#### Programação Paralela

Objetivo: Apresentar conceitos básico de programação paralela com MPI.



#### Apresentação

- Introdução;
- Arquiteturas paralelas;
- Análises de algoritmos;
- Comunicação em programas paralelos;
- Ambiente de desenvolvimento;

- Execução de programas paralelos: mpiexec
- MPI: conceitos básicos;
- Comunicação coletiva;
- Comunicação ponto a ponto;
- Paralelização de programas;
- Exemplos completos;
- Trilinos: introdução;

## Bibliografia

- MPI: A Message Passing Interface Standard http://www.mpi-forum.org/docs/mpi-3.1/mpi31-report.pdf
- Introduction to High Performance Scientific Computing,
   Victor Eijkhout –
   https://bitbucket.org/VictorEijkhout/hpc-book-and-course/src
- Parallel Computing for Science and Engineering, Victor Eijkhout – https://bitbucket.org/VictorEijkhout/parallelcomputing-book/src
- Parallel and Distributed Computation, Dimitri P. Bertsekas, 1988;
- Manuais Trilinos https://trilinos.org/about/documentation/
- Tutorial Python –
   https://docs.python.org/3/tutorial/index.html

#### Motivação

#### Porque computação paralela?

- Respostas em tempos de engenharia;
- Incerteza;
- Otimização;
- Múltiplas Físicas;
- Problemas 3D, transientes;
- Milhões, bilhões de células;

#### **Alternativas**

- Algoritmo melhor (programador mais inteligente!);
- Compilador melhor;
- Computador mais rápido;
- Usar vários processadores!

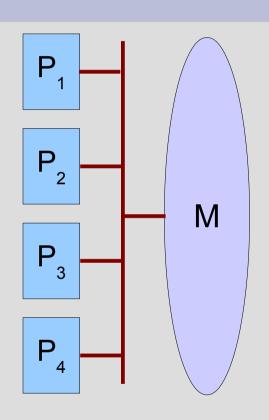
#### Porque Estudar Computação Paralela

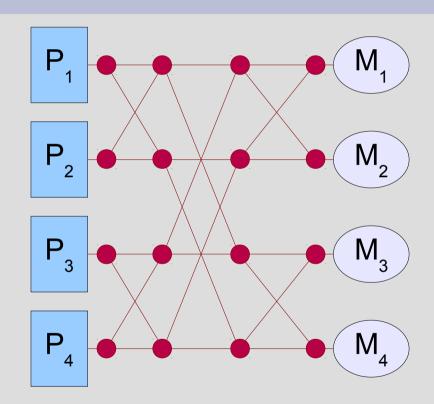
- Fatores que não existem na computação serial:
  - Decomposição de problemas e alocação de tarefas;
  - Comunicação entre processadores;
  - Sincronização;
- Aprender um padrão "universal" para escrita de programas portáteis: MPI;

## Classificação de Computadores Paralelos

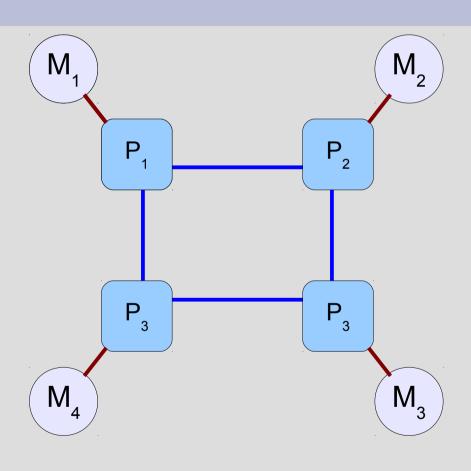
- Tipo e número de processadores:
  - Massivamente paralelos x "Coarse Grained"
- Mecanismo global de controle:
  - Ausente ou presente
  - SIMD x MIMD
- Operação síncrona ou assíncrona
- Comunicação entre processadores
  - Memória compartilhada x distribuída (troca de mensagens)

## Memória Compartilhada





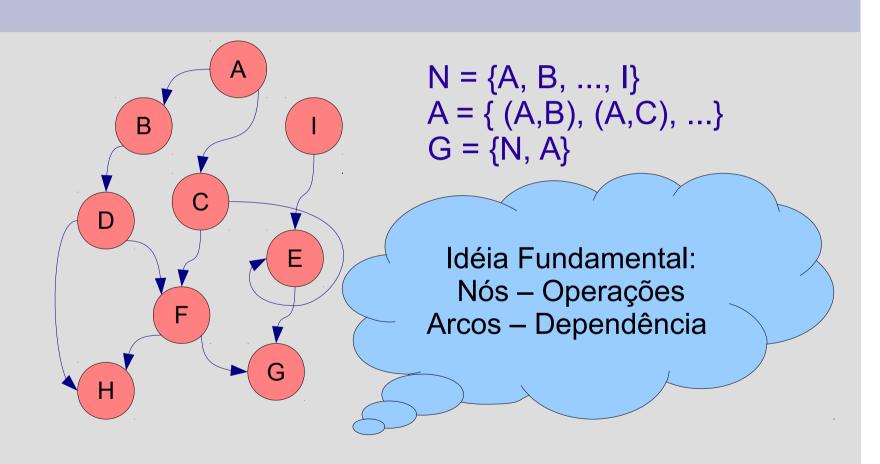
#### Memória Distribuída



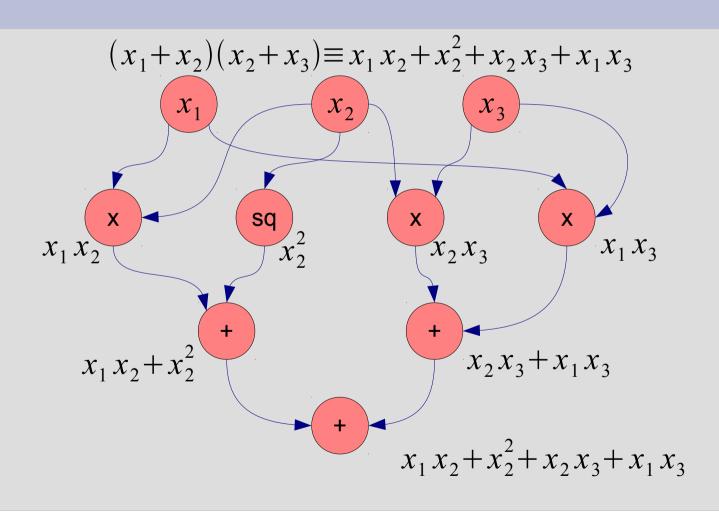
### Modelo para Computação Paralela

- Hipóteses Básicas:
  - a)Cada processador é um computador. sequencial convencional: laços, controle, etc.
  - b) Mecanismo para troca de informação.
  - c)Todas as operações levam 1 unidade de tempo.

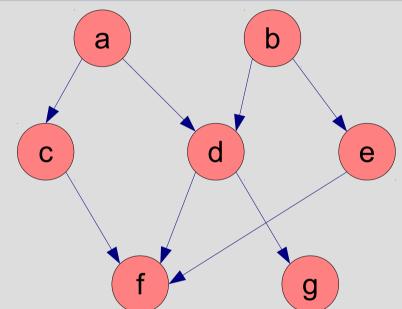
#### DAG - Directed Acyclic Graph



### Exemplo



### Terminologia



 $x_i = f_i (\{x_j \mid j \text{ \'e predecessor de } i\})$ 

Predecessor:

i é predecessor de j se  $(i, j) \in A$ 

Caminho Positivo:

$$\{(i_0, \dots, i_K) | (i_k, i_k+1) \in A; k=0, \dots, K-1\}$$

- ⋄Grau de entrada
- Grau de saída
- $\diamond N_0$
- Caminho Positivo
- ⋄Profundidade do DAG

