

运行MPI程序 hello.c

- 编译：mpicc -o hello hello.c
- 运行：./hello

  [0] Aborting program ! Could not create p4 procgroup.Possible missing fileor program started without mpirun.
- 运行：mpiexec -np 4 hello

  Hello World!

  Hello World!

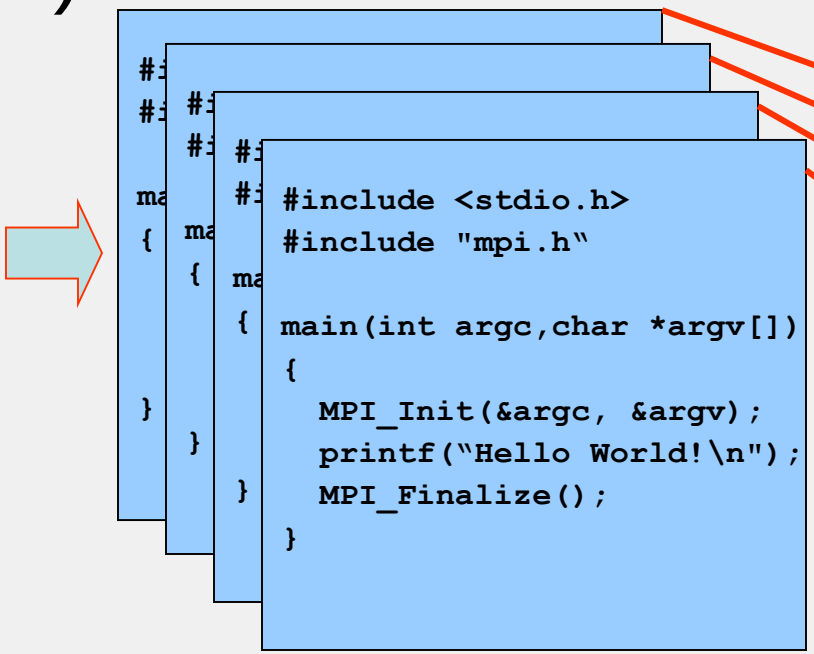
  Hello World!

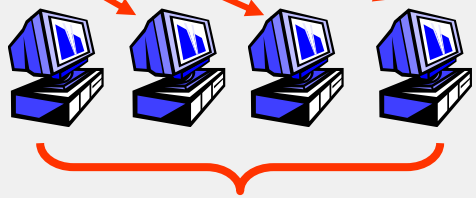
  Hello World!

Hello是如何被执行的？

- SPMD: Single Program Multiple Data(MIMD)

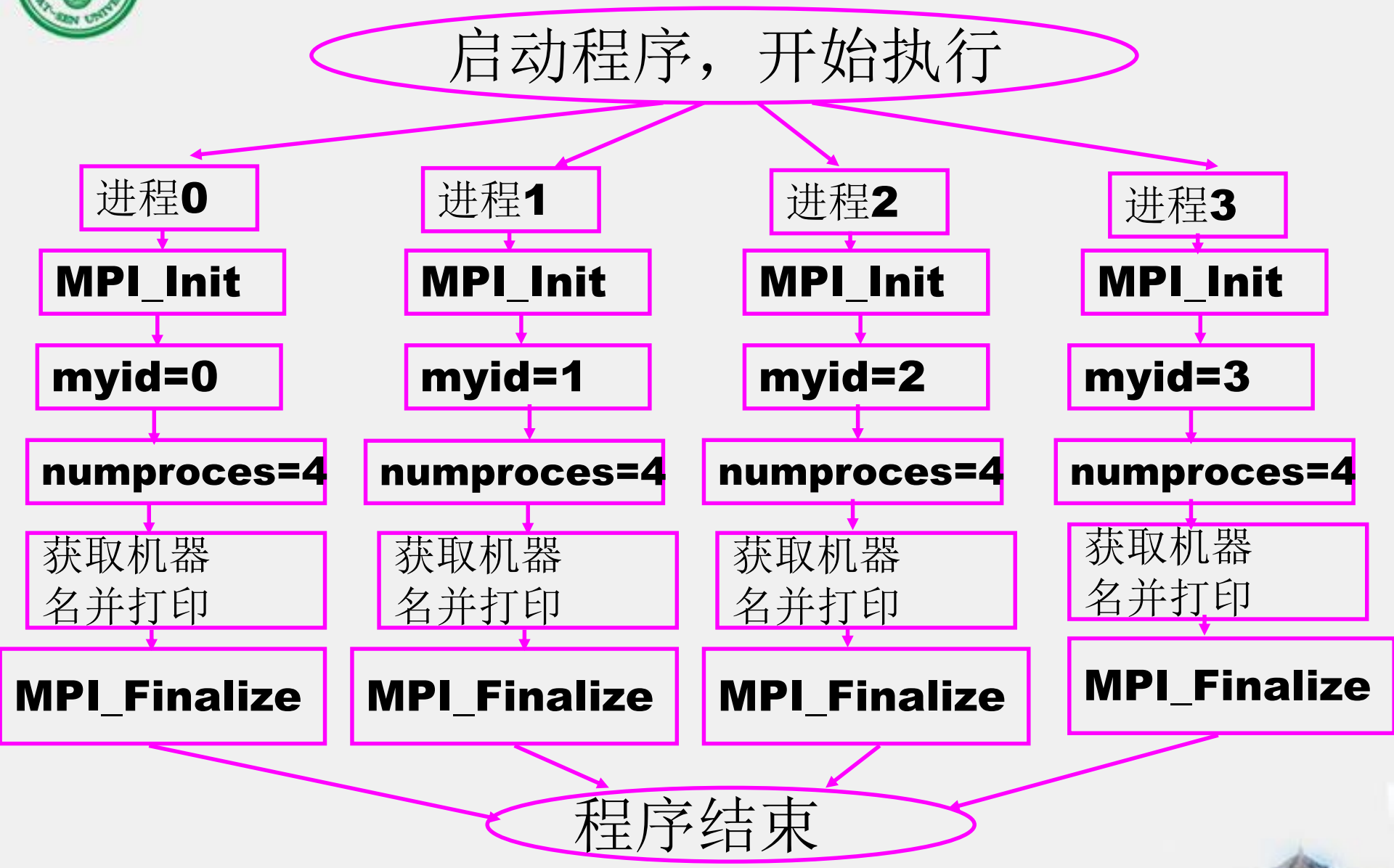
```
#include <stdio.h>
#include "mpi.h"

main(int argc,char *argv[])
{
  MPI_Init(&argc, &argv);
  printf("Hello World!\n");
  MPI_Finalize();
}
```





```
Hello World!
Hello World!
Hello World!
Hello World!
```

Hello程序在单机上的运行方式



基本框架

```
. . .
#include <mpi.h>
. . .
int main(int argc, char* argv[]) {
    . . .
    /* No MPI calls before this */
    MPI_Init(&argc, &argv);
    . . .
    MPI_Finalize();
    /* No MPI calls after this */
    . . .
    return 0;
}
```

开始写MPI程序

- 写MPI程序时，我们常需要知道以下两个问题的答案:
  - 任务由多少进程来进行并行计算？
  - 我是哪一个进程？

通信子/通信域

- 一组可以相互发送消息的进程集合.
- MPI_Init 在用户启动程序时，定义由用户启动的所有进程所组成的通信子或通信域.
- 称为 MPI_COMM_WORLD.
  - 全局通信域

实际建立下面数据结构，并获得自己的进程号

	进程网络地址0	进程网络地址1	…	…	进程网络地址(p-1)
	端口号	端口号			端口号
进程号	0	1	…	…	p-1

- MPI提供了下列函数来回答这些问题：
  - 用MPI_Comm_size 获得进程个数p

in
```
int  MPI_Comm_size(
        MPI_Comm   comm          /* in  */,
        int*       comm_sz_p     /* out */);
```

  - 用MPI_Comm_rank 获得进程的一个叫my_rank_p的值，该值为0到p-1间的整数,相当于进程的ID

int
```
int  MPI_Comm_rank(
        MPI_Comm   comm          /* in  */,
        int*       my_rank_p     /* out */);
```

更新的Hello World(C语言)

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

main( int argc, char *argv[] )
{
    int myid,numprocs;

    MPI_Init( &argc, &argv );
    MPI_Common_rank(MPI_COMMON_WORLD,&myid);
    MPI_Common_size(MPI_COMMON_WORLD,&numprocs);
    printf("I am %d of %d \n", myid,numprocs);
    MPI_Finalize();
}
```

运行结果

- mpicc –o hello1 hello1.c
- mpiexec -np 4 hello1

结果：

I am 0 of 4

I am 1 of 4

I am 2 of 4

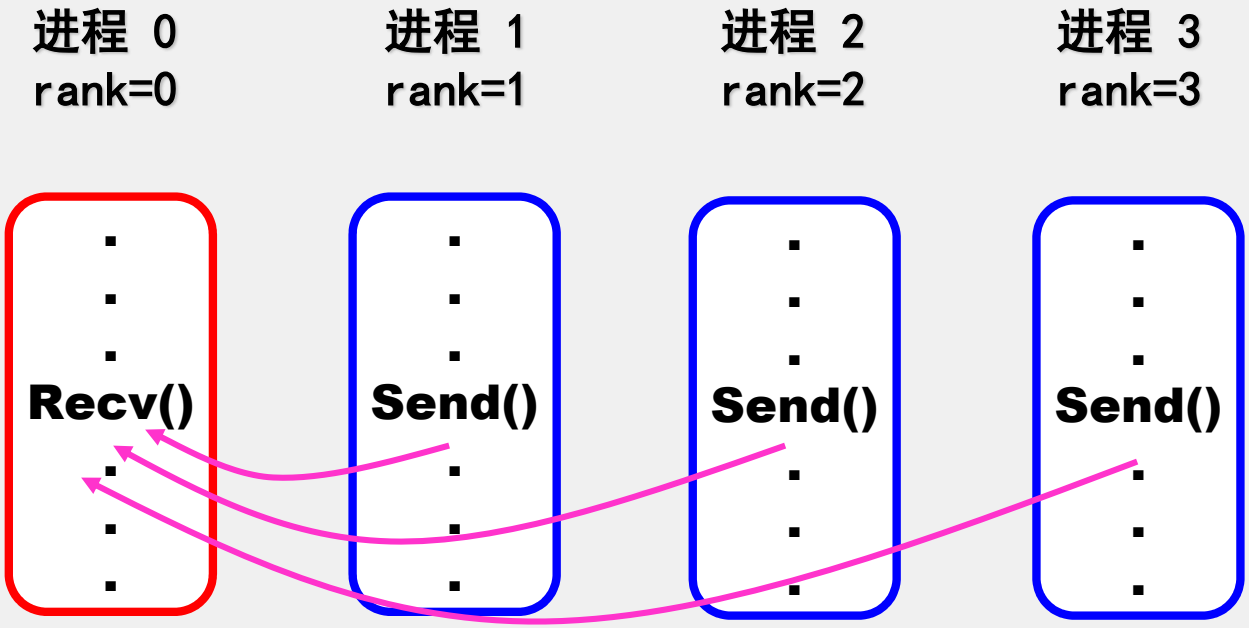
I am 3 of 4

通信
有消息传递greetings(C语言)

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

main( int argc, char *argv[] )
{
    int myid,numprocs,soure;
    MPI_Status status;
    char message[100];

    MPI_Init( &argc, &argv );
    MPI_Common_rank(MPI_COMMON_WORLD,&myid);
    MPI_Common_size(MPI_COMMON_WORLD,&numprocs);
```

```
  if (myid != 0) {
    strcpy(message, "Hello World!");
    MPI_Send(message,strlen(message)+1,MPI_CHAR,
             0,99,MPI_COMM_WORLD);
  } else {/* myid == 0 */
    for (source = 1; source < numprocs; source++) {
        MPI_Recv(message, 100, MPI_CHAR, source, 99,
           MPI_COMM_WORLD, &status);
        printf("%s\n", message);
    }
  }
  MPI_Finalize();
} /* end main */
```

Greeting执行过程



解剖greeting程序

- 头文件：mpi.h/mpif.h
- int MPI_Init(int *argc, char ***argv)
- 通信组/通信子: MPI_COMM_WORLD
  - 一个通信组是一个进程组的集合。所有参与并行计算的进程可以组合为一个或多个通信组
  - 执行MPI_Init后，一个MPI程序的所有进程形成一个缺省的组,这个组被写作MPI_COMM_WORLD
  - 该参数是MPI通信操作函数中必不可少的参数,用于限定参加通信的进程的范围

- int MPI_Comm_size (MPI_Comm comm, int *size)
  - 获得通信组comm中包含的进程数
- int MPI_Comm_rank (MPI_Comm comm, int *rank)
  - 得到本进程在通信组中的rank值,即在组中的逻辑编号(从0开始)
- int MPI_Finalize()

消息传递

```
MPI_Send(A, 10, MPI_DOUBLE, 1, 99, MPI_COMM_WORLD);

MPI_Recv(B, 20, MPI_DOUBLE, 0, 99, MPI_COMM_WORLD, &status);
```

- 数据传送＋同步操作
- 需要发送方和接受方合作完成

MPI的6个基本函数

- MPI函数的总数虽然庞大，但根据实际编写MPI的经验，常用的MPI调用的个数确实有限。
- 从理论上说，MPI所有的通信功能可以用它的6个基本的调用来实现:

MPI_Init:	启动MPI环境
MPI_Comm_size:	确定进程数
MPI_Comm_rank:	确定自己的进程标识符
MPI_Send:	发送一条消息
MPI_Recv:	接收一条消息
MPI_Finalize:	结束MPI环境

MPI的6个基本函数

(1)MPI初始化：通过MPI_Init函数进入MPI环境并完成所有的初始化工作。

```
int MPI_Init( int *argc, char * * * argv )
```

(2)MPI结束：通过MPI_Finalize函数从MPI环境中退出。

```
int MPI_Finalize(void)
```

MPI的6个基本函数

(3)获取进程的编号：调用MPI_Comm_rank函数获得当前进程在指定通信域中的编号，将自身与其他程序区分。

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

(4)获取指定通信域的进程数：调用MPI_Comm_size函数获取指定通信域的进程个数，确定自身完成任务比例。

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

MPI的6个基本函数

(5)消息发送：MPI_Send函数用于发送一个消息到目标进程。

int MPI_Send(void *buf, int count, MPI_Datatype dataytpe, int dest, int tag, MPI_Comm comm)

