Технология программирования MPI (3)

Антонов Александр Сергеевич,
к.ф.-м.н., вед.н.с. лаборатории Параллельных информационных технологий НИВЦ МГУ

Летняя суперкомпьютерная академия
Москва, 2016

MPI

Группы и коммуникаторы

MPI

Необходимость групп и коммуникаторов:

- дать возможность некоторой группе процессов работать над своей независимой подзадачей;
- если только часть процессов должна обмениваться данными, бывает удобно завести для их взаимодействия отдельный коммуникатор;
- при создании библиотек подпрограмм нужно гарантировать, что пересылки данных в библиотечных модулях не пересекутся с пересылками в основной программе.

MPI

Группа – упорядоченное множество процессов. Каждому процессу в группе сопоставлено целое число – номер (ранг).

`MPI_GROUP_EMPTY` – пустая группа.

`MPI_GROUP_NULL` – значение, используемое для ошибочной группы.

Новую группу можно создать только из уже существующих групп или коммуникаторов.

MPI

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

Получение группы **group**, соответствующей коммуникатору **comm**.

Поскольку изначально существует единственный нетривиальный коммуникатор **MPI_COMM_WORLD**, обычно в начале программы нужно получить соответствующую ему группу процессов.

MPI

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

Создание группы **newgroup** из пересечения групп **group1** и **group2**. Полученная группа содержит все процессы группы **group1**, входящие также в группу **group2** и упорядоченные так же, как в первой группе.

MPI

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

Создание группы **newgroup** из объединения групп **group1** и **group2**. Полученная группа содержит все процессы группы **group1** в прежнем порядке, за которыми следуют процессы группы **group2**, не вошедшие в группу **group1**, также в прежнем порядке.

MPI

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

Создание группы **newgroup** из разности групп **group1** и **group2**. Полученная группа содержит все элементы группы **group1**, не входящие в группу **group2** и упорядоченные, как в первой группе.

MPI

Пусть в группу **gr1** входят процессы **0**, **1**, **2**, **4**, **5**, а в группу **gr2** – процессы **0**, **2**, **3**.

```
MPI_Group_intersection(gr1, gr2, &newgr1);
MPI_Group_union(gr1, gr2, &newgr2);
MPI_Group_difference(gr1, gr2, &newgr3);
```

После этих вызовов:

newgr1: **0**, **2**;

newgr2: **0**, **1**, **2**, **4**, **5**, **3**;

newgr3: **1**, **4**, **5**.

MPI

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

Создание группы **newgroup** из **n** процессов группы **group** с рангами **ranks[0]**,…,**ranks[n-1]**, причём рангу **ranks[i]** в старой группе соответствует ранг **i** в новой группе. При **n=0** создается пустая группа **MPI_GROUP_EMPTY**.

MPI

```
int MPI_Group_excl(MPI_Group
group, int n, int *ranks,
MPI_Group *newgroup)
```

Создание группы **newgroup** из процессов группы **group**, исключая процессы с рангами **ranks[0]**,…,**ranks[n-1]**, причём порядок процессов в новой группе соответствует порядку процессов в старой группе. При **n=0** создаётся группа, идентичная старой группе.

MPI

```
MPI_Comm_group(MPI_COMM_WORLD, &group);
size1 = size/2;
for(i=0; i<size1; i++) ranks[i] = i;
MPI_Group_incl(group, size1, ranks, &group1);
MPI_Group_excl(group, size1, ranks, &group2);
```

MPI

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

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

Определение количества процессов и номера процесса в группе. Если процесс не входит в группу, то возвращается значение **MPI_UNDEFINED**.

MPI

```
int MPI_Group_translate_ranks
(MPI_Group group1, int n, int
*ranks1, MPI_Group group2, int
*ranks2)
```

В массиве **ranks2** возвращаются ранги в группе **group2** процессов с рангами **ranks1** в группе **group1**. Если процесс из группы **group1** не входит в группу **group2**, то для него возвращается значение **MPI_UNDEFINED**.

