

OpenMP を用いた並列計算（2）

谷口 隆晴

システム情報学研究科 計算科学専攻

2014 年 6 月 5 日

応用編

- 宿題の解答例
- 演習 1 : ループでのスレッド割り当て方法の指定 (**schedule**)
- 演習 2 : 各スレッドに異なる仕事を割り当てる方法 (**omp sections**)
- 単独のスレッドで実行 (**omp single, omp master**)
- 演習 3・4 : スレッドの同期と制御 (**barrier, critical, atomic**)
- 演習 5 : 乱数生成の並列化

宿題の解答例

```
program pi
implicit none
integer, parameter :: SP = kind(1.0)
integer, parameter :: DP = selected_real_kind(2*precision(1.0_SP))
integer, parameter :: n = 1000000
integer :: i
real(DP) :: x, dx, p
real(DP) :: time0, time1, omp_get_wtime

dx = 1.0_DP / real(n, DP)

p = 0.0_DP
time0 = omp_get_wtime()
!$omp parallel do default(none) private(i,x) shared(dx) reduction(+:p)
do i = 1,n
x = real(i, DP) * dx
p = p + 4.0_DP / (1.0_DP + x**2) * dx
end do
time1 = omp_get_wtime()

print *, p
print *, time1-time0

end program
```

毎年多い間違い：

`i` や `x` を共有変数に設定

真の値： 3.141592653589793...

計算値の例： 3.141591653589612

ループでのスレッド割り当て方法の指定

例) 三角行列とベクトルの積

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & a_{14} & a_{15} & a_{16} & a_{17} & a_{18} \\ & a_{22} & a_{23} & a_{24} & a_{25} & a_{26} & a_{27} & a_{28} \\ & & a_{33} & a_{34} & a_{35} & a_{36} & a_{37} & a_{38} \\ & & & a_{44} & a_{45} & a_{46} & a_{47} & a_{48} \\ & & & & a_{55} & a_{56} & a_{57} & a_{58} \\ & & & & & a_{66} & a_{67} & a_{68} \\ & & & & & & a_{77} & a_{78} \\ & & & & & & & a_{88} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \\ x_5 \\ x_6 \\ x_7 \\ x_8 \end{pmatrix}$$

スレッド0は青の部分を，スレッド1が緑の部分を担当。

素直に2つに分割：青の要素数 = 26個，緑の要素数 = 10個。



緑の部分よりも青の部分のほうが計算が大変！

スレッド0の計算に時間がかかってしまい，全体としても速くならない。 ➡ なるべく負荷を均一にしたい

解決策の例) ブロックサイクリック分割

例) 三角行列とベクトルの積

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & a_{14} & a_{15} & a_{16} & a_{17} & a_{18} \\ & a_{22} & a_{23} & a_{24} & a_{25} & a_{26} & a_{27} & a_{28} \\ & & a_{33} & a_{34} & a_{35} & a_{36} & a_{37} & a_{38} \\ & & & a_{44} & a_{45} & a_{46} & a_{47} & a_{48} \\ & & & & a_{55} & a_{56} & a_{57} & a_{58} \\ & & & & & a_{66} & a_{67} & a_{68} \\ & & & & & & a_{77} & a_{78} \\ & & & & & & & a_{88} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \\ x_5 \\ x_6 \\ x_7 \\ x_8 \end{pmatrix}$$

スレッド0は青の部分、スレッド1が緑の部分を担当。
2行からなるブロックごとに分割：青の要素数 = 22個、緑の要素数 = 14個。
→ ちょっと改善。

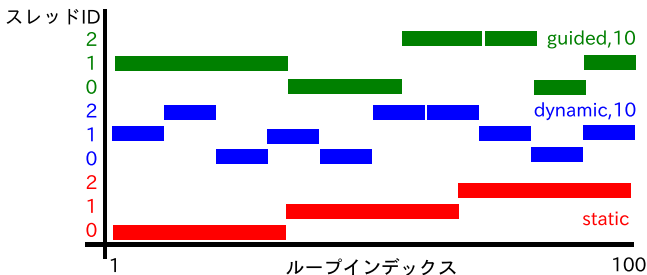
OpenMP では

```
!$omp parallel do schedule(static,2)
```

【書き方】 schedule(種類, サイズ)

例) `!$omp parallel do schedule(static, 4)`

- サイズは指定しなくても良い（指定しない場合、適切な値に自動設定）。
- 種類は次の中から指定。
 - **static** : 先ほどのブロックサイクリック分割。
 - **dynamic** : 1ブロックずつから始め、終わったスレッドが順次、次を実行。
 - **guided** : **dynamic** と同様だが、ブロックサイズを徐々に小さくしていく（最低でも指定サイズ）。
 - **runtime** : プログラムの実行時に環境変数 **OMP_SCHEDULE** で指定。