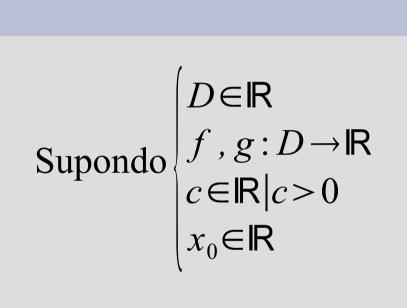
#### **Aspectos Importantes**

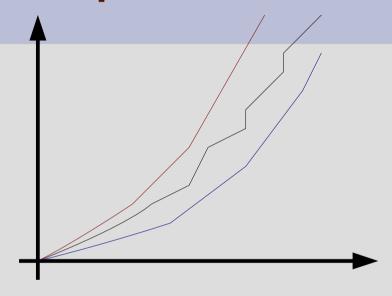
- DAG *não* representa todos os aspectos da operação de um algoritmo paralelo
- Representa:
  - Operações necessárias
  - Precedência das operações
- Não representa:
  - Aonde? (em qual processador)
  - Quando? (em que tempo será executado)

#### Agendamento

- Imaginando p processadores idênticos
- Para cada nó em  $N_0$  vamos atribuir um  $P_i$
- $t_i$ é o tempo no qual a operação será executada
- $t_i = 0$  para nós de entrada
- Consequências:  $\begin{cases} \operatorname{Se} i \neq j, t_i = t_j \Rightarrow P_i \neq P_j \\ (i, j) \in A \Rightarrow t_j \geq t_i + 1 \end{cases}$ 
  - Agendamento:  $\{(i, P_i, t_i) | i \in N_0\}$

#### Medidas de Complexidade

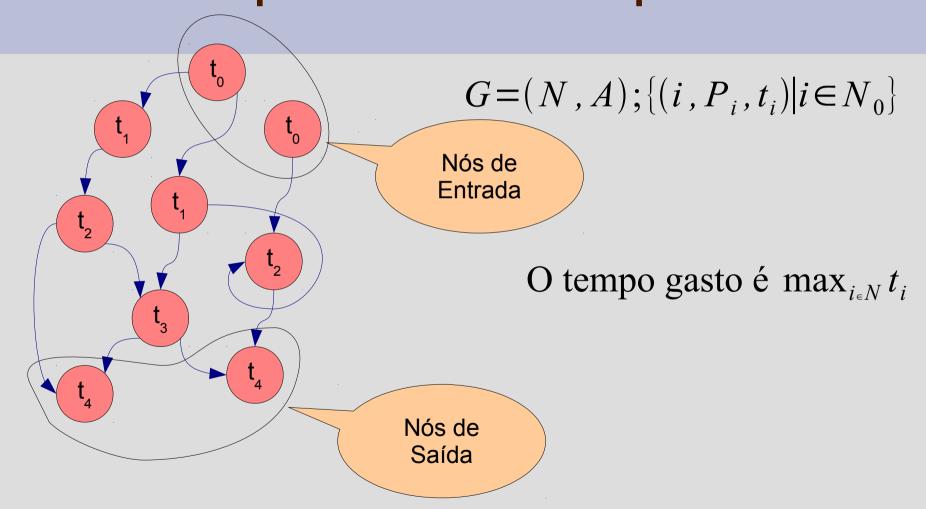




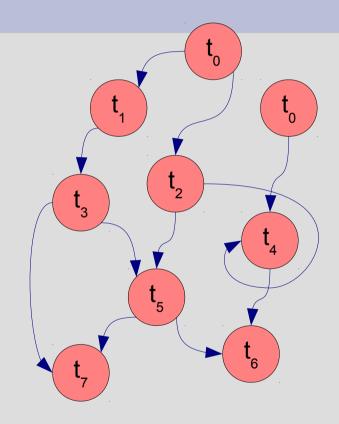
Se 
$$\forall x \ge x_0, |f(x)| \le c g(x)$$
, então  $f(x) = O(g(x))$   
Se  $\forall x \ge x_0, |f(x)| \ge c g(x)$ , então  $f(x) = \Omega(g(x))$ 

Se 
$$f(x) = O(g(x))e f(x) = \Omega(g(x))$$
, então  $f(x) = \Theta(g(x))$ 

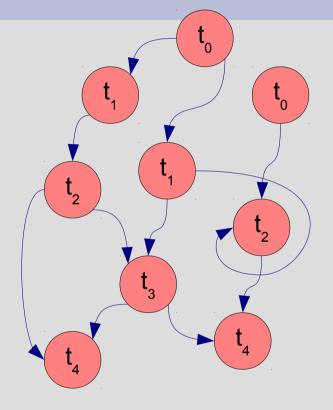
# Complexidade Temporal



## Agendamentos Alternativos



$$p = 1; \max(t_i) = 7$$



$$p=2$$
; max $(t_i)=4$ 

### Tempo de execução

 Considerando todos os possíveis schedules com p processadores, definimos:

$$T_p = \min(\max_{i \in N} t_i)$$

- Este é o menor tempo de execução possível com p processadores.
- Considerando uma disponibilidade infinita de processadores:

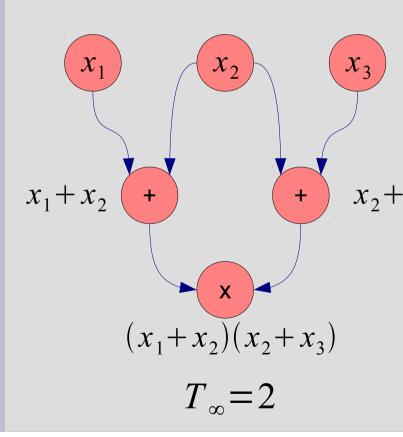
$$T_{\infty} = \min_{p \ge 1} T_p$$

#### Observações

```
T_p \ge 0
T_p não aumenta com p
\exists p^* | T_p = T_\infty, p \ge p^*, já \text{ que } p \text{ \'e inteiro}
T_\infty \'e a complexidade temporal do algoritmo
T_1 \'e o tempo para execução com 1 processador
T_1 = |N_0|
T_\infty = D
```

#### DAG Ótimo

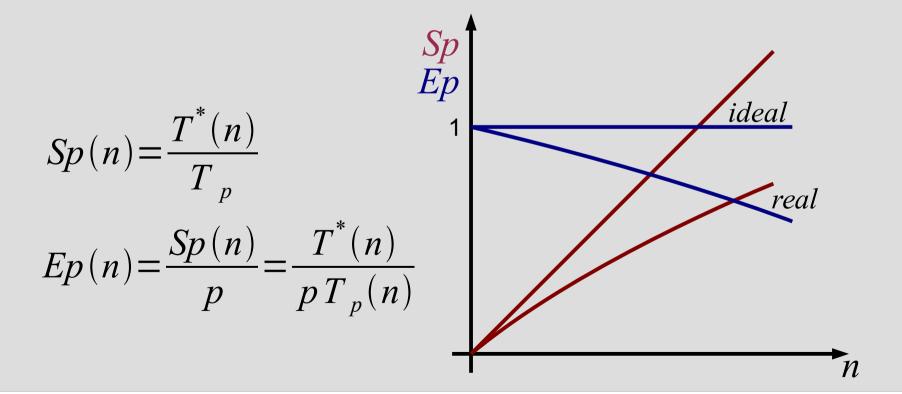
• Não é nada trivial!



Definimos  $T_p^*$  como o menor  $T_p$  entre todos os DAG  $x_2+x_3$  (algorimos) possíveis para um problema.

