# 并行与分布式计算基础 II: MPI 编程与实践

杨超 chao\_yang@pku.edu.cn

2019 秋



# 内容提纲

- ① 入门知识
- ② 点对点通信
- ③ 死锁与非阻塞通信
- 4 集合通信
- 5 辅助函数
- 6 点对点通信实践机制
- ☑ 通信器与进程组
- 8 补遗与新特性

# 内容提纲

- 1 入门知识
- 2 点对点通信
- ③ 死锁与非阻塞通信
- 4 集合通信
- 5 辅助函数
- 6 点对点通信实践机制
- 通信器与进程组
- ② 补遗与新特性

## 什么是 MPI?

### MPI = Message Passing Interface

是一组由学术界和工业界联合发展的、面向主流并行计算机的、标准化和可移植的消息传递接口标准。

- 定义了若干核心库函数的语法和涵义;
- 独立于编程语言,支持 C/C++、Fortran 语言的绑定;
- 独立于平台, 学术界和厂商发展了若干高效、可靠的实现版;
- 支撑和推动了高性能计算软硬件生态的发展。

#### 为什么用 MPI?

- 目前几乎所有主流并行计算机上都提供了 MPI 的支持;
- MPI 没有依托于任何标准化组织,但已经成为事实上的工业标准;
- 除了 MPI, 没有其他更好的选择!

## MPI 的发展历史

- 1991 年夏季:首次讨论 MPI 的概念;
- 1992 年 4 月: 首届 MPI 研讨会, MPI 标准工作组成立;
- 1992 年 11 月: MPI 1.0 初稿形成, MPI 论坛成立;
- 1993 年 1-9 月: MPI 标准工作组会议每六周开展一次;
- 1993 年 11 月: MPI 1.0 初稿在 SC93 大会上公布, 征集公众意见;
- 1994 年 6 月: MPI 1.0 发布。

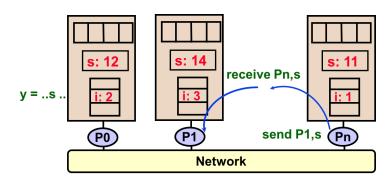
版本	最新版	增加主要功能	增加语言绑定
MPI-1	MPI 1.3	消息传递、静态运行空间	C/F77
MPI-2	MPI 2.2	并行 IO、动态进程等	C++/F90
MPI-3	MPI 3.1	容错、RMA 等 (主流版本)	F2008
MPI-4	MPI 4.0	混合编程等 (进行中)	-

# MPI 的主要实现版本

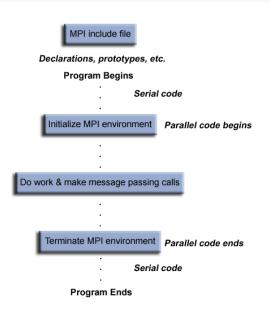
- MPICH
  - ▶ 由 Argonne 国家实验室与 Mississippi 州立大学联合开发;
  - ▶ 是最早的,也是目前最流行的 MPI 实现。
- MVAPICH
  - ▶ Ohio 州立大学开发;
  - ▶ 基于 MPICH 发展,强调对各类硬件和网络的个性化支持。
- OpenMPI
  - ▶ Stuttgart 大学等开发;
  - ▶ 是多个 MPI 开源实现的合并版。
- 商业版
  - ► Intel MPI、IBM MPI、Cray MPI、HP-MPI、MS-MPI、.....
- ABI (application binary interface) 兼容:由 MPICH 发起,保证各个MPI 实现在底层数据类型上的兼容性。

## MPI 的主要理念

- 机器由若干可以相互传递消息的进程 (process) 构成;
- 每个进程拥有私有的存储空间,进程间无共享存储;
- 进程间的消息传递采用显式的发送/接收 (send/receive) 机制完成;
- 程序的运行模式主要有松散同步和完全异步两种;
- 程序往往采用 SPMD (single program multiple data) 方式编写。



### MPI 程序的执行流程



### MPI 程序的结构

• 头文件 (header file): 包含了 MPI 库提供的函数接口定义

C include file		Fortran include file	
#in	clude "mpi.h"	include 'mpif.h'	

- 函数接口的调用格式
  - ▶ MPI 中函数、变量、参数均以 MPI\_ 作为前缀

C Binding		
Format:	rc = MPI_Xxxxx(parameter,)	
Example:	rc = MPI_Bsend(&buf,count,type,dest,tag,comm)	
Error code:	Returned as "rc". MPI_SUCCESS if successful	
Fortran Binding		
Format:	CALL MPI_XXXXX(parameter,, ierr) call mpi_xxxxx(parameter,, ierr)	
Example:	CALL MPI_BSEND(buf,count,type,dest,tag,comm,ierr)	
Error code:	Returned as "ierr" parameter. MPI_SUCCESS if successful	

## MPI 定义的函数

- MPI-3 有超过 430 个函数 (包含 MPI-1、MPI-2 大部分函数);
- 从应用角度 (包括功能和性能) 上看, 只有 20 多个函数是常用的;
- 单纯从功能上说,只需要 6 个函数就可以完成所有 MPI 功能。

#### The minimal set of MPI routines.

MPI_Init	Initializes MPI.
MPI_Finalize	Terminates MPI.
MPI_Comm_size	Determines the number of processes.
MPI_Comm_rank	Determines the label of the calling process.
MPI_Send	Sends a message.
MPI_Recv	Receives a message.

## MPI 库的启动和结束

- MPI\_Init 一般在主程序的开头,主要用于启动 MPI 环境;
- MPI\_Finalize 一般在主程序末尾,主要用于终止 MPI 环境;
- 这两个函数的语法如下:

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

• 如果运行正常,所有 MPI 函数的返回值都是 MPI\_SUCCESS 常量。

# 我在哪?——通信器 (communicator)

- 定义了所有参与通信的进程的集合;
- 几乎所有的 MPI 函数都需要指定该函数所作用的通信器;
- 通信器变量的数据类型是 MPI\_Comm;
- 默认通信器是 MPI\_COMM\_WORLD (所有进程)。

#### MPI\_COMM\_WORLD



# 我是谁?——获取进程信息

- MPI\_Comm\_size 函数用来获得目标通信器的总进程数;
- MPI\_Comm\_rank 函数用来获得当前进程在目标通信器的进程号;
- 这两个函数的语法如下:

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

- rank 的范围: 0,1,...,size 1.
- 同一个进程可以属于不同的通信器,因此 rank 也可能不同!

