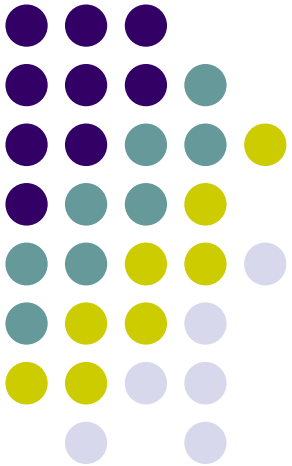
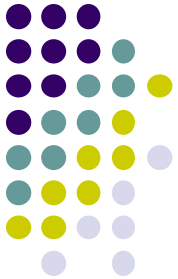
2016年度
実践的並列コンピューティング
第4回

OpenMPによる
共有メモリプログラミング (2)

遠藤 敏夫

endo@is.titech.ac.jp





前回の復習

- OpenMP: 共有メモリ並列プログラミングモデルの一つ
- サンプルプログラムはTSUBAMEの
  ~endo-t-ac/ppcomp/16/
- プログラム中に
  - #pragma omp parallel

  と書くと、その次のブロック・文が並列に実行される (並列region)
- 並列region中に
  - #pragma omp for

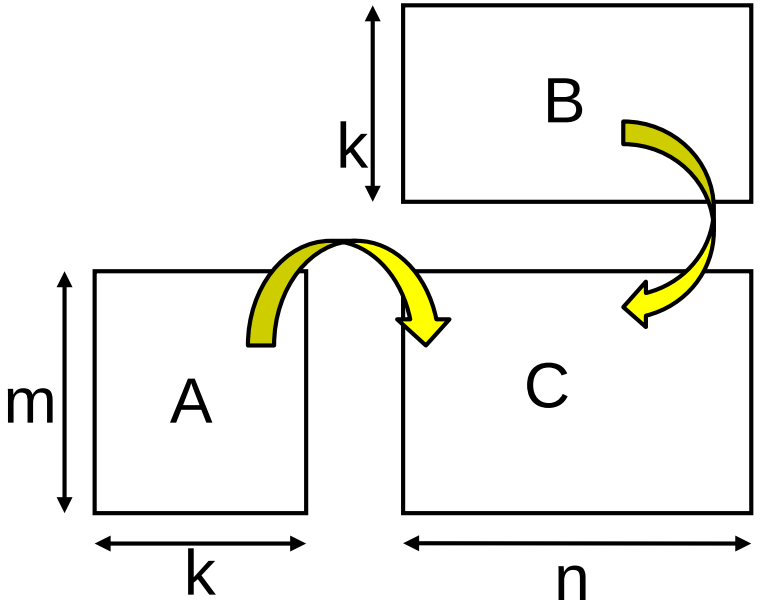
  と書くと、その次のfor文は、スレッド間で分担して実行される

行列積サンプルプログラムmm

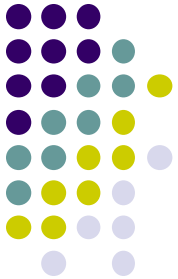
実行方法: ./mm [m] [n] [k]

(m×k)行列と(k×n)行列の積

- 三重のforループで記述
- 動的長さ配列．二次元を一次元で表現　(column-major)
- 計算量：O(mnk)
  - 必要な浮動小数演算数は2mnk
  - サンプルでは計算速度を2mnk/t (tは実行時間)で計算



C言語の残念な点：配列長を動的に決められない



- int a[n]; (これはエラー)を実現するには？
- 重要な関数：void *malloc(size_t size);
  ⇒sizeバイトのメモリを「ヒープ領域」より確保し，そのポインタを返す
- 領域が不要になったら，free関数で解放する

固定長さの場合

```
int a[5];

...この間は，a[i]を
自由に使える...
```

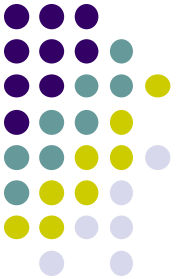
```
int *a;
a = (int *)malloc(sizeof(int)*n);

...この間は，a[i]を自由に使える...

free(a);
```

