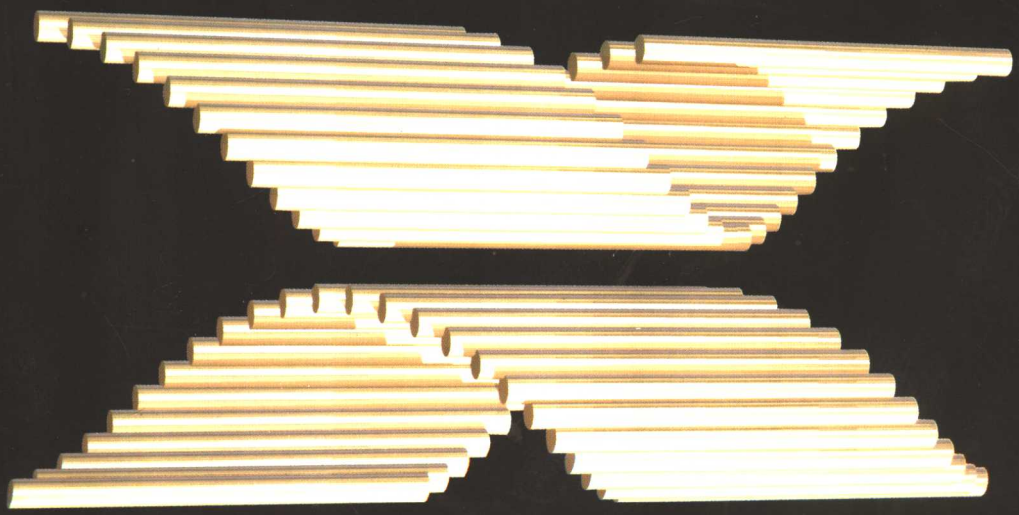
Mc Graw Hill Education
世界著名计算机教材精选

MPI与OpenMP并行程序设计

C语言版

Michael J. Quinn 著
陈文光 武永卫 等译



PARALLEL PROGRAMMING

in C with MPI and OpenMP

清华大学出版社
Mc Graw Hill

世界著名计算机教材精选

MPI与OpenMP并行程序设计

（C语言版）

Michael J. Quinn 著

陈文光 武永卫 等 译

清华大学出版社

北 京

Michael J. Quinn
Parallel Programming in C with MPI and OpenMP
EISBN: 0-07-282256-2

图书在版编目(CIP)数据

MPI 与 OpenMP 并行程序设计：C 语言版/奎因（Quinn, M. J.）著；陈文光，武永卫等译. —北京：清华大学出版社，2004.10
（世界著名计算机教材精选）
书名原文：Parallel Programming in C with MPI and OpenMP
ISBN 7-302-09555-8

I. M…　II. ①奎…　②陈…　③武…　III. 并行程序–程序设计–教材　IV. TP311.11

中国版本图书馆 CIP 数据核字（2004）第 095663 号

出 版 者：清华大学出版社　　**地　　址**：北京清华大学学研大厦
http://www.tup.com.cn　　**邮　　编**：100084
社总机：010-62770175　　**客户服务**：010-62776969
责任编辑：龙啟铭
印 刷 者：世界知识印刷厂
装 订 者：三河市金元装订厂
发 行 者：新华书店总店北京发行所
开　　本：185×260　**印张**：27.75　**字数**：687 千字
版　　次：2004 年 10 月第 1 版　2004 年 10 月第 1 次印刷
书　　号：ISBN 7-302-09555-8/TP・6645
印　　数：1~3000
定　　价：51.00 元

前　言

本书是用 C 语言进行 MPI 和 OpenMP 并行编程的实用教程，适用于大学高年级本科生、研究生以及利用本书进行自学的计算机专业人员。读者需要有很好的 C 语言编程经验，并学习过基础的算法分析课程。

对并行程序设计感兴趣的 Fortran 程序员也可以从本书中受益。尽管本书中的例子都是用 C 写的，但是使用 MPI 和 OpenMP 进行并行程序设计的基本概念对于 C 和 Fortran 来说是基本相同的。

在过去 20 年中，我为数以百计的本科生和研究生讲授了并行程序设计。在这个过程中，我逐步了解了人们在开始“用并行方式思考”和编写并行程序时所遇到的各种问题。逐步设计和实现的程序更容易让学生们受益。因此我的哲学是仅在需要时才引入新的功能，尽可能地在解决设计、实现和分析中的具体问题时引入新概念。

