并行计算

2022 年 5 月 8 日

目录

1 矩阵乘并行计算

1.1 矩阵基本性质

1.1.1 加法

可交换顺序、可分配可结合、A+(-A)=O

1.1.2 数乘

可交换顺序、可分配可结合。

1.1.3 乘法

不可交换顺序、可分配可结合。

1.1.4 转置

$(A+B)^T = A^T + B^T$
$(kA)^T = kA^T$
$(AB)^T = B^T A^T$
$(AT)^T = A$

1.1.5 共轭

$(A)_{i,j} = \overline{A_{i,j}}$
矩阵内实部不变，虚部取负。

1.1.6 注意

$(A+B)(A+B) = A^2 + AB + BA + B^2$

1.1.7 相关定义

- 行列式：是一个函数，其定义域为 det 的矩阵 A，取值为一个标量，写作 det(A) 或 |A|，A 为 n×n 的正方形矩阵。
- 余子式：n 阶行列式 D 中，把元素 a_{oe} 所在的第 o 行和第 e 列划去后，留下来的 n-1 阶行列式叫做元素 a_{oe} 的余子式，记作 M_{oe}。

  k 阶余子式：行列式 D 中划去了 k 行 k 列，划去的交叉部分组成子式 A（即元素），称剩下的为行列式 D 的 k 阶子式 A 的余子式。
- 代数余子式：将余子式 M_{oe} 再乘以-1 的 o+e 次幂记为 A_{oe}，A_{oe} 叫做元素 a_{oe} 的代数余子式。

  同理 k 阶代数余子式。此时 o、e 为行和列的序号累加。
- 特征值：对于 n 阶方阵 A，如果存在数 m 和非零 n 维列向量 x，使得 Ax=mx 成立，则称 m 是 A 的一个特征值（characteristic value）或本征值（eigenvalue）。
- 特征向量：对于一个给定的线性变换，它的特征向量（本征向量或称正规正交向量）v 满足经过该线性变换之后，得到的新向量仍然与原来的 v 保持在同一条直线上。
- 迹：n 阶方阵 A 的对角元素之和称为矩阵 A 的迹 (trace)，记作 tr(A)。
- 正定矩阵：n 阶方阵 A，如果对任何非零向量 z，都有 $z^TAz > 0$，其中 z^T 表示 z 的转置，就称 M 为正定矩阵。大于等于 0 则为半正定矩阵，小于 0 则为负定矩阵。

1.1.8 初等变换

初等变换：设 A 是 m×n 矩阵，进行倍乘、互换、倍加行（列）变换，统称为初等变换。包括：

- 倍乘：用非零常数 k 乘 A 的**某行 (列)** 的每个元素。
- 互换：互换 A 的某两行（列）的位置。
- 倍加行（列）：将 A 的某行（列）元素的 k 倍加到另一行（列）。

初等矩阵：单位矩阵经一**次**初等变换得到的矩阵称为初等矩阵。

等价矩阵：矩阵 A 经过有限次初等变换变成矩阵 B，则称 A 与 B 等价（可能有多个矩阵与 A 等价，其中等价的最简矩阵被称为 A 的等价标准型）

性质：用初等矩阵 P 左乘（右乘）A，其结果 PA(AP) 相当于对 A 作相应的初等行（列）变换。

1.2 传分块统方法

对于矩阵 a 被分成 2×2 四块的情况：

$$\begin{bmatrix} a_{0,0} & a_{0,1} \\ a_{1,0} & a_{1,1} \end{bmatrix}$$

有：$c_{0,0} = a_{0,0} * b_{0,0} + a_{0,1} * b_{1,0}$

该情况下，每个线程（计算块）中都存储一行 A 和一列 B（矩阵块），（又要传递又要储存）大大增加了存储量，存储量由 O（n 平方）—>O(n 立方)

1.3 Cannon 方法

该算法在每次计算完成后让计算块内的数据有规律的传递移动，记为 M×M 矩阵，有：

1. A 总体上子块从右往左循环移动 1 步；$a_{i,j} -> a_{i,j-1}$
2. B 总体上子块从下往上循环移动 1 步；$b_{i,j} -> b_{i-1,j}$
3. 每个计算块正常相乘，并存入 C 块中，$c_{i,j} = c_{i,j} + c$；
4. 重复上述过程，累计 M 次；

最终得到相乘的结果。

2 线性方程组的并行求解

2.1 直接求解法

2.1.1 LU 分解算法

对于矩阵形式的线性方程组：Ax=b，如果 A 满足为方阵且可逆，则 A 可以被分解为下三角矩阵 L(Lower Triangle Matrix) 和上三角矩阵 U(Uppder Triangle Matrix) 的乘积。即：

PA = LU

得：LUx=Pb

则方程可以被分解为 (L)y=(Pb) 和 (U)x=(y)，通过两个相似的步骤依次求解 y 和 x 即可。

基本原理是利用高斯消元，原理是在求解方程组 Ax=b 时将系数矩阵 A 和右向量 b 组成增广矩阵，对其进行行的初等变换，最终得到上三角初等矩阵，则自下而上可求得各个 x。

在不带入 b 的情况下，对 A 矩阵的初等变换操作可以以置换矩阵 E_{ij} 来表示，表示交换第 i 行和第 j 行。而此矩阵乘以一个置换矩阵 P 即可化为下三角形式。

置换矩阵 P：

对于单位矩阵 E，交换其内部的行列，即可得到置换矩阵，与矩阵相乘时，对单位矩阵的操作（交换、乘加、乘（但仅交换属于置换矩阵））都会作用到相乘的矩阵上。

2.1.2 Gauss 直接消去

对矩阵：$\begin{bmatrix} a_{1,1} & a_{1,2} & \dots & a_{1,n} \\ a_{2,1} & a_{2,2} & \dots & a_{2,n} \\ \dots & & & \\ a_{m,1} & a_{m,2} & \dots & a_{m,n} \end{bmatrix}$

- 从上往下，第二行减去乘以系数 $a_{2,1}/a_{1,1}$ 的第一行：

  $a_{2,k} = a_{2,k} - a_{1,k} * a_{2,1}/a_{1,1}$

  更新第二行的值 $a_{2,k}$。

- 第三行减去乘以系数 $a_{3,1}/a_{1,1}$ 的第一行，减去乘以系数 $a_{3,2}/a_{2,2}$ 的第二行：

  $a_{3,k} = a_{3,k} - a_{1,k} * a_{2,1}/a_{1,1}$

  $a_{3,k} = a_{3,k} - a_{2,k} * a_{3,2}/a_{2,2}$

- 对于第 i 行的处理，第 j 列元素有：

  $a_{i,j} = a_{i,j} - \sum_{k=1}^{k<i} (a_{k,j} * a_{i,k}/a_{k,k})$

  第 k 行乘的因子始终为：$a_{i,k}/a_{k,k}$

- 最终得到上三角初等矩阵 U。L 和 P 通过反推变换过程可以得到。

- 对向量 b 做相同变换，则可从下而上，逐渐求解出各个未知数。

列主元 Gauss 消去方法：

- 类似于直接方法，但避免了 $a_{j,j}$ 为 0 时无法消元的情况。将从第 j 列的 $a_{j,j}$ 及其以下的各元素中选取绝对值最大的元素，然后通过行变换将它交换到主元素 $a_{j,j}$ 的位置上，再进行消元。
- 对于第 j 列，首先找到该列中最大值的所在行 l($l \geq j$ 即可)，记最大值为 $a_{l,j}$。
- 然后将第 j 列第 j 行即主元 $a_{j,j}$ 的值，与 $a_{l,j}$ 进行对比：

  如果 $a_{l,j}$ 等于 0 就直接退出（该矩阵无法求解）；

  如果不相等，则将第 j 行与第 l 行进行交换，使第 j 列最大值在主元位置：$swap(a_{l,j}, a_{j,j})$。
- 对于$i > j$的每一行 i(k 表示列)，执行操作 $a_{ik} = a_{ik} - a_{ik} \times a_{ij}/a_{jj}$，注意 j 始终指当前的第 j 列。
- 然后依次处理$0 \leq j < n$各列。

2.1.3 Gauss 消去并行计算方法

- 并行部分以列为块分割，传递的是因子 $f_{i-j} = a_{i,j}/a_{j,j}$(使相邻块加乘相同，表示第 i 行用的（减去）第 j 行乘的因子)；以及为了定位行的交换，还需要传递最大值所在行 l。
- 并行部分只计算落在当前线程列区间内的列的因子，并计算区间内列的交换和加乘。

