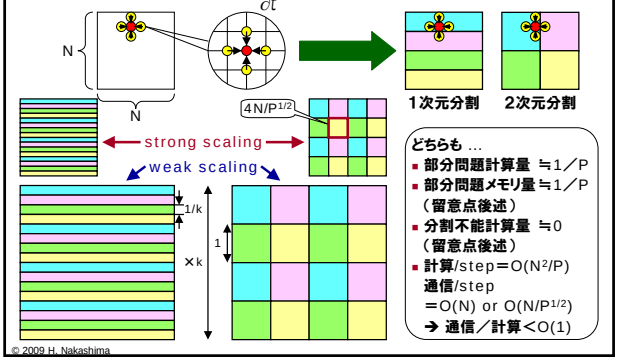
計算科学演習
MPI 発展

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

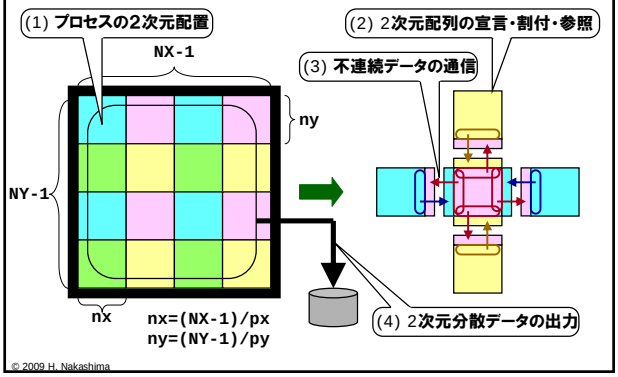
目次

序論
1次元分割 vs 2次元分割

- 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

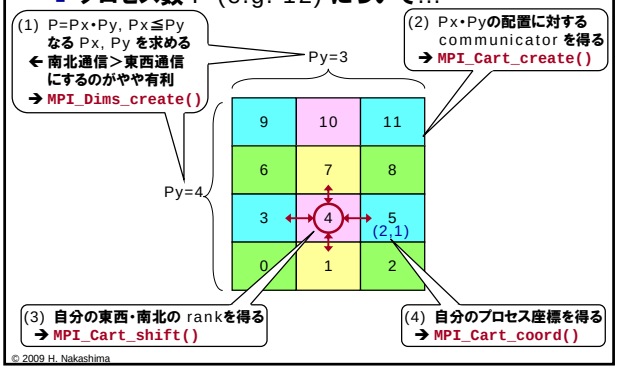


序論
実装のポイント



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…



プロセスの2次元配置
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]`=$n_0, n_1, \ldots, n_{k-1}$
    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)
```

プロセスの2次元配置
直交プロセス空間 (2/2)

- **プロセス座標系**(p_0, ..., p_{k-1}) (0≦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)=**{0 次元 i は非周期境界 / 1 次元 i は周期境界
    - **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)
```


プロセスの2次元配置
rank ⇔ 座標の変換 (1/3)

- (p_0, ..., p_{k-1}) **の** rank (row major)
  - $r_0=p_0$ $r_i=n_ir_{i-1}+p_i$ 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);  do c(2)=0,dims(2)
  call MPI_Cart_rank(cart,c,r,err)
  call MPI_Recv_rank(...,r,...)
end do;  end do
```


プロセスの2次元配置
rank ⇔ 座標の変換 (2/3)

- **逆変換** (p_0, ..., p_{k-1})=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
```


プロセスの2次元配置
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∓1, ..., p_{k-1})

    dst=rank(p_0, ..., p_d±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 (1/2)

- [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))
```

  - 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 (2/2)

- 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**

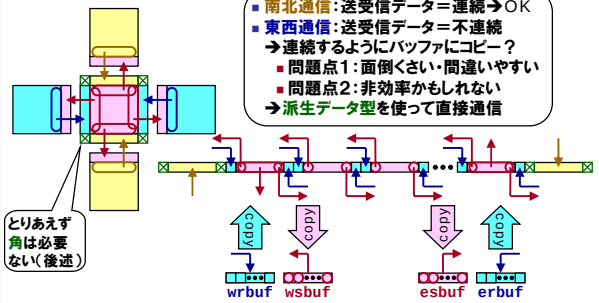
```
for(i=...) {
  double *ai=a+i*w, *aip=ai+(i+1)*w;
  for(j=...)
    ...=...ai[j]...aip[j]...;
}
```

➔**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]...;
}
```

