課題S1解説

2011年夏季集中講義

中島研吾

並列計算プログラミング（616-2057）・先端計算機演習I（616-4009）

課題S1（1/2）

- 内容
  - 「<$T-S1>/a1.0～a1.3」,「 <$T-S1>/a2.0～a2.3 」から局所ベクトル情報を読み込み，全体ベクトルのノルム（||x||）を求めるプログラムを作成する（S1-1）。
    - <$T-S1>file.f, <$T-S1>file2.fをそれぞれ参考にする。
  - 「<$T-S1>/a2.0~a2.3」から局所ベクトル情報を読み込み,「全体ベクトル」情報を各プロセッサに生成するプログラムを作成する。MPI_Allgathervを使用する（S1-2）。

課題S1（2/2）

- 内容（続き）
  - 下記の数値積分の結果を台形公式によって求めるプログラムを作成する。MPI_Reduce，MPI_Bcast等を使用して並列化を実施し，プロセッサ数を変化させた場合の計算時間を測定する（S1-3）。

$$\int_0^1 \frac{4}{1+x^2}\,dx$$

ファイルコピー

```
>$ cd <$T-EPS> 各自作成したディレクトリ

FORTRAN
>$ cp /home/t00000/EPSsummer/F/s1r-f.tar .
>$ tar xvf s1r-f.tar

C
>$ cp /home/t00000/EPSsummer/C/s1r-c.tar .
>$ tar xvf s1r-c.tar

直下に「/S1-ref」というディレクトリができている。
<$T-EPS>/S1-refを<$T-S1R>と呼ぶ。
```

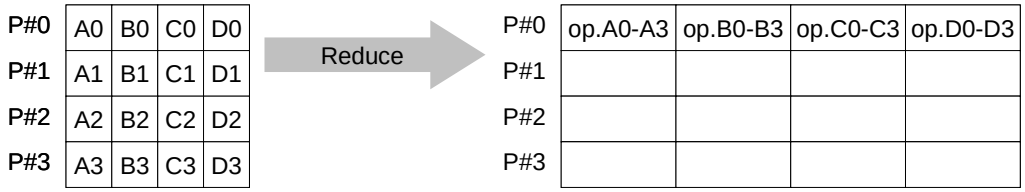
S1-1：局所ベクトル読み込み，ノルム計算

- 「<$T-S1>/a1.0～a1.3」，「 <$T-S1>/a2.0～a2.3 」から局所ベクトル情報を読み込み，全体ベクトルのノルム（||x||）を求めるプログラムを作成する（S1-1）。

- MPI_Allreduce（またはMPI_Reduce）の利用

- ワンポイントアドバイス
  - 変数の中身を逐一確認しよう！

MPI_REDUCE



- コミュニケーター「comm」内の，各プロセスの送信バッファ「sendbuf」について，演算「op」を実施し，その結果を1つの受信プロセス「root」の受信バッファ「recbuf」に格納する。
  - 総和，積，最大，最小 他

- **call MPI_REDUCE (sendbuf,recvbuf,count,datatype,op,root,comm,ierr)**
  - **sendbuf** 任意 I 送信バッファの先頭アドレス，
  - **recvbuf** 任意 O 受信バッファの先頭アドレス，
    タイプは「datatype」により決定
  - **count** 整数 I メッセージのサイズ
  - **datatype** 整数 I メッセージのデータタイプ

    ```
    FORTRAN  MPI_INTEGER, MPI_REAL, MPI_DOUBLE_PRECISION, MPI_CHARACTER etc.
    C        MPI_INT, MPI_FLOAT, MPI_DOUBLE, MPI_CHAR etc
    ```

  - **op** 整数 I 計算の種類

    ```
    MPI_MAX, MPI_MIN, MPI_SUM, MPI_PROD, MPI_LAND, MPI_BAND etc
    ```

    ユーザーによる定義も可能： MPI_OP_CREATE
  - **root** 整数 I 受信元プロセスのID（ランク）
  - **comm** 整数 I コミュニケータを指定する
  - **ierr** 整数 O 完了コード

送信バッファと受信バッファ

- MPIでは「送信バッファ」,「受信バッファ」という変数がしばしば登場する。

- 送信バッファと受信バッファは必ずしも異なった名称の配列である必要はないが，必ずアドレスが異なっていなければならない。

MPI_Reduce/Allreduceの “op”

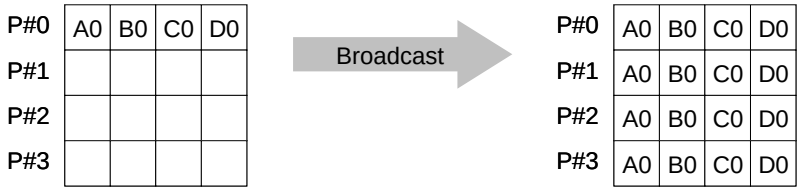
```
call MPI_REDUCE
(sendbuf,recvbuf,count,datatype,op,root,comm,ierr)
```

- **MPI_MAX**, **MPI_MIN**　最大値，最小値
- **MPI_SUM**, **MPI_PROD**　総和，積
- **MPI_LAND**　論理AND

```
real(kind=8):: X0, X1

call MPI_REDUCE
(X0, X1, 1, MPI_DOUBLE_PRECISION, MPI_MAX, 0, <comm>, ierr)
```

```
real(kind=8):: X0(4), XMAX(4)

call MPI_REDUCE
(X0, XMAX, 4, MPI_DOUBLE_PRECISION, MPI_MAX, 0, <comm>, ierr)
```

MPI_BCAST



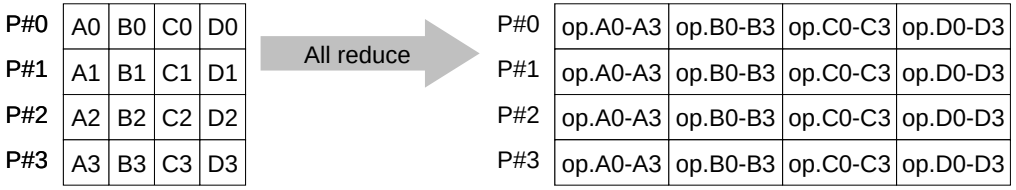
- コミュニケーター「comm」内の一つの送信元プロセス「root」のバッファ「buffer」から，その他全てのプロセスのバッファ「buffer」にメッセージを送信。

- **call MPI_BCAST (buffer,count,datatype,root,comm,ierr)**
  - **buffer** 任意 I/O バッファの先頭アドレス，
    タイプは「datatype」により決定
  - **count** 整数 I メッセージのサイズ
  - **datatype** 整数 I メッセージのデータタイプ

    FORTRAN MPI_INTEGER, MPI_REAL, MPI_DOUBLE_PRECISION, MPI_CHARACTER etc.

    C MPI_INT, MPI_FLOAT, MPI_DOUBLE, MPI_CHAR etc.
  - **root** 整数 I 送信元プロセスのID（ランク）
  - **comm** 整数 I コミュニケータを指定する
  - **ierr** 整数 O 完了コード

MPI_ALLREDUCE



- MPI_REDUCE + MPI_BCAST
- 総和，最大値を計算したら，各プロセスで利用したい場合が多い

- **call MPI_ALLREDUCE (sendbuf,recvbuf,count,datatype,op, comm,ierr)**
  - **sendbuf** 任意 I 送信バッファの先頭アドレス，
  - **recvbuf** 任意 O 受信バッファの先頭アドレス，
    タイプは「datatype」により決定
  - **count** 整数 I メッセージのサイズ
  - **datatype** 整数 I メッセージのデータタイプ
  - **op** 整数 I 計算の種類
  - **comm** 整数 I コミュニケータを指定する
  - **ierr** 整数 O 完了コード

S1-1：局所ベクトル読み込み，ノルム計算

均一長さベクトルの場合（a1.*）：s1-1-for_a1.f/c

```
implicit REAL*8 (A-H,O-Z)
include 'mpif.h'
integer :: PETOT, my_rank, SOLVER_COMM, ierr
real(kind=8), dimension(8) :: VEC
character(len=80)          :: filename

call MPI_INIT      (ierr)
call MPI_COMM_SIZE (MPI_COMM_WORLD, PETOT, ierr )
call MPI_COMM_RANK (MPI_COMM_WORLD, my_rank, ierr )

if (my_rank.eq.0) filename= 'a1.0'
if (my_rank.eq.1) filename= 'a1.1'
if (my_rank.eq.2) filename= 'a1.2'
if (my_rank.eq.3) filename= 'a1.3'

N=8

open (21, file= filename, status= 'unknown')
do i= 1, N
  read (21,*) VEC(i)
enddo

sum0= 0.d0
do i= 1, N
  sum0= sum0 + VEC(i)**2
enddo

call MPI_allREDUCE (sum0, sum,  1, MPI_DOUBLE_PRECISION, MPI_SUM, MPI_COMM_WORLD, ierr)
sum= dsqrt(sum)

if (my_rank.eq.0) write (*,'(1pe16.6)') sum

call MPI_FINALIZE (ierr)
stop
end
```

write(filename,'(a,i1.1)') 'a1.', my_rank

中身を書き出して見よう

call MPI_Allreduce
(sendbuf,recvbuf,count,datatype,op, comm,ierr)

S1-1：局所ベクトル読み込み，ノルム計算

不均一長さベクトルの場合（a2.*）：s1-1-for_a2.f/c

```
implicit REAL*8 (A-H,O-Z)
include 'mpif.h'
integer :: PETOT, my_rank, SOLVER_COMM, ierr
real(kind=8), dimension(:), allocatable :: VEC, VEC2
character(len=80)          :: filename

call MPI_INIT      (ierr)
call MPI_COMM_SIZE (MPI_COMM_WORLD, PETOT, ierr )
call MPI_COMM_RANK (MPI_COMM_WORLD, my_rank, ierr )

if (my_rank.eq.0) filename= 'a2.0'
if (my_rank.eq.1) filename= 'a2.1'
if (my_rank.eq.2) filename= 'a2.2'
if (my_rank.eq.3) filename= 'a2.3'

open (21, file= filename, status= 'unknown')
  read (21,*) N
  allocate (VEC(N))
  do i= 1, N
    read (21,*) VEC(i)
  enddo

sum0= 0.d0
do i= 1, N
  sum0= sum0 + VEC(i)**2
enddo

call MPI_allREDUCE (sum0, sum,  1, MPI_DOUBLE_PRECISION, MPI_SUM, MPI_COMM_WORLD, ierr)
sum= dsqrt(sum)

if (my_rank.eq.0) write (*,'(1pe16.6)') sum

call MPI_FINALIZE (ierr)
stop
end
```

中身を書き出して見よう

```
call MPI_Allreduce
(sendbuf,recvbuf,count,datatype,op, comm,ierr)
```

S1-1

実 行（課題S1-1）

FORTRAN

```
$ cd <$T-S1r>
$ mpif90 –Oss -noparallel s1-1-for_a1.f
$ mpif90 –Oss -noparallel s1-1-for_a2.f
$ バッチ処理実行（4プロセス）
```

C

```
$ cd <$T-S1r>
$ mpicc -Os –noparallel s1-1-for_a1.c
$ mpicc -Os –noparallel s1-1-for_a2.c
$バッチ処理実行（4プロセス）
```

S1-1：局所ベクトル読み込み，ノルム計算
計算結果

予め求めておいた答え

```
a1.* 1.6208824756903259000E+03
a2.* 1.2221849287239636000E+03
```