  设并行区间为 [j0,j1]、行列式为 m*m 大小。

  如果列在区间内：直接计算因子 f_{i-j}，并向下一个线程发送因子 ($i \subseteq [j0, j1], j \subseteq [j0+1/j1+1, m]$)，(因子**包括之前线程传来**的，反正传总的就行，没写的也是 0) 和 l。

  如果列在区间外 (指小于区间)，就接受对应列的因子和 l。大于也可，反正都是 0。

  最终得到区间内需要的所有的因子和 l。
- 利用因子和 l，先按顺序进行所有的列交换，然后按顺序对行加乘运算。最终得到上三角矩阵。

三角矩阵的并行求解：

以下三角矩阵为例：步骤：

$$\begin{bmatrix} a_{1,1} & 0 & 0 & ... & 0 \\ a_{2,1} & a_{2,2} & 0 & ... & 0 \\ a_{3,1} & a_{2,3} & a_{3,3} & ... & 0 \\ ... & & & & \\ a_{m,1} & a_{m,2} & a_{m,3} & ... & a_{m,n} \end{bmatrix}$$

- 并行的部分为列，但出于处理器负载均衡的考虑，每一个并行块并不是相邻的若干列，而是分开的，类似于 123，123，123 这样的交替排列，每一组大小为 P 列 (等于并行的数量)，称为卷帘。
- 并行部分原理：从 k=0 列开始：
- 如果属于第一个线程，就使 $u_i = b_i$(行 $i \subseteq [0, n-1]$)，并使 $v_i = 0$(行 $i \subseteq [0, p-2]$)。

  否则使 $u_i = 0$，行范围同上。

  (即只在第一个线程处对 u 赋右值、对 v 赋初值 0)
- 判断属于第 myid 线程，i 从 myid 开始增加，对每一个线程内的第 i 行 (0 到 p-1)，i 以 p 为步长递增，直到最后 n:

  $for \quad i = myid \quad step \quad p \quad to \quad n-1$
- 在 i=0 的情况下，不接受数据；否则接收 n 维向量 v_{recv}。
- 计算 $x_k = (u_i + v_0)/a_{ik}$。

  整个 0 到 p-1 只有这一行即 k 行的 x 是求的，剩下的由接下来的线程求。
- 更新传入的 v 向量：

  $v_j = v_{j+1} + u_{i+j+1} - a_{i+j+1} * x_k$, j=0,...,p-3

  $v_{p-2} = u_{i+p-1} - a_{i+p-1} * x_k$, 类似于 j=p-2(改成 p-1?)

  j 在这里指的是每一个 i 下，对应的行数，随 i 的变化 v 向量不断更新。
- 向下一线程发送 v 向量 v_{send}。

- 更新 [i+p,u-1] 行范围内的 u 向量：

  $u_j = u_j - a_{jk} * x_k$, j=i+p,...,n-1

- k=K+1。

- 继续循环 i，最终完成全部求解。每次循环只处理一列!!

- 注意：

  - v 用于将本线程的计算结果对接下来的方程的影响传递给其他线程。大小取决于线程总数目。每次循环时都会变化，由新计算出的解来更新。

  - 其每次循环计算 P 次，恰好到下一个本线程之前。

  - 注意在 v 的更新中，更新后的 v_0 指的是当前的 k 对应的 k+1 行，即迭代更新。但注意其中 u(old) 的更新同样采用了迭代的方法，在继承下一行 v_j 的同时，有引入了当前线程的 u，而最下行的 v 则并没有添加新的 u，也就是说在下次循环到本线程时，v 向量所有的 u 都不是本线程的了，因此在下一次循环到本线程时，计算 x 时仍然需要加 u。（但这样设计是因为 v 大小只为一个循环的，只能考虑这么多的 $a_i * x_i$ 计算，到下一个循环时需要重新计算 $a_{i+p} * x_{i+p}$）只含有当前线程计算的全部结果对方程的影响。因此在下一个线程接收到这个数据时，并不包括本线程之前的所得解的影响，因此在 x 计算公式中可以看到，加上了本线程储存的 u(new，用上次计算出的 x 更新过)。

  - u 表示未计算的所有行方程 $d + bx = c - a$ 中的 c-a 项，每次计算出一个 x_{k-1} 值后，就会对 u 进行更新，未解行 i 的方程（之后的方程）全部减去 $x_{k-1} * a_{ik}$。

  - u 在初始情况下即第一个线程时被初始赋值为 b，即为方程右值。

  - u 仅用于标记线程内部所得解对 c-a 的影响，外部影响必须全部通过传递的 v 得到。

2.2 迭代解法

可以对每一行的方程迭代部分进行划分，每一个计算块处理若干行的迭代方程。

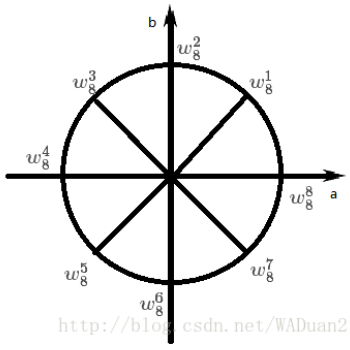
3 FFT 并行算法

3.1 复数基本知识

- 复数乘法的在复平面中表现为辐角相加，模长相乘；

  即 $(a_1, \theta_1) * (a_2, \theta_2) = (a_1 * a_2, \theta_1 + \theta_2)$

- 单位根：复数 w 满足 $w^n = 1$，称为 n 次单位根。如图所示：



总 n 次第 m 个根记为 w_n^m，其中 n 为 2 的整数倍，则满足性质：

$w_n^m = -w_n^{m+n/2}$

3.2 快速傅氏变换 FFT 原理

3.2.1 物理意义

傅里叶变换：

对于周期函数，是将 $f(t)$ 分解为无数个**不同频率**、**不同幅值**的正、余弦信号。用频谱函数表示，自变量是频率 ω，因变量是幅值。函数是离散的，自变量都是基频 ω_0 的整数倍。

对于非周期函数，则是求频谱密度函数，自变量是 ω ，因变量是信号幅值在频域中的分布密度，即单位频率信号的强度。

可以将频谱函数和频谱密度函数类比为离散概率分布和概率密度函数。

快速傅氏变换：

是离散傅氏变换的快速算法，是对离散傅立叶变换的改进。可用于加速多项式的乘法，将复杂度从 $\Theta(n^2)$ 优化为 $\Theta(n \log n)$。

3.2.2 DFT

对于连续的傅里叶变换，已知：

$F(f) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(t)e^{-j2\pi ft}dt$

其目的是得到信号的频谱密度函数 (t->w(f))，DFT 就是 t 和 f 都为离散版的傅里叶变换。

由于计算机也只可能计算出有限个频率上对应的幅值密度，因此最终也需要转为离散的情况。转化步骤：

- 采样：

  利用狄拉克函数的性质：

  $\int_{-\infty}^{\infty} \delta(t-t_0)f(t)\,dx = f(t_0)$

  能够筛选出 f(t) 在 t_0 时刻的函数值 $f(t)$)，从而采样 t_0 点，记采样周期为 T_s，并认为采样附近函数值相等，则 f(t) 可近似为：

  $f_s = \sum_{n=-\infty}^{\infty} f(t)\delta(t-nT_s)$

- 时域离散化：

  对采样结果进行傅里叶变换，使时域为无限大求和形式，即：

  $F(\omega) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} f(nT_s)e^{-j\omega nT_s}$

  即每一个 ω 点的值 $F(\omega)$ 都是由无数个取样点的和组成，且只能得到指定位置的点的值 $(k\omega)$。

- 频域离散化：

  选取有限的 N 个时刻 T，采样间隔同为 T_s，求和只求范围内的，则可求的 k 个点的 F 值为：

  $F[k] = \frac{1}{N}\sum_{n=0}^{N-1} f[n]e^{-j\frac{2\pi}{N}kn}$　　k=0,1,2,...,N-1(表示取样点)

  其中 $F[k] = F(k\omega_0)T_s = F(\omega_k)T_s$ 表示频域，

  $f[n] = f(nT_s) = f(t_n)$ 表示时域。

  即得到频谱函数 $F[k]$，表示的是 $k\omega_0$ 时刻信号幅值大小。

- 替代：取样点总数 N->n, 当前取样点数 n->j, 复数标志 j->i。得：

  $F[k] = \frac{1}{n}\sum_{j=0}^{n-1} f[j]e^{-\frac{2\pi ijk}{n}}$　　k=0,1,2,...,n-1