## 第一个 MPI 程序: hello world!

#### mpi\_hello.c

```
#include <mpi.h> // mpi header file
    #include <stdio.h> // standard I/O
3
4
    int main(int argc, char *argv[]){
5
      int size, rank;
6
      MPI_Init(&argc, &argv); // initialize MPI
8
      MPI_Comm_size(MPI_COMM_WORLD, &size); // get num of procs
9
      MPI_Comm_rank(MPI_COMM_WORLD, &rank); // get my rank
10
      printf("From process %d of %d: Hello World!\n", rank, size);
11
      if (rank == 0) printf("That's all, folks!\n");
12
      MPI_Finalize(); // done with MPI
13
      return 0;
14
```

## 程序的编译与运行

• 加载 MPI 库环境:

```
$ module add mpich
```

• 编译:

```
$ mpicc mpi_hello.c -o hello
```

• 运行 (请正确使用 sbatch 或者 salloc):

```
$ mpiexec -n 4 ./hello
```

# 运行结果

#### • 第一次运行:

```
From process 3 of 4: Hello World!
From process 1 of 4: Hello World!
From process 2 of 4: Hello World!
From process 0 of 4: Hello World!
That's all, folks!
```

#### • 第二次运行:

```
From process 2 of 4: Hello World!
From process 1 of 4: Hello World!
From process 0 of 4: Hello World!
That's all, folks!
From process 3 of 4: Hello World!
```

#### • 为什么?

# 内容提纲

- 1 入门知识
- ② 点对点通信
- ③ 死锁与非阻塞通信
- 4 集合通信
- 5 辅助函数
- 6 点对点通信实践机制
- 通信器与进程组
- ② 补遗与新特性

# 基本消息传递——发送与接收

- MPI\_Send 函数用来发送消息;
- MPI\_Recv 函数用来接收消息;
- 这两个函数语法如下:

```
int MPI_Send(void *buf, int count, MPI_Datatype datatype, int
   dest, int tag, MPI_Comm comm)
int MPI_Recv(void *buf, int count, MPI_Datatype datatype, int
   source, int tag, MPI_Comm comm, MPI_Status *status)
```

- tag 表示消息标签 (非负整数), 最大不超过常量 MPI\_TAG\_UB;
- buf 表示发送和接收的消息所对应的本地内存位置;
- count 表示发送和接收的消息长度;
- datatype 表示发送和接收的消息的数据类型;
- dest 和 source 分别表示接收端和发送端的进程号。

思考:接收端和发送端所设定的消息长度可以不一样吗?

# MPI 数据类型

• MPI\_Datatype 定义了若干常用数据类型:

MPI Datatype	C Datatype
MPI_CHAR	signed char
MPI_SHORT	signed short int
MPI_INT	signed int
MPI_LONG	signed long int
MPI_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	

- MPI\_BYTE 是字节类型 (8 bits);
- MPI\_PACKED 是多个数据的聚合类型,用于不连续数据的打包。

### MPI 通信状态

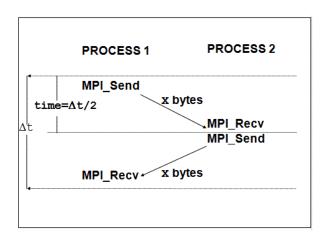
- 接收函数比发送函数多一个参数: status;
- 它保存了函数返回的通信状态,可置为 MPI\_STATUS\_IGNORE;
- 其类型 MPI\_Status 是一个 MPI 预定义的结构体:

```
typedef struct MPI_Status {
  int MPI_SOURCE;
  int MPI_TAG;
  int MPI_ERROR;
  ...
};
```

• 可以使用 MPI\_Get\_count 函数得到接收消息的大小:

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

# 示例程序: 乒乓通信 (1)



# 示例程序: 乒乓通信 (2)

#### mpi\_pingpong.c

```
#include <mpi.h>
    #include <stdio.h>
3
4
    int main(int argc, char *argv[]){
5
      int token, size, rank;
6
      MPI_Init(&argc, &argv);
8
      MPI_Comm_size(MPI_COMM_WORLD, &size);
9
      MPI_Comm_rank(MPI_COMM_WORLD, &rank);
10
11
      if (rank == 0) {
12
        token = -1:
13
        MPI_Send(&token, 1, MPI_INT, 1-rank, 0, MPI_COMM_WORLD);
14
        printf("Process %d pinged token %d to process %d\n", rank,
        token, 1-rank);
15
        MPI_Recv(&token, 1, MPI_INT, 1-rank, 0, MPI_COMM_WORLD,
        MPI_STATUS_IGNORE);
```

# 示例程序: 乒乓通信 (3)

```
16
        printf("Process %d ponged token %d from process %d\n", rank
        , token, 1-rank);
17
      } else if (rank == 1) {
18
        MPI_Recv(&token, 1, MPI_INT, 1-rank, 0, MPI_COMM_WORLD,
        MPI_STATUS_IGNORE);
19
        MPI_Send(&token, 1, MPI_INT, 1-rank, 0, MPI_COMM_WORLD);
20
21
22
      MPI_Finalize();
23
      return 0;
24
```

## 运行结果

• 运行 (请正确使用 sbatch 或者 salloc):

```
$ mpiexec -n 2 ./pingpong
```

• 运行结果:

```
Process 0 pinged token -1 to process 1
Process 0 ponged token -1 from process 1
```

# 小练习

• 尝试利用 MPI\_Status 检查通信状态

```
MPI_Status sta;
3
      if (rank == 0) {
4
       token = -1;
5
       MPI_Send(&token, 1, MPI_INT, 1-rank, 0, MPI_COMM_WORLD);
       printf("Process %d pinged token %d to process %d\n", rank
        , token, 1-rank);
       MPI_Recv(&token, 1, MPI_INT, 1-rank, 0, MPI_COMM_WORLD, &
        sta);
8
       printf("Process %d ponged token %d from process %d\n", rank
        , token, sta.MPI_SOURCE);
      } else if (rank == 1) {
10
```