$> ./chk-a1
$> ./chk-a2
“a1x.all”, “a2x.all”に全体データが入っています
“dot-a1.f”, “dot-a2.f”にソースコード

計算結果

```
a1.* 1.6208824756903259000E+03
a2.* 1.2221849287239636000E+03
```

S1-1：局所ベクトル読み込み，ノルム計算

SENDBUFとRECVBUFを同じにしたら・・・

正
```
call MPI_allREDUCE(sum0, sum, 1, MPI_DOUBLE_PRECISION,
                   MPI_SUM, MPI_COMM_WORLD,  ierr)
```

誤
```
call MPI_allREDUCE(sum0, sum0, 1, MPI_DOUBLE_PRECISION,
                   MPI_SUM, MPI_COMM_WORLD,  ierr)
```

S1-1：局所ベクトル読み込み，ノルム計算

SENDBUFとRECVBUFを同じにしたら・・・

正
```
call MPI_allREDUCE(sum0, sum, 1, MPI_DOUBLE_PRECISION,
                   MPI_SUM, MPI_COMM_WORLD,  ierr)
```

誤
```
call MPI_allREDUCE(sum0, sum0, 1, MPI_DOUBLE_PRECISION,
                      MPI_SUM, MPI_COMM_WORLD,  ierr)
```

正
```
call MPI_allREDUCE(sumK(1), sumK(2), 1, MPI_DOUBLE_PRECISION,
                      MPI_SUM, MPI_COMM_WORLD,  ierr)
```

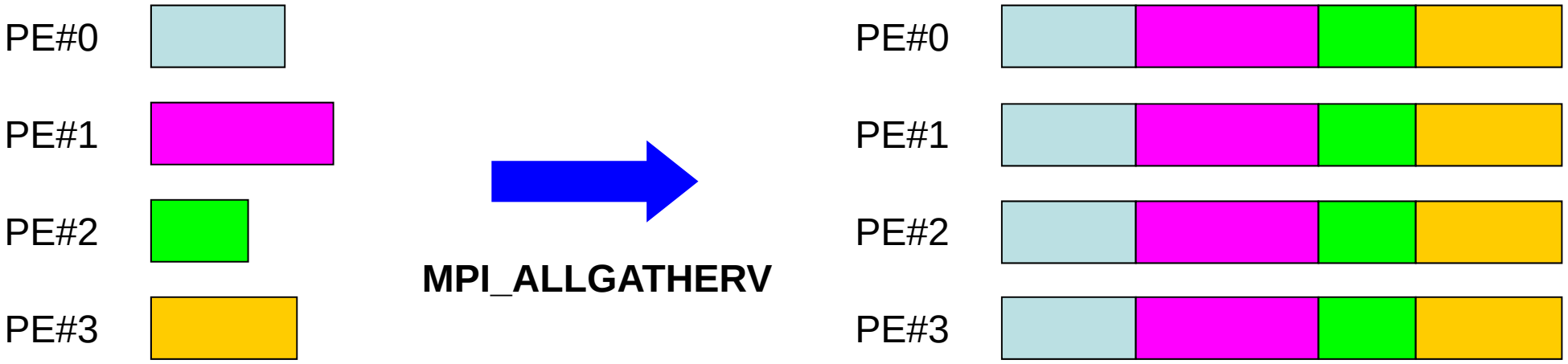
これバッファが重なっていないのでOK

S1-2：局所ベクトルから全体ベクトル生成

- 「<$T-S1>/a2.0~a2.3」から局所ベクトル情報を読み込み，「全体ベクトル」情報を各プロセッサに生成するプログラムを作成する。MPI_Allgathervを使用する。

S1-2：局所ベクトルから全体ベクトル生成

ALLGATHERVを使う場合（1/5）



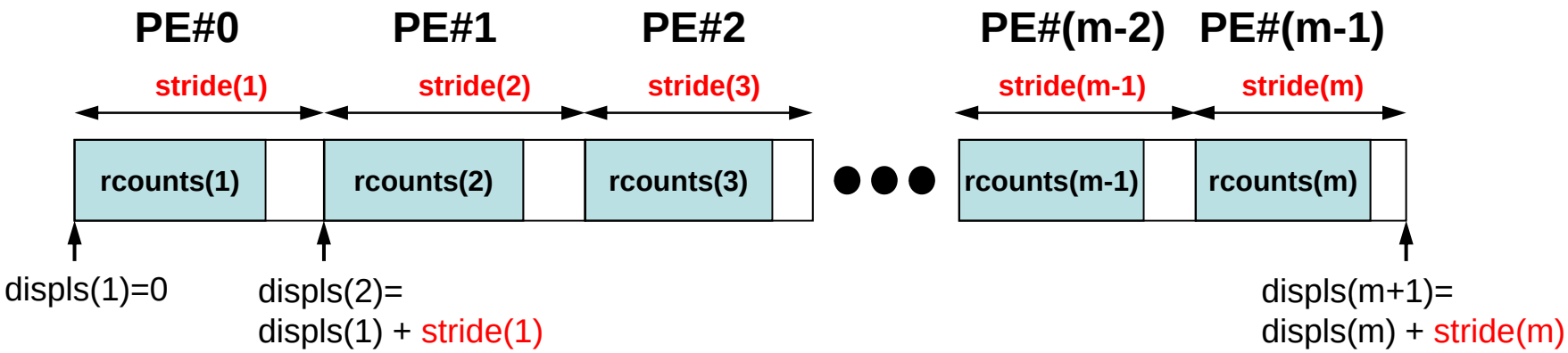
MPI_ALLGATHERV

- MPI_ALLGATHER の可変長さベクトル版
  - 「局所データ」から「全体データ」を生成する

- **call MPI_ALLGATHERV (sendbuf, scount, sendtype, recvbuf, rcounts, displs, recvtype, comm, ierr)**
  - sendbuf 任意 I 送信バッファの先頭アドレス,
  - scount 整数 I 送信メッセージのサイズ
  - sendtype 整数 I 送信メッセージのデータタイプ
  - recvbuf 任意 O 受信バッファの先頭アドレス,
  - **rcounts 整数 I 受信メッセージのサイズ（配列：サイズ＝PETOT）**
  - **displs 整数 I 受信メッセージのインデックス（配列：サイズ＝PETOT+1）**
  - recvtype 整数 I 受信メッセージのデータタイプ
  - comm 整数 I コミュニケータを指定する
  - ierr 整数 O 完了コード

MPI_ALLGATHERV（続き）

- **call MPI_ALLGATHERV (sendbuf, scount, sendtype, recvbuf, rcounts, displs, recvtype, comm, ierr)**
  - **rcounts　整数 I 受信メッセージのサイズ（配列：サイズ＝PETOT）**
  - **displs　整数 I 受信メッセージのインデックス（配列：サイズ＝PETOT+1）**
  - **この2つの配列は，最終的に生成される「全体データ」のサイズに関する配列であるため，各プロセスで配列の全ての値が必要になる：**
    - **もちろん各プロセスで共通の値を持つ必要がある。**
  - **通常はstride(i)=rcounts(i)**

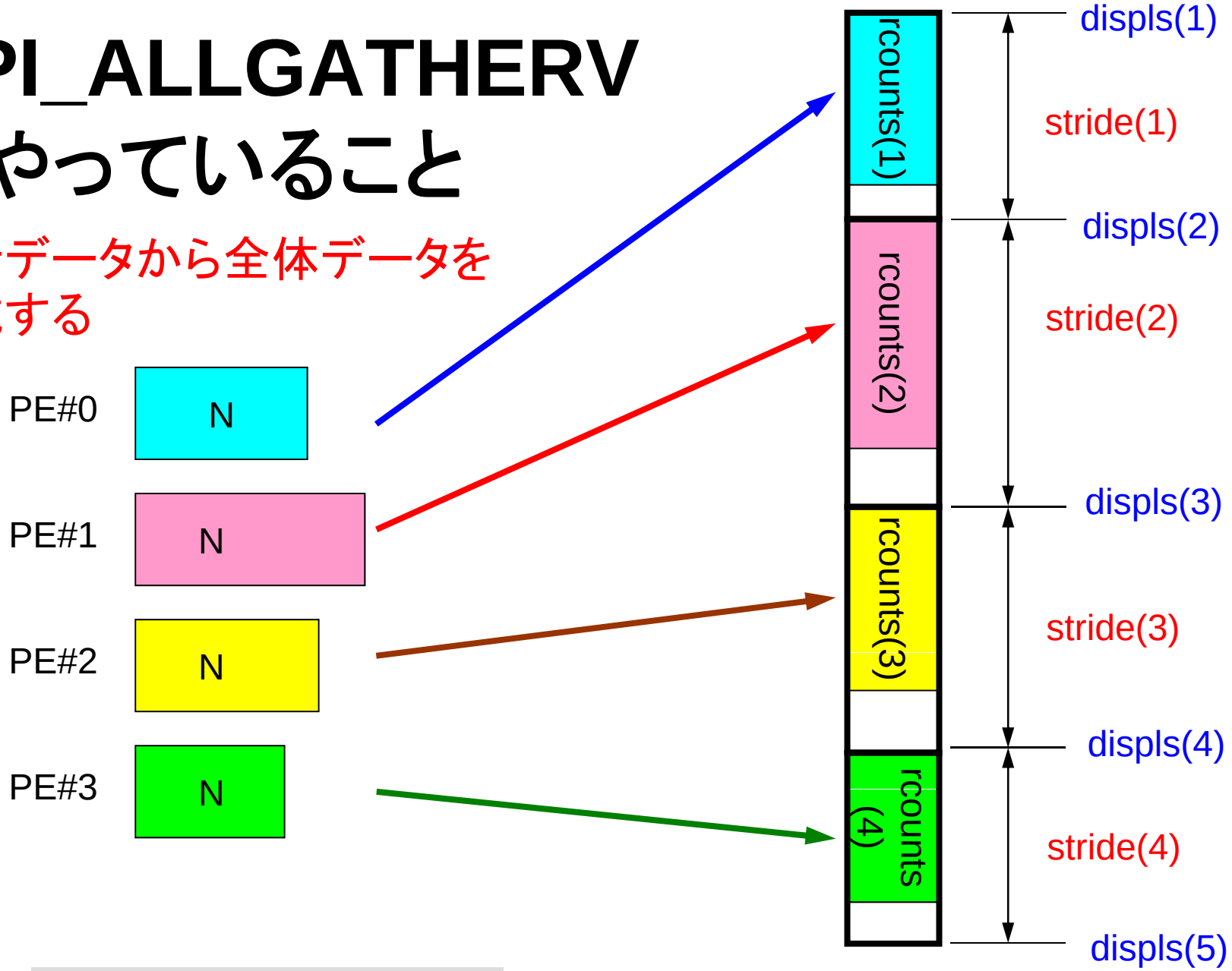


size(recvbuf)= displs(PETOT+1)= sum(stride)

