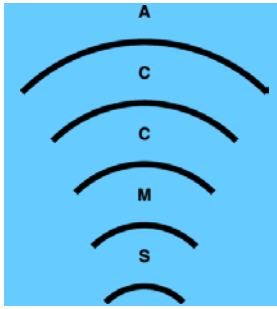


計算科学演習B
MPI 発展

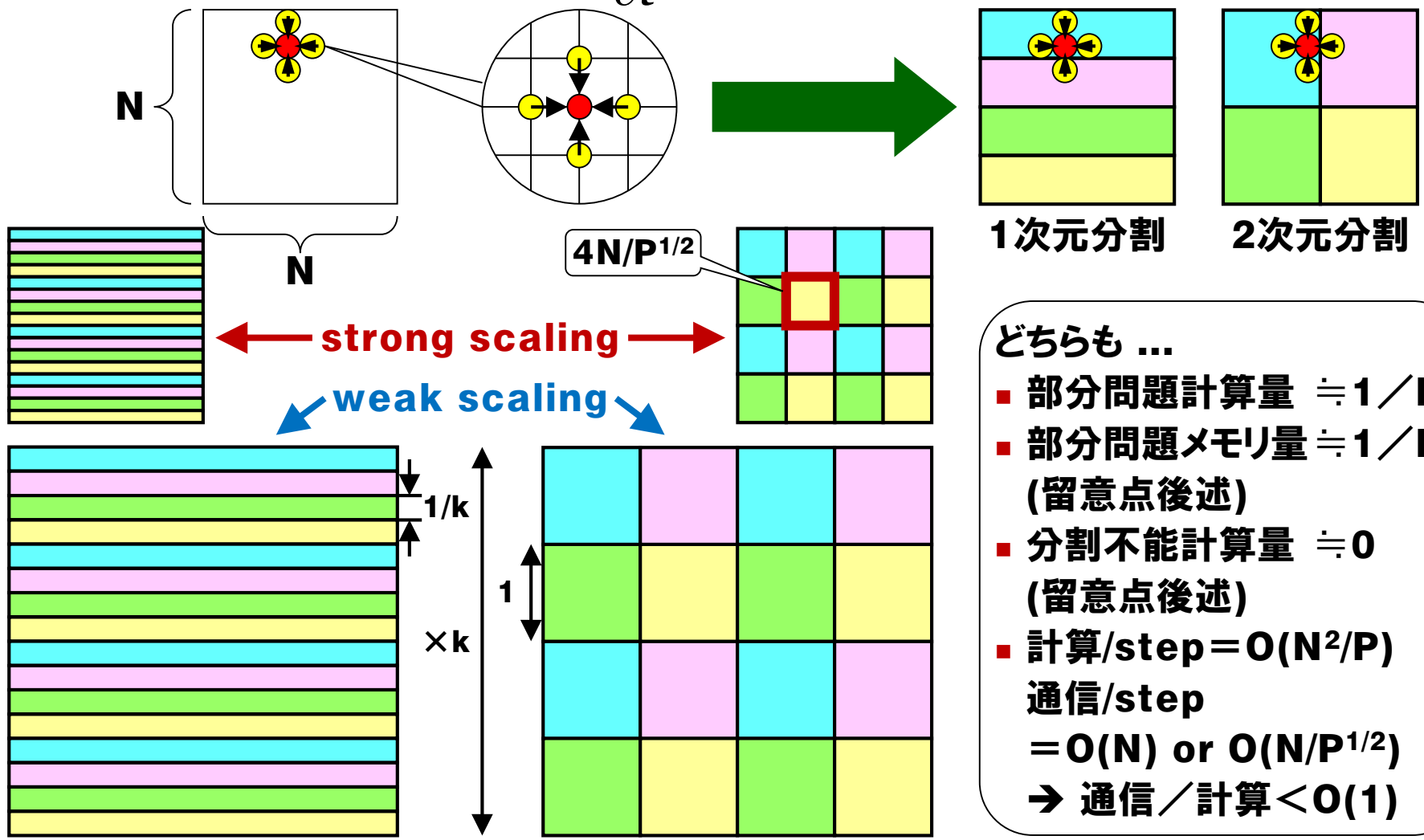
学術情報メディアセンター
情報学研究科・システム科学専攻
中島　浩

目次

- 序論
  - 1次元分割 vs 2次元分割、実装のポイント
- プロセスの2次元配置
  - 直交プロセス空間
  - rank ⇔ 座標の変換
- 2次元配列の宣言・割付・参照
- 不連続データの通信
  - 派生データ型、東西通信用派生データ型
  - 通信回数削減との関係
- 2次元分散データの出力
  - 良くない方法2種
  - 個別出力：MPI File I/O 機能の利用

1次元分割 vs 2次元分割

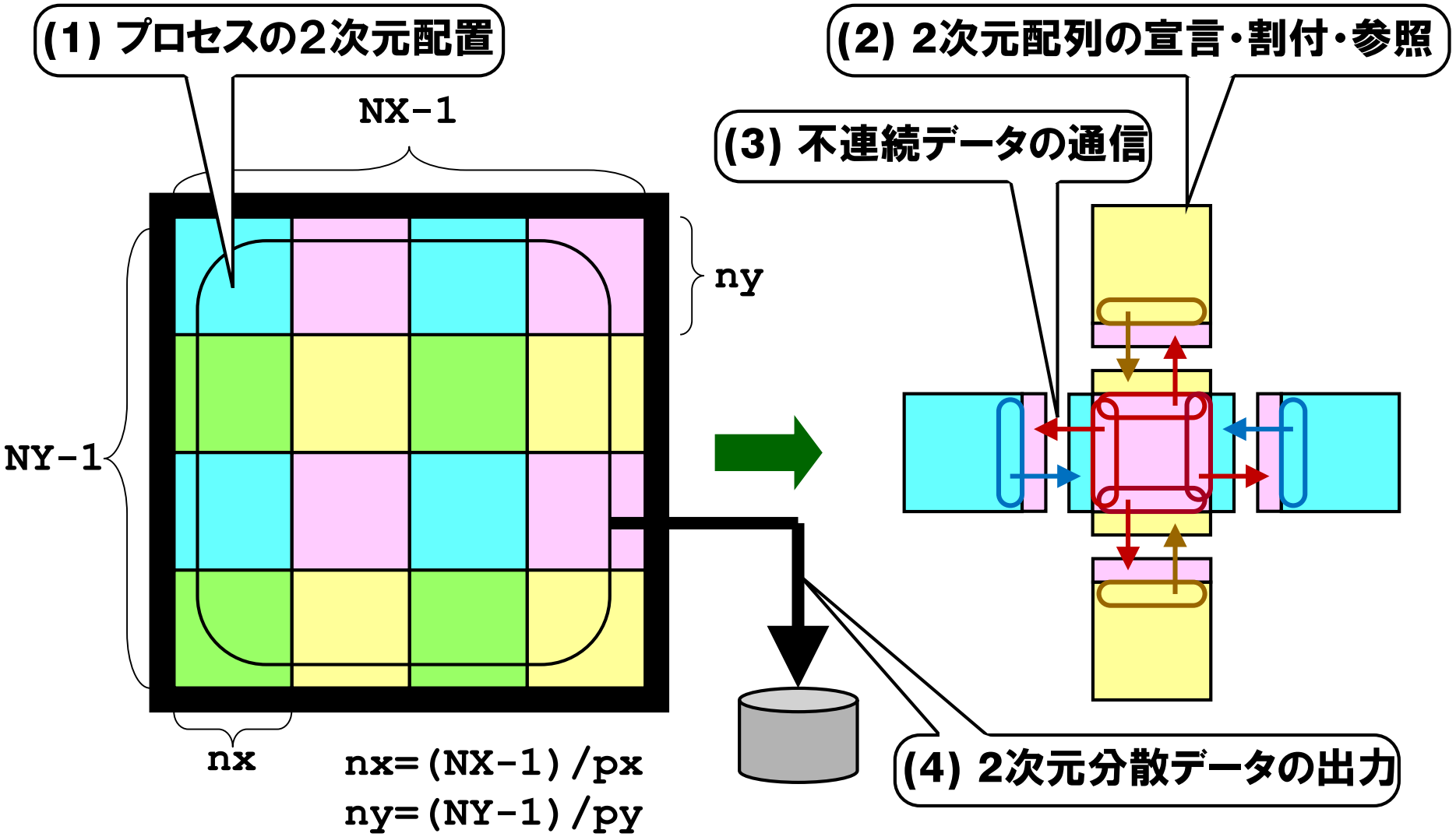
- 拡散方程式 $\nabla^2\varphi = \frac{\partial\varphi}{\partial t}$ の初期値問題求解 by 陽解法