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);
```


不連続データの通信
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

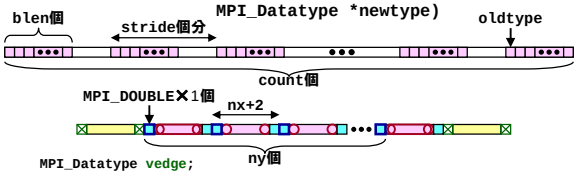
東西通信
- MPI_Type_contiguous() 同一型の単純な連続
- MPI_Type_vector() 同一型の規則的な連続＋不連続
- MPI_Type_hvector() 同一型の規則的な連続＋不連続

  - 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_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

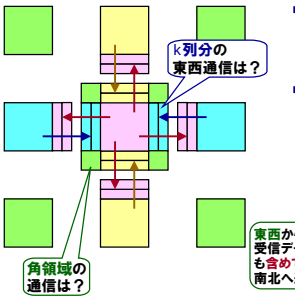
```
MPI_Type_vector(int count, int blen, int stride,
                MPI_Datatype oldtype,
                MPI_Datatype *newtype)
```




```
MPI_Datatype vedge;
MPI_Type_vector(ny,1,nx+2,MPI_DOUBLE,&vedge);
MPI_Type_commit(&vedge);          作ったデータの使用開始宣言
MPI_Sendrecv(&u[...],1,vedge,east,0,
             &u[...],1,vedge,west,0,MCW,&st);
```

```
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

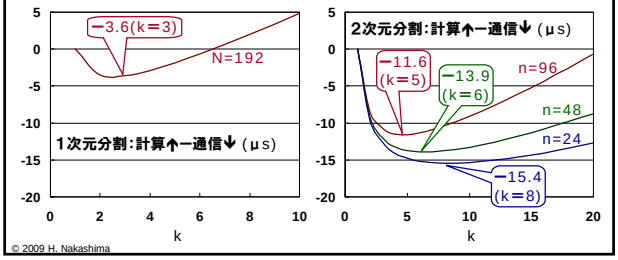


- k列分の東西通信
  - blen=k の Type_vector()
    ≠1列分×k個
- 角領域通信
  - 南西・南東 ➔ 南 ➔ 自分
    北西・北東 ➔ 北 ➔ 自分
    ≠南西など ➔ 自分