S1-2

MPI_ALLGATHERV でやっていること

局所データから全体データを生成する



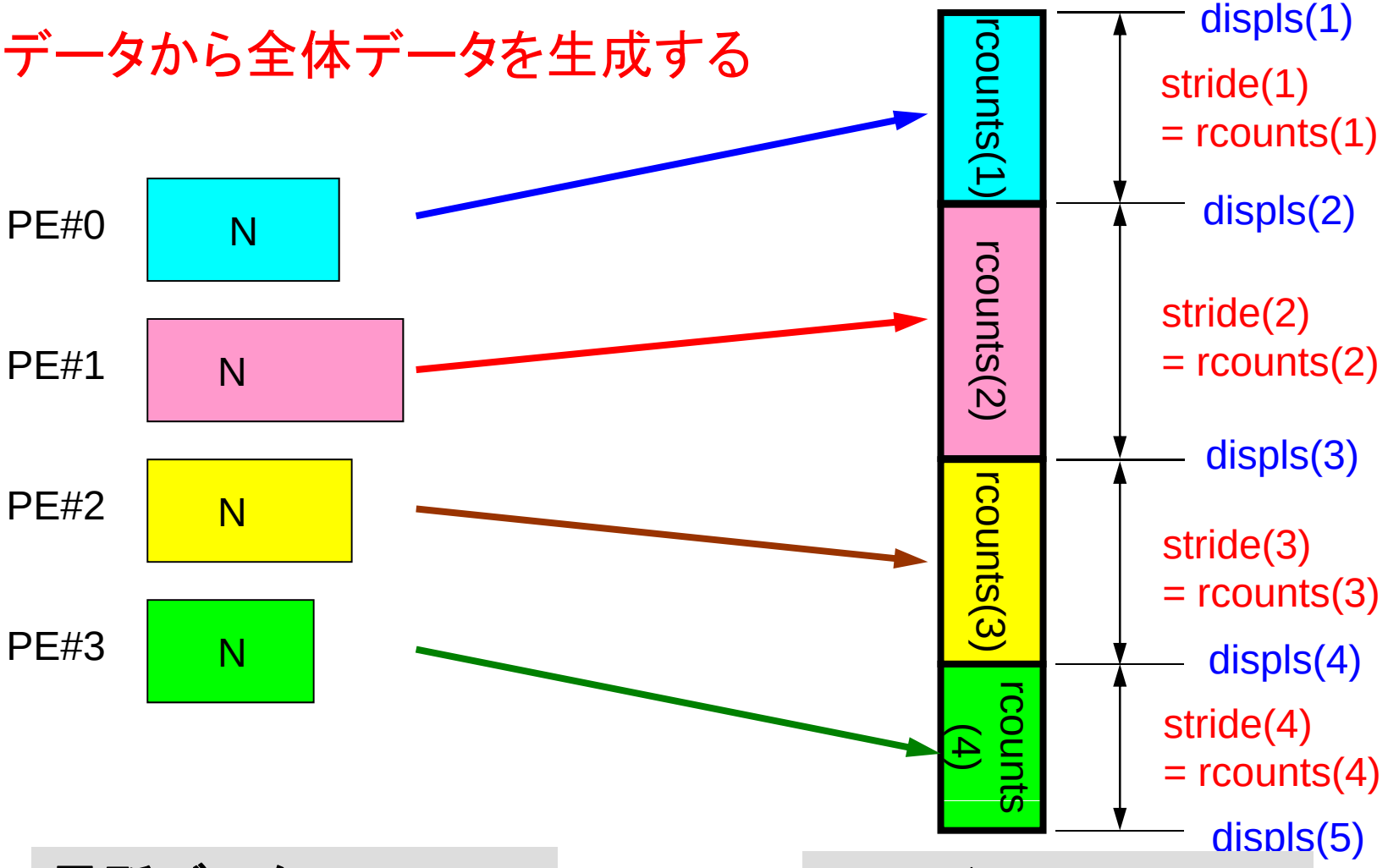
局所データ：sendbuf

全体データ：recvbuf

S1-2

MPI_ALLGATHERV でやっていること

局所データから全体データを生成する



局所データ：sendbuf

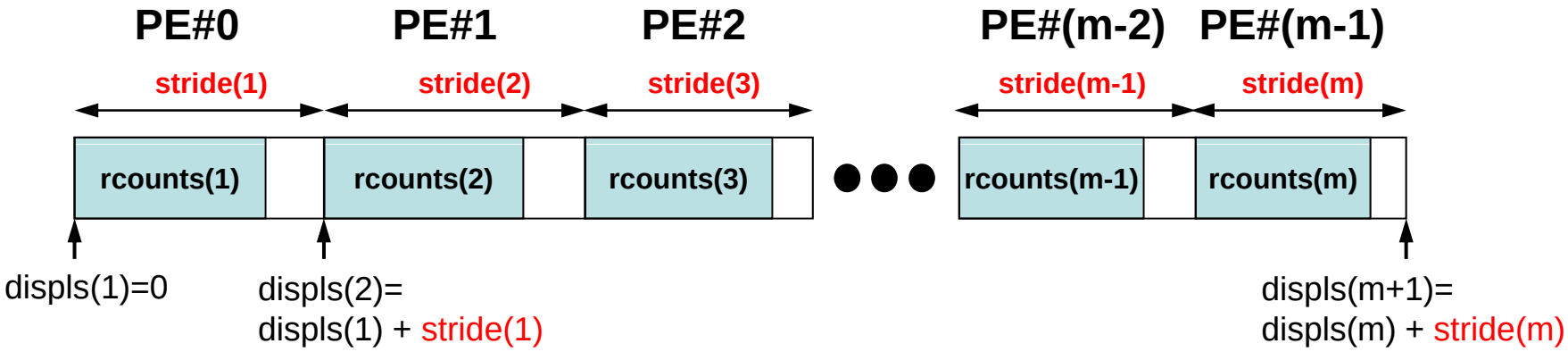
全体データ：recvbuf

S1-2

MPI_ALLGATHERV詳細(1/2)

- `call MPI_ALLGATHERV (sendbuf, scount, sendtype, recvbuf, rcounts, displs, recvtype, comm, ierr)`
  - `rcounts` 整数 I 受信メッセージのサイズ(配列:サイズ=PETOT)
  - `displs` 整数 I 受信メッセージのインデックス(配列:サイズ=PETOT+1)

- `rcounts`
  - 各PEにおけるメッセージサイズ:局所データのサイズ
- `displs`
  - 各局所データの全体データにおけるインデックス
  - `displs(PETOT+1)`が全体データのサイズ

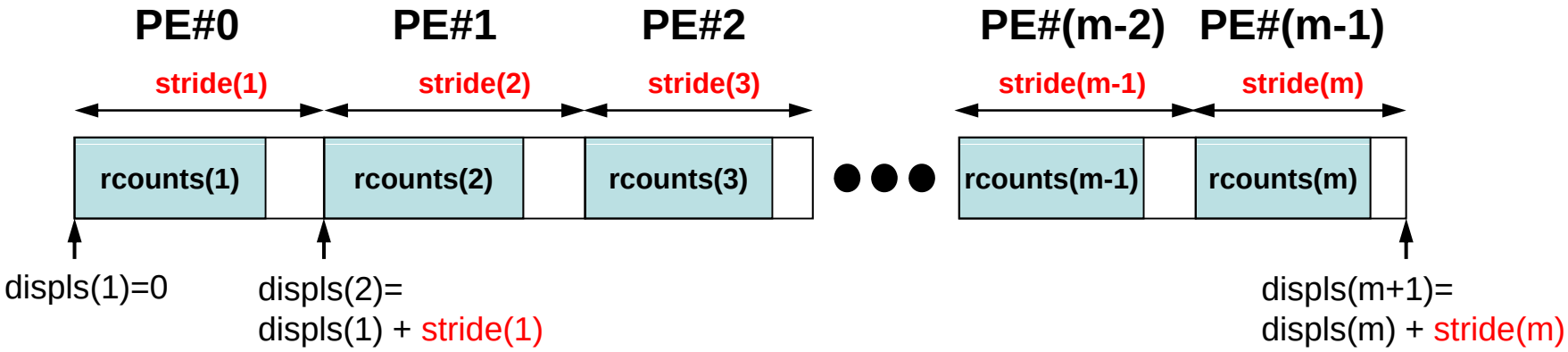


size(recvbuf)= displs(PETOT+1)= sum(stride)

S1-2

MPI_ALLGATHERV詳細(2/2)

- rcountsとdisplsは各プロセスで共通の値が必要
  - 各プロセスのベクトルの大きさ N をallgatherして，rcountsに相当するベクトルを作る。
  - rcountsから各プロセスにおいてdisplsを作る(同じものができる)。
    - stride(i)= rcounts(i) とする
  - rcountsの和にしたがってrecvbufの記憶領域を確保する。



size(recvbuf)= displs(PETOT+1)= sum(stride)

S1-2

MPI_ALLGATHERV使用準備 例題：<$T-S1>/agv.f，<$T-S1>/agv.c

- “a2.0”~”a2.3”から，全体ベクトルを生成する。
- 各ファイルのベクトルのサイズが，8,5,7,3であるから，長さ23（=8+5+7+3）のベクトルができることになる。

a2.0~a2.3

PE#0

```
  8
101.0
103.0
105.0
106.0
109.0
111.0
121.0
151.0
```

PE#1

```
  5
201.0
203.0
205.0
206.0
209.0
```

PE#2

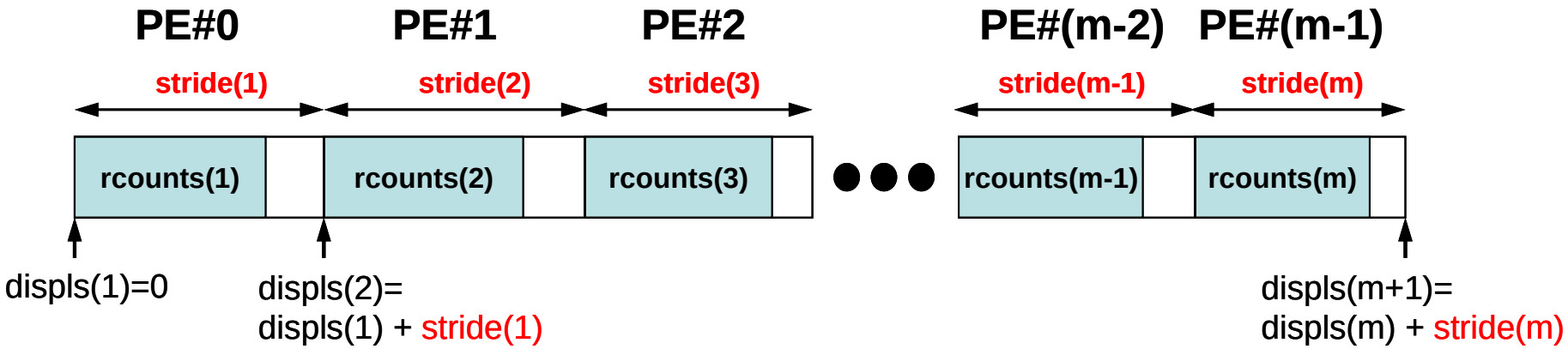
```
  7
301.0
303.0
305.0
306.0
311.0
321.0
351.0
```

PE#3

```
  3
401.0
403.0
405.0
```

S1-2

S1-2：局所⇒全体ベクトル生成：手順



size(recvbuf)= displs(PETOT+1)= sum(stride)

