「情報システム学特別講義３」
MPIの基礎

東京大学情報基盤センター准教授　片桐孝洋

２０１４年５月１３日（火）１４：４０－１６：１０

東京大学情報基盤センター
Information Technology Center,The University of Tokyo

講義日程
（情報システム学特別講義３）

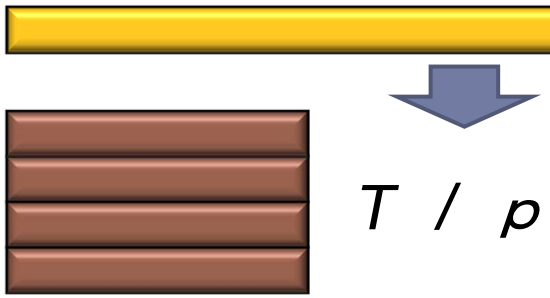
レポートおよびコンテスト課題
（締切：
2014年8月11日（月）24時　厳守

1. ~~4月８日：ガイダンス~~
2. ~~4月15日~~
   - ~~プログラム高速化の基礎（その1）~~
3. ~~4月22日~~
   - ~~プログラム高速化の基礎（その2）~~
4. 5月13日
   - MPIの基礎
5. 5月20日
   - OpenMPの基礎
6. 5月27日
   - Hybrid並列化技法
     （MPIとOpenMPの応用編）
7. 6月3日
   - プログラム高速化の応用
8. 6月10日
   - 行列ーベクトル積の並列化
9. 6月17日
   - べき乗法の並列化
10. 6月24日
    - 行列−行列積の並列化
11. 7月8日
    - LU分解の並列化
12. 7月15日
    - 非同期通信
    - 疎行列反復解法の並列化
13. 7月22日
    - ソフトウェア自動チューニング
14. 8月5日（補講日）
    - エクサフロップスコンピューティング
      に向けて

並列プログラミングの基礎

並列プログラミングとは何か？

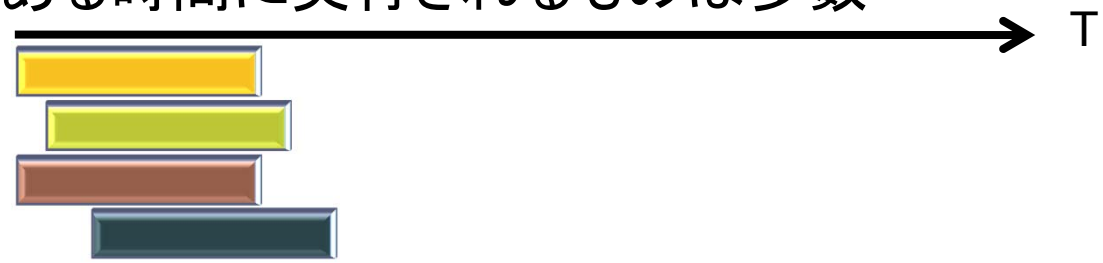
- 逐次実行のプログラム（実行時間 T）を、p台の計算機を使って、T / p にすること.



- 素人考えでは自明。
- 実際は、できるかどうかは、対象処理の内容（アルゴリズム）で　大きく　難しさが違う
  - アルゴリズム上、絶対に並列化できない部分の存在
  - 通信のためのオーバヘッドの存在
    - 通信立ち上がり時間
    - データ転送時間

並列と並行

- 並列（Parallel）
  - 物理的に並列（時間的に独立）
  - ある時間に実行されるものは多数



- 並行（Concurrent）
  - 論理的に並列（時間的に依存）
  - ある時間に実行されるものは1つ（＝1プロセッサで実行）

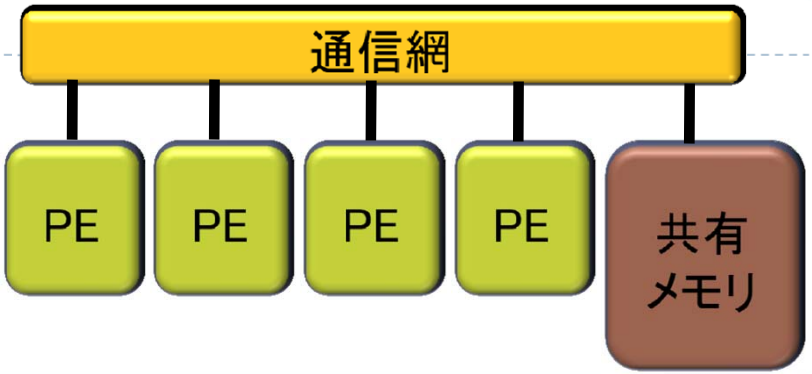
  - 時分割多重、疑似並列
  - OSによるプロセス実行スケジューリング（ラウンドロビン方式）

並列計算機の分類

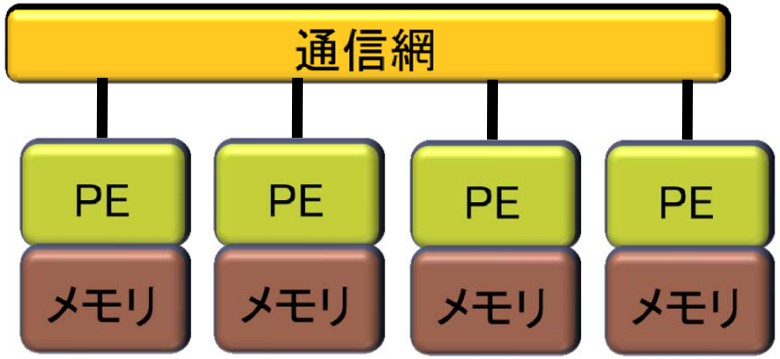
- Michael J. Flynn教授（スタンフォード大）の分類（1966）
- 単一命令・単一データ流
  （SISD, Single Instruction Single Data Stream）
- 単一命令・複数データ流
  （SIMD, Single Instruction Multiple Data Stream）
- 複数命令・単一データ流
  （MISD, Multiple Instruction Single Data Stream）
- 複数命令・複数データ流
  （MIMD, Multiple Instruction Multiple Data Stream）

並列計算機のメモリ型による分類

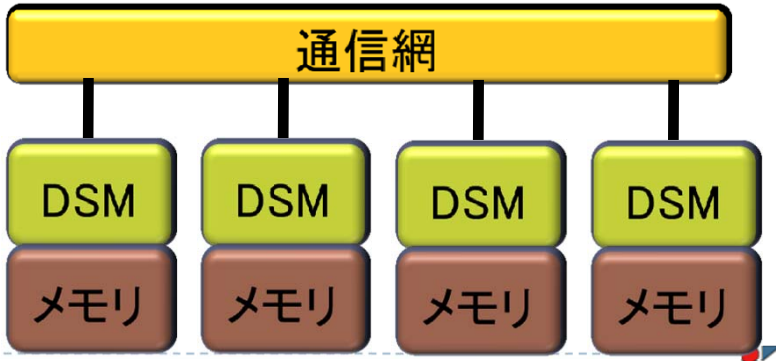
1. 共有メモリ型
（SMP、
Symmetric Multiprocessor）



2. 分散メモリ型
（メッセージパッシング）

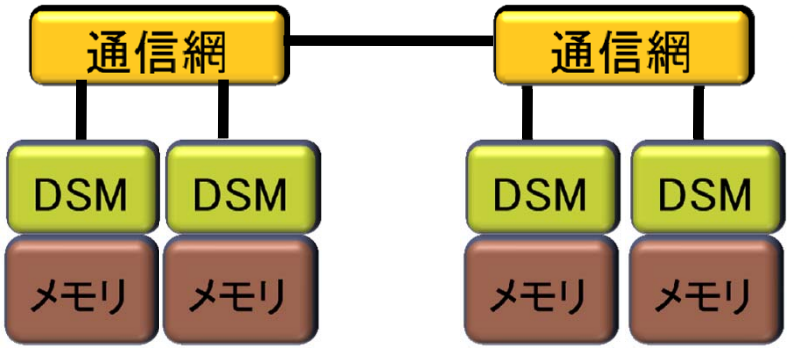


3. 分散共有メモリ型
（DSM、
Distributed Shared Memory）



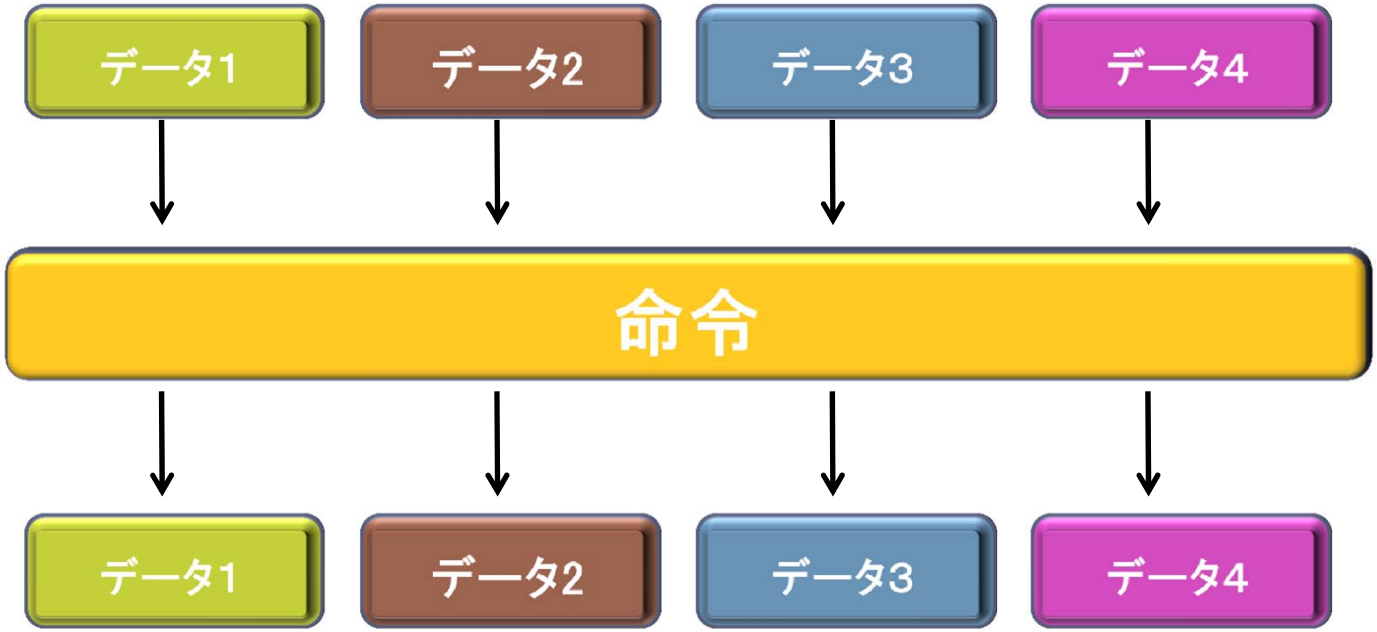
並列計算機のメモリ型による分類

4. 共有・非対称メモリ型
（ccNUMA、
Cache Coherent Non-
Uniform Memory Access）



並列プログラミングのモデル

- 実際の並列プログラムの挙動はMIMD
- アルゴリズムを考えるときは＜SIMDが基本＞
  - 複雑な挙動は理解できないので



並列プログラミングのモデル

- MIMD上での並列プログラミングのモデル
  1. SPMD（Single Program Multiple Data）
     - 1つの共通のプログラムが、並列処理開始時に、全プロセッサ上で起動する
     - MPI（バージョン1）のモデル

  2. Master / Worker（Master / Slave）
     - 1つのプロセス（Master）が、複数のプロセス（Worker）を管理（生成、消去）する。

並列プログラムの種類

- マルチプロセス
  - MPI（Message Passing Interface）
  - HPF（High Performance Fortran）
    - 自動並列化Fortranコンパイラ
    - ユーザがデータ分割方法を明示的に記述

プロセスとスレッドの違い
•メモリを意識するかどうかの違い
　•別メモリは「プロセス」
　•同一メモリは「スレッド」

- マルチスレッド
  - Pthread（POSIX スレッド）
  - Solaris Thread（Sun Solaris OS用）
  - NT thread（Windows NT系、Windows95以降）
    - スレッドの Fork（分離）と Join（融合）を明示的に記述
  - Java
    - 言語仕様としてスレッドを規定
  - OpenMP
    - ユーザが並列化指示行を記述

並列処理の実行形態（1）

- データ並列
  - データを分割することで並列化する。
  - データの操作（＝演算）は同一となる。
  - データ並列の例：行列ー行列積

SIMDの
考え方と同じ

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 4 & 5 & 6 \\ 7 & 8 & 9 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 9 & 8 & 7 \\ 6 & 5 & 4 \\ 3 & 2 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1*9+2*6+3*3 & 1*8+2*5+3*2 & 1*7+2*4+3*1 \\ 4*9+5*6+6*3 & 4*8+5*5+6*2 & 4*7+5*4+6*1 \\ 7*9+8*6+9*3 & 7*8+8*5+9*2 & 7*7+8*4+9*1 \end{pmatrix}$$

