Введение в МРІ

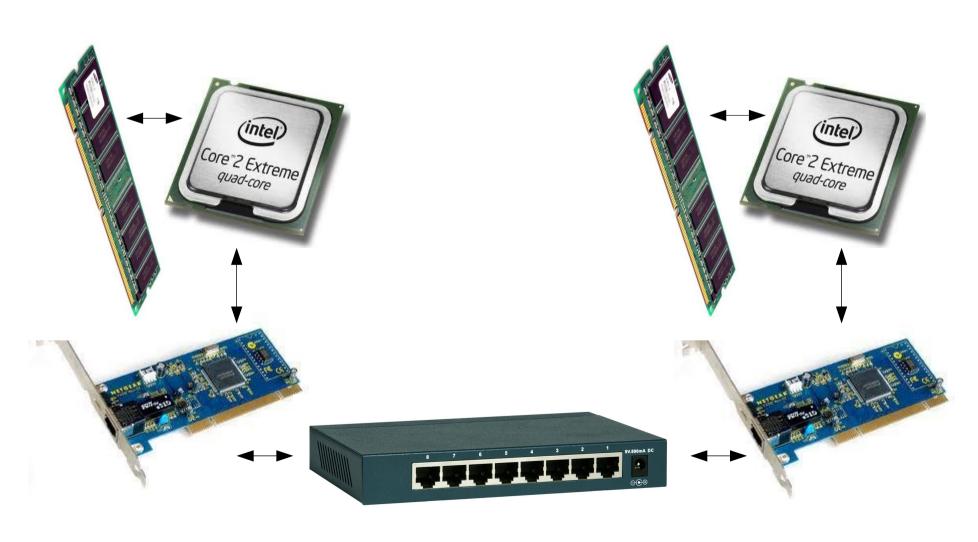
Алексей А. Романенко

arom@ccfit.nsu.ru

Содержание раздела

- Системы с распределенной памятью
- MPI
 - История
 - Содержание
 - Типы данных
 - Передача сообщений
 - Топологии

Системы с распределенной памятью



Передача данных

socket bind socket listen connect accept send/recv send/recv

PVM, MPI

- PVM: Parallel Virtual Machine
 - Разработан 80's
 - Первая высокоуровневая спецификация функций передачи сообщений
 - Процесс PVM демон заботится о передаче сообщений между узлами
- MPI: Message Passing Interface
 - Разработан 90's
 - Высокоуровневая спецификация функций передачи сообщений
 - Доступно несколько реализаций: mpich, mpi-lam
 - Библиотека функций подключается в программе (демоны отсутствуют)

Рождение MPI - 1

- MPI-1 Forum
 - Первый стандарт MPI
 - 60 представителей из 40+ организаций США и Европы
 - Два года согласований, обсуждений
 - Разработан и утвержден документ Message Passing Interface
 - MPI 1.0 июнь, 1994
 - MPI 1.1 июнь 12, 1995

MPI-2

- MPI-2 Forum
 - Та же процедура
 - MPI-2: Документ *Extensions to Message Passing Interface* (Июль 18, 1997)
 - MPI 1.2 В основном разъяснения
 - MPI 2.0 расширение к MPI 1.2

http://www.hlrs.de/mpi/

MPI - Message Passing Interface

- MPI (MPI-1) является спецификацией на библиотечные функции
- MPI-2: добавлен параллельный B/B динамическое управление процессами, удаленные операции в памяти и пр.
- MPI Standard: *www-unix.mcs.anl.gov/mpi/standard.html*
- MPI Standard 1.1 Index: www.mpi-forum.org/docs/mpi-11-html/node182.html
- MPI-2 Standard Index: www-unix.mcs.anl.gov/mpi/mpi-standard/mpi-report-2.0/node306.htm
- MPI Forum Home Page: www.mpi-forum.org/index.html

Цели и границы MPI

- Основная цель MPI
 - Обеспечить механизм передачи сообщений.
 - Обеспечить переносимость кода.
 - Позволить эффективную реализацию.
- Предлагает:
 - Большой объем функциональности.
 - Поддержку гетерогенных архитектур.
- MPI-2:
 - Дополнительную функциональность.
 - Совместимость с MPI-1.