※補足: C99規格では可変長配列(variable length arrays)が可能。~endo-t-ac/ppcomp/16/vla/ にサンプルあり

大きさが動的に決まる多次元配列を作りたい場合



int a[m][n]; (これはエラー)を実現するには？

素直にはできないので，以下のいずれか

- ポインタのポインタにする

  各行の一次元配列をmallocし，それらへのポインタをまとめた動的配列をmallocする

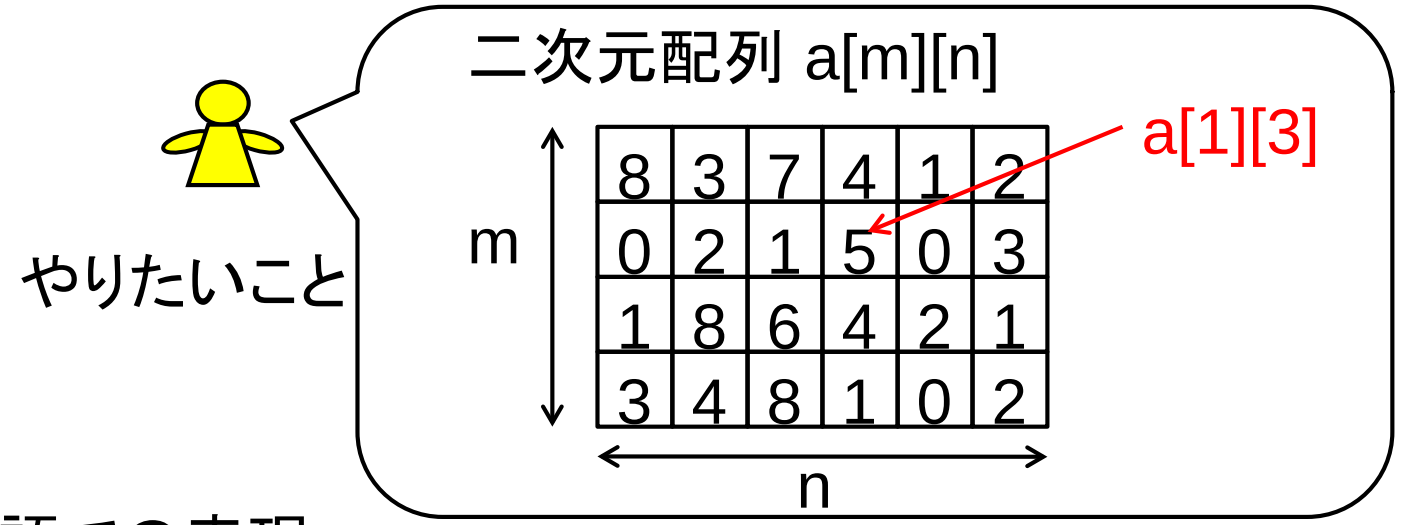
- あきらめて，長さm×nの一次元配列にする

  (mm, diffusionサンプルプログラムではこちらを採用)

  a[i][j] の代わりに，a[i*n+j]とする

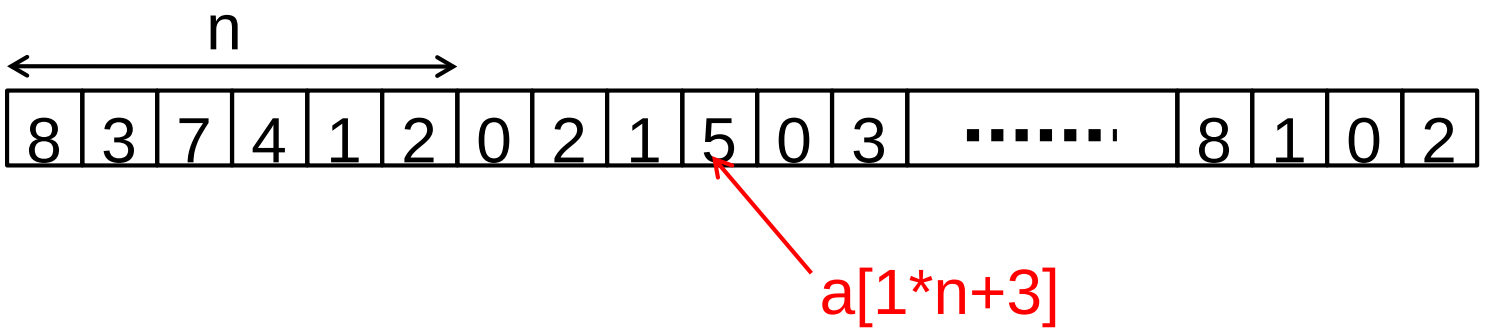
※補足: C99可変長配列は多次元もok
(ただしこの機能自体が将来安泰かは微妙)

