Faculté des Sciences & Techniques

Université de Limoges

Master 1ère année

Parallélisme & Applications : MPI — P-F. Bonnefoi

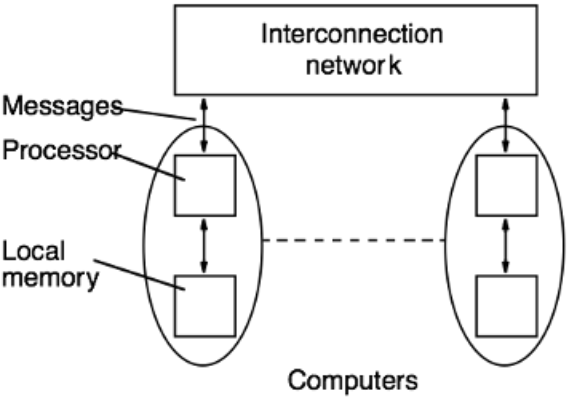
Version du 12 septembre 2025

Table des matières



Le réseau de station de travail, « NOW »

Un ensemble de machines autonomes connectées par un réseau d'interconnexion qui communiquent entre eux par « échange de messages ».

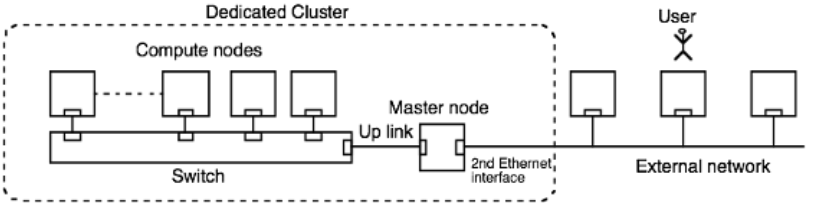


Ce modèle est caractérisé par :

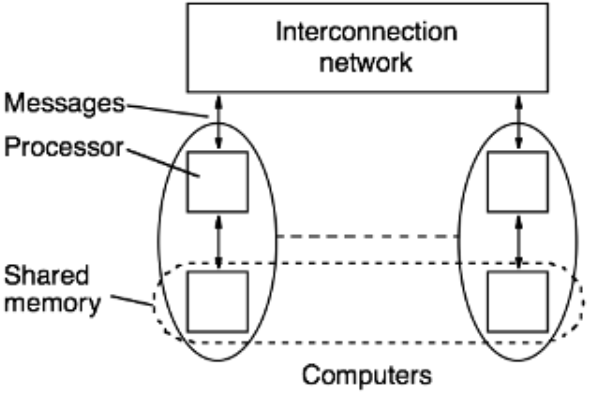
- une topographie réelle : le réseau d'interconnexion ;
- l'absence de synchronisation aux niveaux des instructions exécutées sur chaque processeur (machines indépendantes) ;
- l'organisation des échanges entre processeur :
  - les messages contrôlent le programme parallèle ;
  - le chemin des messages définissent la topographie de la machine parallèle (topographie virtuelle) !



Organisation



Par exemple, il est possible à l'aide d'échanges de messages de simuler une machine à mémoire partagée au-dessus de la machine parallèle.



Cela permet de simplifier la programmation en ne tenant pas compte des messages à échanger entre les différents processeurs, mais cela peut entraîner des surcoûts parce que le programmeur n'est pas informé des effets de sa programmation (exemple : accès par ligne à une matrice « réellement » répartie par colonnes entre les processeurs).



Modèle du «*Message Passing*»

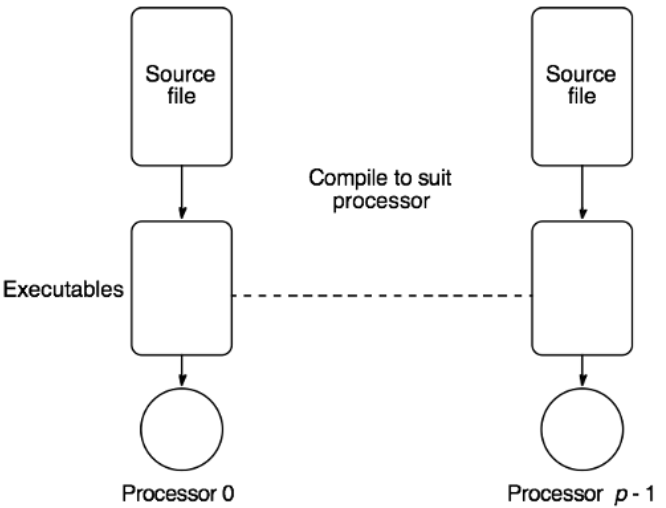


Mécanismes proposés

– possibilité de créer de processus séparés sur différentes ordinateurs ;

– possibilité d'envoyer et de recevoir des messages.