Сборка и запуск

```
Заголовочные файлы
             - #include <mpi.h>
   Fortran - include 'mpif.h'
сборка:
   gcc -o prog prog.c -lmpi
   mpicc -o prog prog.c
   mpiCC -o prog prog.cpp
   g77 -o prog prog.f -Impi
   mpif77 -o prog prog.f
Запуск
   mpirun -np <#> ./prog <parameters>
```

Парадигма MPI

- Каждый процессор выполняет подпрограмму:
 - написанную на последовательном языке, например, С или Fortran,
 - обычно одну и ту же для каждого процессора (SPMD),
 - переменные в подпрограммах имеют одинаковое имя, но разное расположение различные значения! Т.е. Все переменные приватные.

Process
Process
Process
Communication Envitonment

Распределение данных и задач

- Каждый процесс идентифицируется по **rank**
- Rank число от 0 до np количество параллельных процессов
- Значение **rank** можно узнать
- Количество процессов определяется при запуске программы (mpirun)
- Все распределение работы основываетс на значение **rank**

Что такое SPMD?

- Single Program, Multiple Data
- Одна и та же (под-)программа выполнется на разных процессорах
- MPI допускает MPMD, т.е., Multiple Program, но некоторые реализации ограничены только SPMD
- MPMD можно реализовать через SPMD

Эмуляция MPMD

```
int main(int argc, char *argv[]){
    if (rank < .... /* process should run the ocean model */){
        ocean( /* arguments */ );
    }else{
        weather( /* arguments */ );
    }
}</pre>
```

Сообщения

- Сообщение порция данных передаваемая между (под)программами
- Необходимые атрибуты:
 - sending process
 receiving process (ranks)
 - source location
 destination location
 - source data type destination data type
 - source data size destination buffer size
- Все посланные сообщения должны быть получены!

Взаимодействие точка-точка

- Простейший способ взаимодействия.
- Один процесс посылает сообщение другому.
- Типы:
 - Синхронная передача
 - Буферизованая = асинхронная

Синхронная передача

• Подтверждение того, что сообщение получено.

Буферизованая передача

- Информация о том, что сообщение послано.
- MPI гарантирует, что сообщение будет доставлено.

Блокирующие операции

- Операции локального действия
 - Посылка (сообщения)
 - передача (сообщения)
- Блокировка одного процесса возможна пока другой процесс исполняется:
 - Синхронная передача блокируется до тех пор пока сообщение не будет принято;
 - Прием блокируется до тех пор пока не будет послано и получено сообщение.
- Выход из функции блокируется до тех пор пока не завершится операция.

Неблокирующие операции

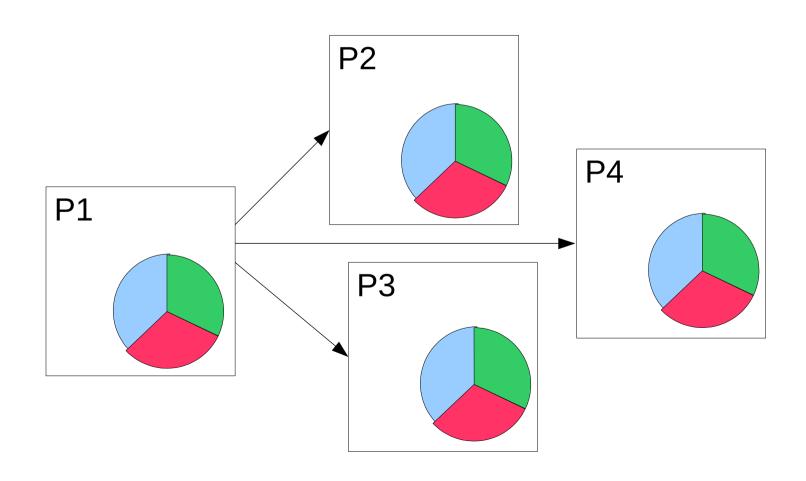
- Немедленный выход из функции.
- Для всех неблокируемых вызовов должна быть выполнена проверка завершенности.
- Некоторые ресурсы могут быть переиспользованы или освобождены после завершения неблокируемых вызовов.
- Неблокируемый вызов с проверкой завершения (wait) блокируемый вызов.