#### Speed-Up e Eficiência

 $T^*$  é definido como o tempo ótimo serial



#### Lei de Amdahl

- A maior parte dos problemas tem seções que são seqüenciais;
- Supondo que f seja a porcentagem do tempo de execução que é estritamente seqüencial:

$$T^{*}(n) = (f + (1 - f))T^{*}(n)$$

$$T_{\infty}(n) = f T^{*}(n) \text{ (paralelização perfeita!)}$$

$$Sp(n) = \frac{T^{*}(n)}{f T^{*}(n)} = \frac{1}{f}$$

$$\frac{f(\%) \text{ Sp(n)}}{50,0}$$

$$\frac{25,0}{25,0}$$

$$\frac{10,0}{5,0}$$

$$\frac{20}{20,0}$$

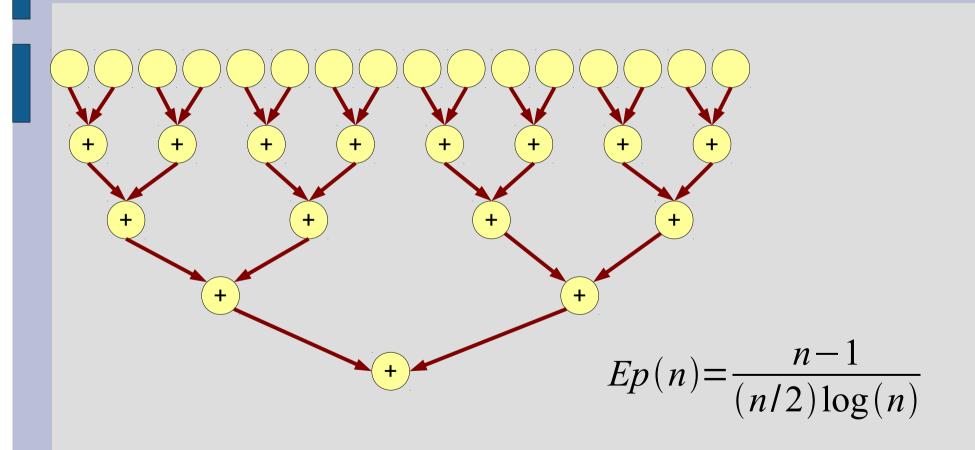
$$\frac{20}{10,0}$$

$$\frac{20}{10,0}$$

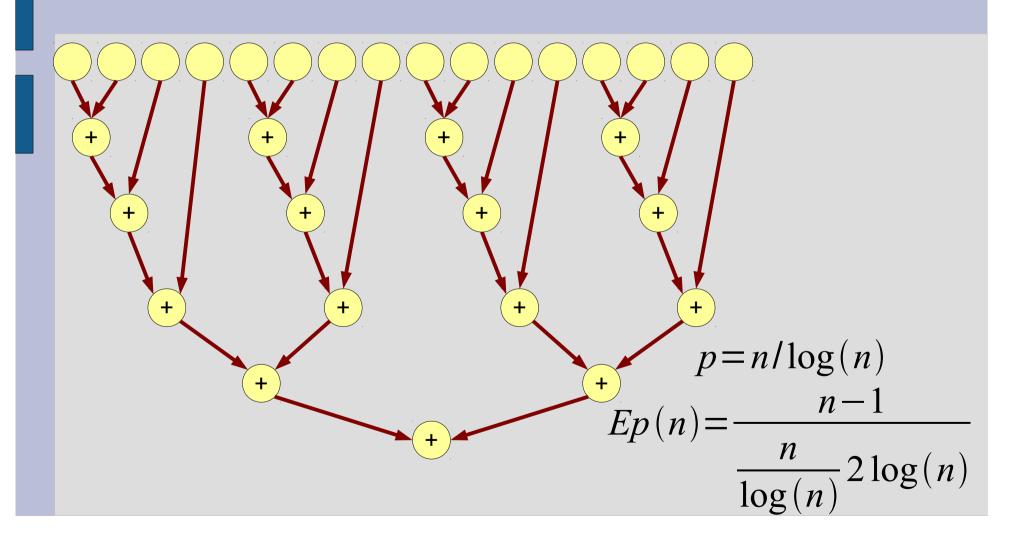
$$\frac{20}{10,0}$$

$$\frac{20}{10,0}$$

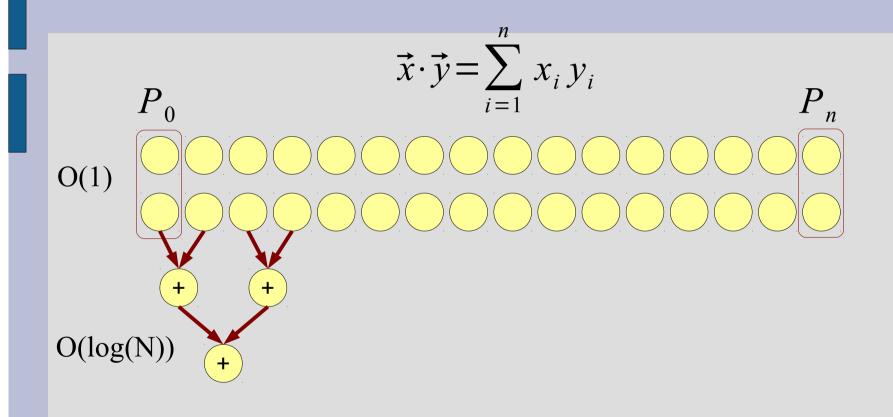
## Adição de n Números



## Adição de n Números



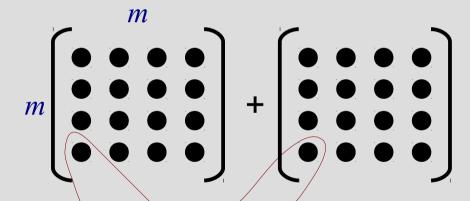
#### Produto Interno



#### Adição de 2 Matrizes

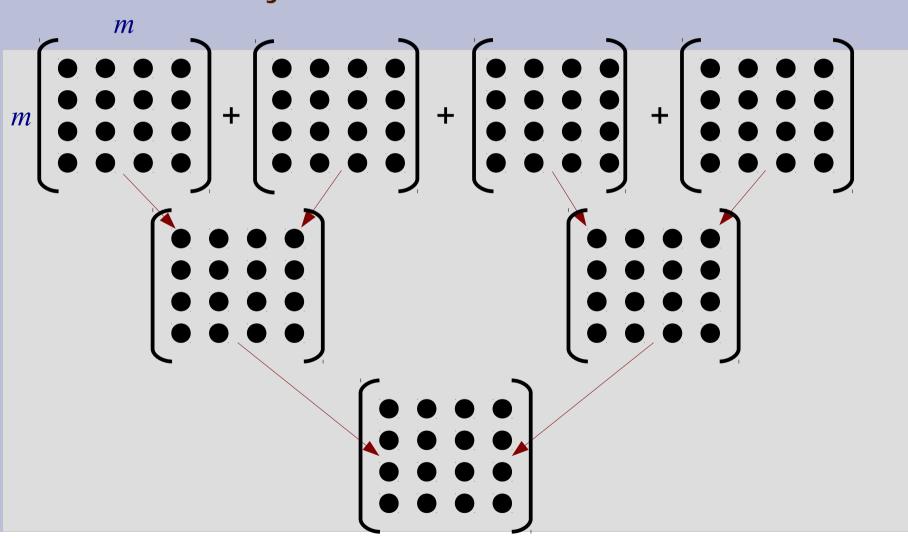
$$C_{m \times m} = A_{m \times m} + B_{m \times m}$$

$$c_{ij} = a_{ij} + b_{ij}$$



Tempo 1 com  $m^2$  processadores! Cada processador computa 1 soma!

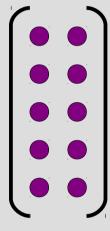
### Adição de N Matrizes

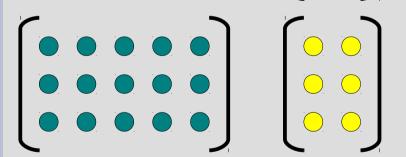


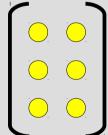
#### Multiplicação de Matrizes

$$C_{m \times l} = A_{m \times n} + B_{n \times l}$$

$$c_{ij} = \sum_{k=1}^{n} a_{ik} + b_{kj}$$







- *ml* produtos internos de comprimento n que podem ser calculados simultaneamente com *ml* processadores: tempo
- com ml(n/2)processadores o tempo é  $O(\log(n))$

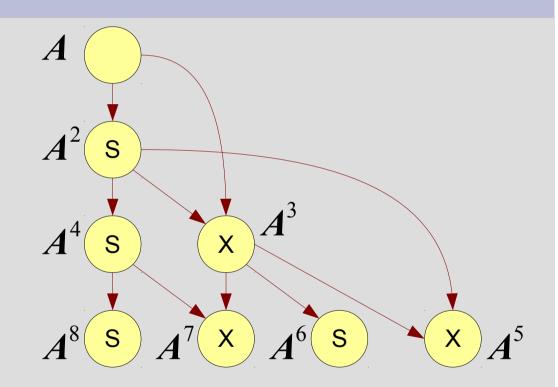
#### Potências de Matrizes

Dada  $A_{n\times n}$ 

Calcular 
$$A^k = \overbrace{AA...A}^{k \text{ vezes}}$$

Se 
$$k=2^{l}$$

$$A^{k} = \underbrace{((A^{2})^{2} \cdots)^{2}}_{l=\log(k) \text{ vezes}}$$



No passo i, calculamos  $A^{2^{i-1}+1}, \ldots, A^{2^i}$ 

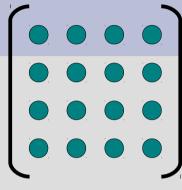
## Observações Gerais

- Claramente, mostramos o algoritmo mais rápido possível (máximo número de processadores)
- Muitas vezes eficiência muito baixa, eg, multiplicação de matrizes:

$$E_p = \frac{\mathcal{O}(n^3)}{n^3 \mathcal{O}(\log n)}$$

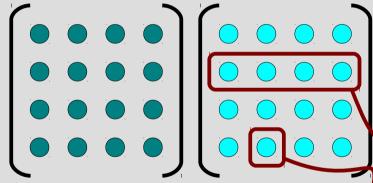
 Podemos melhorar a eficiência usando menos processadores (o que é normal para problemas de grande porte!)