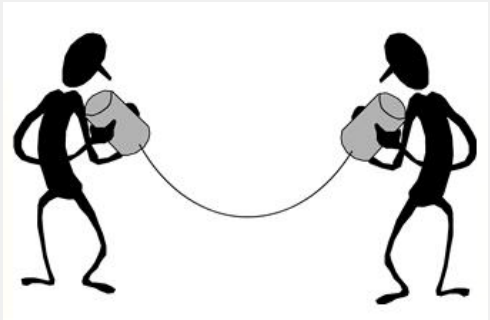
(6)消息接受:MPI_Recv函数用于从指定进程接收一个消息

int MPI_Recv(void *buf, int count, MPI_Datatype datatyepe,int source, int tag, MPI_Comm comm, **MPI_Status *status**)

- 下面更多的了解MPI基本的6个函数

通信——发送

- **int MPI_Send(void* msg_buf_p, int msg_size, MPI_Datatype msg_type,int dest, int tag, MPI_Comm communicator);**
  - IN msg_buf_p　　发送缓冲区的起始地址
  - IN msg_size　　要发送信息的元素个数
  - IN msg_type　　发送信息的数据类型
  - IN dest　　目标进程的rank值
  - IN tag　　消息标签
  - IN communicator　　通信域/子/组



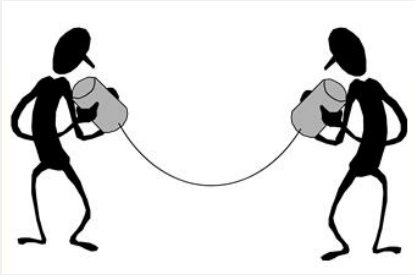
这里用到的**MPI_Datatype**

一些预先定义的MPI数据类型

MPI datatype	C datatype
MPI_CHAR	signed char
MPI_SHORT	signed short int
MPI_INT	signed int
MPI_LONG	signed long int
MPI_LONG_LONG	signed long 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
MPI_BYTE	
MPI_PACKED	

通信——接收

- **int MPI_Recv(void* msg_buf_p, int buf_size, MPI_Datatype buf_type, int source, int tag, MPI_Comm comminicator, MPI_Status *status_p);**
  - OUT msg_buf_p　　发送缓冲区的起始地址
  - IN buf_size　　要发送信息的元素个数
  - IN buf_type　发送信息的数据类型
  - IN source　　目标进程的rank值
  - IN tag　　消息标签
  - IN comminicator　　通信子
  - OUT status_p　status_p对象,包含实际接收到的消息的有关信息



为什么使用消息标签(Tag)?

为了说明为什么要用标签, 我们先来看右面一段没有使用标签的代码:

这段代码打算传送A的前32个字节进入X, 传送B的前16个字节进入Y. 但是, 如果消息B尽管后发送但先到达进程Q,就会被第一个recv()接收在X中.

使用标签可以避免这个错误.

未使用标签

Process P:	Process Q:
send(A,32,Q)	
	recv(X, 32, P)
Process R:	recv(Y, 16, P)
send(B,16,Q)	

使用了标签

Process P:	Process Q:
send(A,32,Q,tag1)	
	recv (X, 32, P, tag1)
Process R:	recv (Y, 16, P, tag2)
send(B,16,Q,tag2)	

在消息传递中使用标签

```
Process P:
send (request1,32, Q)

Process R:
send (request2, 32, Q)

Process Q:
while (true) {
      recv (received_request, 32, Any_Process);
      process received_request;
      }
```

使用标签的另一个原因是可以简化对下列情形的处理：

假定有两个客户进程P和R，每个发送一个服务请求消息给服务进程Q.

```
Process P:
send(request1, 32, Q, tag1)

Process R:
send(request2, 32, Q, tag2)

Process Q:
while (true){
      recv(received_request, 32, Any_Process, Any_Tag, Status);
      if (Status.Tag==tag1) process received_request in one way;
      if (Status.Tag==tag2) process received_request in another way;
      }
```

消息匹配

```
MPI_Send(send_buf_p, send_buf_sz, send_type, dest, send_tag,
         send_comm);
```

r

MPI_Send

src = q

MPI_Recv

dest = r

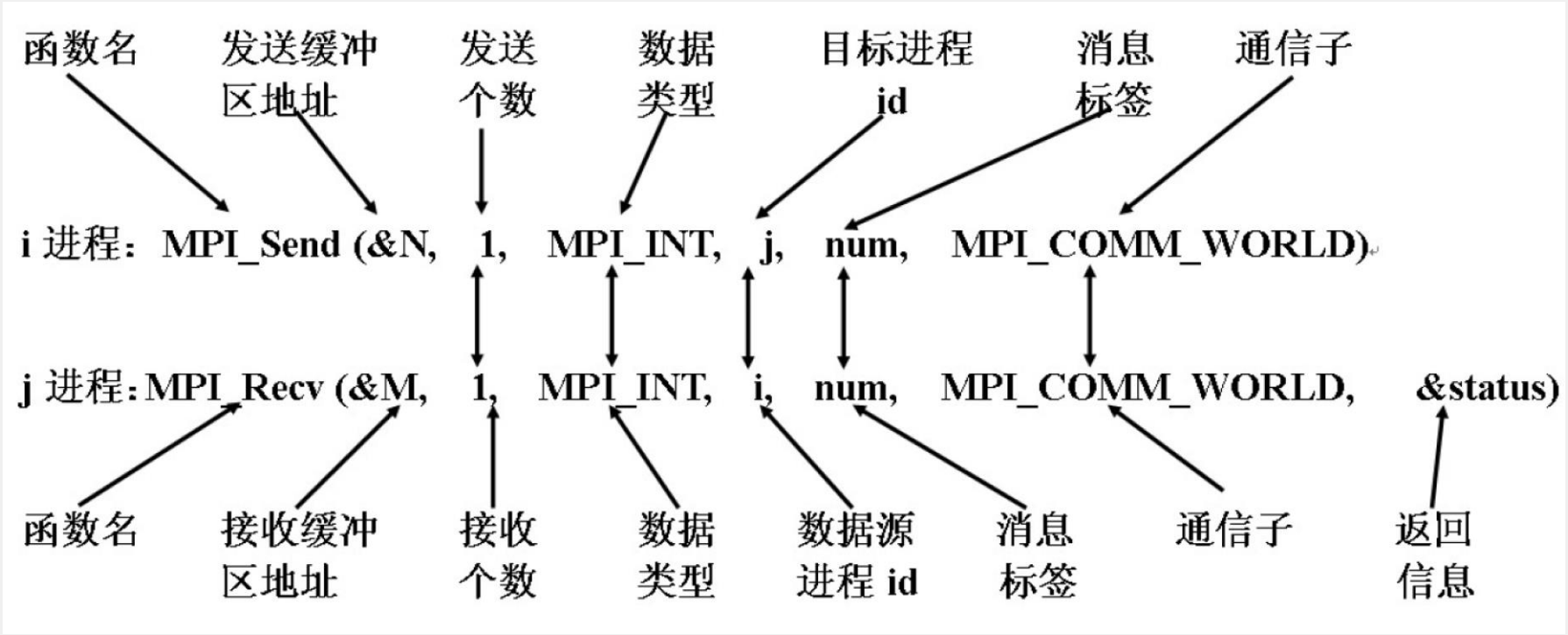
```
MPI_Recv(recv_buf_p, recv_buf_sz, recv_type, src, recv_tag,
         recv_comm, &status);
```

q

消息匹配

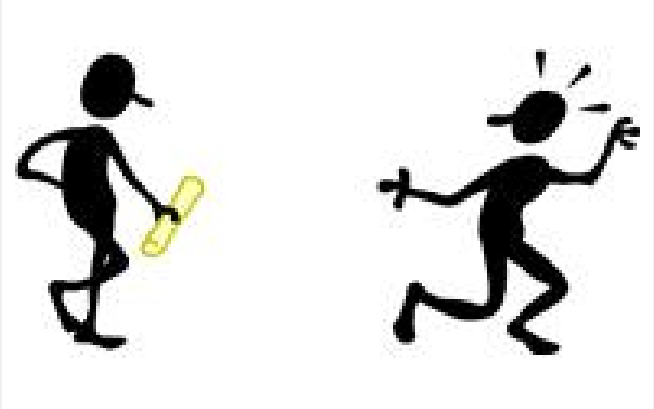
- **接收buffer必须至少可以容纳count个由datatype参数指明类型的数据. 如果接收buf太小，将导致溢出、出错**
- **消息匹配**
  - 参数匹配dest,tag,comm/ source,tag,comm
  - Source == MPI_ANY_SOURCE：接收任意处理器来的数据(任意消息来源).
  - Tag == MPI_ANY_TAG：匹配任意tag值的消息(任意tag消息)
- **在阻塞式消息传送中不允许Source==Dest, 否则会导致死锁**
- **消息传送被限制在同一个communicator.**
- **在send函数中必须指定唯一的接收者**

消息匹配——send和recv参数匹配



接收消息

- 接收者可以在不知道以下信息的情况下接收消息:
  - 消息中的数据量,
  - 消息的发送者,
  - 消息的标签.



status_p参数

- **当使用MPI_ANY_SOURCE或/和MPI_ANY_TAG接收消息时如何确定消息的来源source 和tag值？**
  - 在C中,status.MPI_SOURCE, status.MPI_TAG.
- status.*MPI_ERROR*

- **Status还可用于返回实际接收到消息的长度**
  - int MPI_Get_count(MPI_Status status_p,
  - MPI_Datatype type,
  - int* count.p
  -)

    IN status_p 接收操作的返回值.

    IN type 接收缓冲区中元素的数据类型

    OUT count.p 接收消息中的元素个数

status_p参数

```
MPI_Recv(recv_buf_p, recv_buf_sz, recv_type, src, recv_tag,
         recv_comm, &status);
```

MPI_Status*

MPI_SOURCE
MPI_TAG
MPI_ERROR

MPI_Status* status;

status.MPI_SOURCE
status.MPI_TAG

How much data am I receiving?

```
int MPI_Get_count(
          MPI_Status*   status_p   /* in  */,
          MPI_Datatype  type       /* in  */,
          int*          count_p    /* out */);
```

分析greetings

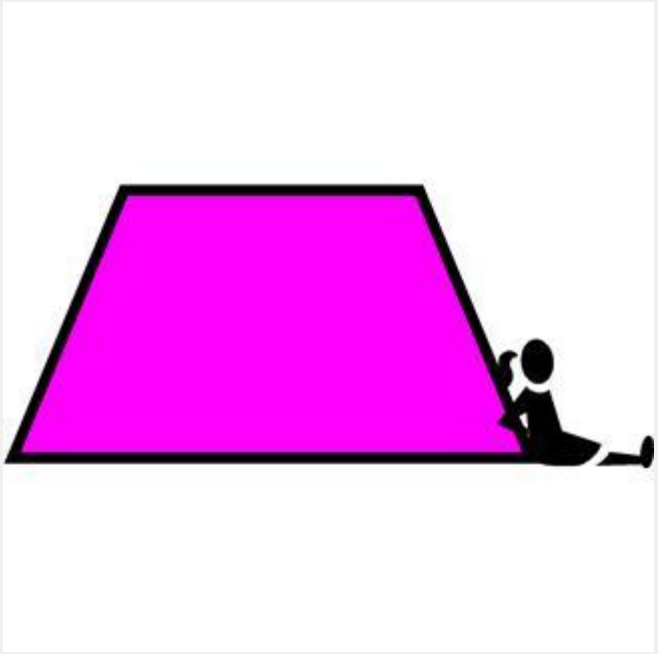
```
#include <stdio.h>
#include "mpi.h"
main( int argc, char *argv[] )
{
    int numprocs;          /*进程数,该变量为各处理器中的同名变量,存储是分布的*/
    int myid;              /*进程ID,存储也是分布的                          */
    MPI_Status status;     /*消息接收状态变量,存储也是分布的                */
    char message[100];     /*消息buffer,存储也是分布的                      */
    /*初始化MPI*/
    MPI_Init( &argc, &argv );
    /*该函数被各进程各调用一次,得到自己的进程rank值*/
    MPI_Common_rank(MPI_COMMON_WORLD,&myid);
    /*该函数被各进程各调用一次,得到进程数*/
    MPI_Common_size(MPI_COMMON_WORLD,&numprocs);
```

分析greetings

```
 if (myid != 0) {
  /*建立消息*/
   sprintf(message, "Greetings from process %d!",myid);
  /* 发送长度取strlen(message)+1,使\0也一同发送出去*/
    MPI_Send(message,strlen(message)+1,MPI_CHAR,
             0,99,MPI_COMM_WORLD);
 } else
{/*myrank == 0*/
 for (source = 1; source < numprocs; source++) {
    MPI_Recv(message, 100, MPI_CHAR, source, 99,
             MPI_COMM_WORLD, &status);
    printf("%s\n", message);
    }
 }
 /*关闭MPI,标志并行代码段的结束*/
 MPI_Finalize();
} /* end main */
```

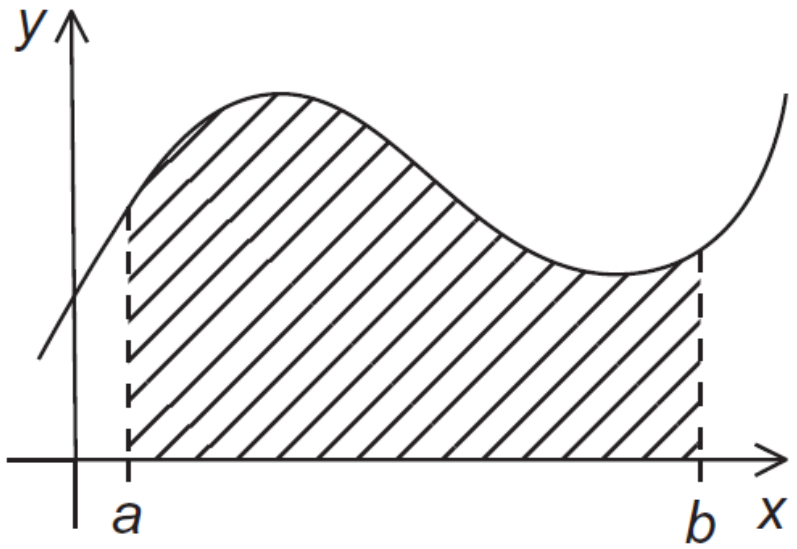
MPI_Send和MPI_Recv的问题

- MPI_Send的精确行为是由MPI实现决定的
- MPI_Send可能有不同大小的缓冲区，是缓冲还是阻塞可以由一个消息“截止”大小决定（ cutoffs message size）
- MPI_Recv总是被阻塞的，直到接收到一条匹配的消息
- 了解你的执行情况；不要做假设！