MPI

```
int MPI_Group_compare(MPI_Group group1, MPI_Group group2, int *result)
```

Сравнение групп **group1** и **group2**. Если совпадают, то возвращается значение **MPI_IDENT**. Если отличаются только рангами процессов, то возвращается значение **MPI_SIMILAR**. Иначе возвращается значение **MPI_UNEQAL**.

MPI

```
int MPI_Group_free(MPI_Group
*group)
```

Уничтожение группы **group**. Переменная **group** принимает значение **MPI_GROUP_NULL**.

MPI

Коммуникатор – контекст обмена группы. В операциях обмена используются только коммуникаторы!

`MPI_COMM_WORLD` – коммуникатор для всех процессов приложения.

`MPI_COMM_NULL` – значение, используемое для ошибочного коммуникатора.

`MPI_COMM_SELF` – коммуникатор, включающий только вызвавший процесс.

MPI

Коммуникатор даёт возможность независимых обменов. Каждой группе процессов может соответствовать несколько коммуникаторов, но каждый коммуникатор соответствует только одной группе.

Создание коммуникатора является коллективной операцией и требует операции межпроцессного обмена, поэтому такие процедуры могут оказаться весьма затратными по времени.

MPI

```
int MPI_Comm_dup(MPI_Comm comm,
MPI_Comm *newcomm)
```

Создание нового коммуникатора **newcomm** с той же группой процессов и атрибутами, что и у коммуникатора **comm**.

MPI

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

Создание нового коммуникатора **newcomm** из коммуникатора **comm** с группой процессов **group**. Вызов должен стоять во всех процессах коммуникатора **comm**. На процессах, не принадлежащих **group**, вернётся значение **MPI_COMM_NULL**.

MPI

```
#include <stdio.h>
#include "mpi.h"
int main(int argc, char **argv)
{
    int rank, size, i, rbuf;
    MPI_Group group, new_group;
    MPI_Comm new_comm;
    int ranks[128], new_rank;
    MPI_Init(&argc, &argv);
    MPI_Comm_size(MPI_COMM_WORLD, &size);
    MPI_Comm_rank(MPI_COMM_WORLD, &rank);
    MPI_Comm_group(MPI_COMM_WORLD, &group);
```

MPI

```
    for(i=0; i<size/2; i++) ranks[i] = i;
    if(rank < size/2) MPI_Group_incl(group,
size/2, ranks, &new_group);
    else MPI_Group_excl(group, size/2, ranks,
&new_group);
    MPI_Comm_create(MPI_COMM_WORLD, new_group,
&new_comm);
    MPI_Allreduce(&rank, &rbuf, 1, MPI_INT,
MPI_SUM, new_comm);
    MPI_Group_rank(new_group, &new_rank);
    printf("rank=%d newrank=%d rbuf=%d\n", rank,
new_rank, rbuf);
    MPI_Finalize();
}
```

MPI

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

Разбиение коммуникатора **comm** на несколько по числу значений параметра **color**. В одну подгруппу попадают процессы с одним значением **color**. Процессы с бóльшим значением **key** получат больший ранг.

MPI

Процессы, которые не должны войти в новые группы, указывают в качестве **color** константу **MPI_UNDEFINED**. Им в параметре **newcomm** вернется значение **MPI_COMM_NULL**.

```
MPI_Comm_split(MPI_COMM_WORLD, rank%3, rank,
new_comm)
```

MPI

```
int MPI_Comm_compare(MPI_Comm comm1, MPI_Comm comm2, int *result)
```

Сравнение **comm1** и **comm2**. Если совпадают, то в **result** возвращается **MPI_IDENT**. Если соответствуют одинаковым группам, а отличаются контекстом, то **MPI_CONGRUENT**. Если соответствуют группам с одними процессами, но разной нумерацией, то возвращается **MPI_SIMILAR**. Иначе - **MPI_UNEQUAL**.

