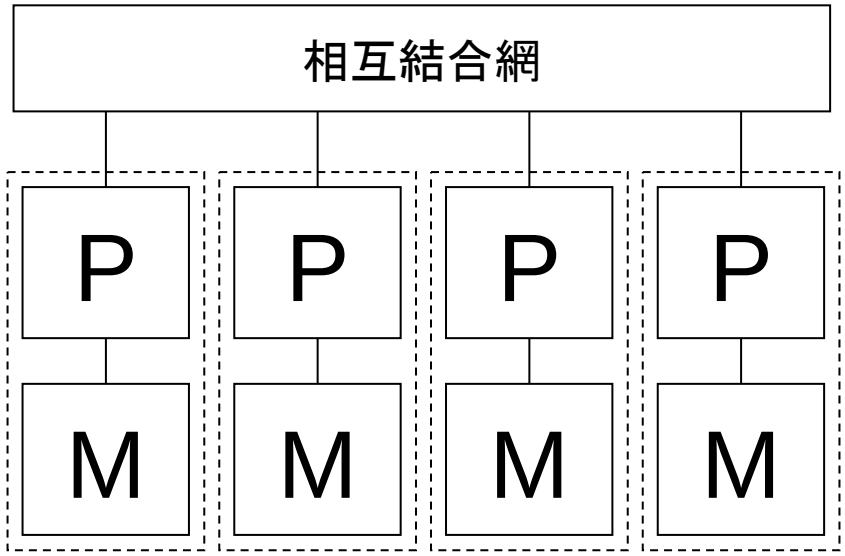
筑波大学計算科学研究センター
CCS HPCサマーセミナー
「MPI」

建部修見
tatebe@cs.tsukuba.ac.jp
筑波大学大学院システム情報工学研究科
計算科学研究センター

分散メモリ型並列計算機（PCクラスタ）

- 計算ノードはプロセッサとメモリで構成され，相互結合網で接続
- ノード内のメモリは直接アクセス
- 他ノードとはネットワーク通信により情報交換
- いわゆるPCクラスタ

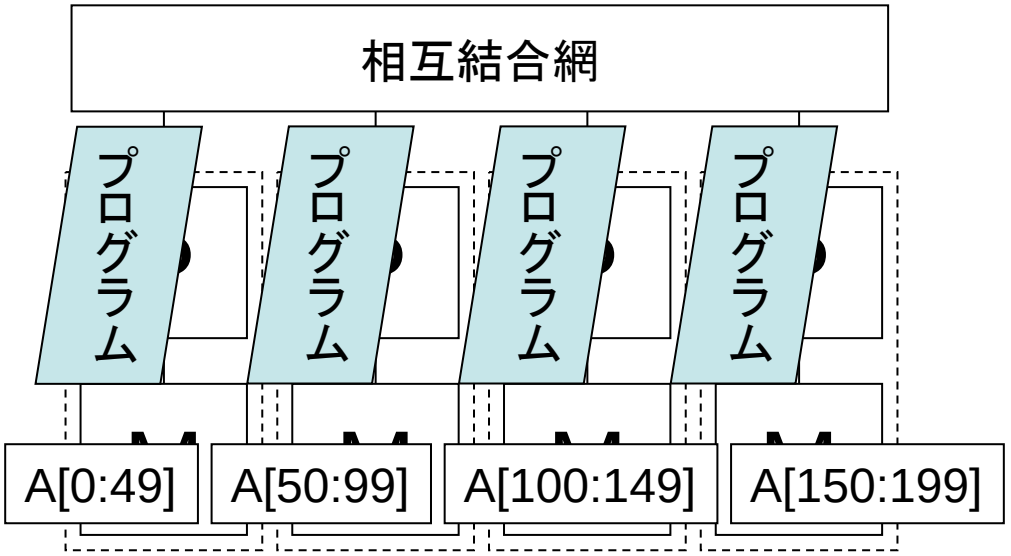


MPI – The Message Passing Interface

- メッセージ通信インターフェースの標準
- 1992年より標準化活動開始
- 1994年，MPI-1.0リリース
  - ポータブルな並列ライブラリ，アプリケーション
  - 8つの通信モード，コレクティブ操作，通信ドメイン，プロセストポロジ
  - 100以上の関数が定義
  - 仕様書　http://www.mpi-forum.org/
    - MPI-2.1が2008年9月にリリース
  - 翻訳　http://phase.hpcc.jp/phase/mpi-j/ml/

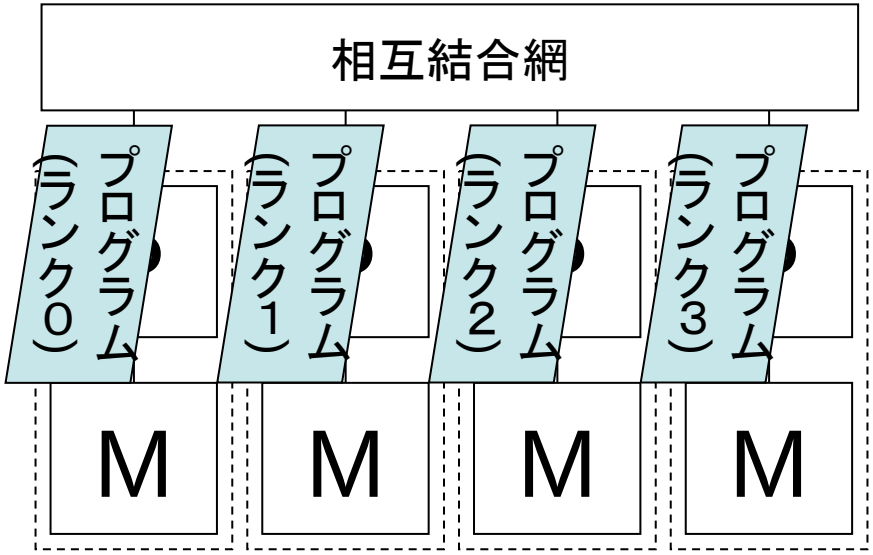
SPMD – Single Program, Multiple Data

- 異なるプロセッサで同一プログラムを独立に実行（cf. SIMD）
- 同一プログラムで異なるデータを処理
- メッセージ通信でプログラム間の相互作用を行う



MPI実行モデル

- (同一の)プロセスを複数のプロセッサで起動
  - プロセス間は(通信がなければ)同期しない
- 各プロセスは固有のプロセス番号をもつ
- MPIによりプロセス間の通信を行う