- 局所ベクトル情報を読み込む
- 「rcounts」，「displs」を作成する
- 「recvbuf」を準備する
- ALLGATHERV

S1-2：局所⇒全体ベクトル生成（1/2）
s1-2.f/c

```
  implicit REAL*8 (A-H,O-Z)
  include 'mpif.h'
  integer :: PETOT, my_rank, SOLVER_COMM, ierr
  real(kind=8), dimension(:), allocatable :: VEC, VEC2, VECg
  integer (kind=4), dimension(:), allocatable :: COUNT, COUNTindex
  character(len=80)           :: filename

  call MPI_INIT      (ierr)
  call MPI_COMM_SIZE (MPI_COMM_WORLD, PETOT, ierr )
  call MPI_COMM_RANK (MPI_COMM_WORLD, my_rank, ierr )


  if (my_rank.eq.0) filename= 'a2.0'
  if (my_rank.eq.1) filename= 'a2.1'
  if (my_rank.eq.2) filename= 'a2.2'
  if (my_rank.eq.3) filename= 'a2.3'

  open (21, file= filename, status= 'unknown')
    read (21,*) N
    allocate (VEC(N))
    do i= 1, N
      read (21,*) VEC(i)
    enddo

  allocate (COUNT(PETOT), COUNTindex(PETOT+1))
  call MPI_allGATHER ( N    , 1, MPI_INTEGER,
&                      COUNT, 1, MPI_INTEGER,
&                      MPI_COMM_WORLD, ierr)
  COUNTindex(1)= 0

  do ip= 1, PETOT
    COUNTindex(ip+1)= COUNTindex(ip) + COUNT(ip)
  enddo
```

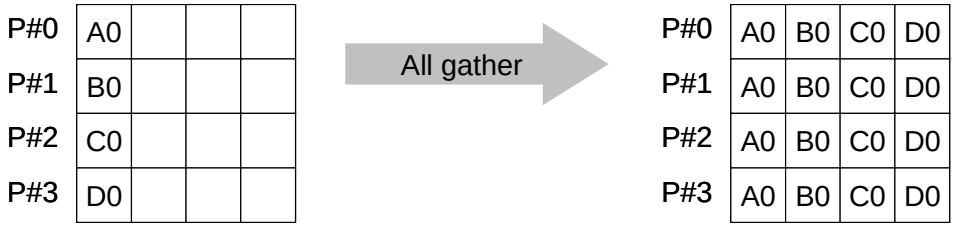
中身を書き出して見よう

各PEにおけるベクトル長さの情報が「COUNT」に入る（「rcounts」）

中身を書き出して見よう

S1-2

MPI_ALLGATHER



- MPI_GATHER＋MPI_BCAST

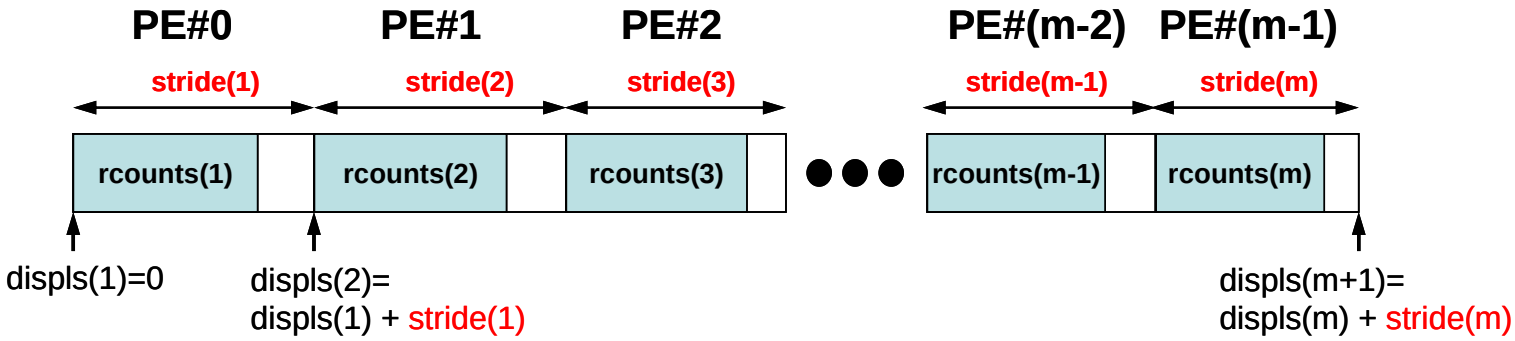
- **call MPI_ALLGATHER (sendbuf, scount, sendtype, recvbuf, rcount, recvtype, comm, ierr)**
  - sendbuf 任意 I 送信バッファの先頭アドレス，
  - scount 整数 I 送信メッセージのサイズ
  - sendtype 整数 I 送信メッセージのデータタイプ
  - recvbuf 任意 O 受信バッファの先頭アドレス，
  - rcount 整数 I 受信メッセージのサイズ
  - recvtype 整数 I 受信メッセージのデータタイプ
  - comm 整数 I コミュニケータを指定する
  - ierr 整数 O 完了コード

S1-2

S1-2：局所⇒全体ベクトル生成（2/2）
s1-2.f/c

```
  do ip= 1, PETOT
    COUNTindex(ip+1)= COUNTindex(ip) + COUNT(ip)
  enddo

  allocate (VECg(COUNTindex(PETOT+1)))
  VECg= 0.d0

  call MPI_allGATHERv                                              &
&     ( VEC , N, MPI_DOUBLE_PRECISION,                             &
&       VECg, COUNT, COUNTindex, MPI_DOUBLE_PRECISION,             &
&       MPI_COMM_WORLD, ierr)

  do i= 1, COUNTindex(PETOT+1)
    write (*,'(2i8,f10.0)') my_rank, i, VECg(i)
  enddo

  call MPI_FINALIZE (ierr)

  stop
  end
```

「displs」に相当するものを生成。

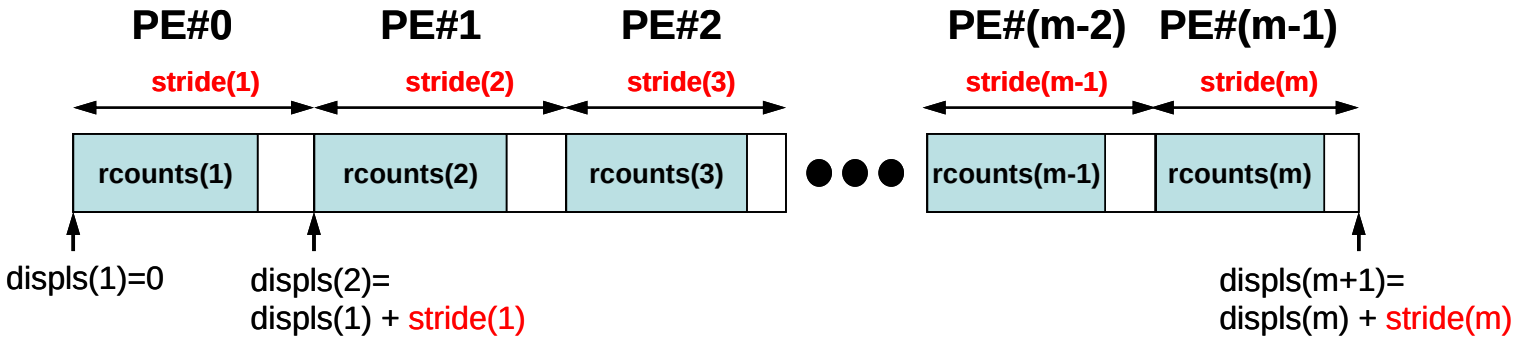


size(recvbuf)= displs(PETOT+1)= sum(stride)

S1-2：局所⇒全体ベクトル生成（2/2）
s1-2.f/c

```
  do ip= 1, PETOT
    COUNTindex(ip+1)= COUNTindex(ip) + COUNT(ip)
  enddo

  allocate (VECg(COUNTindex(PETOT+1)))
  VECg= 0.d0

  call MPI_allGATHERv                                                  &
&     ( VEC , N, MPI_DOUBLE_PRECISION,                                 &
&       VECg, COUNT, COUNTindex, MPI_DOUBLE_PRECISION,                 &
&       MPI_COMM_WORLD, ierr)

  do i= 1, COUNTindex(PETOT+1)
    write (*,'(2i8,f10.0)') my_rank, i, VECg(i)
  enddo

  call MPI_FINALIZE (ierr)

  stop
  end
```

「recbuf」のサイズ

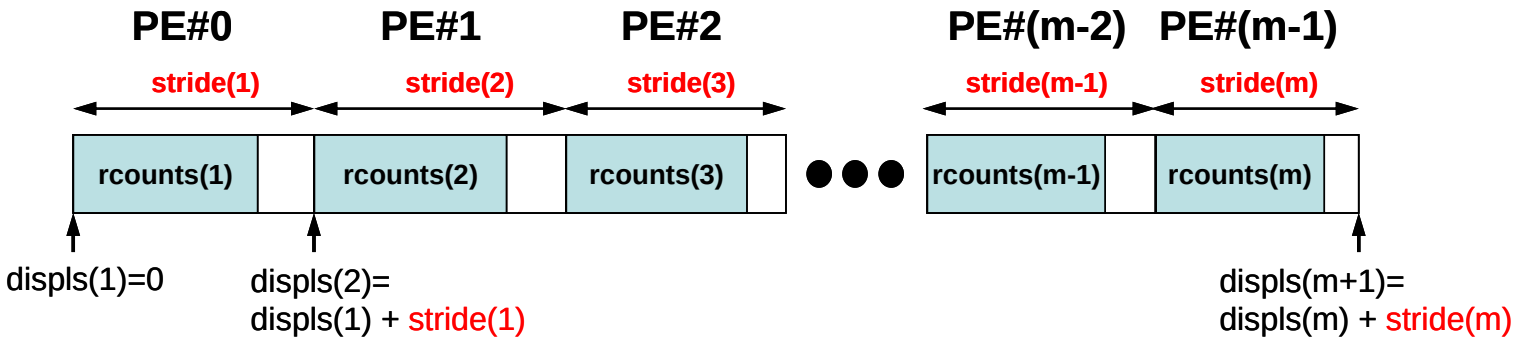


size(recvbuf)= displs(PETOT+1)= sum(stride)

S1-2：局所⇒全体ベクトル生成（2/2）
s1-2.f/c

```
  do ip= 1, PETOT
    COUNTindex(ip+1)= COUNTindex(ip) + COUNT(ip)
  enddo

  allocate (VECg(COUNTindex(PETOT+1)))
  VECg= 0.d0

  call MPI_allGATHERv                                              &
 &    ( VEC , N, MPI_DOUBLE_PRECISION,                             &
 &      VECg, COUNT, COUNTindex, MPI_DOUBLE_PRECISION,             &
 &      MPI_COMM_WORLD, ierr)

  do i= 1, COUNTindex(PETOT+1)
    write (*,'(2i8,f10.0)') my_rank, i, VECg(i)
  enddo

  call MPI_FINALIZE (ierr)

  stop
  end
```

call MPI_ALLGATHERV
(sendbuf, scount, sendtype, recvbuf, rcounts, displs, recvtype, comm, ierr)



size(recvbuf)= displs(PETOT+1)= sum(stride)

実 行(課題S1-2)

FORTRAN

```
$ mpif90 –Oss -noparallel s1-2.f
$ バッチ処理実行(4プロセス)
```

C

```
$ mpicc –Os -noparallel s1-2.c
$ バッチ処理実行(4プロセス)
```

S1-2：結果

my_rank	ID	VAL
0	1	101.
0	2	103.
0	3	105.
0	4	106.
0	5	109.
0	6	111.
0	7	121.
0	8	151.
0	9	201.
0	10	203.
0	11	205.
0	12	206.
0	13	209.
0	14	301.
0	15	303.
0	16	305.
0	17	306.
0	18	311.
0	19	321.
0	20	351.
0	21	401.
0	22	403.
0	23	405.

my_rank	ID	VAL
1	1	101.
1	2	103.
1	3	105.
1	4	106.
1	5	109.
1	6	111.
1	7	121.
1	8	151.
1	9	201.
1	10	203.
1	11	205.
1	12	206.
1	13	209.
1	14	301.
1	15	303.
1	16	305.
1	17	306.
1	18	311.
1	19	321.
1	20	351.
1	21	401.
1	22	403.
1	23	405.

my_rank	ID	VAL
2	1	101.
2	2	103.
2	3	105.
2	4	106.
2	5	109.
2	6	111.
2	7	121.
2	8	151.
2	9	201.
2	10	203.
2	11	205.
2	12	206.
2	13	209.
2	14	301.
2	15	303.
2	16	305.
2	17	306.
2	18	311.
2	19	321.
2	20	351.
2	21	401.
2	22	403.
2	23	405.

my_rank	ID	VAL
3	1	101.
3	2	103.
3	3	105.
3	4	106.
3	5	109.
3	6	111.
3	7	121.
3	8	151.
3	9	201.
3	10	203.
3	11	205.
3	12	206.
3	13	209.
3	14	301.
3	15	303.
3	16	305.
3	17	306.
3	18	311.
3	19	321.
3	20	351.
3	21	401.
3	22	403.
3	23	405.