#### Eficiência



Tempo 
$$2 \log n \operatorname{com} \frac{n^3}{\log n} \operatorname{proc}$$

$$E_p = \frac{n^3}{\frac{n^3}{\log n}} \equiv O(1)$$



Tempo  $n^2$  com n processadores

$$E_p = \frac{n^3}{n n^2} \equiv O(1)$$

Tempo n com  $n^2$  processadores

$$E_p = \frac{n^3}{n^2 n} \equiv \mathcal{O}(1)$$

#### Métodos Iterativos

$$\begin{cases} x(t+1) = f(x(t)); & t = 0, 1, \dots, \\ x \in \mathbb{R}^n \\ f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n \end{cases}$$

$$x_i(t+1) = f_i(x_1(t), x_2(t), \dots, x_n(t)); & i = 1, \dots, n$$
Se
$$f(x) = Ax + b$$

$$A \text{ é uma matriz } n \times n \text{ constante } b \in \mathbb{R}^n$$
Então a iteração é linear

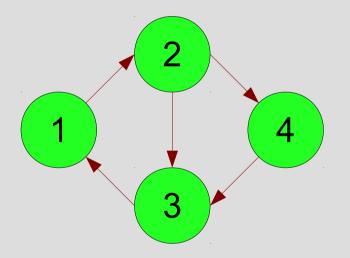
### Iteração de Jacobi

$$x_{1}(t+1) = f_{1}(x_{1}(t), x_{3}(t))$$

$$x_{2}(t+1) = f_{2}(x_{1}(t), x_{2}(t))$$

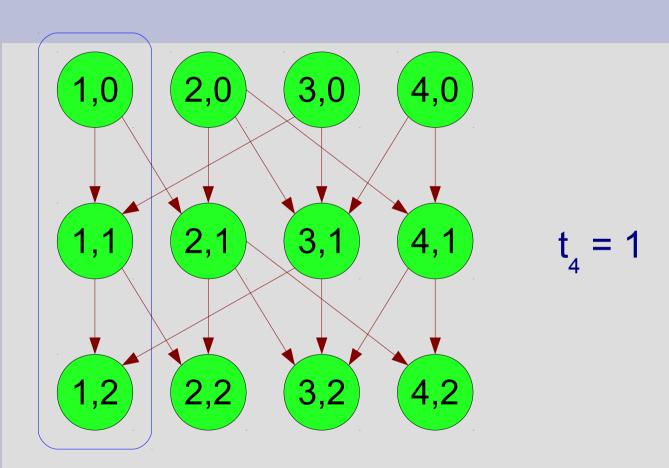
$$x_{3}(t+1) = f_{3}(x_{2}(t), x_{3}(t), x_{4}(t))$$

$$x_{4}(t+1) = f_{4}(x_{2}(t), x_{4}(t))$$



O grafo de dependência não é um DAG!

## DAG Iteração de Jacobi



#### Paralelização em Blocos

$$\mathbb{R}^{n} = \mathbb{R}^{n_{1}} \times \mathbb{R}^{n_{2}} \times \cdots \times \mathbb{R}^{n_{p}}$$

$$\sum_{j=1}^{p} n_{j} = n$$

$$\vec{x} \in \mathbb{R}^{n} \equiv \vec{x} = (\vec{x}_{1}, \dots, \vec{x}_{j}, \dots, \vec{x}_{p}); \quad \vec{x}_{j} \in \mathbb{R}^{n_{j}}$$

$$\vec{x}_{j} \text{ é um bloco de } \vec{x}$$

Iteração por blocos:

$$\vec{x}_{j}(t+1) = f_{j}(\vec{x}(t)); \quad j=1,...,p$$

### Iteração de Gauss-Seidel

$$x_i(t+1) = f_i(x_1(t+1), x_2(t+1), ..., x_{i-1}(t+1), x_i(t), ..., x_n(t))$$
  
 $i = 1, ..., n$ 

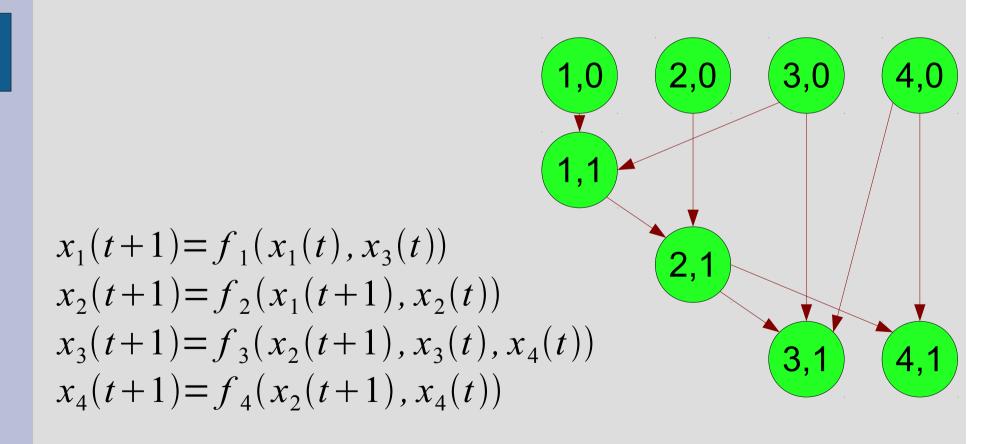
$$x_{1}(t+1) = f_{1}(x_{1}(t), x_{3}(t))$$

$$x_{2}(t+1) = f_{2}(x_{1}(t+1), x_{2}(t))$$

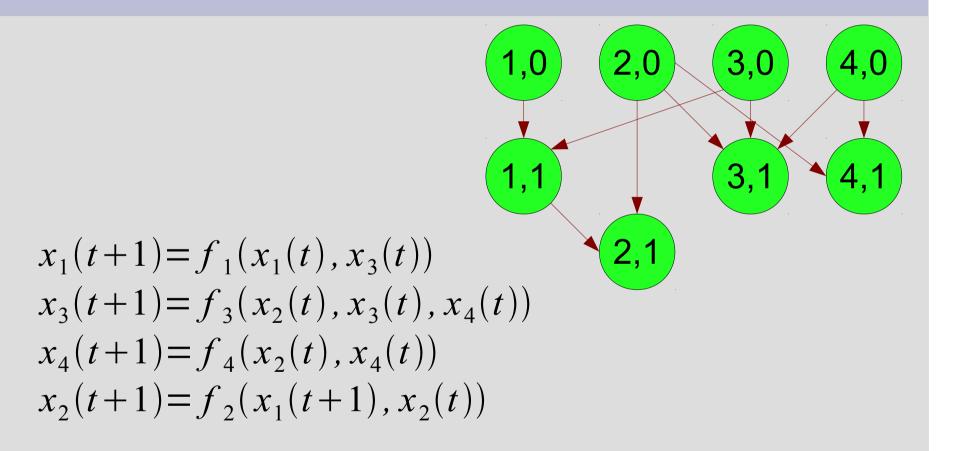
$$x_{3}(t+1) = f_{3}(x_{2}(t+1), x_{3}(t), x_{4}(t))$$

$$x_{4}(t+1) = f_{4}(x_{2}(t+1), x_{4}(t))$$

## DAG Iteração de GS



### Outra Ordem de Atualização



#### Problema!

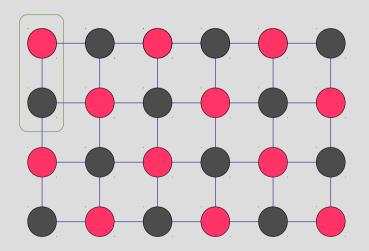
- Não é sempre possível paralelizar a iteração de Gauss-Seidel!
- Se cada variável depende de todos as outras (o grafo de dependência é "cheio"), então não há paralelismo;
- Nas iterações de métodos numéricos, (PDEs) no entanto, o grafo de dependência é em geral "esparso", e é possível encontrar paralelismo.