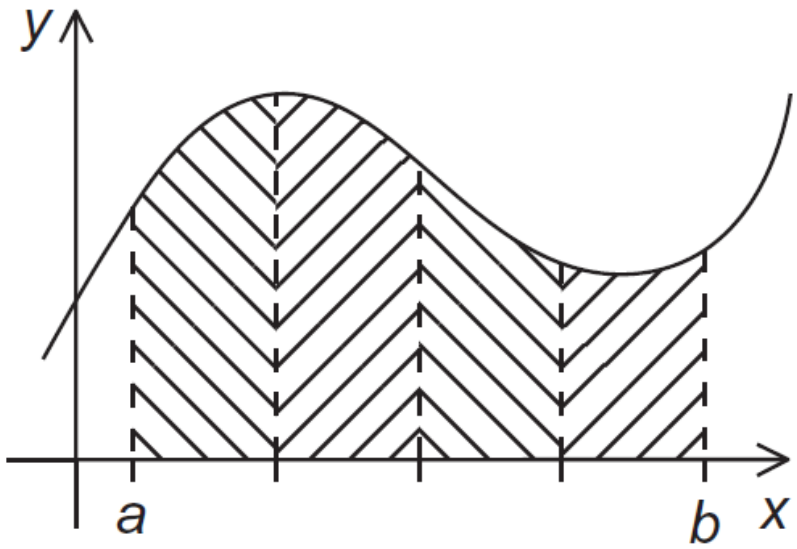


用MPI实现梯形积分法

梯形积分法

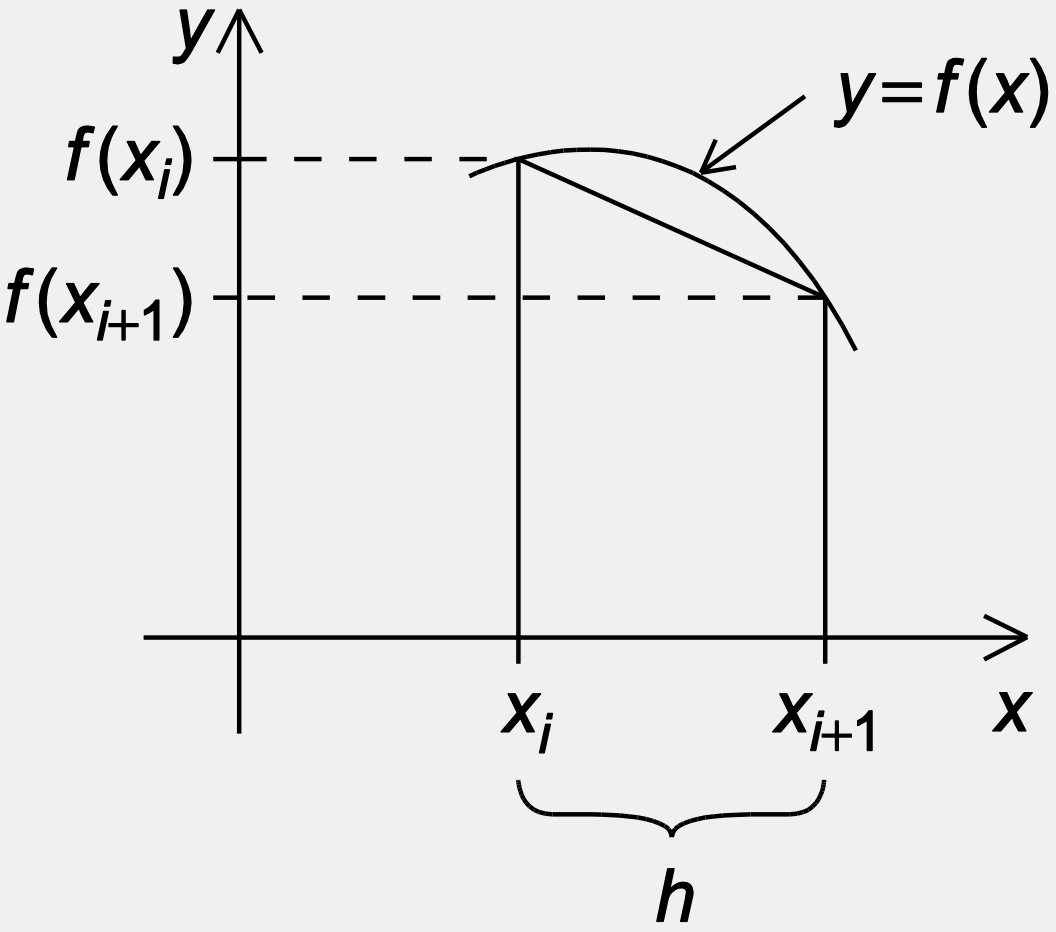


(a)



(b)

一个梯形



梯形积分法

$$\text{Area of one trapezoid } = \frac{h}{2}[f(x_i) + f(x_{i+1})]$$

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

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

$$\text{Sum of trapezoid areas } = h[f(x_0)/2 + f(x_1) + f(x_2) + \cdots + f(x_{n-1}) + f(x_n)/2]$$

梯形积分法的串行伪代码

```
/* Input:   a, b, n */
h = (b-a)/n;
approx = (f(a) + f(b))/2.0;
for (i = 0; i <= n-1; i++) {
    x_i = a + i*h;
    approx += f(x_i);
}
approx = h*approx;
```

并行化的梯形积分法

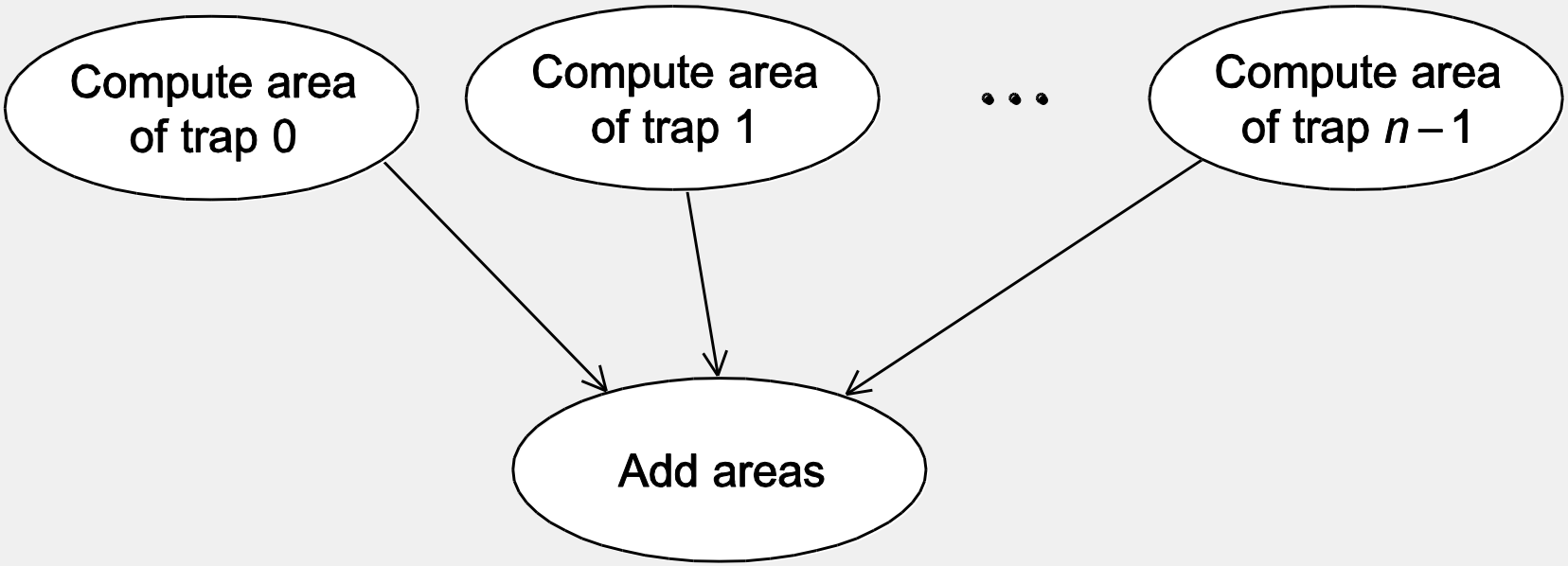
1. 将问题的解决方案划分成多个任务。

2. 在任务间识别出需要的通信信道。

3. 将任务聚合成复合任务。

4. 在核上分配复合任务。

并行梯形积分法的任务和通信



梯形积分法的并行伪代码

```
1     Get a, b, n;
2     h = (b-a)/n;
3     local_n = n/comm_sz;
4     local_a = a + my_rank*local_n*h;
5     local_b = local_a + local_n*h;
6     local_integral = Trap(local_a, local_b, local_n, h);
7     if (my_rank != 0)
8        Send local_integral to process 0;
9     else /* my_rank == 0 */
10       total_integral = local_integral;
11       for (proc = 1; proc < comm_sz; proc++) {
12          Receive local_integral from proc;
13          total_integral += local_integral;
14       }
15    }
16    if (my_rank == 0)
17       print result;
```

并行代码C语言

```
1  int main(void) {
2     int my_rank, comm_sz, n = 1024, local_n;
3     double a = 0.0, b = 3.0, h, local_a, local_b;
4     double local_int, total_int;
5     int source;
6
7     MPI_Init(NULL, NULL);
8     MPI_Comm_rank(MPI_COMM_WORLD, &my_rank);
9     MPI_Comm_size(MPI_COMM_WORLD, &comm_sz);
10
11    h = (b-a)/n;            /* h is the same for all processes */
12    local_n = n/comm_sz;    /* So is the number of trapezoids  */
13
14    local_a = a + my_rank*local_n*h;
15    local_b = local_a + local_n*h;
16    local_int = Trap(local_a, local_b, local_n, h);
17
18    if (my_rank != 0) {
19       MPI_Send(&local_int, 1, MPI_DOUBLE, 0, 0,
20             MPI_COMM_WORLD);
```

并行代码C语言

```
21      } else {
22          total_int = local_int;
23          for (source = 1; source < comm_sz; source++) {
24              MPI_Recv(&local_int, 1, MPI_DOUBLE, source, 0,
25                  MPI_COMM_WORLD, MPI_STATUS_IGNORE);
26              total_int += local_int;
27          }
28      }
29
30      if (my_rank == 0) {
31          printf("With n = %d trapezoids, our estimate\n", n);
32          printf("of the integral from %f to %f = %.15e\n",
33              a, b, total_int);
34      }
35      MPI_Finalize();
36      return 0;
37  } /*  main  */
```

Trap函数

```
1  double Trap(
2        double left_endpt  /* in */,
3        double right_endpt /* in */,
4        int    trap_count  /* in */,
5        double base_len    /* in */) {
6     double estimate, x;
7     int i;
8
9     estimate = (f(left_endpt) + f(right_endpt))/2.0;
10    for (i = 1; i <= trap_count-1; i++) {
11       x = left_endpt + i*base_len;
12       estimate += f(x);
13    }
14    estimate = estimate*base_len;
15
16    return estimate;
17 } /*  Trap  */
```

I/O处理

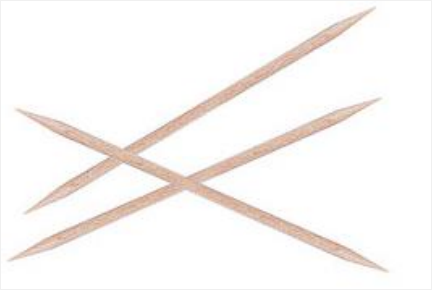
```
#include <stdio.h>
#include <mpi.h>

int main(void) {
    int my_rank, comm_sz;

    MPI_Init(NULL, NULL);
    MPI_Comm_size(MPI_COMM_WORLD, &comm_sz);
    MPI_Comm_rank(MPI_COMM_WORLD, &my_rank);

    printf("Proc %d of %d > Does anyone have a toothpick?\n",
           my_rank, comm_sz);

    MPI_Finalize();
    return 0;
}  /* main */
```

每个进程只打印一条消息

Running with 6 processes

```
Proc 0 of 6 > Does anyone have a toothpick?
Proc 1 of 6 > Does anyone have a toothpick?
Proc 2 of 6 > Does anyone have a toothpick?
Proc 4 of 6 > Does anyone have a toothpick?
Proc 3 of 6 > Does anyone have a toothpick?
Proc 5 of 6 > Does anyone have a toothpick?
```

输出不确定性:
输出的顺序是无法预测的



输入

- 大部分的MPI实现只允许MPI_COMM_WORLD 中的0号进程访问标准输入stdin。
- 0号进程负责读取数据(scanf)，并将数据发送给其他进程。

Get_input →

```
. . .
MPI_Comm_rank(MPI_COMM_WORLD, &my_rank);
MPI_Comm_size(MPI_COMM_WORLD, &comm_sz);

Get_data(my_rank, comm_sz, &a, &b, &n);

h = (b-a)/n;
. . .
```

一个用于读取用户输入的函数

```
void Get_input(
      int       my_rank   /* in  */,
      int       comm_sz   /* in  */,
      double*   a_p       /* out */,
      double*   b_p       /* out */,
      int*      n_p       /* out */) {
   int dest;

   if (my_rank == 0) {
      printf("Enter a, b, and n\n");
      scanf("%lf %lf %d", a_p, b_p, n_p);
      for (dest = 1; dest < comm_sz; dest++) {
         MPI_Send(a_p, 1, MPI_DOUBLE, dest, 0, MPI_COMM_WORLD);
         MPI_Send(b_p, 1, MPI_DOUBLE, dest, 0, MPI_COMM_WORLD);
         MPI_Send(n_p, 1, MPI_INT, dest, 0, MPI_COMM_WORLD);
      }
   } else { /* my_rank != 0 */
      MPI_Recv(a_p, 1, MPI_DOUBLE, 0, 0, MPI_COMM_WORLD,
            MPI_STATUS_IGNORE);
      MPI_Recv(b_p, 1, MPI_DOUBLE, 0, 0, MPI_COMM_WORLD,
            MPI_STATUS_IGNORE);
      MPI_Recv(n_p, 1, MPI_INT, 0, 0, MPI_COMM_WORLD,
            MPI_STATUS_IGNORE);
   }
}  /* Get_input */
```