S1-2

```
  do ip= 1, PETOT
    COUNTindex(ip+1)= COUNTindex(ip) + COUNT(ip)
  enddo

  if (my_rank.eq.0) then
    allocate (VECg(COUNTindex(PETOT+1)))
    VECg= 0.d0
  endif

  call MPI_Gatherv                                                  &
 &    ( VEC , N, MPI_DOUBLE_PRECISION,                             &
 &      VECg, COUNT, COUNTindex, MPI_DOUBLE_PRECISION,             &
 &      0, MPI_COMM_WORLD, ierr)

  if (my_rank.eq.0) then
    do i= 1, COUNTindex(PETOT+1)
      write (*,'(2i8,f10.0)') my rank, i, VECg(i)
    enddo
  endif

  call MPI_FINALIZE (ierr)

  stop
  end
```

- MPI_Gathervを使って，0番プロセスだけで処理する
- 上記のように0番プロセスのみでVECgをallocateしても通った
- 実はこれまであまり考えたことが無かったのであるが（使わなくても各PEでallocateしていた），配列をreduceすることなどを考えるとこれでも大丈夫

S1-2

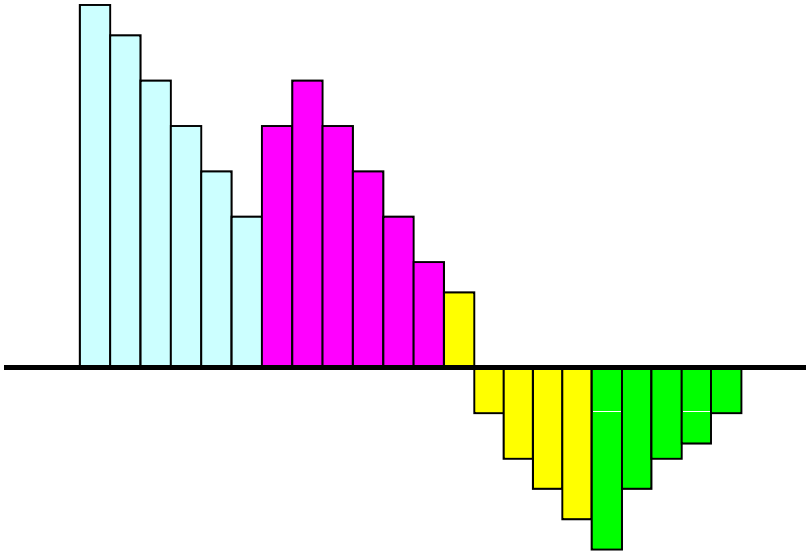
S1-3：台形則による積分

- 下記の数値積分の結果を台形公式によって求めるプログラムを作成する。MPI_REDUCE，MPI_BCASTを使用して並列化を実施し，プロセッサ数を変化させた場合の計算時間を測定する。

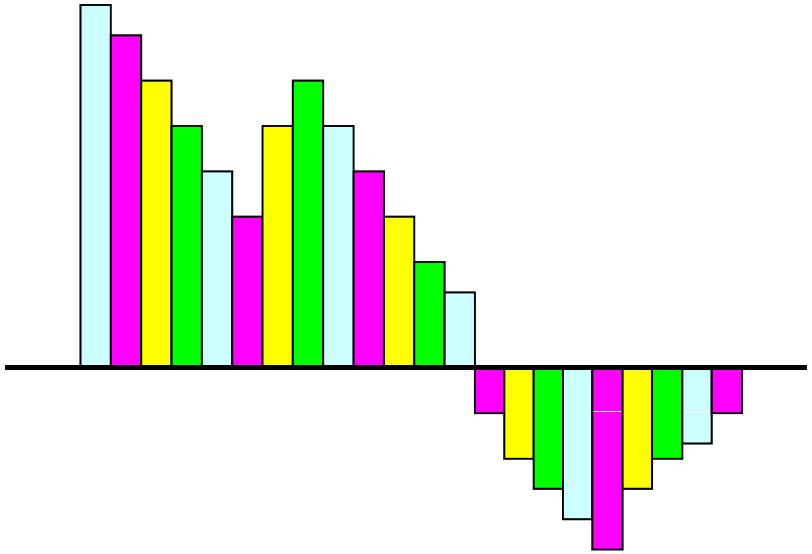
$$\int_0^1 \frac{4}{1+x^2}\,dx$$

S1-3：台形則による積分
プロセッサへの配分の手法

タイプA



タイプB



$$\frac{1}{2}\Delta x\left(f_1 + f_{N+1} + \sum_{i=2}^{N} 2 f_i \right)$$ を使うとすると必然的に「タイプA」となるが・・・

S1-3：台形則による計算
TYPE-A（1/2）：s1-3a.f/c

```
implicit REAL*8 (A-H,O-Z)
include 'mpif.h'

integer :: PETOT, my_rank, ierr, N
integer, dimension(:), allocatable :: INDEX
real (kind=8) :: dx

call MPI_INIT      (ierr)
call MPI_COMM_SIZE (MPI_COMM_WORLD, PETOT, ierr )
call MPI_COMM_RANK (MPI_COMM_WORLD, my_rank, ierr )

allocate (INDEX(0:PETOT))
INDEX= 0

if (my_rank.eq.0) then
  open (11, file='input.dat', status='unknown')
  read (11,*)  N
  close (11)
endif

call MPI_BCAST (N, 1, MPI_INTEGER, 0, MPI_COMM_WORLD, ierr)
dx= 1.d0 / dfloat(N)

nnn= N / PETOT
nr = N - PETOT * nnn

if (my_rank+1.le.nr) then
  nnn= nnn + 1
endif
```

“input.dat”で分割数Nを指定
中身を書き出して見よう:N

S1-3：台形則による計算
TYPE-A（1/2）：s1-3a.f/c

```
implicit REAL*8 (A-H,O-Z)
include 'mpif.h'

integer :: PETOT, my_rank, ierr, N
integer, dimension(:), allocatable :: INDEX
real (kind=8) :: dx

call MPI_INIT      (ierr)
call MPI_COMM_SIZE (MPI_COMM_WORLD, PETOT, ierr )
call MPI_COMM_RANK (MPI_COMM_WORLD, my_rank, ierr )

allocate (INDEX(0:PETOT))
INDEX= 0

if (my_rank.eq.0) then
  open (11, file='input.dat', status='unknown')
  read (11,*)  N
  close (11)
endif

call MPI_BCAST (N, 1, MPI_INTEGER, 0, MPI_COMM_WORLD, ierr)
dx= 1.d0 / dfloat(N)

nnn= N / PETOT
nr = N - PETOT * nnn

do ip= 1, PETOT
  if (ip.le.nr) then
    INEDX(ip)= nnn + 1
   else
    INDEX(ip)= nnn
  endif
enddo
```

各PEにおける小領域数が「nnn」（またはnnn+1）

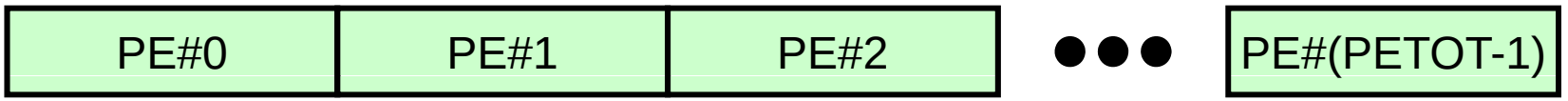
各PEで INDEX(my_rank+1) の中身を書き出して見よう:

S1-3

S1-3：台形則による計算
TYPE-A（2/2）：s1-3a.f/c

```
  do ip= 1, PETOT
    INDEX(ip)= INDEX(ip-1) + INDEX(ip)
  enddo

  Stime= MPI_WTIME()
  SUM0= 0.d0
  do i= INDEX(my_rank)+1, INDEX(my_rank+1)
    X0= dfloat(i-1) * dx
    X1= dfloat(i  ) * dx
    F0= 4.d0/(1.d0+X0*X0)
    F1= 4.d0/(1.d0+X1*X1)
    SUM0= SUM0 + 0.50d0 * ( F0 + F1 ) * dx
  enddo

  call MPI_REDUCE (SUM0, SUM, 1, MPI_DOUBLE_PRECISION, MPI_SUM, 0,  &
 &                 MPI_COMM_WORLD, ierr)
  Etime= MPI_WTIME()

  if (my_rank.eq.0) write (*,*) SUM, 4.d0*datan(1.d0), Etime-Stime

  call MPI_FINALIZE (ierr)

  stop
  end
```

中身を書き出して見よう: index

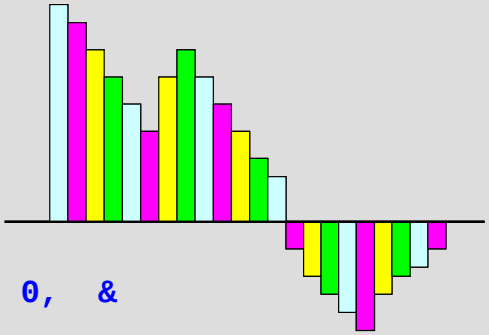


INDEX(0)+1　INDEX(1)+1　INDEX(2)+1　INDEX(3)+1　INDEX(PETOT-1)+1　INDEX(PETOT)=N

S1-3：台形則による計算

TYPE-B：s1-3b.f/c

```
implicit REAL*8 (A-H,O-Z)
include 'mpif.h'
integer :: PETOT, my_rank, ierr, N
real (kind=8) :: dx

call MPI_INIT      (ierr)
call MPI_COMM_SIZE (MPI_COMM_WORLD, PETOT, ierr )
call MPI_COMM_RANK (MPI_COMM_WORLD, my_rank, ierr )

if (my_rank.eq.0) then
  open (11, file='input.dat', status='unknown')
  read (11,*)  N
  close (11)
endif

call MPI_BCAST (N, 1, MPI_INTEGER, 0, MPI_COMM_WORLD, ierr)
dx= 1.d0 / dfloat(N)

Stime= MPI_WTIME()
SUM0= 0.d0
do i= my_rank+1, N, PETOT
  X0= dfloat(i-1) * dx
  X1= dfloat(i  ) * dx
  F0= 4.d0/(1.d0+X0*X0)
  F1= 4.d0/(1.d0+X1*X1)
  SUM0= SUM0 + 0.50d0 * ( F0 + F1 ) * dx
enddo

call MPI_REDUCE (SUM0, SUM, 1, MPI_DOUBLE_PRECISION, MPI_SUM, 0,  &
&                 MPI_COMM_WORLD, ierr)
Etime= MPI_WTIME()

if (my_rank.eq.0) write (*,*) SUM, 4.d0*datan(1.d0), Etime-Stime

call MPI_FINALIZE (ierr)
stop
end
```



