

- Multicomputer bestehen aus einzelnen Rechnern mit eigenem Speicher, die über ein Netzwerk miteinander verbunden sind.
- Ein direkter Zugriff auf fremden Speicher ist nicht möglich.
- Die Kommunikation kann daher nicht über gemeinsame Speicherbereiche erfolgen. Stattdessen geschieht dies durch den Austausch von Daten über das Netzwerk.

- Eine traditionelle Vernetzung einzelner unabhängiger Maschinen über Ethernet und der Verwendung von TCP/IP-Sockets erscheint naheliegend.
- Der Vorteil ist die kostengünstige Realisierung, da die bereits vorhandene Infrastruktur genutzt wird und zahlreiche Ressourcen zeitweise ungenutzt sind (wie etwa Pools mit Desktop-Maschinen).
- Zu den Nachteilen gehört
 - ▶ die hohe Latenzzeit (ca. $150\mu s$ bei GbE auf Pacioli, ca. $500\mu s$ über das Uni-Netzwerk),
 - die vergleichsweise niedrige Bandbreite,
 - das Fehlen einer garantierten Bandbreite und
 - die Fehleranfälligkeit (wird von TCP/IP automatisch korrigiert, kostet aber Zeit).
 - Ferner fehlt die Skalierbarkeit, wenn nicht erheblich mehr in die Netzwerkinfrastruktur investiert wird.

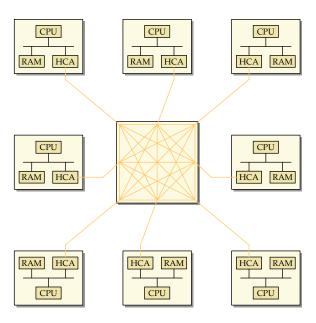
InfiniBand 216

 Mehrere Hersteller schlossen sich 1999 zusammen, um gemeinsam einen Standard zu entwickeln für Netzwerke mit höheren Bandbreiten und niedrigeren Latenzzeiten.

- Infiniband ist heute die populärste Vernetzung bei Supercomputern: Zwei Supercomputer der TOP-10 und 224 der TOP-500 verwenden Infiniband (Stand: November 2014).
- Die Latenzzeiten liegen im Bereich von 140 ns bis 2,6 μs .
- Brutto-Bandbreiten sind zur Zeit bis ca. 56 Gb/s möglich. (Bei Pacioli: brutto 2 Gb/s, netto mit MPI knapp 1 Gb/s.)
- Nachteile:
 - Keine hierarchischen Netzwerkstrukturen und damit eine Begrenzung der maximalen Rechnerzahl,
 - alles muss räumlich sehr eng zueinander stehen,
 - sehr hohe Kosten insbesondere dann, wenn viele Rechner auf diese Weise zu verbinden sind.

- Bei einer Vernetzung über Infiniband gibt es einen zentralen Switch, an dem alle beteiligten Rechner angeschlossen sind.
- Jede der Rechner benötigt einen speziellen HCA (*Host Channel Adapter*), der direkten Zugang zum Hauptspeicher besitzt.
- Zwischen den HCAs und dem Switch wird normalerweise Kupfer verwendet. Die maximale Länge beträgt hier 14 Meter. Mit optischen Kabeln und entsprechenden Adaptern können auch Längen bis zu ca. 100 Meter erreicht werden.
- Zwischen einem Rechner und dem Switch können auch mehrere Verbindungen bestehen zur Erhöhung der Bandbreite.
- Die zur Zeit auf dem Markt angebotenen InfiniBand-Switches bieten zwischen 8 und 864 Ports.

Topologie bei InfiniBand



Die extrem niedrigen Latenzzeiten werden bei InfiniBand nur durch spezielle Techniken erreicht:

- ▶ Die HCAs haben direkten Zugang zum Hauptspeicher, d.h. ohne Intervention des Betriebssystems kann der Speicher ausgelesen oder beschrieben werden. Die HCAs können dabei auch selbständig virtuelle in physische Adressen umwandeln.
- ▶ Es findet kein Routing statt. Der Switch hat eine separate Verbindungsleitung für jede beliebige Anschlusskombination. Damit steht in jedem Falle die volle Bandbreite ungeteilt zur Verfügung. Die Latenzzeiten innerhalb eines Switch-Chips können bei 200 Nanosekunden liegen, von Port zu Port werden beim 648-Port-Switch von Mellanox nach Herstellerangaben Latenzzeiten von 100-300 Nanosekunden erreicht.