  记$y_k = F(\omega_k) * nT_s$，$x_j = f(t_j)$，则上式可以化为：

$y_k = \sum_{j=0}^{n-1} x_j e^{-\frac{2\pi i j k}{n}}$　　k=0,1,...,n-1

k 是大循环，j 是小循环。

- 注意：该方法的时间复杂度为 $\Theta(n^2)$。

3.2.3 FFT

用于在 DFT 的基础上，减少其复杂度。
基本原理：

- 记 $\omega(n) = e^{-\frac{2\pi i}{n}}$，则 $\omega(n)^k$ 为方程 $x^n = 1$ 的第 k 根。上式化为：

  $y_k = \sum_{j=0}^{n-1} x_j \omega(n)^{kj}$　　k=0,1,...,n-1

- 同样有性质成立：

  性质 1：$\omega(n)^{2k} = \omega(n/2)^k$ 不同于：$[\omega(n)^k]^2 = \omega(2n)^k$

  性质 2：$\omega(n)^{kn} = 1$

  性质 3：$\omega(n)^{kn/2} = -1$

  性质 4：$\omega(n)^k = \omega(n)^{k+n} = -\omega(n)^{k+n/2}$

- 则可利用这些性质化简 DFT 方程。

  把 $\omega(n)^j$ 视为整体，首先考虑单个方程的化简。(化简内循环 j)

  将其拆分成奇数和偶数两部分相加，有：

  $y_k = \sum_{j=0}^{n/2-1} x_{2j} \omega(n)^{2jk} + \sum_{j=0}^{n/2-1} x_{2j+1} \omega(n)^{(2j+1)k}$

  记 n=2m，利用性质 1 和 4，化简为：

  $y_k = \sum_{j=0}^{m-1} x_{2j} \omega(m)^{jk} + \omega(n)^k \sum_{j=0}^{m-1} x_{2j+1} \omega(m)^{jk}$

- 考虑方程间的化简：(化简大循环 k)

  由性质 4：

  $(\omega(m)^{k+m})^j = \omega(m)^{kj}$、$(\omega(n)^{k+m})^j = (\omega(n)^{k+n/2})^j = -\omega(n)^{kj}$

  因此可得 y_{k+m} 的表达式与 y_k 几乎一样，区别仅在于第二部分的 $\omega(n)^{k+m}$ 由于对应方程级数仍然为 n，因此变化为 $-\omega(n)^k$。

  最终得到：

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

可记为：

$$\begin{cases} y_k = G(x^2) + xH(x^2) \\ y_{k+m} = G(x^2) - xH(x^2) \end{cases}$$

注意其中的 x 实际上指的是 $\omega(m)$，而非前式的 x。

也就是说，只要能够得到 y_k，就一定能够得到 y_{k+m}。因为每一个 m、k 下，H 和 G 总是相等的。

- 分治方法：

  完整的分治过程不仅包括利用 k+m 与 k 的关系不断对方程组进行减半的拆分，还包括对方程内的不同指数的项按奇偶进行拆分。

  对于 n=2m 的划分可以一直进行下去，但由于每一次方程数目减半，方程内也需要继续进行划分以减少系数，同时每一行 y 的表达式增加，直到最简单的形式：H 和 G 中不含有 x 即 $y = G + xH$。

  使 n=n/2,m=n/2。只对 y_k 处理，然后对 G 和 H 分别建立方程 $y_{k'} = G(x^2)$，$y_{k''} = H(x^2)$，有 $y_{k'} + y_{k''} = y_k$。由于 G 和 H 在形式上是完全一样的，因此处理步骤相同。以 $y_{k'}$ 为例，使用 x 替代 x^2(利用性质 1 恰好使上一步的 $\omega(m)$ 中的 m 减小一半，对应新的 m)，然后就可以按照前文的步骤，将奇部取出 x，即 $y_{k'} = G'(x^2) + xH'(x^2)$。然后以此类推。

- 复杂度：由于对于个点 n 而言，一共需要在 $n^{0.5}$ 个位置建立方程求解 (m 对应的位置才需要)，而每一次需要进行 n 次乘法 (x 与 ω 相乘)，因此总的复杂度量级为 $nlog_2(n)$。

- 注意：方程数目或多项式系数 +1 必须为 2^n 次方，否则需要补零。

- 注意：可见求解中需要计算全部的 $\omega(m)^{kj}$，m=2,4,...,n/2、k=0,1,...,n-1。但利用性质 1，k 计算到 n/2-1 就可以了。

3.3 多项式乘法与 FFT

3.3.1 多项式的表示方法

系数表示法：用一个多项式的各个项系数来表达该多项式。

点值表示法：把 n-1 阶多项式看成一个函数，从上面选取 n 个点，从而利用这 n 个点来唯一的表示这个函数。每个点记为 $(x_i, y(x_i))$。

DFT：多项式由系数表示法转为点值表示法的过程；

IDFT：把一个多项式的点值表示法转化为系数表示法的过程。

FFT 就是通过取某些特殊的 x 的点值来加速 DFT 和 IDFT 的过程。

3.3.2 点值表示法与 FTT 关系

在点值表示法下，单纯的多项式相乘复杂度为 n，因为在向量乘中，x_k 保持不变，而仅仅需要将各项 $f(x_i)$ 和 $g(x_i)$ 相乘。

对于 DFT 和 IDFT 过程，复杂度则取决于这两个转化过程：$y_i = a_0 + a_1 * x_i + a_2 * x_i^2 + ... + a_n * x_i^n$ 方程组，已知 A 和 X 向量，求解 Y；已知 Y 和 X 向量，求解系数向量 A。最适合带入的 X 的值即为方程 $x^n = 1$ 的根，$\omega_n^k \ k = 0, 1, .., n-1$。由于每个方程系数是一样的，这样就可以利用之前复数的周期性质，减少乘的数量，快速转化。复杂度同 FFT 算法，为 $nlog_2 n$ 量级。

带入 x，对于第 k 行方程，表示为：

$y_k = \sum_{j=0}^{n-1} a_j x_k^j = \sum_{j=0}^{n-1} a_j (\omega_n^k)^j$　　k=0,1,...,n-1

参考 FFT 基本式：$y_k = \sum_{j=0}^{n-1} x_j \omega(n)^{kj}$　　k=0,1,...,n-1

则若视 a_j 为 x_j，则两式完全相等。可以采用同样的方法进行化简。

编写程序时注意 $(e^{\theta i} = cos(\theta) + isin(\theta))$：对于 $\omega_n^k = e^{-2\pi ik/n}$，在传统意义上表示时域向频域的转化关系，但在多项式中则表示原项乘以了逆矩阵且扩大了 n 倍。多项式乘法中，如果只是单纯的相乘，应采用 $e^{2\pi ik/n}$。

3.3.3 FFT 加速 DFT

在 DFT 中，a 与 x 已知，求解 y；

基本 FFT 实现：

- 待乘式次数补 0，使满足 $n = 2^l$；

- 计算出所有的 x：$\omega(m)^k$、$m = 2, 4, ..., n/2$、$k = 0, 1, ..., n/2 - 1$。
- 利用 FFT 部分的奇偶分治，只考虑第 0 行方程，将其拆分到最终只剩两个与 ω 无关的参数 a：

  即 n=1 时：$G_0 = y_0^{(0)} = a_0 * \omega_1^0 = a_0$；$H_0 = y_1^{(0)} = a_1 * \omega_1^0 = a_1$。
- 然后在纵向和横向上不断“滚雪球”一般累加回各项或方程，顺序与拆分时相反。
  - 首先考虑横向的累加：

    每轮累加时都满足：下一个偶数项/奇数项 = 上一个偶数项 $+\omega_n^k \times$ 上一个奇数项。其中 n 是当前方程下的 n。

    则通过这样的步骤以翻倍的速度不断加回之前被分治的各奇偶项，直到得到最终的 y。由于 H 和 G 都是一轮一轮累加出来的，避免了利用求和公式累加幂导致 j 对 ω 影响。
  - 然后考虑纵向的累加：

    在每一轮横向累加时利用当前 n 值下的周期性，每一个 n 下增加对 $k + n/2$ 列的计算即可 (即蝴蝶操作)。但注意由于每一次的原方程并不完整，因此每一次纵向回滚时都需要重新计算所有的行方程 (更新 y)(就是用新的 G 和 H 变换加减号来计算)。
- 示例：