#### Colorindo Grafos

- "Colorir" um grafo significa atribuir um número (uma "cor") a cada nó do grafo, de forma que nós vizinhos tenham cores diferentes.
- Podemos mostrar que se um grafo de dependência simétrico pode ser colorido com *K* cores, então uma iteração de GS pode ser feita em *K* passos.
- A idéia é que nós com a mesma cor podem ser atualizados simultaneamente.

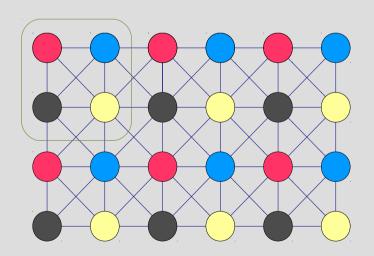
## Exemplos – Diferenças finitas 2D

$$\nabla^2 u_{ij} \approx \frac{u_{i+1,j} + u_{i-1,j} + u_{i,j+1} + u_{i,j-1} - 4 u_{i,j}}{\Delta h^2}$$

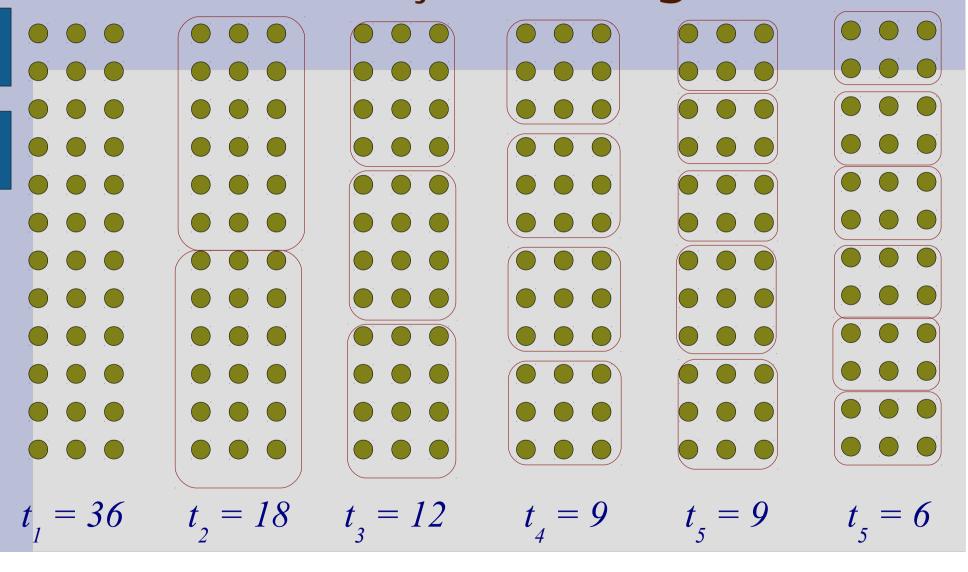


## Exemplo - Diferenças Finitas 2D

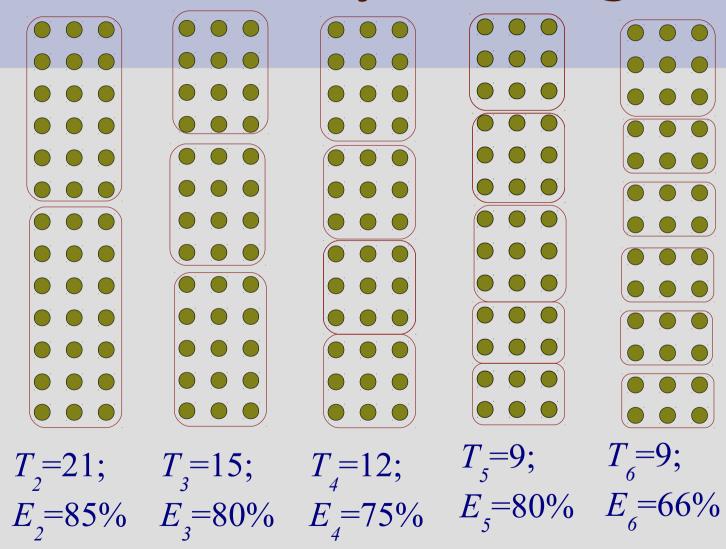
$$\nabla^{2} u_{ij} \approx \frac{1}{\Delta h^{2}} \left( 4 u_{i+1,j} + 4 u_{i-1,j} + 4 u_{i,j+1} + 4 u_{i,j-1} - 20 u_{i,j} + u_{i+1,j+1} + u_{i-1,j-1} + u_{i+1,j-1} + u_{i-1,j-1} \right)$$



## Balanço de Carga



## Balanço de Carga



## Comunicação em Programas Paralelos

- Comunicação não é instantânea!
- O tempo de comunicação pode ser uma parcela importante do tempo total de um algoritmo paralelo;
- Custo de comunicação ("communication penalty"):

$$CP = \frac{T_{total}}{T_{comp}}$$

$$E_p = \frac{T_1}{pT_p} = \frac{T_1}{pCPT_{comp}}$$

## Comunicação em redes

- Modelo:
  - Comunicação através de uma rede.
  - Mensagens trocadas através de pacotes de tamanho variável.
  - Armazena e encaminha ("store & forward") em cada nó.
- Modelo simples, apenas para mostrar alguns dos problemas envolvidos.

## Atrasos devidos à comunicação

$$D=P+RL+Q$$

D: tempo total

P: processamento + propagação

Q: enfileiramento

R: tempo para 1 bit

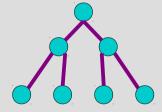
L: tamanho da mensagem em bits

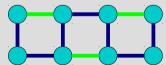
### Topologia de Conexão

- Topologia: G = (N, A), onde cada arco representa uma conexão ("link") bidirecional, direta, sem erros, entre dois processadores;
- A comunicação pode ser simultânea em todas as conexões de um nó;
- Pacotes de mesmo tamanho atrasam o mesmo tempo em todas as conexões;
- Para simplificar, cada pacote leva uma unidade de tempo para cruzar cada conexão;

## Características Importantes

- Diâmetro: maior distância entre um par de nós;
- Conectividade: é uma medida do número de caminhos independentes entre dois nós;
- Flexibilidade: facilidade de executar eficientemente vários algoritmos;
- Custo para algoritmos padrão;

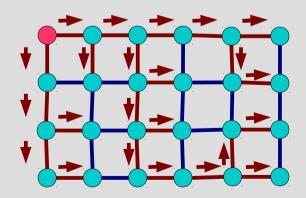




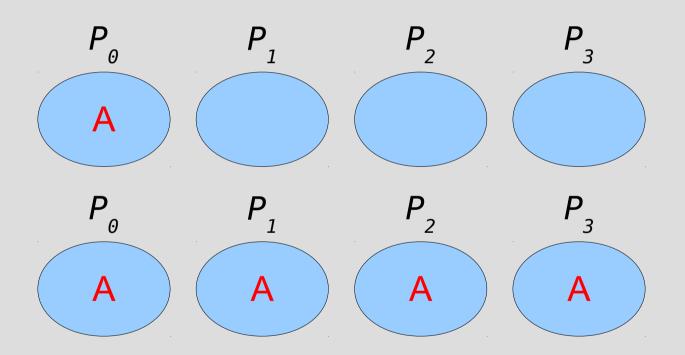


## Algoritmos Padrão: Broadcast

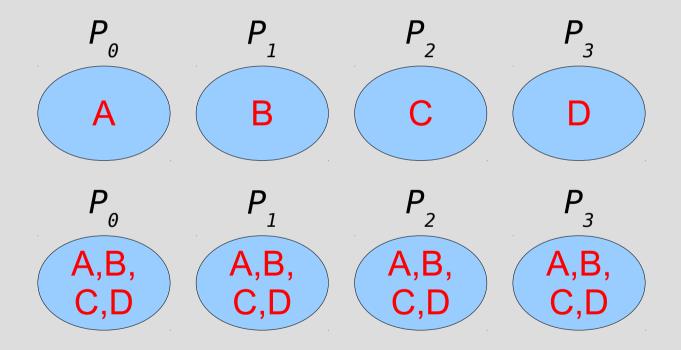
- "Broadcast" (Difusão???)
  - Única ("single node"): um nó envia o mesmo pacote para todos os outros nós;
  - *Múltipla* ("*multinode*"): *cada* nó envia um pacote para todos os outros nós;
- "Spanning tree" com raiz no nó de origem;