●並列化

全CPUで共有

CPU0 $\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \end{pmatrix}$

CPU1 $\begin{pmatrix} 4 & 5 & 6 \end{pmatrix}$

CPU2 $\begin{pmatrix} 7 & 8 & 9 \end{pmatrix}$

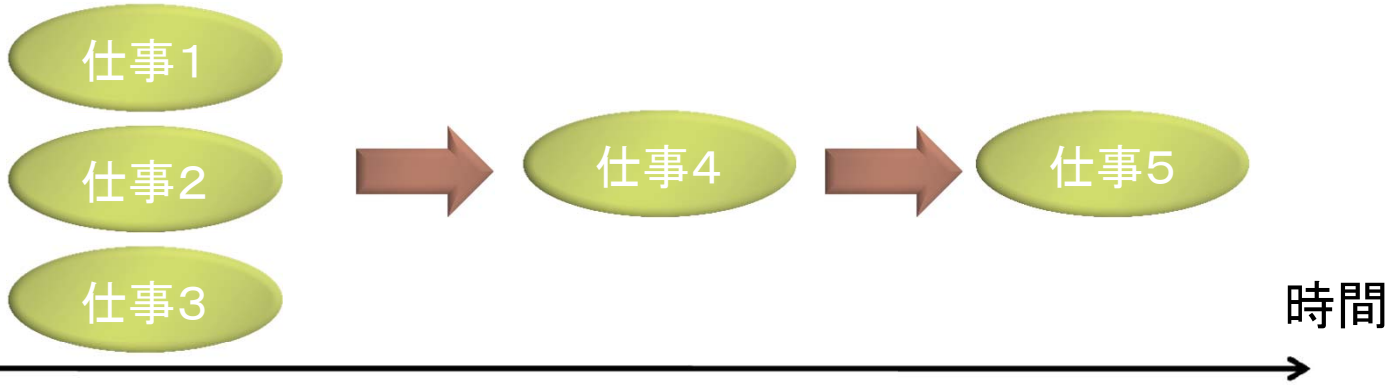
$$\begin{pmatrix} 9 & 8 & 7 \\ 6 & 5 & 4 \\ 3 & 2 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1*9+2*6+3*3 & 1*8+2*5+3*2 & 1*7+2*4+3*1 \\ 4*9+5*6+6*3 & 4*8+5*5+6*2 & 4*7+5*4+6*1 \\ 7*9+8*6+9*3 & 7*8+8*5+9*2 & 7*7+8*4+9*1 \end{pmatrix}$$

並列に計算：初期データは異なるが演算は同一

並列処理の実行形態（２）

- タスク並列
  - タスク（ジョブ）を分割することで並列化する。
  - データの操作（＝演算）は異なるかもしれない。
  - タスク並列の例：カレーを作る
    - 仕事１：野菜を切る
    - 仕事２：肉を切る
    - 仕事３：水を沸騰させる
    - 仕事４：野菜・肉を入れて煮込む
    - 仕事５：カレールゥを入れる

●並列化



MPIの特徴（１／２）

- メッセージパッシング用のライブラリ規格の１つ
  - メッセージパッシングのモデルである
  - コンパイラの規格、特定のソフトウエアやライブラリを指すものではない！
- 分散メモリ型並列計算機で並列実行に向く
- 大規模計算が可能
  - 1プロセッサにおけるメモリサイズやファイルサイズの制約を打破可能
  - プロセッサ台数の多い並列システム（MPPシステム、Massively Parallel Processingシステム）を用いる実行に向く
    - 1プロセッサ換算で膨大な実行時間の計算を、短時間で処理可能
  - 移植が容易
    - API（Application Programming Interface）の標準化
- スケーラビリティ、性能が高い
  - 通信処理をユーザが記述することによるアルゴリズムの最適化が可能
  - プログラミングが難しい（敷居が高い）

MPIの特徴（２／２）

- MPIは敷居が高いという人がいる
  - OpenMPなどに対して、記述量が増える
  - 「並列処理のマシン語」
  - 下記の観点から、上記は正しくないと思われる
    1. 高性能を実現するプログラムではOpenMPでも記述量が増す
       - OpenMPで記述量が少なく高性能が達成できるのは、簡素な処理のみ
    2. 移植性が高い
       - マシン語は特定のCPUしか動作しないが、MPIはCPUが違っても動作する。一度作成すると、数十年は利用できるソフトウェアとなる。
    3. 高速化率が高い
       - マシン語で高速化できるケースは高々10倍。MPIで高速化できる可能性はノード数に比例するので最大で数万倍にもなる。

MPIの経緯（1/2）

- MPIフォーラム（http://www.mpi-forum.org/）が仕様策定
  - 1994年5月1.0版（MPI-1）
  - 1995年6月1.1版
  - 1997年7月1.2版、および 2.0版（MPI-2）
- 米国アルゴンヌ国立研究所、およびミシシッピ州立大学で開発
- MPI-2 では、以下を強化：
  - 並列I/O
  - C++、Fortran 90用インターフェース
  - 動的プロセス生成/消滅
    - 主に、並列探索処理などの用途
  - 片方向通信、RMA (Remote Memory Access)

MPIの経緯（2/2） MPI3.0策定 (3.1/4.0も策定中)

- 以下のページで経緯・ドキュメントを公開中
  - http://meetings.mpi-forum.org/MPI_3.0_main_page.php
  - http://www.mpi-forum.org/docs/mpi-3.0/mpi30-report.pdf （MPI 3.0, Released September 21, 2012 ）
- 注目すべき機能
  - RMA (Remote Memory Access) サポート
  - FT (Fault Tolerant) stabilization、FT を意識したMPIプログラム作成のAPI群とセマンティクス
  - MPIT (Performance Tool)、デバッガやパフォーマンスモニタ、開発環境といったツール群とのインターフェース仕様

MPIの経緯（2/2） MPI3.0策定 (3.1/4.0も策定中)

- 注目すべき機能(つづき)
  - Neighborhood collectives(物理的に近いノードを対象にした専用コレクティブ通信), 粗通信モデルの為の集団通信API
  - Fortran bindings – improved Fortran bindings, taking into account
    Fortran 2003 and 2008 features.
  - Non-blocking collective I/O – extend non-blocking collective support to include MPI-I/O
  - Hybrid: Shared memory communicator, Threads, and Endpoint proposals

MPIの実装

- MPICH（エム・ピッチ）
  - 米国アルゴンヌ国立研究所が開発
- LAM（Local Area Multicomputer）
  - ノートルダム大学が開発
- その他
  - OpenMPI　（FT-MPI, LA-MPI, LAM/MPI, PACX-MPIの統合プロジェクト）
  - YAMPII（東大・石川研究室）（SCore通信機構をサポート）
- 注意点:メーカ独自機能拡張がなされていることがある

MPIによる通信

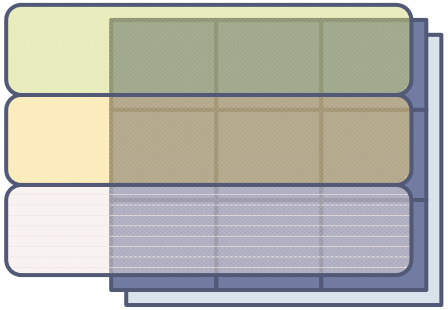
- 郵便物の郵送に同じ
- 郵送に必要な情報：
  1. 自分の住所、送り先の住所
  2. 中に入っているものはどこにあるか
  3. 中に入っているものの分類
  4. 中に入っているものの量
  5. （荷物を複数同時に送る場合の）認識方法（タグ）
- MPIでは：
  1. 自分の認識ID、および、送り先の認識ID
  2. データ格納先のアドレス
  3. データ型
  4. データ量
  5. タグ番号

MPI関数

- システム関数
  - MPI_Init；MPI_Comm_rank；MPI_Comm_size；MPI_Finalize；
- １対１通信関数
  - ブロッキング型
    - MPI_Send； MPI_Recv；
  - ノンブロッキング型
    - MPI_Isend； MPI_Irecv；
- １対全通信関数
  - MPI_Bcast
- 集団通信関数
  - MPI_Reduce； MPI_Allreduce； MPI_Barrier；
- 時間計測関数
  - MPI_Wtime

コミュニケータ

- MPI_COMM_WORLDは、コミュニケータとよばれる概念を保存する変数
- コミュニケータは、操作を行う対象のプロセッサ群を定める
- 初期状態では、0番～numprocs －1番までのプロセッサが、1つのコミュニケータに割り当てられる
  - この名前が、“MPI_COMM_WORLD”
- プロセッサ群を分割したい場合、MPI_Comm_split 関数を利用
  - メッセージを、一部のプロセッサ群に放送するときに利用
  - “マルチキャスト”で利用

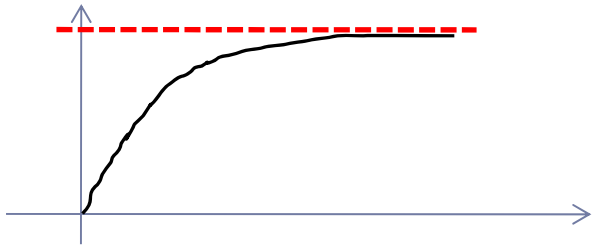


性能評価指標

並列化の尺度

性能評価指標－台数効果

- 台数効果
  - 式: $S_P = T_S / T_P \quad (0 \leq S_p)$
  - T_S :逐次の実行時間、 T_P :P台での実行時間
  - P台用いて $S_P = P$ のとき、理想的な(ideal)速度向上
  - P台用いて $S_P > P$ のとき、スーパリニア・スピードアップ
    - 主な原因は、並列化により、データアクセスが局所化されて、キャッシュヒット率が向上することによる高速化
- 並列化効率
  - 式: $E_P = S_P / P \times 100 \ (0 \leq E_p) \ [\%]$
- 飽和性能
  - 速度向上の限界
  - Saturation、「さちる」



アムダールの法則

- 逐次実行時間を K とする。
  そのうち、並列化ができる割合を α とする。
- このとき、台数効果は以下のようになる。

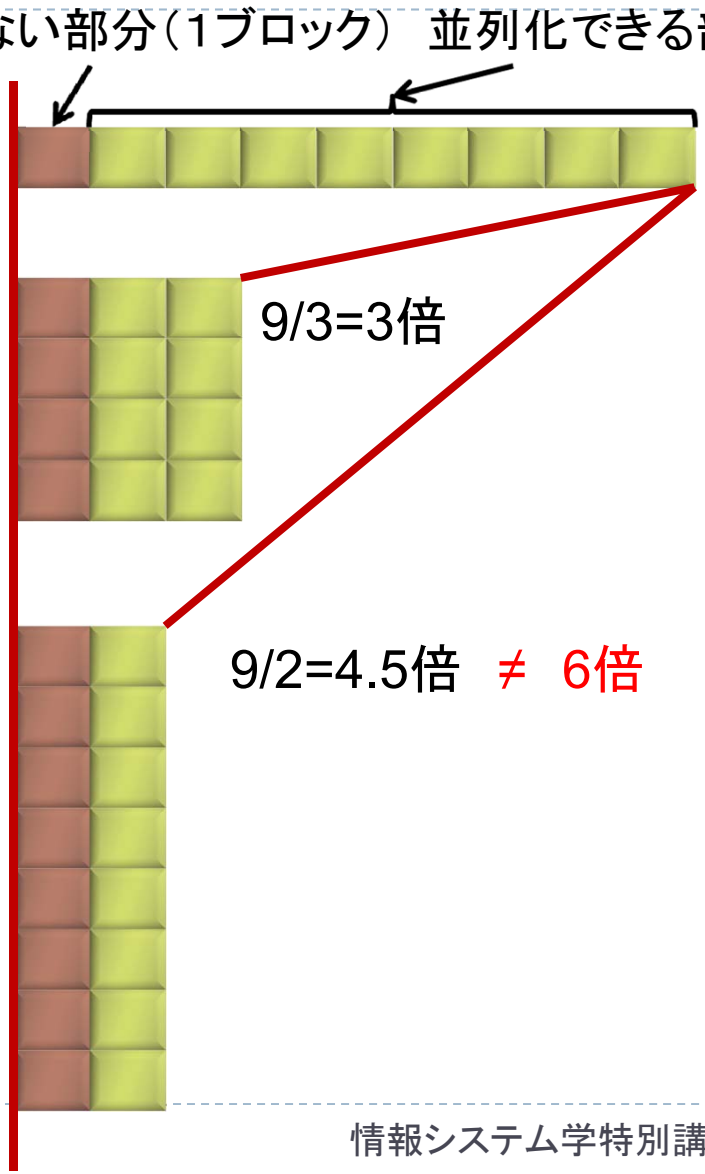
$$S_P = K/(K\alpha/P + K(1-\alpha))$$

$$= 1/(\alpha/P + (1-\alpha)) = 1/(\alpha(1/P - 1) + 1)$$

- 上記の式から、たとえ無限大の数のプロセッサを使っても(P→∞)、台数効果は、高々 1／(1－α) である。
  (アムダールの法則)
  - 全体の90%が並列化できたとしても、無限大の数のプロセッサをつかっても、1/(1−0.9) = 10 倍 にしかならない！