# 示例程序: 交换通信 (1)

#### mpi\_exchange.c

```
#include <mpi.h>
    #include <stdio.h>
3
4
    int main(int argc, char *argv[]){
5
      int a, b, size, rank;
6
      MPI_Init(&argc, &argv);
8
      MPI Comm size(MPI COMM WORLD, &size);
9
      MPI Comm rank(MPI COMM WORLD, &rank);
10
11
      if (rank == 0) {
12
        a = -1:
13
        MPI_Send(&a, 1, MPI_INT, 1-rank, 0, MPI_COMM_WORLD);
14
        printf("Process %d sent token %d to process %d\n", rank, a,
         1-rank):
15
        MPI_Recv(&b, 1, MPI_INT, 1-rank, 0, MPI_COMM_WORLD,
        MPI STATUS_IGNORE);
```

# 示例程序: 交换通信 (2)

```
16
        printf("Process %d received token %d from process %d\n",
        rank, b, 1-rank);
17
      } else if (rank == 1) {
18
        a = 1:
19
        MPI_Recv(&b, 1, MPI_INT, 1-rank, 0, MPI_COMM_WORLD,
        MPI_STATUS_IGNORE);
20
        MPI_Send(&a, 1, MPI_INT, 1-rank, 0, MPI_COMM_WORLD);
21
22
23
      MPI Finalize();
24
      return 0;
25
```

## 运行结果

• 运行 (请正确使用 sbatch 或者 salloc):

```
$ mpiexec -n 2 ./exchange
```

• 运行结果:

```
Process 0 sent token -1 to process 1
Process 0 received token 1 from process 1
```

# 小练习

#### • 这部分代码:

#### • 是否可以修改为:

## MPI 数据交换

• 如果两个进程需要进行数据交换,可以使用发送接收组合操作:

```
int MPI_Sendrecv(void *sendbuf, int sendcount, MPI_Datatype
  senddatatype, int dest, int sendtag, void *recvbuf, int
  recvcount, MPI_Datatype recvdatatype, int source, int recvtag,
  MPI_Comm comm, MPI_Status *status)
```

• 如果交换的数据共用一个 buffer,则可借助于如下操作:

```
int MPI_Sendrecv_replace(void *buf, int count, MPI_Datatype
  datatype, int dest, int sendtag, int source, int recvtag,
  MPI_Comm comm, MPI_Status *status)
```

### MPI 数据交换示例

• 考虑下面的通信行为:

• 可以使用数据交换函数一次性完成:

```
Process: 0

sendrecv(a, 10, 1, tag1, b, 10, 1, tag2)

Process: 1

sendrecv(b, 10, 0, tag2, a, 10, 0, tag1)
```

# 小练习

• 尝试利用 MPI\_Sendrecv 完成数据交换:

#### mpi\_exchange2.c

```
1
2
      if (rank == 0) {
3
        a = -1;
        MPI_Sendrecv(&a, 1, MPI_INT, 1-rank, 0, &b, 1, MPI_INT
        , 1-rank, 0, MPI_COMM_WORLD, MPI_STATUS_IGNORE);
5
        printf("Process %d exchanged token %d to token %d with
         process %d\n", rank, a, b, 1-rank);
6
      } else if (rank == 1) {
        a = 1:
        MPI_Sendrecv(&a, 1, MPI_INT, 1-rank, 0, &b, 1, MPI_INT
        , 1-rank, 0, MPI_COMM_WORLD, MPI_STATUS_IGNORE);
9
10
```

• 尝试利用 MPI\_Sendrecv\_replace 完成数据交换。

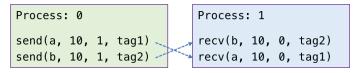
# 内容提纲

- 1 入门知识
- 2 点对点通信
- ③ 死锁与非阻塞通信
- 4 集合通信
- 5 辅助函数
- 6 点对点通信实践机制
- 7 通信器与进程组
- ⑧ 补遗与新特性

# 死锁 (deadlock)

• 考虑下面的通信行为:

• 如果改变消息的接收顺序, 会怎样?



- 产生了死锁 (deadlock)!
- 怎么避免?(1)程序员把控;(2)非阻塞 (non-blocking)通信。

# 阻塞 (blocking) vs 非阻塞 (non-blocking) 通信

• 阻塞 (blocking) 通信: 不成功不返回 (通信过程中该进程暂停)。

```
int MPI_Send(void *buf, int count, MPI_Datatype datatype, int dest,
   int tag, MPI_Comm comm)
int MPI_Recv(void *buf, int count, MPI_Datatype datatype, int source
   , int tag, MPI_Comm comm, MPI_Status *status)
```

• 非阻塞 (non-blocking) 通信: 交上去不管了 (后台执行通信)。

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

request 变量用来标记通信任务。

## 非阳塞通信状态的检测与控制

• 取消非阻塞通信:

```
int MPI_Cancel(MPI_Request *request)
```

检测非阻塞通信是否已经结束 (立即返回, flag 值为 0 表示未结 束):

```
int MPI_Test(MPI_Request *request, int *flag, MPI_Status *status)
```

等待非阻塞通信结束(通信结束后函数返回):

```
int MPI_Wait(MPI_Request *request, MPI_Status *status)
```

### 如果非阳塞通信没有结束,要小心使用 buf 中的数据!

- 不要修改 buf 中的发送数据; 不要使用 buf 中的接收数据。

### 非阻塞通信状态的批量检测与控制

• 检测/等待多个非阻塞通信:

• 检测/等待任一个非阻塞通信:

• 检测/等待任一些非阻塞通信: MPI\_Testsome, MPI\_Waitsome (略).

### 使用非阻塞通信避免死锁

• 使用非阻塞发送:

```
Process: 0

isend(a, 10, 1, tag1, &req1)
isend(b, 10, 1, tag2, &req2)
...
wait(&req1, &sta1)
wait(&req2, &sta2)

Process: 1

recv(b, 10, 0, tag2)
recv(a, 10, 0, tag1)
```

• 或者,使用非阻塞接收:

```
Process: 0

send(a, 10, 1, tag1)
send(b, 10, 1, tag2)

Process: 1

irecv(b, 10, 0, tag2, &req1)
irecv(a, 10, 0, tag1, &req2)
...

wait(&req1, &sta1)
wait(&req2, &sta2)
```

• 思考: wait 的顺序有影响吗? tag 可以去掉吗?