MPI

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

Удаление коммуникатора **comm**. Переменной **comm** присваивается значение **MPI_COMM_NULL**.

MPI

```
#include <stdio.h>
#include "mpi.h"
int main(int argc, char **argv)
{
    int rank, size, rank1;
    MPI_Comm comm_revs;
    MPI_Init(&argc, &argv);
    MPI_Comm_size(MPI_COMM_WORLD, &size);
    MPI_Comm_rank(MPI_COMM_WORLD, &rank);
    MPI_Comm_split(MPI_COMM_WORLD, 1, size-rank,
&comm_revs);
    MPI_Comm_rank(comm_revs, &rank1);
    printf("rank = %d rank1 = %d\n", rank, rank1);
    MPI_Comm_free(&comm_revs);
    MPI_Finalize();
}
```

MPI

Виртуальные топологии

MPI

Топология – механизм сопоставления процессам альтернативной схемы адресации. В MPI топологии виртуальны, не связаны с физической топологией сети.

Два типа топологий:

- *декартова* (прямоугольная решётка произвольной размерности)
- *топология графа*.

MPI

```
int MPI_Cart_create(MPI_Comm comm, int ndims, int *dims, int *periods, int reorder, MPI_Comm *comm_cart)
```

Создание коммуникатора **comm_cart** с декартовой топологией. **ndims** – размерность декартовой решётки, **dims** – число элементов в каждом измерении.

MPI

`periods` – массив из **`ndims`** элементов, определяющий, является ли решётка периодической вдоль каждого измерения.

`reorder` – при значении **`1`** системе разрешено менять порядок нумерации процессов.

Процедура должна быть вызвана всеми процессами коммуникатора.

Некоторым процессам может вернуться значение **`MPI_COMM_NULL`**.

MPI

```
dims[0] = 4;
dims[1] = 3;
dims[2] = 2;
periods[0] = periods[1] = periods[2] = 1;
MPI_Cart_create(MPI_COMM_WORLD, 3, dims,
periods, 1, comm_cart);
```

MPI

```
int MPI_Dims_create(int nnodes,
int ndims, int *dims)
```

Определение размеров **dims** для каждой из **ndims** размерностей при создании декартовой топологии для **nnodes** процессов. **dims[i]** рассчитывается, если перед вызовом функции оно равно **0**, иначе оставляется без изменений.

MPI

Размеры по разным размерностям устанавливаются так, чтобы быть возможно близкими друг к другу. Перед вызовом функции значение **`nnodes`** должно быть кратно произведению ненулевых значений массива **`dims`**. Выходные значения массива **`dims`**, переопределённые процедурой, будут упорядочены в порядке убывания.

MPI

dims перед вызовом	вызов процедуры	dims после вызова
(0, 0, 0)	MPI_Dims_create(6, 3, dims)	(3, 2, 1)
(0, 0, 0)	MPI_Dims_create(7, 3, dims)	(7, 1, 1)
(0, 3, 0)	MPI_Dims_create(6, 3, dims)	(2, 3, 1)
(0, 3, 0)	MPI_Dims_create(7, 3, dims)	ошибка

MPI

```
int MPI_Cart_coords(MPI_Comm comm, int rank, int maxdims, int *coords)
```

Определение декартовых координат процесса по его рангу. Координаты возвращаются в массиве **`coords`**. Отсчёт координат по каждому измерению начинается с **`0`**.

MPI

```
int MPI_Cart_rank(MPI_Comm comm,
int *coords, int *rank)
```

Определение ранга процесса по его декартовым координатам. Для периодических решёток координаты вне допустимых интервалов пересчитываются, для непериодических – ошибочны.

MPI

```
int MPI_Cart_sub(MPI_Comm comm,
int *dims, MPI_Comm *newcomm)
```

Расщепление коммуникатора **comm** на подгруппы, соответствующие декартовым подрешёткам меньшей размерности. **i**–ый элемент массива **dims** равен **1**, если **i**–ое измерение должно остаться в подрёшетке.