  →高性能を達成するためには、少しでも並列化効率を上げる実装をすることがとても重要である

アムダールの法則の直観例



●逐次実行

＝88.8%が並列化可能

●並列実行（4並列）

9/3=3倍

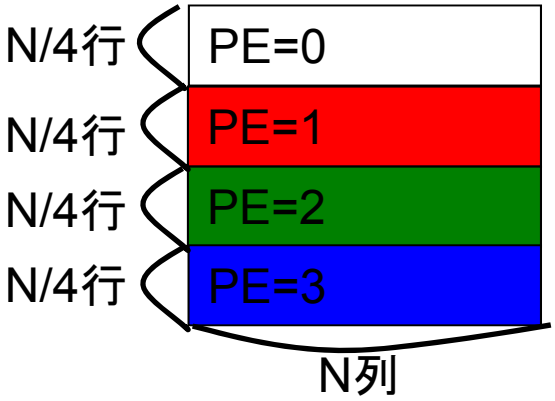
●並列実行（8並列）

9/2=4.5倍 ≠ 6倍

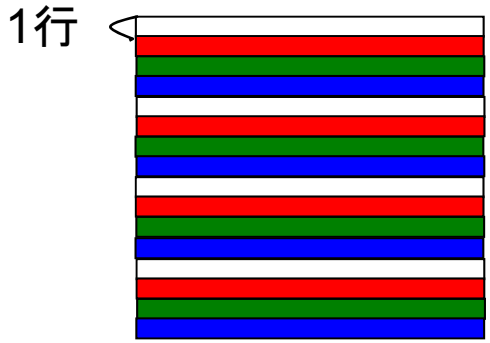
基本演算

- 逐次処理では、「データ構造」が重要
- 並列処理においては、「データ分散方法」が重要になる！
  1. 各PEの「演算負荷」を均等にする
     - ロード・バランシング： 並列処理の基本操作の一つ
     - 粒度調整
  2. 各PEの「利用メモリ量」を均等にする
  3. 演算に伴う通信時間を短縮する
  4. 各PEの「データ・アクセスパターン」を高速な方式にする
     （＝逐次処理におけるデータ構造と同じ）
- 行列データの分散方法
  - ＜次元レベル＞： １次元分散方式、２次元分散方式
  - ＜分割レベル＞： ブロック分割方式、サイクリック（循環）分割方式

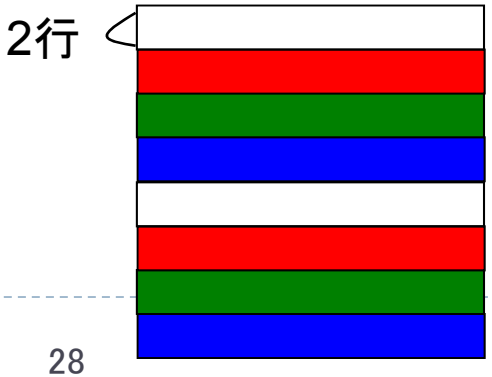
１次元分散



•（行方向） ブロック分割方式
•(Block, *) 分散方式



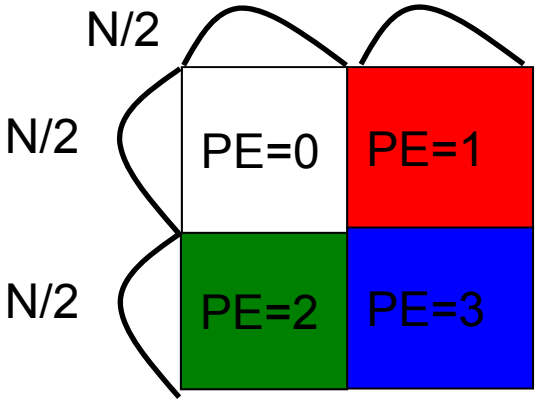
•(行方向) サイクリック分割方式
•(Cyclic, *) 分散方式



•(行方向)ブロック・サイクリック分割方式
•(Cyclic(2), *) 分散方式

この例の「２」: ＜ブロック幅＞とよぶ

2次元分散



•ブロック・ブロック分割方式
•(Block, Block)分散方式

0	1	0	1	0	1	0	1
2	3	2	3	2	3	2	3
0	1	0	1	0	1	0	1
2	3	2	3	2	3	2	3
0	1	0	1	0	1	0	1
2	3	2	3	2	3	2	3
0	1	0	1	0	1	0	1
2	3	2	3	2	3	2	3

•サイクリック・サイクリック分割方式
•(Cyclic, Cyclic)分散方式

0	0	1	1	0	0	1	1
0	0	1	1	0	0	1	1
2	2	3	3	2	2	3	3
2	2	3	3	2	2	3	3
0	0	1	1	0	0	1	1
0	0	1	1	0	0	1	1
2	2	3	3	2	2	3	3
2	2	3	3	2	2	3	3

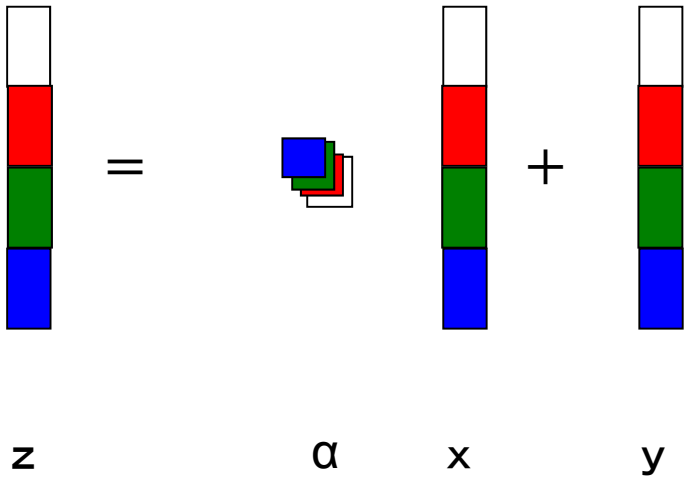
•二次元ブロック・サイクリック分割方式
•(Cyclic(2), Cyclic(2))分散方式

ベクトルどうしの演算

- 以下の演算

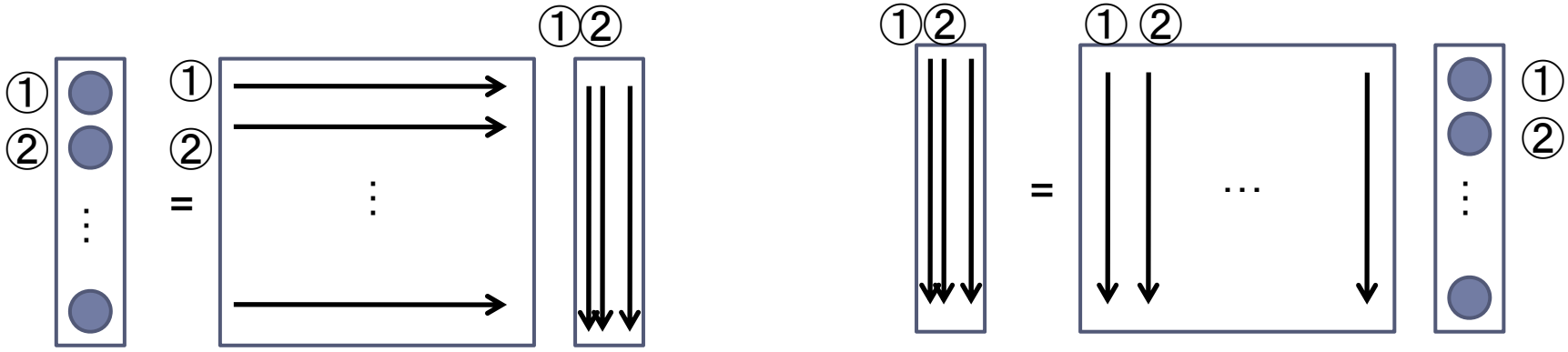
$$z = \alpha x + y$$

  - ここで、α はスカラ、z、x、y　はベクトル
- どのようなデータ分散方式でも並列処理が可能
  - ただし、スカラ α は全PEで所有する。
  - ベクトルはO(n)のメモリ領域が必要なのに対し、スカラはO(1)のメモリ領域で大丈夫。
    →スカラメモリ領域は無視可能
  - 計算量：O(N/P)
  - あまり面白くない



行列とベクトルの積

- ＜行方式＞と＜列方式＞がある。
  - ＜データ分散方式＞と＜方式＞組のみ合わせがあり、少し面白い




```
for(i=0;i<n;i++){
    y[i]=0.0;
    for(j=0;j<n;j++){
        y[i] += a[i][j]*x[j];
    }
}
```

＜行方式＞： 自然な実装
C言語向き

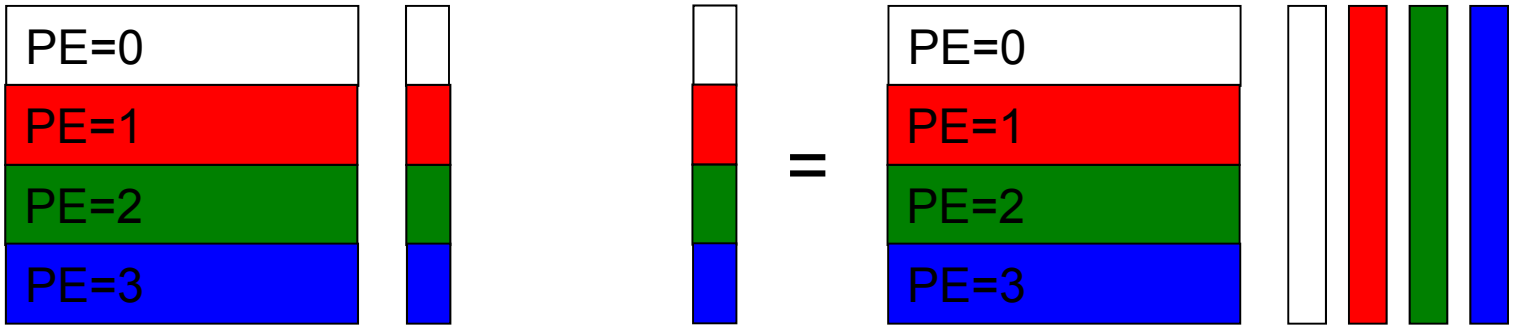
```
for(j=0; j<n; j++) y[j]=0.0;
for(j=0; j<n; j++) {
   for (i=0; i<n; i++) {
      y[i] += a[i][j]*x[j];
   }
}
```