コミュニケータ(1)

- 通信ドメイン
  - プロセスの集合
  - プロセス数，プロセス番号(ランク)
  - プロセストポロジ
    - 一次元リング，二次元メッシュ，トーラス，グラフ
- MPI_COMM_WORLD
  - 全プロセスを含む初期コミュニケータ

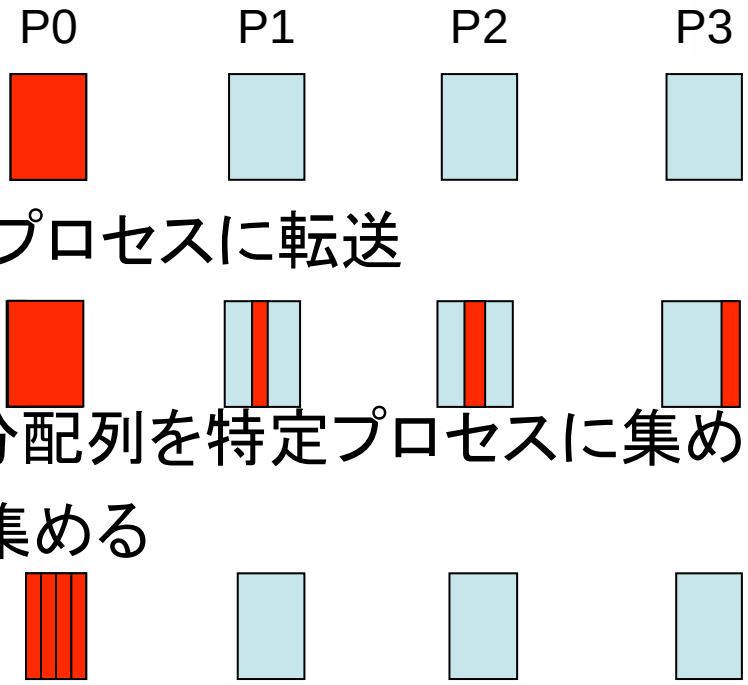
コミュニケータ(2)

- 集団通信の“スコープ”(通信ドメイン)を自由に作成可能
- プロセスの分割
  - 2/3のプロセスで天気予報，1/3のプロセスで次の初期値計算
- イントラコミュニケータとインターコミュニケータ

集団通信

- コミュニケータに含まれる全プロセス間でのメッセージ通信
- バリア同期（データ転送なし）
- 大域データ通信
  - 放送（broadcast），ギャザ（gather），スキャタ（scatter），全プロセスへのギャザ（allgather），転置（alltoall）
- 縮約通信（リダクション）
  - 縮約（総和，最大値など），スキャン（プレフィックス計算）

大域データ通信



- 放送
  - ルートプロセスのA[*]を全プロセスに転送
- ギャザ
  - プロセス間で分散した部分配列を特定プロセスに集める
  - allgatherは全プロセスに集める
- スキャタ
  - ルートプロセスのA[*]をプロセス間で分散させる
- Alltoall
  - 二次元配列A[分散][*]→A^T[分散][*]