MPI

```
dims[0] = 1;
dims[1] = 0;
dims[2] = 1;
MPI_Cart_sub(comm, dims, &newcomm);
```

MPI

```
int MPI_Cartdim_get(MPI_Comm comm, int *ndims)
```

Определение размерности декартовой топологии коммуникатора **`comm`**.

MPI

```
int MPI_Cart_get(MPI_Comm comm,
int maxdims, int *dims, int
*periods, int *coords)
```

Получение информации о декартовой топологии коммуникатора **comm** и координатах в ней вызвавшего процесса.

MPI

```
int MPI_Cart_shift(MPI_Comm
comm, int direction, int disp,
int *source, int *dest)
```

Получение номеров посылающего (**source**) и принимающего (**dest**) процессов в декартовой топологии коммуникатора **comm** для осуществления сдвига вдоль измерения **direction** на величину **disp**.

MPI

Для периодических измерений осуществляется циклический сдвиг, для непериодических – линейный сдвиг.

Для **n**-мерной декартовой решётки значение **direction** должно быть в пределах от **0** до **n-1**.

Значения **source** и **dest** можно далее использовать, например, для обмена функцией **MPI_Sendrecv**.

MPI

```
periods[0]=1;
periods[1]=1;
MPI_Cart_create(MPI_COMM_WORLD, 2, dims,
periods, 1, &comm);
MPI_Comm_rank(comm, &rank);
MPI_Cart_coords(comm, rank, 2, coords);
shift = 2;
MPI_Cart_shift(comm, 0, shift, &source,
&dest);
MPI_Sendrecv_replace(a, 1, MPI_FLOAT, dest, 0,
source, 0, comm, &status);
```

MPI

```
int MPI_Graph_create(MPI_Comm
comm, int nnodes, int *index,
int *edges, int reorder,
MPI_Comm *comm_graph)
```

Создание топологии графа **comm_graph**.
nnodes – число вершин графа,
index[i-1] содержит суммарное количество соседей для первых **i** вершин.

MPI

`edges` содержит упорядоченный список номеров процессов-соседей.

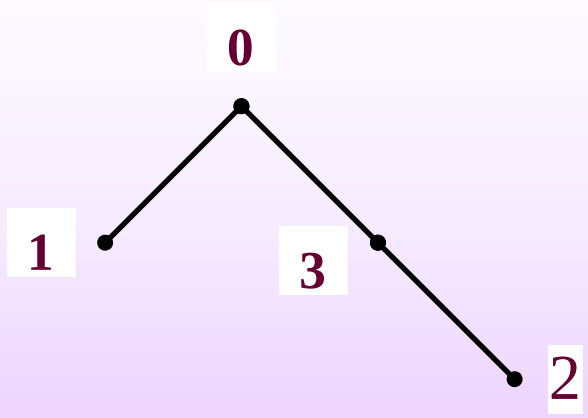
`reorder` – при значении **`1`** системе разрешено менять порядок нумерации процессов.

Процедура должна быть вызвана всеми процессами коммуникатора.

Некоторым процессам может вернуться значение **`MPI_COMM_NULL`**.

MPI

Процесс	Соседи
0	1, 3
1	0
2	3
3	0, 2




```
nnodes=4
index=2, 3, 4, 6
edges=1, 3, 0, 3, 0, 2
```

```
MPI_Graph_create(MPI_COMM_WORLD, nnodes, index,
edges, 1, &comm_graph);
```

MPI

```
int MPI_Graph_neighbors_count
(MPI_Comm comm, int rank, int
*nneighbors)
```

Определение количества непосредственных соседей данной вершины графа.

MPI

```
int MPI_Graph_neighbors(MPI_Comm comm, int rank, int max, int *neighbors)
```

Определение непосредственных соседей данной вершины графа.

MPI

```
int MPI_Graphdims_get(MPI_Comm comm, int *nnodes, int *nedges)
```

Определение числа вершин и числа дуг графа.