二次元配列の一次元配列による表現



C言語での表現

int *a;　a = malloc(sizeof(int)*m*n);

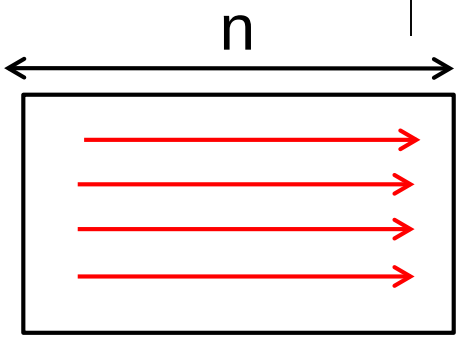


配列要素$a_{i,j}$を、a[i*n+j]と表す

二次元データの並びの呼び方

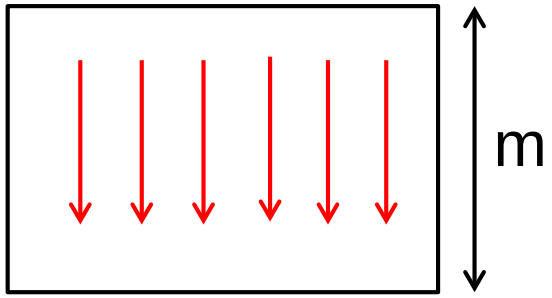
Row major order
- C言語の二次元配列

$a_{i,j} \Rightarrow a[i*n+j]$



Column major order
- Fortranの二次元配列
- BLASライブラリ
- mmサンプル

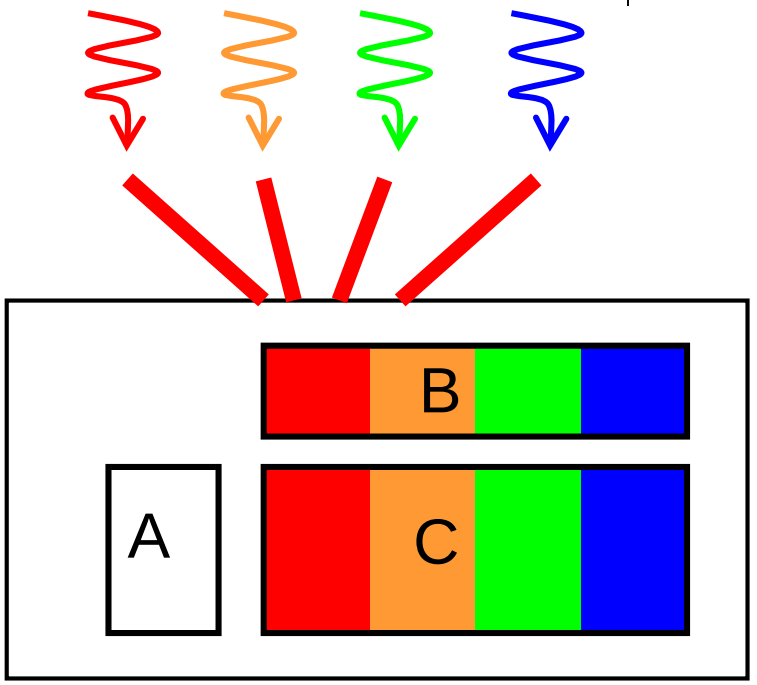
$a_{i,j} \Rightarrow a[i+j*m]$



- 三次元以上でも、プログラマが並びを考える必要あり

mmのOpenMPによる並列化 (mm-omp)

- 三重ループの最外ループを並列化
  - #pragma omp parallel for
    - #pragma omp parallelの直下に#pragma omp forを書くのと同じ意味
  - 列方向のループ(長さn)をスレッド間で分割することになる
    - 行方向のループ(m)を分割しても正しく動く。ただし性能は?
    - 内積方向のループ(k)を分割するのはダメ! なぜ?