通信类型

- MPI点对点通信
  - 阻塞型和非阻塞型**Blocking，Non-Blocking**
- MPI集合通信

MPI点对点通信

- 阻塞型**Blocking**
- 非阻塞型**Non-Blocking**

MPI点对点通信

- 阻塞型通信
  - 阻塞型通信函数需要等待指定的操作实际完成，或所涉及的数据被 MPI 系统安全备份后才返回。
    - Memory referenced is ready for reuse, Non local operation
    - MPI_Send, MPI_Recv

- 非阻塞通信
  - 非阻塞型通信函数总是立即返回，实际操作由MPI 后台进行，需要调用其它函数来查询通信是否完成。
    - Local operation
    - 在实际操作完成之前对相关数据区域的操作是不安全的
    - 在有些并行系统上(Communication processors)，使用非阻塞型函数
    - 可以实现计算与通信的重叠进行
    - MPI_Isend, MPI_Irecv

集合通信

MPI集合通信

- 集合通信 (collective communication)是一个进程组中的所有进程都参加的全局通信操作。
- 按照通信方向的不同，集合通信可分为三种类型：
  - 一对多：一个进程向其它所有的进程发送消息，这个负责发送消息的进程叫做Root进程。
  - 多对一：一个进程负责从其它所有的进程接收消息，这个接收的进程也叫做Root进程。
  - 多对多：每一个进程都向其它所有的进程发送或者接收消息。

- 集合通信一般实现三个功能：
  - 通信，同步和计算

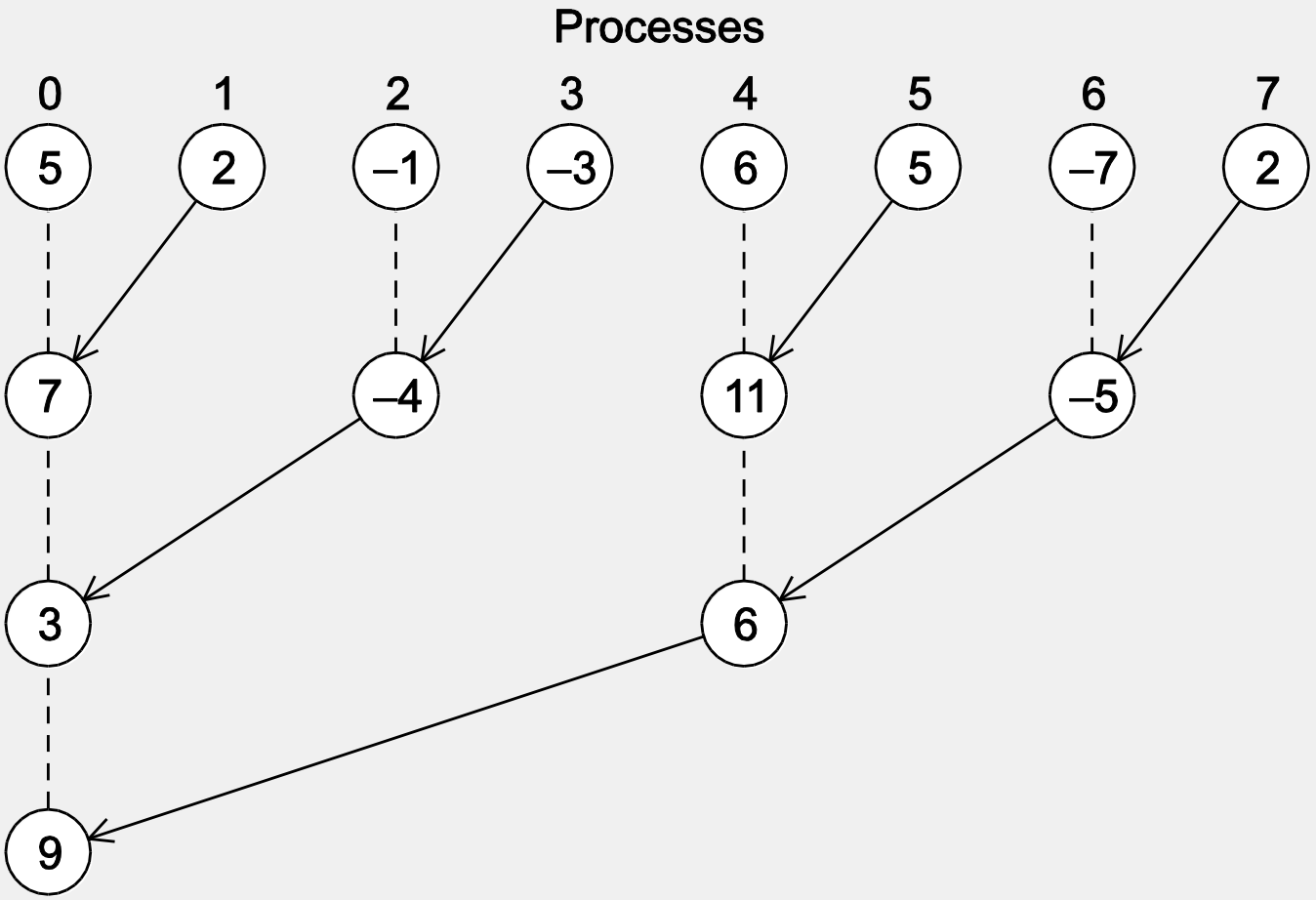
    - 通信功能主要完成组内数据的传输
    - 聚集功能在通信的基础上对给定的数据完成一定的操作
    - 同步功能实现组内所有进程在执行进度上取得一致

树形结构通信

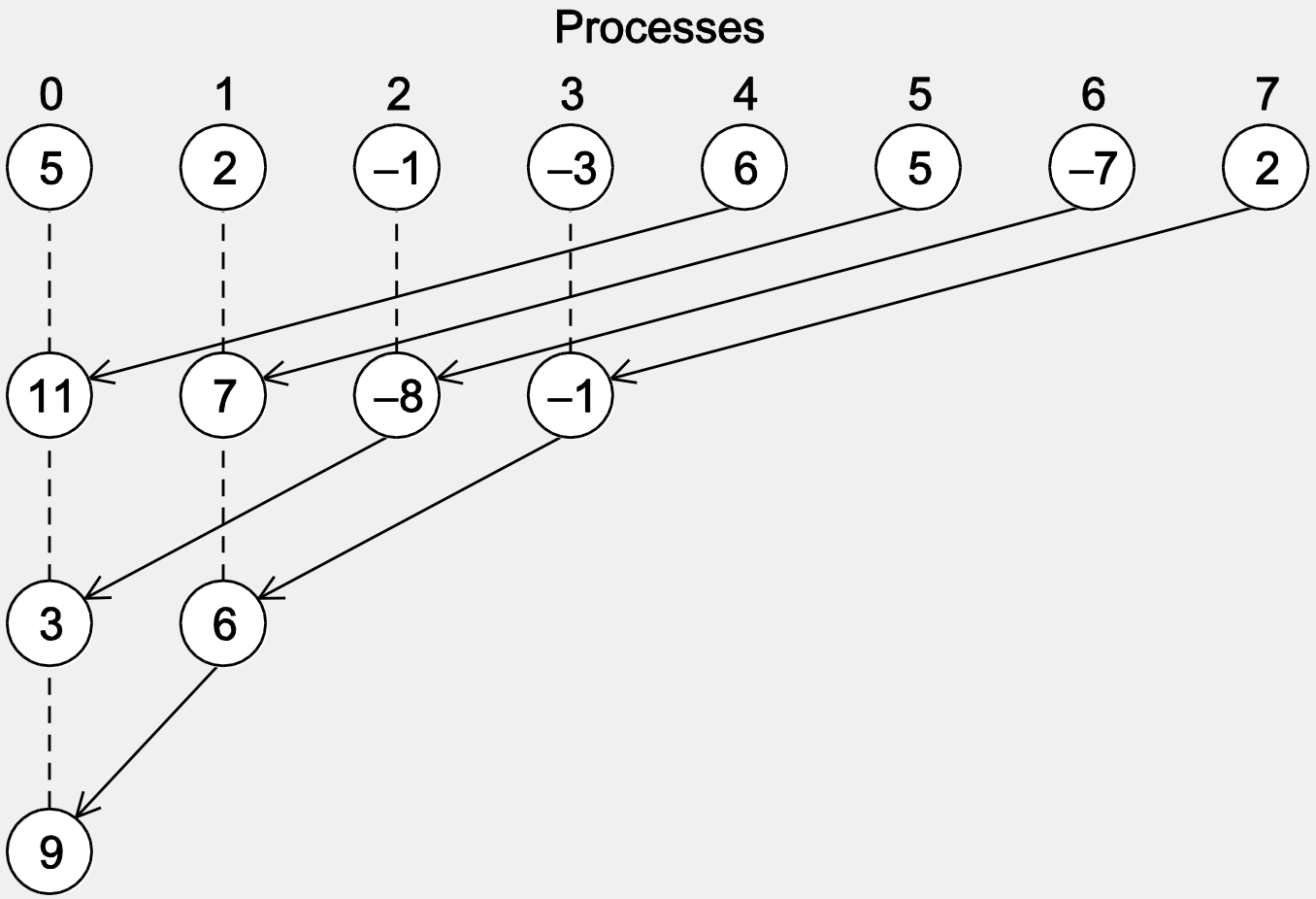
1. 第一阶段:
   (a) 1号，3号，5号，7号进程将他们的值分别发送给0号，2号，4号，6号进程。
   (b) 0, 2, 4和6号进程将接收到的值加到他们自己原有的值上。
   (c) 2号核6号进程将新值分别发送给0号和4号进程。
   (d) 0号和4号进程将接收到的值加到它们的新值上。

2. (a) 4号进程将最新的值发送给0号进程。
   (b) 0号进程将接收到的值相加。

树形结构全局求和



树形结构全局求和的另一种方法



MPI_Reduce

```
int MPI_Reduce（void * input_data_p,
                void * output_data_p,
                int count,
                MPI_Datatype datatype,
                MPI_Op operator,
                int dest_process,
                MPI_Comm comm）
```

这里每个进程的待处理数据存放在**input_data_p**中，所有进程将这些值通过输入的操作子**operator**计算为最终结果并将它存入**dest_process**进程的**output_data_p**。数据项的数据类型在Datatype域中定义。

并行代码C语言

```
1  int main(void) {
2      int my_rank, comm_sz, n = 1024, local_n;
3      double a = 0.0, b = 3.0, h, local_a, local_b;
4      double local_int, total_int;
5      int source;
6
7      MPI_Init(NULL, NULL);
8      MPI_Comm_rank(MPI_COMM_WORLD, &my_rank);
9      MPI_Comm_size(MPI_COMM_WORLD, &comm_sz);
10
11     h = (b-a)/n;            /* h is the same for all processes */
12     local_n = n/comm_sz;    /* So is the number of trapezoids  */
13
14     local_a = a + my_rank*local_n*h;
15     local_b = local_a + local_n*h;
16     local_int = Trap(local_a, local_b, local_n, h);
17
18     if (my_rank != 0) {
19        MPI_Send(&local_int, 1, MPI_DOUBLE, 0, 0,
20              MPI_COMM_WORLD);
```

```
21      } else {
22         total_int = local_int;
23         for (source = 1; source < comm_sz; source++) {
24            MPI_Recv(&local_int, 1, MPI_DOUBLE, source, 0,
25                  MPI_COMM_WORLD, MPI_STATUS_IGNORE);
26            total_int += local_int;
27         }
28      }
29
30      if (my_rank == 0) {
31         printf("With n = %d trapezoids, our estimate\n", n);
32         printf("of the integral from %f to %f = %.15e\n",
33             a, b, total_int);
34      }
35      MPI_Finalize();
36      return 0;
37   } /*  main  */
```

```
int MPI_Reduce(
      void*         input_data_p   /* in  */,
      void*         output_data_p  /* out */,
      int           count          /* in  */,
      MPI_Datatype  datatype       /* in  */,
      MPI_Op        operator       /* in  */,
      int           dest_process   /* in  */,
      MPI_Comm      comm           /* in  */);
```

```
MPI_Reduce(&local_int, &total_int, 1, MPI_DOUBLE, MPI_SUM, 0,
      MPI_COMM_WORLD);
```

```
double local_x[N], sum[N];
. . .
MPI_Reduce(local_x, sum, N, MPI_DOUBLE, MPI_SUM, 0,
      MPI_COMM_WORLD);
```

MPI中预定义的规约操作符

Operation Value	Meaning
MPI_MAX	Maximum
MPI_MIN	Minimum
MPI_SUM	Sum
MPI_PROD	Product
MPI_LAND	Logical and
MPI_BAND	Bitwise and
MPI_LOR	Logical or
MPI_BOR	Bitwise or
MPI_LXOR	Logical exclusive or
MPI_BXOR	Bitwise exclusive or
MPI_MAXLOC	Maximum and location of maximum
MPI_MINLOC	Minimum and location of minimum

集合通信与点对点通信的不同

- 在通信子中的所有进程都必须调用相同的集合通信函数。
  - 例如，试图将一个进程中的MPI_Reduce调用与另一个进程的MPI_Recv调用相匹配的程序会出错，此时程序会被悬挂或者崩溃。

- 每个进程传递给MPI集合通信函数的参数必须是“相容的”。
  - 例如，如果一个进程将0作为dest_process的值传递给函数，而另一个传递的是1，那么对MPI_Reduce调用所产生的结果就是错误的，程序可能被悬挂起来或者崩溃。

- 参数output_data_p只用在dest_process上。
  - 然而，所有进程仍需要传递一个与output_data_p相对应的实际参数，即使它的值只是NULL。

- 点对点通信函数是通过标签和通信子来匹配的。
- 集合通信函数不使用标签，只通过通信子和调用的顺序来进行匹配。

示例

Time	Process 0	Process 1	Process 2
0	`a = 1; c = 2`	`a = 1; c = 2`	`a = 1; c = 2`
1	`MPI_Reduce(&a, &b, ...)`	`MPI_Reduce(&c, &d, ...)`	`MPI_Reduce(&a, &b, ...)`
2	`MPI_Reduce(&c, &d, ...)`	`MPI_Reduce(&a, &b, ...)`	`MPI_Reduce(&c, &d, ...)`