### MPI 墙钟时间

• 返回当前进程的时钟时间:

```
double MPI_Wtime()
```

• 用法:

```
1 ...
2 t0 = MPI_Wtime();
3 ... // do some works
4 t1 = MPI_Wtime();
5 ...
```



• 返回 MPI\_Wtime 的时钟刻度:

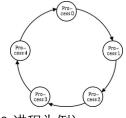
```
double MPI_Wtick()
```

### 作业 1: 击鼓传花

 完成击鼓传花程序,要求运用 MPI 点对点通信, 在此基础上可以增加对延迟的测试等内容,程序 需要有简单的说明;

• 截止时间: 2019 年 10 月 23 日 24 点前。

• 提交方式: 发送至助教邮箱。



• 正确性验证: 数院机器, 支持 2 至 16 进程(以 8 进程为例)

```
$ mpiexec -n 8 ./mpi_hw1
Process 1 received token -1 from process 0
Process 2 received token -1 from process 1
Process 3 received token -1 from process 2
Process 4 received token -1 from process 3
Process 5 received token -1 from process 4
Process 6 received token -1 from process 5
Process 7 received token -1 from process 6
Process 0 received token -1 from process 7
```

## 内容提纲

- 1 入门知识
- 2 点对点通信
- ③ 死锁与非阻塞通信
- 4 集合通信
- 5 辅助函数
- 6 点对点通信实践机制
- 7 通信器与进程组
- ⑧ 补遗与新特性

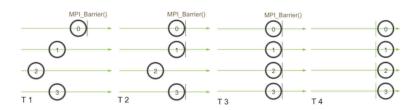
## MPI 集合通信 (collective communication) 概述

- MPI 集合通信是指涉及到通信器中所有进程的通信,有三类:
  - ▶ 同步 (synchronization): barrier 等;
  - ▶ 数据移动: broadcast, scatter/gather, all to all 等;
  - ▶ 规约 (reduction): reduce, all reduce, reduce scatter 等。
- MPI 集合通信的一些特点:
  - ▶ 通信器中所有进程必须同时调用该操作;
  - ▶ 不需要指定 tag;
  - ▶ 所有的集合通信都是某种意义的同步操作。

### MPI 栅栏同步

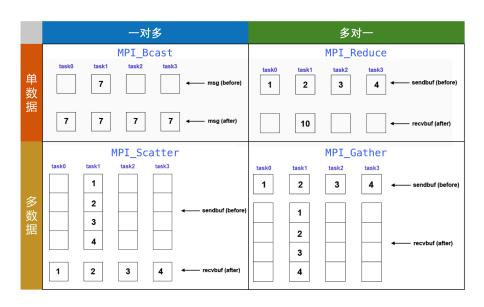
• 通信器中所有进程相互等待至某个同步点:

int MPI\_Barrier(MPI\_Comm comm)



• 思考: 这种栅栏同步底层是怎么实现的呢?

## MPI "一对多"与"多对一"通信概览



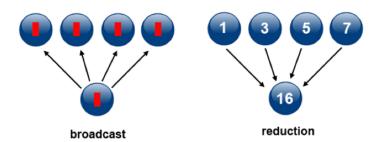
#### MPI 广播与规约

● 广播 (broadcast):

```
int MPI_Bcast(void *buf, int count, MPI_Datatype datatype, int
    source, MPI_Comm comm)
```

• 规约 (reduce):

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



### 规约操作的类型

• MPI\_Op 是 MPI 自定义操作,主要有:

Operation	Meaning	Datatypes					
MPI_MAX	Maximum	C integers and floating points					
MPI_MIN	Minimum	C integers and floating points					
MPI_SUM	Sums the elements	C integers and floating points					
MPI_PROD	Multiplies the elements	C integers and floating points					
MPI_LAND	Logical AND	C integers					
MPI_BAND	Bit-wise AND	C integers and bytes					
MPI_LOR	Logical OR	C integers					
MPI_BOR	Bit-wise OR	C integers and bytes					
MPI_LXOR	Logical XOR	C integers					
MPI_BXOR	Bit-wise XOR	C integers and bytes					
MPI_MAXLOC	Max value and the rank	Data-pairs					
MPI_MINLOC	Min value and the rank	Data-pairs					

# 示例程序:广播与规约(1)

#### mpi\_bcast\_reduce.c

```
#define ROOT 0 // Rank of the root process
3
4
    int main(int argc, char **argv){
5
      . . .
6
      /* Set the data on root process */
      if (rank == ROOT) {
8
        data = 100;
        printf("On root proc %d, data to be broadcast: %d\n", rank,
         data):
10
      }
11
12
      /* Broadcast the data to everybody */
13
      MPI_Bcast(&data, 1, MPI_INT, ROOT, MPI_COMM_WORLD);
14
15
      /* Everybody shows the broadcast data */
16
      printf("On proc %d, data after broadcasting = %d\n", rank,
        data):
```

# 示例程序:广播与规约(2)

```
17
      MPI Barrier(MPI COMM WORLD);
18
19
      /* Modify the data to reduce */
20
      data = data + rank;
21
      printf("On proc %d, data to be reduced = %d\n", rank, data);
22
23
      /* Reduce everybody's data to root */
24
      MPI_Reduce(&data, &data_reduce, 1, MPI_INT, MPI_SUM, ROOT,
        MPI COMM WORLD);
25
26
      /* On root, show the reduced data */
27
      if (rank == ROOT) {
28
        printf("On root proc %d, data reduced: %d\n", rank,
        data_reduce);
29
30
```

# 示例程序:广播与规约(3)

运行 (请正确使用 sbatch 或者 salloc):

```
$ mpiexec -n 4 ./bcast_reduce
On root proc 0, data to be broadcast: 100
On proc 0, data after broadcasting = 100
On proc 2, data after broadcasting = 100
On proc 3, data after broadcasting = 100
On proc 1, data after broadcasting = 100
On proc 0, data to be reduced = 100
On proc 2, data to be reduced = 102
On proc 1, data to be reduced = 101
On proc 3, data to be reduced = 103
On root proc 0, data reduced: 406
```

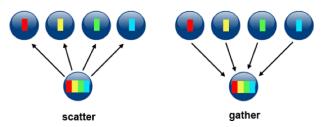
#### MPI 分发与集中

#### • 分发 (scatter):

```
int MPI_Scatter(void *sendbuf, int sendcount, MPI_Datatype
  senddatatype, void *recvbuf, int recvcount, MPI_Datatype
  recvdatatype, int source, MPI_Comm comm)
```

#### • 集中 (gather):

```
int MPI_Gather(void *sendbuf, int sendcount, MPI_Datatype
  senddatatype, void *recvbuf, int recvcount, MPI_Datatype
  recvdatatype, int target, MPI_Comm comm)
```