Колективное взаимодействие

- Функции высокого уровня.
- Вовлечено несколько процессов.
- Могут приментяься оптимизированные алгоритмы для выполнения
- Могут быть построены на базе вызовов точка-точка.

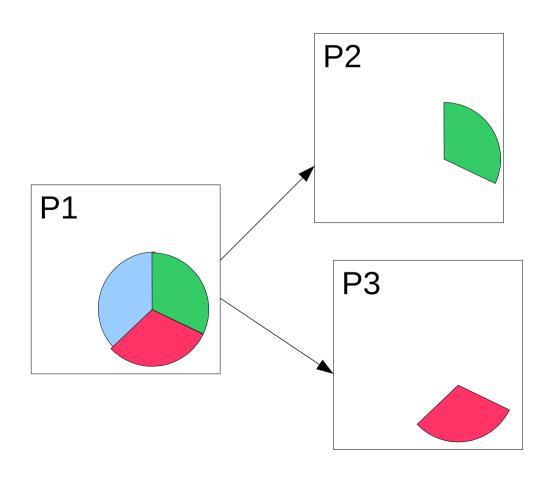
Broadcast

• Один ко многим.



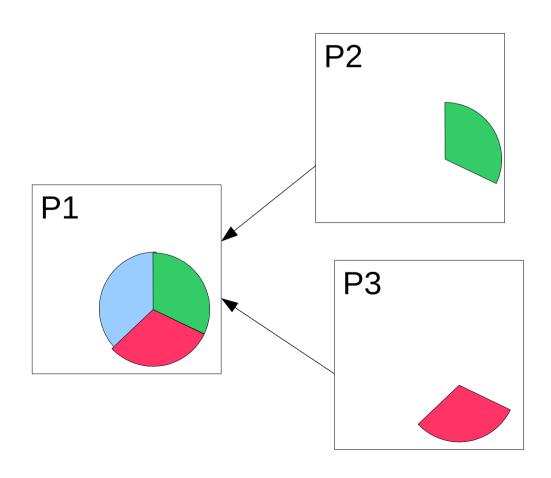
Scatter

• Распределение данных по процессам



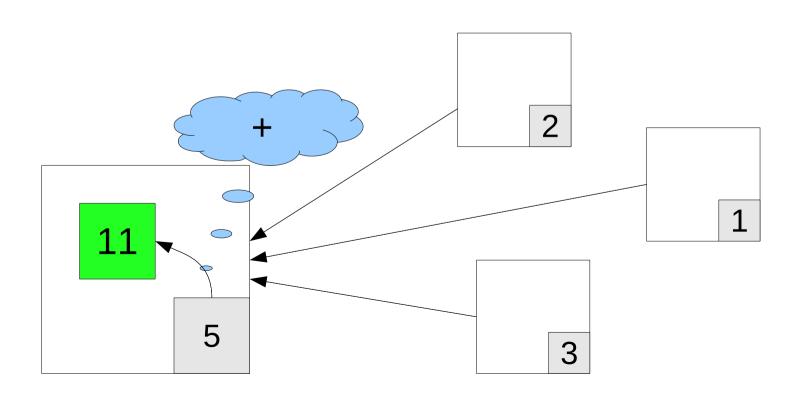
Gather

• Сбор данных от процессов



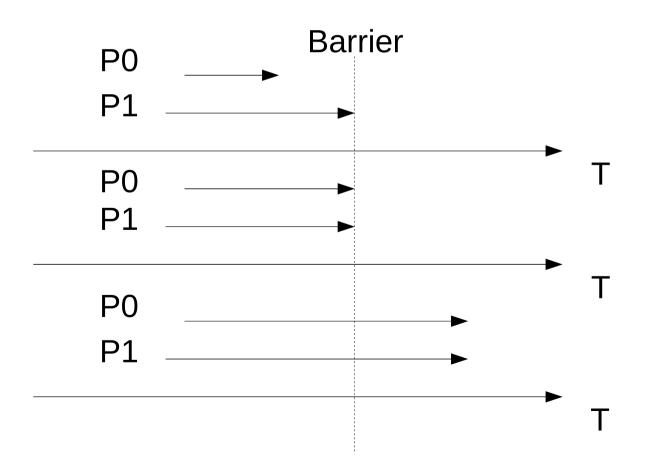
Операция редукции

• Сбор данных от о всех и передача результата выделенному процессу.