  以 8 项式为例，首先考虑横向的分治和回滚，略去行系数 k：

  x_0、x_1、x_2、x_3、x_4、x_5、x_6、x_7　　n=8

  分治步骤：

  第一次：x_0、x_2、x_4、x_6；x_1、x_3、x_5、x_7　　n=4

  第二次：x_0、x_4；x_2、x_6；x_1、x_5；x_3、x_7　　n=2

  第三次：x_0；x_4；x_2；x_6；x_1；x_5；x_3；x_7　　n=1

  回滚：

  最开始：$G_0 = a_0$；$H_4 = a_4$；$G_2 = a_2$；$H_6 = a_6$；$G_1 = a_1$；$H_5 = a_5$；$G_3 = a_3$；$H_7 = a_7$；　　n=1

  滚 1 次：$G_{04} = G_0 + \omega(n)H_4$；$H_{26} = G_2 + \omega(n)H_6$；$G_{15} = G_1 + \omega(n)H_5$；$H_{37} = G_3 + \omega(n)H_7$；　　n=2

滚 2 次：$G_{0426}=G_{04}+\omega(n)H_{26}$；$G_{1537}=G_{15}+\omega(n)H_{37}$　　n=4

滚 3 次：$Y=G_{0426}+\omega(n)H_{1537}$　　n=8

得到了最终的 y 值。

然后考虑纵向的回滚，记一开始为第 0 行：

第一次：0->1　　n=2,m=1

第二次：0->2,1->3　　n=4,m=2

第三次：0->4,1->5,2->6,3->7　　n=8,m=4

最终求得了每一行的 y 值。

注意：除非最后一次 (n) 计算，其他次 (n) 的计算都是不完整的，因此每一个 n 下都需要重新计算所有的其余列。

- 递归程序参考：

```
RECURSIVE-FFT(a)
    n=a.length
    if n==1
        return a
    E={a[0],a[2],...,a[n-2]}
    O=(a[1],a[3],...,a[n-1]}
    y_E=RECURSIVE-FFT(E);
    y_O=RECURSIVE-FFT(O);
    for k=0 to n/2-1
        w=e^(2πki/n)
        y[k]=y_E[k]+w*y_O[k]
        y[k+n/2]=y_E[k]-w*y_O[k]
    return y
```

- 此过程复杂度为 $nlog_2n$。

高效 FFT 实现：

之前的 FFT 实现中，在行之间的计算顺序每次 (n) 都是按 0 到 n 增加的，但是行内则是对每一项进行了重新排列，在递归方法下需要花费大量空间用于创建和维护数组。而如果一开始每一行的项就是已经是排列后的，则可以利用迭代法来求解，提高 FFT 效率。

重要规律：在原始的顺序下，每个项序号用二进制表示 (四位)，然后把每个数的二进制顺序翻转一下，就是最终拆分完全后每个数的序号。

蝴蝶变换：输入 x_1、x_2，通过 $y_1 = x_1 + x_2$、$y_2 = x_1 - x_2$，使最终输出 $x_1 = y_1$、$x_2 = y_2$ 的方法。

迭代法 FFT 实现：

- 翻转多项式所有的系数 a_i，变化为需要的排列顺序；
- 以 a 的次序为处理顺序；
- 进行主循环，记 step，从 1 开始每次自身乘 2 递增直到 n-1；

  (记 step 个系数的 H+xG 的值为大单元，则 step 表示分治下各部分系数数量为 step 的情况 (不管行))
- 计算当前 step 下的 $\omega_n^1 = e^{2\pi/ni}$；(由于因为这是逆操作，step 始终是只为原来一半的，因此利用当前的 H+xG 求解新 H 或 G 时，在 x 中需要将 step 乘 2，即 $e^{\pi/ni}$)
- 进行中循环，记 j，从 0 开始每次增加 2 倍的 step 直到 n-1；(将向量 a 按当前 step 大小全分割 (总计 n/step 个)，每一次循环处理两个大单元 (序号间隔 step)，最终得到全部更新的 a 向量)

  (j 表示当前处理的 a 向量范围 $[j, j + 2step)$))

  可以视为对单行方程的分割。随 step 增加 j 取值不断减少。当 step=n/2 时，不分割，对应的 a_j 即 j 行的计算值。
- 进行小循环，记 k，从 j 开始 +1 增加 step 个数为止；(利用之前 step 下计算的上一轮的 a 向量值，来得到可求的每一行方程内对应传入的 step 位置的 G+xH 的值，即更新一部分 a 向量 (2step 个))

  (k 即表示 a 向量的序号，每次小循环会更新 j 即 2step 的部分 a 向量，直到全部更新完成)(在第一次传入 j 中表示行的序号，从 0 到 step；而在之后传入的 j 下，a 向量的序号并不对应于列，需要减去之前的序号 (即 $k - j$ 或 $k - 2 * step * l$ 才表示列))

  可以视为单方程内分割下的方程间分割的分别计算。随 step 增加 k 取值不断增加，当 step=n/2 时，计算量最大，恰好为全部的 a 数。
- 注意：传入的 a 矩阵为按顺序排列的系数向量，由于采用了重复赋值更新，在一轮大循环后，a 的意义就已经发生变化了，a 向量按一定的规律在不同的 step 下排列，但最后会表示为每一行的累加值。

```cpp
typedef complex<double> cd;//C++ 自带复数类，需要头文件complex
void fft(cd *a,int n)
{
    for(int i=0;i<n;i++) if(i<rev[i]) swap(a[i],a[rev[i]]);
    for(int step=1;step<n;step<<=1)
    {
        cd wn=exp(cd(0,PI/step));//exp：e的幂，此处计算单位根
        for(int j=0;j<n;j+=step<<1)
        {
            cd wnk(1,0);//cd构造函数：cd(实数部分,虚数部分/i);
            for(int k=j;k<j+step;k++)
            {//蝴蝶操作
                cd x=a[k];
                cd y=wnk*a[k+step];
                a[k]=x+y;
                a[k+step]=x-y;
                wnk*=wn;
            }
        }
    }
}
```

- 程序：

  注意需要考虑不同行中 k 的影响，这是通过小循环中从第 0 行开始，每次循环 wnk 项乘以一个 wn 来的 $(\omega_{2n}^{0+1+1+\cdots})$。

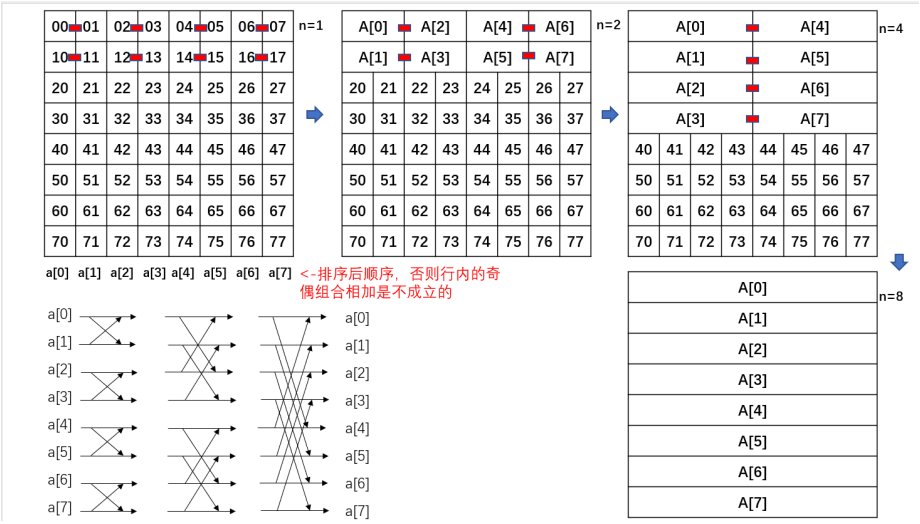
- 蝴蝶变换示意图：

3.3.4 FFT 加速 IDFT

在 IDFT 中，y 与 x 已知，求解 a。

将方程写为如下矩阵形式：(之前也是这种形式，只不过 a 向量乘进去了)

$$\begin{bmatrix} y_0 \\ y_1 \\ y_2 \\ y_3 \\ \vdots \\ y_{n-1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & \cdots & 1 \\ 1 & \omega_n & \omega_n^2 & \omega_n^3 & \cdots & \omega_n^{n-1} \\ 1 & \omega_n^2 & \omega_n^4 & \omega_n^6 & \cdots & \omega_n^{2(n-1)} \\ 1 & \omega_n^3 & \omega_n^6 & \omega_n^9 & \cdots & \omega_n^{3(n-1)} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & \omega_n^{n-1} & \omega_n^{2(n-1)} & \omega_n^{3(n-1)} & \cdots & \omega_n^{(n-1)^2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \\ a_3 \\ \vdots \\ a_{n-1} \end{bmatrix}$$