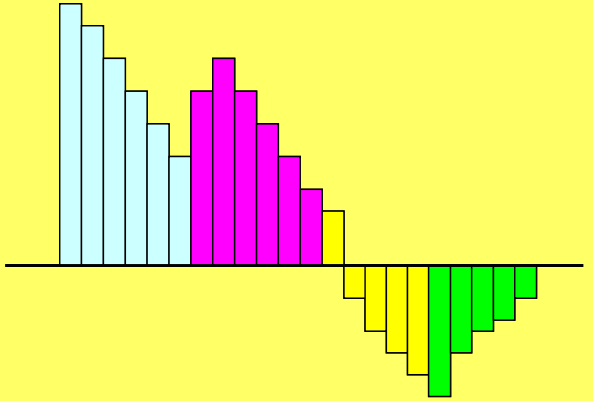
S1-3

コンパイル・実行（課題S1-3）

FORTRAN

```
$ mpif90 –Oss -noparallel s1-3a.f
$ mpif90 –Oss -noparallel s1-3b.f
$ バッチ処理実行（4プロセス）
```

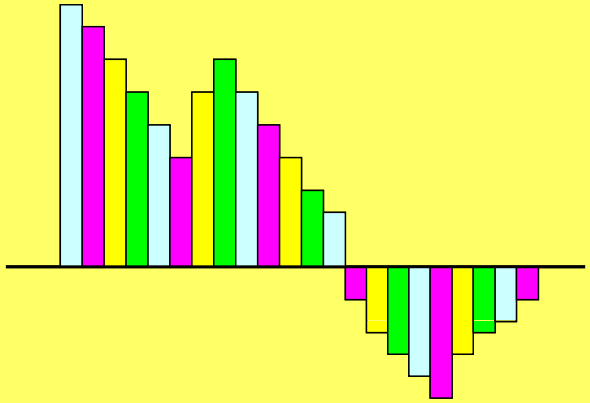
タイプA



C

```
$ mpicc –Os -noparallel s1-3a.c
$ mpicc –Os –noparallel s1-3b.c
$ バッチ処理実行（4プロセス）
```

タイプB



S1-3：台形則による計算

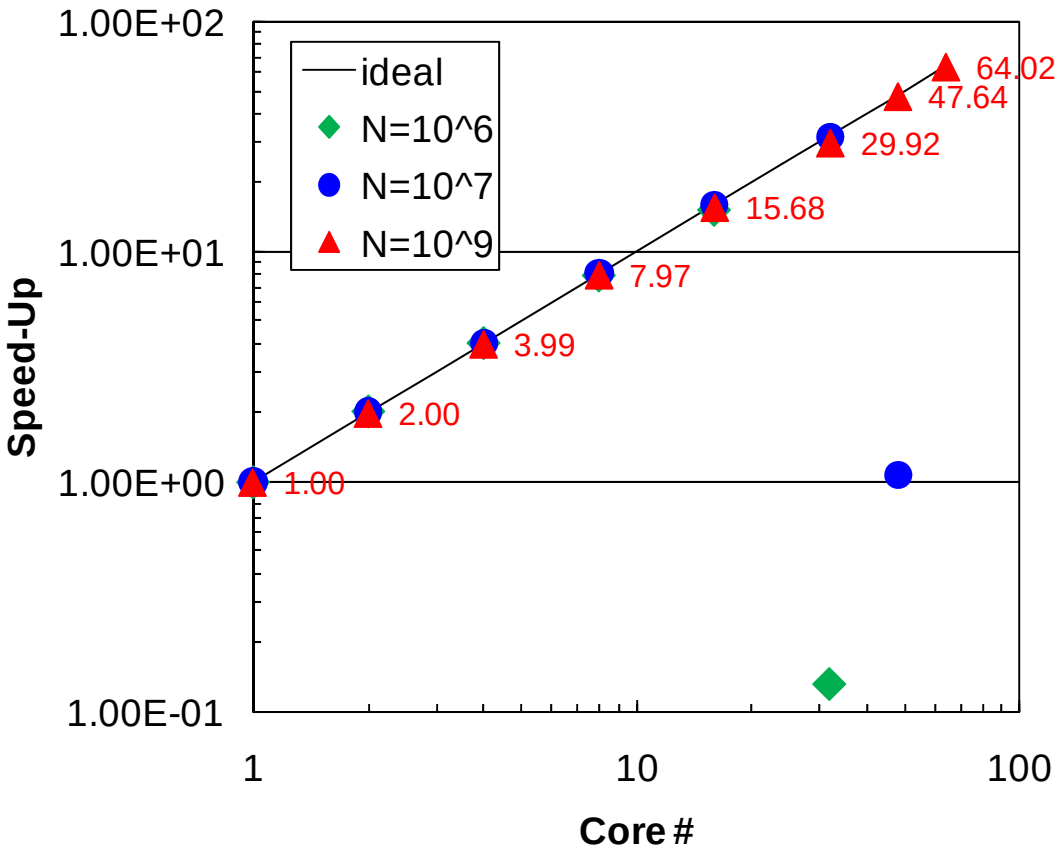
TYPE-B，PETOT=4，N=102の場合

```
do i= my_rank+1, N, PETOT
  (OPERATIONS)
enddo

my_rank=0
  do i= 1, 101, 4              i= 1, 5,  9, 13,-, 93, 97, 101
    (op)
  enddo

my_rank=1
  do i= 2, 102, 4              i= 2, 6, 10, 14,-, 94, 98, 102
    (op)
  enddo

my_rank=2
  do i= 3,  99, 4              i= 3, 7, 11, 15,-, 95, 99
    (op)
  enddo

my_rank=3
  do i= 4, 100, 4              i= 4, 8, 12, 16,-, 96, 100
    (op)
  enddo
```

S1-3

S1-3：T2K（東大）における並列効果

- ◆：N=10^6, ●：10^7, ▲：10^9
- ー：理想値
- 1コアにおける計測結果（sec.）からそれぞれ算出




```
#@$-r test
#@$-q lecture
#@$-N 1
#@$-J T4
#@$-e err
#@$-o hello.lst
#@$-lM 28GB
#@$-lT 00:05:00
#@$

cd $PBS_O_WORKDIR
mpirun numactl --localalloc ./a.out
```

- 赤字部分の影響
- 1ノードより多いと変動あり

S1-3

理想値からのずれ

- MPI通信そのものに要する時間
  - データを送付している時間
  - ノード間においては通信バンド幅によって決まる
    - Gigabit Ethernetでは 1Gbit/sec.（理想値）
  - 通信時間は送受信バッファのサイズに比例
- MPIの立ち上がり時間
  - latency
  - 送受信バッファのサイズによらない
    - 呼び出し回数依存，プロセス数が増加すると増加する傾向
  - 通常，数～数十μsecのオーダー
- MPIの同期のための時間
  - プロセス数が増加すると増加する傾向

理想値からのずれ（続き）

- 計算時間が小さい場合（S1-3ではNが小さい場合）はこれらの効果を無視できない。
  - 特に，送信メッセージ数が小さい場合は，「Latency」が効く。

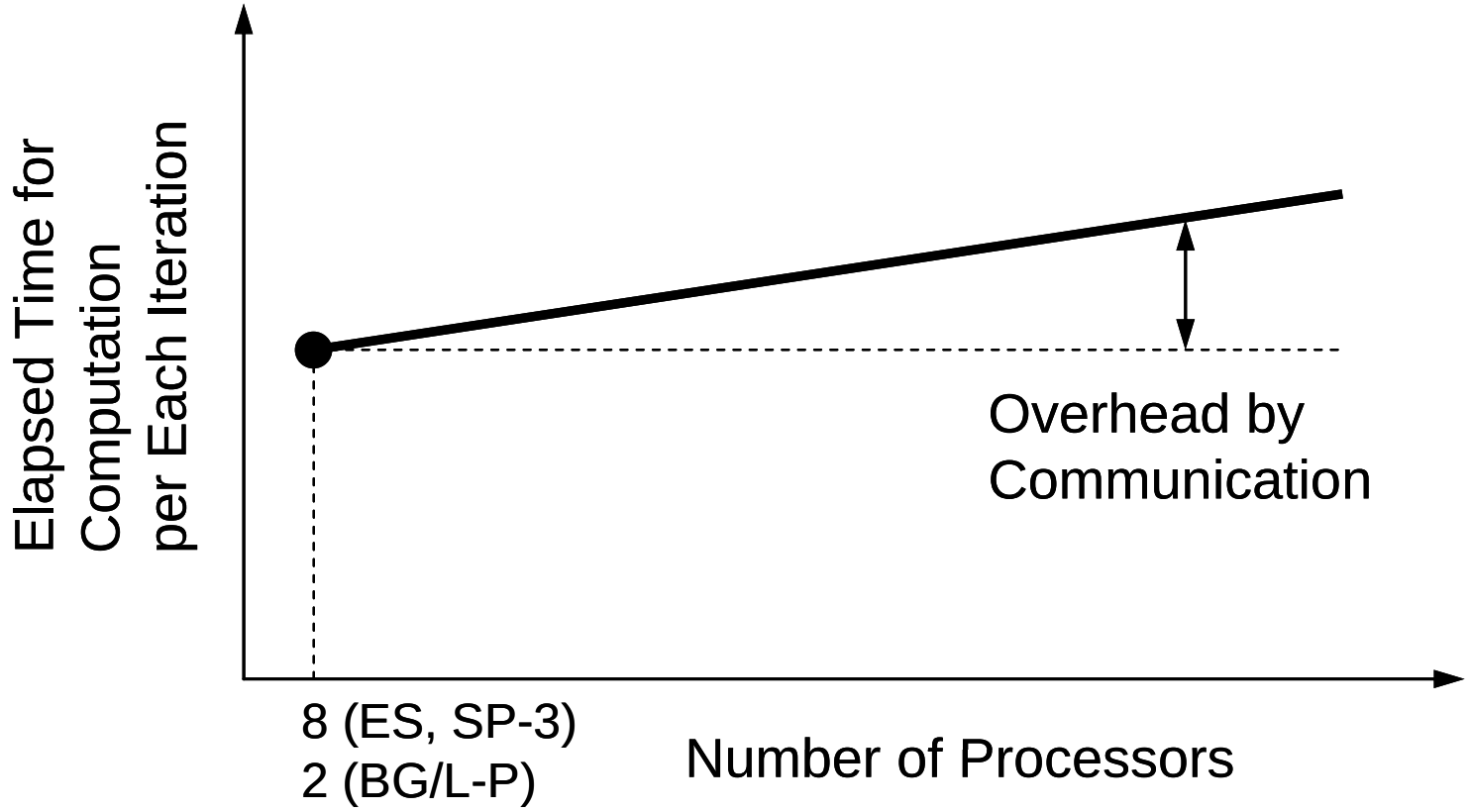
研究例

- Weak Scaling
  - プロセッサあたりの問題規模を固定
  - プロセッサ数を増加させる
  - 「計算性能」としては不変のはずであるが，普通はプロセッサ数を増やすと性能は悪化