## 示例程序:分发与集中(1)

#### $mpi\_scatter\_gather.c$

```
#define N 2 // Number of data per process
    #define ROOT 0 // Rank of the root process
4
5
    int main(int argc, char **argv){
6
      /* Set the data on root process */
      if (rank == ROOT) {
        printf("On root proc %d, data to be scattered:\n", rank);
10
        for ( j=0; j<size; j++) {</pre>
11
          for ( i=0; i<N; i++ ) {</pre>
12
            data_root[j][i] = j+i;
13
            printf("(%d, %d) = %d ", j, i, data_root[j][i]);
14
15
          printf("\n");
16
17
18
```

# 示例程序: 分发与集中 (2)

```
19
      /* Scatter the data to everybody */
20
      MPI_Scatter(&data_root[0][0], N, MPI_INT, &data[0], N,
        MPI_INT, ROOT, MPI_COMM_WORLD);
21
22
      /* Everybody shows the scatterd data */
23
      for (i=0; i<N; i++) {</pre>
24
        printf("On proc %d, scattered data[%d] = %d\n", rank, i,
        data[i]):
25
26
      MPI Barrier(MPI COMM WORLD);
27
28
      /* Gather everybody's data to root */
29
      MPI_Gather(&data[0], N, MPI_INT, &data_root[0][0], N, MPI_INT
         , ROOT, MPI COMM WORLD);
30
31
      /* On root, show the gathered data */
32
      if (rank == ROOT) {
33
        printf("On root proc %d, data gathered:\n", rank);
34
        for ( j=0; j<size; j++) {</pre>
```

# 示例程序: 分发与集中 (3)

• 运行 (请正确使用 sbatch 或者 salloc):

```
$ mpiexec -n 4 ./scatter_gather

Data to be scattered on root proc 0:
(0, 0) = 0 (0, 1) = 1
(1, 0) = 1 (1, 1) = 2
(2, 0) = 2 (2, 1) = 3
(3, 0) = 3 (3, 1) = 4
On proc 0, scattered data[0] = 0
On proc 0, scattered data[1] = 1
```

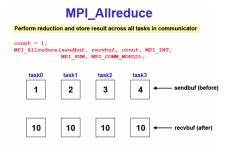
# 示例程序:分发与集中(4)

```
On proc 2, scattered data[0] = 2
On proc 2, scattered data[1] = 3
On proc 1, scattered data[0] = 1
On proc 3, scattered data[0] = 3
On proc 3, scattered data[1] = 4
On proc 1, scattered data[1] = 2
Data gathered on root proc 0:
(0, 0) = 0 (0, 1) = 1
(1, 0) = 1 (1, 1) = 2
(2, 0) = 2 (2, 1) = 3
(3, 0) = 3 (3, 1) = 4
```

## MPI "多对多"通信 (1)

• 全规约 (allreduce):

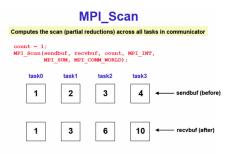
```
int MPI_Allreduce(void *sendbuf, void *recvbuf, int count,
    MPI_Datatype datatype, MPI_Op op, MPI_Comm comm)
```



## MPI "多对多"通信 (2)

• 前缀和 (scan, prefix-sum):

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

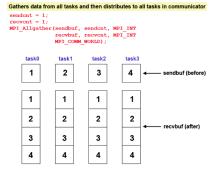


# MPI "多对多"通信 (3)

#### • 全集中 (allgather):

```
int MPI_Allgather(void *sendbuf, int sendcount, MPI_Datatype
  senddatatype, void *recvbuf, int recvcount, MPI_Datatype
  recvdatatype, MPI_Comm comm)
```

#### MPI\_Allgather

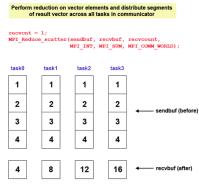


## MPI "多对多"通信 (4)

• 规约分发 (reduce\_scatter):

int MPI\_Reduce\_scatter(void \*sendbuf, void \*recvbuf, const int
 recvcount[], MPI\_Datatype datatype, MPI\_Op op, MPI\_Comm comm)

#### MPI\_Reduce\_scatter



# MPI "多对多"通信 (5)

#### • 全交换 (alltoall):

```
int MPI_Alltoall(void *sendbuf, int sendcount, MPI_Datatype
  senddatatype, void *recvbuf, int recvcount, MPI_Datatype
  recvdatatype, MPI_Comm comm)
```

#### MPI\_Alltoall

#### Scatter data from all tasks to all tasks in communicator

task	:0	task1	task2	task3							
1		5	9	13	← sendbuf (before)	1	2		7	4	recvbuf (after)
2		6	10	14		5	6			8	
3		7	11	14		9	10		11	12	
4		8	12	16		13	14		15	16	

## 内容提纲

- ① 入门知识
- ② 点对点通信
- ③ 死锁与非阻塞通信
- 4 集合通信
- 5 辅助函数
- 6 点对点通信实践机制
- 7 通信器与进程组
- ⑧ 补遗与新特性

### 一些重要的辅助函数

• 判断 MPI 是否已经初始化:

```
int MPI_Initialized(int *flag)
```

• 中止 MPI 环境:

```
int MPI_Abort(MPI_Comm comm, int errorcode)
```

• 获取 MPI 版本号:

```
int MPI_Get_version(int *version, int *subversion)
```

• 获取处理器名:

```
int MPI_Get_processor_name(char *name, int *resultlen);
```

# 示例程序: hello world 2! (1)

#### mpi\_hello2.c

```
1
      MPI_Init(&argc, &argv); // initialize MPI
3
      MPI_Comm_size(MPI_COMM_WORLD, &size); // get num of procs
4
      MPI_Comm_rank(MPI_COMM_WORLD, &rank); // get my rank
5
      MPI_Get_processor_name(name, &len); // get node name
6
      MPI_Get_version(&ver, &sver); // get mpi version
8
      if (size > 16) {
9
        printf("Number of processes %d is too large. Abort MPI!\n",
         size);
10
        MPI Abort (MPI COMM WORLD, 911); // abort mpi for large size
11
12
13
      t0 = MPI_Wtime(); // tick
14
      printf("On %s, from process %d of %d: Hello World!\n", name,
        rank, size);
15
      fflush(stdout); // flush standard output
```

