

---

# MPI - Eine Einführung

---

Portable parallele Programmierung mit dem  
Message-Passing Interface

---

von

William Gropp, Ewing Lusk, Anthony Skjellum

---

Übersetzt von Dr. Holger Blaar, Halle

Wissenschaftliche Leitung der Übersetzung:  
Prof. Dr. Paul Molitor,  
Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg

---

Oldenbourg Verlag München Wien

---

# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Motivation</b>	<b>1</b>
1.1	Parallelverarbeitung – warum? .....	1
1.2	Hemmnisse .....	2
1.3	Warum Message-Passing? .....	3
1.3.1	Parallele Berechnungsmodelle .....	3
1.3.2	Vorteile des Message-Passing-Modells .....	8
1.4	Entwicklung der Message-Passing-Systeme .....	9
1.5	Das MPI-Forum .....	10
<b>2</b>	<b>Einführung in MPI</b>	<b>13</b>
2.1	Ziel .....	13
2.2	Was ist MPI? .....	13
2.3	Grundlegende MPI-Konzepte .....	14
2.4	Weitere interessante Konzepte in MPI .....	18
2.5	Ist MPI umfangreich oder knapp? .....	20
2.6	Dem Entwickler verbleibende Entscheidungen .....	21
<b>3</b>	<b>MPI in einfachen Programmen</b>	<b>23</b>
3.1	Ein erstes MPI-Programm .....	23
3.2	Ausführung des ersten MPI-Programms .....	28
3.3	Ein erstes MPI-Programm in C .....	29
3.4	Ein erstes MPI-Programm in C++ .....	29
3.5	Zeitmessung in MPI-Programmen .....	33
3.6	Ein Beispiel für autonome Prozesskoordination .....	35
3.7	Untersuchung der parallelen Leistung .....	42
3.7.1	Elementare Berechnungen zur Skalierbarkeit .....	42
3.7.2	Aufzeichnung von Informationen über die Programmausführung .....	44
3.7.3	MPE-Protokollierung in parallelen Programmen .....	45
3.7.4	Ereignisse und Zustände .....	46

3.7.5	Protokollierung im Programm zur Matrizenmultiplikation .....	46
3.7.6	Bemerkungen zur Implementierung der Protokollierung .....	48
3.7.7	Aufbereitung der Logdateien mit Upshot.....	51
3.8	Die Arbeit mit Kommunikatoren.....	52
3.9	Ein anderer Weg zur Bildung neuer Kommunikatoren .....	60
3.10	Eine praktische Graphikbibliothek für parallele Programme .....	61
3.11	Typische Fehler und Missverständnisse .....	63
3.12	Anwendung: Quanten-Monte-Carlo Berechnungen in der Kernphysik ...	65
3.13	Zusammenfassung .....	66
<b>4</b>	<b>MPI für Fortgeschrittene</b>	<b>67</b>
4.1	Das Poisson-Problem .....	68
4.2	Topologien .....	71
4.3	Ein Programm für das Poisson-Problem.....	80
4.4	Anwendung nichtblockierender Kommunikationen .....	89
4.5	Synchrones Senden und „sichere“ Programme .....	91
4.6	Mehr zur Skalierbarkeit.....	92
4.7	Jacobi-Verfahren mit 2D-Dekomposition .....	95
4.8	Ein erweiterter MPI-Datentyp .....	96
4.9	Überlagern von Kommunikation und Berechnung.....	99
4.10	Mehr zur Laufzeitmessung in Programmen .....	101
4.11	Drei Dimensionen .....	103
4.12	Typische Fehler und Missverständnisse .....	104
4.13	Simulation der Wirbelevolution in supraleitenden Materialien .....	105
<b>5</b>	<b>Weitergehende Details zum Message-Passing mit MPI</b>	<b>107</b>
5.1	MPI-Datentypen .....	107
5.1.1	Basisdatentypen und Konzepte .....	107
5.1.2	Abgeleitete Datentypen.....	112
5.1.3	Was genau ist die Länge? .....	113
5.2	Das N-Körper-Problem .....	113
5.2.1	Aufsammeln von Informationen .....	115
5.2.2	Nichtblockierende Pipeline.....	118
5.2.3	Verschieben von Teilchen zwischen Prozessen .....	121
5.2.4	Senden dynamisch erzeugter Daten .....	127