Barriers

• Синхронизация процессов.



Правило именования в МРІ

• MPI_XXXX_XXXX

Строчные символы
Заглавный символ
Заглавными "MPI" + почерк

Инициализация MPI

- C: int MPI_Init(int *argc, char ***argv)
- Должен быть первым вызовом МРІ!

Выход из МРІ программы

- C: int MPI_Finalize()
- Fortran: MPI_FINALIZE(IERROR)
- MPI вызовы MPI_Finanize() не допустимы.
- Все процессы должны выполнить этот вызов!

Коммуникатор MPI_COMM_WORLD

- Все процессы (= подпрограммы) одной MPI программы объединены коммуникатором MPI_COMM_WORLD.
- MPI_COMM_WORLD константа определенная в mpi.h и mpif.h.
- В коммуникаторе каждый процесс имеет свой rank:
 - Начиная с «0»
 - Заканчивая (size-1)

Rank

- Идентифицирует процусс в MPI программе.
- Служит для распределения работы.
- C: int MPI_Comm_rank(MPI_Comm comm, int *rank)
- Fortran:
 MPI_COMM_RANK(comm, rank, ierror); INTEGER
 comm, rank, ierror

Size

- Определяет количество процессов в коммуникаторе
- C: int MPI_Comm_size(MPI_Comm comm, int *size)
- Fortran:
 MPI_COMM_SIZE(comm, size, ierror);
 INTEGER comm, size, ierror

"Hello world" example

```
#include <mpi.h>
#include <stdlib.h>
int main(int argc, char* argv∏){
    int rank, size;
    MPI Init(&argc, &argv);
    MPI Comm rank(MPI COMM WORLD, &rank);
    MPI_Comm size(MPI COMM WORLD, &size);
    printf("I am %d from %d\n", rank, size);
    MPI Finalize();
    return 0;
```

"Hello world" example (II)

```
# gcc -o hello hello.c -lmpi
# mpirun -np 4 ./hello
I am 0 from 4
I am 1 from 4
I am 3 from 4
I am 2 from 4
# mpirun -np 4 ./hello
I am 2 from 4
I am 1 from 4
I am 3 from 4
I am 0 from 4
# mpirun -np 4 ./hello
I am 0 from 4
I am 2 from 4
I am 1 from 4
I am 3 from 4
```

Типы данных

- Сообщение содержит некоторое количество элементов определенного типа данных.
- Типы даннх МРІ:
 - Базовые (встроенные).
 - Пользовательские.
- Пользовательские типы данных могут строиться из базовых.
- Типы данных Си отличны от типов данных Fortran.

Базовые типы данных (С)

MPI datatype	C datatype
MPI_PACKED	
MPI_BYTE	
MPI_LONG_DOUBLE	long double
MPI_DOUBLE	double
MPI_FLOAT	float
MPI_UNSIGNED_LONG	unsigned long int
MPI_UNSIGNED	unsigned int
MPI_UNSIGNED_SHORT	unsigned short int
MPI_UNSIGNED_CHAR	unsigned char
MPI_LONG	signed long int
MPI_INT	signed int
MPI_SHORT	signed short int
MPI_CHAR	signed char

Базовые типы данных (Fortran)

MPI Datatype	Fortran datatype
MPI_PACKED	
MPI_BYTE	
MPI_CHARACTER	CHARACTER(1)
MPI_LOGICAL	LOGICAL
MPI_COMPLEX	COMPLEX
MPI_DOUBLE_PRECISION	DOUBLE PRECISION
MPI_REAL	REAL
MPI_INTEGER	INTEGER

Посылка сообщения

- C: int MPI_Send(void *buf, int count, MPI_Datatype datatype, int dest, int tag, MPI_Comm comm)
- Fortran: MPI_SEND(BUF, COUNT, DATATYPE, DEST, TAG, COMM, IERROR)
- <type> BUF(*), INTEGER COUNT, DATATYPE, DEST, TAG, COMM, IERROR
- <u>buf</u> указатель на начало сообщения длинной в count элементов, каждый из которых имеет тип <u>datatype</u>.
- <u>dest</u> ранг получателя в коммуникаторе <u>comm</u>.
- <u>tag</u> положительное целое число идентифицирующее передачу.
- **tag** может использоваться чтобы различать сообщения.