对MPI_Reduce的多个调用

- 假设每个进程调用 MPI_Reduce函数的运算符都是MPI_SUM ，那么目标进程为0号进程。

- 表中，在两次调用 MPI_Reduce后，b的值是3，而d的值是6。

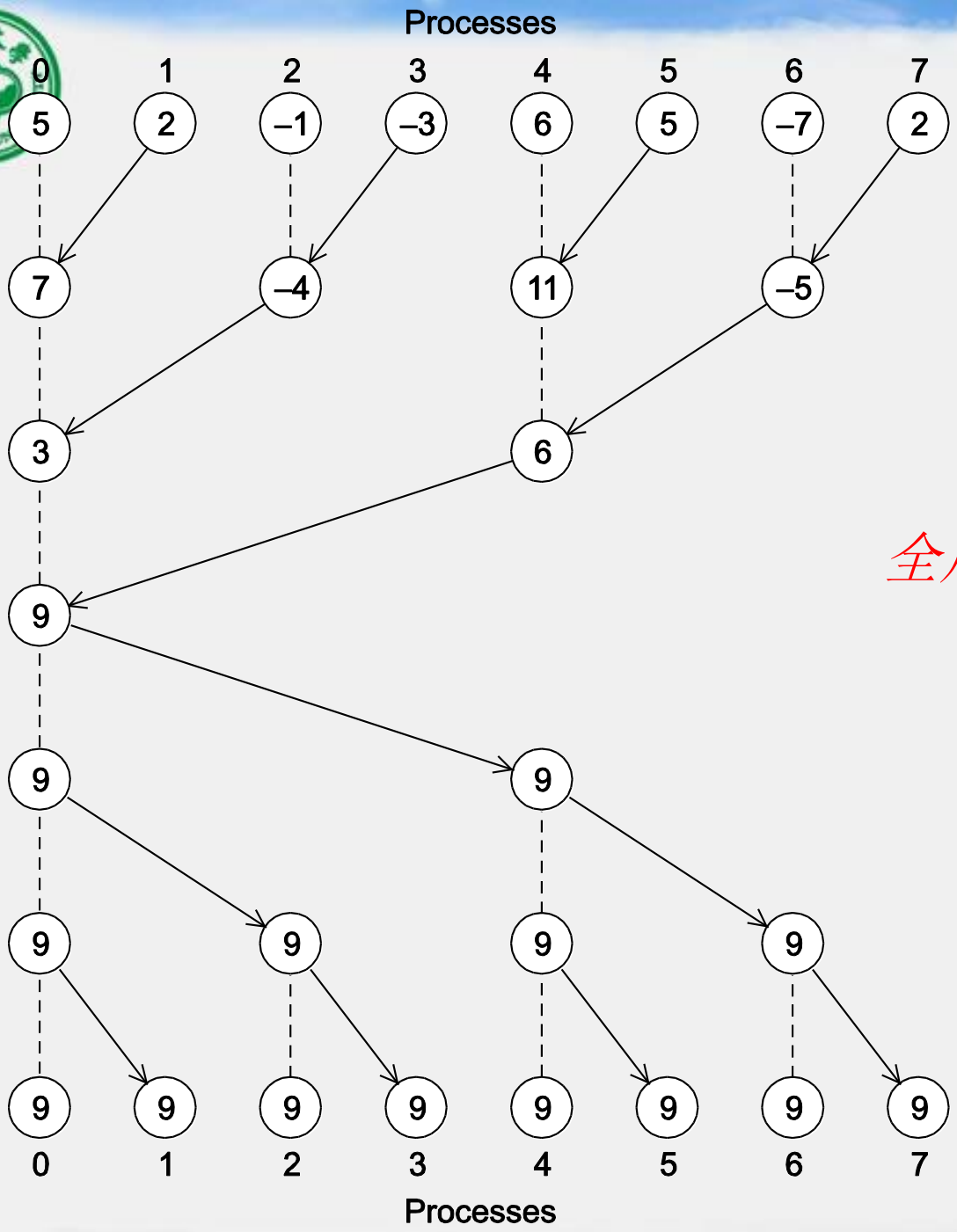
- 但是，内存单元的名字与 MPI_Reduce的调用匹配无关，函数调用的顺序决定了匹配方式。

- 所以b中所存储的值将是1+2+1 = 4， d中存储的值将是2+1+2 = 5。

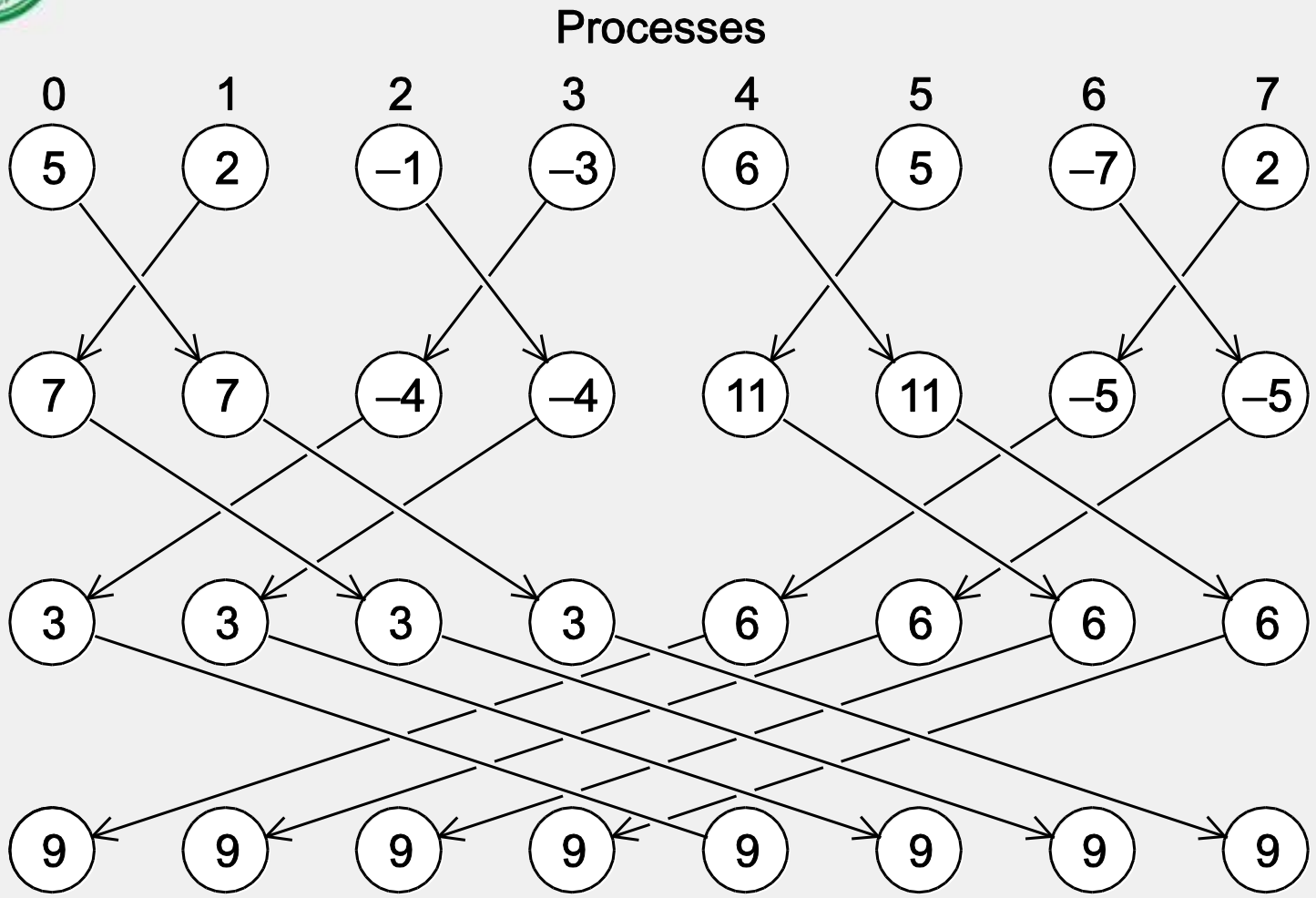
MPI_Allreduce

- 不难想象这样一种情况，即所有进程都想得到全局总和的结果，以便可以完成一个更大规模的计算。

```
int MPI_Allreduce(
        void*        input_data_p   /* in  */,
        void*        output_data_p  /* out */,
        int          count          /* in  */,
        MPI_Datatype datatype       /* in  */,
        MPI_Op       operator       /* in  */,
        MPI_Comm     comm           /* in  */);
```



全局求和计算结果的发布



蝶形结构的全局总和计算

广播

Root

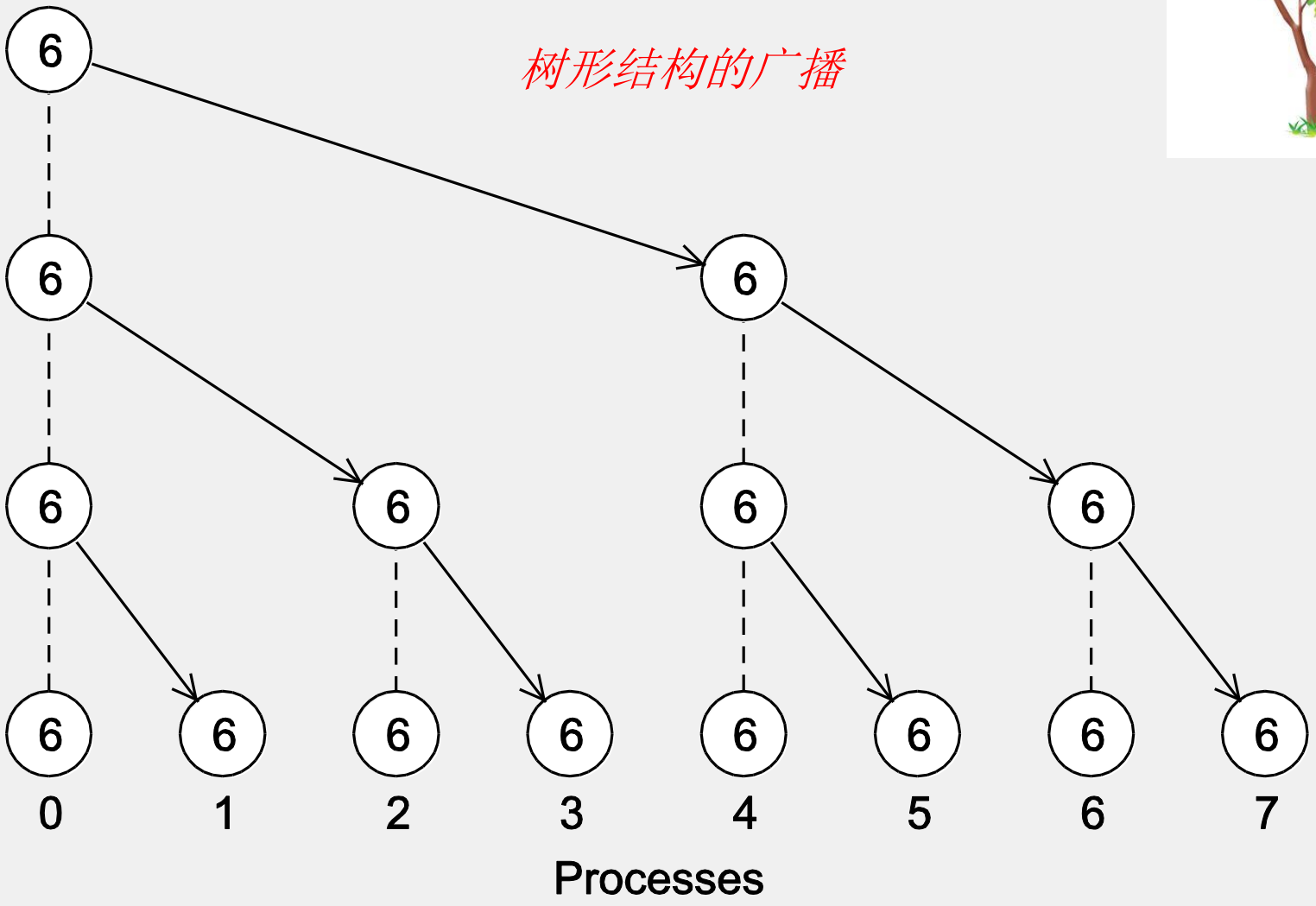
- 在一个集合通信中，如果属于一个进程的数据被发送到通信子中的所有进程，这样的集合通信就叫做广播。

```
int MPI_Bcast(
        void*           data_p          /* in/out */,
        int             count           /* in     */,
        MPI_Datatype    datatype        /* in     */,
        int             source_proc     /* in     */,
        MPI_Comm        comm            /* in     */);
```

  - 进程号为source_proc的进程将data_p所引用的内存内容发送给通信子comm中的所有进程。

- 广播的特点
  - 标号为Root的进程发送相同的消息给通信域Comm中的所有进程。
  - 消息的内容如同点对点通信一样由三元组<Address, Count, Datatype>标识。
  - 对Root进程来说，这个三元组既定义了发送缓冲也定义了接收缓冲。对其它进程来说，这个三元组只定义了接收缓冲

树形结构的广播



一个使用MPI_Bcast的Get_input函数版本

```
void Get_input(
      int        my_rank  /* in  */,
      int        comm_sz  /* in  */,
      double*    a_p      /* out */,
      double*    b_p      /* out */,
      int*       n_p      /* out */) {

   if (my_rank == 0) {
      printf("Enter a, b, and n\n");
      scanf("%lf %lf %d", a_p, b_p, n_p);
   }
   MPI_Bcast(a_p, 1, MPI_DOUBLE, 0, MPI_COMM_WORLD);
   MPI_Bcast(b_p, 1, MPI_DOUBLE, 0, MPI_COMM_WORLD);
   MPI_Bcast(n_p, 1, MPI_INT, 0, MPI_COMM_WORLD);
}  /* Get_input */
```

数据分发

$$
\begin{aligned}
\mathbf{x}+\mathbf{y} &= (x_0, x_1, \ldots, x_{n-1}) + (y_0, y_1, \ldots, y_{n-1}) \\
&= (x_0 + y_0, x_1 + y_1, \ldots, x_{n-1} + y_{n-1}) \\
&= (z_0, z_1, \ldots, z_{n-1}) \\
&= \mathbf{z}
\end{aligned}
$$

计算向量和

向量求和的串行实现

```
void Vector_sum(double x[], double y[], double z[], int n) {
   int i;

   for (i = 0; i < n; i++)
      z[i] = x[i] + y[i];
}  /* Vector_sum */
```