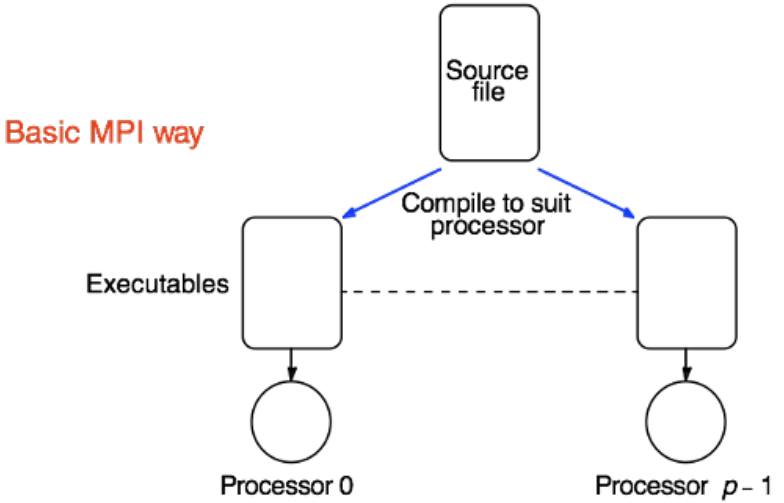
Cela correspond au modèle «*Multiple program, multiple data (MPMD)*»





Modèle SPMD

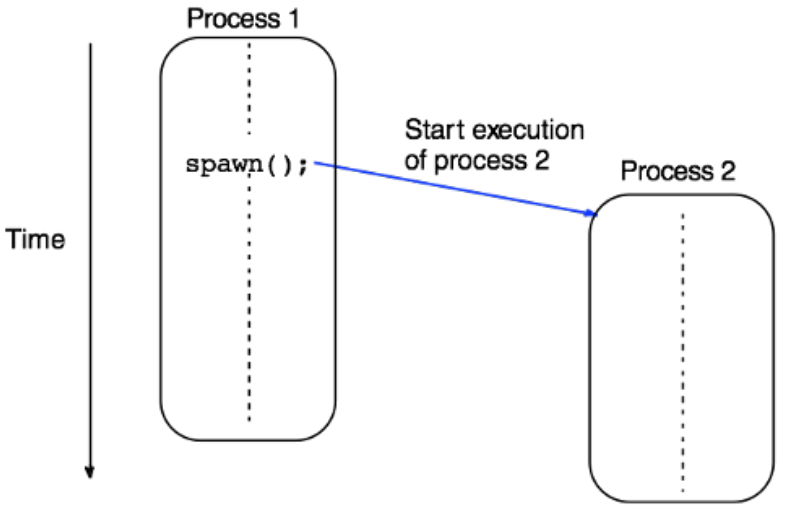
- différents processus se « mélangent » en un seul programme ;
- les instructions de contrôle vont exécuter différentes parties des programmes présents sur chaque processeur.
- tous les exécutables démarrent en même temps : on parle de création statique de processus





Modèle MPMD

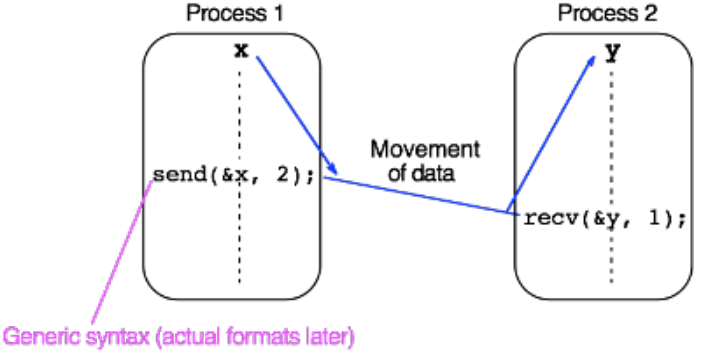
- ▷ des programmes séparés sur chaque processeur ;
- ▷ un processeur exécute le processus « maître » ;
- ▷ le processus maître exécute d'autres processus : on parle de création dynamique de processus.



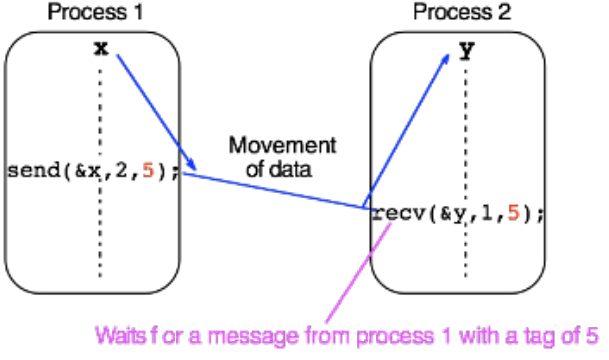


Passage de messages

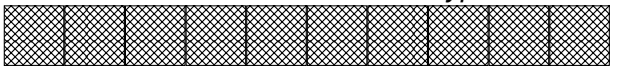
– un processus envoie un message contenant une donnée vers un autre processus ;



– le message peut contenir un étiquette ou « tag » pour différencier les messages (ne contiennent que des données).



Un message MPI est un tableau d'éléments d'un certain *datatype* :



Où le *datatype* est :

MPI_CHAR	signed char
MPI_SHORT	signed short int
MPI_INT	signed int
MPI_LONG	signed long int
MPI_UNSIGNED_CHAR	unsigned char
MPI_UNSIGNED_SHORT	unsigned short int
MPI_UNSIGNED	unsigned int
MPI_UNSIGNED_LONG	unsigned long int
MPI_FLOAT	float
MPI_DOUBLE	double
MPI_LONG_DOUBLE	long double
MPI_BYTE	
MPI_PACKED.	