どちらも …

- 部分問題計算量 ≒1／P
- 部分問題メモリ量 ≒1／P
  (留意点後述)
- 分割不能計算量 ≒0
  (留意点後述)
- 計算/step＝O(N^2/P)
  通信/step
  ＝O(N) or O(N/$P^{1/2}$)
  ➔ 通信／計算＜O(1)

実装のポイント

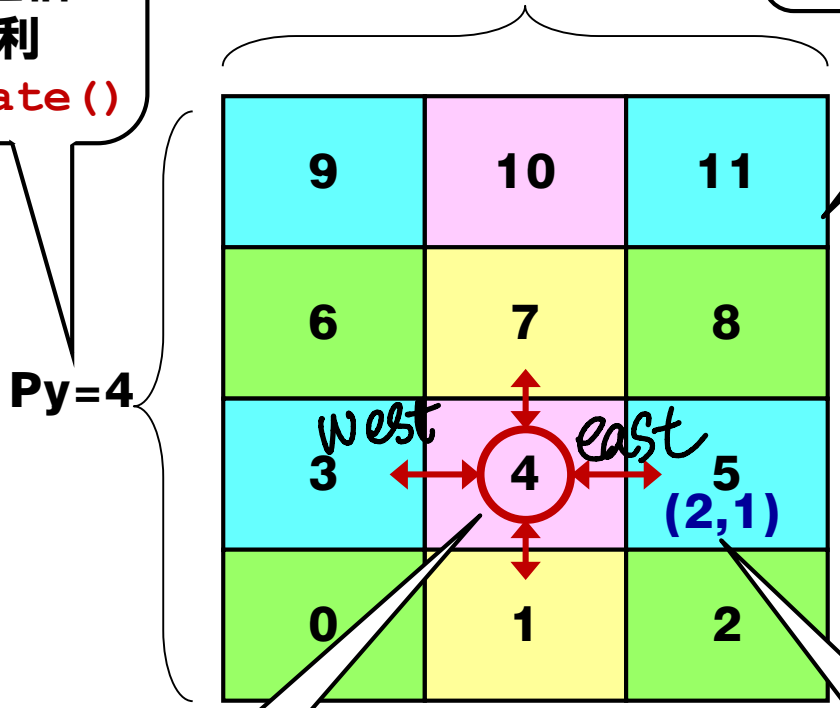


プロセスの2次元配置概論

- プロセス数 P (e.g. 12) について...

(1) P=Px・Py, Px≦Py なる Px, Py を求める
← 南北通信＞東西通信にするのがやや有利
➔ MPI_Dims_create()

(2) Px・Pyの配置に対する communicator を得る
➔ MPI_Cart_create()



(3) 自分の東西・南北の rankを得る
➔ MPI_Cart_shift()

(4) 自分のプロセス座標を得る
➔ MPI_Cart_coord()

直交プロセス空間 (1/2)

- $n = n_0 \times n_1 \times \ldots \times n_{k-1}$
  $(n_0 \geqq n_1 \geqq \ldots \geqq n_{k-1}$ かつ Σn_i 最小) の算出
  - `MPI_Dims_create(int n, int k, int *dims)`
    `dims={0,...,0}` or `dims=(/0,...,0/)` で呼出し
    → `dims[0...k-1]=dims(1...k)=`$n_0, n_1, \ldots, n_{k-1}$
  cf) 呼出し前の非ゼロ要素は「尊重」される
  - 例

```
int dims[2]={0,0};
MPI_Comm_size(MCW,&np);
MPI_Dims_create(np,2,dims);
```

```
integer::dims(2)=(/0,0/)
call MPI_Comm_size(MCW,np,err)
call MPI_Dims_create(np,2,dims,err)
```

直交プロセス空間 (2/2)

- プロセス座標系(p_0, ..., p_{k-1}) ($0 \leqq p_i < n_i$) 生成
  - `MPI_Cart_create(MPI_Comm comm, int k, int *dims, int *periods, int reorder, MPI_Comm *cart)`
    - dims=n_0, n_1, ..., n_{k-1}
    - periods[i]=periods(i+1)=$\begin{cases} 0 & \text{次元 i は非周期境界} \\ 1 & \text{次元 i は周期境界} \end{cases}$
    - reorder==0 ? rank不変 : rank変更あり
  - 例

```
int periods[2]={0,0};  MPI_Comm cart;
MPI_Dims_create(np,2,dims);
MPI_Cart_create(MCW,2,dims,periods,0,&cart);
```

```
integer::periods(2)=(/0,0/),cart
call MPI_Dims_create(np,2,dims,err)
call MPI_Cart_create(MCW,2,dims,periods,0,cart,err)
```

rank ⇔ 座標の変換 (1/3)

- $(p_0, ..., p_{k-1})$ の rank (row major)
  - $r_0 = p_0 \quad r_i = n_i r_{i-1} + p_i \quad r_{k-1} = rank(p_0, ..., p_{k-1})$
  - `MPI_Cart_rank(MPI_Comm cart, int *coord, int *rank)`

    coord=$p_0, ..., p_{k-1}$ → rank=$rank(p_0, ..., p_{k-1})$
  - 例

```
int c[2];
for(c[0]=0;c[0]<dims[0];c[0]++)
  for(c[1]=0;c[1]<dims[1];c[1]++){
    MPI_Cart_rank(cart,c,&r); MPI_Recv(...,r,...);
  }
```

```
integer::c(2)
do c(1)=0,dims(1)-1;  do c(2)=0,dims(2)-1
  call MPI_Cart_rank(cart,c,r,err)
  call MPI_Recv(...,r,...)
end do;  end do
```

rank ⇔ 座標の変換 (2/3)

- 逆変換 $(p_0, \ldots, p_{k-1}) = \mathrm{rank}^{-1}(r)$
  - `MPI_Cart_coords(MPI_Comm cart, int rank, int k, int *coord)`
  - 例

```
int c[2];
MPI_Cart_coords(cart,me,2,c);
for(i=...) for(j=...) {
  y=c[0]*ny+i+1;  x=c[1]*nx+j+1;
  ...
}
```

```
integer::c(2)
call MPI_Cart_coords(cart,me,2,c,err)
do i=...;  do j=...;
  y=c(1)*ny+i+1;  x=c(2)*nx+j+1
  ...
end do;  end do
```

rank ⇔ 座標の変換 (3/3)

- 隣接プロセスの rank
  - `MPI_Cart_shift(MPI_Comm cart, int d, int dir, int *src, int *dst)`

me=rank(p_0, ..., p_{k-1}) ➔ src=rank(p_0, ..., $p_d \mp 1$, ..., p_{k-1})

dst=rank(p_0, ..., $p_d \pm 1$, ..., p_{k-1})

非周期境界の端では MPI_PROC_NULL

dir>0 ➔ −／+
dir<0 ➔ +／−

  - 例

```
MPI_Cart_shift(cart,0,1,&south,&north);
MPI_Cart_shift(cart,1,1,&west,&east); ...
MPI_Sendrecv(...,north,...,south,...); ...
MPI_Sendrecv(...,east,...,west,...); ...
```

```
call MPI_Cart_shift(cart,0,1,south,north,err)
call MPI_Cart_shift(cart,1,1,west,east,err); ...
call MPI_Sendrecv(...,north,...,south,...); ...
call MPI_Sendrecv(...,east,...,west,...); ...
```

2次元配列の宣言・割付・参照 (1/3)

- [X0,x1]×[Y0,y1] なる配列 a の宣言＆割付
  （X0, Y0 は定数、x1, y1は可変）
  - Fortran は相変わらず簡単

```
double precision,allocatable::a(:,:)
allocate(a(X0:x1,Y0:y1))
```

  - ANSI C で a[j][i] に固執→良くない方法しかない

```
double **a;  int h=y1-Y0+1, w=x1-X0+1;
a=(double**)malloc(h*sizeof(double*))-Y0;
a[Y0]=(double*)malloc(h*w*sizeof(double))-X0;
for(j=Y0+1;j<=y1;j++) a[j]=a[j-1]+w;
```

2次元配列の宣言・割付・参照 (2/3)