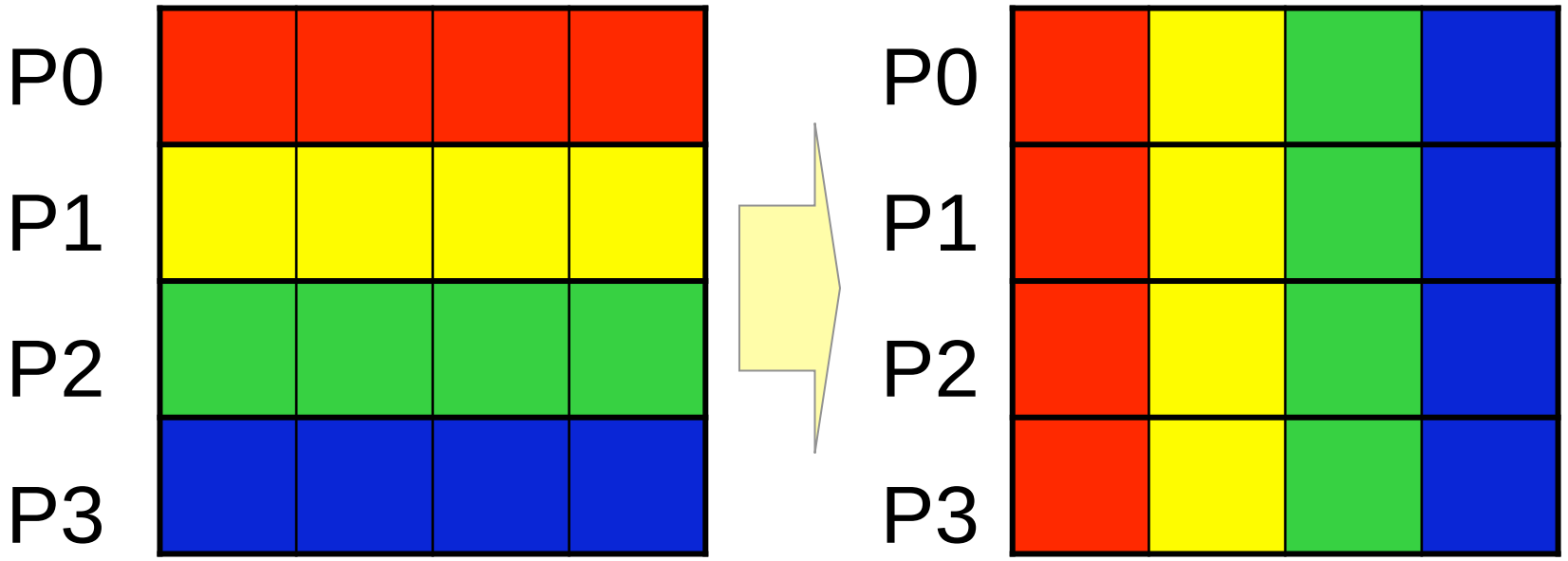
allgather

- 各プロセスの部分配列を集めて全プロセスで全体配列とする

P0	A[0:49]		A[0:199]
P1	A[50:99]		A[0:199]
P2	A[100:149]		A[0:199]
P3	A[150:199]		A[0:199]

alltoall

- （行方向に）分散した配列を転置する



1対1通信

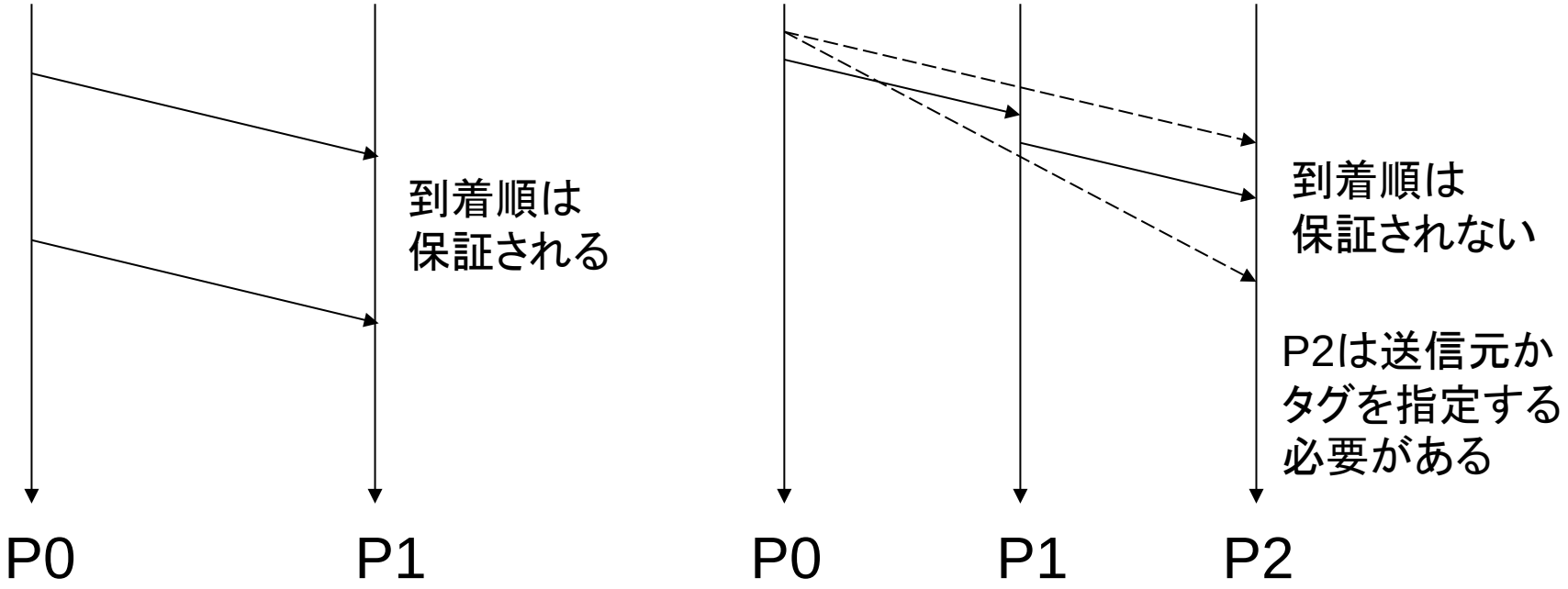
- Point-to-Point通信とも呼ばれる
- プロセスのペア間でのデータ転送
  - プロセスAはプロセスBにデータを送信（send）
  - プロセスBは（プロセスAから）データを受信（recv）
- 型の付いたデータを転送
  - 基本データ型，配列，構造体，ベクタ，ユーザ定義データ型
- コミュニケータ，メッセージタグ，送受信プロセスランクでsendとrecvの対応を決定

1対1通信（2）

- ブロック型通信
  - 送信バッファが再利用可能となったら送信終了
  - 受信バッファが利用可能となったら受信終了
- MPI_Send(A, . . .)が戻ってきたらAを変更しても良い
  - 同一プロセスの通信用のバッファにコピーされただけかも
  - メッセージの送信は保証されない

1対1通信の注意点(1)

- メッセージ到着順
  - (2者間では)メッセージは追い越されない
  - 3者間以上では追い越される可能性がある



1対1通信の注意点(2)

- 公平性
  - 通信処理において公平性は保証されない
  - P1とP2がP0にメッセージ送信
  - P0は送信元を指定しないで受信を複数発行
    - P0はP2からのメッセージばかり受信し，P1からのメッセージがstarvationを引き起こす可能性がある

非ブロック型1対1通信

- 非ブロック型通信
  - post-send, complete-send
  - post-receive, complete-receive
- Post-{send,recv}で送信受信操作を開始
- Complete-{send,recv}で完了待ち
- 計算と通信のオーバラップを可能に
  - マルチスレッドでも可能だが，しばしばより効率的