MPI

```
int MPI_Graph_get(MPI_Comm comm,
int maxindex, int maxedges, int
*index, int *edges)
```

Определение информации о топологии графа в том виде, как она задается при создании топологии.

MPI

```
int MPI_Graph_map(MPI_Comm comm,
int nnodes, int *index, int
*edges, int *newrank)
```

Процедура вычисляет «оптимальное» относительно данной графовой топологии расположение процессов на процессорах (если поддерживается реализацией). В параметре **`newrank`** возвращается новый ранг процесса. Если вызывающий процесс не включен в графовую топологию, то возвращается значение **`MPI_UNDEFINED`**.

MPI

```
#include <stdio.h>
#include "mpi.h"
#define MAXPROC 128
#define MAXEDGES 512
int main(int argc, char **argv)
{
   int rank, rank1, i, size;
   int a, b;
   MPI_Status status;
   MPI_Comm comm_graph;
   int index[MAXPROC], edges[MAXEDGES];
   int num, neighbors[MAXPROC];
   MPI_Init(&argc, &argv);
   MPI_Comm_size(MPI_COMM_WORLD, &size);
   MPI_Comm_rank(MPI_COMM_WORLD, &rank);
   for(i = 0; i<size; i++) index[i] = size+i-1;
```

MPI

```
    for(i = 0; i<size-1; i++){
        edges[i] = i+1;
        edges[size+i-1] = 0;
    }
    MPI_Graph_create(MPI_COMM_WORLD, size, index, edges, 1,
     &comm_graph);
    MPI_Graph_neighbors_count(comm_graph, rank, &num);
    MPI_Graph_neighbors(comm_graph, rank, num, neighbors);
    for(i = 0; i<num; i++){
        MPI_Sendrecv(&rank, 1, MPI_INT, neighbors[i], 1,
     &rank1, 1, MPI_INT, neighbors[i], 1, comm_graph,
     &status);
        printf("process %d communicate with process %d\n",
     rank, rank1);
    }
    MPI_Finalize();
}
```

MPI

```
int
MPI_Dist_graph_create_adjacent(M
PI_Comm comm, int indegree, int
sources[], int sourceweights[],
int outdegree, int
destinations[], int
destweights[], MPI_Info info,
int reorder, MPI_Comm
*comm_dist_graph)
```

Создание коммуникатора **comm_dist_graph** с топологией распределённого графа.

MPI

Вызывающий процесс не указывает структуру всего графа, а только своих непосредственных соседей (те процессы, с которыми он будет обмениваться данными). Параметр **`indegree`** задаёт число процессов, от которых вызывающий процесс будет получать данные, в массиве **`sources`** задаются номера таких процессов. Параметр **`outdegree`** задаёт число процессов, которым вызывающий процесс будет посылать данные, в массиве **`destinations`** задаются номера таких процессов.

MPI

В массивах **`sourceweights`** и **`destweights`** задаются «веса» (неотрицательные целые числа) соответствующих дуг графа, которые могут использоваться для лучшей маршрутизации сообщений (использование зависит от реализации). Если один и тот же процесс входит в оба списка, то соответствующие веса должны совпадать. Вместо массива весов можно указать предопределённое значение **`MPI_UNWEIGHTED`**, означающее, что все дуги будут иметь одинаковые веса.

MPI

Параметр **`info`** может использоваться для указания способа интерпретации заданных весов. Значения зависят от реализации, например: минимизировать количество дуг или минимизировать сумму весов. Если не требуется, можно использовать значение **`MPI_INFO_NULL`**. Параметр **`reorder`** при значении **`1`** означает, что разрешено менять порядок нумерации процессов для оптимизации их распределения по процессорам; система может использовать значения заданных весов дуг.

MPI

```
int
MPI_Dist_graph_create(MPI_Comm
comm, int n, int sources[], int
degrees[], int destinations[],
int weights[], MPI_Info info,
int reorder, MPI_Comm
*comm_dist_graph)
```

Создание коммуникатора **comm_dist_graph** с топологией распределённого графа. Вызывающий процесс задаёт произвольную часть графа.