需要在等式两边左侧乘以 ω 的逆矩阵，即可变为 $A = \omega^{-1}y$ 的格式，与之前的 y=ax 形式完全一样，可用相同方法求解。即输入为 y 向量，返回的为新的系数向量 a。

可以证明，对于矩阵每一项取倒数再除以 n 就是该矩阵的逆矩阵。

注意为保证输出 a 向量的顺序，也需要在计算前对 y 向量进行翻转。

则程序基本上与 DFT 过程相同，区别在于对系数的处理中，将 y 向量每一项除以 n；然后在 H+xG 处理中，x 的初始定义由 $\omega_n^k = e^{2\pi ik/n}$ 变为 $\omega_n^k = e^{-2\pi ik/n}$(e 的系数加个负号)。

完整的程序可以写为一个函数，除上述操作外其他部分完全一样。

3.4 二维串行 FFT 算法

可以由两个方向的一维 FFT 来完成。

4 MPI 并行程序设计基础

与 pthread 区别

定义：Massage Passing Interface: 是消息传递函数库的标准规范。是一种新的库描述, 不是一种语言。

mpi 是基于分布式内存系统，而 openmp 和 pthread 基于共享内存系统；

即 mpi 之间的数据共享需要通过消息传递，因为 mpi 同步的程序属于不同的进程，甚至不同的主机上的不同进程。相反由于 openmp 和 pthread 共享内存，不同线程之间的数据就无须传递，直接传送指针就行。

同时 mpi 不同主机之间的进程协调工作需要安装 mpi 软件（例如 mpich）来完成。

4.1 并行相关分类

计算机架构：

- SMP：SMP 是对称多处理技术。具有多个 CPU，所有的 CPU 共享一个内存，使用相同的地址空间。所有的 CPU 通过一条总线 (bus) 和内存以及 IO 设备 (硬盘等) 连接。总线同一时刻只能处理一个请求，当有多个 CPU 的访存访问请求时，只能一个一个处理。
- MMP：类似于集群，但 MMP 使用了更多定制化的组件，包括网络、处理器、操作系统等；而 cluster 运行通用操作系统，互连网络使用商业标准的 IB 和以太网设备连接，存储为 SAN、NAS 和并行文件系统。
- Cluster：集群，它至少将两个系统连接到一起，使两台服务器能够像一台机器那样工作或者看起来好像一台机器。基本特征是具备多个 CPU 模块，每一个 CPU 模块由多个 CPU 组成，而且具备独立的本地内存、I/O 槽口等。
- MMP 与 Cluster 区别：
  - MPP 实际上是一台机器，这台机器有使用高速网络紧密连接的成千上万个处理器，只有一个操作系统。
  - cluster 实际上是有多台机器，每个机器有自己的操作系统（一般都是一样的）、硬盘、内存等，这些机器使用一些普通网络的一些变体连接起来，使用某些系统帮助分配任务给这些主机。

并行计算机系统结构编程模型 (Flynn 分类法)：

- 单指令单数据 (SISD)：SISD 是标准意义上的串行机，具有如下特点：1）单指令：在每一个时钟周期内，CPU 只能执行一个指令流；2）单数据：在每一个时钟周期内，输入设备只能输入一个数据流；3）执行结果是确定的。这是最古老的一种计算机类型。

- 单指令多数据 (SIMD)：SIMD 属于一种类型的并行计算机，具有如下特点：1）单指令：所有处理单元在任何一个时钟周期内都执行同一条指令；2）多数据：每个处理单元可以处理不同的数据元素；3）非常适合于处理高度有序的任务，例如图形/图像处理；4）同步（锁步）及确定性执行；5）两个主要类型：处理器阵列和矢量管道。

- 多指令单数据 (MISD)：MISD 属于一种类型的并行计算机，具有如下特点：1）多指令：不同的处理单元可以独立地执行不同的指令流；2）单数据：不同的处理单元接收的是同一单数据流。这种架构理论上是有的，但是工业实践中这种机型非常少。

- 多指令多数据 (MIMD)：MIMD 属于最常见的一种类型的并行计算机，具有如下特点：1）多指令：不同的处理器可以在同一时刻处理不同的指令流；2）多数据：不同的处理器可以在同一时刻处理不同的数据；3）执行可以是同步的，也可以是异步的，可以是确定性的，也可以是不确定性的。这是目前主流的计算机架构类型。

并行程序类型：

- 主从式 M-S：即 Master/Slaver 模式。核心思想是基于分而治之，将一个原始任务分解为若干个语义等同的子任务，并由专门的工作者线程来并行执行这些任务，原始任务的结果是通过整合各个子任务的处理结果形成的。各子任务互不相干。

- 对称式 SPMD：(Single Program Multiple Data) 指单程序多数据。类似于 SIMD，但在 SPMD 中，虽然各处理器并行地执行同一个程序，但所操作的数据不一定相同 (即各处理器只在需要时进行同步，而不是同步地执行每一条指令)。

- 自主式 MPMD：(Single Program Multiple) 指多程序多数据。相比于 SPMD，相当于各自进程执行各自的程序。SPMD 和 MPMD 的表达能力是相同的，只是针对不同的问题编写难易而已。MPI 是可以写 SPMD 和 MPMD 的并行程序的。

  重点在 SPMD。

4.2 并行程序基本结构

- 进入 MPI 环境。产生通讯子 (进程序号、进程数)。
- 程序主体。
- 退出 MPI 环境。

4.3 MPI 数据类型

MPI 数据类型	C 中对应数据类型
MPI_SHORT	short int
MPI_INT	int
MPI_LONG	long int
MPI_LONG_LONG	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_UNSIGNED_LONG_LONG	unsigned long long int
MPI_FLOAT	float
MPI_DOUBLE	double
MPI_LONG_DOUBLE	long double
MPI_BYTE	char

4.4 MPI 通信子 (通信域) 基础

定义及功能:

通信子定义了一组能够互相发消息的进程。在这组进程中，每个进程会被分配一个序号，称作秩 (rank)，进程间显性地通过指定秩来进行通信。

内容:

- 上下文 (context): 提供了一个相对独立的通信区域，不同的信息在不同的上下文中传递，不同的上下文的信息互不干扰，上下文可以区分不同的通信。
- 进程组 (group): 组是一个进程的有序集合，在实现中可以看作是进程标识符的一个有序集。一个通信域对应一个进程组。组内的每个进程

与一个整数 rank 相联系，称为序列号，从 0 开始并且是连续的。

- 虚拟处理器拓扑 (topology)：…

附注：进程：一个进程对应一个 pid 号，同一个进程可以属于多个进程组 (每个进程在不同进程组中有个各自的 rank 号)，因此也可以属于不同的通信域。

默认 (最大范围)：MPI_COMM_WOLRD，这是 MPI 已经预定义好的通信子，是一个包含所有进程的通信子。最大集。

通信域产生方法：

- 在已有通信域基础上划分获得：MPI_Comm_split
- 在已有通信域基础上复制获得：MPI_Comm_dup
- 在已有进程组的基础上创建获得：MPI_Comm_Create

进程组产生方法：

可以当成一个集合的概念，可以通过“子、交、并、补”各种方法。所有进程组产生的方法都可以套到集合的各种运算。

4.5 进程通信原理

通信的基础建立在不同进程间发送和接收操作。一个进程可以通过指定另一个进程的秩以及一个独一无二的消息标签 (tag) 来发送消息给另一个进程。接受者可以发送一个接收特定标签标记的消息的请求（也可以不管标签，接收任何消息），然后依次处理接收到的数据。这样的涉及一个发送者以及一个接受者的通信被称作点对点通信。

如果某个进程需要跟所有其他进程通信。则可用专门的接口来处理这类所有进程间的通信，称为集体性通信。

4.6 MPI 基本函数

4.6.1 并行环境管理函数

MPI_Init(&argc, &argv)

- 功能：初始化 MPI 环境。产生一个通信子 (称 MPI_COMM_WORLD)

- 参数：
  - 就是 C++main 函数传入的参数，形式如上。
- 备注：必须保证程序中第一个调用的 MPI 函数是这个函数。不关心返回值。

MPI_Finalize()