Получение сообщения

- C: int MPI_Recv(void *buf, int count, MPI_Datatype datatype, int source, int tag, MPI_Comm comm, MPI_Status *status)
- Fortran: MPI_RECV(BUF, COUNT, DATATYPE, SOURCE, TAG, COMM, STATUS, IERROR)
- <u>buf/count/datatype</u> описание буфера для приема сообщения.
- Получать сообщение с <u>rank</u> = <u>source</u> в коммуникаторе <u>comm</u>.
- Информация о сообщение возвращается в **status**.
- Получаются только сообщения с совпадающим tag.

Требования к коммуникациям точка-точка

Для успешного завершения операции:

- При посылке указан правильный rank получателя сообщения.
- При приеме указан правильный rank отправителя сообщения.
- Указан один и тот же коммуникатор.
- tag, типы данных должны совпадать.
- Буфер в приемнике >= длине сообщения.

Send-Recv example

```
#include <mpi.h>
int main(int argc, char* argv∏){
   int rank, buf[256];
   MPI Status status;
   MPI Init(&argc, &argv);
   MPI Comm rank(MPI COMM WORLD, &rank);
   if(rank == 0){
      // init buffer
      MPI Send(buf, 256, MPI INT, 1, 10, MPI COMM WORLD);
   if(rank == 1){
      MPI_Recv(buf, 256, MPI_INT, 0, 10, MPI_COMM_WORLD, &status);
      // process buffer
   MPI Finalize();
   return 0;
```

Wildcard

- Получение по wildcard.
- Получить сообщение от любого источника source = MPI_ANY_SOURCE
- Получить сообщение с любым tag tag = MPI_ANY_TAG
- Реальные значения source и tag возвращаются в структуре **status**.

Информация о сообщение

• Возвращается в переменную status.

```
• C: status.MPI_SOURCE status.MPI_TAG count через MPI Get count()
```

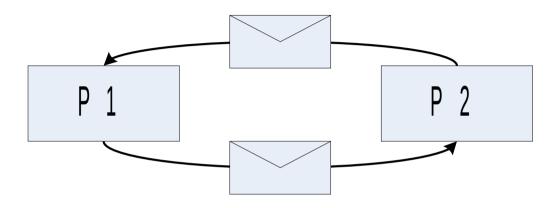
• Fortran: status(MPI_SOURCE)
status(MPI_TAG)
count uepes MPI GET COUNT()

Значение count при получении

- C: int MPI_Get_count(MPI_Status *status, MPI_Datatype datatype, int *count)
- Fortran: MPI_GET_COUNT(STATUS, DATATYPE, COUNT, IERROR)

Неблокирующие операции

Deadlock



• Код в каждом MPI процессе: MPI_Send(..., right_rank, ...) MPI_Recv(..., left_rank, ...)

Неблокирующие операции

- Выполнение в три этапа:
- Инициализация
 - немедленный выход
 - функции начинаются с MPI_I...
- Выполняем какую-то работу
- Ожидание завершения

Non-blocking Send

C:
 MPI_Isend(buf, count, datatype, dest, tag, comm,
 &request_handle);
 MPI_Wait(&request_handle, &status);

- Fortran:
 - CALL MPI_ISEND(buf, count, datatype, dest, tag, comm, request_handle, ierror);
 CALL MPI_WAIT(request_handle, status, ierror)
- buf не должен использоваться между Issend и Wait
- "Isend + Wait сразу после Issend" эквивалентно (Ssend)
- status в Isend не используется, только в Wait

Non-blocking Receive

- C: MPI_Irecv (buf, count, datatype, source, tag, comm, &request_handle); MPI_Wait(&request_handle, &status);
- Fortran:
 CALL MPI_IRECV (buf, count, datatype, source, tag, comm, request_handle, ierror);
 CALL MPI_WAIT(request_handle, status, ierror)
- Buf не должен использоваться между Irecv и Wait

Завершение

- C: MPI_Wait(&request_handle, &status); MPI_Test(&request_handle, &flag, &status);
- Fortran:
 CALL MPI_WAIT(request_handle, status, ierror)
 CALL MPI_TEST(request_handle, flag, status, ierror)
- Должно быть или
 - WAIT или
 - Цикл с TEST пока flag не станет равным 1 или "TRUE".