1対1通信の通信モード

- ブロック型，非ブロック型通信のそれぞれに以下の通信モードがある
  - 標準モード
    - 実装依存
  - バッファモード
    - 送信メッセージはバッファリングされる
    - 送信はローカルに終了
  - 同期モード
    - ランデブー
  - Readyモード
    - 受信が既に発行されていることが保証されている場合

並列処理の例(1):ホスト名表示

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

int
main(int argc, char *argv[])
{
        int rank, len;
        char name[MPI_MAX_PROCESSOR_NAME];

        MPI_Init(&argc, &argv);
        MPI_Comm_rank(MPI_COMM_WORLD, &rank);
        MPI_Get_processor_name(name, &len);
        printf("%03d %s\n", rank, name);
        MPI_Finalize();
        return (0);
}
```

解説

- mpi.hをインクルード

- 各プロセスはmainからプログラムが実行
- SPMD (single program, multiple data)
  - 単一のプログラムを各ノードで実行
  - 各プログラムは違うデータ(つまり、実行されているプロセスのデータ)をアクセスする

- 初期化
  - **MPI_Init**

解説（続き）

- プロセスランク番号の取得
  - **MPI_Comm_rank**(MPI_COMM_WORLD, &rank);
  - コミュニケータMPI_COMM_WORLDに対し，自ランクを取得
  - コミュニケータはopaqueオブジェクト，内容は関数でアクセス

- ノード名を取得
  - **MPI_Get_processor_name**(name, &len);

- 最後にexitの前で、全プロセッサで！

  MPI_Finalize();

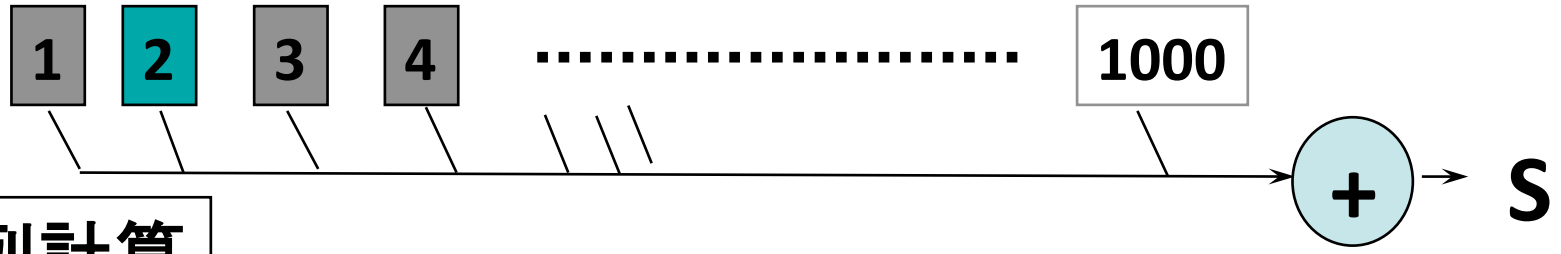
コミュニケータに対する操作

- int **MPI_Comm_size**(MPI_Comm comm, int *size);
- コミュニケータcommのプロセスグループの総数をsizeに返す
- int **MPI_Comm_rank**(MPI_Comm comm, int *rank);
- コミュニケータcommのプロセスグループにおける自プロセスのランク番号をrankに返す

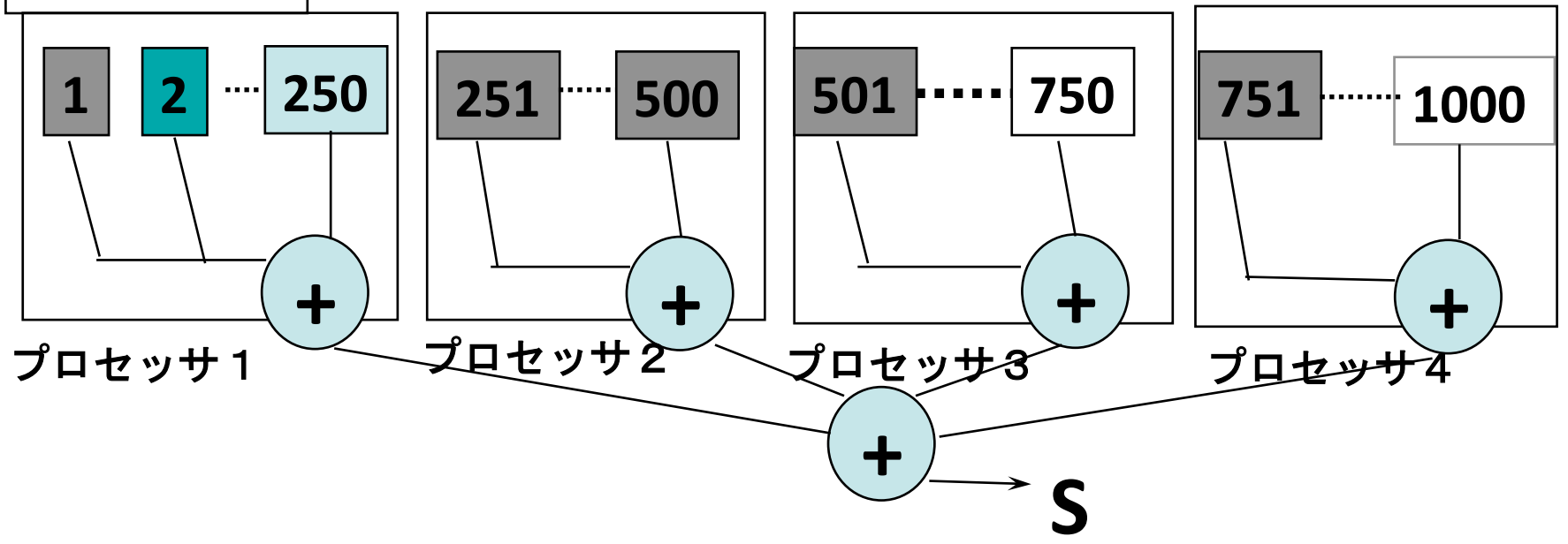
並列処理の例(2):総和計算

for (i = 0; i < 1000; i++)
S += A[i]

逐次計算



並列計算