# 示例程序: hello world 2! (2)

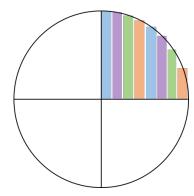
```
16     MPI_Barrier(MPI_COMM_WORLD); // barrier for the flush
17     t1 = MPI_Wtime(); // tock
18
19     if (rank == 0) printf("MPI version is %1d.%1d. Time ellapsed
        is %f.\nThat's all, folks!\n", ver, sver, t1-t0);
20     ...
```

#### • 运行结果:

```
On cu01, from process 2 of 4: Hello World!
On cu01, from process 0 of 4: Hello World!
On cu01, from process 3 of 4: Hello World!
On cu01, from process 1 of 4: Hello World!
MPI version is 3.1. Time elapsed is 0.000086.
That's all, folks!
```

## 示例程序: 计算 $\pi$ (1)

• 计算依据: 单位圆的面积。



• 并行策略: round-robin。

$$\pi = 4 \int_0^1 \sqrt{1 - x^2} dx$$
$$\approx 4h \sum_{i=0}^{N-1} \sqrt{1 - x_i^2},$$

where

$$x_i = (i + \frac{1}{2})h, \quad h = \frac{1}{N}.$$

## 示例程序: 计算 $\pi$ (2)

#### mpi\_cpi.c

```
1
      if (rank == 0) n = 10000000;
3
      MPI_Bcast(&n, 1, MPI_INT, 0, MPI_COMM_WORLD);
4
5
      t0 = MPI_Wtime();
6
      for (k = 0; k < REPEAT; k++) {
        h = 1.0 / (double) n;
8
        sum = 0.0:
9
        for (i = rank + 1; i <= n; i += size) {
10
          x = h * ((double)i - 0.5);
11
          sum += 4.0 * sqrt(1.-x*x);
12
13
        mypi = h * sum;
14
        MPI_Allreduce(&mypi, &pi, 1, MPI_DOUBLE, MPI_SUM,
        MPI_COMM_WORLD);
15
16
      t1 = MPI_Wtime();
```

# 示例程序: 计算 $\pi$ (3)

```
if (rank == 0) {
   printf("Number of processes = %d\n", size);
   printf(" pi is approximately %.16f\n", pi);
   printf(" Error is %.16f\n", fabs(pi-PI25DT));
   printf(" Wall clock time = %f\n", (t1-t0)/REPEAT);
}
...
```

#### ● 运行 (请正确使用 sbatch 或者 salloc):

```
$ mpiexec -n 1 ./cpi
$ mpiexec -n 2 ./cpi
$ mpiexec -n 4 ./cpi
$ mpiexec -n 8 ./cpi

Number of processes = 1
pi is approximately 3.1415926536003460
Error is 0.0000000000105529
```

# 示例程序: 计算 $\pi$ (4)

```
Wall clock time = 0.104462
Number of processes = 2
pi is approximately 3.1415926536009313
Error is 0.000000000111382
Wall clock time = 0.061566
Number of processes = 4
pi is approximately 3.1415926536006418
Error is 0.000000000108487
Wall clock time = 0.039160
Number of processes = 8
pi is approximately 3.1415926536006591
Error is 0.000000000108660
 Wall clock time = 0.026021
```

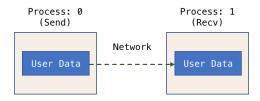
- 思考 1: 为什么加速比不是线性的?
- 思考 2: 为什么误差不同?

## 内容提纲

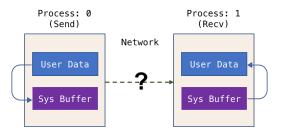
- ① 入门知识
- 2 点对点通信
- ③ 死锁与非阻塞通信
- 4 集合通信
- 5 辅助函数
- 6 点对点通信实践机制
- ☑ 通信器与进程组
- ② 补遗与新特性

# MPI 系统缓冲 (system buffer)

• MPI Send/Recv 的接口:

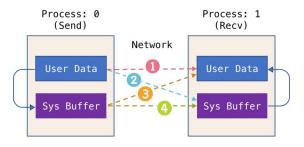


• 借助 MPI 系统缓冲, Send/Recv 的底层实现有几种方式?



### 基于 MPI 系统缓冲的 Send/Recv 的底层实现

• 借助 MPI 系统缓冲, Send/Recv 的底层实现包括:



• MPI 底层会根据具体实现、消息大小等选择合适的方式。

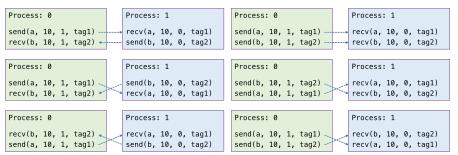
### 阻塞通信的再思考

• 阻塞发送/接收函数,哪个可以提前返回?

```
Process: 0

send(a, 10, 1, tag1) ------- recv(a, 10, 0, tag1)
```

- ▶ 发送函数:将消息拷贝至系统缓冲(如可用!);
- ▶ 接收函数: 收到消息。
- 讨论: 如下哪些情况一定产生死锁? 哪些可能产生? 哪些一定不会?



## 发送函数的分类 (1)

- 同步 (synchronous) 模式: MPI\_Ssend
  - ▶ 无论接收端是否启动接收,发送端可在任意时间启动发送;
  - ▶ 只有在接收端启动接收后,发送端才返回;
  - ► 发送端返回不仅表示缓冲区可以使用,还表示接收端已经到达了某个程序点 (进行了握手同步)。
- 就绪 (ready) 模式: MPI\_Rsend
  - ▶ 仅当对方的接收操作启动且准备就绪,才发送数据 (否则报错);
  - ▶ 语义上和同步发送完全一致,避免了额外的缓冲区操作和发送 接收方的握手操作。
- 缓冲 (buffered) 模式: MPI\_Bsend
  - ▶ 发送端把数据拷贝到用户提供的临时缓冲区;
  - ▶ 函数返回时,发送缓冲区可以用。
- 上述三种模式与 MPI\_Send 语法完全相同。

## 缓冲发送的用法

● 缓冲发送函数 MPI\_Bsend 在使用前后需要用户使用如下函数显式 地指定和释放内部缓冲区:

```
int MPI_Buffer_attach(void* buffer, int length)
int MPI_Buffer_detach(void* buffer_addr, int* length_addr)
```

- 缓冲区应不小于发送数据所需的总空间,在此基础上还需要加上额外空间长度 MPI\_BSEND\_OVERHEAD.
- 对比区分: 程序中的发送缓冲和用户指定的 bsend 缓冲区.