- ANSI Cでの良い方法＝2次元配列の1次元化
  - ```
    double *a;
    a=(double*)malloc(h*w*sizeof(double))-Y0*w-X0;
    for(i=...) for(j=...)
      ...=...a[i*w+j]...a[(i+1)*w+j]...;
    ```

  ➔内側ループのループ不変式 (e.g. i*w) の追い出し

  ```
  for(i=...) {
    double *ai=a+i*w, *aip=ai+(i+1)*w;
    for(j=...)
      ...=...ai[j]...aip[j]...;
  }
  ```

  ➔演算子強度低減 (strength reduction) 乗算➔加算

  ```
  for(i=...,ai=...,aip=...;...;...,ai+=w,aip+=w){
    for(j=...)
      ...=...ai[j]...aip[j]...;
  }
  ```
  ```

2次元配列の宣言・割付・参照 (3/3)

- C99での良い方法＝可変長配列(!!)
  - f(...){...
    h=...; w=...;
    double b[h][w];
    double (*a)[w]=(double(*)[w])&b[-Y0][-X0];
    ...}

ローカル変数または引数のみ可能

ローカル変数
➔h*w が大きい
➔スタックオーバフロー

1次元目が w 要素の配列へのポインタ

引数の場合
- f(int h, int w, double a[h][w]){
  ...}
  ➔要素数を定める引数よりも後で定義

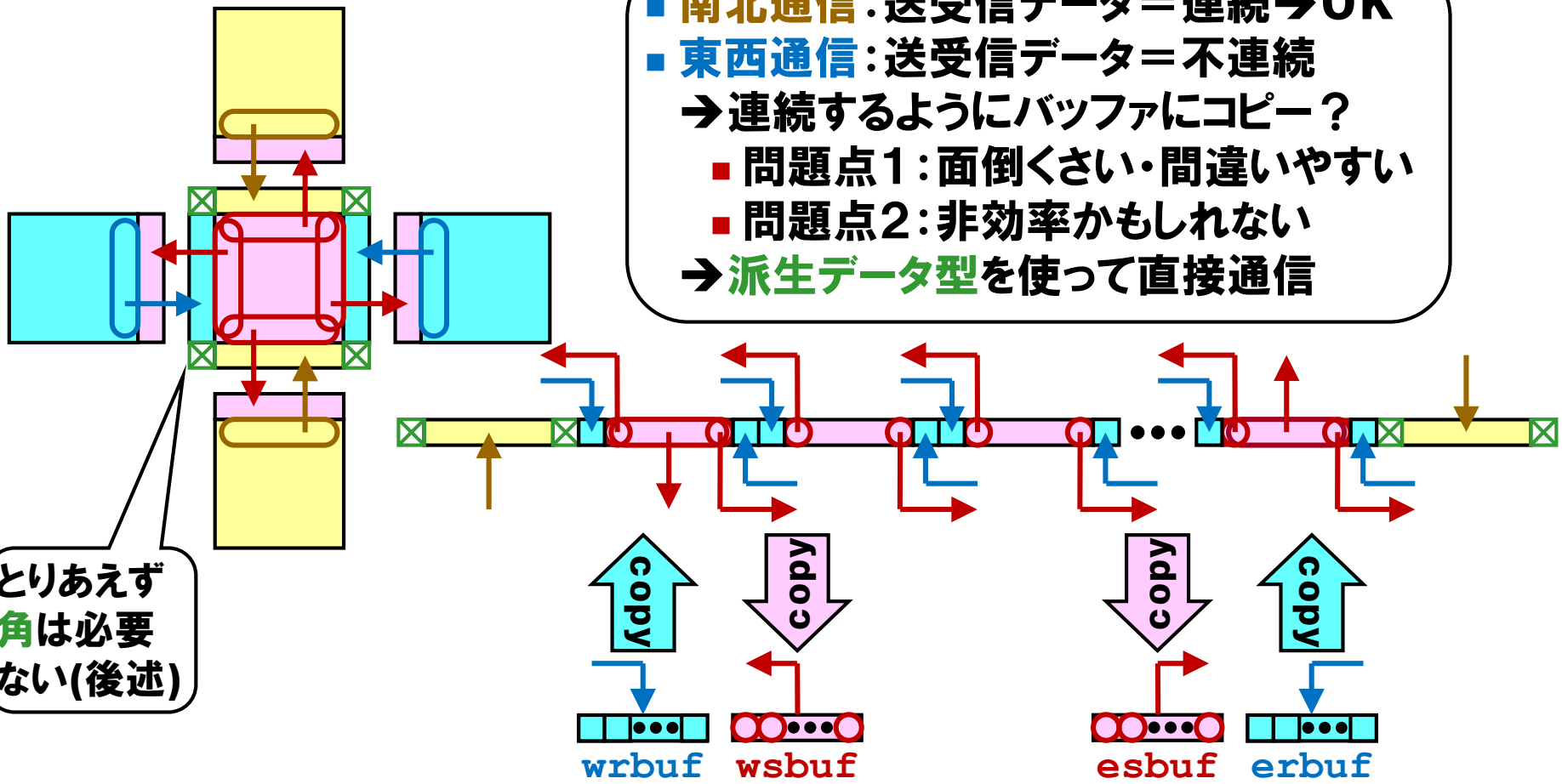
  - f(...){...
    h=...; w=...;
    double (*a)[w];
    a=(double(*)[w])malloc(h*w*sizeof(double));
    a=(double(*)[w])&a[-Y0][-X0];
    ...}
  - コンパイルは mpiicc -std=c99 ...

配列の実体はヒープに
➔h*w 大でもOK

不連続データの通信概論

- 南北通信：送受信データ＝連続➔OK
- 東西通信：送受信データ＝不連続
  ➔連続するようにバッファにコピー？
  - 問題点1：面倒くさい・間違いやすい
  - 問題点2：非効率かもしれない

  ➔派生データ型を使って直接通信




```
MPI_Sendrecv(esbuf,ny,MPI_DOUBLE,east,0,
             wrbuf,ny,MPI_DOUBLE,west,0,MCW,&st);
MPI_Sendrecv(wsbuf,ny,MPI_DOUBLE,west,0,
             erbuf,ny,MPI_DOUBLE,east,0,MCW,&st);
```

派生データ型

- 派生データ型 (derivative data type)
  - 基本型 (MPI_DOUBLE など)・他の派生型を組み合わせて作られる送受信用 (およびファイルI/O用) の型
  - 内部に穴がある不連続データ型も定義可能

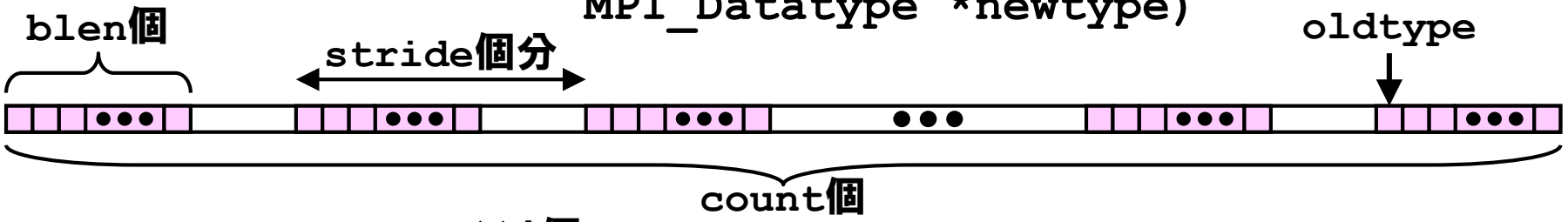
    →送受信MPI関数が必要に応じて pack/unpack
  - 規則的な派生データ型生成関数

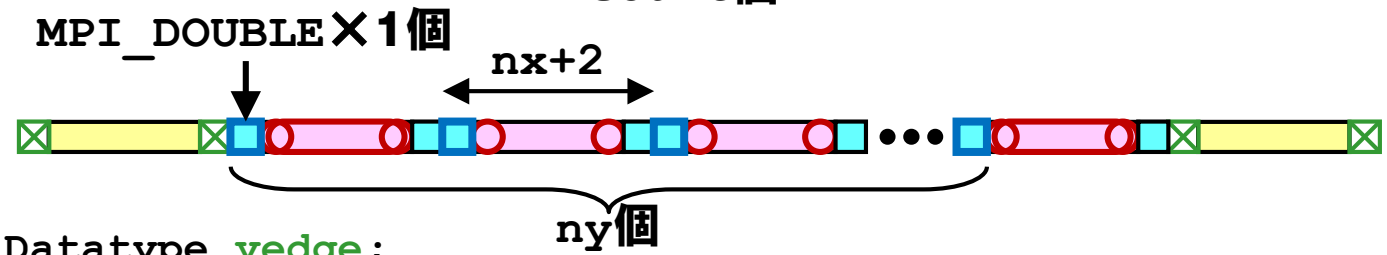
    東西通信
    - MPI_Type_contiguous()　同一型の単純な連続
    - MPI_Type_vector()　同一型の規則的な連続＋不連続
    - MPI_Type_hvector()　同一型の規則的な連続＋不連続
  - 不規則な派生データ型生成関数