Le *datatype* des données doit correspondre entre envoi et réception.

Les communications entre processus

- Communications **point à point** entre deux processeurs ;
- L'envoi de message nécessite 2 opérations :
  - ◇ émission de l'expéditeur
  - ◇ réception du destinataire

  Si l'une des deux est absente il n'y a pas de communication

Suivant le modèle de communication, le récepteur qui refuse de recevoir message peut bloquer l'expéditeur ou non.

Pour l'envoi

Forme : `MPI_Send(&buffer, count, datatype, destination, tag, comm)`

- **buffer** pointeur en mémoire qui indique où se trouve le premier octet de l'info à envoyer ;
- **count** entier indiquant la taille du message en nombre d'éléments de type `datatype` ;
- **datatype** type d'un élément du message.
- **destination** identifiant du destinataire ;
- **tag** étiquette du message *Il permet de différencier les messages au sein de l'application*
- **comm** : indique le *communicator* à utiliser.

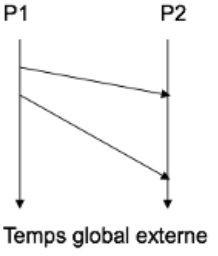
Pour la réception

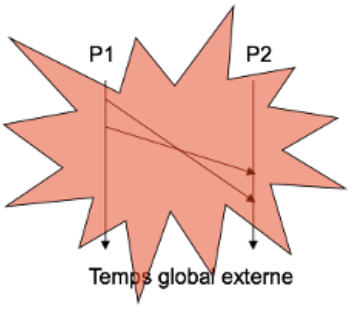
Forme : `MPI_Recv(&buffer, count, datatype, source, tag, comm, &status)`

- **buffer** pointeur en mémoire qui indique où devra être déposé le premier octet de l'info
- **count** entier indiquant la taille du message en nombre d'éléments de type `datatype` ;
- **datatype** type d'un élément du message ;
- **source** identifiant de la source. `MPI_ANY_SOURCE` indique depuis n'importe quel source ;
- **tag** étiquette du message. `MPI_TAG_ANY` indique n'importe quelle étiquette ;
- **comm** : communicator à utiliser ;
- **status** : pointeur vers une structure `MPI_Status` contenant des infos sur le message reçu (source, tag, error, count, cancelled). *On peut utiliser `MPI_STATUS_IGNORE` si on n'en a pas besoin*.

Les communications entre processus

- chaque paire de processeurs est reliée par un lien ;
  Ce lien « logique » peut être réalisé par plusieurs liens physiques et switches
- les liens sont **fiables** : pas de perte de message
- les liens garantissent l'ordre FIFO, «*First In First Out*» ;

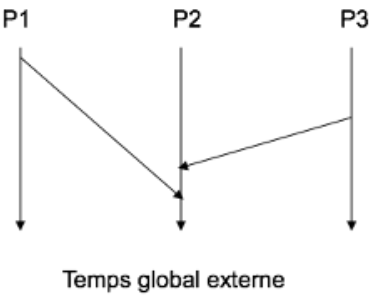




Problème ? Absence de temps global

On ne peut pas garantir que deux messages envoyés par des processeurs distincts arrivent dans un ordre choisi.

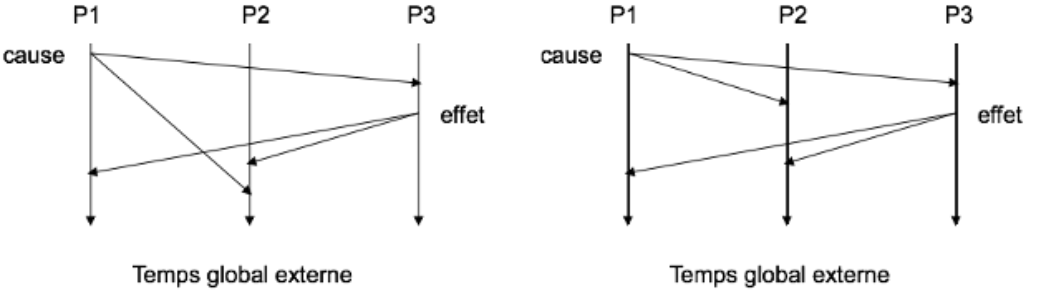
si le message M1 est plus ancien que M2, ils ont nécessairement été envoyés dans cet ordre seulement s'ils proviennent du même processus.



L'ordre causal n'est pas respecté dans une machine parallèle

- différence des distances
- différence des disponibilités des liens ...

Caractérisation : plusieurs possibilités



Conséquence

Le non respect de l'ordre causal se traduit par du **non déterminisme**.

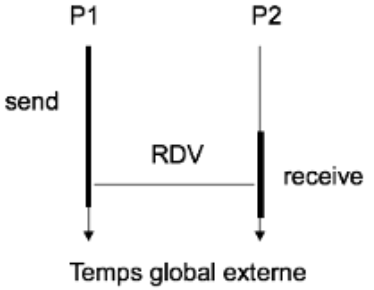
Ce non déterminisme doit être pris en compte :

- Lors de l 'écriture et de l'utilisation des primitives d'envoi et de réception ;
- Lors de la conception d'outils d'analyse de performance et/ou de débogage qui peuvent modifier l'ordre des messages en effectuant la collecte de traces d'exécution et des échanges de messages.