## 练习 (1)

• 研究并测试 mpi\_bsend.c 程序,找出程序的问题.

```
1
    #define n 300
    int main(int argc, char** argv) {
      int size, rank, i, a[n], b[n];
4
5
      int buf_len = MPI_BSEND_OVERHEAD + n*sizeof(int);
6
      int *buf = malloc(buf_len);
8
      MPI Init(&argc, &argv);
9
      MPI_Comm_size(MPI_COMM_WORLD, &size);
10
      MPI_Comm_rank(MPI_COMM_WORLD, &rank);
11
12
      if (rank == 0) {
13
        for (i = 0; i < n; i++) {
14
          a[i] = i+10; b[i] = -i-100;
15
16
        MPI_Buffer_attach(buf, buf_len);
```

# 练习 (2)

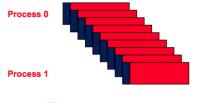
```
17
        MPI Bsend(a, n, MPI INT, 1-rank, 0, MPI COMM WORLD);
18
        MPI_Bsend(b, n, MPI_INT, 1-rank, 1, MPI_COMM_WORLD);
19
        MPI_Buffer_detach(&buf, &buf_len);
20
      } else if (rank == 1) {
21
        MPI_Recv(b, n, MPI_INT, 1-rank, 1, MPI_COMM_WORLD,
        MPI STATUS IGNORE);
22
        printf("Process %d received %d intergers (first entry: %d)
        from process %d\n", rank, n, b[0], 1-rank);
23
        MPI_Recv(a, n, MPI_INT, 1-rank, 0, MPI_COMM_WORLD,
        MPI STATUS_IGNORE);
24
        printf("Process %d received %d intergers (first entry: %d)
        from process %d\n", rank, n, a[0], 1-rank);
25
26
      free(buf);
27
```

# 发送函数的分类 (2)

- 标准 (standard) 模式: MPI\_Send
  - ▶ 可以是同步的或缓冲的,给予系统以灵活选择的机会;
    - ★ 对短消息,一般采用缓冲模式;
    - ★ 对长消息,一般采用同步模式,不同在于数据传输完成才返回;
    - ★ 长短消息的切换点,可以配置。
- 非阻塞发送
  - ▶ 上述发送也有对应的非阻塞版本,但是极少使用。
- 一些建议
  - ► 发送函数:尽量采用标准模式的 MPI\_Send,除非知道自己在 干什么;
  - ▶ 接收函数:如果有必要,采用非阻塞版本 MPI\_Irecv,并尽早发起。

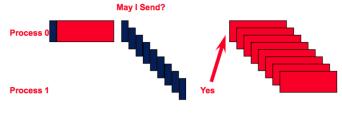
## 点对点通信的底层协议 (protocol)

• 急迫 (eager) 协议:发送方就绪就可以发送数据。



Time

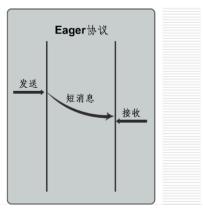
• 汇合 (rendezvous) 协议:双方均就绪才发送数据。

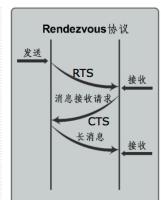


Time

### 两种协议的比较

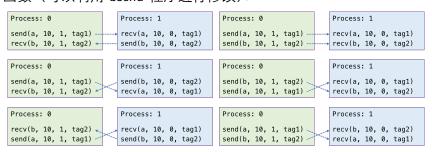
- 急迫协议:引入底层缓冲开销,减少同步开销,适合短消息传输。
- 汇合协议:可以避免缓冲,引入同步开销,适合长消息传输。
- MPI 系统自动选择,用户可调节切换策略 (如 EAGER\_LIMIT 等)。





## 练习

● 从下图中选择一种感兴趣的通信场景,测试不同的 MPI 发送/接收 函数 (可以利用 bsend 程序进行修改):



## 内容提纲

- 1 入门知识
- 2 点对点通信
- ③ 死锁与非阻塞通信
- 4 集合通信
- 5 辅助函数
- 6 点对点通信实践机制
- ☑ 通信器与进程组
- ② 补遗与新特性

## 通信器的再思考

- 定义了所有参与通信的进程的集合;
- 几乎所有的 MPI 函数都需要指定该函数所作用的通信器;
- 通信器变量的数据类型是 MPI\_Comm;
- 默认通信器是 MPI\_COMM\_WORLD (所有进程)。

#### MPI\_COMM\_WORLD



如果我们只打算对通信器中的部分进程进行集合通信 怎么办?

## 通信器的分裂 (split)

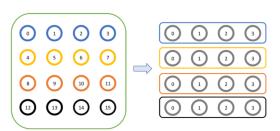
• 基于通信器,分裂出新的子通信器:

```
int MPI_Comm_split(MPI_Comm comm, int color, int key, MPI_Comm*
    newcomm)
```

- ▶ comm: 原始通信器, 没有消失;
- ▶ color:决定该进程属于哪个子通信器 (MPI\_UNDEFINED 排除);
- ▶ key: 决定该进程在子通信器中的 rank (从小到大);
- ▶ newcomm: 分裂出的子通信器。
- 释放不使用的通信器:

```
int MPI_Comm_free(MPI_Comm * comm)
```

## 示例程序: 分裂 (1)



#### mpi\_split.c

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

int main(int argc, char **argv){
   int rank, size, color, sub_rank, sub_size;
   MPI_Comm sub_comm;

MPI_Init(&argc, &argv);
```

## 示例程序: 分裂 (2)

```
9
      MPI_Comm_rank(MPI_COMM_WORLD, &rank);
10
      MPI Comm size(MPI COMM WORLD, &size);
11
12
      color = rank/4;
13
14
      MPI_Comm_split(MPI_COMM_WORLD, color, rank, &sub_comm);
15
16
      MPI_Comm_rank(sub_comm, &sub_rank);
17
      MPI_Comm_size(sub_comm, &sub_size);
18
19
      printf("World rank/size: %d/%d \t Sub rank/size: %d/%d\n",
        rank, size, sub rank, sub size);
20
21
      MPI_Comm_free(&sub_comm);
22
      MPI Finalize();
23
      return 0;
24
```

## 示例程序: 分裂 (3)

运行 (请正确使用 sbatch 或者 salloc):