```
#include <mpi.h>

double A[1000 / N_PE];

int main(int argc, char *argv[])
{
   double sum, mysum;

   MPI_Init(&argc,&argv);
   mysum = 0.0;
   for (i = 0; i < 1000 / N_PE; i++)
         mysum += A[i];
   MPI_Reduce(&mysum, &sum, 1, MPI_DOUBLE,
         MPI_SUM, 0, MPI_COMM_WORLD);
   MPI_Finalize();
   return (0);
}
```

解説

- 宣言されたデータは各プロセッサで重複して取られる
  - 1プロセスではプロセス数N_PEで割った分を確保

- 計算・通信
  - 各プロセッサで部分和を計算して、集計
  - コレクティブ通信
  - **MPI_Reduce**(&mysum, &sum, 1, MPI_DOUBLE,
  - MPI_SUM, 0, MPI_COMM_WORLD);
  - コミュニケータはMPI_COMM_WORLDを指定
  - 各プロセスのMPI_DOUBLEの要素数1のmysumに対し
  - リダクションのタイプはMPI_SUM，結果はランク0のsumに

並列処理の例（3）：Cpi

- 積分して、円周率を求めるプログラム
- MPICHのテストプログラム
  - 変数nの値をBcast
  - 最後にreduction
  - 計算は、プロセスごとに飛び飛びにやっている

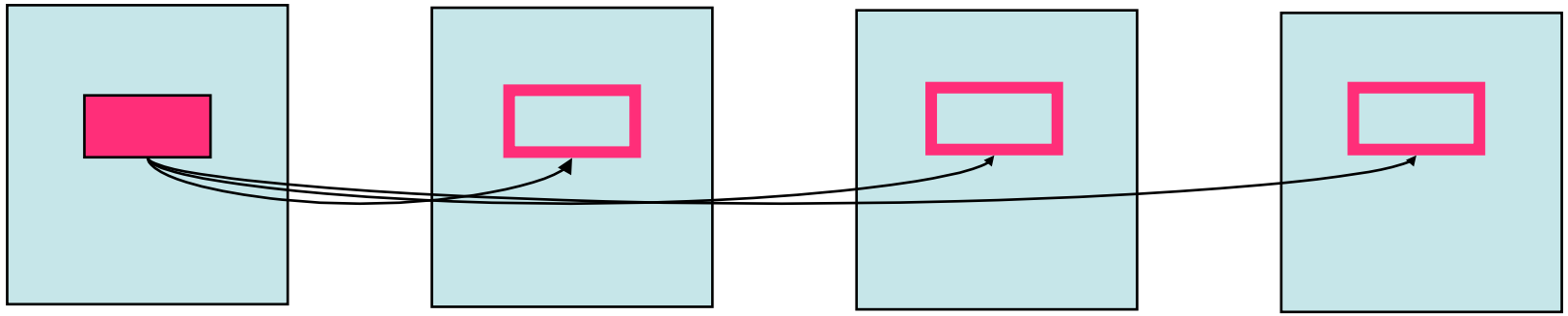
$$\pi = \int_0^1 \frac{4}{1+t^2}\,dt$$

```
…
MPI_Bcast(&n, 1, MPI_INT, 0, MPI_COMM_WORLD);

h = 1.0 / n;
sum = 0.0;
for (i = myid + 1; i <= n; i += numprocs){
      x = h * (i - 0.5);
      sum += f(x);
}
mypi = h * sum;

MPI_Reduce(&mypi, &pi, 1, MPI_DOUBLE,
           MPI_SUM, 0, MPI_COMM_WORLD);
```

for (i = 1; i <= n; i++)

集団通信: ブロードキャスト

```
MPI_Bcast(
  void      *data_buffer,   // ブロードキャスト用送受信バッファのアドレス
  int       count,          // ブロードキャストデータの個数
  MPI_Datatype data_type,   // ブロードキャストデータの型(*1)
  int       source,         // ブロードキャスト元プロセスのランク
  MPI_Comm  communicator    // 送受信を行うグループ
);
```

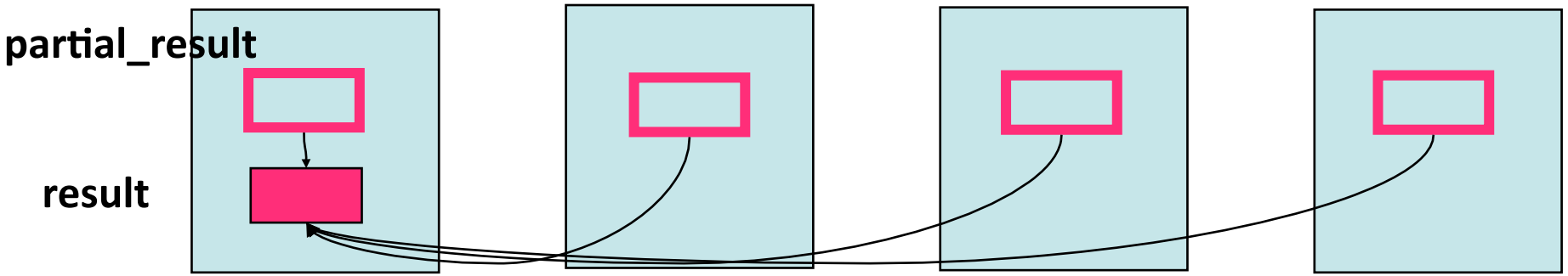


source

全プロセスで実行されなくてはならない

集団通信: リダクション