- 功能：结束 MPI 环境。
- 参数：无
- 备注：任何 MPI 程序结束时，都需要调用该函数。不关心返回值。

4.6.2 MPI 通信子操作函数

MPI_Comm_rank 函数

```
int MPI_Comm_rank(
    MPI_Comm comm, //[传入] 当前进程所在的通信子
    int *rank //[传出] 进程号
)
```

- 功能：获得当前进程的进程标识 (进程号)。
- 返回值：不关心。
- 备注：在调用该函数时，需要先定义一个整型变量如 myid，不需要赋值。将该变量传入函数中，会将该进程号存入 myid 变量中并返回。

MPI_Comm_size 函数

```
int MPI_Comm_size(
    MPI_Comm comm, //[传入](不一定本进程的) 通信子。如果通信子为 MP_Comm_WORLD，即获取总进程数
    int *size //[传出] 进程数目
)
```

- 功能：是获取该通信子内的总进程数。
- 返回值：不关心。
- 备注：用法类似前一个。

MPI_Comm_dup 函数

int MPI_Comm_dup(

MPI_Comm comm,//[传入] 要复制的通信子

MPI_Comm *newcomm //[传出] 新的通信子，具有相同的组和从源复制的任何缓存信息，但它包含新的上下文信息

)

- 功能：复制现有通信子及其所有缓存的信息
- 返回值：不关心。
- 备注：无。

MPI_Comm_compare 函数

int MPI_Comm_compare(

MPI_Comm comm1,//[传入] 要比较的通信子 1

MPI_Comm comm2 //[传入] 要比较的通信子 2

)

- 功能：比较两个通信子
- 返回值：
  - MPI_IDENT：两个通信子的组和上下文相同。
  - MPI_CONGRUENT：上下文不同、组相同。
  - MPI_SIMILAR：上下文不同，组的成员相同但次序不同。
  - MPI_UNEQUAL：都不相同。
  - 失败：错误代码。
- 备注：无。

MPI_Comm_create 函数

int MPI_Comm_Create(

MPI_Comm comm, //[传入] 源通信子

MPI_Group group, //[传入] 定义源通信子中请求的进程子集的组

MPI_Comm *newcomm //[传出] 新的通信子

)

- 功能：提取一组进程的子集，以便在单独的通信子中进行单独的多指令多数据 (MIMD) 计算。
- 返回值：返回成功时为 MPI_SUCCESS，否则为错误代码。
- 备注：创建新的，老的还在。group 需要自己定义。

MPI_Comm_split 函数

int MPI_Comm_split(
MPI_Comm comm,//[传入] 要拆分的通信子。也就是被划分的范围
int color,//[传入] 相同的 color 的通信子会被划分成同一个子通信子
int key,//[传入] 新通信子中调用进程的相对等级 (rank)。进程在新的通信子中按参数键的值定义的顺序排列
Out MPI_Comm *newcomm //[传出] 新的通信子
)

- 功能：用于将指定的单个通信的进程组划分为任意数量的子组。
- 返回值：返回成功时为 MPI_SUCCESS，否则为错误代码。
- 备注：将原有的通信子拆分了，新的组成老的。且子组的数量由在所有进程中指定的 color 数量确定。生成的通信器不重叠。

MPI_Comm_free 函数

int MPI_Comm_free(
MPI_Comm *comm //[输入] 指向要释放的通信子的指针
);

- 功能：释放通过 dup、create 或 split 创建的通信子。
- 返回值：成功时返回 MPI_SUCCESS，否则返回错误代码。
- 备注：

  此操作将通信子标记为释放。句柄设置为 MPI_COMM_NULL。任何使用此通信子的挂起操作都将正常完成。直到没有对对象的活动引用时，对象才会被释放。

这一功能既适用于内部通信子，也适用于外部通信子。

所有缓存属性的删除被回调函数以不确定的顺序调用。

5 点到点通信函数

5.1 阻塞式

阻塞式：发送或接受完数据后该 rank 进程才会继续执行。而且必须发送成功 (但不一定接收成功)。

5.1.1 MPI_Send 函数

```
int MPI_Send(
    void* data,//[传入] 发送缓冲区地址
    int count,//[传入] 数据大小
    MPI_Datatype datatype,//[传入] 信息的数据类型
    int dest,//[传入] 目标的进程编号
    int tag,//[传入] 消息标记 (用于区分不同类型的消息)
    MPI_Comm send_comm//[传入] 目标的通信子
)
```

- 功能：执行标准模式发送操作，并在可以安全地再利用发送缓冲区时返回 (直到缓存为空)。
- 返回值：成功时返回 MPI_SUCCESS，否则返回错误代码。
- 备注：为非本地函数，成功完成取决于是否存在匹配的接收函数。

5.1.2 MPI_Recv 函数

```
int MPI_Recv(
    void *buf,//[传出] 接收缓冲区地址
    int count,//[传入] 接收的数据大小
    MPI_Datatype datatype,//[传入] 信息的数据类型
    int source,//[传入] 指定来源的进程编号,若为 MPI_ANY_SOURCE 表示任意来源
```

int tag,//[传入] 指定来源的消息标记，若为 MPI_ANY_TAG 表示任意标签都接受

MPI_Comm recv_comm,//[传入](接收方) 通信子，需要与 send 中的相同。通常情况下 send 和 recv 均为 MPI_COMM_WOLRD

MPI_Status *status //[传出] 接受状态，即指向描述已完成操作的 MPI_Status 对象 (结构体) 的指针。如果不需要该状态信息，直接赋常量 MPI_STATUS_IGNORE 即可

);

- 功能：执行接收操作，并且在收到匹配的消息之前不返回 (直到缓存被填充)。
- 返回值：成功时返回 MPI_SUCCESS，否则返回错误代码。
- 备注：
  - 接收消息的长度必须小于或等于接收缓冲区的长度。如果所有传入数据都不适合接收缓冲区，则此函数将返回溢出错误。
  - 发送和接收操作之间存在不对称性。接收操作可以接受来自任意发送方的消息，但发送操作必须指定唯一的接收方。
  - 注意防止死锁。

函数成功接受的必要条件

- send_comm==recv_comm(都是要为接收方的通信子)
- send_tag==recv_tag
- send_dest==recv_rank(接收方进程编号)
- send_rank(发送方进程编号)==recv_source

5.1.3 MPI_Sendrecv 合成函数

int MPI_Sendrecv(

void *sendbuf,//[传入] 发送缓冲区地址

int sendcount,//[传入] 数据大小

MPI_Datatype sendtype,//[传入] 信息的数据类型

int dest,//[传入] 目标的进程编号
int sendtag,//[传入] 消息标记
void *recvbuf,//[传出] 接收缓冲区地址
int recvcount,//[传入] 接收的数据大小
MPI_Datatype recvtype,//[传入] 指定来源的数据类型
int source,//[传入] 指定来源 (接收) 的进程编号
int recvtag,//[传入] 指定来源的消息标记
MPI_Comm comm,//[传入](接收方) 通信子
MPI_Status *status//[传出] 接受状态，同上
);

- 功能：发送和接收消息。
- 返回值：成功时返回 MPI_SUCCESS，否则返回错误代码。
- 备注：send、recv、sendrecv 互相兼容，sendrecv 既可以接受 send 的数据，也可以给 recv 发送数据。

5.1.4 MPI_Sendrecv_Replace 合成函数

int MPI_Sendrecv_replace(
void* buffer,//[传入传出] 发送和接收缓冲区的初始地址
int count,//[传入传出] 数据的大小
MPI_Datatype sendtype,//[传入传出] 数据的类型
int dest,//[传入] 目标的进程编号 rank
int sendtag,//[传入] 发送的信息的消息标记
int source,//[传入] 指定来源的进程编号
int recvtag,//[传入] 指定来源的消息标记
MPI_Comm comm,//[传入](接收方) 通信子
MPI_Status*status//[传出] 接受状态，同上
)

- 功能：使用单个缓冲区发送和接收消息。
- 返回值：成功时返回 MPI_SUCCESS，否则返回错误代码。

- 备注：与 Sendrecv 相比，不同之处在于使用同一个缓冲区来接收和发送数据 (因此前三个参数是一样的)。也正因为如此，效率相比于 Sendrecv 低下。

5.1.5 消息查询函数 MPI_Probe

```
int MPI_Probe(
    int source,//[传入] 查询的进程编号
    int tag,//[传入] 查询的消息标记
    MPI_Comm comm,//[传入] 查询的通信子
    MPI_Status *status//[传出] 接受状态，同上
);
```