Auf Pacioli werden auf Programmebene (mit MPI) Latenzzeiten von unter 5 μs erreicht.

Fallbeispiel Tianhe-2

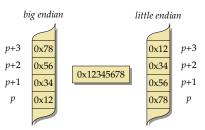
- Mit einer theoretischen Rechenleistung von 33,86 Petaflop/s ist die Installation seit Juni 2013 der stärkste Rechner.
- Tianhe-2 besteht aus 16.000 Knoten mit jeweils zwei Intel-Ivy-Bridge-Xeon-Prozessoren (mit je 12 Cores und 32 GB Hauptspeicher) und drei Xeon-Phi-Prozessoren (mit je 57 SIMD-Cores und 8 GB Hauptspeicher).
- Zwei Knoten passen jeweils auf ein Board, 16 Boards ergeben ein Frame und vier Frames passen in ein Rack. Insgesamt gibt es 125 Racks mit ingesamt 16.0000 Rechenknoten.
- Die Kommunikation läuft über ein speziell entwickeltes Interconnect-Netzwerk mit einer Fat-Tree-Topologie. An der Wurzel dieses Baums sind 13 Switches mit je 576 Ports.
- Zum Einsatz kommen MPI (auf Basis der MPICH-Implementierung mit speziellen Erweiterungen für das Interconnect-Netzwerk) und OpenMP, das mit seinen aktuellen SIMD-Erweiterungen die Einbindung der Xeon-Phi-Prozessoren ermöglicht.
- Siehe Jack Dongarra: Visit to the National University for Defense Technology Changsha, China.

- Mit einer Rechenleistung von 17,59 Petaflop/s ist die Installation im November 2014 der zweitstärkste Rechner.
- Titan besteht aus 18.688 einzelnen Knoten des Typs Cray XK7, die jeweils mit einem AMD-Opteron-6274-Prozessor mit 16 Kernen und einer Nvidia-Tesla-K20X-GPU bestückt sind.
- Jede der GPUs hat 2.688 SPs (Stream-Prozessoren).
- Jeweils vier Knoten werden zu einer Blade zusammengefasst, die in insgesamt 200 Schränken verbaut sind.
- Für je zwei Knoten gibt es für die Kommunikation jeweils einen Cray-Gemini-interconnect-Netzwerkknoten, mit 10
 Außenverbindungen, die topologisch in einem drei-dimensionalen Torus organisiert sind (vier redundant ausgelegte Verbindungen jeweils in den x- und z-Dimensionen und zwei in der y-Dimension, die topologisch in einem drei-dimensionalen Torus organisiert sind.
- Die Verbindungsstruktur wurde speziell für MPI ausgelegt und erlaubt auch zusätzlich die dreidimensionale Adressierung fremder Speicherbereiche.

- 12 Knoten mit jeweils 2 AMD-Opteron-252-Prozessoren (2,6 GHz) und 8 GiB Hauptspeicher.
- 20 Knoten mit jeweils 2 AMD-Opteron-2218-Prozessoren mit jeweils zwei Kernen und 8 GiB Hauptspeicher.
- 4 Knoten mit 2 Intel-Xeon-E5-2630-CPUs mit jeweils sechs Kernen und 128 GiB Hauptspeicher.
- Zu jedem Knoten gibt es eine lokale Festplatte.
- Über einen Switch sind sämtliche Knoten untereinander über Infiniband vernetzt.
- Zusätzlich steht noch ein GbE-Netzwerk zur Verfügung, an das jeder der Knoten angeschlossen ist.
- Pacioli bietet zwar auch IP-Schnittstellen für Infiniband an, aber diese sind nicht annähernd so effizient wie die direkte Schnittstelle.