## Single Node Broadcast



#### Multi Node Broadcast



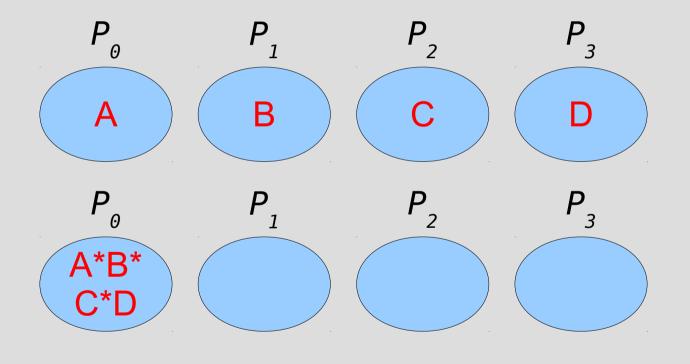
## Algoritmos Padrão: Acumulação

 - Única: cada nó envia para um único nó um pacote com um componente de um resultado global – Tipicamente acumulados no caminho!

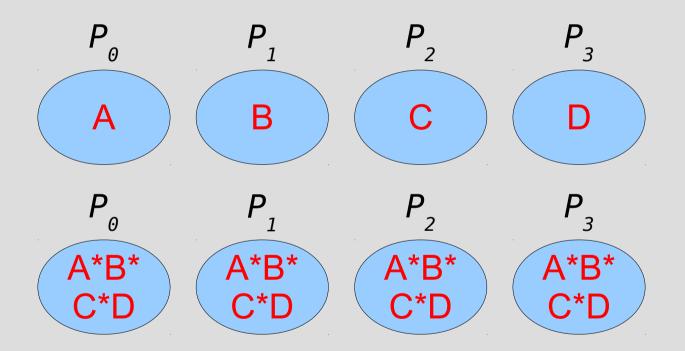
- Múltipla: acumulações únicas simultâneas em

todos os nós.

## Single Node Accumulation



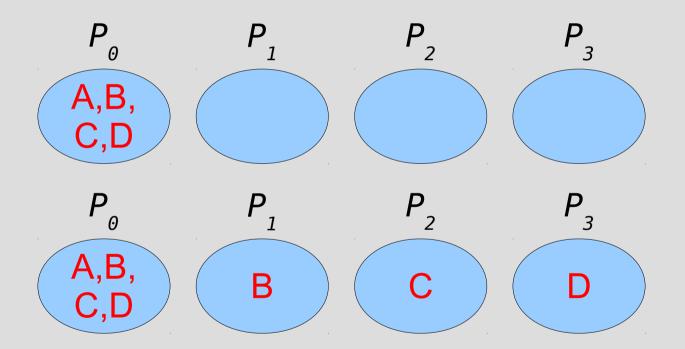
#### Multi Node Accumulation



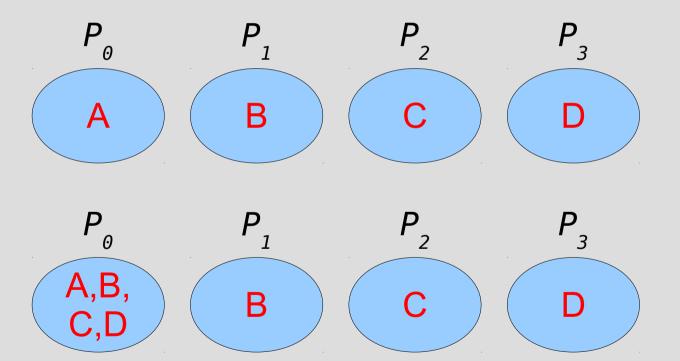
## Algoritmos Padrão: Troca Total

- "Single node Scatter" Espalhamento
  - Um nó manda um pacote diferente para cada outro nó;
- "Single node Gather" Coleta
  - Um nó recebe um pacote diferente de cada outro nó;
- "Total Exchange"
  - Cada nó manda um pacote diferente para cada outro nó;

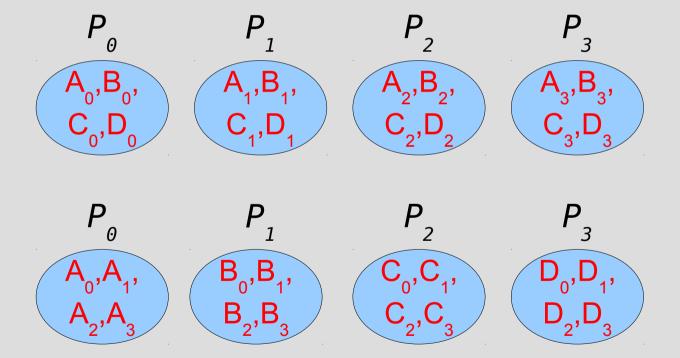
## Single Node Scatter



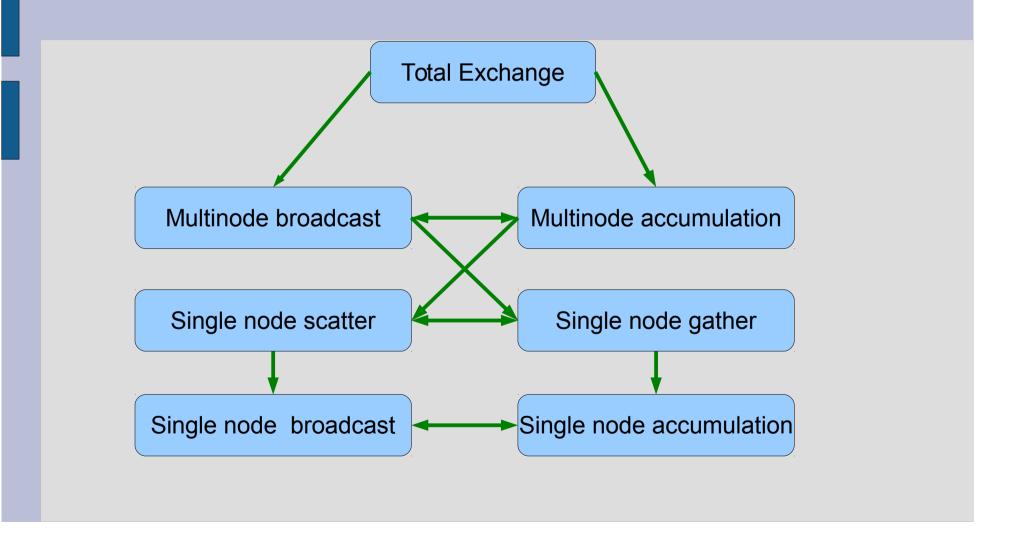
## Single Node Gather



## Total Exchange (MNS, MNG)



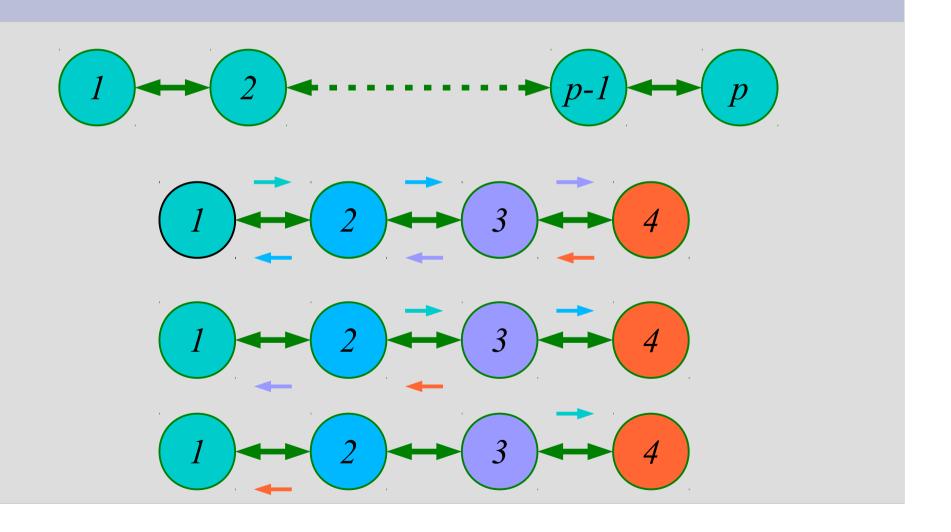
## Algoritmos Padrão: Hierarquia



# Topologias Padrão: Grafo Completo

- Cada nó conectado a todos os outros nós;
- · Certamente o mais rápido e mais flexível;
- "Bus" redes pequenas;
- "Switched networks" redes pequenas, médias e grandes;
- É esquema padrão atual;