- 功能：探测接收消息的内容，但不影响实际接收到的消息。
- 返回值：函数执行成功时返回 MPI_SUCCESS，否则返回错误代码。
- 备注：为阻塞型探测，直到有一个符合条件的消息到达才返回，**即函数成功返回则一定接收到了信息**。

5.1.6 消息查询函数 MPI_IProbe

```
int MPI_IProbe(
    int source,//[传入] 查询的进程编号
    int tag,//[传入] 查询的消息标记
    MPI_Comm comm,//[传入] 查询的通信子
    int *flag,//[传出] 标记，如果找到了符合要求的信息 (source、tag、comm)，就为 1，否则为 0
    MPI_Status *status//[传出] 接受状态，同上
);
```

- 功能：同 Probe，但为非阻塞型。
- 返回值：函数执行成功时返回 MPI_SUCCESS，否则返回错误代码。
- 备注：为非阻塞型探测，无论是否有一个符合条件的消息到达，都立刻返回。通过 flag 判断是否找到。

5.1.7 消息查询函数 MPI_Get_Counte

```
int MPI_Get_count(
    MPI_Status *status,//[传出] 接收状态
    MPI_Datatype datatype,//[传入] 每个接收缓冲区元素的数据类
型
    int *count//[传出] 接收到的元素数目
);
```

- 功能：获得接收到的某一种类型的元素数量。
- 返回值：成功时返回 MPI_SUCCESS，否则返回错误代码。
- 备注：通过对 count 的值进行修改。

5.2 非阻塞式

非阻塞式 (异步通信) 与阻塞式 (同步通信) 区别

- 同步通信中在接受到数据和发送完数据之前，进程处于挂起状态，完成后才允许进程继续执行下一语句。
- 异步通信中发送方在将要发送的消息在消息缓冲区中后, 即可返回; 接受方不管消息缓冲区中是否已有发送原语发送的消息，都将返回。当消息被确切地发出或收到时，系统将用中断信号 (非阻塞式会产生独有的句柄 request) 通知发送方或接受方。在此之前，它们可以周期性地查询、暂时挂起或执行其它计算，以实现计算与通信的重叠。
- 异步通信需要系统提供一个消息缓冲区，同步通信则不需要。
- 在同步通信中，通信可以是异步开始的，但必将是同步结束的；在异步通信中，通信可以是异步开始的，也可以是异步结束。

5.2.1 MPI_Isend 函数

```
int MPI_Isend(
    void* data,//[传入] 发送缓冲区地址
    int count,//[传入] 数据大小
    MPI_Datatype datatype,//[传入] 信息的数据类型
```

int dest,//[传入] 目标的进程编号

int tag,//[传入] 消息标记 (用于区分不同类型的消息)

MPI_Comm send_comm,//[传入] 目标的通信子

MPI_Request *request //[传出]所请求的通信操作的句柄，用来描述非阻塞发送或接收的完成情况。是提供给后面的非阻塞通信检测/等待函数用的。

)

- 功能：启动标准模式发送操作，在调用后不用等待通信完全结束就可以返回。
- 返回值：成功时返回 MPI_SUCCESS，否则返回错误代码。
- 备注：本地函数，此函数可以在将消息发送到缓冲区之前返回。也就是说，在执行完该函数后，数据并没有完全写入缓冲区就已经开始执行接下来的命令了，并不会阻塞在这里等待发送完成，因此函数返回后不能立刻修改 data 中的内容，否则发送的数据也跟着变化，需要执行消息请求完成函数 MPI_Wait 保证发送完毕。

5.2.2 MPI_Irecv 函数

int MPI_Irecv(

void *buf,//[传出] 接收缓冲区地址

int count,//[传入] 接收的数据大小

MPI_Datatype datatype,//[传入] 信息的数据类型

int source,//[传入] 指定来源的进程编号，若为 MPI_ANY_SOURCE 表示任意来源

int tag,//[传入] 指定来源的消息标记，若为 MPI_ANY_TAG 表示任意标签都接受

MPI_Comm recv_comm,//[传入](接收方) 通信子，需要与 send 中的相同。通常情况下 send 和 recv 均为 MPI_COMM_WOLRD

MPI_Status *status,//[传出] 接受状态，即指向描述已完成操作的 MPI_Status 对象 (结构体) 的指针。如果不需要该状态信息，直接赋常量 MPI_STATUS_IGNORE 即可

MPI_Request *request//[传出]所请求的通信操作的句柄，同之前

);

- 功能：执行接收操作，在调用后不用等待通信完全结束就可以返回。
- 返回值：成功时返回 MPI_SUCCESS，否则返回错误代码。
- 备注：此函数是本地的。此函数可以在将消息接收到缓冲区之前返回。即该函数返回后，数据同样并没有写入完全缓冲区，接收并没有完成，同样需要执行消息请求完成函数 MPI_Wait 保证接收完毕后才能操作这部分数据。
- 在调用 wait 和 test 后，已经完成的通信操作的句柄 request 将不可用。

5.2.3 消息请求完成函数 MPI_Wait

```
int MPI_Wait(
    MPI_Request *request,//[传入] 通信对象的句柄
    MPI_Status *status//[传出] 接收状态，同之前
);
```

- 功能：用于等待 MPI 请求完成。
- 返回值：功时返回 MPI_SUCCESS，否则返回错误代码。
- 备注：
  - **此函数成功返回时，表示 request 指针表示的通信操作完成，否则通信操作函数就不会结束**。也就是说程序会卡住直到函数执行完毕。
  - 用于一个非阻塞通信。
  - 非本地操作，成功完成可能取决于其他进程的匹配操作，即一直等到相应的通信完成后才成功返回。
  - 通信操作为空时，立即返回空状态。
  - 往往与 isend 和 irecv 连用，与阻塞式区别在于程序在执行到通信时会不会挂起。
  - 若接收消息的进程先接收、发送消息的进程再发送，则 MPI 就只会填充程序提供的缓冲区 (发送，接收缓冲区)。而无需使用 MPI 提供的消息缓冲区。这可以减少在接收进程端的内存拷贝操作，提高性能。

5.2.4 消息请求完成函数 MPI_Waitany

int MPI_Waitany(

int count,//[传入] 通信对象的数目

MPI_Request *array_of_requests,//[传入](未完成的) 通信对象句柄的数组指针：定义为 MPI_Request request[count]

int *index,//[传出] 指向一个整数的指针，整数表示通信完成的通信对象在数组中的索引

MPI_Status *status//[传出] 接受状态

);

- 功能：用于等待非阻塞通信对象数组中的任意一个通信对象的完成。当存在多个通信对象时，一旦有一个通信完成，就返回该通信所对应通信对象的序号 index，并释放该通信对象，并把该通信的相关信息存放在 status 中。
- 返回值：功时返回 MPI_SUCCESS，否则返回错误代码。
- 备注：

  注意区分 *request 和 *array_of_requests：

  - *request:指的是单个通信对象句柄的地址，调用时传入 &，同 Ised 和 Irecv。
  - *array_of_requests：指的是通信对象的集合，调用时传入集合即数组的名字。

  注意区分 *index 和 *array_of_index：

  - *index:在 wait、waitany 这种输出为 1 个通信对象的情况下，地址为该通信对象在数组中的编号；
  - *array_of_index：在 waitsome 这种输出为多个通信对象的情况下，为数组指针，表示第 I 个通信对象对应的通信完成信息存放在 array_of_statuses[I] 中，其中完成为 1，未完成为 0；
  - waitall 中没有 index。

5.2.5 消息请求完成函数 MPI_Waitall

int MPI_Waitall(
int count,//[传入] 通信对象的数目
MPI_Request *array_of_requests,//[传入] 通信对象句柄的数组指针
MPI_Status *array_of_statuses//[传出] 接受状态
);

- 功能：用于等待非阻塞通信对象数组中的所有通信对象的完成。当所有的通信完成时才返回，并释放所有的通信对象。
- 返回值：功时返回 MPI_SUCCESS，否则返回错误代码。
- 备注：无。

5.2.6 消息请求完成函数 MPI_Waitsome

int MPI_Waitsome(
int incount,//[传入] 通信对象的数目
MPI_Request *array_of_requests,//[传入] 通信对象句柄的数组指针
int outcount,//[传出] 信完成的通信对象的数量
int *array_of_index,//[传出] 数组指针，表示通信完成的全部通信对象在数组中的索引
MPI_Status *array_of_status//[传出] 接受状态
);