- Nakajima, K. (2007), The Impact of Parallel Programming Models on the Linear Algebra Performance for Finite Element Simulations, Lecture Notes in Computer Science 4395, 334-348.
  - 並列有限要素法（特に latency の影響大）

Communication Overhead in Parallel FEM (Weak Scaling)

due to latency, (finite value of) bandwidth

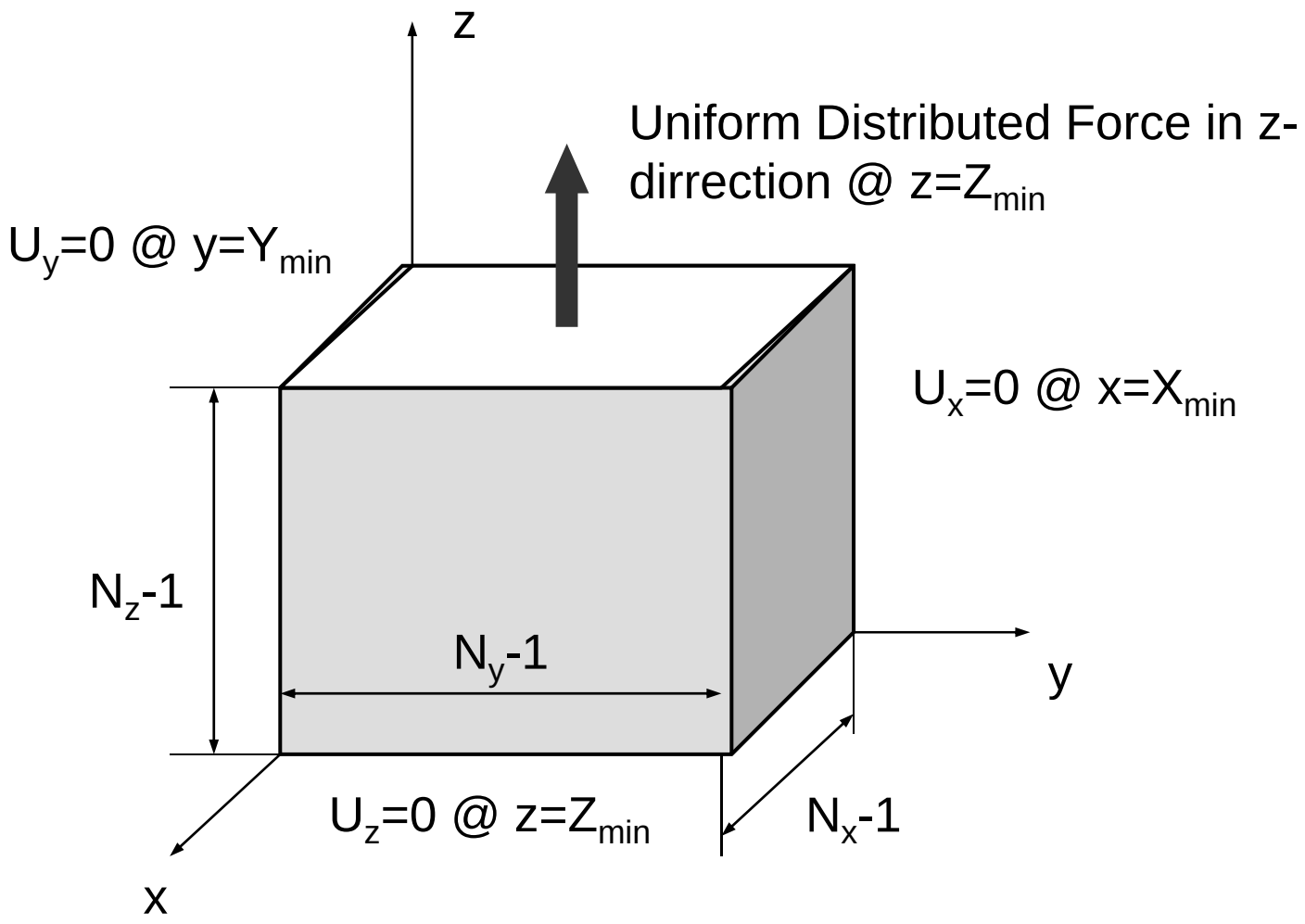


Platforms

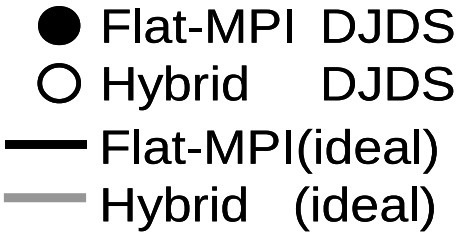
	Earth Simulator	Hitachi SR8000 (U.Tokyo)	IBM-SP3 (LBNL)	IBM p5-595 (LBNL)	IBM BG/L-proto (Prototype)
PE#/node	8	8	16	8	2
Clock rate (MHz)	500	450	375	1,900	500
Peak Performance (GFLOPS/PE)	8.00	1.80	1.50	7.60	1.00 (w/singe FPU)
Memory Size (GB/node)	16	16	16~64	32	0.256
Peak Memory BW (GB/sec/node)	256	32	16	100	3.4
Network Topology	single stage crossbar	3D crossbar	Switch	Switch	3D Torus
Network BW (GB/sec/node)	12.3	1.6	1.0	32	1.32
MPI Latency (μsec)	5.6-7.7	6-20	16.3	3.0	6.0

Only 8 of 16 PE's have been used for each node of IBM-SP3 and IBM p5-595.
Only Flat-MPI for IBM BG/L-proto.

Simple 3D Cubic Model

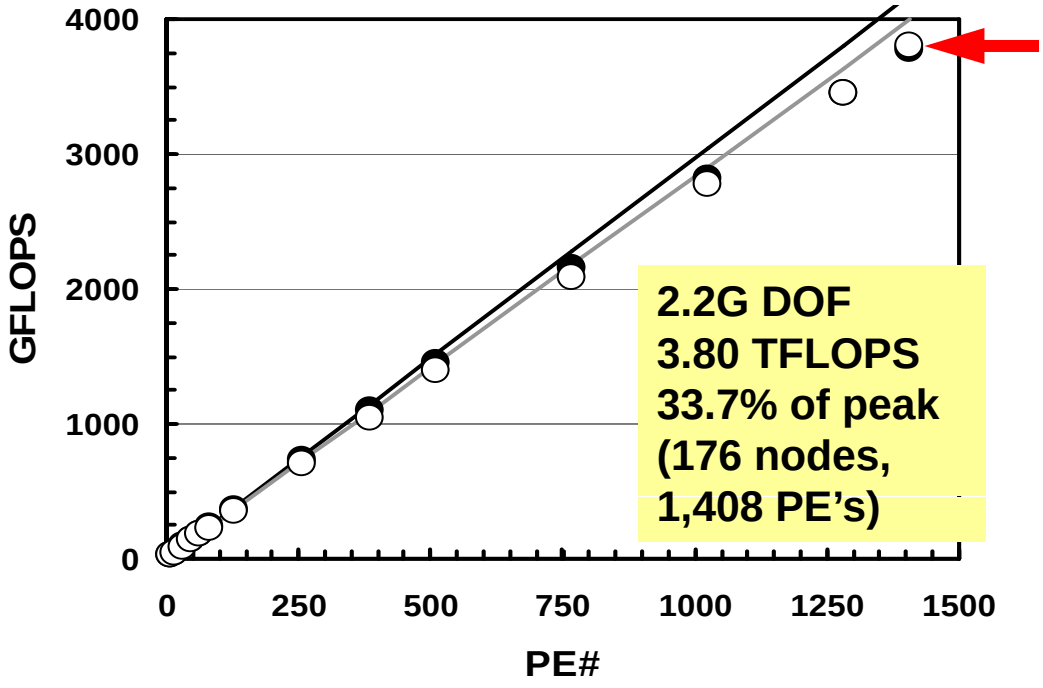


Weak Scaling: LARGE



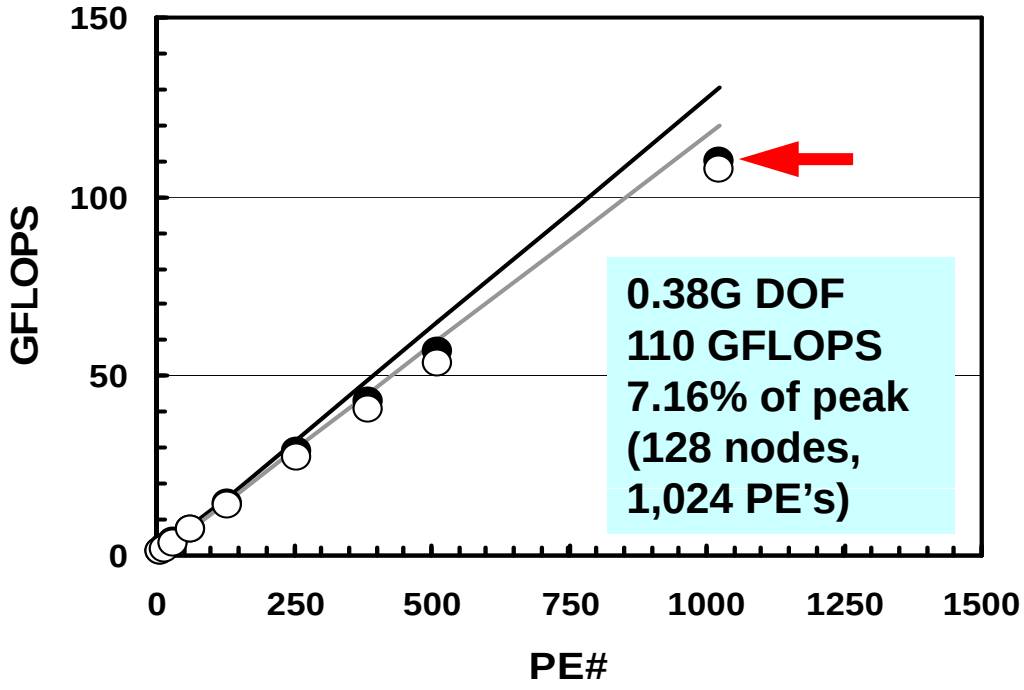
Earth Simulator

1,572,864 DOF/PE
(=3x128x64x64)

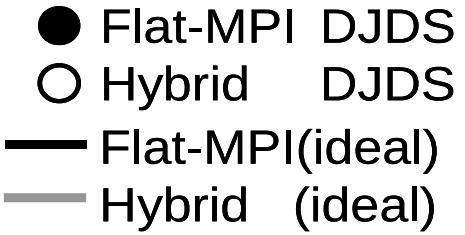


IBM SP-3 (Seaborg at LBNL)

375,000 DOF/PE
(=3x50^3)