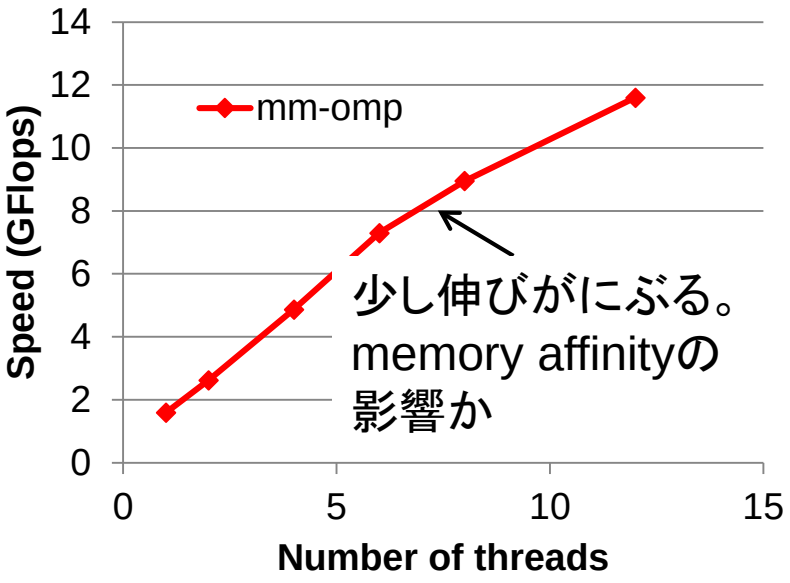


- 各スレッドは、行列B, Cの「自分の担当箇所」をアクセス
- 一方、行列Aについては、全スレッドが全体をアクセス

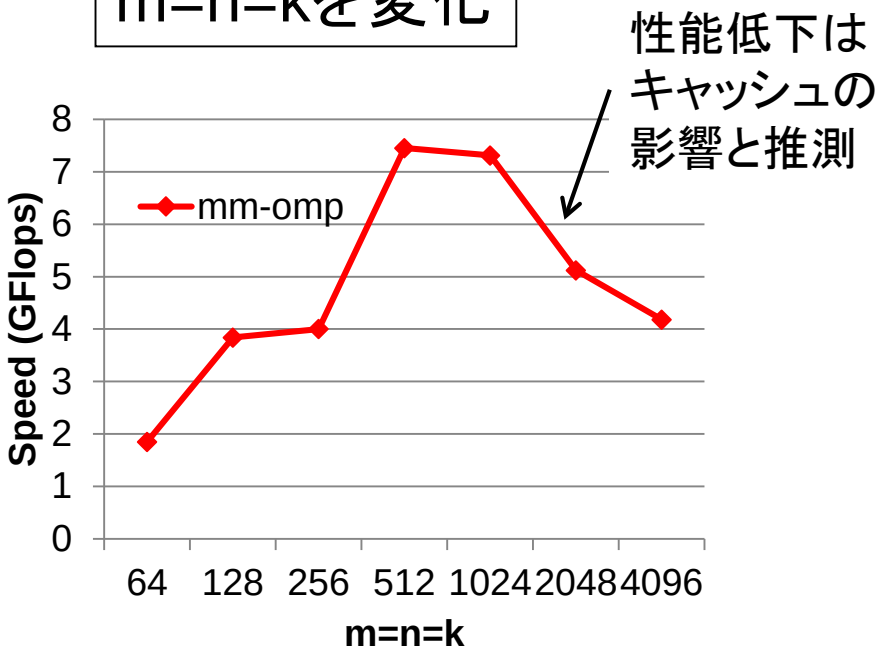
mm-ompの性能

- TSUBAME2ノード上(Xeon X5670 2.93GHz 12core)
- OMP_NUM_THREADS環境変数によりスレッド数指定
- (2mnk/経過時間)にてFlops単位の速度を取得