在3个进程中，对有12个分量的向量的不同划分方式

Process	Components											
	Block				Cyclic				Block-cyclic Blocksize = 2			
0	0	1	2	3	0	3	6	9	0	1	6	7
1	4	5	6	7	1	4	7	10	2	3	8	9
2	8	9	10	11	2	5	8	11	4	5	10	11

划分方式

- 块划分Block partitioning
  - 简单的将连续N个分量所构成的块，分配到每个进程中。
- 循环划分Cyclic partitioning
  - 采用轮转的方式去分配向量分量：每个进程各先分一分量，剩余部分再循环划分。
- 块-循环划分Block-cyclic partitioning
  - 用一个循环来分发向量分量所构成的块，而不是分发单个向量分量。

向量求和的并行实现

```
void Parallel_vector_sum(
        double  local_x[]  /* in  */,
        double  local_y[]  /* in  */,
        double  local_z[]  /* out */,
        int     local_n    /* in  */) {
    int local_i;

    for (local_i = 0; local_i < local_n; local_i++)
        local_z[local_i] = local_x[local_i] + local_y[local_i];
}  /* Parallel_vector_sum */
```

散发

- MPI_Scatter
  - 0号进程读入整个向量，但只将分量发送给需要分量的其他进程。

```
int MPI_Scatter(
      void*          send_buf_p   /* in  */,
      int            send_count   /* in  */,
      MPI_Datatype   send_type    /* in  */,
      void*          recv_buf_p   /* out */,
      int            recv_count   /* in  */,
      MPI_Datatype   recv_type    /* in  */,
      int            src_proc     /* in  */,
      MPI_Comm       comm         /* in  */);
```

- MPI_Scatter是一对多的传递消息。但是它和广播不同，root进程向各个进程传递的消息是可以不同的。
- 散发的特点
  - Scatter执行与Gather相反的操作。
  - Root进程给所有进程(包括它自己)发送一个不同的消息，这n (n为进程域comm包括的进程个数)个消息在Root进程的发送缓冲区中按进程标识的顺序有序地存放。
  - 每个接收缓冲由三元组<RecvAddress, RecvCount, RecvDatatype>标识，所有的非Root进程忽略发送缓冲。对Root进程，发送缓冲由三元组<SendAddress, SendCount, SendDatatype>标识。

一个读取并发向量的函数

```
void Read_vector(
      double    local_a[]   /* out */,
      int       local_n     /* in  */,
      int       n           /* in  */,
      char      vec_name[]  /* in  */,
      int       my_rank     /* in  */,
      MPI_Comm  comm        /* in  */) {

   double* a = NULL;
   int i;

   if (my_rank == 0) {
      a = malloc(n*sizeof(double));
      printf("Enter the vector %s\n", vec_name);
      for (i = 0; i < n; i++)
         scanf("%lf", &a[i]);
      MPI_Scatter(a, local_n, MPI_DOUBLE, local_a, local_n, MPI_DOUBLE,
            0, comm);
      free(a);
   } else {
      MPI_Scatter(a, local_n, MPI_DOUBLE, local_a, local_n, MPI_DOUBLE,
            0, comm);
   }
}  /* Read_vector */
```

收集Gather

- 这个函数将向量的所有分量都收集到0号进程上，然后由0号进程将所有分量都打印出来。

```
int MPI_Gather(
      void*          send_buf_p  /* in  */,
      int            send_count  /* in  */,
      MPI_Datatype   send_type   /* in  */,
      void*          recv_buf_p  /* out */,
      int            recv_count  /* in  */,
      MPI_Datatype   recv_type   /* in  */,
      int            dest_proc   /* in  */,
      MPI_Comm       comm        /* in  */);
```

- 收集的特点
  - 在收集操作中，Root进程从进程域Comm的所有进程(包括它自己)接收消息。
  - 这n个消息按照进程的标识rank排序进行拼接，然后存放在Root进程的接收缓冲中。
  - 接收缓冲由三元组<RecvAddress, RecvCount, RecvDatatype>标识，发送缓冲由三元组<SendAddress, SendCount, SendDatatype>标识，所有非Root进程忽略接收缓冲。

一个打印分布式向量的函数

```
void Print_vector(
      double    local_b[]  /* in */,
      int       local_n    /* in */,
      int       n          /* in */,
      char      title[]    /* in */,
      int       my_rank    /* in */,
      MPI_Comm  comm       /* in */) {

   double* b = NULL;
   int i;
```

```
    if (my_rank == 0) {
        b = malloc(n*sizeof(double));
        MPI_Gather(local_b, local_n, MPI_DOUBLE, b, local_n, MPI_DOUBLE,
              0, comm);
        printf("%s\n", title);
        for (i = 0; i < n; i++)
           printf("%f ", b[i]);
        printf("\n");
        free(b);
    } else {
        MPI_Gather(local_b, local_n, MPI_DOUBLE, b, local_n, MPI_DOUBLE,
              0, comm);
    }
}  /* Print_vector */
```

全局聚集Allgather

- 这个函数将每个进程的send_buf_p内容串联起来，存储到每个进程的recv_buf_p参数中。
- 大部分情况下，recv_count指的是每个进程接收的数据量。

```
int MPI_Allgather(
      void*          send_buf_p   /* in  */,
      int            send_count   /* in  */,
      MPI_Datatype   send_type    /* in  */,
      void*          recv_buf_p   /* out */,
      int            recv_count   /* in  */,
      MPI_Datatype   recv_type    /* in  */,
      MPI_Comm       comm         /* in  */);
```

矩阵-向量乘法

$A = (a_{ij})$ is an $m \times n$ matrix

$\mathbf{x}$ is a vector with n components

$\mathbf{y} = A\mathbf{x}$ is a vector with m components

$$y_i = a_{i0}x_0 + a_{i1}x_1 + a_{i2}x_2 + \cdots a_{i,n-1}x_{n-1}$$

i-th component of y

Dot product of the ith row of A with x.

$$
\begin{bmatrix}
a_{00} & a_{01} & \cdots & a_{0,n-1} \\
a_{10} & a_{11} & \cdots & a_{1,n-1} \\
\vdots & \vdots & & \vdots \\
a_{i0} & a_{i1} & \cdots & a_{i,n-1} \\
\vdots & \vdots & & \vdots \\
a_{m-1,0} & a_{m-1,1} & \cdots & a_{m-1,n-1}
\end{bmatrix}
\begin{bmatrix} x_0 \\ x_1 \\ \vdots \\ x_{n-1} \end{bmatrix}
=
\begin{bmatrix}
y_0 \\
y_1 \\
\vdots \\
y_i = a_{i0}x_0 + a_{i1}x_1 + \cdots a_{i,n-1}x_{n-1} \\
\vdots \\
y_{m-1}
\end{bmatrix}
$$

串行矩阵-向量乘法伪代码

```
/* For each row of A */
for (i = 0; i < m; i++) {
    /* Form dot product of ith row with x */
    y[i] = 0.0;

    for (j = 0; j < n; j++)
        y[i] += A[i][j]*x[j];
}
```

C 语言的风格

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 & 2 & 3 \\ 4 & 5 & 6 & 7 \\ 8 & 9 & 10 & 11 \end{pmatrix}$$

stored as

0 1 2 3 4 5 6 7 8 9 10 11

矩阵-向量的串行乘法

```
void Mat_vect_mult(
        double  A[]   /* in  */,
        double  x[]   /* in  */,
        double  y[]   /* out */,
        int     m     /* in  */,
        int     n     /* in  */) {
    int i, j;

    for (i = 0; i < m; i++) {
        y[i] = 0.0;
        for (j = 0; j < n; j++)
            y[i] += A[i*n+j]*x[j];
    }
}  /* Mat_vect_mult */
```

MPI矩阵-向量乘法函数

```
void Mat_vect_mult(
      double    local_A[]  /* in  */,
      double    local_x[]  /* in  */,
      double    local_y[]  /* out */,
      int       local_m    /* in  */,
      int       n          /* in  */,
      int       local_n    /* in  */,
      MPI_Comm  comm       /* in  */) {
   double* x;
   int local_i, j;
   int local_ok = 1;
```

```
   x = malloc(n*sizeof(double));
   MPI_Allgather(local_x, local_n, MPI_DOUBLE,
         x, local_n, MPI_DOUBLE, comm);

   for (local_i = 0; local_i < local_m; local_i++) {
      local_y[local_i] = 0.0;
      for (j = 0; j < n; j++)
         local_y[local_i] += local_A[local_i*n+j]*x[j];
   }
   free(x);
}  /* Mat_vect_mult */
```

MPI的派生数据类型

派生数据类型

- 在MPI中，通过同时存储数据项的类型以及他们在内存中的相对位置，**派生数据类型**可以表示内存中数据项的任意集合。
  - 其主要思想：如果发送数据的函数知道数据项的类型以及在内存中数据项集合的相对位置，就可以在数据项被发送出去之前在内存中将数据项聚集起来。
  - 类似的，接收数据的函数可以在数据项被接收后将数据项分发到它们在内存中正确的目标地址。

Derived datatypes

- 一个派生数据类型是由一系列的MPI基本数据类型和每个数据类型的偏移所组成。

- 在梯形积分法的例子中:

Variable	Address
a	24
b	40
n	48

$$\{(\texttt{MPI\_DOUBLE}, 0), (\texttt{MPI\_DOUBLE}, 16), (\texttt{MPI\_INT}, 24)\}$$

MPI_Type create_struct

- 由这个函数创建由不同基本数据类型的元素所组成的派生数据类型：

```
int MPI_Type_create_struct(
      int              count                          /* in  */,
      int              array_of_blocklengths[]        /* in  */,
      MPI_Aint         array_of_displacements[]       /* in  */,
      MPI_Datatype     array_of_types[]               /* in  */,
      MPI_Datatype*    new_type_p                     /* out */);
```

MPI_Get_address

- 它返回的location_p是所指向的内存单元的地址。
- 这个特殊类型的MPI_Aint是整数型，它的长度足以表示系统地址。

```
int MPI_Get_address(
      void*      location_p   /* in  */,
      MPI_Aint*  address_p    /* out */);
```

MPI_Type_commit

- MPI_Type_commit 存储的是元素的MPI数据类型。它允许MPI实现为了在通信函数内使用这一数据类型，优化数据类型的内部表示。

```
int MPI_Type_commit(MPI_Datatype*  new_mpi_t_p  /* in/out */);
```

MPI_Type_free

- 当我们使用新的数据类型时，可以用MPI_Type_free 函数去释放额外的存储空间。

```
int MPI_Type_free(MPI_Datatype*  old_mpi_t_p  /* in/out */);
```

使用派生数据类型实现输入(1)

```
void Build_mpi_type(
      double*         a_p              /* in  */,
      double*         b_p              /* in  */,
      int*            n_p              /* in  */,
      MPI_Datatype*   input_mpi_t_p    /* out */) {

   int array_of_blocklengths[3] = {1, 1, 1};
   MPI_Datatype array_of_types[3] = {MPI_DOUBLE, MPI_DOUBLE, MPI_INT};
   MPI_Aint a_addr, b_addr, n_addr;
   MPI_Aint array_of_displacements[3] = {0};
```

使用派生数据类型实现输入（2）

```
    MPI_Get_address(a_p, &a_addr);
    MPI_Get_address(b_p, &b_addr);
    MPI_Get_address(n_p, &n_addr);
    array_of_displacements[1] = b_addr-a_addr;
    array_of_displacements[2] = n_addr-a_addr;
    MPI_Type_create_struct(3, array_of_blocklengths,
          array_of_displacements, array_of_types,
          input_mpi_t_p);
    MPI_Type_commit(input_mpi_t_p);
}   /* Build_mpi_type */
```

使用派生数据类型实现输入（3）

```
void Get_input(int my_rank, int comm_sz, double* a_p, double* b_p,
      int* n_p) {
   MPI_Datatype input_mpi_t;

   Build_mpi_type(a_p, b_p, n_p, &input_mpi_t);

   if (my_rank == 0) {
      printf("Enter a, b, and n\n");
      scanf("%lf %lf %d", a_p, b_p, n_p);
   }
   MPI_Bcast(a_p, 1, input_mpi_t, 0, MPI_COMM_WORLD);

   MPI_Type_free(&input_mpi_t);
}  /* Get_input */
```

MPI程序的性能评估

并行代码运行时间

- MPI_Wtime，返回从过去某一时刻开始所经历的时间

```
double MPI_Wtime(void);
```

```
double start, finish;
. . .
start = MPI_Wtime();
/* Code to be timed */
. . .
finish = MPI_Wtime();
printf("Proc %d > Elapsed time = %e seconds\n"
       my_rank, finish-start);
```

串行代码运行时间

- 计算串行代码运行时间不需要连接MPI库。

- GET_TIME函数返回从过去某一时刻开始所经历的时间

```
#include "timer.h"
. . .
double now;
. . .
GET_TIME(now);
```

串行代码运行时间

```
#include "timer.h"
. . .
double start, finish;
. . .
GET_TIME(start);
/* Code to be timed */
. . .
GET_TIME(finish);
printf("Elapsed time = %e seconds\n", finish-start);
```

MPI_Barrier

- MPI_Barrier 函数确保同一个通信子中的所有进程都完成调用改函数之前，没有进程能够提前返回。

```
int MPI_Barrier(MPI_Comm    comm    /* in */);
```

MPI_Barrier

```
double local_start, local_finish, local_elapsed, elapsed;
. . .
MPI_Barrier(comm);
local_start = MPI_Wtime();
/* Code to be timed */
. . .
local_finish = MPI_Wtime();
local_elapsed = local_finish - local_start;
MPI_Reduce(&local_elapsed, &elapsed, 1, MPI_DOUBLE,
   MPI_MAX, 0, comm);

if (my_rank == 0)
   printf("Elapsed time = %e seconds\n", elapsed);
```

矩阵-向量乘法的串行和并行程序的运行时间

comm_sz	Order of Matrix				
	1024	2048	4096	8192	16,384
1	4.1	16.0	64.0	270	1100
2	2.3	8.5	33.0	140	560
4	2.0	5.1	18.0	70	280
8	1.7	3.3	9.8	36	140
16	1.7	2.6	5.9	19	71

(Seconds)

加速比

$$S(n,p) = \frac{T_{\text{serial}}(n)}{T_{\text{parallel}}(n,p)}$$

效率

$$E(n,p) = \frac{S(n,p)}{p} = \frac{T_{\text{serial}}(n)}{p \times T_{\text{parallel}}(n,p)}$$