- 功能：用于等待非阻塞通信对象数组中的任意数量的通信对象的完成。当任意数目的通信完成时就返回，并释放通信完成的通信对象。
- 返回值：功时返回 MPI_SUCCESS，否则返回错误代码。
- 备注：完成非阻塞通信的数目记录在 outcount 中，相应的非阻塞通信对象的下标存放在下标数组中，对应通信的相关信息存放在 array_of_statuses 中。

5.2.7 消息请求检查函数 MPI_Test

test 与 wait 区别：

- wait 要一直等到相应的非阻塞通信完成后才成功返回，而 test 在调用后会立刻返回。
- wait 在 any、some 的情况下，会给出具体的完成的通信对象的编号；而 test 在 any 的情况下则不会，只会给出当前是否满足通信完成的判断，仅 some 情况下给出编号。
- 相比于 wait 中的 index 指示完成的通信对象的编号，在 test 中用 flag 来取代，仅用于判断是否满足要求。

int MPI_Test(
MPI_Request *request,//[传入] 通信对象句柄的指针
int *flag,//[传出] 指示请求是否已完成的判断指针，通信完成为 1，否则为 0
MPI_Status *status//[传出] 接受状态
);

- 功能：用于测试非阻塞通信中通信完成的情况，立即返回。
- 返回值：功时返回 MPI_SUCCESS，否则返回错误代码。
- 备注：函数执行后立刻返回，不会等待。

5.2.8 消息请求检查函数 MPI_Testany

int MPI_Testany(
int count,//[传入] 通信对象的数目
MPI_Request *request,//[传入] 通信对象句柄的数组指针
int *flag,//[传出] 指示请求是否已完成的判断指针，对应索引位置的通信完成则为 1，否则为 0
MPI_Status *status//[传出] 接受状态
);

- 功能：用于测试非阻塞通信数组中是否有任何一个对象已经完成，若有对象完成 **(若有多个，任取一个)**，令 flag=1 立即返回，并释放该对象；否则令 flag=0 并立即返回。

- 返回值：功时返回 MPI_SUCCESS，否则返回错误代码。
- 备注：如果调用时没有完成的通信，flag 仍然为 0。

5.2.9 消息请求检查函数 MPI_Testall

```
int MPI_Testall(
    int count,//[传入] 通信对象的数目
    MPI_Request *request,//[传入] 通信对象句柄的数组指针
    int *flag,//[传出] 指示请求是否已完成的判断指针，全部通信完成则为 1，否则为 0
    MPI_Status *status//[传出] 接受状态
);
```

- 功能：当非阻塞通信数组中有任意一个非阻塞通信对象对应的非阻塞通信没有完成时，令 flag=false 并立即返回；当所有通信都已经完成时，令 flag=true 并立即返回。
- 返回值：功时返回 MPI_SUCCESS，否则返回错误代码。
- 备注：无。

5.2.10 消息请求检查函数 MPI_Testsome

```
int MPI_Testsome(
    int incount,//[传入] 通信对象的数目
    MPI_Request *request,//[传入] 通信对象句柄的数组指针
    int outcount,//[传出] 通信完成的通信对象的数目
    int *array_of_indices,//[传出] 数组指针，表示通信完成的全部通信对象在数组中的索引
    MPI_Status *status//[传出] 接受状态
);
```

- 功能：立即返回，有几个非阻塞通信已经完成，就令 outcount 等于几，且将完成对象的下标记录在数组中。若没有非阻塞通信完成，则返回 outcount=0。
- 返回值：功时返回 MPI_SUCCESS，否则返回错误代码。

- 备注：**此函数没有 flag 判断参数，是通过 outcount 参数是否为 0 来发挥原 flag 作用的**。

5.3 持久通讯

5.3.1 消息请求检查函数 MPI_Send_init

```
int MPI_Send_init(
    void *buf,//[传入] 发送缓冲区地址
    int count,//[传入] 数据大小
    MPI_Datatype datatype,//[传入] 信息的数据类型
    int dest,//[传入] 目标的进程编号
    int tag,//[传入] 消息标记
    MPI_Comm comm,//[传入] 目标的通信子
    MPI_Request *request//[传出] 所请求的通信操作的句柄, 同之前
);
```

- 功能：执行发送操作，但请求是持久的，即产生的通信句柄可以重复使用，但每次使用时需要激活和取消占用。
- 返回值：成功时返回 MPI_SUCCESS，否则返回错误代码。
- 备注：如果另外一个通信在一个并行计算的内部循环中不断地以**同样的参数**被执行，则没必要每次重新创建通信句柄，即可把这些通信参数一次性捆绑到一个持久通信请求，然后不断用该请求初始化 (激活) 和释放 (取消占用) 消息。
- 注意：**在激活的区间内，该通信就等于一个非阻塞通信**。

  释放有两种方法，一种是 free 释放，另一种是 wait 或者 test 成功返回，且不可以同时采用。

5.3.2 MPI_Recv_init 函数

```
int MPI_Recv_init(
    void *buf,//[传出] 接收缓冲区地址
    int count,//[传入] 接收的数据大小
    MPI_Datatype datatype,//[传入] 信息的数据类型
```

int source,//[传入] 指定来源的进程编号,若为 MPI_ANY_SOURCE 表示任意来源

int tag,//[传入] 指定来源的消息标记，若为 MPI_ANY_TAG 表示任意标签都接受

MPI_Comm recv_comm,//[传入](接收方) 通信子，需要与 send 中的相同。通常情况下 send 和 recv 均为 MPI_COMM_WOLRD

MPI_Request *request//[传出] 所请求的通信对象的句柄

);

- 功能：执行接收操作，但请求是持久的，同样需要激活和取消占用。
- 返回值：成功时返回 MPI_SUCCESS，否则返回错误代码。
- 备注：同上可用于化简接收循环。

5.3.3 MPI_Start 函数

int MPI_Start(

MPI_Request *request //[传入] 通信对象的句柄

);

- 功能：激活持久通信产生的句柄 request 所对应的通信。
- 返回值：成功时返回 MPI_SUCCESS，否则返回错误代码。
- 备注：每次使用持久通信对象时都需要执行。

5.3.4 MPI_Startall 函数

int MPI_Startall(

int count,//[传入] 通信对象的数目

MPI_Request *array_of_requests, //[传入] 通信对象的句柄的数组指针

);

- 功能：激活持久通信产生的句柄所对应的通信集合。
- 返回值：成功时返回 MPI_SUCCESS，否则返回错误代码。
- 备注：每次使用持久通信对象时都需要执行。

5.3.5 MPI_Request_free 函数

```
int MPI_Request_free(
    MPI_Request *requests, //[传入] 通信对象的句柄
);
```

- 功能：释放通信对象 (及所占用的内存资源)。
- 返回值：成功时返回 MPI_SUCCESS，否则返回错误代码。
- 备注：每次使用的持久通信对象完毕时都需要执行。只能一个一个的释放。

  若该通信请求相关联的通信操作尚未完成，则等待通信的完成再返回，因此通信请求的释放并不影响该通信的完成。

  该函数成功返回后 request 被置为 MPI_REQUEST_NULL，与 wait、test 类似。

5.3.6 MPI_Cancel 函数

```
int MPI_Cancel(
    MPI_Request *request //[传入] 通信对象的句柄
);
```

- 功能：非阻塞型，用于取消一个尚未完成的通信请求。
- 返回值：成功时返回 MPI_SUCCESS，否则返回错误代码。
- 备注：原理是在 MPI 系统中设置一个取消该通信请求的标志后立即返回，具体的取消操作由 MPI 系统在后台完成。

  若相应的通信请求已经开始，则它会正常完成，不受取消操作的影响；若相应的通信请求还没开始，则可以释放通信占用的资源。

  仍需用 MPI_WAIT，MPI_TEST 或 MPI_REQUEST_FREE 来释放该通信请求。

注意：free 和 cancel 都是针对非阻塞通信的，用于结束它们 (前者释放后者取消)。

5.3.7 MPI_Test_cancelled 函数

int MPI_Test_cancelled(
MPI_Status *status,//[传入] 接收状态
int *flag //[传出] 通信对象通信情况，1 表示请求成功被取消，否则为 1
);

- 功能：测试以查看请求是否已取消。
- 返回值：成功时返回 MPI_SUCCESS，否则返回错误代码。
- 备注：传入的为接受状态，想调用此函数不可将接受状态设置为不需要。此函数往往和 MPI_Cancel 函数联用以查看取消情况。

5.3.8 函数

- 功能：
- 返回值：成功时返回 MPI_SUCCESS，否则返回错误代码。
- 备注：
-