## Topologia Padrão: Arranjo Linear

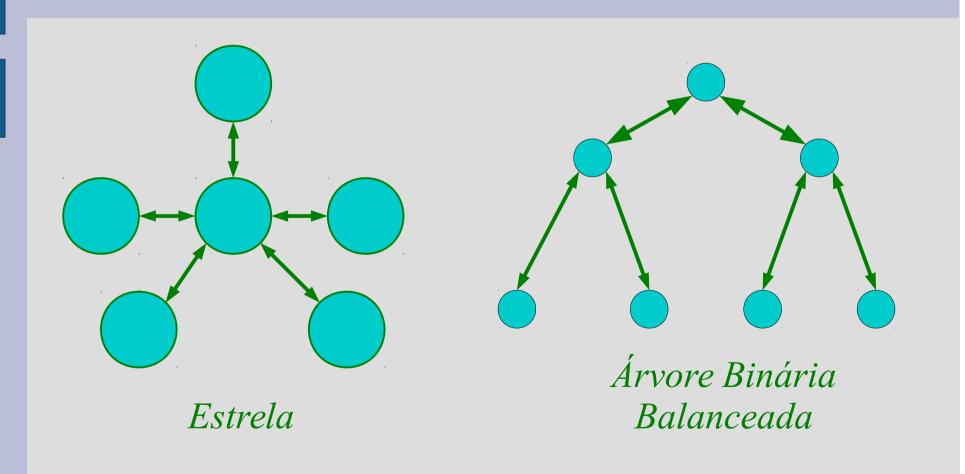


## Topologia Padrão: Anel

• Comportamento de mesma ordem que o arranjo linear! Valem todos os mesmos comentários.



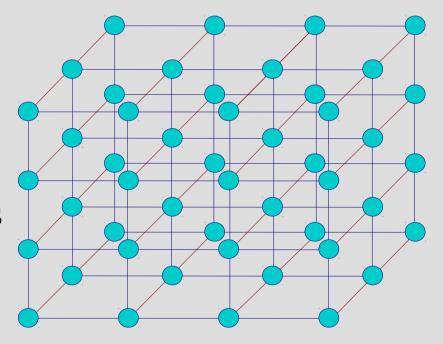
## Topologia Padrão: Árvore



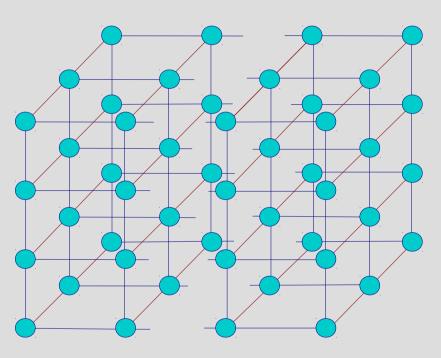
## Topologia Padrão: Matrizes

- 2, 3, *d* dimensões
- Normalmente toroidal

 $4\times4\times3=48$  processadores

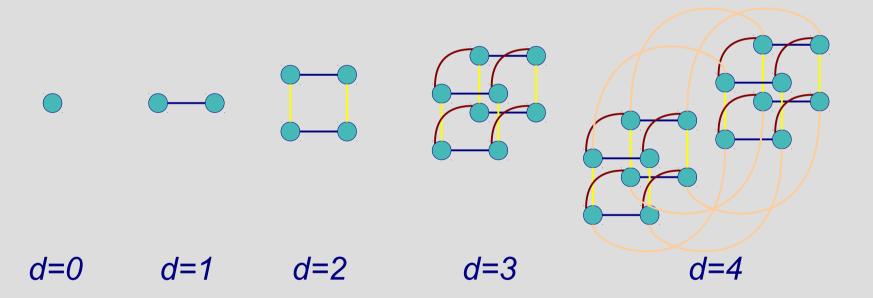


### Topologia Padrão: Matrizes - TE



- Há  $p^{(d-1)/d}$  links cortados pelo plano separador.
- Há *p*/2 processadores em cada bloco.
- Cada bloco recebe  $(p/2)^2$  mensagens.
- Cada link deve transmitir  $O(p^{(d+1)/d})$  mensagens.
- $2d O(p^{3/2})$ ;  $3d O(p^{4/3})$

## Topologia Padrão: Hipercubos



## Comparação Entre Topologias

Problema	Anel	Árvore	Malha	Hipercubo
Single node Broadcast (ou Single Node Accumulation)	O(p)	O(log <i>p</i> )	O(p <sup>1/d</sup> )	O(log <i>p</i> )
Single Node Scatter (ou Single Node Gather)	O(p)	O(p)	O(p)	O(p/log p)
Multinode Broadcast (ou Multinode Accumulation)	O(p)	O(p)	O(p)	O(p/log p)
Total Exchange	O(p²)	$O(p^2)$	$O(p^{(d+1)/d})$	O(p)

## Aspectos de Comunicação e Computação

- Muitos (todos!) os sistemas modernos permitem que mensagens sejam transmitidas enquanto o processador faz alguma outra coisa.
- Desta forma, o custo de comunicação pode ser reduzido. Exemplo:

Iteração por blocos:

$$\vec{x}_{j}(t+1) = f_{j}(\vec{x}(t)); \quad j=1,...,p$$

 Cada bloco pode ser enviado para todos os outros processadores assim que é atualizado

# Aspectos de Comunicação e Computação

- O custo de comunicação tende a diminuir com o tamanho do problema!
- Para a iteração por blocos anterior:

$$\frac{T_{\text{comm}}}{T_{\text{comp}}} = \frac{O(n)}{O(n k)} = O(\frac{1}{k})$$

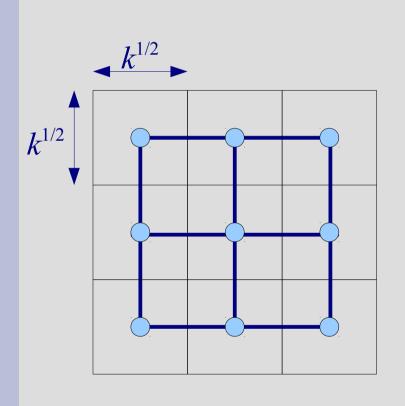
$$S_p = \frac{\mathcal{O}(n^2)}{\mathcal{O}(n) + \mathcal{O}(n k)} = \mathcal{O}(p)$$

# Aspectos de Comunicação e Computação

- Claramente, a idéia fundamental é sempre ter um problema "grande" em cada processador;
- A topologia da rede determina o menor tamanho do problema que pode ser resolvido eficientemente;
- Exemplo anterior em um hipercubo:

$$\frac{T_{\text{comm}}}{T_{\text{comp}}} = \frac{O(\frac{k p}{\log p})}{O(nk)} = O(\frac{1}{k \log p})$$