Завершение (2)

Обработка нескольких запросов:

- Wait или test завершения нескольких операций
 - MPI Waitany / MPI Testany
- Wait или test завершения всех операций
 - MPI Waitall / MPI Testall
- Wait или test завершения как можно большего количества операций
 - MPI_Waitsome / MPI_Testsome

Blocking and Non-Blocking

- Send и receive могут быть как блокируемые, так и неблокируемые
- Блокирующий send может использоваться с неблокирующим receive, и наоборот.

Типы данных МРІ

- Описывают расположение данных в памяти
 - При отправке
 - При приеме
- Базовые типы
- Производные типы
 - векторы
 - структуры
 - прочие

Производные типы данных

• Указатель на список базовых типов и их смещения

basic datatype 0 displacement of datatype 0

basic datatype 1 displacement of datatype 1

. . .

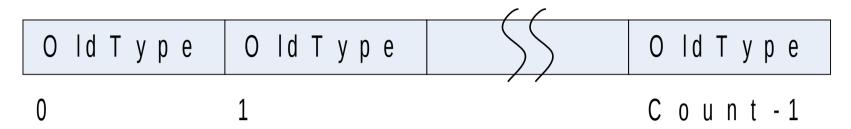
basic datatype n-1 displacement of datatype n-1

Производный тип данных (пример)

```
struct new_type{
    char a;
    int b,c;
    float e;
}
```

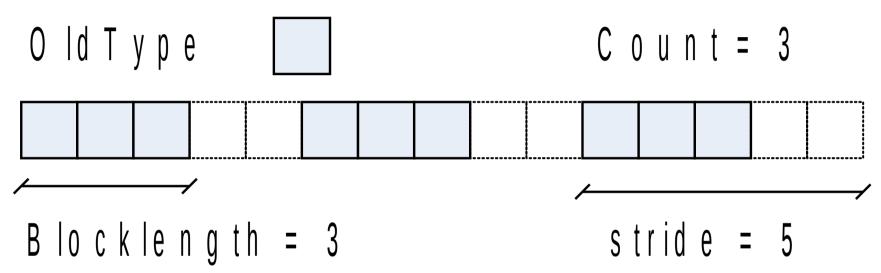
- Базовые типы {MPI_CHAR, MPI_INT, MPI_INT, MPI_FLOAT}
- Базовое смещение {0,4,8,12}

Contiguous Data



- Простейший производный тип данных
- C: int MPI_Type_contiguous(int count, MPI_Datatype oldtype, MPI_Datatype *newtype)
- Fortran: MPI_TYPE_CONTIGUOUS(COUNT, OLDTYPE, NEWTYPE, IERROR)

Vector Datatype



- C: int MPI_Type_vector(int count, int blocklength, int stride, MPI_Datatype oldtype, MPI_Datatype *newtype)
- Fortran:
 MPI_TYPE_VECTOR(COUNT, BLOCKLENGTH,
 STRIDE, OLDTYPE, NEWTYPE, IERROR)

Struct Datatype

- C:
 int MPI_Type_struct(int count, int
 *array_of_blocklengths, MPI_Aint
 *array_of_displacements, MPI_Datatype
 *array of types, MPI Datatype *newtype)
- Fortran: MPI_TYPE_STRUCT(COUNT, ARRAY_OF_BLOCKLENGTHS, ARRAY_OF_DISPLACEMENTS, ARRAY_OF_TYPES, NEWTYPE, IERROR)

Structure datatype example

- struct { int a; char b; } foo;
- sizeof(foo) > sizeof(int) + sizeof(char)

blen[0] = 1; indices[0] = 0; oldtypes[0] = MPI_INT;
 blen[1] = 1; indices[1] = &foo.b - &foo; oldtypes[1] = MPI_CHAR;
 blen[2] = 1; indices[2] = sizeof(foo); oldtypes[2] = MPI_UB;
 MPI Type struct(3, blen, indices, oldtypes, &newtype);