Communication synchrone ou par rendez-vous

- ▷ les deux processus P1 et P2 sont prêts : P1 à émettre, P2 à recevoir ;
- ▷ P1 attend P2.

Évaluation : le temps d'attente peut être long, mais l'expéditeur est sûr que le destinataire a reçu le message



Bloquant : la fonction ne retourne que lorsque l'échange a fini

- ▷ côté réception : les données sont arrivées et prêtes à être traitées ;
- ▷ côté envoi : le buffer d'envoi peut être réutilisé sans créer d'erreurs ;

Communication asynchrone

- l'expéditeur envoie son message dès qu'il est prêt ;
- la réception peut se faire plus tard ;

Avantages :

- l'émetteur n'attend jamais ;
- le récepteur peut éventuellement attendre si le message n'est pas encore arrivé.

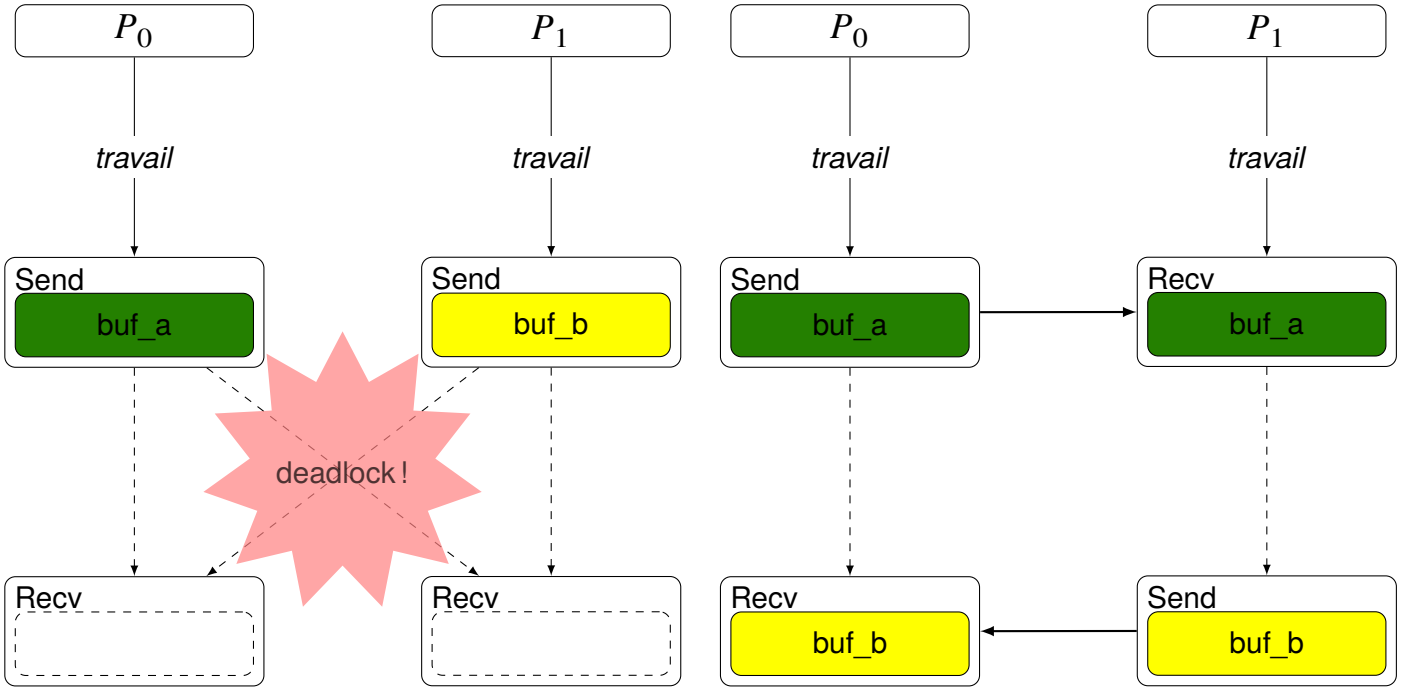
Inconvénient :

- moins de contrôle sur la réception.

Il est facile de simuler du synchrone avec des communications asynchrones à l'aide d'un système d'accusé-réception.

MPI : deadlock possible lors d'envoir/réception simultanés

L'utilisation d'appels bloquants peut conduire à un deadlock



Deadlock :

- ▷ un processus attend un message qui n'arrivera jamais ;
- ▷ le seul moyen de terminer le programme MPI et de l'arrêter brutalement (ctrl-c/kill) ;
- ▷ **peut ne pas toujours bloquer** : cela dépend de la taille des buffers d'envoi.

Et l'indéterminisme dans tout ça ?