＜列方式＞： Fortran言語向き

行列とベクトルの積

＜行方式の場合＞

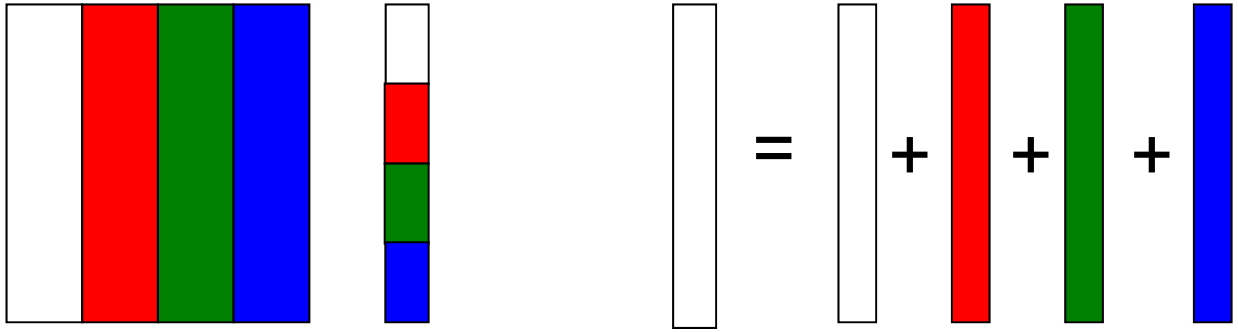
＜行方向分散方式＞　：行方式に向く分散方式



右辺ベクトルを MPI_Allgather関数を利用し、全PEで所有する

各PE内で行列ベクトル積を行う

＜列方向分散方式＞　：ベクトルの要素すべてがほしいときに向く



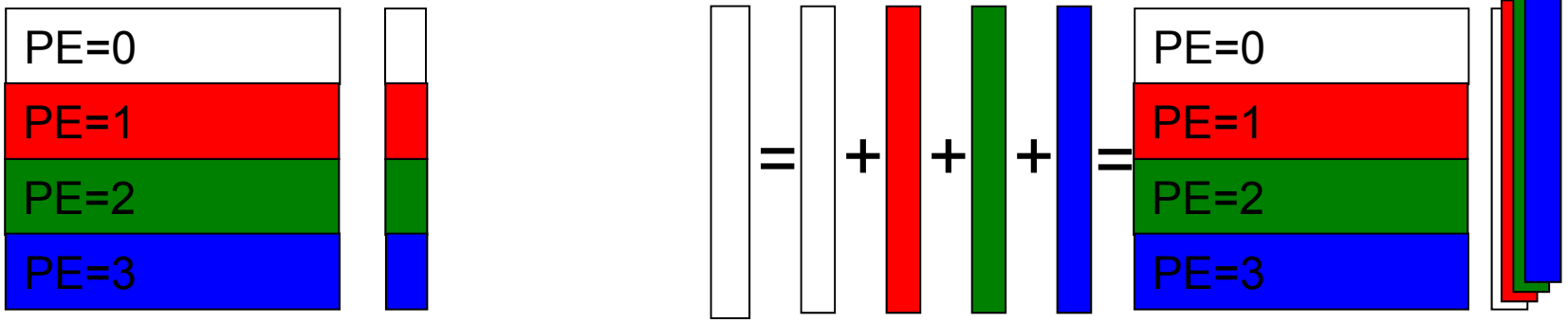
各PE内で行列-ベクトル積を行う

MPI_Reduce関数で総和を求める
（※ある1PEにベクトルすべてが集まる）

行列とベクトルの積

＜列方式の場合＞

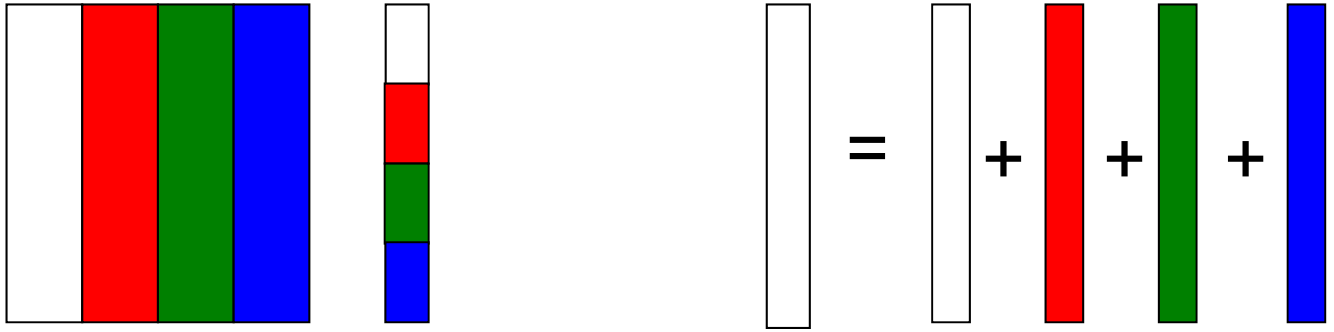
＜行方向分散方式＞　：無駄が多く使われない



右辺ベクトルを MPI_Allgather関数を利用して、全PEで所有する

結果をMPI_Reduce関数により総和を求める

＜列方向分散方式＞　：列方式に向く分散方式



各PE内で行列-ベクトル積を行う

MPI_Reduce関数で総和を求める
（※ある1PEにベクトルすべてが集まる）

基本的なMPI関数

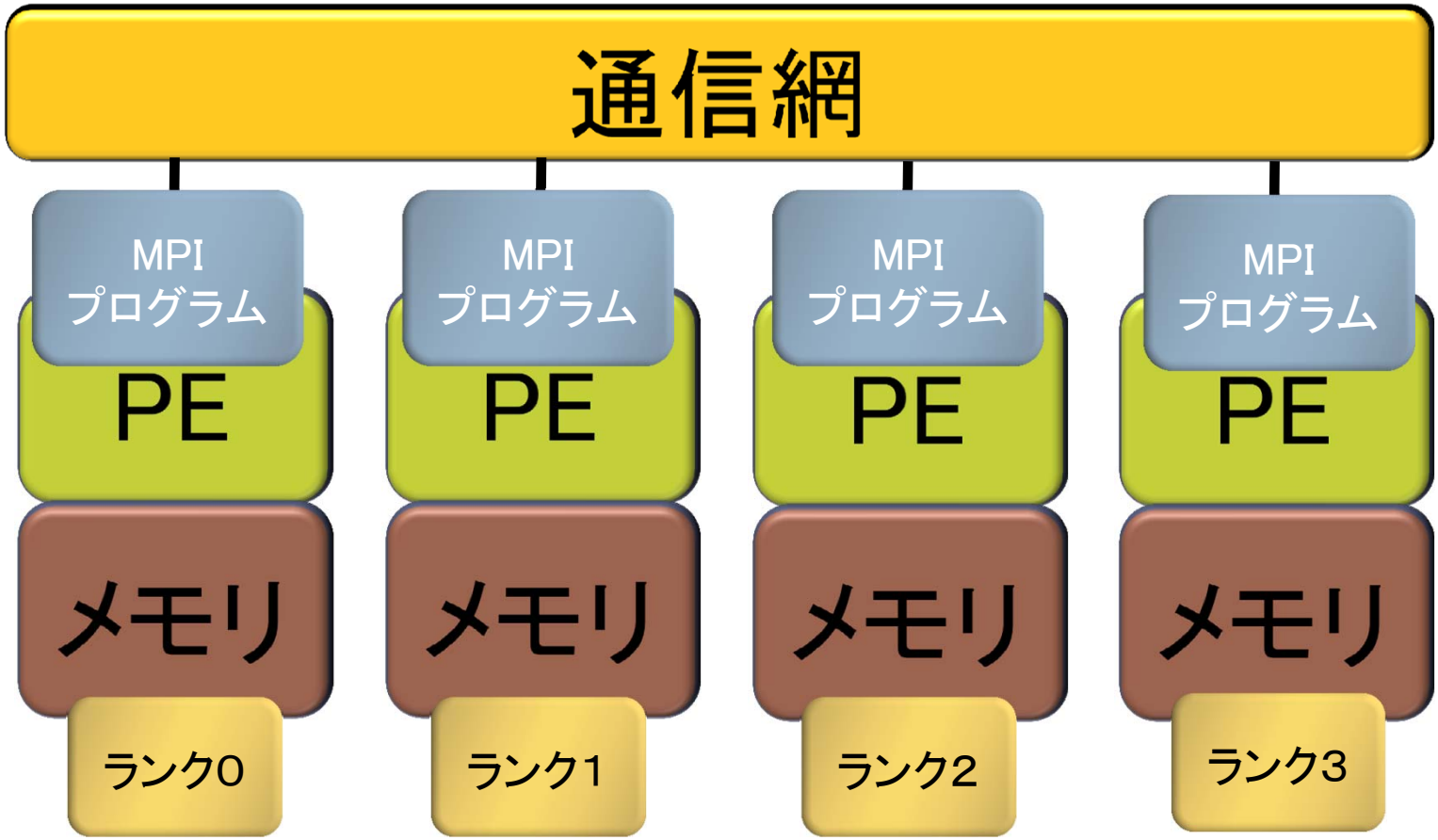
送信、受信のためのインタフェース

略語とMPI用語

- MPIは「プロセス」間の通信を行います。プロセスは（普通は）「プロセッサ」（もしくは、コア）に一対一で割り当てられます。
- 今後、「MPIプロセス」と書くのは長いので、ここではPE（Processer Elementsの略）と書きます。
  - ただし用語として「PE」は現在はあまり使われていません。
- ランク（Rank）
  - 各「MPIプロセス」の「識別番号」のこと。
  - 通常MPIでは、MPI_Comm_rank関数で設定される変数（サンプルプログラムではmyid）に、0～全PE数－１　の数値が入る
  - 世の中の全MPIプロセス数を知るには、MPI_Comm_size関数を使う。

  （サンプルプログラムでは、numprocs に、この数値が入る）

ランクの説明図


通信網
MPI
プログラム
PE
メモリ
ランク0
MPI
プログラム
PE
メモリ
ランク1
MPI
プログラム
PE
メモリ
ランク2
MPI
プログラム
PE
メモリ
ランク3

C言語インターフェースと Fortranインターフェースの違い

- C版は、 整数変数ierr が戻り値

  ierr = MPI_Xxxx(・・・);

- Fortran版は、最後に整数変数ierrが引数

  call MPI_XXXX(・・・, ierr)

- システム用配列の確保の仕方
  - C言語

    MPI_Status istatus;
  - Fortran言語

    integer istatus(MPI_STATUS_SIZE)

C言語インターフェースと Fortranインターフェースの違い

- MPIにおける、データ型の指定
  - C言語

MPI_CHAR (文字型) 、 MPI_INT (整数型)、 MPI_FLOAT (実数型)、MPI_DOUBLE(倍精度実数型)

  - Fortran言語

MPI_CHARACTER (文字型) 、MPI_INTEGER (整数型)、MPI_REAL (実数型)、MPI_DOUBLE_PRECISION(倍精度実数型) 、MPI_COMPLEX(複素数型)

- 以降は、C言語インタフェースで説明する

基礎的なMPI関数—MPI_Recv（１／２）

- ierr = MPI_Recv(recvbuf, icount, idatatype, isource, itag, icomm, istatus);

  - recvbuf： 受信領域の先頭番地を指定する。
  - icount： 整数型。受信領域のデータ要素数を指定する。
  - idatatype： 整数型。受信領域のデータの型を指定する。
    - MPI_CHAR（文字型）、MPI_INT（整数型）、MPI_FLOAT（実数型）、 MPI_DOUBLE(倍精度実数型)
  - isource： 整数型。受信したいメッセージを送信するPEのランクを指定する。
    - 任意のPEから受信したいときは、MPI_ANY_SOURCE を指定する。

基礎的なMPI関数—MPI_Recv（２／２）

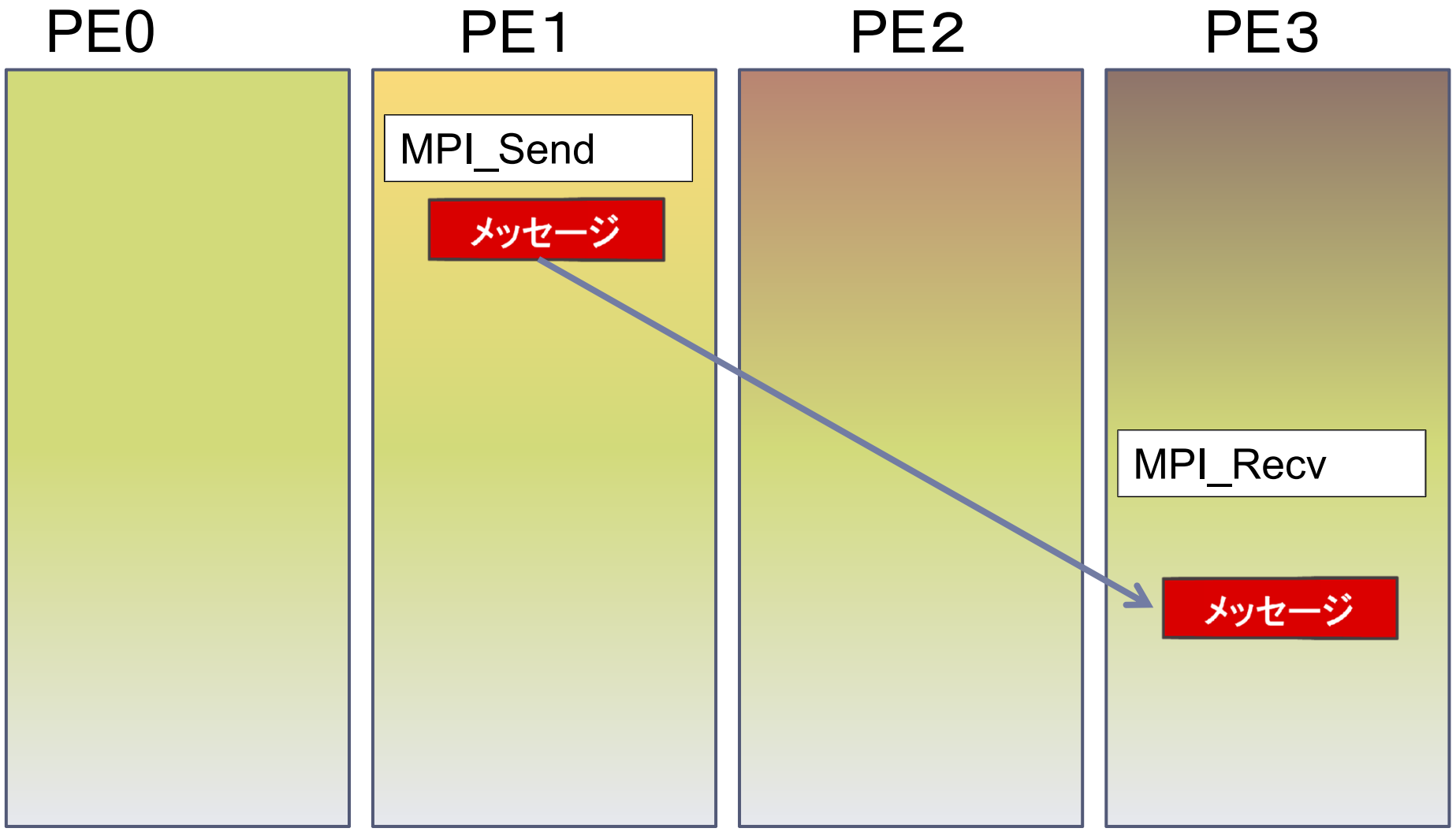
- itag： 整数型。受信したいメッセージに付いているタグの値を指定する。
  - 任意のタグ値のメッセージを受信したいときは、MPI_ANY_TAG を指定する。
- icomm： 整数型。PE集団を認識する番号であるコミュニケータを指定する。
  - 通常ではMPI_COMM_WORLD を指定すればよい。
- istatus： MPI_Status型（整数型の配列）。受信状況に関する情報が入る。かならず専用の型宣言をした配列を確保すること。
  - 要素数がMPI_STATUS_SIZEの整数配列が宣言される。
  - 受信したメッセージの送信元のランクが istatus[MPI_SOURCE]、タグが istatus[MPI_TAG] に代入される。
- ierr(戻り値)： 整数型。エラーコードが入る。

基礎的なMPI関数—MPI_Send

- ierr = MPI_Send(sendbuf, icount, idatatype, idest, itag, icomm);

  - sendbuf : 送信領域の先頭番地を指定する
  - icount : 整数型。送信領域のデータ要素数を指定する
  - idatatype : 整数型。送信領域のデータの型を指定する
  - idest : 整数型。送信したいPEのicomm内でのランクを指定する。
  - itag : 整数型。受信したいメッセージに付けられたタグの値を指定する。
  - icomm : 整数型。プロセッサー集団を認識する番号であるコミュニケータを指定する。
  - ierr (戻り値) : 整数型。エラーコードが入る。