- Da einzelne Rechner unterschiedlichen Architekturen angehören können, werden möglicherweise einige Datentypen (etwa ganze Zahlen oder Gleitkommazahlen) unterschiedlich binär repräsentiert.
- Wenn die Daten mit Typinformationen versehen werden, dann wird die Gefahr von Fehlinterpretationen vermieden.
- Die Übertragung von Daten gibt auch die Gelegenheit, die Struktur umzuorganisieren. Beispielsweise kann ein Spaltenvektor in einen Zeilenvektor konvertiert werden.
- Auch die Übertragung dynamischer Datenstrukturen ist möglich. Dann müssen Zeiger in Referenzen umgesetzt werden.
- Die Technik des Verpackens und Auspackens von Datenstrukturen in Byte-Sequenzen, die sich übertragen lassen, wird Serialisierung oder marshalling genannt.

Little vs. big endian



- Bei *little endian* sind im ersten Byte die niedrigstwertigen Bits (hier 0x78).
- Die Reihenfolge ist bei *big endian* genau umgekehrt, d.h. die höchstwertigen Bits kommen zuerst (hier 0×12).
- Da der Zugriff immer byte-weise erfolgt, interessiert uns nur die Reihenfolge der Bytes, nicht der Bits.
- Zu den Plattformen mit little endian gehört die x86-Architektur von Intel, während die SPARC-Architektur normalerweise mit big endian operiert.

 Prinzipiell hat sich als Repräsentierung das Zweier-Komplement durchgesetzt:

$$a = \sum_{i=1}^{n-1} a_i 2^{i-1} - a_n 2^n$$

- Wertebereich: $[-2^{n-1}, 2^{n-1} 1]$
- Dann bleibt nur noch die Entscheidung über die Größe von n und die Reihenfolge der einzelnen Bytes.
- Bei letzterem wird traditionell big endian gewählt (network byte order), siehe RFC 791, Appendix B, und RFC 951, 3. Abschnitt.

- Durch die Google Protocol Buffers wurde eine alternative Repräsentierung populär, bei der ganze Zahlen mit einer variablen Anzahl von Bytes dargestellt werden.
- Von den acht Bits wird das höchstwertige nur als Hinweis verwendet, ob die Folge fortgesetzt wird oder nicht: 1 = Folge wird fortgesetzt, 0 = Folge ist mit diesem Byte beendet.
- Die anderen sieben Bits (deswegen zur Basis 128) werden als Inhalt genommen, wobei sich Google für little endian entschied, d.h. die niedrigstwertigen Bits kommen zuerst.
- Dieses Verfahren ist jedoch ungünstig für negative Zahlen im Zweierkomplement, da dann für die -1 die maximale Länge zur Kodierung verwendet werden muss.
- Beispiel: 300 wird kodiert als Folge der beiden Bytes 0xac und 0x02 (binär: 1010 1100 0000 0010).

 Bei vorzeichenbehafteten ganzen Zahlen verwenden die Google Protocol Buffers die sogenannte Zickzack-Kodierung, die jeder ganzen Zahl eine nicht-negative Zahl zuordnet:

ganze Zahl	Zickzack-Kodierung	
0	0	
-1	1	
1	2	
-2	3	
2147483647	4294967294	
-2147483648	4294967295	

• Das bedeutet, dass das höchst- und das niedrigstwertige Bit jeweils vertauscht worden sind. Bei 32-Bit-Zahlen sieht das dann so aus: $(n << 1) \hat{\ } (n >> 31)$

- IEEE-754 (auch IEC 60559 genannt) hat sich als Standard für die Repräsentierung von Gleitkommazahlen durchgesetzt.
- Eine Gleitkommazahl nach IEEE-754 besteht aus drei Komponenten:
 - ▶ dem Vorzeichen s (ein Bit),
 - dem aus q Bits bestehenden Exponenten $\{e_i\}_{i=1}^q$,
 - und der aus p Bits bestehenden Mantisse $\{m_i\}_{i=1}^p$.
- Für **float** und **double** ist die Konfiguration durch den Standard festgelegt, bei **long double** ist keine Portabilität gegeben:

Datentyp	Bits	q	р
float	32	8	23
double	64	11	52
long double		≥ 15	≥ 63

• Festzulegen ist hier nur, ob die Binärrepräsentierung in *little* oder *big* endian übertragen wird.