Вычисление смещения

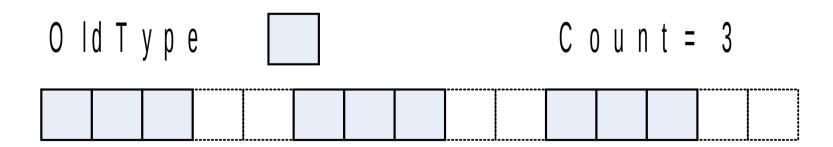
- array_of_displacements[i] := address(block_i) address(block_0)
- MPI-1
 - C: int MPI_Address(void* location, MPI_Aint *address)
 - Fortran:
 MPI_ADDRESS(LOCATION, ADDRESS, IERROR)

Создание типа

- Перед тем, как новый тип данных можно будет использовать нужно завершить его создание MPI_TYPE_COMMIT.
- Достаточно выполнить только один раз.
- C: int MPI_Type_commit(MPI_Datatype *datatype);
- Fortran: MPI_TYPE_COMMIT(DATATYPE, IERROR)

Size и Extent типа данных (1)

- Size := количество байт, которое будет передано
- Extent := количество байт в памяти
- Для мазовых типов Size = Extent
- Производные типы:



size = 9*sizeof(OldType); extend = 15*sizeof(OldType)

Size и Extent типа данных (2)

- C: int MPI_Type_size(MPI_Datatype datatype, int *size) int MPI_Type_extent(MPI_Datatype datatype, MPI_Aint *extent)
- Fortran:
 MPI_TYPE_SIZE(DATATYPE, SIZE, IERROR)
 MPI_TYPE_EXTENT(DATATYPE, EXTENT, IERROR)

Виртуальные топологии

- Удобное наименование процессов
- Адаптация расположения процессов к архитектуре кластера
- Упрощает код
- Передача данных может быть оптимизирована

Использование вируальных топологий

- Создание новой топологии и соответствующего коммуникатора.
- MPI функции для создания топологий и наименования процессов в них.

Типы топологий

- Декартова
 - Каждый процесс связан со своим соседом в виртаальной сети,
 - Возможно связывание границ,
 - Идентификация процессов координатами в декартовой системе координат,
 - Коммуникации между всеми процессами возможны
- Граф

Создание декартовой виртуальной топологии

- C: int MPI_Cart_create(MPI_Comm comm_old, int ndims, int *dims, int *periods, int reorder, MPI Comm *comm cart)
- Fortran:

MPI_CART_CREATE(COMM_OLD, NDIMS, DIMS, PERIODS, REORDER, COMM_CART, IERROR)

Изменение порядка может привести к оптимизации передач.

Получение координат

Соседи в декартовой топологии

- Вычисление раков соседей
- C:
 int MPI_Cart_shift(MPI_Comm comm_cart,
 int direction, int disp, int *rank_source,
 int *rank dest)
- Если соседей нет, то MPI_PROC_NULL.
- MPI_PROC_NULL может использоваться как rank
 → передачи не будет!

Создание топологии типа граф

- C
 int MPI_Graph_create(MPI_Comm comm_old, int nnodes,
 int *index, int *edges, int reorder,
 MPI_Comm *comm_graph)
- Fortran
 MPI_GRAPH_CREATE(COMM_OLD, NNODES, INDEX, EDGES, REORDER, COMM_GRAPH, IERROR)

Коллективные операции

- Взаимодействует группа процессов.
- Вовлечены все процессы в коммуникаторе
- Примеры:
 - Синхронизация (барьер).
 - Broadcast, scatter, gather.
 - Global sum, global maximum, etc.

Характеристики коллективных операций

- Коллективная над коммуникатором
- ВСЕ процессы в рамках коммуникатора должны вызвать коллективную функцию
- Коллективные операции блокирующие.
- Нет tag-a.
- Буфер на отправку данных должен быть такого же размера как и буфер на прием данных.