Send－Recvの概念（１対１通信）

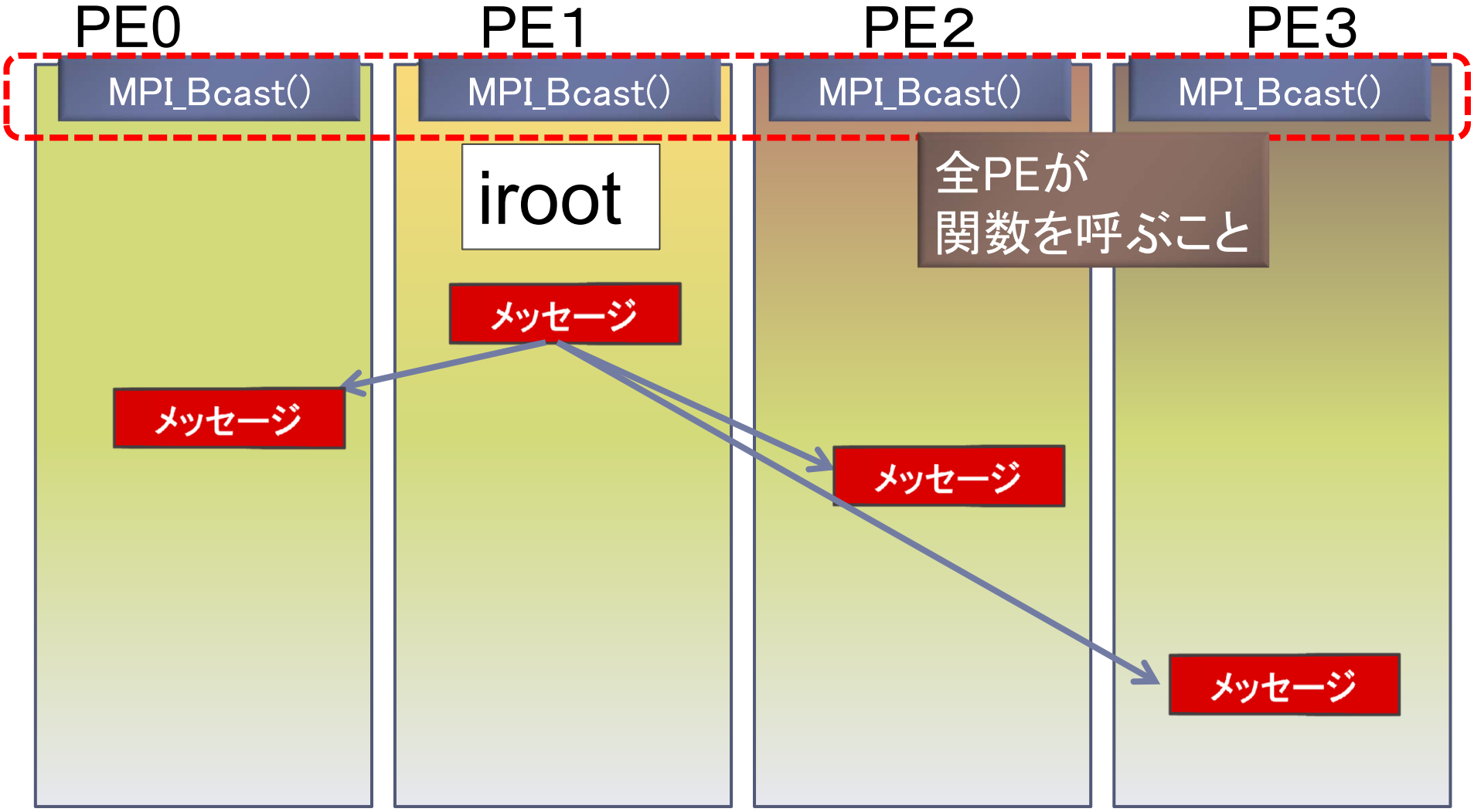


基礎的なMPI関数—MPI_Bcast

- ierr = MPI_Bcast(sendbuf, icount, idatatype,
  iroot, icomm);

- sendbuf： 送信および受信領域の先頭番地を指定する。
- icount： 整数型。送信領域のデータ要素数を指定する。
- idatatype： 整数型。送信領域のデータの型を指定する。
- iroot： 整数型。送信したいメッセージがあるPEの番号を指定する。全PEで同じ値を指定する必要がある。
- icomm： 整数型。PE集団を認識する番号であるコミュニケータを指定する。
- ierr（戻り値）： 整数型。エラーコードが入る。

MPI_Bcastの概念（集団通信）



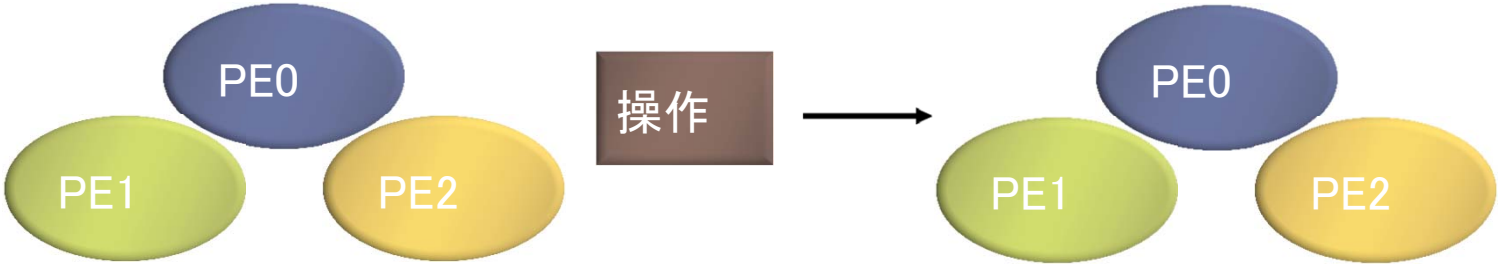
リダクション演算

- ＜操作＞によって＜次元＞を減少（リダクション）させる処理
  - 例：　内積演算
    ベクトル（n次元空間）　→　スカラ（1次元空間）
- リダクション演算は、通信と計算を必要とする
  - 集団通信演算（collective communication operation）と呼ばれる
- 演算結果の持ち方の違いで、2種のインタフェースが存在する

リダクション演算

- 演算結果に対する所有PEの違い
  - MPI_Reduce関数
    - リダクション演算の結果を、ある一つのPEに所有させる

  - MPI_Allreduce関数
    - リダクション演算の結果を、全てのPEに所有させる



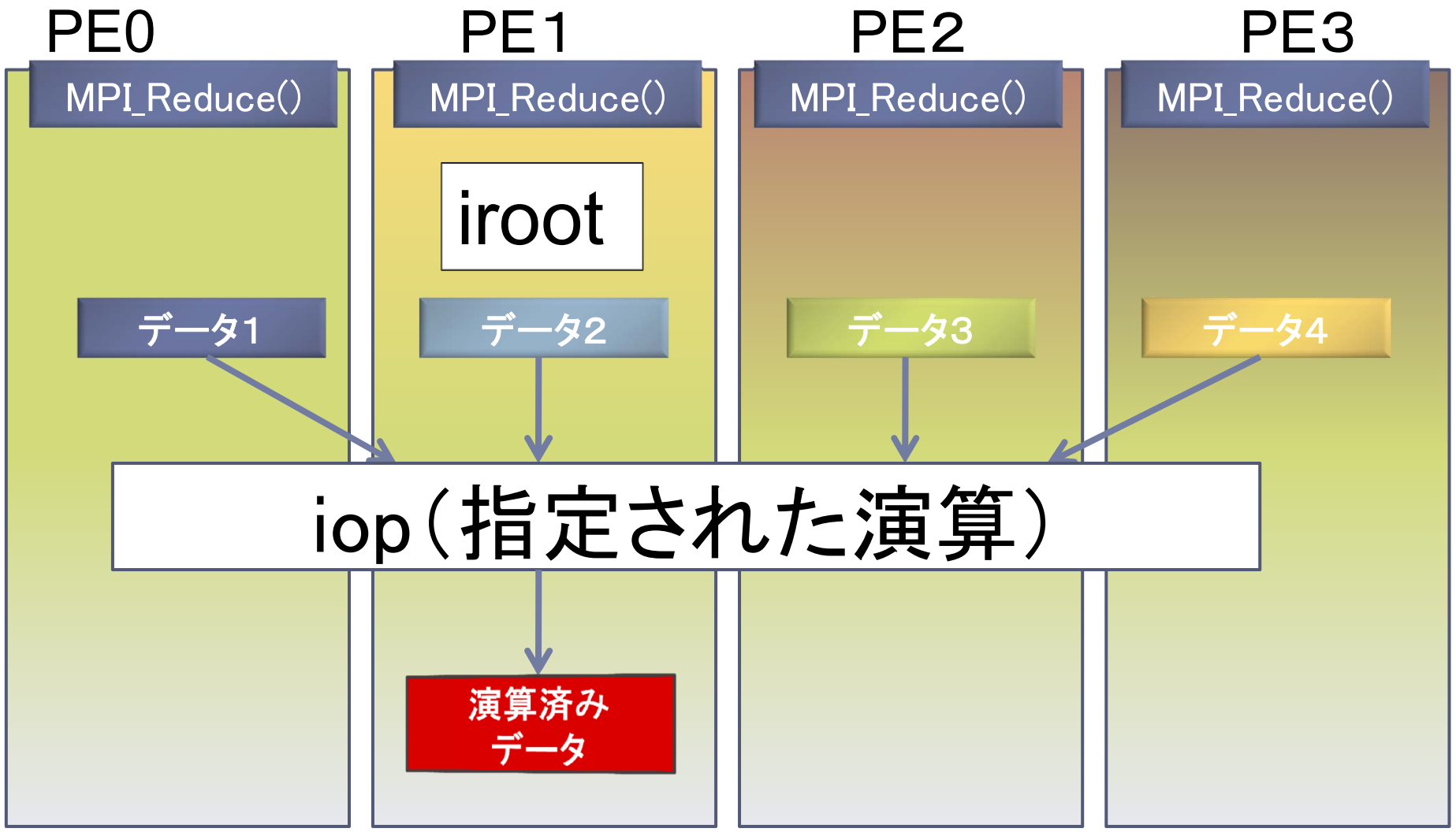
基礎的なMPI関数—MPI_Reduce

- ierr = MPI_Reduce(sendbuf, recvbuf, icount,
  idatatype, iop, iroot, icomm);
  - sendbuf： 送信領域の先頭番地を指定する。
  - recvbuf： 受信領域の先頭番地を指定する。iroot で指定したPEのみで書き込みがなされる。
    送信領域と受信領域は、同一であってはならない。
    すなわち、異なる配列を確保しなくてはならない。
  - icount： 整数型。送信領域のデータ要素数を指定する。
  - idatatype： 整数型。送信領域のデータの型を指定する。
    - ＜最小／最大値と位置＞を返す演算を指定する場合は、MPI_2INT(整数型)、 MPI_2FLOAT (単精度型)、MPI_2DOUBLE(倍精度型) 、 を指定する。

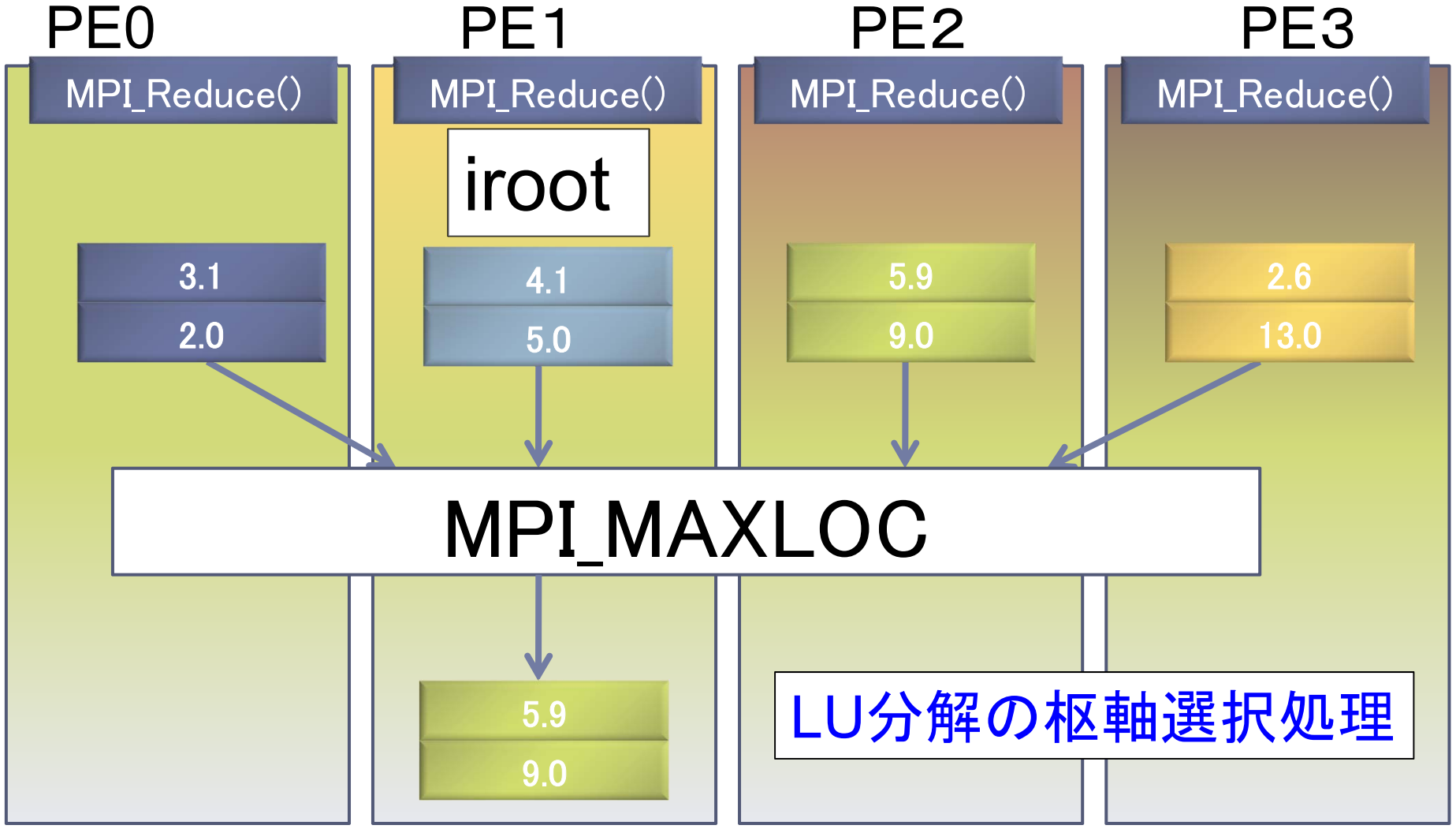
基礎的なMPI関数—MPI_Reduce

- iop：　整数型。演算の種類を指定する。
  - MPI_SUM (総和)、MPI_PROD (積)、MPI_MAX (最大)、MPI_MIN (最小)、 MPI_MAXLOC (最大と位置)、MPI_MINLOC (最小と位置) など。
- iroot：　整数型。結果を受け取るPEのicomm 内でのランクを指定する。全てのicomm 内のPEで同じ値を指定する必要がある。
- icomm：　整数型。PE集団を認識する番号であるコミュニケータを指定する。
- ierr：整数型。 エラーコードが入る。