    結果出力
    - MPI_Type_indexed()　同一型の不規則な連続＋不連続
    - MPI_Type_hindexed()　同一型の不規則な連続＋不連続
    - MPI_Type_create_subarray()　同一型の不規則な連続＋不連続
    - MPI_Type_struct()　非同一型の不規則配置

不連続データの通信
東西通信用派生データ型

- MPI_Type_vector(int count, int blen, int stride,
  MPI_Datatype oldtype,
  MPI_Datatype *newtype)



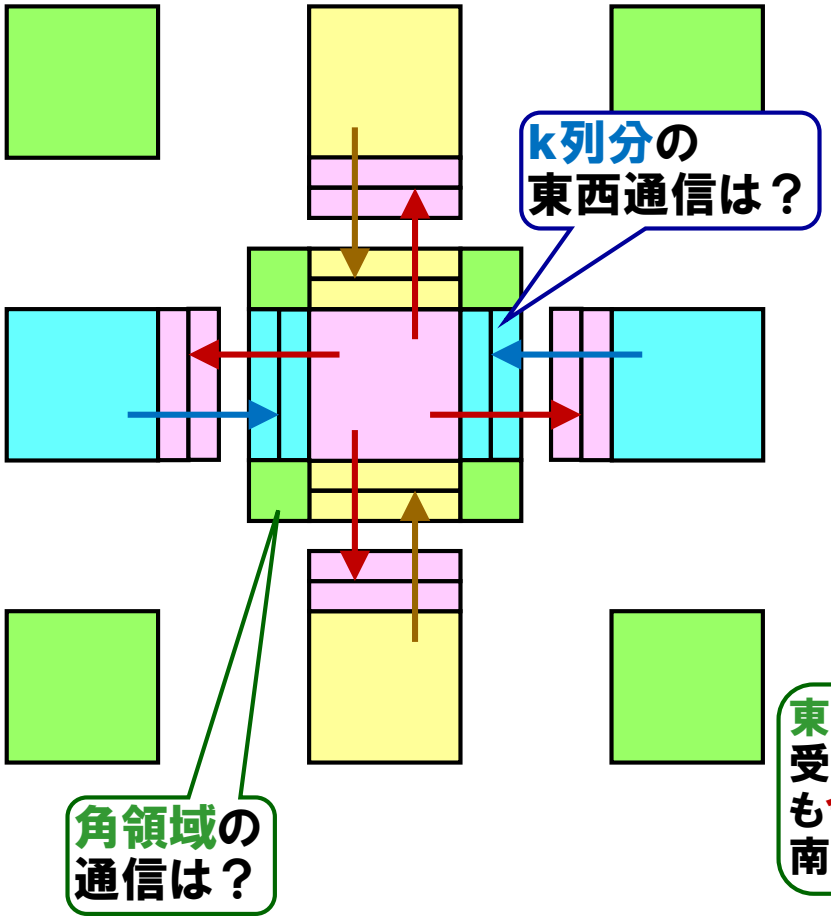



```
MPI_Datatype vedge;
MPI_Type_vector(ny,1,nx+2,MPI_DOUBLE,&vedge);
MPI_Type_commit(&vedge);
MPI_Sendrecv(&u[...],1,vedge,east,0,
             &u[...],1,vedge,west,0,MCW,&st);
```

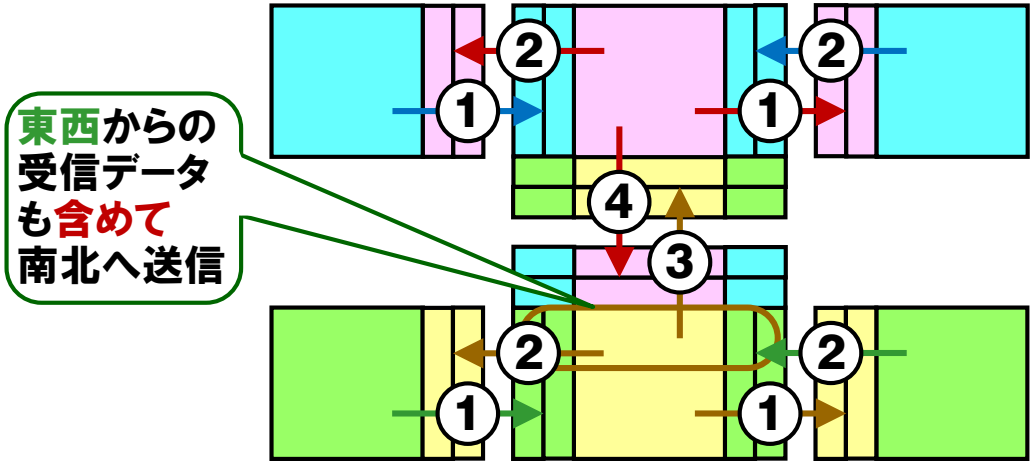
作ったデータの使用開始宣言

```
integer::vedge;
call MPI_Type_vector(ny,1,nx+2,MPI_DOUBLE_PRECISION,vedge,err);
call MPI_Type_commit(vedge,err);
call MPI_Sendrecv(u(...),1,vedge,east,0,
                  u(...),1,vedge,west,0,MCW,st,err);
```

不連続データの通信
通信回数削減への対応



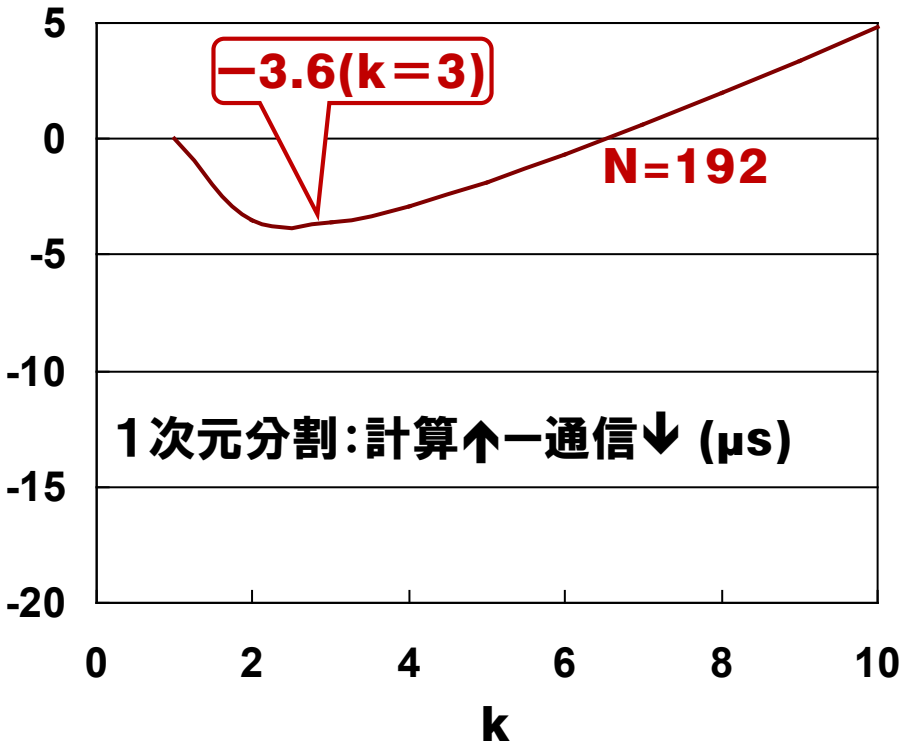
- k列分の東西通信
  - blen=k の Type_vector()
    ≠1列分×k個
- 角領域通信
  - 南西・南東 → 南 → 自分
    北西・北東 → 北 → 自分
    ≠南西など → 自分