m=n=k=2000固定、
スレッド数を変化

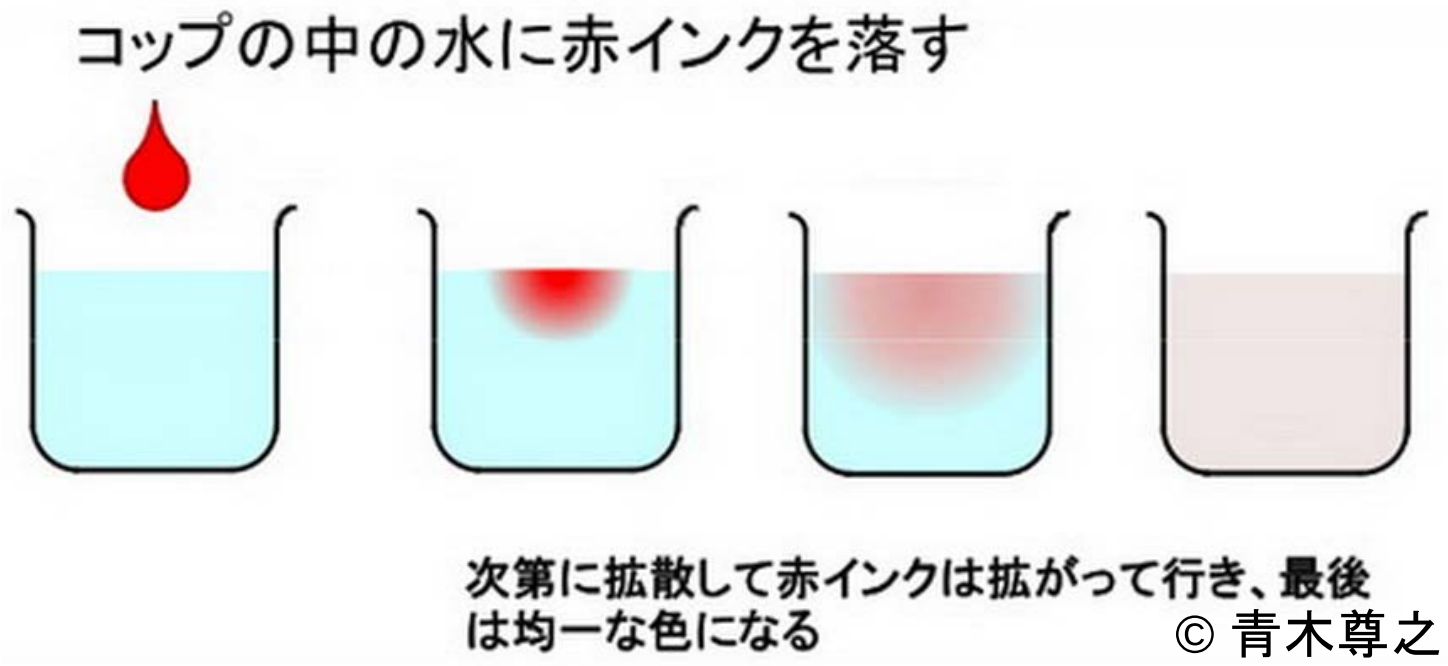


4スレッド、
m=n=kを変化



サンプルプログラム: diffusion

拡散現象



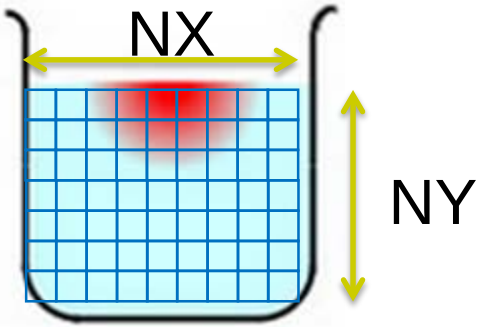
- 各点のインク濃度は、時間がたつと変わっていく
  → その様子を計算機で計算
  - 天気予報などにも含まれる計算

diffusionの実行方法

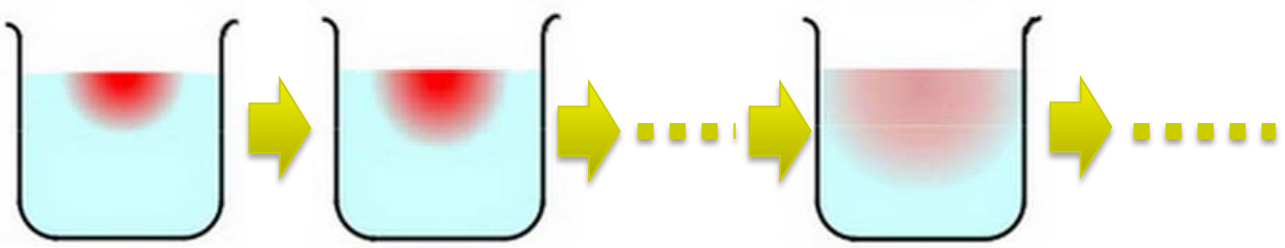
- 実行方法：./diffusion
- nx, ny: 空間サイズ．nt: 時間ステップ数
  - サンプルでは、nx=8192, ny=8192, nt=100に固定
  - オプション指定などで、可変パラメータに対応できるほうがよい (mm参照)
- 計算量：O(nx × ny × nt)

diffusionのデータ構造

- シミュレーションしたい空間をマス目で区切り、配列で表す(本プログラムでは二次元配列)