MPI_Reduceの概念（集団通信）



MPI_Reduceによる２リスト処理例（MPI_2DOUBLEとMPI_MAXLOC）



基礎的なMPI関数—MPI_Allreduce

- ierr = MPI_Allreduce(sendbuf, recvbuf, icount, idatatype, iop, icomm);
  - sendbuf： 送信領域の先頭番地を指定する。
  - recvbuf： 受信領域の先頭番地を指定する。iroot で指定したPEのみで書き込みがなされる。
    送信領域と受信領域は、同一であってはならない。
    すなわち、異なる配列を確保しなくてはならない。
  - icount： 整数型。送信領域のデータ要素数を指定する。
  - idatatype： 整数型。送信領域のデータの型を指定する。
    - 最小値や最大値と位置を返す演算を指定する場合は、MPI_2INT(整数型)、MPI_2FLOAT (単精度型)、MPI_2DOUBLE(倍精度型) を指定する。

基礎的なMPI関数—MPI_Allreduce

- iop：　整数型。演算の種類を指定する。
  - MPI_SUM（総和）、MPI_PROD（積）、MPI_MAX（最大）、MPI_MIN（最小）、 MPI_MAXLOC（最大と位置）、MPI_MINLOC（最小と位置）など。
- icomm：　整数型。PE集団を認識する番号であるコミュニケータを指定する。
- ierr：整数型。 エラーコードが入る。

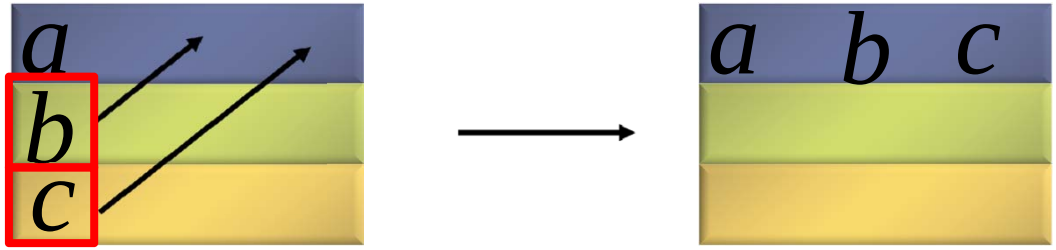
MPI_Allreduceの概念（集団通信）

リダクション演算

- 性能について
  - リダクション演算は、1対1通信に比べ遅い
    - プログラム中で多用すべきでない！
  - MPI_Allreduce は MPI_Reduce に比べ遅い
    - MPI_Allreduce は、放送処理が入る。
    - なるべく、MPI_Reduce を使う。

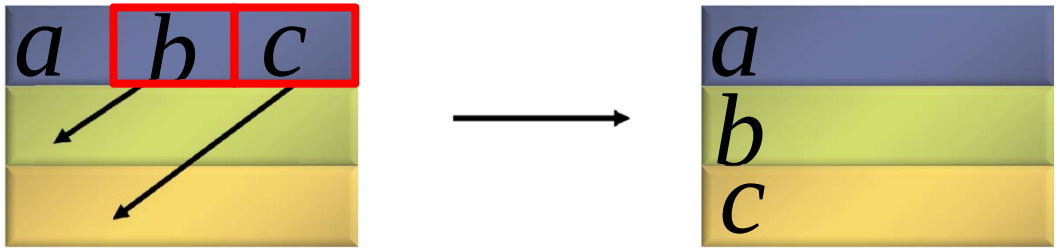
行列の転置

- 行列 A が(Block, *)分散されているとする。
- 行列 A の転置行列 A^T を作るには、MPIでは次の2通りの関数を用いる
  - MPI_Gather関数



集めるメッセージサイズが各PEで均一のとき使う

  - MPI_Scatter関数



集めるサイズが各PEで均一でないときは
MPI_GatherV関数
MPI_ScatterV関数

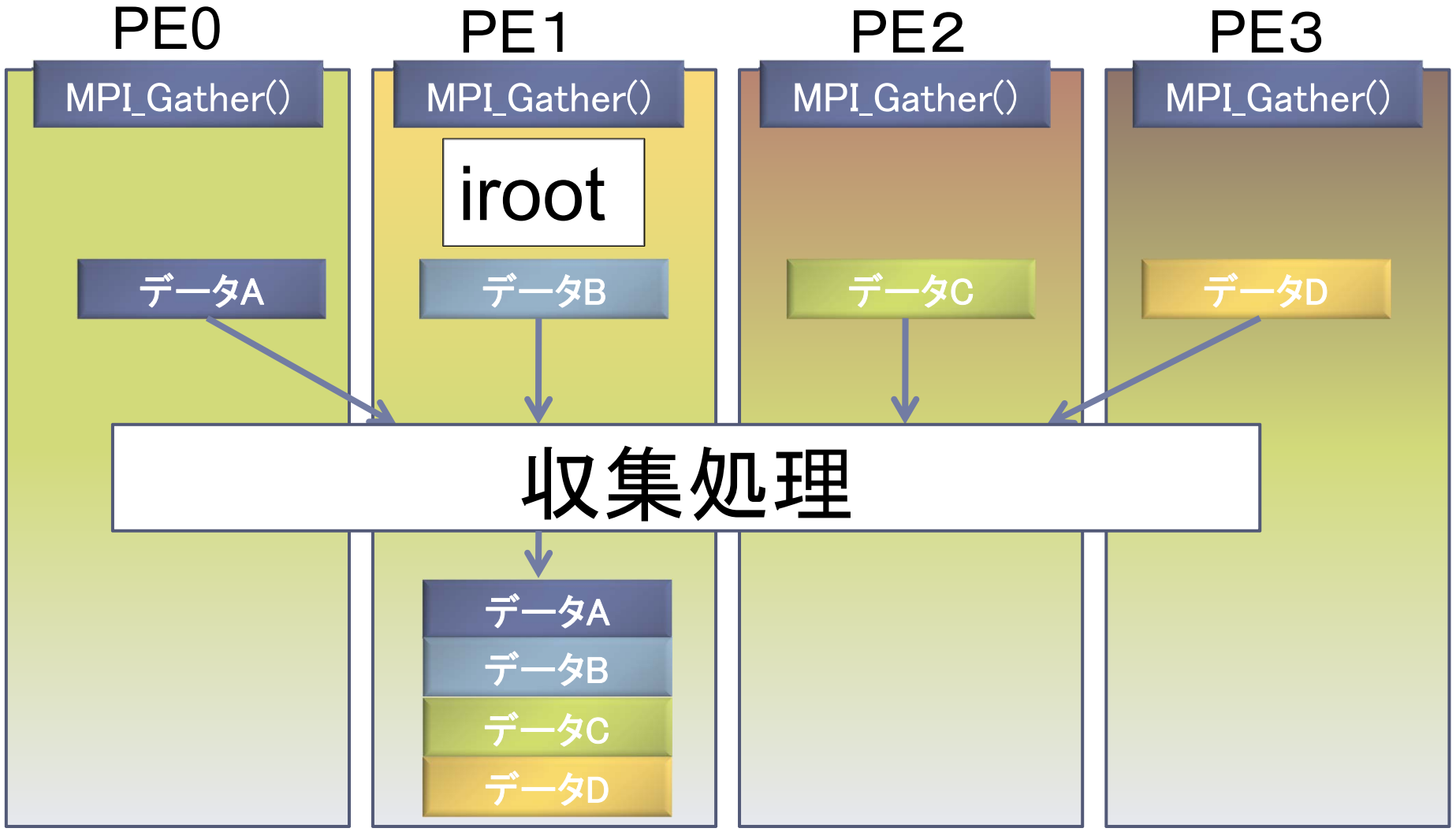
基礎的なMPI関数—MPI_Gather

- ierr = MPI_Gather (sendbuf, isendcount, isendtype,
  recvbuf, irecvcount, irecvtype, iroot, icomm);
  - sendbuf : 送信領域の先頭番地を指定する。
  - isendcount: 整数型。送信領域のデータ要素数を指定する。
  - isendtype : 整数型。送信領域のデータの型を指定する。
  - recvbuf : 受信領域の先頭番地を指定する。iroot で指定したPEのみで書き込みがなされる。
    - なお原則として、送信領域と受信領域は、同一であってはならない。すなわち、異なる配列を確保しなくてはならない。
  - irecvcount: 整数型。受信領域のデータ要素数を指定する。
    - この要素数は、1PE当たりの送信データ数を指定すること。
    - MPI_Gather 関数では各PEで異なる数のデータを収集することはできないので、同じ値を指定すること。

基礎的なMPI関数—MPI_Gather

- irecvtype： 整数型。受信領域のデータ型を指定する。
- iroot： 整数型。収集データを受け取るPEのicomm 内でのランクを指定する。
  - 全てのicomm 内のPEで同じ値を指定する必要がある。
- icomm： 整数型。PE集団を認識する番号であるコミュニケータを指定する。
- ierr： 整数型。エラーコードが入る。