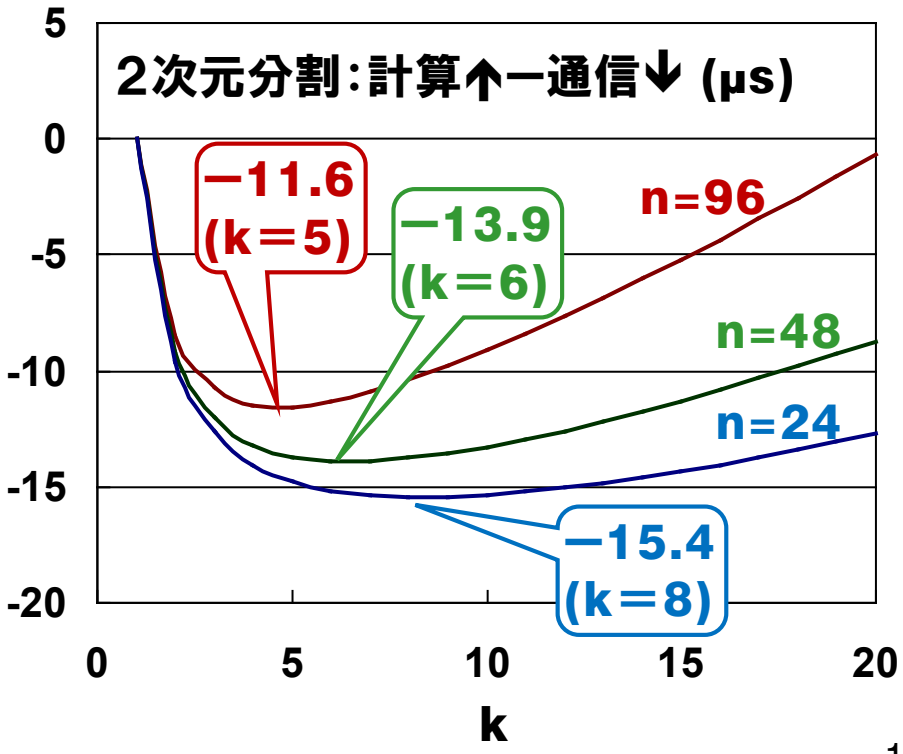


通信回数削減の効果

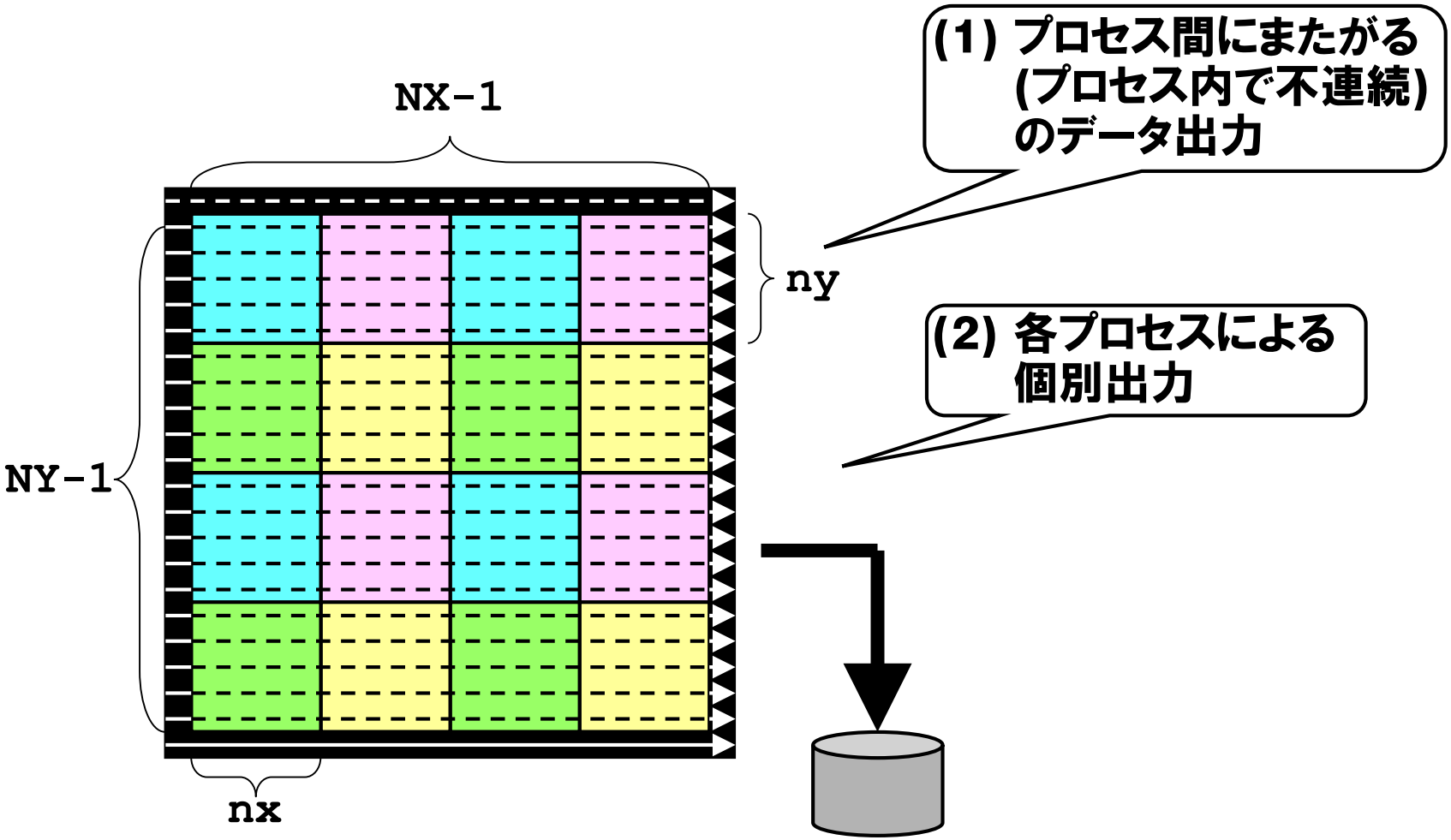
分割	1次元	2次元
計算↑	k(k−1)Nt／k	2k(k−1)(n+(2k−1)／3)t／k
通信↓	2(k−1)L／k	(4(k−1)L−4(k−1)(k−1+n)／B)／k

t＝4ns／格子点　L＝5μs　B＝2GB/s





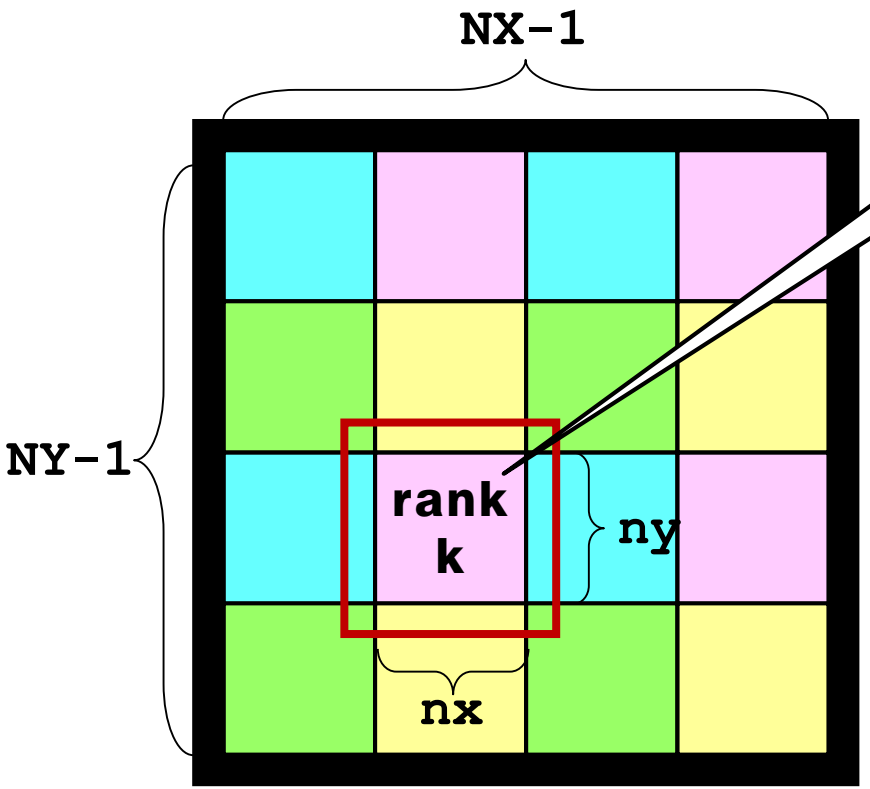
2次元分散データの出力概論



rank0 による出力

- プロセス配列1行分を rank 0 にまとめる

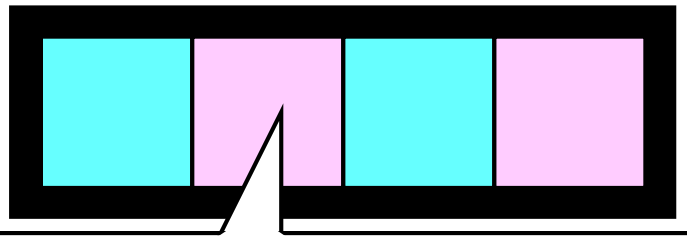
良くない方法




```
MPI_Type_vector(ny,nx,nx+2,
                MPI_DOUBLE,
                &sendtile);
MPI_Send(&u[...],1,sendtile,0,0);
```