- 時間を少しずつ、パラパラ漫画のように進めながら計算する

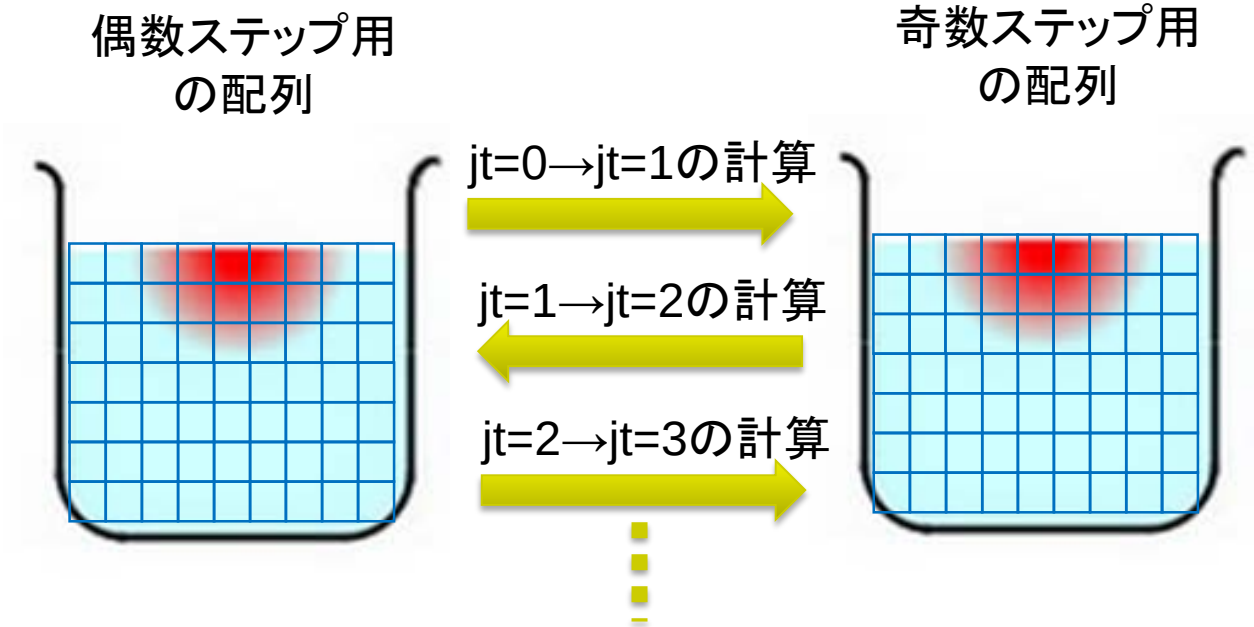


時間ステップ jt=0　　jt=1　　jt=20

ダブルバッファリング技術

- 全時間ステップの配列を覚えておくとメモリ容量を食い過ぎる

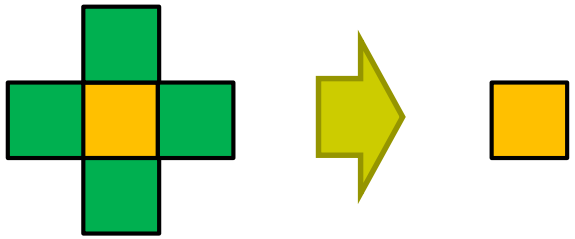
→ 二ステップ分だけ覚えておき、二つの配列(ダブルバッファ)を使いまわす



※ サンプルプログラムでは、大域変数
float data[2][NY][NX];
で表現

diffusionの計算: ステンシル計算

- 時間tにおける点(i,j)を計算するには？
- 時間t-1における下記を利用
  - 点(i,j)の値
  - 点(i,j)の近傍の値 (このサンプルでは上下左右)