Pour tenir compte de l'indéterminisme, il faut tenir compte de :

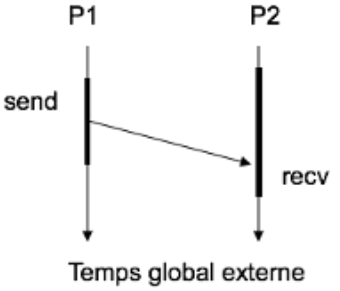
– l'émission doit indiquer le **destinataire** et **l'étiquette** de message ;
C'est la primitive de réception qui détermine donc l'ordre dans lequel les messages doivent être traités
– les réceptions sont indépendantes de l'ordre d'arrivée des messages.

On obtient ainsi une exécution déterministe.

Attention au niveau des algorithmes qui n'imposent pas d'expéditeurs ou d'étiquette de messages.

Modèle asynchrone bloquant

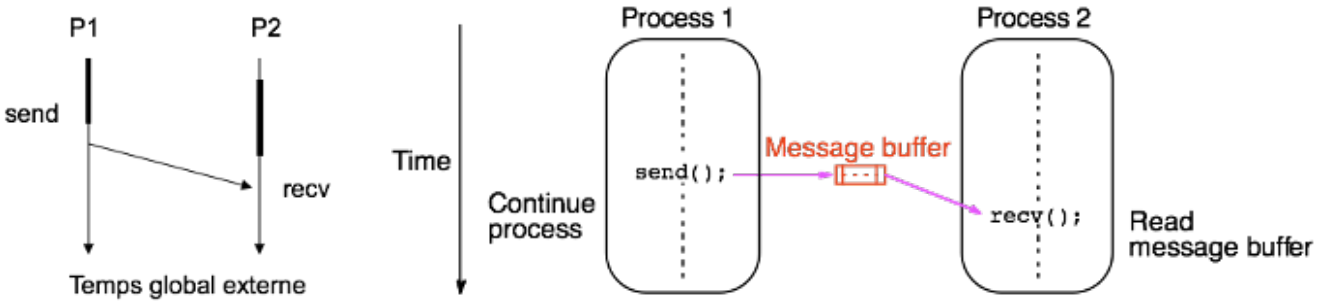
– l'appel à la primitive d'envoi se termine lorsque le message a quitté l'expéditeur
Mais, cela ne signifie pas que le destinataire l'ait bien reçu.
– l'appel à la primitive de réception se termine lorsque le message est :
◇ arrivé ;
◇ copié dans le buffer de réception.



Modèle asynchrone non bloquant

On demande l'exécution d 'une communication sans attendre qu'elle soit finie.

– la couche logiciel expédie ou reçoit dès que possible ;
– recouvrement Calcul/Communication :
  permet de **masquer le temps des communications** : des calculs sont effectués pendant les communications.



Contraintes

Le programmeur doit veiller à ce que les opérations soient terminées en temps voulu :

– une primitive *msgwait* qui bloque l 'exécution jusqu'à ce qu'une communication soit terminée ;
– une primitive *msgdone* qui permet de savoir si la communication a été effectuée.

Les primitives msgwait et msgdone se réfèrent à un numéro de transaction retourné par les primitives send et recv.

Avantage

Il est possible de faire du calcul et parallèlement des communications, mais il faut alors **gérer** la terminaison de ces communications pour **effectuer des calculs** sur les **bonnes données** !

Exemple : Opération sur un vecteur de taille n

- ▷ blsrecv/blsend : réception et envoi bloquant (en MPI : `MPI_Recv` et `MPI_Send`) ;
- ▷ nbsend/nbrecev : réception et envoi non bloquant (en MPI : `MPI_Irecv` et `MPI_Isend`) ;
- ▷ msgwait : attente de l'envoi/réception effective (en MPI : `MPI_Wait`).

Version Bloquante

```
1 pour j = 1 à n faire
2     blrecv(Pi-1,donnée)
3     résultat=calcul(donnée)
4     blsend(Pi+1,résultat)
```

Dans la version **non bloquante**, le `résultat2` peut être calculé pendant que la communication est réalisée.

⇒**recouvrement calcul/communication**.

Version non bloquante

```
 1 blrecv(donnée1)
 2 id_recv=nbrecv(donnée2)
 3 résultat1=calcul(donnée1)
 4 msgwait(id_recv)
 5 donnée1 = donnée2
 6
 7 pour j = 2 à n-1 faire
 8       id_recv = nbrecv(donnée2)
 9       id_send = nbsend(résultat1)
10       résultat2 = calcul(donnée1)
11       msgwait(id_recv)
12       msgwait(id_send)
13       donnée1 = donnée2
14       résultat1 = résultat2
15
16 id_send = nbsend(résultat1)
17 résultat2 = calcul(donnée1)
18 msgwait(id_send)
19 blsend(résultat2)
```


Ce sont des communications :

- ▷ qui concernent **l'ensemble** ou un **sous-ensemble** des processus d'une application parallèle ;
- ▷ qui reprennent des **schémas** de communication **souvent employés**.

Fonctionnement général d'une **communication globale** :

1. **l'ensemble des processus** réalise une séquence d'instructions prédéterminées ;
2. ils se **synchronisent** avant d'exécuter l'algorithme ;
3. ils se **synchronisent** à la fin ;

ces synchronisations permettent de voir **la communication globale** comme une opération **atomique** et **déterministe**.