矩阵-向量乘法的加速比

comm_sz	Order of Matrix				
	1024	2048	4096	8192	16,384
1	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0
2	1.8	1.9	1.9	1.9	2.0
4	2.1	3.1	3.6	3.9	3.9
8	2.4	4.8	6.5	7.5	7.9
16	2.4	6.2	10.8	14.2	15.5

矩阵-向量乘法的效率

comm_sz	Order of Matrix				
	1024	2048	4096	8192	16,384
1	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00
2	0.89	0.94	0.97	0.96	0.98
4	0.51	0.78	0.89	0.96	0.98
8	0.30	0.61	0.82	0.94	0.98
16	0.15	0.39	0.68	0.89	0.97

可扩展性

- 如果问题的规模以一定的速率增大，但效率没有随着进程数的增加而降低，那么就可认为程序是可扩展的。

可扩展性

- 如果程序可以在不增加问题的规模的前提下维持恒定的效率，那么此程序称为强可扩展的。

- 当问题的规模增加，通过增大进程/线程个数来维持恒定的效率的程序称为弱可扩展的。

并行排序算法

排序

- n 个键值， p = comm sz个进程 .
- n/p 个键值分配给每个进程。
- 不对哪些键值分配到哪个进程上加以限制。
- 结果：
  - 当算法结束时：
    - 每个进程上的键值应该以升序的方式存储。
    - 如果 $0 \le q < r < p$, 则分配给进程q的每一个键值应该小于等于分配给进程r的每一个键值。

串行冒泡排序

```
void Bubble_sort(
        int  a[]  /* in/out */,
        int  n    /* in     */) {
    int list_length, i, temp;

    for (list_length = n; list_length >= 2; list_length--)
        for (i = 0; i < list_length-1; i++)
            if (a[i] > a[i+1]) {
                temp = a[i];
                a[i] = a[i+1];
                a[i+1] = temp;
            }

}   /* Bubble_sort */
```

奇偶交换排序

- 这个算法由一系列阶段组成：
- 在偶数阶段，比较-交换由以下数对执行:

$$(a[0],a[1]),(a[2],a[3]),(a[4],a[5]),\ldots$$

- 在奇数阶段，比较-交换由以下数对执行:

$$(a[1],a[2]),(a[3],a[4]),(a[5],a[6]),\ldots.$$

示例

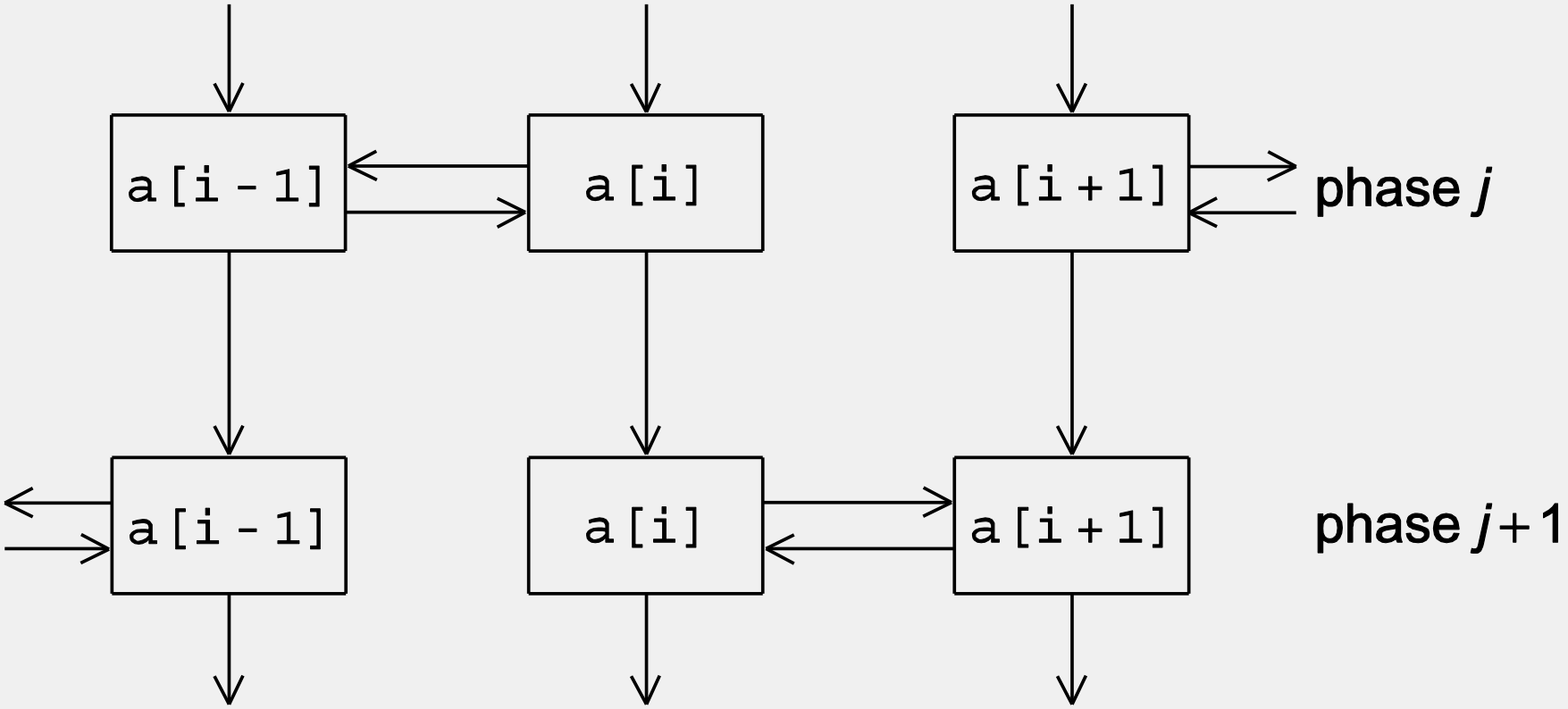
Start: 5, 9, 4, 3

1. Even phase: compare-swap (5,9) and (4,3)
   getting the list 5, 9, 3, 4
2. Odd phase: compare-swap (9,3)
   getting the list 5, 3, 9, 4
3. Even phase: compare-swap (5,3) and (9,4)
   getting the list 3, 5, 4, 9
4. Odd phase: compare-swap (5,4)
   getting the list 3, 4, 5, 9

串行奇偶交换排序

```
void Odd_even_sort(
        int  a[]  /* in/out */,
        int  n    /* in     */) {
   int phase, i, temp;

   for (phase = 0; phase < n; phase++)
      if (phase % 2 == 0) { /* Even phase */
         for (i = 1; i < n; i += 2)
            if (a[i-1] > a[i]) {
               temp = a[i];
               a[i] = a[i-1];
               a[i-1] = temp;
            }
      } else { /* Odd phase */
         for (i = 1; i < n-1; i += 2)
            if (a[i] > a[i+1]) {
               temp = a[i];
               a[i] = a[i+1];
               a[i+1] = temp;
            }
      }
}  /* Odd_even_sort */
```

一次奇偶排序中任务间的通信



用a[i] 来标记确定a[i]值的任务.

并行奇偶交换排序

Time	Process			
	0	1	2	3
Start	15, 11, 9, 16	3, 14, 8, 7	4, 6, 12, 10	5, 2, 13, 1
After Local Sort	9, 11, 15, 16	3, 7, 8, 14	4, 6, 10, 12	1, 2, 5, 13
After Phase 0	3, 7, 8, 9	11, 14, 15, 16	1, 2, 4, 5	6, 10, 12, 13
After Phase 1	3, 7, 8, 9	1, 2, 4, 5	11, 14, 15, 16	6, 10, 12, 13
After Phase 2	1, 2, 3, 4	5, 7, 8, 9	6, 10, 11, 12	13, 14, 15, 16
After Phase 3	1, 2, 3, 4	5, 6, 7, 8	9, 10, 11, 12	13, 14, 15, 16

伪代码

```
Sort local keys;
for (phase = 0; phase < comm_sz; phase++) {
   partner = Compute_partner(phase, my_rank);
   if (I'm not idle) {
      Send my keys to partner;
      Receive keys from partner;
      if (my_rank < partner)
         Keep smaller keys;
      else
         Keep larger keys;
   }
}
```

Compute_partner

```
if (phase % 2 == 0)          /* Even phase */
   if (my_rank % 2 != 0)       /* Odd rank */
      partner = my_rank - 1;
   else                        /* Even rank */
      partner = my_rank + 1;
else                         /* Odd phase */
   if (my_rank % 2 != 0)       /* Odd rank */
      partner = my_rank + 1;
   else                        /* Even rank */
      partner = my_rank - 1;
if (partner == -1 || partner == comm_sz)
   partner = MPI_PROC_NULL;
```

MPI程序的安全性

- MPI标准允许MPI_Send以两种不同的方式来实现：
  - 简单地将消息复制到MPI设置的缓冲区并返回；
  - 或者直到对应的MPI_Recv出现前都阻塞。

- 许多MPI函数都设置了使系统从缓冲到阻塞间切换的阀值。
  - 即相对较小的消息就交由MPI_Send缓冲。
  - 但对于大型数据就选择阻塞模式。

- 如果每个进程都阻塞在MPI_Send上，则没有进程回去调用MPI_Recv，此时程序就会发生死锁。
  - 每个进程都在等待一个不会发生的事件发生。

- 依赖于MPI提供的缓冲机制是不安全的。
  - 这样的程序在运行一些输入集时没有问题，但有可能在运行其他输入集时导致崩溃或者挂起。

引出几个问题！

- 怎么才能说一个程序时安全的？
- 怎样修改并行奇偶交换排序程序中的通信过程，使其安全？

MPI_Ssend

- MPI标准提供的一个函数来替代MPI_Send。
- 这个额外的字母“s”代表同步，保证了直到对应的接收开始前，发送端一直阻塞。

```
int MPI_Ssend(
      void*          msg_buf_p      /* in */,
      int            msg_size       /* in */,
      MPI_Datatype   msg_type       /* in */,
      int            dest           /* in */,
      int            tag            /* in */,
      MPI_Comm       communicator   /* in */);
```

重构通信

```
MPI_Send(msg, size, MPI_INT, (my_rank+1) % comm_sz, 0, comm);
MPI_Recv(new_msg, size, MPI_INT, (my_rank+comm_sz-1) % comm_sz,
      0, comm, MPI_STATUS_IGNORE.
```

```
if (my_rank % 2 == 0) {
   MPI_Send(msg, size, MPI_INT, (my_rank+1) % comm_sz, 0, comm);
   MPI_Recv(new_msg, size, MPI_INT, (my_rank+comm_sz-1) % comm_sz,
         0, comm, MPI_STATUS_IGNORE.
} else {
   MPI_Recv(new_msg, size, MPI_INT, (my_rank+comm_sz-1) % comm_sz,
         0, comm, MPI_STATUS_IGNORE.
   MPI_Send(msg, size, MPI_INT, (my_rank+1) % comm_sz, 0, comm);
}
```

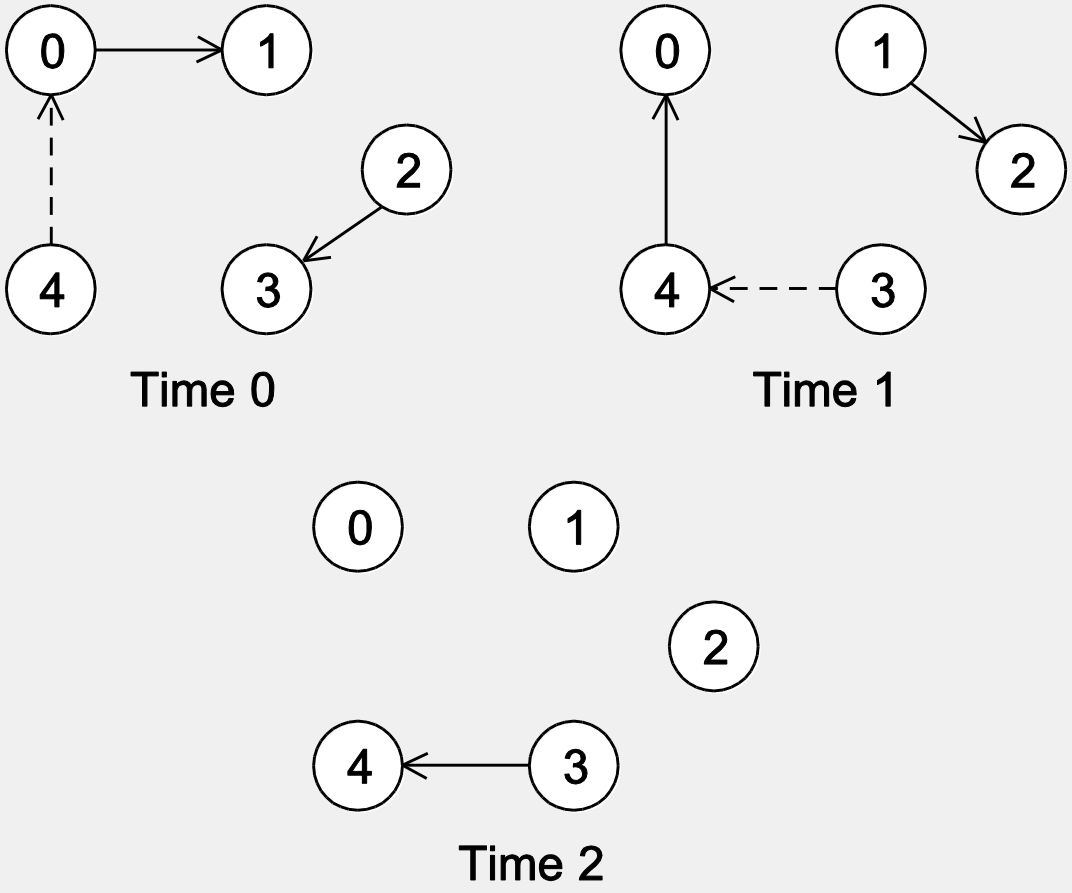
MPI_Sendrecv

- MPI提供的自己调度的方法。
- 他会分别执行一次阻塞式消息发送和一次消息接收。
- dest 和source 参数可以不同也可以相同。
- 优点在于，MPI库实现了通信调度，使程序不再挂起或崩溃。