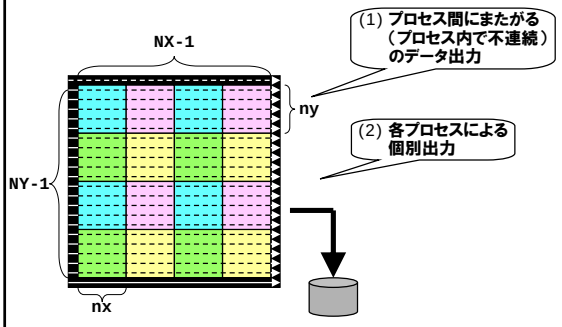
不連続データの通信
通信回数削減の効果

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

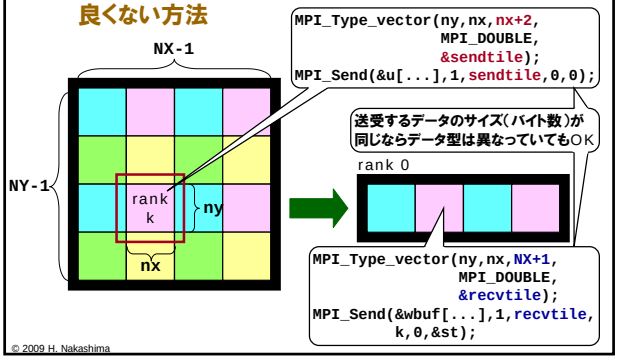


2次元分散データの出力
概論



2次元分散データの出力
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



2次元分散データの出力
西端プロセスによる出力

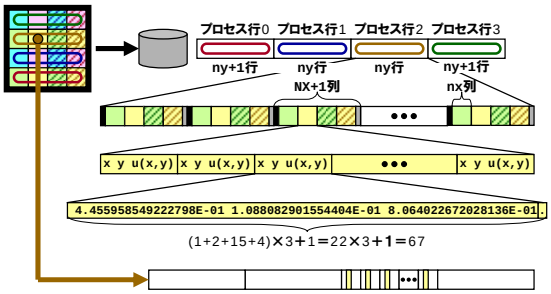
- プロセス配列1行分を西端にまとめる良くない方法
  - 同じ行のプロセスからなる communicator 生成

  - 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);
```


2次元分散データの出力
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



2次元分散データの出力
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)
    (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, int 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)

2次元分散データの出力
個別出力:ファイルの open/close (2/2)

- C の例

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

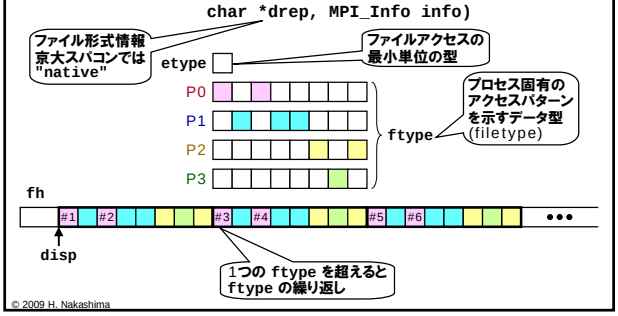
(書込み&存在しなければ生成)
(特にヒントはなし)
(存在した場合初期サイズを0にしないと元より小さいファイルになった場合にゴミが残る)

- Fortran の例

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

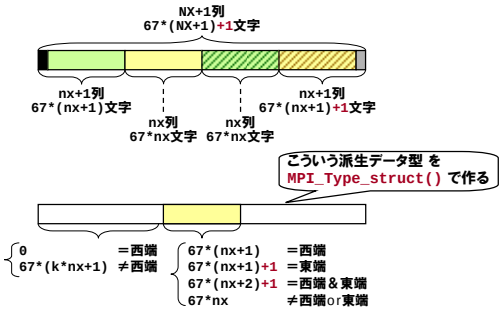

2次元分散データの出力
個別出力:個別書込みパターンの設定

- 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)



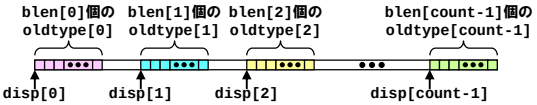
2次元分散データの出力
個別出力:filetype の生成 (1/7)

- k 列目のプロセスの配列1行分のアクセスパターン

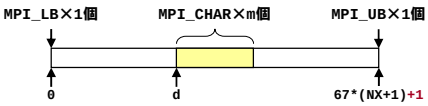


2次元分散データの出力
個別出力:filetype の生成 (2/7)

- MPI_Type_struct(int count, int *blen,
  MPI_Aint *disp, MPI_Datatype *oldtype,
  MPI_Datatype *newtype)



- MPI_LB:派生型の下端を定めるための仮想データ型
  MPI_UB:派生方の上端を定めるための仮想データ型



2次元分散データの出力
個別出力:filetype の生成 (3/7)

- C の例

```
#define LW 67
...
MPI_Datatype rtype;
MPI_Aint disp[3]; int blen[3];
MPI_Datatype types[3]={MPI_LB,MPI_CHAR,MPI_UB};
...
MPI_Dims_create(np,2,dims);
MPI_Cart_coords(cart,me,2,c);
...
disp[0]=0;  disp[2]=LW*(NX+1)+1;
disp[1]=(c[1]==0) ? 0 : LW*(c[1]*nx+1);
blen[0]=blen[2]=1;
blen[1]=LW*nx;
if(c[1]==0) blen[1]+=LW;
if(c[1]==dims[1]-1) blen[1]+=LW+1;
MPI_Type_struct(3,blen,disp,types,&rtype);
```

両方とも成立することがある

2次元分散データの出力
個別出力:filetype の生成 (4/7)

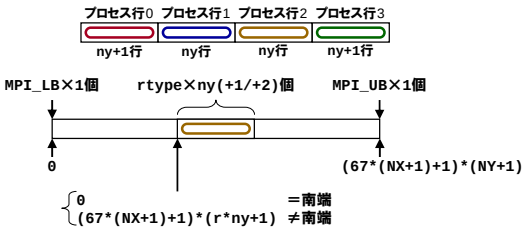
- Fortran の例