Différentes formes de communication globale

- ☐ la **barrière de synchronisation** : permet de synchroniser un ensemble de processus ;
- ☐ la **diffusion** ou broadcast : un processus envoie un même message à l'ensemble des autres ;
- ☐ la **distribution** : un processus donné envoie un message distinct à tous les autres ;
- ☐ le **rassemblement** : opération inverse de la distribution ;
- ☐ la **transposition** : chaque processus effectue simultanément une distribution ;
- ☐ le **commérage** : chacun des n processus possède une information spécifique, à la fin de l'algorithme, tous les processus connaissent les n informations.

Comment organiser les nœuds dans une machine parallèle avec MPI ?

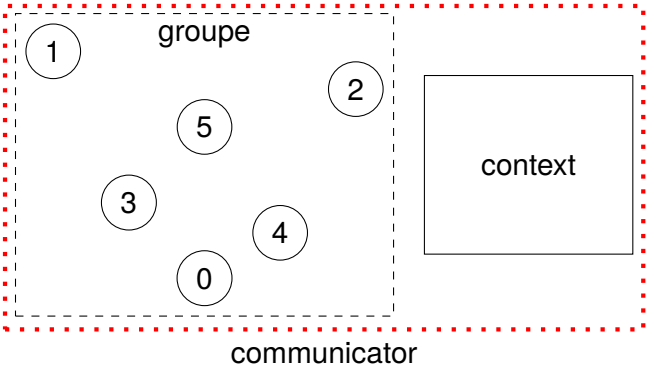
Un nœud doit :

- ▷ rejoindre l'application parallèle : c'est une machine indépendante au lancement ;
- ▷ connaitre les membres de son groupe et leur nombre : pour pouvoir organiser le travail parallèle ;
- ▷ son rang dans le groupe : pour pouvoir s'identifier, déterminer son rôle et communiquer avec les autres nœuds.

Groupe, «*Communicator*» et «*context*»

- ☐ **Goupe** : un ensemble fixe de k nœuds numérotés de 0 à $k-1$
- ☐ «***Communicator***» : spécifier le «*scope*» ou la portée d'une communication :
  - ◇ entre les nœuds dans un groupe (intra) ;
  - ◇ entre deux groupes disjoints (inter) ;

  Par défaut c'est `MPI_COMM_WORLD`
- ☐ «***Context***» : partition de l'espace de communication :
  - ▷ un message envoyé dans un contexte ne peut pas être reçu dans un autre contexte : utile pour des bibliothèques indépendantes utilisant des étiquettes qui leur sont propres.



MPI : les instructions de base

MPI_INIT	rejoindre la machine parallèle
MPI_FINALIZE	quitter la machine parallèle
MPI_COMM_SIZE	obtenir la taille du groupe
MPI_COMM_RANK	obtenir son rang dans le groupe
MPI_SEND	envoyer un message
MPI_RECV	recevoir un message

Le «*hello world*» :

```
#include "mpi.h"
#include <stdio.h>
int main(int argc, char *argv[])
{
   MPI_Init(&argc, &argv);
   printf("Hello, world!\n");
   MPI_Finalize();
   return 0;
}
```

Le `printf` sera local au nœud.

Connaitre la machine parallèle :

```
#include <mpi.h>
#include <stdio.h>
int main(int argc, char *argv[])
{
   int rank, size;
   MPI_Init(&argc, &argv);
   /* rank of this process in the communicator */
   MPI_Comm_rank(MPI_COMM_WORLD, &rank);
   /* get the size of the group associates to the communicator */
   MPI_Comm_size(MPI_COMM_WORLD, &size);
   printf("I am %d of %d\n", rank, size);
   MPI_Finalize();
   return 0;
}
```

Les communications

```
#include <mpi.h>
#include <stdio.h>
int main(int argc, char *argv[])
{
   int rank, size;
   MPI_Init(&argc, &argv);
/* Find out rank, size */
int world_rank, size;

MPI_Comm_rank(MPI_COMM_WORLD, &world_rank);
MPI_Comm_size(MPI_COMM_WORLD, &world_size);

int number;

if (world_rank == 0)
  number = -1;
  MPI_Send(&number, 1, MPI_INT, 1, 0, MPI_COMM_WORLD);
}
else if (world_rank == 1) {
  MPI_Recv(&number, 1, MPI_INT, 0, 0, MPI_COMM_WORLD, MPI_STATUS_IGNORE);
  printf("Process 1 received number %d from process 0\n", number);
}
```

nbre élément

étiquette/tag

rang dest.

communicator par défaut

rang source

status

Compilation

```
xterm
$ mpicc -o hello_world_mpi hello_world_mpi.c
```

Exécution

```
xterm
$ mpirun -np 1 ./hello_world_mpi
```

lancement du travail MPI

nombre de processus

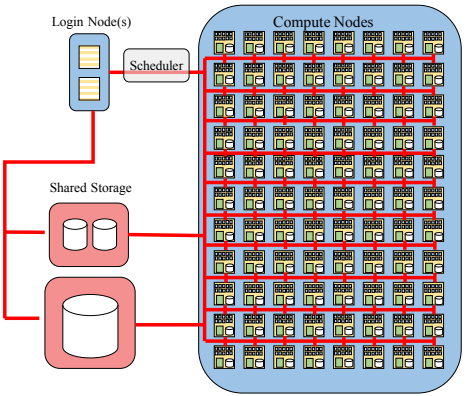
exécutable

Utilisation du scheduler SLURM

- ▷ indiquer les ressources nécessaires et le temps d'utilisation ;
- ▷ donner le travail :
  - ◇ avec `srun` : lancer une application MPI sur un cluster SLURM ;
  - ◇ il exécute `mpirun -np n` mais en tenant compte de l'occupation du cluster.