本书的前两章解释了并行计算的起源并对并行体系结构进行了综述。第 3 章介绍了 Foster 的并行算法设计方法论和几个应用该方法的实例。第 4、5、6、8 和 9 章介绍了如何使用该设计方法，为一系列从易到难的问题开发 MPI 程序。这些章节中用到的 27 个 MPI 函数是 MPI 函数库的一个子集，但已经足够为很多类型的实际应用设计并行程序。这些章节还介绍了能够简化矩阵和向量 I/O 的函数，附录 B 中给出了该 I/O 库的源代码。

第 4、5、6 和 8 章的程序在一个集群系统上进行了性能测试，并在书中给出了测试结果。由于新的处理器比本书中所用到的要快得多，读者可能会发现本书中用到的处理器已经落后了好几代。但是在书中给出测试结果并不是要让读者对计算速度感到吃惊，而是为了表明将串行程序性能、互连网络的通信和延迟等信息集成起来，可以相当准确地预测并行程序的性能。

第 7 章主要介绍了分析和预测并行系统性能所用到的 4 种度量：Amdahl 定律、Gustafson-Barsis 定律、Karp-Flatt 度量和等效度量。

第 10~16 章提供了更多的例子，表明如何分析问题并设计好的并行算法来解决问题。使用 MPI 来实现并行算法的任务则留给了读者。我介绍了蒙特卡洛法和并行随机数生成的相关问题。后面几章介绍了若干关键算法：矩阵乘法、高斯消去法、共轭梯度法、有限元方法、排序、FFT、回溯搜索、分支定界搜索以及 Alpha-Beta 搜索。

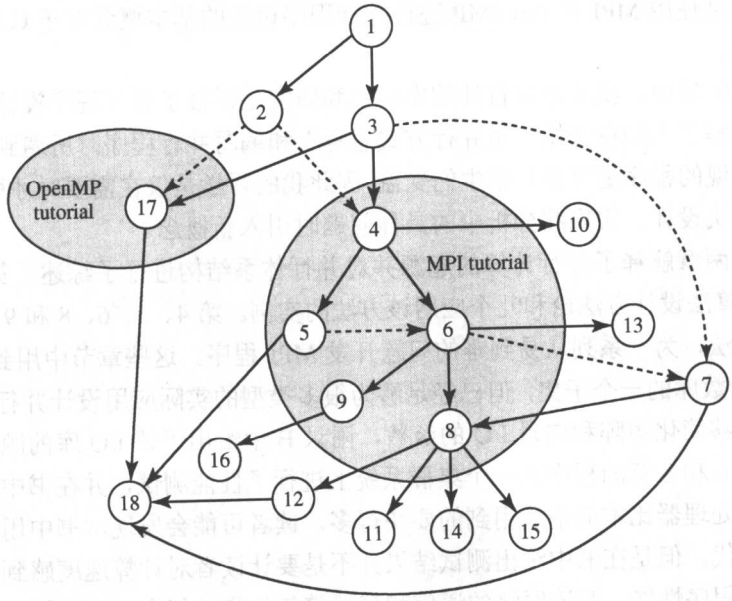
第 17、18 章介绍了新的共享内存编程标准 OpenMP。介绍了将串行程序段转化为并行程序段所需的 OpenMP 功能，并用两个实例讲解了如何将 MPI 程序转化为 MPI/OpenMP 混合程序。在多处理器集群系统上，混合程序比 MPI 程序能够得到更好的性能。

本书包含了超过一学期并行程序设计课程所需的内容。尽管并行程序设计比传统程序设计要困难得多，但也会带来更多的回报。即使在老师的指导与帮助下，大多数学生对于在多个处理器上执行单个任务仍然会觉得有些害怕。但是，当他们那看到调试过的程序比“普通”C 程序要快得多的时候，这种害怕就转换成了真正的成就感。因此，编程练习应

该是本课程的中心内容。

幸运的是，并行计算机比以前更容易获得了。如果无法使用商用并行计算机，使用几台 PC 机、网络设备和自由软件搭建一个小型的集群系统是一件很容易的事情。

图前.1 说明了本书章节的阅读顺序。图中实线箭头代表强依赖关系，虚线箭头代表弱依赖关系。按照章节顺序阅读本书将满足所有的章节依赖关系。但是，如果你希望让学生尽快开始用 C 语言编写 MPI 程序，那么你可能希望跳过第 2 章，或仅讲授该章的 1~2 节内容。如果你希望集中讲授数值算法，那么可以跳过第 5 章，并用其他方式介绍函数 MPI_Bcast。如果你希望学生从蒙特卡洛法开始，那么可以在第 4 章后直接跳到第 10 章。如果你希望在 MPI 之前就讲授 OpenMP，可以在第 3 章后直接跳到第 17 章。