5.2.5	Nutzergesteuertes Packen von Daten . . . . .	129
5.3	Visualisierung der Mandelbrotmenge . . . . .	131
5.3.1	Senden von Feldern von Strukturen . . . . .	139
5.4	Lücken in Datentypen . . . . .	140
5.4.1	Funktionen in MPI-2 zur Manipulation der Länge eines Datentyps . . . . .	141
5.5	Neue Datentyp-Routinen in MPI-2 . . . . .	143
5.6	Weiteres zu Datentypen für Strukturen . . . . .	145
5.7	Veraltete Funktionen . . . . .	148
5.8	Typische Fehler und Missverständnisse . . . . .	149
<b>6</b>	<b>Parallele Bibliotheken</b>	<b>151</b>
6.1	Motivation . . . . .	151
6.1.1	Die Notwendigkeit paralleler Bibliotheken . . . . .	151
6.1.2	Bekannte Schwächen älterer Message-Passing-Systeme . . . . .	152
6.1.3	Überblick zu MPI-Eigenschaften für die Bibliotheksunterstützung . . . . .	154
6.2	Eine erste MPI-Bibliothek . . . . .	157
6.2.1	Routinen für das Attribut-Caching in MPI-2 . . . . .	165
6.2.2	Eine Alternative in C++ zu MPI_Comm_dup . . . . .	165
6.3	Lineare Algebra auf Gittern . . . . .	170
6.3.1	Abbildungen und Logische Gitter . . . . .	171
6.3.2	Vektoren und Matrizen . . . . .	176
6.3.3	Komponenten einer parallelen Bibliothek . . . . .	178
6.4	Der LINPACK-Benchmark mit MPI . . . . .	181
6.5	Strategien für die Erstellung von Bibliotheken . . . . .	182
6.6	Beispiele für Bibliotheken . . . . .	183
<b>7</b>	<b>Weitere Eigenschaften von MPI</b>	<b>185</b>
7.1	Simulation von Shared-Memory-Operationen . . . . .	185
7.1.1	Gemeinsamer und verteilter Speicher . . . . .	185
7.1.2	Ein Zähler-Beispiel . . . . .	186
7.1.3	Realisierung des gemeinsamen Zählers per Polling anstelle eines gesonderten Prozesses . . . . .	190
7.1.4	Fairness im Message-Passing . . . . .	191
7.1.5	Ausnutzung von Anfrage-Antwort-Mustern . . . . .	192
7.2	Die vollständige Konfigurationswechselwirkung als Anwendungsbeispiel .	195
7.3	Erweiterte kollektive Operationen . . . . .	196
7.3.1	Bewegen von Daten . . . . .	196
7.3.2	Kollektive Berechnung . . . . .	196
7.3.3	Typische Fehler und Missverständnisse . . . . .	202