Barrier Synchronization

- C: int MPI_Barrier(MPI_Comm comm)
- Fortran: MPI_BARRIER(COMM, IERROR)
- MPI_Barrier обычно не используется, но:
 - Используется для отладки:
 - Не забывайте удалять после отладки.
 - Используется для профилирования
 - Load imbalance of computation [MPI_Wtime(); MPI_Barrier();
 MPI_Wtime()]
 - communication epochs [MPI_Wtime(); MPI_Allreduce(); ...;
 MPI_Wtime()]
 - Используется для синхронизации внешних операций (например, I/O):
 - Посылка сообщений может быть более эффективна

Broadcast

- C: int MPI_Bcast(void *buf, int count, MPI_Datatype datatype,int root, MPI_Comm comm)
- Fortran:
 MPI_Bcast(BUF, COUNT, DATATYPE, ROOT, COMM, IERROR)

Scatter

 C: int MPI_Scatter(void *sendbuf, int sendcount, MPI_Datatype sendtype, void *recvbuf, int recvcount, MPI_Datatype recvtype, int root, MPI_Comm comm)

Fortran:

MPI_SCATTER(SENDBUF, SENDCOUNT, SENDTYPE, RECVBUF, RECVCOUNT, RECVTYPE, ROOT, COMM, IERROR)

Gather

 C: int MPI_Gather(void *sendbuf, int sendcount, MPI_Datatype sendtype, void *recvbuf, int recvcount, MPI_Datatype recvtype, int root, MPI_Comm comm)

Fortran:

MPI_GATHER(SENDBUF, SENDCOUNT, SENDTYPE, RECVBUF, RECVCOUNT, RECVTYPE, ROOT, COMM, IERROR)

Глобальные операции редукции

 To perform a global reduce operation across all members of a group.

$$d_0 o d_1 o d_2 o d_3 o \dots o d_{s-2} o d_{s-1}$$

- d_i = data in process rank i
 - single variable, or vector
- o = associative operation
- Example:
 - global sum or product
 - global maximum or minimum
 - global user-defined operation
- floating point rounding may depend on usage of associative law.

Предопределенные операторы редукции

Операторы

MPI BAND

MPI BOR

MPI BXOR

MPI MAX

MPI MAXLOC

MPI MIN

MPI MINLOC

MPI LAND

MPI LOR

MPI LXOR

MPI PROD

MPI SUM

Функции

Bitwise AND

Bitwise OR

Bitwise exclusive OR

Maximum

Maximum and location of the maximum

Minimum

Minimum and location of the minimum

Logical AND

Logical OR

Logical exclusive OR

Product

Sum

Глобальна редукция

Заключение

Модель процессов MPI

- Передача сообщений
 - Блокируемая → several modes (standard, buffered, synchronous, ready)
 - неблокируемая
 - Позволяет параллельную передачу сообщений
 - Позволяет исключить мертвые блокировки
 - Собственные типы данных
 - Передача различных данных одной посылкой
- Виртуальные топологии → схема нумерации процессов
- Коллективные операции доп. Возможность оптимизации

Пример 1. Контрольная сумма

```
int res, gres;
char * buf, *rbuf;
MPI Init(&argc, &argv);
// init bufs
MPI Comm rank(MPI COMM WORLD, &rank);
MPI Comm size(MPI COMM WORLD, &size);
while(/* have data */){
   if(rank == 0) read data(buf, 100*size);
   MPI Scatter(buf, 100, MPI CHAR, rbuf, 100,
                     MPI CHAR, 0, MPI COMM WORLD);
   res = process data(rbuf, 100);
   MPI Reduce(&res, &gres, 1, MPI INT, MPI XOR, 0,
                     MPI COMM WORLD);
   save res(gres);
```

Пример 2. Master-slave

```
MPI Init(&argc, &argv);
MPI Comm rank(MPI COMM WORLD, &rank);
MPI Comm size(MPI COMM WORLD, &size);
for(i=0; i<size; i++){
   read data(buf, d size);
   MPI Send(buf, d_size, MPI_INT, i, 0, MPI_COMM_WORLD);
while(/* have data */){
   MPI Recv(buf, d size, MPI INT, MPI ANY SOURCE, 0,
         MPI COMM WORLD, &status);
   save res(buf, d size);
   read data(buf, d size);
  i = status.MPI SOURCE;
  MPI Send(buf, d size, MPI_INT, i, 0, MPI_COMM_WORLD);
```

Пример 2. Master-slave (прод.)