图前.1 章节之间的依赖关系：实线箭头代表强依赖关系，虚线箭头代表弱依赖关系

感谢 McGraw-Hill 出版社的每位员工，他们帮助我创造了这本书，特别是 Betsy Jones, Michelle Flomenhoft 和 Kay Brimeyer。感谢他们的赞助、鼓励和帮助。同样感谢 Maggie Murphy 和 Interactive Composition Corporation 公司其他排版者所提供的帮助。

感谢本书的审稿者，他们仔细阅读了我的手稿，修正了其中的错误，指出其中的弱点并建议补充内容。他们是：A. P. W. Bohm, Colorado 州立大学；Thomas Cormen, Dartmouth 学院；Narsingh Deo, Central Florida 大学；Philip J. Hatcher,New Hampshire 大学；Nickolas S. Jovanovic, Arkansas 大学 Little Rock 分校；Dinesh Mehta, Colorado 矿业学校；Zina Ben Miled, Indiana 大学-Purdue 大学；Paul E. Plassman,Pennsylvania 州立大学；Quinn O. Snell, Brigham Young 大学；Ashok Srinivasan, Florida 州立大学；Xian-He Sun, Illinois 理工学院；Virgil Wallentine, Kansas 州立大学；Bob Weems, Texas 大学 Arlington 分校；Kay Zemoudel, California 州立大学和 Jun Zhang，Kentucky 大学。

Oregon 州立大学的许多同事也给予了我不少帮助：Robin Landaw 和 Henri Jansen 分别帮助我了解了 Monte Carlo 算法和详细的平衡条件；学生 Charles Sauerbier 和 Bernd Michael

Kelm；Tim Budd 教我如何把 PostScript 图插入到 LaTeX 文档中；Jalal Haddad 提供了技术支持。感谢他们的帮助！

最后，感谢我的妻子 Victoria。她鼓励我返回到教科书的写作中来。感谢那个令人鼓舞的圣诞节礼物："Chicken Soup for the Writer's Soul: Stories to Open the Heart and Rekindle the Spirit of Writers"。

译 者 序

并行处理是解决人类重大挑战问题的关键技术。随着集群技术和 SMP 系统的发展，并行处理在科学研究、工程计算以及商业计算等领域得到了越来越多的应用。并行程序设计一直是并行处理技术中的核心问题，人们也进行了非常多的尝试，提出了多种并行程序开发方法和并行程序设计语言。近年来，MPI 和 OpenMP 逐渐成为了并行程序设计的主流方式。

本书是介绍使用 MPI 和 OpenMP 进行并行程序设计的教材，作者是美国俄勒冈州立大学的 Miachael J. Quinn 教授。我们觉得此书具有下面几个特点:

- 作为一本程序设计教材，本书没有简单地罗列所涉及的语句和函数，而是为每个语句和函数的“出场”都精心设计了实际问题，让读者能够在实际的上下文中了解这些语句和函数的目的和作用，以及在实际程序中的使用方式。这无疑将对读者理解相关的概念带来极大的帮助。
- 全书中贯穿使用了 Foster 提出的并行程序设计方法，即划分、通信、聚集和映射四步法。掌握系统化的并行程序设计方法，有助于读者养成良好的习惯，做出正确的设计决策，开发出高效率的并行程序。
- 并行程序的性能是非常重要的，一个低效的并行程序可能还没有串行程序速度快。本书专门介绍了并行程序性能量度模型和性能分析技术，并在多个章节中进行了实例分析，对并行程序的性能问题给予了足够的重视。
- 内容较新。尽管目前已经有较多讲授 MPI（消息传递接口）并行程序设计的教材，但本书不仅包括了 MPI 并行程序设计，还包括了 OpenMP 程序设计的内容。这是目前许多并行程序设计教材所不具备的。本书还介绍了 MPI/OpenMP 混合编程模式，该模式对于现有的 SMP（对称多处理器）集群系统具有重要意义。此外，处理器在未来一段时间内的发展趋势是在一个芯片上集成多个核心，研究 MPI/OpenMP 混合编程模式对采用多内核处理器构造的并行系统的适用性也是一个重要的研究课题。