7.4	Interkommunikatoren .....	203
7.5	Rechnen in einer heterogenen Umgebung.....	210
7.6	Die MPI-Schnittstelle zur Programmanalyse .....	210
7.6.1	Entdecken von Pufferproblemen.....	214
7.6.2	Erkennung ungleichmäßiger Lastverteilung .....	216
7.6.3	Der Mechanismus zur Nutzung der Analyseschnittstelle .....	217
7.7	Fehlerbehandlung .....	218
7.7.1	Routinen zur Fehlerbehandlung .....	218
7.7.2	Ein Beispiel zur Fehlerbehandlung .....	221
7.7.3	Anwenderdefinierte Fehlerbehandlungen .....	223
7.7.4	Abbruch von MPI-Programmen.....	224
7.7.5	Funktionen in MPI-2 zur Fehlerbehandlung .....	226
7.8	Die MPI-Umgebung .....	227
7.8.1	Prozessorname .....	229
7.8.2	Ist MPI initialisiert? .....	229
7.9	Ermittlung der Version von MPI.....	230
7.10	Weitere Funktionen in MPI.....	231
7.11	Eine Anwendung: Numerische Strömungsmechanik .....	232
7.11.1	Parallelisierung .....	233
7.11.2	Parallele Implementierung .....	235
<b>8</b>	<b>Wie arbeiten MPI-Implementierungen?</b>	<b>239</b>
8.1	Einführung .....	239
8.1.1	Senden von Daten .....	240
8.1.2	Empfangen von Daten .....	240
8.1.3	Rendezvous-Protokoll.....	241
8.1.4	Zuordnung zwischen Protokollen und MPI-Sendemodi .....	241
8.1.5	Auswirkungen auf die Leistung .....	242
8.1.6	Alternative Strategien für MPI-Implementierungen .....	243
8.1.7	Anpassung von MPI-Implementierungen .....	243
8.2	Wie schwierig ist es, MPI zu implementieren? .....	244
8.3	Zusammenspiel von Hardware-Eigenschaften und MPI-Bibliothek.....	244
8.4	Sicherheit der Datenübertragung.....	245
<b>9</b>	<b>MPI im Vergleich</b>	<b>247</b>
9.1	Sockets .....	247
9.1.1	Erzeugen und Beenden von Prozessen .....	249
9.1.2	Behandlung von Fehlern .....	251
9.2	PVM 3 .....	252
9.2.1	Grundlagen .....	253

9.2.2	Weitere Funktionen .....	254
9.2.3	Kollektive Operationen .....	254
9.2.4	MPI-Gegenparts weiterer PVM-Funktionalitäten .....	255
9.2.5	Funktionalitäten, die sich in MPI nicht wiederfinden .....	256
9.2.6	Starten von Prozessen .....	256
9.2.7	Zu MPI und PVM ähnliche Werkzeuge .....	257
9.3	Wo kann man noch mehr erfahren? .....	257
<b>10</b>	<b>Über Message-Passing hinaus</b>	<b>259</b>
10.1	Dynamische Prozessverwaltung .....	260
10.2	Threads .....	261
10.3	Ausführung aus der Ferne .....	262
10.4	Parallele Ein- und Ausgabe .....	263
10.5	MPI-2 .....	264
10.6	Wird es MPI-3 geben? .....	264
10.7	Schlusswort .....	264
<b>Glossar</b>		<b>265</b>
<b>A</b>	<b>Zusammenfassung der MPI-1-Routinen</b>	<b>275</b>
A.1	C-Funktionen .....	275
A.2	Fortran-Routinen .....	289
A.3	C++-Methoden .....	307
<b>B</b>	<b>Die MPI-Implementierung MPICH</b>	<b>321</b>
B.1	Eigenschaften der Modellimplementierung .....	321
B.1.1	Besonderheiten für den Anwender .....	321
B.1.2	Portierbarkeit .....	322
B.1.3	Effizienz .....	323
B.1.4	Zusätzliche Programme .....	323
B.1.5	MPICH in der Forschung .....	323
B.2	Installation und Ausführung der Modellimplementierung .....	326
B.3	Die Geschichte von MPICH .....	326
<b>C</b>	<b>Die MPE-Bibliothek</b>	<b>329</b>
C.1	Protokollierung mit MPE .....	329
C.2	MPE-Graphik .....	331
C.3	Hilfen in MPE .....	331

C.4	Das Upshot-Visualisierungssystem .....	332
<b>D</b>	<b>MPI-Quellen im Internet</b>	<b>337</b>
<b>E</b>	<b>Sprachdetails</b>	<b>339</b>
E.1	Felder in C und Fortran .....	339
E.1.1	Spalten- und zeilenweise Anordnung .....	339
E.1.2	Gitter versus Matrizen.....	340
E.1.3	Höherdimensionale Felder.....	340
E.2	Aliasing .....	343
	<b>Literaturverzeichnis</b>	<b>345</b>
	Index .....	357
	Index für Funktionen, Typen, Datenfelder .....	363