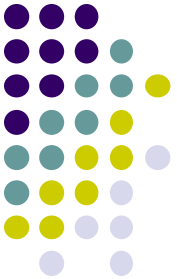


時間t-1　　時間t

本来の「ステンシル」

- このタイプの演算をステンシル計算と呼ぶ
- 以下が既知とする
  - 時間0の全点の温度(初期条件)
  - 各時間における、領域の「端」の点の温度(境界条件)

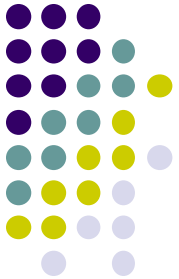
diffusionの並列化について



これを並列化するには??

- 空間ループをomp forで並列化が良い．結果的に空間を分割して，スレッドたちで分担することになる．
- 時間ループにomp forをつけてはいけない！なぜか？

For指示文の補足情報: #pragma omp forが書ける条件



- 直後のfor文が「canonical form (正準形)」であること

```
#pragma omp for
  for (var = lb; var rel-op b; incr-expr)
    body
```

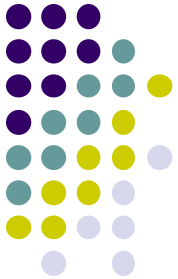
ここでincr-exprは ++var, --var, var++, var--, var+=c, var-=cなど

for (i = 0; i < n; i++) ⇒ For指示文可能！

for (p = head; p != NULL; p = p->next) ⇒ For指示文不可

Canonical formであっても、プログラムの挙動の正しさは
やはりプログラマの責任

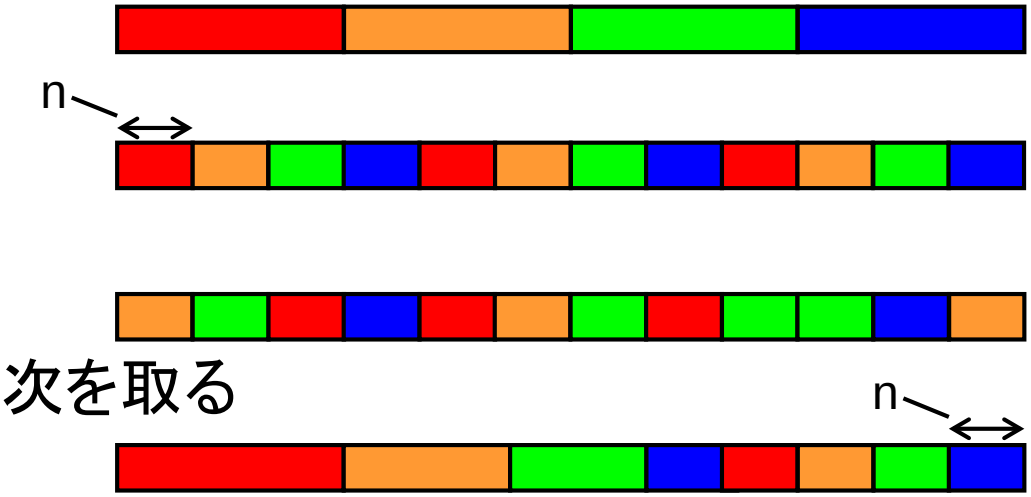
For指示文のオプション：スケジューリング



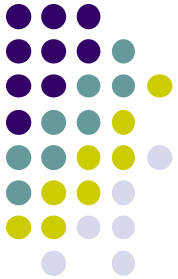
- 通常，スレッドに割り当てられる反復回数は均等分割
  - 例： 1000回を4スレッドでなら、250ずつ
- 各反復の仕事量が違うと非効率．たとえば三角行列の演算 ⇒ 様々なスケジューリング手法が用意されている

  #pragma omp for schedule(・・・)

schedule(static)
　均等分割(default)
schedule(static, n)
　ブロックサイクリック分割
schedule(dynamic, n)
　仕事が終わったスレッドが次を取る
schedule(guided, n)
　“chunk size”が等比的に小さく



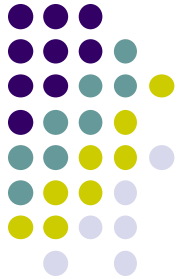
参考：OpenMPとpthreadの比較



- OpenMPでは
  - 原則的に並列リージョン内のスレッド数は一定
- Pthreadでは
  - 好きなときにスレッドの生成・終了
  - スレッド内の局所変数はスレッドプライベート