MPI_Gatherの概念（集団通信）



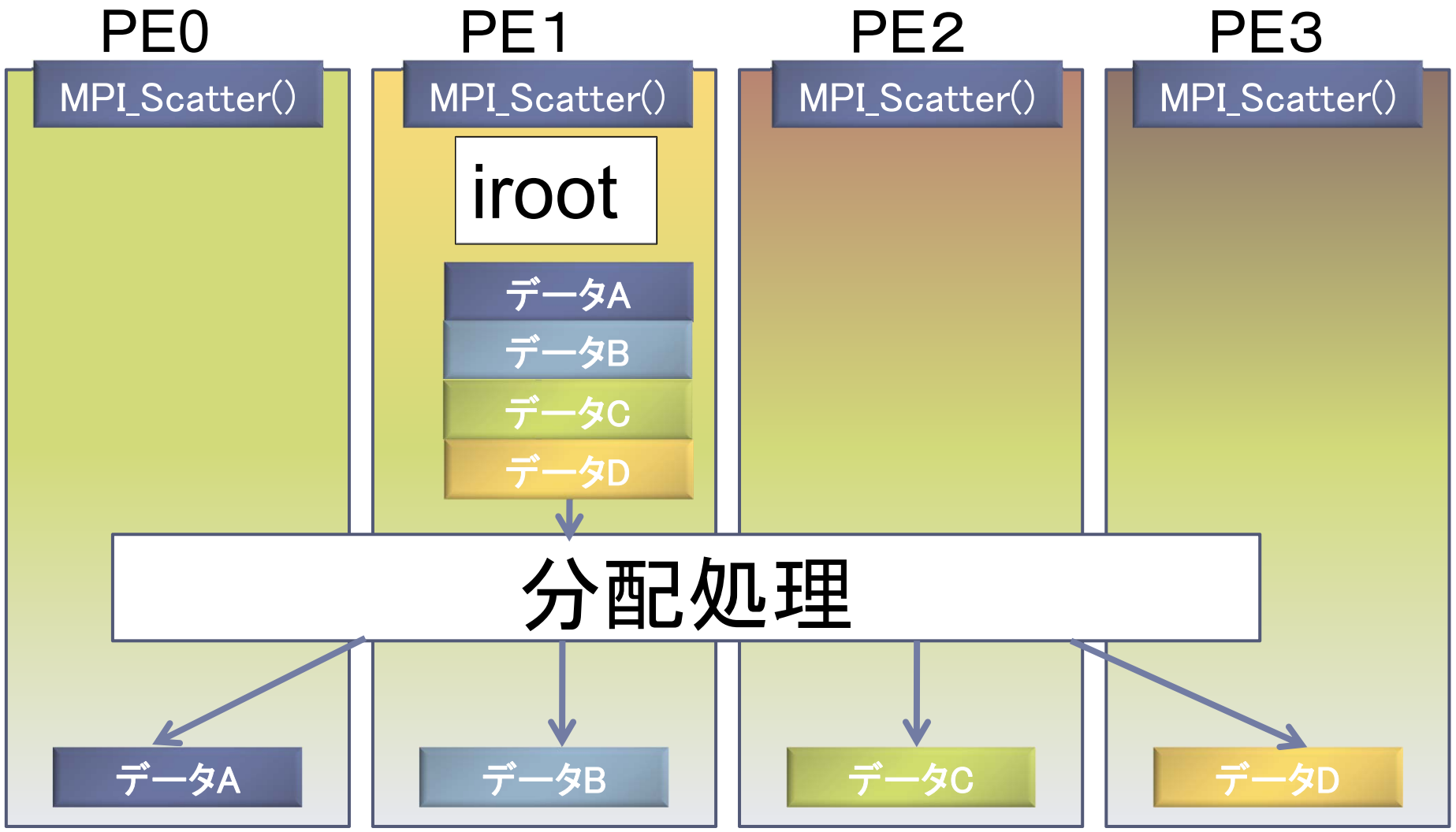
基礎的なMPI関数—MPI_Scatter

- ierr = MPI_Scatter (sendbuf, isendcount, isendtype, recvbuf, irecvcount, irecvtype, iroot, icomm);
  - sendbuf : 送信領域の先頭番地を指定する。
  - isendcount: 整数型。送信領域のデータ要素数を指定する。
    - この要素数は、1PE当たりに送られる送信データ数を指定すること。
    - MPI_Scatter 関数では各PEで異なる数のデータを分散することはできないので、同じ値を指定すること 。
  - isendtype : 整数型。送信領域のデータの型を指定する。 iroot で指定したPEのみ有効となる。
  - recvbuf : 受信領域の先頭番地を指定する。
    - なお原則として、送信領域と受信領域は、同一であってはならない。すなわち、異なる配列を確保しなくてはならない。
  - irecvcount: 整数型。受信領域のデータ要素数を指定する。

基礎的なMPI関数—MPI_Scatter

- irecvtype： 整数型。受信領域のデータ型を指定する。
- iroot： 整数型。収集データを受け取るPEのicomm 内でのランクを指定する。
  - 全てのicomm 内のPEで同じ値を指定する必要がある。
- icomm： 整数型。PE集団を認識する番号であるコミュニケータを指定する。
- ierr： 整数型。エラーコードが入る。

MPI_Scatterの概念（集団通信）

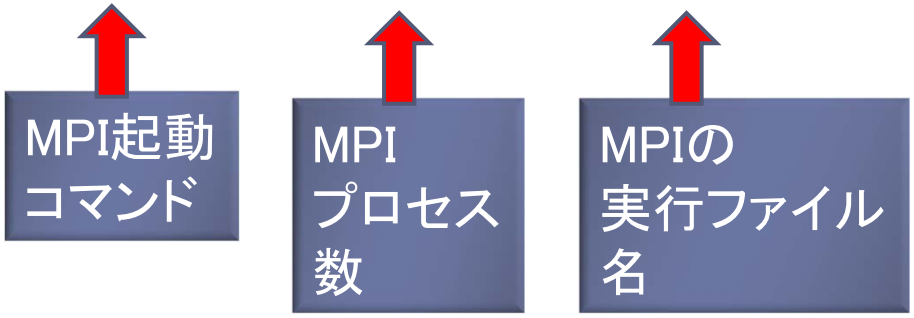


MPIプログラム実例

MPIの起動

- MPIを起動するには
  1. MPIをコンパイルできるコンパイラでコンパイル
     - 実行ファイルは a.out　とする（任意の名前を付けられます）
  2. 以下のコマンドを実行
     - インタラクティブ実行では、以下のコマンドを直接入力
     - バッチジョブ実行では、ジョブスクリプトファイル中に記載

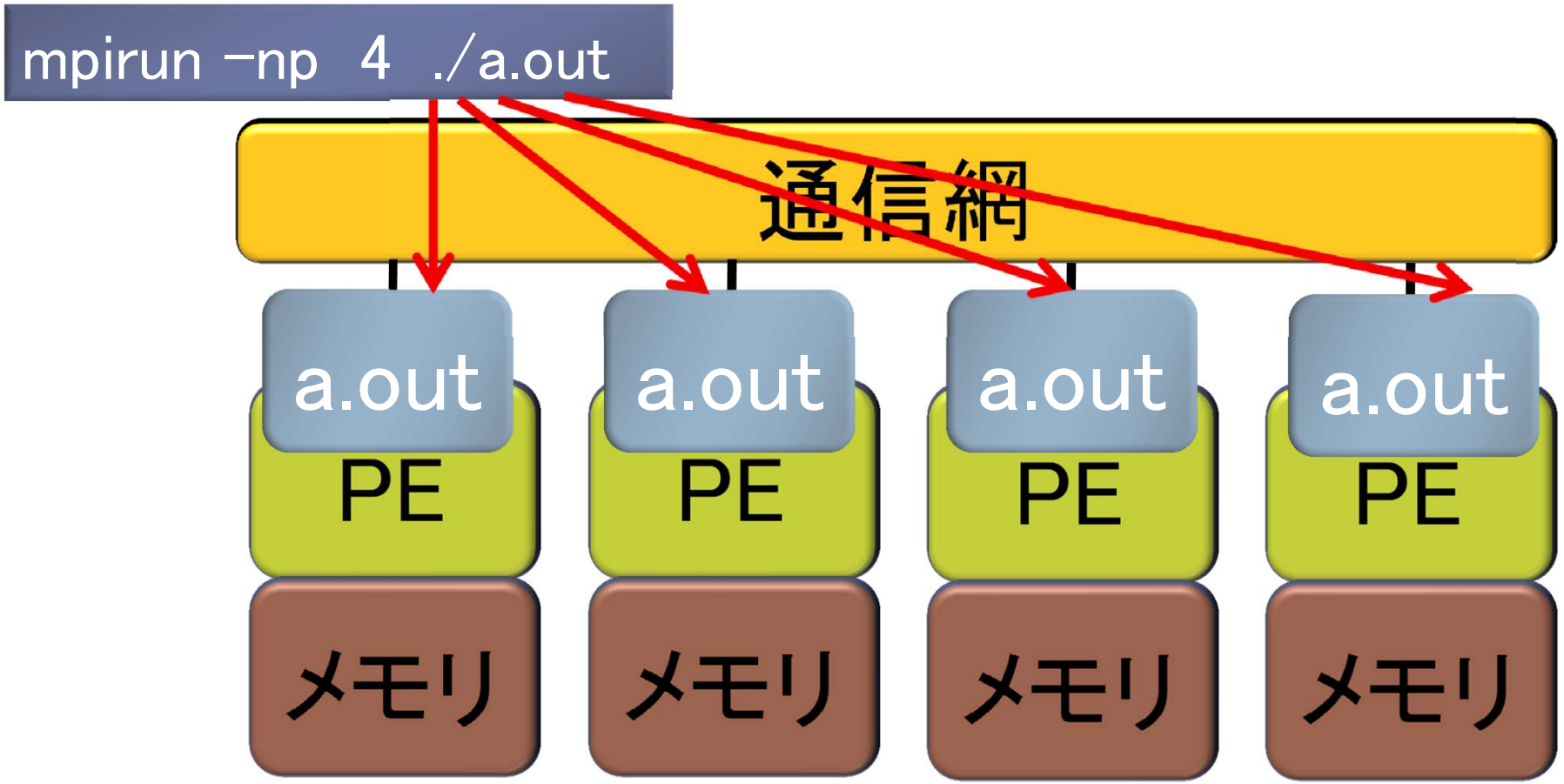
```
$ mpirun   -np  8    ./a.out
```



※スパコンのバッチジョブ実行では、MPIプロセス数は専用の指示文で指定する場合があります。
その場合は以下になることがあります。

$mpirun　./a.out

MPIの起動


mpirun −np 4 ./a.out
通信網
a.out
PE
メモリ
a.out
PE
メモリ
a.out
PE
メモリ
a.out
PE
メモリ

並列版Helloプログラムの説明（C言語）

このプログラムは、全PEで起動される

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

void main(int argc, char* argv[]) {

    int    myid, numprocs;
    int    ierr, rc;

    ierr = MPI_Init(&argc, &argv);
    ierr = MPI_Comm_rank(MPI_COMM_WORLD, &myid);
    ierr = MPI_Comm_size(MPI_COMM_WORLD, &numprocs);

    printf("Hello parallel world!  Myid:%d ¥n", myid);

    rc = MPI_Finalize();

    exit(0);
}
```

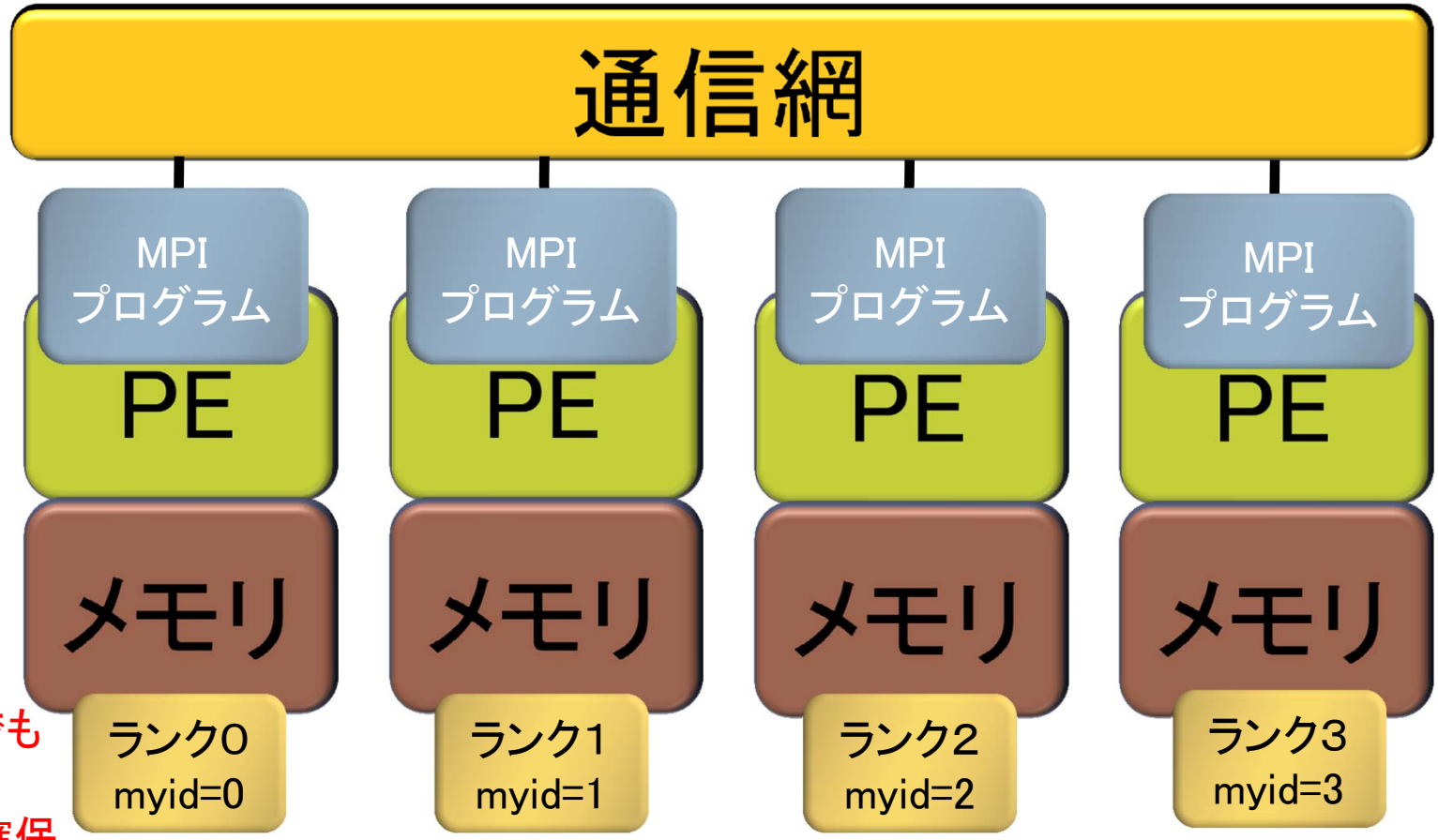
MPIの初期化

自分のID番号を取得
：各PEで値は異なる

全体のプロセッサ台数を取得
：各PEで値は同じ

MPIの終了

変数myidの説明図



同じ変数名でも
別メモリ上
に別変数で確保

並列版Helloプログラムの説明（Fortran言語）

このプログラムは、全PEで起動される