Le script shell pour SLURM :

```
#!/bin/bash
#SBATCH --ntasks 4 # 4 mpi tasks
#SBATCH -t 00:05:00 # Time in HH:MM:SS

#Launch job with srun not mpirun/mpiexec!
srun ./hello_world_mpi
```



MPI : les Instructions les plus utilisées

`MPI_Init`	Initialize MPI
`MPI_Finalize`	Clean up MPI
`MPI_Comm_size`	Get size of MPI communicator
`MPI_Comm_Rank`	Get rank of MPI Communicator
`MPI_Reduce`	Min Max Sum *etc*
`MPI_Bcast`	Send message to everyone
`MPI_Allreduce`	Reduce but store result everywhere
`MPI_Barrier`	Synchronize all tasks by blocking
`MPI_Send`	Send a message (blocking)
`MPI_Recv`	Receive a message (blocking)
`MPI_Isend`	Send a message (non-blocking)
`MPI_Irecv`	Receive a message (non-blocking)
`MPI_Wait`	Blocks until message is completed
`MPI_Wtime`	Donne le temps courant

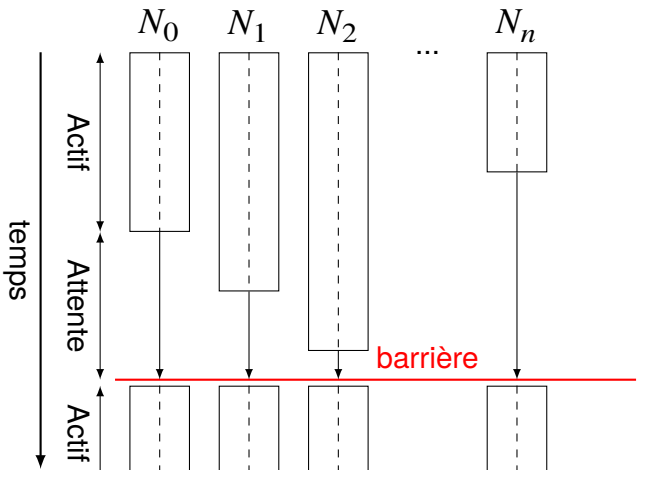
Exemple de mesure du temps d'exécution :

```
double t1 = MPI_Wtime();

//do something expensive...

double t2 = MPI_Wtime();

if (my_rank == 0) {
   printf("Total runtime = %g s\n",
      (t2-t1));
}
```


Barrière de synchronisation

`MPI_Barrier` : réalise une synchronisation de tous les nœuds.

```
MPI_Barrier(comm)
```



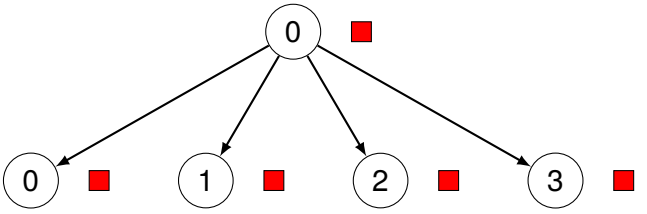
Synchronisation des processus :

- ▷ instruction forcément bloquante ;
- ▷ tous les processus sont forcés de s'attendre mutuellement ;
- ▷ **À utiliser uniquement si nécessaire⟹ réduit le parallélisme !**

Diffusion et regroupement

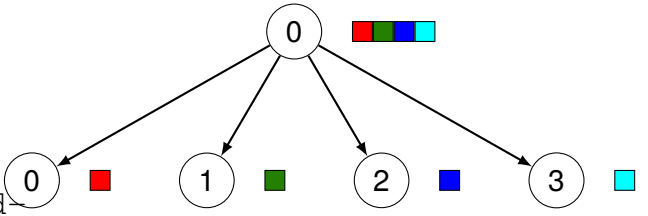
`MPI_Bcast`: envoie la même donnée vers tous les processus du groupe, *y compris lui-même*.

```
MPI_Bcast(&buffer, count, datatype,
root, comm)
```



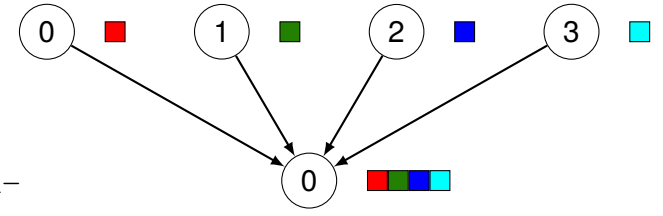
`MPI_Scatter`: envoi différentes données d'un tableau vers différents nœuds, *y compris lui-même*.

```
MPI_Scatter(&sendbuf, sendcnt, send-
type, &recvbuf, recvcnt, recvtype,
root, comm)
```