- Kommunikation ist entweder bilateral (der Normalfall) oder richtet sich an viele Teilnehmer gleichzeitig (*multicast*, *broadcast*).
- Bei einer bilateralen Kommunikation ergibt sich aus der Asymmetrie der Verbindungsaufnahme eine Rollenverteilung, typischerweise die eines Klienten und die eines Diensteanbieters.
- Diese Rollenverteilung bezieht sich immer auf eine konkrete Verbindung, d.h. es können zwischen zwei Kommunikationspartnern mehrere Verbindungen mit unterschiedlichen Rollenverteilungen bestehen.
- Über ein Protokoll wird geregelt, wie die einzelnen Mitteilungen aussehen und in welcher Abfolge diese gesendet werden dürfen.

- Klassischerweise existieren Netzwerkdienste, die angerufen werden können:
 - Diese sind sinnvoll, wenn die gleichen Aufgaben wiederkehrend zu lösen sind.
 - Es bleibt aber das Problem, wie diese Dienste gefunden werden und wie eine sinnvolle Lastverteilung zwischen konkurrierenden Anwendungen erfolgt.
- Bei variierenden Aufgabenstellungen muss ggf. eine Anwendung erst auf genügend Rechnerresourcen verteilt werden:
 - Wie erfolgt die Verteilung?
 - Wird die Umfang der Ressourcen zu Beginn oder erst im Laufe der Anwendung festgelegt?
 - Wie erfolgt die Verbindungsaufnahme untereinander?

MPI 231

• MPI (*Message Passing Interface*) ist ein Standard für eine Bibliotheksschnittstelle für parallele Programme.

- 1994 entstand die erste Fassung (1.0), 1995 die Version 1.2 und seit 1997 gibt es 2.0. Im September 2012 erschien die Version 3.0, die bei uns bislang nur auf der Thales unterstützt wird. Die Standards sind öffentlich unter http://www.mpi-forum.org/.
- Der Standard umfasst die sprachspezifischen Schnittstellen für Fortran und C. (Es wird die C-Schnittstelle in C++ verwendet. Alternativ bietet sich die Boost-Library an:

```
http://www.boost.org/doc/libs/1_55_0/doc/html/mpi.html).
```

- Es stehen mehrere Open-Source-Implementierungen zur Verfügung:
 - OpenMPI: http://www.open-mpi.org/ (auf Thales und Theseus, jeweils mit den Solaris-Studio-Übersetzern)
 - ► MPICH: http://www.mpich.org/ (auf unseren Debian-Installationen)
 - MVAPICH: http://mvapich.cse.ohio-state.edu/ (spezialisiert auf Infiniband, auf Pacioli)

- Zu Beginn wird mit *n* die Zahl der Prozesse festgelegt.
- Jeder Prozess läuft in seinem eigenen Adressraum und hat innerhalb von MPI eine eigene Nummer (rank) im Bereich von 0 bis n-1.
- Die Kommunikation mit den anderen Prozessen erfolgt über Nachrichten, die entweder an alle gerichtet werden (broadcast) oder individuell versandt werden.
- Die Kommunikation kann sowohl synchron als auch asynchron erfolgen.
- Die Prozesse können in einzelne Gruppen aufgesplittet werden.

```
int main(int argc, char** argv) {
  MPI Init(&argc, &argv);
   int nofprocesses; MPI_Comm_size(MPI_COMM_WORLD, &nofprocesses);
   int rank; MPI_Comm_rank(MPI_COMM_WORLD, &rank);
  // process command line arguments
  int n; // number of intervals
  if (rank == 0) {
      cmdname = argv[0];
     if (argc > 2) usage();
     if (argc == 1) {
        n = nofprocesses;
      } else {
         istringstream arg(argv[1]);
        if (!(arg >> n) || n <= 0) usage():
  // ...
  MPI_Finalize();
  if (rank == 0) {
      cout << setprecision(14) << sum << endl;
```

```
MPI_Init(&argc, &argv);

int nofprocesses; MPI_Comm_size(MPI_COMM_WORLD, &nofprocesses);
int rank; MPI_Comm_rank(MPI_COMM_WORLD, &rank);
```