MPI_Sendrecv

```
int MPI_Sendrecv(
      void*          send_buf_p      /* in  */,
      int            send_buf_size   /* in  */,
      MPI_Datatype   send_buf_type   /* in  */,
      int            dest            /* in  */,
      int            send_tag        /* in  */,
      void*          recv_buf_p      /* out */,
      int            recv_buf_size   /* in  */,
      MPI_Datatype   recv_buf_type   /* in  */,
      int            source          /* in  */,
      int            recv_tag        /* in  */,
      MPI_Comm       communicator    /* in  */,
      MPI_Status*    status_p        /* in  */);
```

5个进程之间的安全通信



并行奇偶排序算法中的Merge_low函数

```
void Merge_low(
        int  my_keys[],      /* in/out     */
        int  recv_keys[],    /* in         */
        int  temp_keys[],    /* scratch    */
        int  local_n         /* = n/p, in  */) {
   int m_i, r_i, t_i;

   m_i = r_i = t_i = 0;
   while (t_i < local_n) {
      if (my_keys[m_i] <= recv_keys[r_i]) {
         temp_keys[t_i] = my_keys[m_i];
         t_i++; m_i++;
      } else {
         temp_keys[t_i] = recv_keys[r_i];
         t_i++; r_i++;
      }
   }

   for (m_i = 0; m_i < local_n; m_i++)
      my_keys[m_i] = temp_keys[m_i];
}  /* Merge_low */
```

并行奇偶排序算法的运行时间

Processes	Number of Keys (in thousands)				
	200	400	800	1600	3200
1	88	190	390	830	1800
2	43	91	190	410	860
4	22	46	96	200	430
8	12	24	51	110	220
16	7.5	14	29	60	130

(times are in milliseconds)

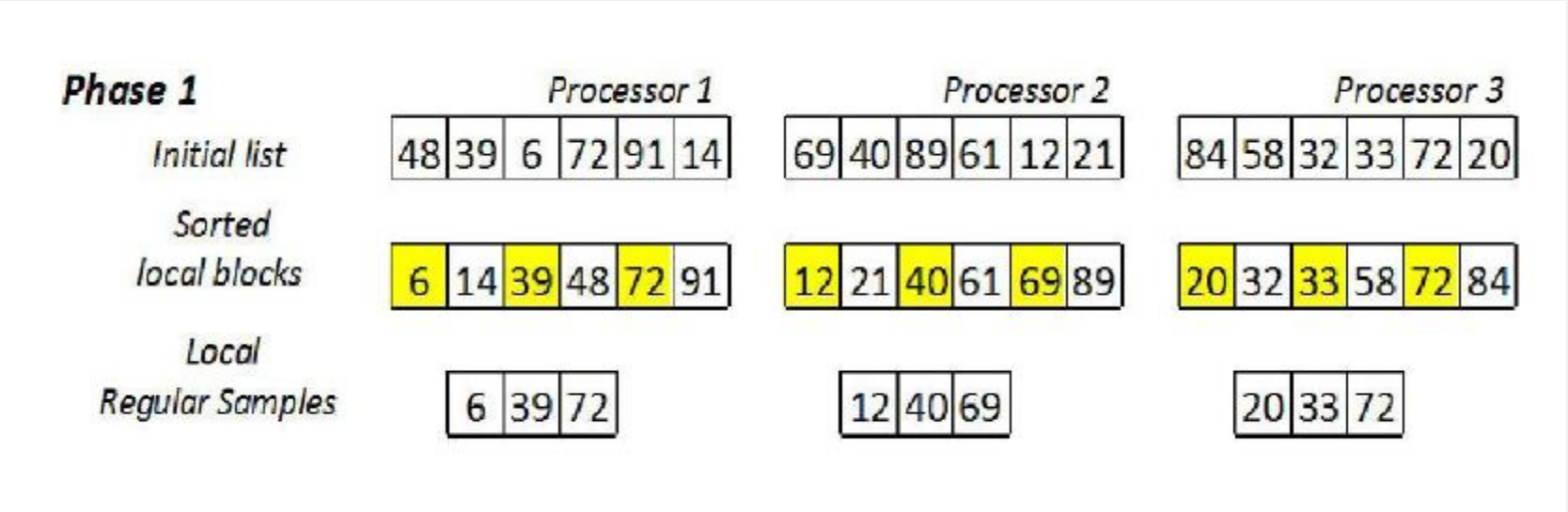
并行正则采样排序

并行正则采样排序 PSRS(Parallel Sorting by Regular Sampling)

- 一种基于均匀划分的负载均衡的并行排序算法；
- 这种负载均衡是相对的。

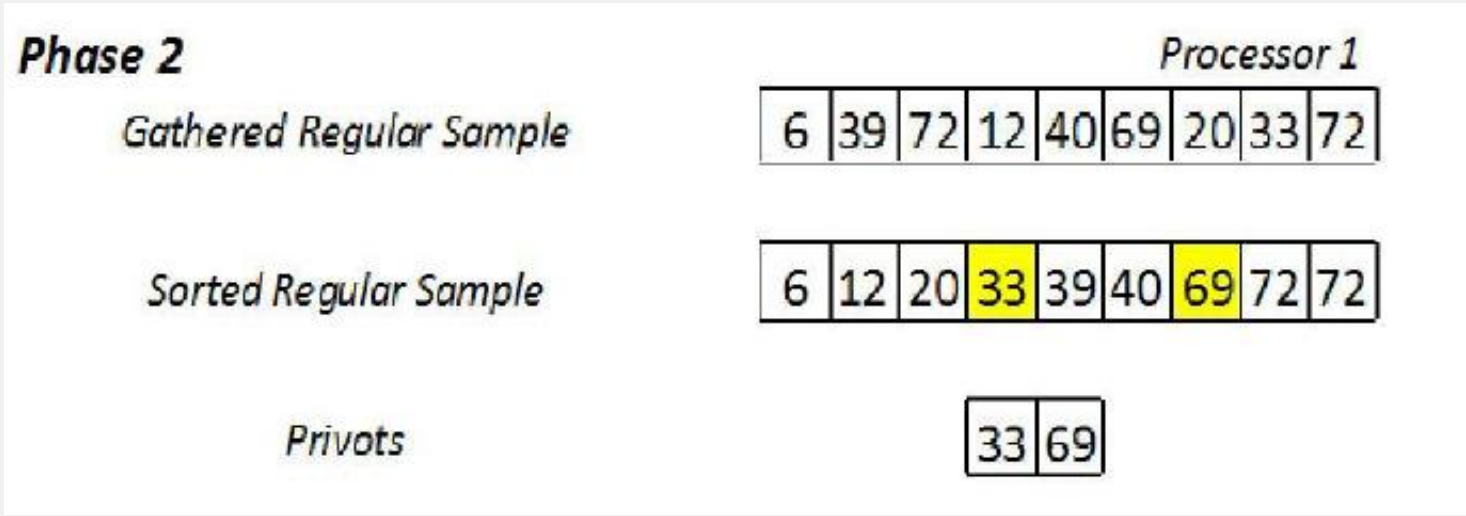
并行正则采样排序

- 第一步：本地数据排序
  - 本地数据排序；
  - 按进程数N等间隔采样。



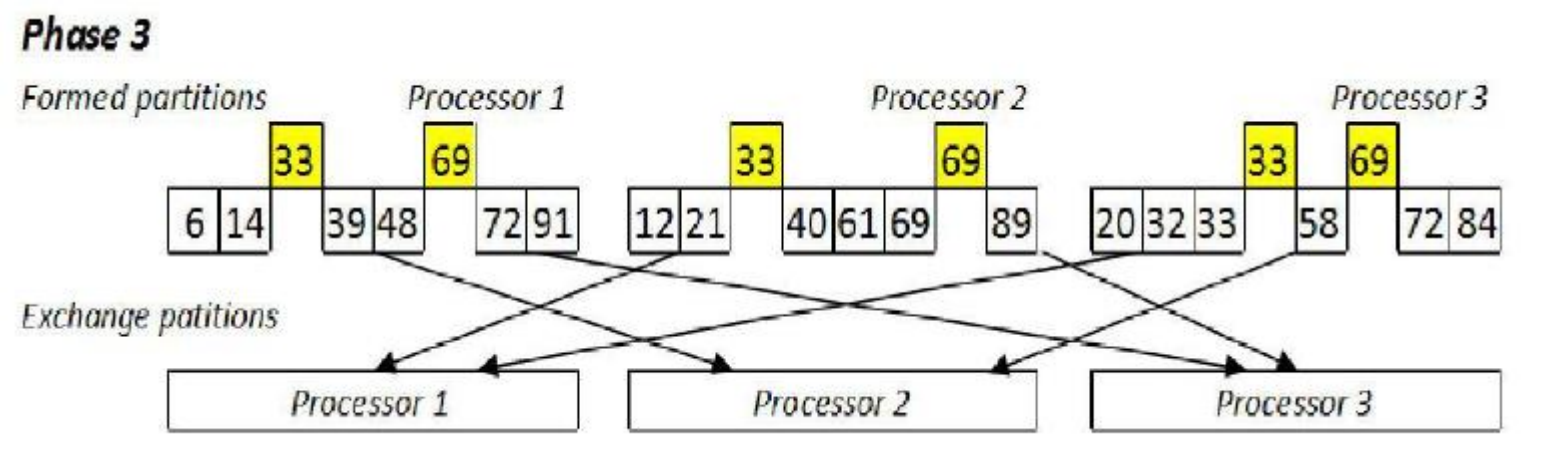
并行正则采样排序

- 第二步：获得划分主元
  - 一个进程收集样本并对所有样本进行排序；
  - 按进程数N对全体样本等间隔采样；
  - 散发最终样本，即主元。



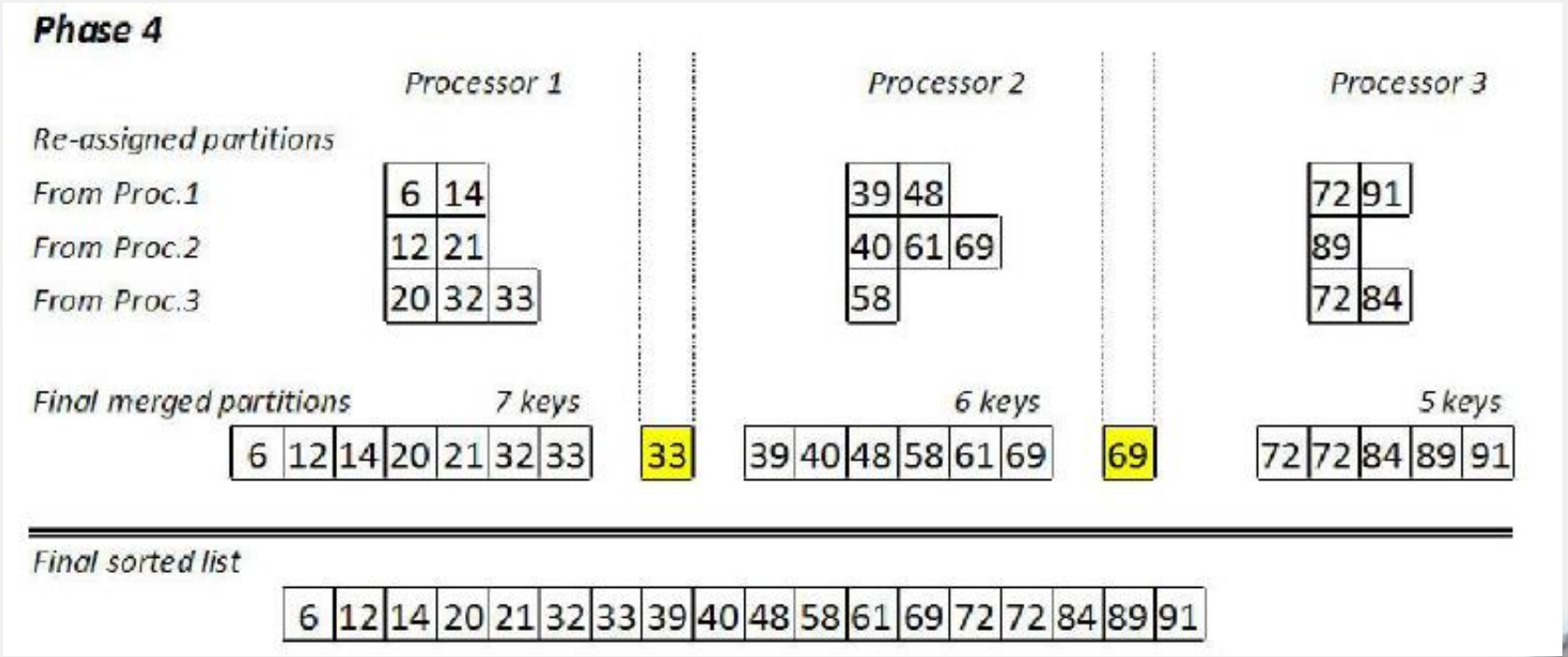
并行正则采样排序

- 第三步：交换数据
  - 交换本地数据划分后的分块；
  - 一个全互换过程。（MPI_Alltoallv）



并行正则采样排序

- 第四步：归并排序
  - 合并得到的分块；
  - 对最终的本地数据进行排序。



并行正则采样排序

- 评价PSRS：
  - 一个好的串行排序算法的时间复杂度为$O(nlogn)$那么，容易证得PSRS算法的时间复杂度在$n>p^3$时为$O(\frac{n}{p}\log n)$；
  - 仍有负载不均匀，在归并排序中排序时间很可能会不均匀。

本章小结

- **消息传递接口**（MPI）：是一个可以被C, C++和Fortran程序调用的函数库。
- **通信子**：一组进程的集合，该集合中的进程之间可以相互发送消息。
- **单程序多数据流**（SPMD）：许多并行程序通过根据不同的进程号转移到不同的分支语句。

- 大多数串行程序时**确定性的**：若用同一个程序运行相同的数据得到的结果是一样的。
- 大多数并行程序时**非确定性的**：同样的输入会得到不同的输出。
- **集合通信**：不同于只涉及两个进程的MPI_Send和MPI_Recv，它涉及一个通信子中的所有进程。

- **墙上时钟时间**：即运行一段代码所需要的时间，它包括用户级代码，库函数，用户代码调用系统函数的运行时间以及空闲时间。
- **加速比**：串行运行时间与并行运行时间之比。
- **效率**：加速比除以进程总数。.

- **可扩展的**：如果增加问题的规模(n)，随着p的增加，效率却没有递减，则称该并行程序时可扩展的。
- **不安全的**：MPI_Send既可以阻塞也可以缓冲输入。