```
MPI_Reduce(
  void      *partial_result, // 各ノードの処理結果が格納されているアドレス
  void      *result,         // 集計結果を格納するアドレス
  int       count,           // データの個数
  MPI_Datatype data_type,    // データの型(*1)
  MPI_Op    operator,        // リデュースオペレーションの指定(*2)
  int       destination,     // 集計結果を得るプロセス
  MPI_Comm  communicator     // 送受信を行うグループ
);
```



全プロセスで実行されなくてはならない

Resultを全プロセスで受け取る場合は、MPI_Allreduce

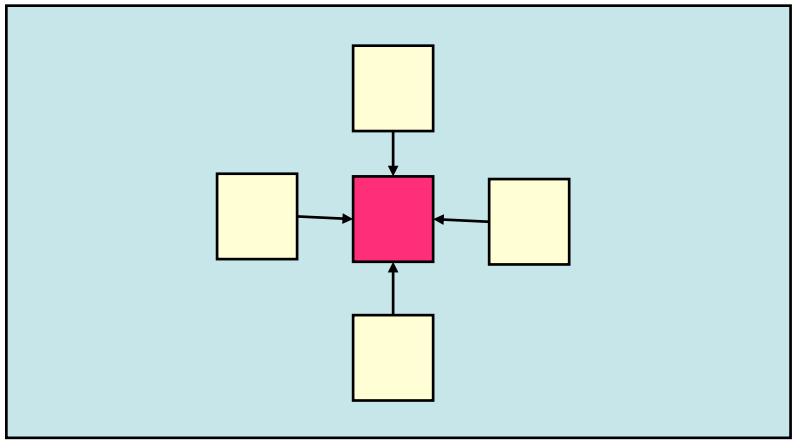
```
/* cpi mpi version */
#include <stdlib.h>
#include <stdio.h>
#include <math.h>
#include <mpi.h>

double
f(double a)
{
        return (4.0 / (1.0 + a * a));
}

int
main(int argc, char *argv[])
{
        int n = 0, myid, numprocs, i;
        double PI25DT = 3.14159265358979323846264643;
        double mypi, pi, h, sum, x;
        double startwtime = 0.0, endwtime;
        int namelen;
        char processor_name[MPI_MAX_PROCESSOR_NAME];
```

```
MPI_Init(&argc, &argv);
MPI_Comm_size(MPI_COMM_WORLD, &numprocs);
MPI_Comm_rank(MPI_COMM_WORLD, &myid);
MPI_Get_processor_name(processor_name, &namelen);
fprintf(stderr, "Process %d on %s\n", myid, processor_name);

if (argc > 1)
        n = atoi(argv[1]);
startwtime = MPI_Wtime();
/* broadcast 'n' */
MPI_Bcast(&n, 1, MPI_INT, 0, MPI_COMM_WORLD);
if (n <= 0) {
        fprintf(stderr, "usage: %s #partition\n", *argv);
        MPI_Abort(MPI_COMM_WORLD, 1);
}
```

```
        /* calculate each part of pi */
        h = 1.0 / n;
        sum = 0.0;
        for (i = myid + 1; i <= n; i += numprocs){
                x = h * (i - 0.5);
                sum += f(x);
        }
        mypi = h * sum;
        /* sum up each part of pi */
        MPI_Reduce(&mypi, &pi, 1, MPI_DOUBLE, MPI_SUM, 0, MPI_COMM_WORLD);
        if (myid == 0) {
                printf("pi is approximately %.16f, Error is %.16f\n",
                        pi, fabs(pi - PI25DT));
                endwtime = MPI_Wtime();
                printf("wall clock time = %f\n",
                        endwtime - startwtime);
        }
        MPI_Finalize();
        return (0);
}
```

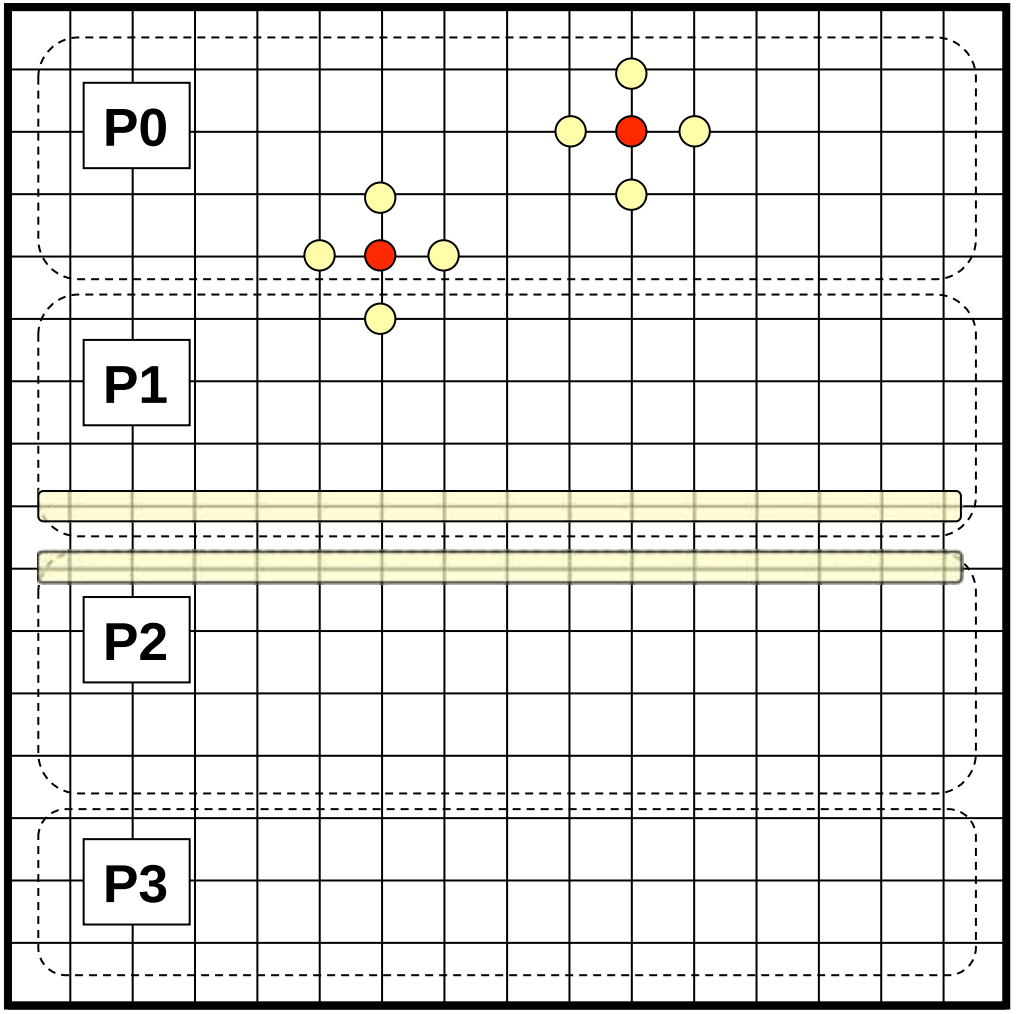
並列処理の例（4）：laplace

- Laplace方程式の陽的解法
  - 上下左右の4点の平均で、updateしていくプログラム
  - Oldとnewを用意して直前の値をコピー
  - 典型的な領域分割
  - 最後に残差をとる



行列分割と隣接通信

- 二次元領域をブロック分割
- 境界の要素は隣のプロセスが更新
- 境界データを隣接プロセスに転送



ブロック型1対1通信

- Send/Receive