```
$ mpiexec -n 16 ./split
World rank/size: 8/16 -- Sub rank/size: 0/4
World rank/size: 9/16 -- Sub rank/size: 1/4
World rank/size: 12/16 -- Sub rank/size: 0/4
World rank/size: 14/16 -- Sub rank/size: 2/4
World rank/size: 13/16 -- Sub rank/size: 1/4
World rank/size: 2/16 -- Sub rank/size: 2/4
World rank/size: 3/16 -- Sub rank/size: 3/4
World rank/size: 4/16 -- Sub rank/size: 0/4
World rank/size: 5/16 -- Sub rank/size: 1/4
World rank/size: 10/16 -- Sub rank/size: 2/4
World rank/size: 0/16 -- Sub rank/size: 0/4
World rank/size: 11/16 -- Sub rank/size: 3/4
World rank/size: 15/16 -- Sub rank/size: 3/4
World rank/size: 1/16 -- Sub rank/size: 1/4
World rank/size: 6/16 -- Sub rank/size: 2/4
World rank/size: 7/16 -- Sub rank/size: 3/4
```

# 进程组 (group) (1)

● 每个通信器包含一个唯一的 ID (MPI 内部管理) 以及对应一个进程组 (group),采用下面方式获取通信器的进程组:

```
int MPI_Comm_group(MPI_Comm comm, MPI_Group* group)
```

• 进程组包含了该通信器的进程信息,因此可以获取 rank 和 size:

```
int MPI_Group_rank(MPI_Group group, int* rank)
int MPI_Group_size(MPI_Group group, int* size)
```

# 进程组 (group) (2)

- 进程组不可以用于通信,但是可以用于创建新的进程组
  - ▶ 两个进程组的并:

▶ 两个进程组的交:

```
int MPI_Group_intersection(MPI_Group group1, MPI_Group
    group2, MPI_Group* newgroup)
```

▶ 指定 n 个进程:

```
int MPI_Group_incl(MPI_Group group, int n, const int ranks
[], MPI_Group* newgroup)
```

• 因此,同一个进程可以属于不同的进程组/通信器。

# 进程组 (group) (3)

• 基于进程组 (使用全局通信/局部通信),可以创建通信器:

```
int MPI_Comm_create(MPI_Comm comm, MPI_Group group, MPI_Comm*
    newcomm)
int MPI_Comm_create_group(MPI_Comm comm, MPI_Group group, int
    tag, MPI_Comm* newcomm)
```

## 示例程序: 进程组(1)

#### mpi\_group.c

```
#include <mpi.h>
    #include <stdio.h>
    int main(int argc, char **argv){
4
      int
                rank, size, sub_rank, sub_size;
5
      MPI_Group group, sub_group;
6
      MPI_Comm sub_comm;
      const int ranks [4] = \{2, 3, 5, 7\};
8
9
      MPI_Init(&argc, &argv);
10
      MPI Comm_rank(MPI_COMM_WORLD, &rank);
11
      MPI Comm size(MPI COMM WORLD, &size);
12
13
      MPI_Comm_group(MPI_COMM_WORLD, &group);
14
      MPI_Group_incl(group, 4, ranks, &sub_group);
15
16
      MPI_Comm_create(MPI_COMM_WORLD, sub_group, &sub_comm);
17
18
      if (sub_comm != MPI_COMM_NULL) {
```

# 示例程序: 进程组 (2)

```
19
        MPI_Comm_rank(sub_comm, &sub_rank);
20
        MPI_Comm_size(sub_comm, &sub_size);
21
      } else {
22
        sub_rank = -1;
23
        sub size = -1:
24
25
26
      printf("World rank/size: %d/%d --- Sub rank/size: %d/%d\n",
        rank, size, sub rank, sub size);
27
28
      MPI_Group_free(&group);
29
      MPI_Group_free(&sub_group);
30
31
      if (sub comm != MPI COMM NULL) {
32
        MPI_Comm_free(&sub_comm);
33
34
      MPI Finalize();
35
      return 0;
36
```

## 示例程序: 进程组 (3)

• 运行 (请正确使用 sbatch 或者 salloc):

```
$ mpiexec -n 8 ./group
World rank/size: 0/8 --- Sub rank/size: -1/-1
World rank/size: 1/8 --- Sub rank/size: -1/-1
World rank/size: 2/8 --- Sub rank/size: 0/4
World rank/size: 4/8 --- Sub rank/size: -1/-1
World rank/size: 5/8 --- Sub rank/size: 2/4
World rank/size: 3/8 --- Sub rank/size: 1/4
World rank/size: 6/8 --- Sub rank/size: -1/-1
World rank/size: 7/8 --- Sub rank/size: 3/4
```

## 内容提纲

- ① 入门知识
- 2 点对点通信
- ③ 死锁与非阻塞通信
- 4 集合通信
- 5 辅助函数
- 6 点对点通信实践机制
- 7 通信器与进程组
- 补遗与新特性

## MPI-1 的一些其他特性

- 扩展数据类型:
  - ▶ 除了多种预定义的数据类型, MPI 允许用户自定义数据类型;
  - ▶ 自定义数据类型的数据在内存中可以是连续存储的,也可以是不连续的。
- 虚拟拓扑:
  - ▶ 支持通信器/进程组中的进程按照某种拓扑方式排列;
  - ▶ 主要有笛卡尔 (Cartesian) 和图 (Graph) 两种;
  - ▶ 可以反映底层网络物理连接,也可以纯粹为了编程方便。

### MPI-2 的一些重要新特性

- 动态进程: 进程数可以动态改变;
- 单边通信: 又称远程内存访问 (Remote Memory Access, RMA);
- 增强的集合通信:允许跨通信器进行集合通信;
- 外部接口:允许用户在上层对 MPI 函数进行封装;
- 并行 I/O: 支持并行文件的输入和输出。

## MPI-3 的一些重要新特性

- 非阻塞集合通信:支持非阻塞形式执行集合通信操作,可实现计算通信重叠;
- 新的单边通信: 可以更好地处理不同类型的内存模型;
- 邻居集合通信:定义在进程拓扑的基础上,实现邻居进程间的集合通信;
- 内部接口:允许用户通过 MPIT 工具接口 MPI 内部的变量信息。

MPI 标准的最新进展:

http://www.mpi-forum.org/docs/