送受するデータのサイズ(バイト数)が
同じならデータ型は異なっていてもOK

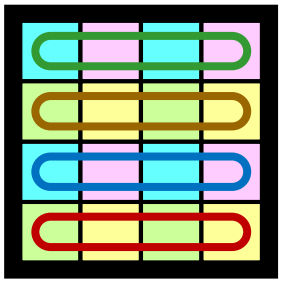
rank 0



```
MPI_Type_vector(ny,nx,NX+1,
                MPI_DOUBLE,
                &recvtile);
MPI_Recv(&wbuf[...],1,recvtile,
         k,0,&st);
```

西端プロセスによる出力

- プロセス配列1行分を西端にまとめる良くない方法
  - 同じ行のプロセスからなる communicator 生成

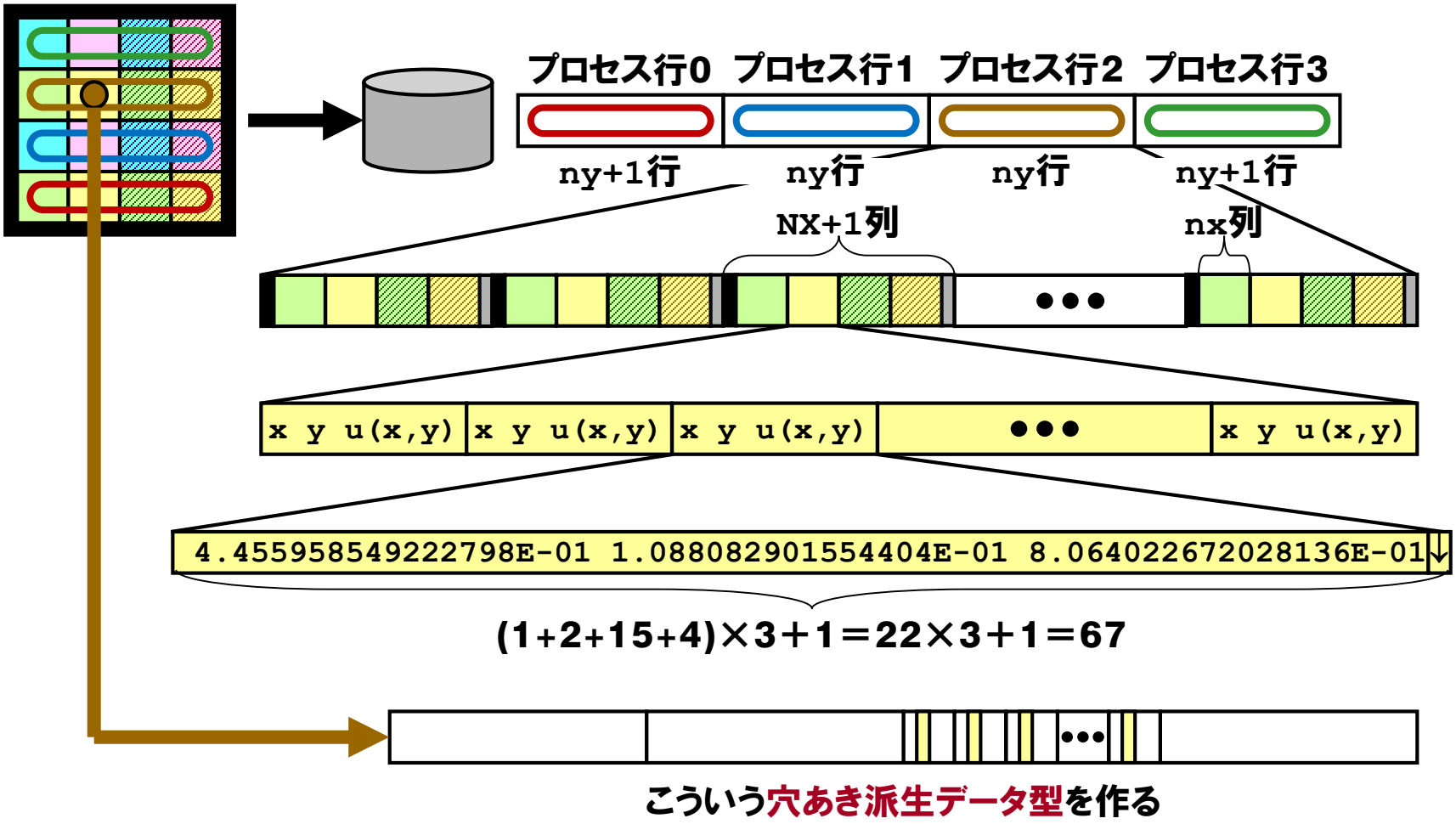


    - `MPI_Comm_split(MPI_Comm comm, int color, int key, MPI_Comm *newcomm)`
    - `newcomm`＝`color` が自分と同じプロセスの集合
    - `newcomm` での rank＝`key` の昇順
  - 行プロセス集合の中で西端に `MPI_Gather()`
  - 例:

```
MPI_Comm row;
MPI_cart_coords(cart,me,2,c);
MPI_Comm_split(cart,c[0],c[1],&row);
MPI_Gather(&u[...],...,wbuf,...,0,row);
```

個別出力：概論

- やりたいこと＝プロセスの位置により定まるファイル中の不連続領域への分散書込み



個別出力:ファイルの open/close (1/2)

- open等のMPI関数:全プロセスが同一引数で実行
  - `MPI_File_open(MPI_Comm comm, char *name, int mode, MPI_Info info, MPI_File *fh)`
    - `info`: ファイルに関するヒント
    - `comm` で共有する名前が `name` のファイルをオープン
    - アクセスモード `mode`＝以下 (など) の定数の論理和
      - `MPI_MODE_RDONLY`:読出し専用
      - `MPI_MODE_RDWR` :読出し＆書込み
      - `MPI_MODE_WRONLY`:書込み専用
      - `MPI_MODE_APPEND`:追加(書込み)
      - `MPI_MODE_CREATE`:ファイルがなければ生成
  - `MPI_File_set_size(MPI_File fh, MPI_Offset size)`
    - ファイルの (初期) サイズを設定
    - 書込みオープンでも既存ファイルの初期サイズは0ではない!!
  - `MPI_File_close(MPI_File *fh)`

個別出力:ファイルの open/close (2/2)

- C の例
  - 書込み＆存在しなければ生成
  - 特にヒントはなし
  - 存在した場合初期サイズを0にしないと元より小さいファイルになった場合にゴミが残る