MPI

n задаёт число описываемых данным процессом начальных вершин дуг, сам список начальных вершин – в массиве **sources**. Для каждой начальной вершины в массиве **degrees** указывается количество задаваемых дуг. В массиве **destinations** в соответствующем порядке задаются конечные вершины дуг. Сначала все конечные вершины для первой начальной вершины, потом – для второй и т.д. В массиве **weights** - веса для всех дуг.

MPI

```
int
MPI_Dist_graph_neighbors_count(M
PI_Comm comm, int *indegree, int
*outdegree, int *weighted)
```

Определяется количество **indegree** входящих и **outdegree** исходящих дуг в топологии распределённого графа. В параметре **weighted** возвращается значение **0**, если при создании топологии было задано значение **MPI_UNWEIGHTED**, иначе – значение **1**.

MPI

```
int
MPI_Dist_graph_neighbors(MPI_Com
m comm, int maxindegree, int
sources[], int sourceweights[],
int maxoutdegree, int
destinations[], int
destweights[])
```

В параметре **sources** определяются начальные вершины дуг, входящих в данную, в **destinations** – конечные вершины дуг, исходящих из данной.

MPI

В массивах **`sourceweights`** и **`destweights`** определяются соответствующие веса дуг, если они были заданы при создании топологии. Параметры **`maxindegree`** и **`maxoutdegree`** задают размеры определяемых массивов.

MPI

```
int MPI_Topo_test(MPI_Comm comm,
   int *type)
```

Определение типа топологии, связанной с коммуникатором **comm**.

- **MPI_GRAPH** для графа;
- **MPI_DISTGRAPH** для распределённого графа;
- **MPI_CART** для декартовой топологии;
- **MPI_UNDEFINED** – нет связанной топологии.

MPI

Задание 5: Реализуйте разбиение процессов приложения на две группы, в одной из которых осуществляется обмен по кольцевой топологии при помощи сдвига в одномерной декартовой топологии, а в другой – коммуникации по схеме «мастер – рабочие», реализованной при помощи топологии графа.

MPI

Литература

1. MPI: A Message-Passing Interface Standard Version 1.1. URL: http://www.mpi-forum.org/docs/mpi-11-html/mpi-report.html
2. MPI: A Message-Passing Interface Standard Version 2.2. URL: http://www.mpi-forum.org/docs/mpi-2.2/mpi22-report.pdf
3. MPI – the complete reference, second edition / Ed. by M. Snir, S. Otto, S. Huss-Lederman, D. Walker, J. Dongarra. – The MIT Press, 1998.
4. Антонов А.С. Технологии параллельного программирования MPI и OpenMP: Учеб. пособие. Предисл.: В.А.Садовничий. - М.: Издательство Московского университета, 2012.-344 с.- (Серия "Суперкомпьютерное образование").
5. Антонов А.С. Введение в параллельные вычисления (методическое пособие). – М.: Изд-во Физического факультета МГУ, 2002.
6. Антонов А.С. Параллельное программирование с использованием технологии MPI: Учебное пособие. – М.: Изд-во МГУ, 2004.

MPI

Литература

7. Букатов А.А., Дацюк В.Н., Жегуло А.И. Программирование многопроцессорных вычислительных систем. – Ростов-на-Дону: Издательство ООО «ЦВВР», 2003.
8. Воеводин В.В., Воеводин Вл.В. Параллельные вычисления. – СПб: БХВ-Петербург, 2002.
9. Корнеев В.Д. Параллельное программирование в MPI. – Новосибирск: Изд-во СО РАН, 2000.
10. Немнюгин С.А., Стесик О.Л. Параллельное программирование для многопроцессорных вычислительных систем. – СПб: БХВ-Петербург, 2002.
11. Шпаковский Г.И., Серикова Н.В. Программирование для многопроцессорных систем в стандарте MPI: Пособие. – Минск: БГУ, 2002.