- Im Normalfall starten alle Prozesse das gleiche Programm und beginnen alle mit main(). (Es ist auch möglich, verschiedene Programme über MPI zu koordinieren.)
- Erst nach dem Aufruf von *MPI_Init()* sind weitere MPI-Operationen zulässig.
- MPI_COMM_WORLD ist die globale Gesamtgruppe aller Prozesse eines MPI-Laufs.
- Die Funktionen MPI_Comm_size und MPI_Comm_rank liefern die Zahl der Prozesse bzw. die eigene Nummer innerhalb der Gruppe (immer ab 0, konsekutiv weiterzählend).

```
// process command line arguments
int n; // number of intervals
if (rank == 0) {
   cmdname = argv[0];
   if (argc > 2) usage();
   if (argc == 1) {
        n = nofprocesses;
   } else {
        istringstream arg(argv[1]);
        if (!(arg >> n) || n <= 0) usage();
   }
}</pre>
```

 Der Hauptprozess hat den rank 0. Nur dieser sollte verwendet werden, um Kommandozeilenargumente auszuwerten und/oder Ein- und Ausgabe zu betreiben.

```
// broadcast number of intervals
MPI_Bcast(&n, 1, MPI_INT, 0, MPI_COMM_WORLD);
```

- Mit der Funktion MPI_Bcast kann eine Nachricht an alle Mitglieder einer Gruppe versandt werden.
- Die Funktion bezieht sich auf eine Gruppe, wobei MPI_COMM_WORLD die globale Gesamtgruppe repräsentiert.
- Der erste Parameter ist ein Zeiger auf das erste zu übermittelnde Objekt. Der zweite Parameter nennt die Zahl der zu übermittelnden Objekte (hier nur 1).
- Der dritte Parameter spezifiziert den Datentyp eines zu übermittelnden Elements. Hier wird MPI_INT verwendet, das dem Datentyp int entspricht.
- Der vorletzte Parameter legt fest, welcher Prozess den Broadcast verschickt. Alle anderen Prozesse, die den Aufruf ausführen, empfangen das Paket.

```
// broadcast number of intervals
MPI_Bcast(&n, 1, MPI_INT, 0, MPI_COMM_WORLD);
double value = 0: // summed up value of our intervals:
if (rank < n) {
   int nofintervals = n / nofprocesses;
   int remainder = n % nofprocesses;
   int first_interval = rank * nofintervals;
   if (rank < remainder) {
     ++nofintervals:
     if (rank > 0) first interval += rank:
   } else {
     first interval += remainder:
   int next_interval = first_interval + nofintervals;
   double xleft = a + first interval * (b - a) / n:
   double x = a + next_interval * (b - a) / n;
   value = simpson(f, xleft, x, nofintervals);
double sum:
MPI_Reduce(&value, &sum, 1, MPI_DOUBLE, MPI_SUM, 0, MPI_COMM_WORLD);
```

```
mpi-simpson.cpp
```

238

```
double sum;
MPI_Reduce(&value, &sum, 1, MPI_DOUBLE, MPI_SUM, 0, MPI_COMM_WORLD);
```

- Mit der Funktion MPI_Reduce werden die einzelnen Ergebnisse aller Prozesse (einschließlich dem auswertenden Prozess) eingesammelt und dann mit einer auszuwählenden Funktion aggregiert.
- Der erste Parameter ist ein Zeiger auf ein Einzelresultat. Der zweite Parameter verweist auf die Variable, wo der aggregierte Wert abzulegen ist.
- Der dritte Parameter liegt wieder die Zahl der Elemente fest (hier 1) und der vierte den Datentyp (hier MPI_DOUBLE für double).
- Der fünfte Parameter spezifiziert die aggregierende Funktion (hier MPI_SUM zum Aufsummieren) und der sechste Parameter gibt an, welcher Prozess den aggregierten Wert erhält.