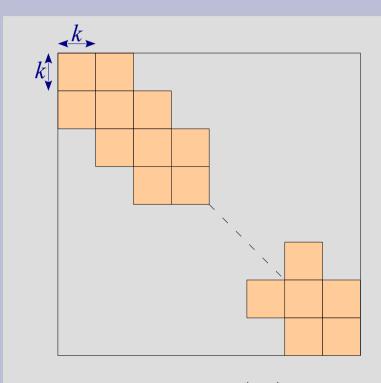
# Efeito da Esparsidade



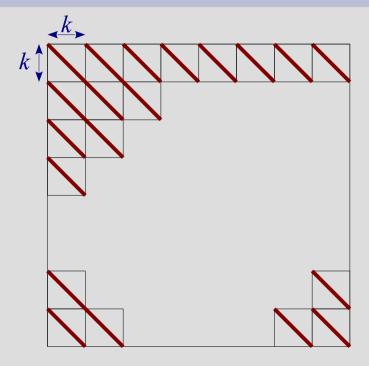
- Discretização PDE 2D.
- Efeito Área-Perímetro.
- *k* variáveis por bloco.

$$T_{\text{comm}} = O(\sqrt{k})$$
 em uma malha  
 $T_{\text{comp}} = O(k)$   
 $\frac{T_{\text{comm}}}{T_{\text{comm}}} = O(\frac{1}{\sqrt{k}})$ 

# Efeito da Esparsidade



$$T_{\text{comm}} = O(k)$$
  
 $T_{\text{comp}} = O(k^2)$ 



$$T_{\text{comm}} = O(n) = O(pk)$$
  
 $T_{\text{comp}} = O(n) = O(pk)$ 

# Exemplos: Produto Interno

$$a \cdot b = \sum_{i=1}^{n} a_{i} b_{i}$$
 onde 
$$\begin{cases} a, b \in \mathbb{R}^{n} \\ n = p k \end{cases}$$

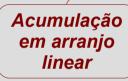
Cada processador armazena  $a_i$  e  $b_i$ , para i=(i-1)k+1,...,ik calcula

$$c_i = \sum_{j=(i-1)k+1}^{ik} a_j b_j$$

e acumula em um nó.

### Produto Interno: Processadores

Considerando um arranjo linear:



O tempo para calcular o produto interno é:

$$k\alpha + (\alpha + \beta)\langle \frac{p}{2} \rangle = \frac{n\alpha}{p} + (\alpha + \beta)\langle \frac{p}{2} \rangle$$

otimizando:

Produtos parciais em paralelo

$$p \approx \left(\frac{2\alpha n}{\alpha + \beta}\right)^{\frac{1}{2}}$$

## Produto Interno: Processadores

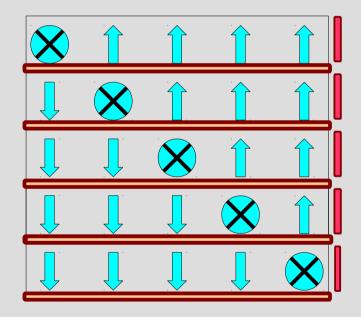
#### Caso crítico:

Se 
$$\beta > (2n-1)\alpha$$
, então  $p < 1$ .

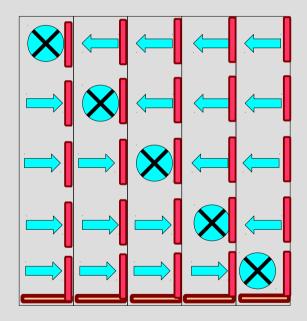
### Hipercubo:

$$\frac{n\alpha}{p} + (\alpha + \beta)\log p$$
, otimizando:  $p \approx \left(\frac{\alpha n}{\alpha + \beta}\right)$ 

# Exemplo: Matriz x Vetor



Armazenamento por linhas (MNB)



Armazenamento por colunas (MNA)

### Matriz Vetor: Processadores

Considerando um arranjo linear:

Produtos parciais em paralelo

O tempo para a multiplicação é:

$$\frac{\alpha n^2}{p} + (p-1)(\beta + \frac{n\gamma}{p})$$

Multinode broadcast

otimizando para p:

$$p \approx n \left( \frac{\alpha - \gamma / n}{\beta} \right)^{\frac{1}{2}}$$

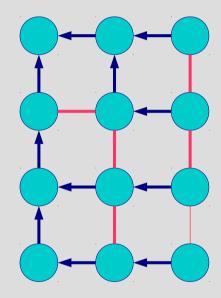
# Sincronização: Algoritmos Síncronos

- O problema é composto de fases sequenciais, onde cada fase é composta por componentes atribuídos a processadores diferentes.
- O tempo no qual a computação de cada componente é realizada é independente dos outros componentes.
- Dentro de cada fase os processadores não interagem.
- Ao final de cada fase, os processadores interagem, trocando os dados necessário para a próxima fase.

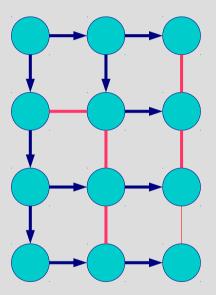
# Sincronização Global

- Cada processador aguarda a mensagem de terminação de seus filhos, e assim que todas as mensagens de terminação chegam e sua computação termina, manda uma mensagem de terminação para seu "pai" e fica parado esperando a mensagem de início de fase.
- O processador raiz, após receber as mensagens de terminação de seus filhos, e terminar sua computação, envia mensagens de início de fase para seus filhos.
- Cada processador recebe a mensagem de início de fase, inicia seu processamento e envia a mensagem para seus filhos.

# Sincronização Global



Mensagens de término de fase

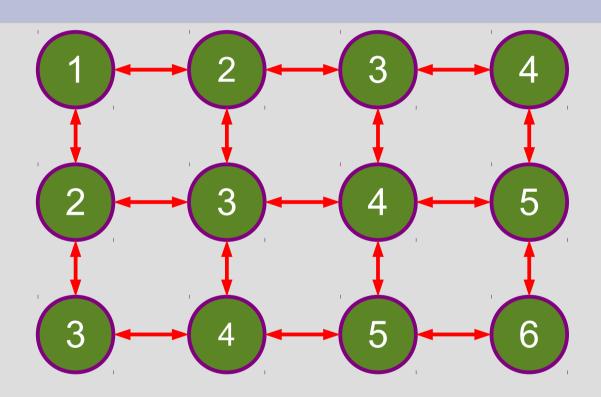


Mensagens de início de fase

# Sincronização Local

- Cada processador sabe quais mensagens deve receber em cada fase (de quem e o que!)
- Cada processador envia todas as mensagens que deve assim que possível, preferencialmente ao mesmo tempo em que computa.
- Quando termina sua computação, espera por todas as mensagens que deve receber.
- Assim que recebe todas as mensagens, inicia a nova fase.

# Sincronização Local



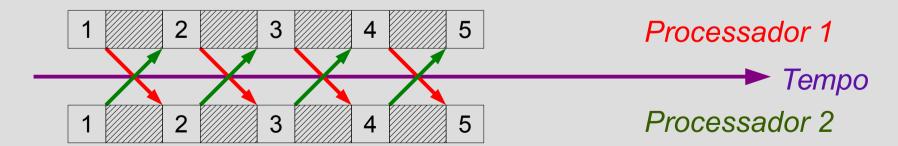
Iteração de Jacobi

# Custo da Sincronização

Comunicação instantânea

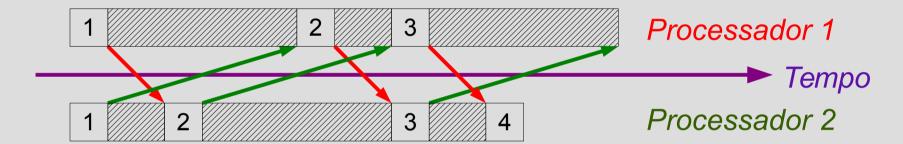


• Comunicação não instantânea

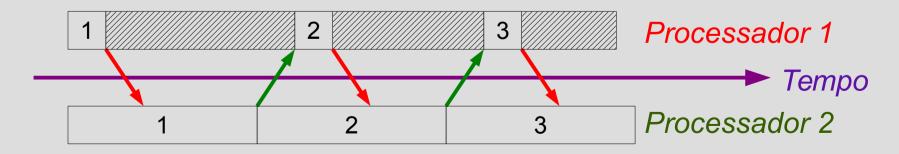


# Custo da Sincronização

Um canal lento



Um processador lento



# Algoritmo Assíncrono

• Comunicação não instantânea