```
integer,parameter::LW=67
integer::rtype;
integer::disp(3),blen(3)
integer::types(3)=&
        (/MPI_LB,MPI_CHARACTER,MPI_UB/)
...
call MPI_Dims_create(np,2,dims,err)
call MPI_Cart_coords(cart,me,2,c,err)
...
disp(1)=0;  disp(3)=LW*(NX+1)+1
disp(2)=0;  if (c(2)!=0) disp(2)=LW*(c(2)*nx+1)
blen(1)=1;  blen(3)=1;  blen(2)=LW*nx
if(c(2)==0) blen(2)=blen(2)+LW
if(c(2)==dims(2)-1) blen(2)=blen(2)+LW+1
call MPI_Type_struct(3,blen,disp,types,&
                     rtype,err)
```

両方とも成立することがある

2次元分散データの出力
個別出力:filetype の生成 (5/7)

- r 行目のプロセスのアクセスパターン



2次元分散データの出力
個別出力:filetype の生成 (6/7)

- C の例

```
MPI_Datatype ftype;
...
rowwidth=LW*(NX+1)+1
disp[2]=rowwidth*(NY+1);
disp[1]=(c[0]==0) ? 0 : rowwidth*(c[0]*ny+1);
blen[1]=ny;
if(c[0]==0) blen[1]++;
if(c[0]==dims[0]-1) blen[1]++;
types[1]=rtype;
MPI_Type_struct(3,blen,disp,types,&ftype);
MPI_Type_commit(&ftype);
MPI_File_set_view(udata,0,MPI_CHAR,ftype,
                  "native",MPI_INFO_NULL);
```

両方とも成立することがある

2次元分散データの出力
個別出力:filetype の生成 (7/7)

- Fortran の例

```
integer::ftype;
...
rowwidth=LW*(NX+1)+1
disp(3)=rowwidth*(NY+1)
disp(2)=0
if (c(1)!=0) disp(2)=rowwidth*(c(1)*ny+1)
blen(2)=ny
if(c(1)==0) blen(2)=ny+1
if(c(1)==dims(1)-1) blen(2)=ny+1
types(2)=rtype
call MPI_Type_struct(3,blen,disp,types,&
                     ftype,err)
call MPI_Type_commit(ftype,err)
call MPI_File_set_view(udata,0,MPI_CHARACTER,&
                ftype,"native",MPI_INFO_NULL,err)
```

両方とも成立することがある

2次元分散データの出力
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(j=...){
  for(i=...) {
    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

2次元分散データの出力
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(j=...){
  for(i=...,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);
}
```


2次元分散データの出力
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 j=...;  k=1
  do i=...
    write(wbuf(k:k+LW-1),'(...)')...,u(...);  k=k+LW
  end do
  if(eastmost) then
    write(wbuf(k:k+LW),'(.../)')...,u(...)
    call MPI_File_write(udata,wbuf,k+LW,MPI_CHAR,st,err);
  else
    call MPI_File_write(udata,wbuf,k-1,MPI_CHAR,st,err);
end do
end subroutine
```


2次元分散データの出力
個別出力:まとめ (1/2)

- Cのまとめ

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


2次元分散データの出力
個別出力:まとめ (2/2)

- Fortran のまとめ

```
integer::udata,rtype,ftype
...
call MPI_File_open(udata,...)
call MPI_File_set_size(udata,0,err)
/* rtype の生成 */
/* ftype の生成 */
call MPI_Type_commit(ftype,err)
call MPI_File_set_view(udata,...,ftype,...)
do j=...
  do i=...
    ...
  end do
  call print_u(u,...,LW*(nx+2)+1,c(1)==dims(1)-1)
end do
MPI_File_close(&udata);
```