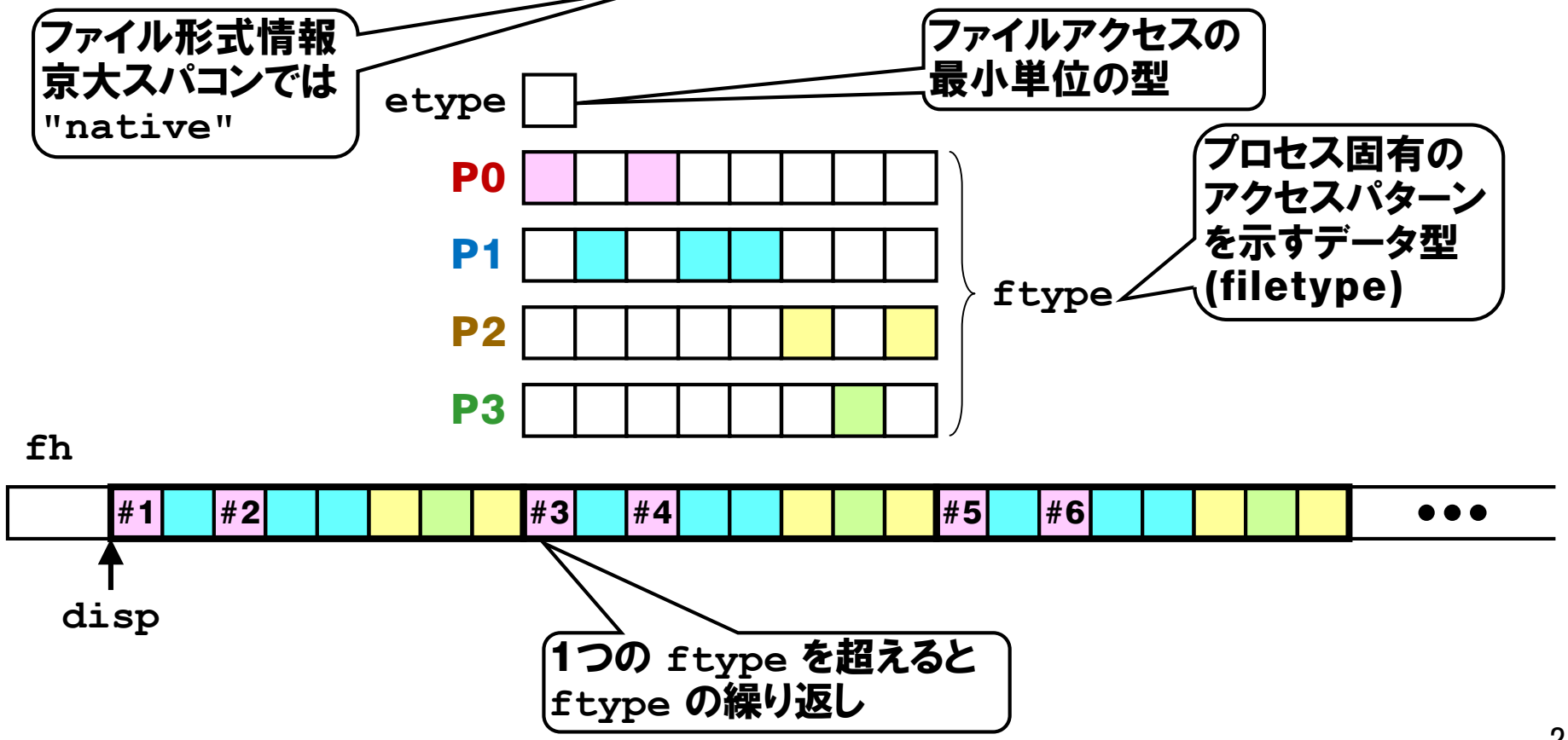
```
MPI_File udata;
MPI_File_open(cart,"...",
              MPI_MODE_WRONLY|MPI_MODE_CREATE,
              MPI_INFO_NULL,&udata);
MPI_File_set_size(udata,(MPI_Offset)0);
...
MPI_File_close(&udata);
```

- Fortran の例

```
integer::udata
integer(kind=MPI_OFFSET_KIND)::zero=0
call MPI_File_open(cart,'...',&
           ior(MPI_MODE_WRONLY,MPI_MODE_CREATE),&
           MPI_INFO_NULL,udata,err)
call MPI_File_set_size(udata,zero,err)
...
call MPI_File_close(udata,err)
```

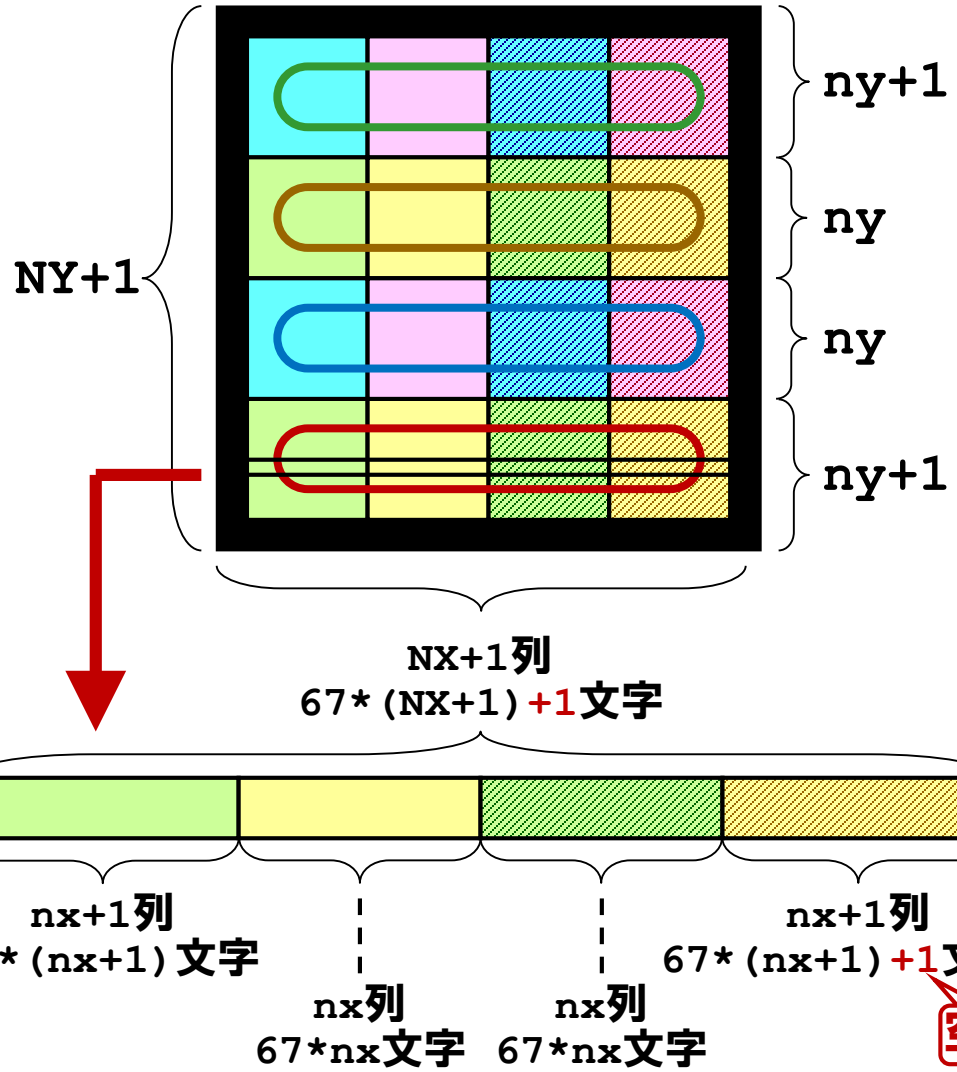
個別出力：個別書込みパターンの設定

- ファイルの view の設定
  - `MPI_File_set_view(MPI_File fh, MPI_Offset disp, MPI_Datatype etype, MPI_Datatype ftype, char *drep, MPI_Info info)`



個別出力:filetype の生成 (1/4)