本书由于篇幅所限，并未在所有有关问题上都进行详细的展开讲解，但每一章最后的参考文献为希望更加深入学习的读者提供了进一步阅读的建议。

因此我们认为，本书是一本很优秀的并行程序设计教材，适合学习并行程序设计的学生和计算机专业人士阅读。我们希望本书中文版的出版，能够将本书介绍给更多的中国读者，并为大家的阅读带来方便。同时，由于本书所涉及的领域相当广泛，译者水平有限，翻译中可能还存在不妥之处，敬请广大读者批评指正。

感谢清华大学计算机系的周立柱教授，将本书介绍给我们。感谢清华大学出版社的龙啟铭编辑，为本书的中文版的出版所付出的耐心和努力。

全书由陈文光、武永卫、陈永健、李建江、薛瑞尼、齐琳等译。清华大学计算机系都志辉进行了审读。

译 者

目　录

第 1 章　动机和历史

Well done is quickly done.

Caesar Augustus

1.1　概　　述

你是那些认为运行速度还不够“快”的人吗？现在的计算机工作站比10 年前的要快了100 倍，但是计算科学家和工程师还需要更快的速度。他们已经对问题进行了大量的简化，但是在现有的计算机上仍然需要数小时、数日甚至数周的时间来完成他们的程序。

更快的计算机可以处理更加复杂的计算问题。假如你可以等待一个晚上来得到计算结果。当你的程序突然快了 10 倍的时候，过去一些无法忍受的计算任务现在变得可以接受了，过去需要大约一周时间的计算，现在可以用 15 小时左右来完成了。

当然，你可以等待 CPU 运行得更快。5 年后的 CPU 将比现在快 10 倍（根据摩尔定理）。但另一方面，如果你可以等待 5 年的时间，你对速度的要求肯定没有那么高！并行计算是现在就获得更高性能的有效方法。

什么是并行计算

并行计算就是使用并行计算机来减少解决单个计算问题所需的时间。现在，并行计算被认为是科学家和工程师用来解决各种领域的问题的标准方法，如银河系的演变过程、气候模拟、飞行器设计以及分子动力学等。

什么是并行计算机

并行计算机是支持并行计算的多处理器计算机系统。多计算机（multicomputer）和集中式多处理器（centralized multiprocessors）是两种主要的并行计算机。多计算机是由多台计算机和互连网络组成的并行计算机。不同计算机上的处理器之间通过传递消息来相互通信。

相反，集中式多处理器（也称为对称多处理器系统，SMP 或 symmetrical mutltiprocessor）是集成的更加紧密的系统。系统中的所有 CPU 共享全局内存，并通过共享内存支持处理器之间的通信和同步。

在第 2 章，我们将研究集中式多处理器、多计算机以及其他类型的并行计算机。

什么是并行程序设计

并行程序设计是使用程序设计语言显式地说明计算中不同部分如何在不同处理器上同时执行。在本章的最后，我们将讨论各种并行程序设计语言。

并行程序设计真的有必要吗

人们投入了很多的精力来研究自动并行化技术，目标是能够自动将 Fortran77 或 C 语言程序转换成在拥有大量处理器的并行计算机上可执行的高效并行代码。这是一个非常困难的问题，尽管出现了一些试验性的并行化编译器，但是迄今为止，还没有出现任何成熟的商业产品。因此，我们只能自己编写并行程序。

为什么应该使用 MPI 或 OpenMP 编程

MPI（Message Passing Interface，消息传递接口）是消息传递库的标准。几乎所有的并行计算机都支持该标准通信库。如果你希望在集群系统上运行 MPI 的话，也可以使用免费的 MPI 库。如果使用 MPI 开发程序，当你可以使用更新、更快的系统的时候，可以重用该程序而无需重新编写。

并行计算机正越来越多地使用 SMP 系统来构建。在每个 SMP 系统内部，CPU 共享全局地址空间。尽管 MPI 是在不同 SMP 系统之间进行通信的良好方式，但 OpenMP 在描述单个 SMP 节点内部的处理器之间通信上更加有效。在第 18 章，我们将会看到，在实际应用程序中采用 MPI/OpenMP 混合编程，可以获得比仅使用 MPI 编程更好的性能。