Übersicht der Datentypen

```
MPI unterstützt folgende Datentypen von C++:
 MPI CHAR
                                    char
 MPI_SIGNED_CHAR
                                    signed char
 MPI UNSIGNED CHAR
                                    unsigned char
 MPI SHORT
                                    signed short
 MPI INT
                                    signed int
 MPI LONG
                                    signed long
 MPI LONG LONG
                                    signed long long int
 MPI UNSIGNED SHORT
                                    unsigned short
                                    unsigned int
 MPI UNSIGNED
 MPI UNSIGNED LONG
                                    unsigned long
 MPI UNSIGNED LONG LONG
                                    unsigned long long int
 MPI FLOAT
                                    float
 MPI DOUBLE
                                    double
 MPI LONG DOUBLE
                                    long double
 MPI WCHAR
                                    wchar_t
 MPI CXX BOOL
                                    bool
 MPI CXX FLOAT COMPLEX
                                    std::complex<float>
 MPI CXX_DOUBLE_COMPLEX
                                    std::complex<double>
 MPI CXX LONG DOUBLE COMPLEX
                                    std::complex<long double>
```

- Die Option mpi sollte in ~/.options genannt werden. Ggf. hinzufügen und erneut anmelden.
- Dann ist /usr/local/openmpi-1.8.5/bin relativ weit vorne im Suchpfad.
- Statt den C++-Compiler von Solaris Studio mit CC direkt aufzurufen, wird stattdessen mpiCC verwendet, das alle MPI-spezifischen Header-Dateien und Bibliotheken automatisch zugänglich macht.
- Die Option -fast schaltet alle Optimierungen ein. Die Warnung, die deswegen ausgegeben wird, kann ignoriert werden.

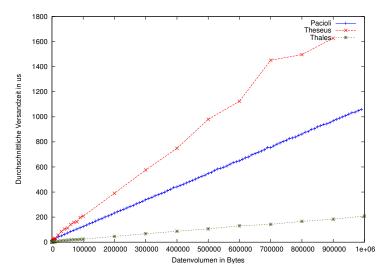
```
thales$ ls
Makefile mpi-simpson.cpp
thales$ make
mpiCC -fast -std=c++11 mpi-simpson.cpp -o mpi-simpson
thales$ time mpirun -np 1 mpi-simpson 100000000
3.1415926535901
real 0m0.865s
user 0m0.791s
sys
       0m0.037s
thales$ time mpirun -np 4 mpi-simpson 100000000
3.1415926535897
real 0m0.337s
user 0m0.905s
sys
       0m0.110s
thales$
```

- Mit mpirun können MPI-Anwendungen gestartet werden.
- Wenn das Programm ohne mpirun läuft, dann gibt es nur einen einzigen Prozess.
- Die Option -np spezifiziert die Zahl der zu startenden Prozesse. Per Voreinstellung starten die alle auf der gleichen Maschine.

- Es stehen *mpic++* und *mpirun* zur Verfügung.
- Es kommt die MPICH-Implementierung zum Einsatz.
- Insbesondere die Optionen von mpirun weichen je nach verwendeter MPI-Implementierung ab. Entsprechend lohnt sich das Lesen der Manualseite.

Verteilung auf mehrere Rechner

- Die Option -hostfile ermöglicht auf den Suns die Spezifikation einer Datei mit Rechnernamen. Diese Datei sollte soviel Einträge enthalten, wie Prozesse gestartet werden.
- Bei OpenMPI werden die Prozesse auf den anderen Rechnern mit Hilfe der ssh gestartet. Letzteres sollte ohne Passwort möglich sein. Entsprechend sollte mit ssh-keygen ein Schlüsselpaar erzeugt werden und der eigene öffentliche Schlüssel in ~/.ssh/authorized_keys integriert werden.
- Das reguläre Ethernet mit TCP/IP ist jedoch langsam!



 Pacioli: 8 Prozesse, Infiniband. Gemeinsamer Speicher: Theseus: 6 Prozesse; Thales: 8 Prozesse (2 Intel X5650-Prozessoren, 2,6 GHz) Warum schneidet die Pacioli mit dem Infiniband besser als die Theseus ab?

- OpenMPI nutzt zwar gemeinsame Speicherbereiche zur Kommunikation, aber dennoch müssen die Daten beim Transfer zweifach kopiert werden.
- Das Kopieren erfolgt zu Lasten der normalen CPUs.
- ► Hier wäre OpenMP grundsätzlich wesentlich schneller, da dort der doppelte Kopieraufwand entfällt.
- Sobald kein nennenswerter Kopieraufwand notwendig ist, dann sieht die Theseus mit ihren niedrigeren Latenzzeiten besser aus: 2,2 μs vs. 4,8 μs bei Pacioli. (Thales: 0,62 μs).