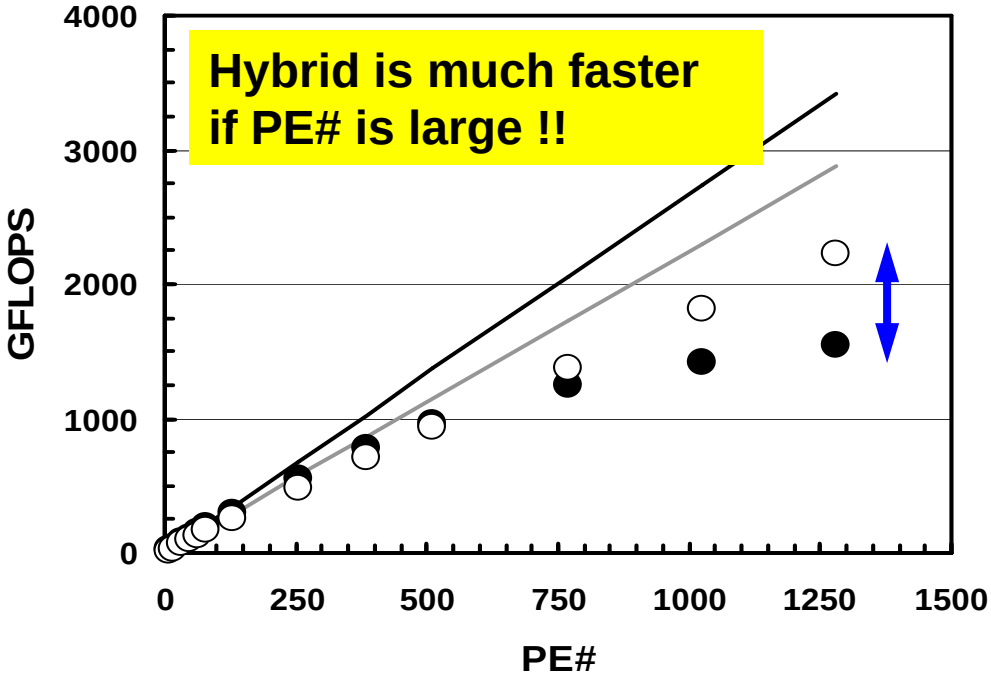


Weak Scaling: SMALL



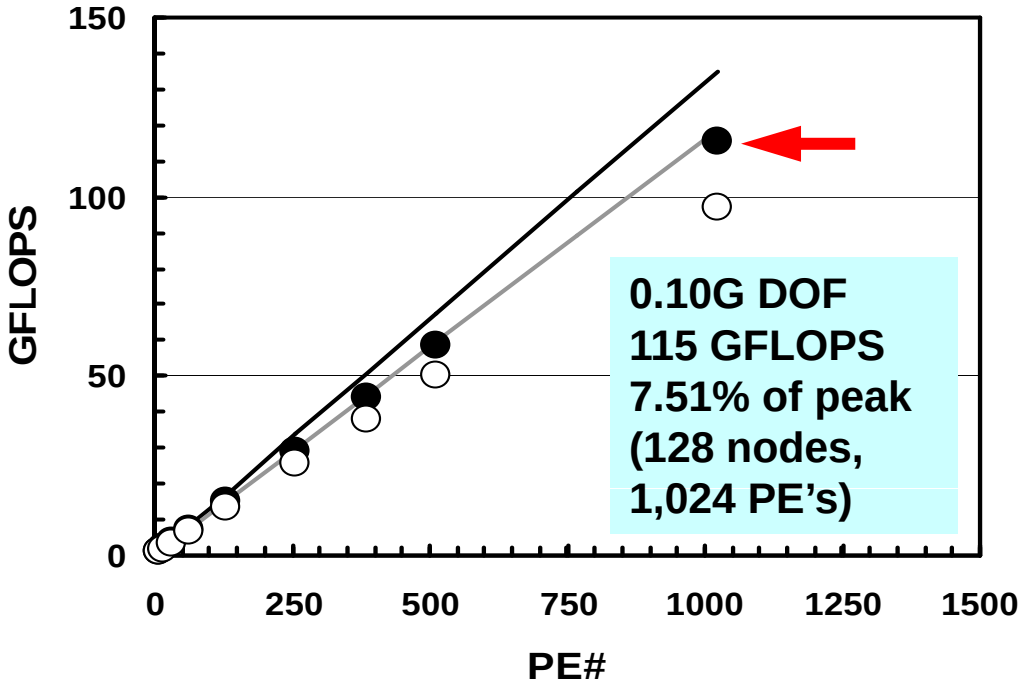
Earth Simulator

98,304 DOF/PE
(=3x32³)

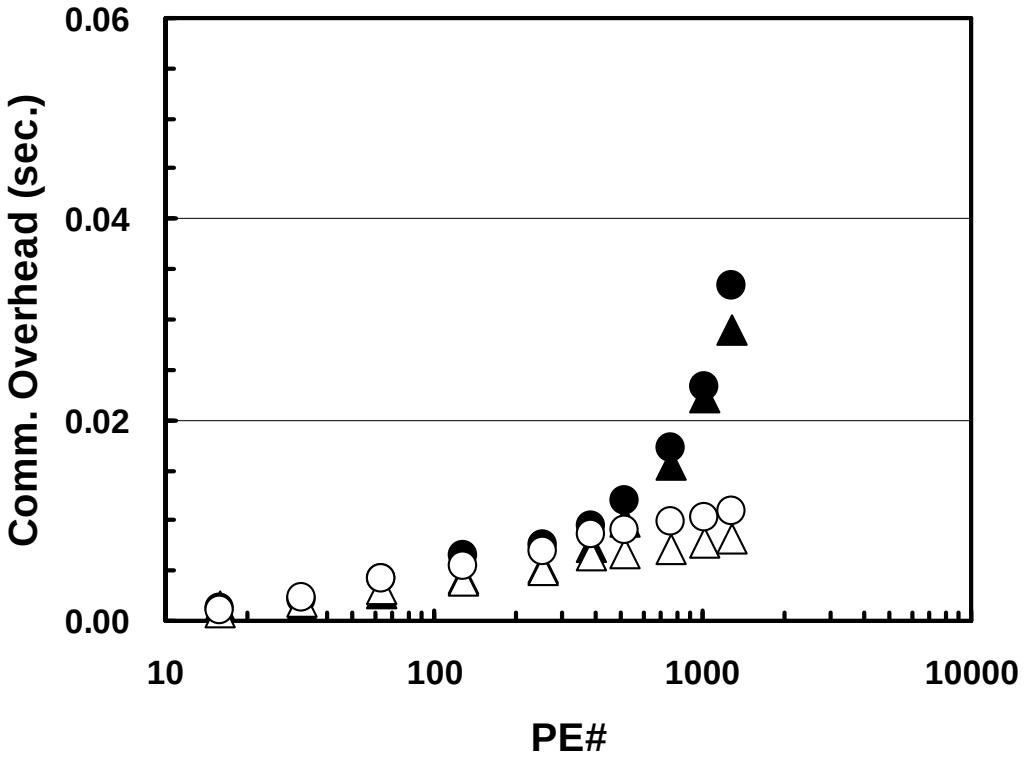


IBM SP-3 (Seaborg at LBNL)

98,304 DOF/PE
(=3x32³)



Communication Overhead
Weak Scaling: Earth Simulator

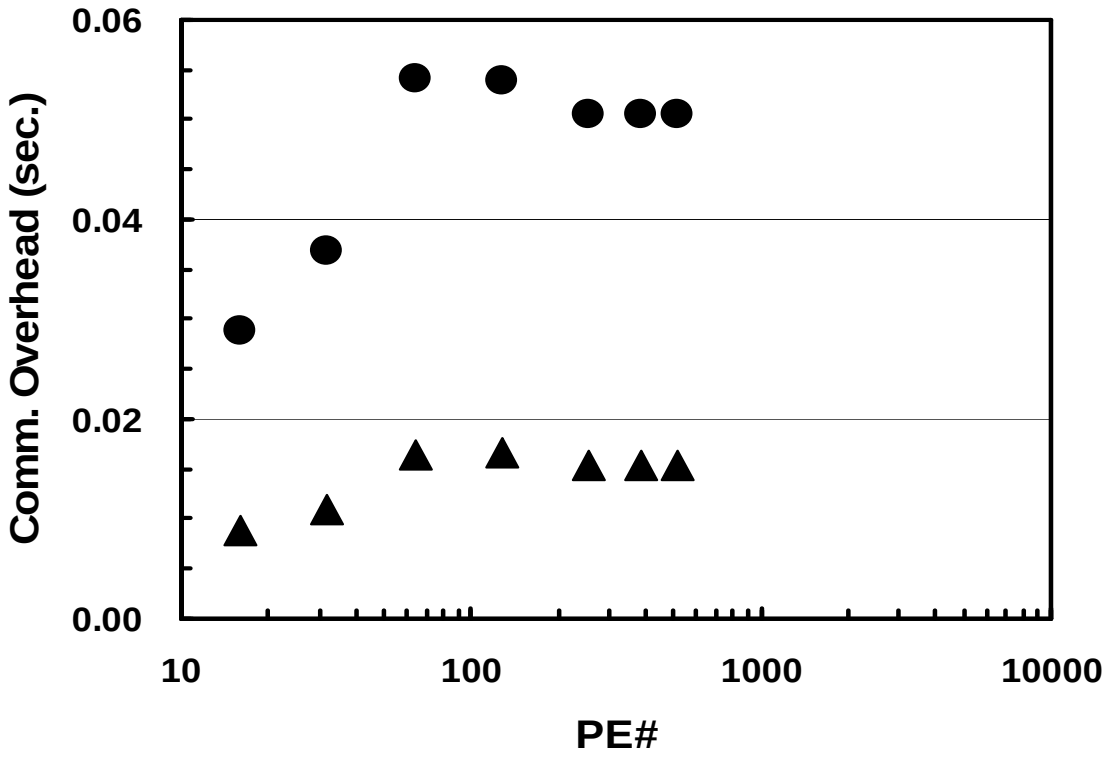


●○ 3x50³ DOF/PE
▲△ 3x32³ DOF/PE
●▲ Flat-MPI ○△ Hybrid

Effect of message size is small. Effect of latency is large.

Memory-copy is so fast.

Communication Overhead Weak Scaling: IBM BG/L-proto



● 3x44³ DOF/PE
▲ 3x24³ DOF/PE
(Flat-MPI only)

1 PE/node

Effect of message size is more significant.

通信：メモリーコピー

実は意外にメモリの負担もかかる

```
 do neib= 1, NEIBPETOT
   do k= export_index(neib-1)+1, export_index(neib)
     kk= export_item(k)
     SENDbuf(k)= VAL(kk)
   enddo
 enddo

 do neib= 1, NEIBPETOT
   iS_e= export_index(neib-1) + 1
   iE_e= export_index(neib  )
   BUFlength_i= iE_e + 1 - iS_e
   iS_i= import_index(neib-1) + 1
   iE_i= import_index(neib  )
   BUFlength_i= iE_i + 1 - iS_i

   call MPI_SENDRECV                                                 &
&         (SENDbuf(iS_e), BUFlength_e, MPI_INTEGER, NEIBPE(neib), 0,&
&          RECVbuf(iS_i), BUFlength_i, MPI_INTEGER, NEIBPE(neib), 0,&
&          MPI_COMM_WORLD, stat_sr, ierr)
  enddo

  do neib= 1, NEIBPETOT
    do k= import_index(neib-1)+1, import_index(neib)
      kk= import_item(k)
      VAL(kk)= RECVbuf(k)
    enddo
  enddo
```