通过本书的学习，你可以学到一些关于并行计算机硬件的知识，以及很多并行程序设计策略方面的知识，包括并行算法设计和分析，程序实现和调试，以及测试和优化程序的方法。

1.2 现代科学方法

经典科学是基于观察、理论和实际实验的。通过对现象的观察，总结出假说。科学家发展出理论来解释现象，并设计实验来对理论进行测试。通常，实验的结果会导致科学家对理论进行修正，或是完全放弃。于是，观察又成为中心的步骤。

经典科学的特征是模型和实际实验。例如，很多物理学的学生利用纸带、滑块和气垫导轨研究过质量、力和加速度之间的关系。物理实验允许在实践中检验理论（比如牛顿第一运动定律）。

现代科学的特征是模型、理论、实验和数值模拟。科学家们经常无法通过实际实验来验证理论，因为实验过于昂贵、过于耗时或是根本无法实现。因此，数值模拟成为了科学家们日益重要的工具，如图 1.1 所示。科学家使用数值模拟来实现模型，比较数值模拟的行为并从自然界得到的数据。科学家可以利用这些数据的差别来修订理论或是进行更多的观察。

许多重要的科学问题是非常复杂，需要功能非常强大的计算机来进行数值模拟。这些复杂的问题，经常视作为科学上的**重大挑战**问题。它们可以分为以下几类：

（1）量子化学、统计力学和相对论物理学；

（2）宇宙学和天体物理学；

（3）计算流体力学和湍流；

（4）材料设计和超导；

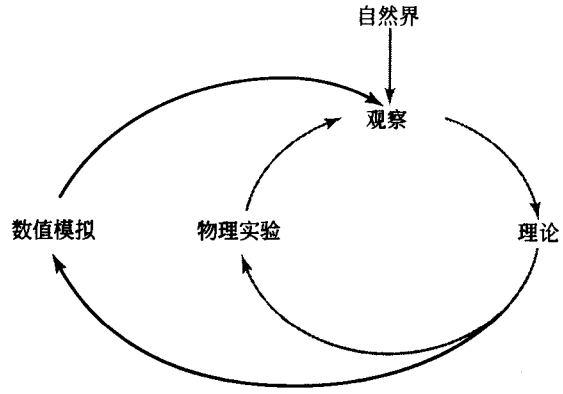


图 1.1　数值模拟方法的引入区分了经典科学方法和现代科学方法

（5）生物学、制药研究、基因组序列分析、基因工程、蛋白质折叠、酶活动和细胞建模；

（6）药物、人类骨骼和器官建模；

（7）全球天气和环境建模。

尽管这些重大挑战问题是在 20 世纪 80 年代才作为高性能计算进一步发展的推动力而出现的，但你也可以把整个电子计算的历史看作对高性能的追求的历史。

1.3　超级计算的进化

美国政府在开发和使用高性能计算机方面扮演了重要的角色。在第二次世界大战期间，美国军队为了加速弹道表的计算而投资研制了 ENIAC。在二战后的 30 年里，美国政府使用高性能计算机来设计核武器、破译密码，并进行其他与国家安全相关的应用。

超级计算机是所能建造的、功能最强大的计算机（随着计算机速度的增加，成为“超级计算机”的条件也会随之提高）。术语“超级计算机”是 1976 年随着 Cray-1 计算机的出现而得到广泛使用的。Cray-1 是流水线向量处理器，而不是多计算机系统，但是其计算能力可以超过每秒 1 亿次浮点运算。

超级计算机通常需要 1000 万美元以上。高成本一度意味着超级计算机几乎只能在政府所属的研究机构中找到，比如美国政府的 Los Almos 国家实验室。

但是，随着时间的推移，超级计算机逐渐开始在政府部门以外出现了。20 世纪 70 年代末，超级计算机在资本密集型工业中开始得到应用，石油公司使用超级计算机寻找石油，汽车生产商开始使用超级计算机来改进其产品的燃油效率和安全性。

10 年后，全球数以百计的公司使用超级计算机来支持其业务，原因很简单：对很多业务来说，更快的计算能力意味着竞争优势。更快的碰撞模拟实验可以减少汽车制造商设计一辆新车所用的时间；更快的药物设计可以增加医药公司所持有的专利数。高速计算机甚至用于设计类似于一次性尿布这样的日常用品！

在过去 50 年中，计算速度有了飞速的增长。ENIAC 每秒可以执行约 350 次乘法，今天的超级计算机则要快上 10 亿倍，能够每秒执行数万亿次浮点运算。

单处理器的速度比 50 年前增长了大约 100 万倍。主要的性能增长归功于处理器时钟