```
MPI_Send(
  void          *send_data_buffer, // 送信データが格納されているメモリのアドレス
  int           count,             // 送信データの個数
  MPI_Datatype  data_type,         // 送信データの型(*1)
  int           destination,       // 送信先プロセスのランク
  int           tag,               // 送信データの識別を行うタグ
  MPI_Comm      communicator       // 送受信を行うグループ.
);
```

```
MPI_Recv(
  void          *recv_data_buffer, // 受信データが格納されるメモリのアドレス
  int           count,             // 受信データの個数
  MPI_Datatype  data_type,         // 受信データの型(*1)
  int           source,            // 送信元プロセスのランク
  int           tag,               // 受信データの識別を行うためのタグ.
  MPI_Comm      communicator,      // 送受信を行うグループ.
  MPI_Status    *status            // 受信に関する情報を格納する変数のアドレス
);
```

メッセージ通信

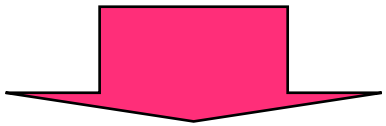
- メッセージはデータアドレスとサイズ
  - 型がある　MPI_INT，MPI_DOUBLE，…
  - Binaryの場合は、MPI_BYTEで、サイズにbyte数を指定
- Source/destinationは、プロセス番号（rank）とタグを指定
  - 送信元を指定しない場合はMPI_ANY_SOURCEを指定
  - 同じタグを持っているSendとRecvがマッチ
  - どのようなタグでもRecvしたい場合はMPI_ANY_TAGを指定
- Statusで，実際に受信したメッセージサイズ，タグ，送信元などが分かる

非ブロック型通信

- Send/recvを実行して、後で終了をチェックする通信方法
  - 通信処理が裏で行える場合は計算と通信処理のオーバラップが可能

```
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 )
```



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

プロセストポロジ

- int **MPI_Cart_create**(MPI_Comm comm_old, int ndims, int *dims, int *periods, int reorder, MPI_Comm *comm_cart);
- ndims次元のハイパーキューブのトポロジをもつコミュニケータcomm_cartを作成
- dimsはそれぞれの次元のプロセス数
- periodsはそれぞれの次元が周期的かどうか
- reorderは新旧のコミュニケータでrankの順番を変更するかどうか

シフト通信の相手先

- int **MPI_Cart_shift**(MPI_Comm comm, int direction, int disp, int *rank_source, int *rank_dest);
- directionはシフトする次元
  - ndims次元であれば0～ndims-1
- dispだけシフトしたとき，受け取り先がrank_source，送信先がrank_destに返る
- 周期的ではない場合，境界を超えるとMPI_PROC_NULLが返される

```
/* calculate process ranks for 'down' and 'up' */
MPI_Cart_shift(comm, 0, 1, &down, &up);

/* recv from down */
MPI_Irecv(&uu[x_start-1][1], YSIZE, MPI_DOUBLE, down, TAG_1,
          comm, &req1);
/* recv from up */
MPI_Irecv(&uu[x_end][1], YSIZE, MPI_DOUBLE, up, TAG_2,
          comm, &req2);

/* send to down */
MPI_Send(&u[x_start][1], YSIZE, MPI_DOUBLE, down, TAG_2, comm);
/* send to up */
MPI_Send(&u[x_end-1][1], YSIZE, MPI_DOUBLE, up, TAG_1, comm);

MPI_Wait(&req1, &status1);
MPI_Wait(&req2, &status2);
```

端（0とnumprocs-1)のプロセッサについてはMPI_PROC_NULLが指定され
特別な処理は必要ない

```
/*
 * Laplace equation with explicit method
 */
#include <stdio.h>
#include <stdlib.h>
#include <math.h>
#include <mpi.h>

/* square region */
#define XSIZE 256
#define YSIZE 256
#define PI 3.1415927
#define NITER 10000
double u[XSIZE + 2][YSIZE + 2], uu[XSIZE + 2][YSIZE + 2];
double time1, time2;
void lap_solve(MPI_Comm);
int myid, numprocs;
int namelen;
char processor_name[MPI_MAX_PROCESSOR_NAME];
int xsize;
```

二次元対象領域
uuは更新用配列