```
program main
include 'mpif.h'
common /mpienv/myid,numprocs

integer  myid, numprocs
integer  ierr

call MPI_INIT(ierr)
call MPI_COMM_RANK(MPI_COMM_WORLD, myid, ierr)
call MPI_COMM_SIZE(MPI_COMM_WORLD, numprocs, ierr)

print *, "Hello parallel world!  Myid:", myid

call MPI_FINALIZE(ierr)

stop
end
```

MPIの初期化

自分のID番号を取得
：各PEで値は異なる

全体のプロセッサ台数を取得
：各PEで値は同じ

MPIの終了

プログラム出力例

- 4プロセス実行の出力例

Hello parallel world! Myid:0

Hello parallel world! Myid:3

Hello parallel world! Myid:1

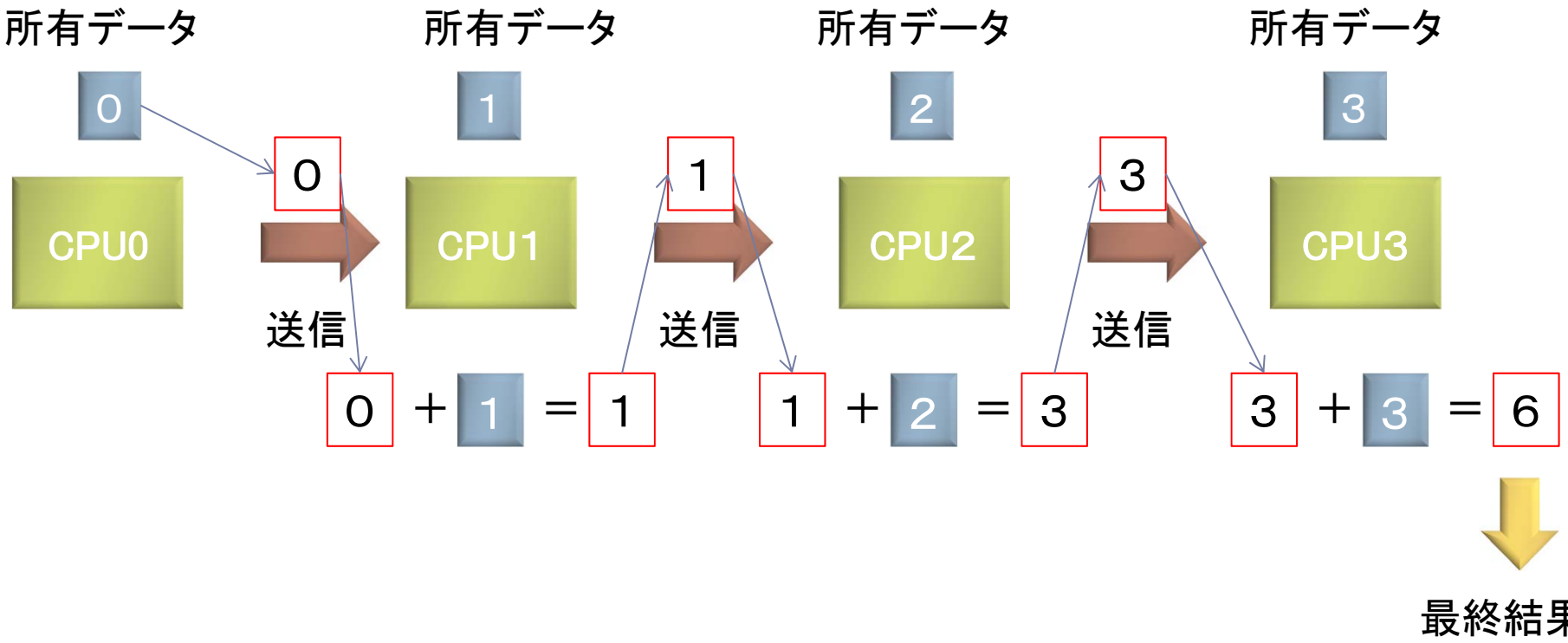
Hello parallel world! Myid:2

●4プロセスなので、表示が4個でる
（1000プロセスなら1000個出力がでる）
●myid番号が表示される。全体で重複した番号は無い。
●必ずしも、myidが0から3まで、連続して出ない
→各行は同期して実行されていない
→実行ごとに結果は異なる

総和演算プログラム（逐次転送方式）

- 各プロセスが所有するデータを、全プロセスで加算し、
  あるプロセス1つが結果を所有する演算を考える。
- 素朴な方法（逐次転送方式）
  1. （0番でなければ）左隣のプロセスからデータを受信する；
  2. 左隣のプロセスからデータが来ていたら；
     1. 受信する;
     2. ＜自分のデータ＞と＜受信データ＞を加算する;
     3. （最終ランクでなければ）右隣のプロセスに＜2の加算した結果を＞送信する;
     4. 処理を終了する;
- 実装上の注意
  - 左隣りとは、（myid−1）のIDをもつプロセス
  - 右隣りとは、（myid+1）のIDをもつプロセス
    - myid=0のプロセスは、左隣りはないので、受信しない
    - myid=p−1のプロセスは、右隣りはないので、送信しない

バケツリレー方式による加算



１対１通信利用例（逐次転送方式、C言語）

```
void main(int argc, char* argv[]) {
  MPI_Status istatus;
….
  dsendbuf = myid;
  drecvbuf = 0.0;
  if (myid != 0) {
     ierr = MPI_Recv(&drecvbuf, 1, MPI_DOUBLE, myid-1, 0,
                MPI_COMM_WORLD, &istatus);
  }
  dsendbuf = dsendbuf + drecvbuf;
  if (myid != nprocs-1) {
    ierr = MPI_Send(&dsendbuf, 1, MPI_DOUBLE, myid+1, 0,
                MPI_COMM_WORLD);
  }
  if (myid == nprocs-1) printf ("Total = %4.2lf ¥n", dsendbuf);
….
}
```

受信用システム配列の確保

自分より一つ少ないID番号（myid-1）から、double型データ1つを受信しdrecvbuf変数に代入

自分より一つ多いID番号（myid+1）に、dsendbuf変数に入っているdouble型データ1つを送信

１対１通信利用例（逐次転送方式、Fortran言語）

```
      program main
      integer  istatus(MPI_STATUS_SIZE)
      ....
      dsendbuf = myid
      drecvbuf = 0.0
      if (myid .ne. 0) then
        call MPI_RECV(drecvbuf, 1, MPI_DOUBLE_PRECISION,
     &              myid-1, 0, MPI_COMM_WORLD, istatus, ierr)
      endif
      dsendbuf = dsendbuf + drecvbuf
      if (myid .ne. numprocs-1) then
        call MPI_SEND(dsendbuf, 1, MPI_DOUBLE_PRECISION,
     &          myid+1, 0, MPI_COMM_WORLD, ierr)
      endif
     if (myid .eq. numprocs-1) then
        print *, "Total = ", dsendbuf
      endif
      ....
      stop
      end
```

受信用システム配列の確保

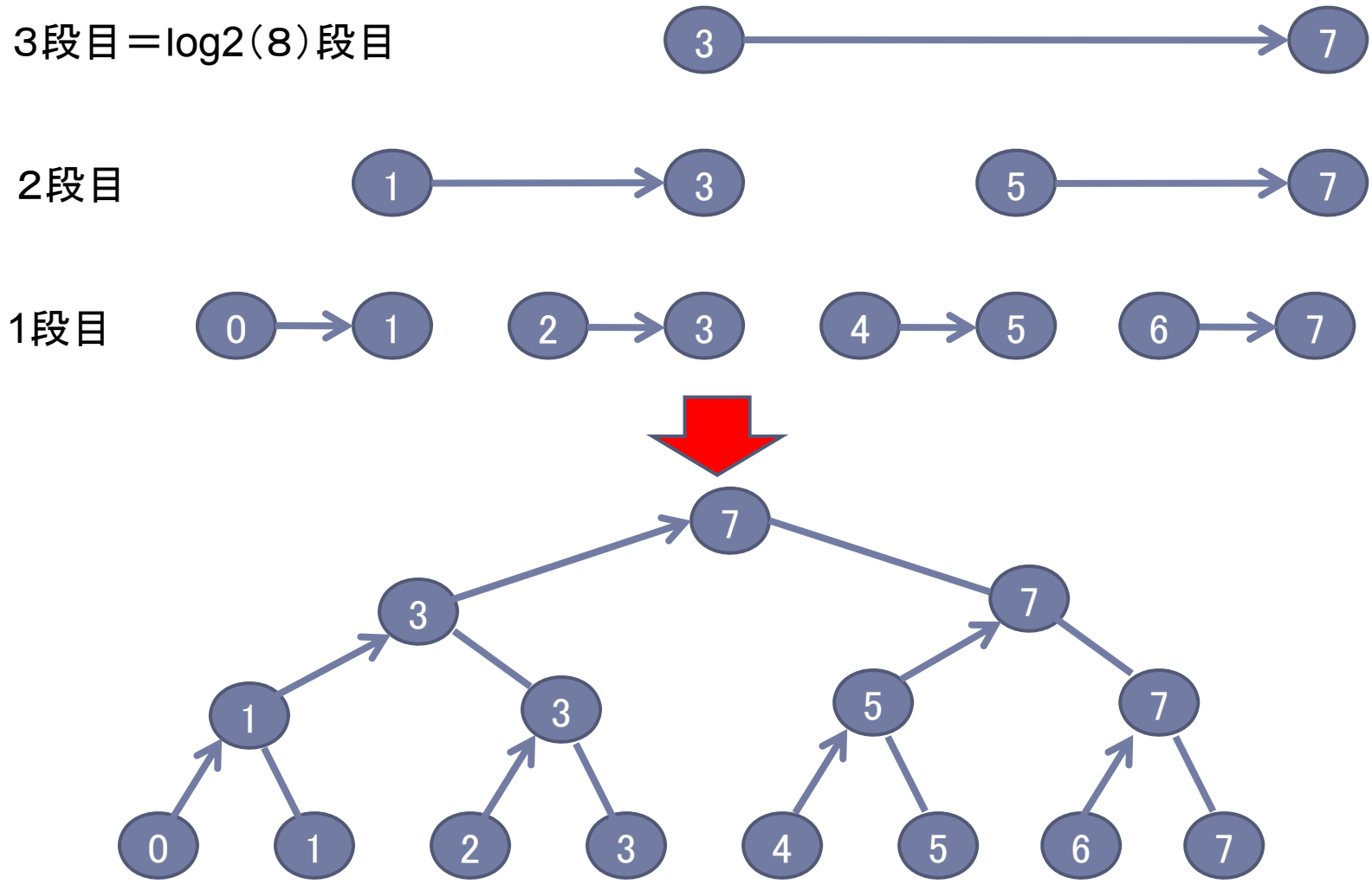
自分より一つ少ないID番号（myid-1）から、double型データ1つを受信しdrecvbuf変数に代入

自分より一つ多いID番号（myid+1）に、dsendbuf変数に入っているdouble型データ1つを送信

総和演算プログラム（二分木通信方式）

- 二分木通信方式
  1. k = 1;
  2. for (i=0; i < log2(nprocs); i++)
  3. if ((myid & k) == k)
     - (myid – k)番 プロセス からデータを受信;
     - 自分のデータと、受信データを加算する;
     - k = k * 2;
  4. else
     - (myid + k)番 プロセス に、データを転送する;
     - 処理を終了する;

総和演算プログラム（二分木通信方式）



総和演算プログラム（二分木通信方式）

- 実装上の工夫
  - 要点：プロセス番号の2進数表記の情報を利用する
  - 第i段において、受信するプロセスの条件は、以下で書ける：

    myid & k が k と一致
    - ここで、k = 2^(i−1)。
    - つまり、プロセス番号の2進数表記で右からi番目のビットが立っているプロセスが、送信することにする
  - また、送信元のプロセス番号は、以下で書ける：

    myid + k
    - つまり、通信が成立するPE番号の間隔は2^(i−1) ←二分木なので
  - 送信プロセスについては、上記の逆が成り立つ。

総和演算プログラム（二分木通信方式）

- 逐次転送方式の通信回数
  - 明らかに、nprocs－１ 回
- 二分木通信方式の通信回数
  - 見積もりの前提
    - 各段で行われる通信は、完全に並列で行われる
      （通信の衝突は発生しない）
  - 段数の分の通信回数となる
  - つまり、log2(nprocs) 回
- 両者の通信回数の比較
  - プロセッサ台数が増すと、通信回数の差（＝実行時間）が
    とても大きくなる
  - １０２４構成では、１０２３回　対　１０回！
  - でも、必ずしも二分木通信方式がよいとは限らない（通信衝突の多発）

参考文献

1. MPI並列プログラミング、P.パチェコ 著 ／ 秋葉 博 訳
2. 並列プログラミング虎の巻MPI版、青山幸也 著、
   理化学研究所情報基盤センタ
   （ http://accc.riken.jp/HPC/training/text.html ）
3. Message Passing Interface Forum
   （ http://www.mpi-forum.org/ ）
4. MPI-Jメーリングリスト
   （ http://phase.hpcc.jp/phase/mpi-j/ml/ ）
5. 並列コンピュータ工学、富田眞治著、昭晃堂（1996）

レポート課題（その１）

- 問題レベルを以下に設定

問題のレベルに関する記述：
- L00: きわめて簡単な問題。
- L10: ちょっと考えればわかる問題。
- L20: 標準的な問題。
- L30: 数時間程度必要とする問題。
- L40: 数週間程度必要とする問題。複雑な実装を必要とする。
- L50: 数か月程度必要とする問題。未解決問題を含む。

※L40以上は、論文を出版するに値する問題。

- 教科書のサンプルプログラムは以下が利用可能
  - Sample-fx.tar

レポート課題（その２）

1. [L05] MPIとは何か説明せよ。
2. [L10] 逐次転送方式、2分木通信方式の実行時間を計測し、どの方式が何台のプロセッサ台数で有効となるかを明らかにせよ。また、その理由について、考察せよ。
3. [L15]　二分木通信方式について、プロセッサ台数が2のべき乗でないときにも動作するように、プログラムを改良せよ。