	OpenMP	pthread
スレッドの区別方法	0から始まるint型	pthread_t型
クリティカルセクション	あり	あり(pthread_mutex_lockなど)
バリア同期	あり	あり(pthread_barrier_waitなど)
条件変数による同期	なし (taskwaitで可能な場合あり)	あり(pthread_cond_waitなど)
タスク並列	あり	なし (ユーザが明示的に記述)
ワークシェアリング構文	あり (omp for)	なし (ユーザが明示的に記述)

本授業のレポートについて

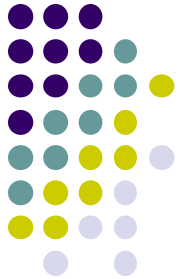


- 各パートで課題を出す。2つ以上のパートのレポート提出を必須とする

  予定パート:

  - OpenMPパート
  - MPIパート
  - GPUパート

OpenMPパート課題説明 (1)



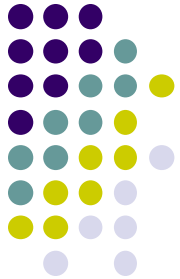
以下の[O1]—[O3]のどれか一つについてレポートを提出してください

[O1] diffusionサンプルプログラムを、OpenMPで並列化してください.

オプション:

- 配列サイズや時間ステップ数を可変パラメータにしてみる。引数で受け取って、配列をmallocで確保するようにする、など。
- より良いアルゴリズムにしてみる。ブロック化・計算順序変更でキャッシュミスを減らせないか？

OpenMPパート課題説明 (2)



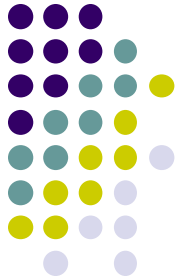
[O2] sortサンプルプログラム(次回以降説明)を、OpenMPで並列化してください.

- 注意：OpenMP3.0以上のtask対応コンパイラである必要
  - TSUBAMEではpgcc (-mpつき)や icc (-openmpつき)

オプション：

- クイックソート以外のアルゴリズムではどうか?
  - ヒープソート？マージソート？

OpenMPパート課題説明 (3)



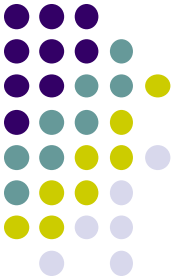
[O3] 自由課題：任意のプログラムを，OpenMPを用いて並列化してください．

- 単純な並列化で済む問題ではないことが望ましい
  - スレッド・プロセス間に依存関係がある
  - 均等分割ではうまくいかない、など
- たとえば，過去のSuperConの本選問題
  http://www.gsic.titech.ac.jp/supercon/
  たんぱく質類似度(2003)，N体問題(2001)・・・
  入力データは自分で作る必要あり
- たとえば，自分が研究している問題

課題の注意

- いずれの課題の場合も，レポートに以下を含むこと
  - 計算・データの割り当て手法の説明
  - TSUBAME2などで実行したときの性能
    - プロセッサ(コア)数を様々に変化させたとき
    - 問題サイズを様々に変化させたとき(可能な問題なら)
    - 「XXコア以上で」「問題サイズXXX以上で」発生する問題に触れているとなお良い
  - 高性能化・機能追加などのための工夫が含まれているとなお良い
    - 「XXXのためにXXXをしてみたが高速にならなかった」のような失敗でもgood
  - 作成したプログラムも提出
    - zipなどで圧縮してOCW-iに提出
    - 困難な場合は，TSUBAME2の自分のホームディレクトリに置き，置き場所を連絡(パーミッションに注意)

課題の提出について



- OpenMPパート提出期限
  - 5/19 (木) (予定)
- OCW-i ウェブページから下記ファイルを提出のこと
- レポート形式
  - レポート本文：PDF, Word, テキストファイルのいずれか
  - プログラム：zip形式に圧縮するのがのぞましい

- OCW-iからの提出が困難な場合、メールでもok
  - 送り先： ppcomp@el.gsic.titech.ac.jp
  - メール題名： ppcomp report

次回:

- OpenMP(3)
  - タスク並列による不規則的なプログラムの並列化