```
void
initialize()
{
        int x, y;

        /* 初期値を設定 */
        for (x = 1; x < XSIZE + 1; x++)
                for (y = 1; y < YSIZE + 1; y++)
                        u[x][y] = sin((x - 1.0) / XSIZE * PI) +
                                cos((y - 1.0) / YSIZE * PI);
        /* 境界をゼロクリア */
        for (x = 0; x < XSIZE + 2; x++) {
                u [x][0] = u [x][YSIZE + 1] = 0.0;
                uu[x][0] = uu[x][YSIZE + 1] = 0.0;
        }
        for (y = 0; y < YSIZE + 2; y++) {
                u [0][y] = u [XSIZE + 1][y] = 0.0;
                uu[0][y] = uu[XSIZE + 1][y] = 0.0;
        }
}
```

```
#define TAG_1 100
#define TAG_2 101

#ifndef FALSE
#define FALSE 0
#endif

void lap_solve(MPI_Comm comm)
{
        int x, y, k;
        double sum;
        double t_sum;
        int x_start, x_end;
        MPI_Request req1, req2;
        MPI_Status status1, status2;
        MPI_Comm comm1d;
        int down, up;
        int periods[1] = { FALSE };
```

```
/*
 * Create one dimensional cartesian topology with
 * nonperiodical boundary
 */
MPI_Cart_create(comm, 1, &numprocs, periods, FALSE, &comm1d);
/* calculate process ranks for 'down' and 'up' */
MPI_Cart_shift(comm1d, 0, 1, &down, &up);

x_start = 1 + xsize * myid;
x_end = 1 + xsize * (myid + 1);
```

- Comm1dを1次元トポロジで作成
  - 境界は周期的ではない
- 上下のプロセス番号をup, downに取得
  - 境界ではMPI_PROC_NULLとなる

```
for (k = 0; k < NITER; k++){
        /* old <- new */
        for (x = x_start; x < x_end; x++)
                for (y = 1; y < YSIZE + 1; y++)
                        uu[x][y] = u[x][y];

        /* recv from down */
        MPI_Irecv(&uu[x_start - 1][1], YSIZE, MPI_DOUBLE,
                down, TAG_1, comm1d, &req1);
        /* recv from up */
        MPI_Irecv(&uu[x_end][1], YSIZE, MPI_DOUBLE,
                up, TAG_2, comm1d, &req2);
        /* send to down */
        MPI_Send(&u[x_start][1], YSIZE, MPI_DOUBLE,
                down, TAG_2, comm1d);
        /* send to up */
        MPI_Send(&u[x_end - 1][1], YSIZE, MPI_DOUBLE,
                up, TAG_1, comm1d);

        MPI_Wait(&req1, &status1);
        MPI_Wait(&req2, &status2);
```

```
            /* update */
            for (x = x_start; x < x_end; x++)
                  for (y = 1; y < YSIZE + 1; y++)
                        u[x][y] = .25 * (uu[x - 1][y] + uu[x + 1][y] +
                                         uu[x][y - 1] + uu[x][y + 1]);
      }
      /* check sum */
      sum = 0.0;
      for (x = x_start; x < x_end; x++)
            for (y = 1; y < YSIZE + 1; y++)
                  sum += uu[x][y] - u[x][y];
      MPI_Reduce(&sum, &t_sum, 1, MPI_DOUBLE, MPI_SUM, 0, comm1d);
      if (myid == 0)
            printf("sum = %g\n", t_sum);
      MPI_Comm_free(&comm1d);
}
```

```
int
main(int argc, char *argv[])
{
        MPI_Init(&argc, &argv);
        MPI_Comm_size(MPI_COMM_WORLD, &numprocs);
        MPI_Comm_rank(MPI_COMM_WORLD, &myid);
        MPI_Get_processor_name(processor_name, &namelen);
        fprintf(stderr, "Process %d on %s\n", myid, processor_name);

        xsize = XSIZE / numprocs;
        if ((XSIZE % numprocs) != 0)
                MPI_Abort(MPI_COMM_WORLD, 1);
        initialize();
        MPI_Barrier(MPI_COMM_WORLD);
        time1 = MPI_Wtime();
        lap_solve(MPI_COMM_WORLD);
        MPI_Barrier(MPI_COMM_WORLD);
        time2 = MPI_Wtime();
        if (myid == 0)
                printf("time = %g\n", time2 - time1);
        MPI_Finalize();
        return (0);
}
```

改善すべき点

- 配列の一部しか使っていないので、使うところだけにする
  - 配列のindexの計算が面倒になる
  - 大規模計算では本質的な点

- １次元分割だけだが、２次元分割したほうが効率がよい
  - 通信量が減る
  - 多くのプロセッサが使える

Open Source MPI

- OpenMPI
  - http://www.open-mpi.org/
- MPICH2
  - http://www-unix.mcs.anl.gov/mpi/mpich2/
- YAMPII
  - http://www.il.is.s.u-tokyo.ac.jp/yampii/

コンパイル・実行の仕方

- コンパイル

  % mpicc … test.c …

  – MPI用のコンパイルコマンドがある
  – 手動で-lmpiをリンクすることもできる

- 実行

  % mpiexec –n #procs a.out …

  – a.outが#procsプロセスで実行される
  – 以前の処理系ではmpirunが利用され，de factoとなっているが，ポータブルではない

  % mpirun –np #procs a.out …

  – 実行されるプロセス群はマシン構成ファイルなどで指定する
  – あらかじめデーモンプロセスを立ち上げる必要があるものも

「MPI」レポート課題

- Laplaceのプログラムに関して，改善すべき点（必要最小限のメモリ領域の確保，2次元分割）を改善しなさい。レポートにはプログラム，プログラムの説明，実行結果，実行結果の説明を含めること。