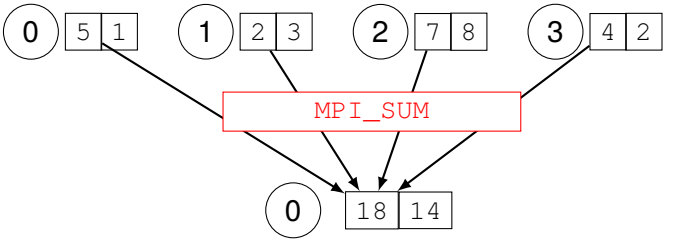
`MPI_Gather`: récupère différentes données depuis différents nœuds dans un tableau, *y compris lui-même*.

```
MPI_Gather(&sendbuf, sendcnt, send-
type, &recvbuf, recvcnt, recvtype,
root, comm)
```



Réduction

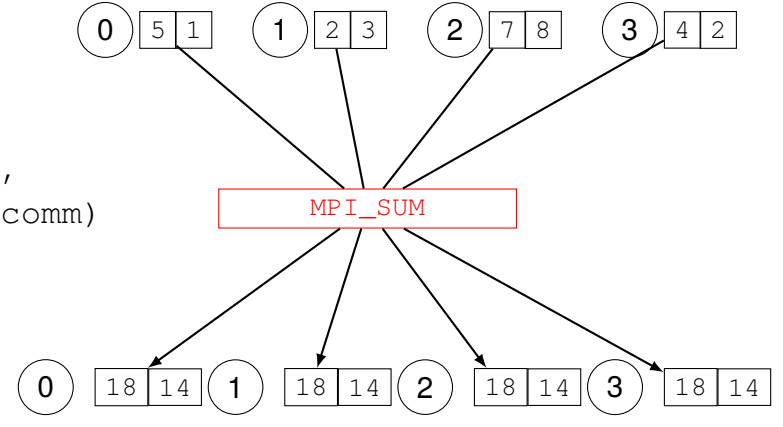
`MPI_Reduce`: Prends un tableau de données en entrée sur chaque nœud et retourne un tableau de données en sortie dans le nœud racine en réalisant l'opération indiquée.
Ici, on réalise un somme.
$\Longrightarrow$opération de **réduction**




```
MPI_Reduce(&sendbuf, &recvbuf, count,
datatype, mpi_operation, root, comm)
```

`MPI_Allreduce`: Similaire à `MPI_Reduce` mais distribue le résultat à tous les nœuds.

```
MPI_Allreduce(&sendbuf, &recvbuf,
count, datatype, mpi_operation, comm)
```



Une des difficultés d'utilisation des machines MIMD résidait dans le manque de logiciels adaptés.

Solution : ▷ des **bibliothèques spécialisées** de calcul disponible pour des machines parallèles de tout genre (NOW, machine pipeline, vectoriel *etc*).
▷ portabilité ;
▷ efficacité ;
▷ certains **algorithmes fondamentaux** de calcul reviennent régulièrement dans les programmes de calcul scientifique ;
▷ routines de base optimisées permettant de construire des programmes plus simples, plus portables et plus efficaces.

Exemples pour le calcul scientifique

- **BLAS**, BLAS Parallèles : «*Basic Linear Algebra Subroutines*»
  - BLAS de niveau 1 (les premières de l'algèbre linéaire) :
    - opérations de base sur les vecteurs
    - mise à jour et produit scalaire sur des vecteurs de même dimension
  - BLAS de niveau 2 : opérations entre matrices et vecteurs
  - BLAS de niveau 3 :opérations matrice-matrice
- **LAPACK** : «*Linear Algebra PACKage*»
  - résolution de systèmes linéaires, résolution des moindres carrés, valeur propre, valeur singulière factorisation de matrice LU…
  - conçue pour les machines vectorielles et les machines parallèles à mémoire partagée
  - LAPACK utilise les BLAS de niveau 3
- **ScaLAPACK** : Bibliothèque LAPACK pour machine parallèle à mémoire distribuée (scalable)
  - BLACS pour les communications PBLAS pour les calculs
  - PBLAS : BLAS parallèles, travaille sur des matrices distribuées selon un schéma cyclique par bloc

Pour les communications

- base de la programmation des machines parallèles ;
- amélioration des performances ;
- confort d'utilisation (les premières machines à mémoire distribuée étaient livrées avec des primitives de trop bas niveau et souvent uniquement bloquantes).

Exemples

BLACS (Basic Linear Algebra Communication Subroutines) : dédiée aux opérations de communications pour la parallélisation des BLAS ou pour LAPACK

- bibliothèque spécifique au **calcul matriciel** ;
- routines de bas niveau :
  - SD : envoyer un message
  - RV : recevoir un message
- routines de haut niveau :
  - BS : diffuser un message
  - BR : recevoir un message
- opérateurs globaux : MAX, MIN, SUM ;
- structures de données échangées : matrices rectangulaires et trapézoïdales.