- 出力ファイル＝仮想的2次元配列



仮想的には

全体
`char[NY+1][67*(NX+1)+1]`

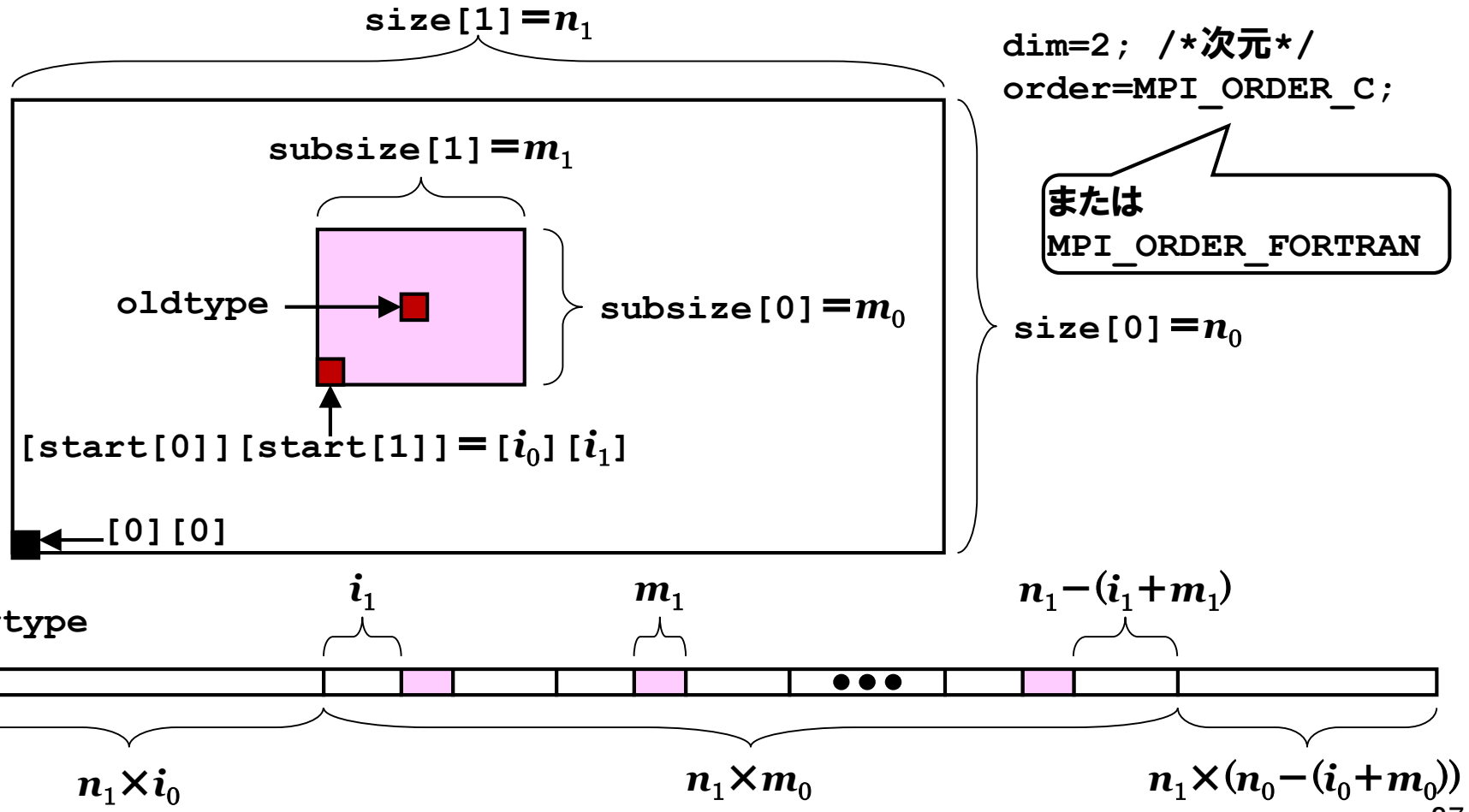
1プロセス＝部分配列

$$\mathrm{char}\left[\begin{Bmatrix}67*nx\\67*(nx+1)\\67*(nx+1)+1\end{Bmatrix}\right]\left[\begin{Bmatrix}ny\\ny+1\end{Bmatrix}\right]$$

部分配列型生成
`MPI_Type_create_subarray()`

個別出力:filetype の生成 (2/4)

- MPI_Type_create_subarray(int dim,
  int *size, int *subsize, int *start, int order,
  MPI_Datatype oldtype, MPI_Datatype *newtype)



個別出力:filetype の生成 (3/4)

- C の例

```
#define LW 67
...
MPI_Datatype ftype;
int size[2]={NY+1,LW*(NX+1)+1}, subsize[2], start[2];
...
MPI_Dims_create(np,2,dims);
MPI_Cart_coords(cart,me,2,c);
...
subsize[0]=ny;  subsize[1]=LW*nx;
start[0]=c[0]*ny+1;  start[1]=LW*(c[1]*nx+1);
if (c[0]==0){ subsize[0]++;  start[0]=0; }
if (c[0]==dims[0]-1) subsize[0]++;
if (c[1]==0){ subsize[1]+=LW;  start[1]=0; }
if (c[1]==dims[1]-1) subsize[1]+=LW+1;
MPI_Type_create_subarray(2,size,subsize,start,
                         MPI_ORDER_C,MPI_CHAR,&ftype);
MPI_Type_commit(&ftype);
MPI_File_set_view(udata,(MPI_Offset)0,MPI_CHAR,ftype,
                  "native",MPI_INFO_NULL);
```

両方とも成立することがある

両方とも成立することがある

個別出力:filetype の生成 (4/4)

- Fortran の例

```
integer,parameter::LW=67
integer::ftype
integer::size(2)=(/NNY+1,LW*(NNX+1)+1/),
integer::subsize(2), start(2)
...
call MPI_Dims_create(np,2,dims,err)
call MPI_Cart_coords(cart,me,2,c,err)
...
subsize(1)=ny;  subsize(2)=LW*nx;
start(1)=c(1)*ny+1;  start(2)=LW*(c(2)*nx+1)
if (c(1)==0) then
  subsize(1)=subsize(1)+1;  start(1)=0;  endif
if (c(1)==dims(1)-1) subsize(1)=subsize(1)+1
if (c(2)==0) then
  subsize(2)=subsize(2)+LW;  start(2)=0;  endif
if (c(2)==dims(2)-1) subsize(2)=subsize(2)+LW+1
call MPI_Type_create_subarray(2,size,subsize,start,&
                    MPI_ORDER_C,MPI_CHARACTER,ftype,err)
call MPI_Type_commit(ftype,err)
call MPI_File_set_view(udata,zero,MPI_CHARACTER,&
                    ftype,'native',MPI_INFO_NULL,err)
```

両方とも成立することがある

両方とも成立することがある

個別出力:ファイルの書込み (1/3)

- `MPI_File_write(MPI_File fh, void *buf, int count, MPI_Datatype dtype, MPI_Status *st)`
  - `buf` から `count` 個の `dtype` データを `fh` に書込み
  - `dtype` のデータがある部分を繋いだもの ＝ `etype` を並べたもの
- あまり良くない (かもしれない) 例

```
char wbuf[LW+1];
...
for(i=...){
  for(j=...) {
    sprintf(wbuf,"...",...,u[...]);
    MPI_File_write(udata,wbuf,LW,MPI_CHAR,&st);
  }
  if(c[1]==dims[1]-1)
    MPI_File_write(udata,"¥n",1,MPI_CHAR,&st);
}
```

MPI_File_write() を沢山実行すると、とりあえず京大スパコンでは結構な時間がかかった

個別出力:ファイルの書込み (2/3)

- どのマシンでもそこそこ良い (はずの) 例 (C版)

```
char *wbuf;
...
wbuf=(char*)malloc((LW*(nx+2)+2)*sizeof(char));
for(i=...){
  for(j=...,k=0;...,;...,k+=LW)
    sprintf(wbuf+k,"...",...,u[...]);
  }
  if(c[1]==dims[1]-1)
    sprintf(wbuf+(k++),"¥n");
  MPI_File_write(udata,wbuf,k,MPI_CHAR,&st);
}
```

個別出力:ファイルの書込み (3/3)

- どのマシンでもそこそこ良い (はずの) 例 (Fortran版)

```
subroutine print_u(u,...,bufsize,eastmost)
integer::bufsize
logical::eastmost
character(len=bufsize)::wbuf
...
do i=...;  k=1
  do j=...
    write(wbuf(k:k+LW-1),'(...)')...,u(...),char(10)
    k=k+LW
  end do
  if(eastmost) then
    wbuf(k:k)=char(10)
    call MPI_File_write(udata,wbuf,k,MPI_CHAR,st,err)
  else
    call MPI_File_write(udata,wbuf,k-1,MPI_CHAR,st,err)
end do
end subroutine
```

個別出力:まとめ (1/2)

- Cのまとめ

```
MPI_File udata;
MPI_Datatype ftype;
...
MPI_File_open(&udata,...);
MPI_File_set_size(udata,(MPI_Offset)0);
/* ftype の生成 */
MPI_Type_commit(&ftype);
MPI_File_set_view(udata,...,ftype,...);
for(i=...){
  for(j=...){...} ...;
  MPI_File_write(udata,...);
}
MPI_File_close(&udata);
```

個別出力:まとめ (2/2)

- **Fortran のまとめ**

```
integer::udata,ftype
...
call MPI_File_open(udata,...)
call MPI_File_set_size(udata,zero,err)
/* ftype の生成 */
call MPI_Type_commit(ftype,err)
call MPI_File_set_view(udata,...,ftype,...)
call print_u(u,...,LW*(nx+2)+1,c(1)==dims(1)-1)
call MPI_File_close(udata,err)
```