演習1：いろいろな分割方法を試してみよう！

- 1 今日の演習用のディレクトリ（例えば enshu-openmp2）を作成

```
mkdir enshu-openmp2  
cd enshu-openmp2
```

- 2 次のスライドのプログラム（/tmp/openmp2/schedule.f90）について並列化指示行

```
!omp parallel do schedule(,)
```

の **schedule** の部分を，いろいろなサイズの **static**, **dynamic**, **guided** に設定。

- 3 プロセッサ数を4として計算時間を比較。

演習1のプログラム

```
program schedule
implicit none
integer, parameter :: SP = kind(1.0)
integer, parameter :: DP = selected_real_kind(2*precision(1.0_SP))
integer, parameter :: n = 2000
integer :: i, j
real(DP), dimension(n) :: x, y
real(DP), dimension(n,n) :: A
real(DP) :: time0, time1, omp_get_wtime
x(:) = 2.0_DP
A(:, :) = 1.0_DP
time0 = omp_get_wtime()
!$omp parallel do schedule(,) default(none) private(i,j) shared(A,x,y)
do i=1,n
  y(i) = 0.0_DP
  do j=i,n
    y(i) = y(i) + A(i, j) * x(j)
  end do
end do
!$omp end parallel do
time1 = omp_get_wtime()
print *, time1-time0
end program
```


復習：4 スレッドでの実行方法

- 下のようなスクリプトを作成して、適当な名前（例えば **enshu.sh** など）で保存.
- その後,

```
pjsub enshu.sh
```

とすると `jobname.o????` (???? は適当な番号) というファイルの中に結果が書き込まれます.

```
#!/bin/bash
#PJM -N "jobname"
#PJM -L "rscgrp=small"
#PJM -L "node=1"
#PJM -L "elapsed=2:00"
#PJM -j
export OMP_NUM_THREADS=4
./a.out
```

シェルを指定
ジョブ名を指定
投入先のキュー名を指定
使用ノード数を指定

スレッド数を指定
実行プログラム名を指定

同じものが `/tmp/openmp2/enshu.sh` においてあります.
前回利用したものを使いまわしてもかまいません.

復習：ループの順番とキャッシュミス

演習1のプログラム

```
!$omp parallel do
do i=1,n
  y(i) = 0.0_DP
  do j=i,n
    y(i) = y(i) + A(i,j) * x(j)
  end do
end do
!$omp end parallel do
```

(復習) ループを回す順番でキャッシュミスの多さが変化 ➡ **変えてみよう!**

のループを入れ替えて

```
do j=1,n
  y(i) = 0.0_DP
  do i=1,j
    y(i) = y(i) + A(i,j) * x(j)
  end do
end do
```



```
y(:) = 0.0_DP
do j=1,n
  do i=1,j
    y(i) = y(i) + A(i,j) * x(j)
  end do
end do
```

【演習1'】 ループを上のように修正して、実行時間を比較してみよ。

各スレッドに別々の仕事を割り当て（!\$omp sections）

例：質点の運動のシミュレーション
program

do while ($t < \text{必要な時間}$)

（ x 軸方向の更新）

（ y 軸方向の更新）

（ z 軸方向の更新）

end do

end program

!\$omp sections の特徴

- それぞれの **section** を別々のスレッドが実行.
- 他のスレッドは待機.
- 実行される順序は指定できない.



!\$omp parallel

!\$omp sections

!\$omp section

！（ x 軸方向の更新）

omp end section は書かない.

!\$omp section

！（ y 軸方向の更新）

!\$omp section

！（ z 軸方向の更新）

!\$omp end sections

!\$omp end parallel

演習 2 : シェルピンスキーギャスケット

【課題】

- 1 プログラム `/tmp/openmp2/sierp.f90` を各自のディレクトリにコピー.
- 2 do ループ中の $x(i)$ の計算と $y(i)$ の計算は並列計算できるので **sections** を利用して並列化.
(**sections** を使えるように, うまくプログラムを書き換えること.)
- 3 1 スレッド, 2 スレッドで実行した場合について計算時間を比較.
(計算時間比較用のスクリプトファイルが `/tmp/openmp2/jscript.sh` においてあります.)

【終わった人は】結果を gnuplot で表示

- プログラム中の計算時間出力部分を消す. 最後 3 行のコメントを外して $x(i)$, $y(i)$ を出力.
- 1 プロセッサで実行.
- 一度, ログアウトして X サーバを有効にして再ログイン.
- gnuplot → plot "jobname.o???" → exit
(終わったらログアウトして, X サーバ無しで再ログイン)

演習 2 のプログラム

```
program sierpinski
implicit none
! 変数の定義など
do i=1,n
  call random_number(myrand(i))
end do

time0 = omp_get_wtime()
do i=1,n-1
  if (myrand(i) < 0.33_DP) then
    x(i+1) = x(i) * 0.5_DP + 1.0_DP
    y(i+1) = y(i) * 0.5_DP
  else if (myrand(i) > 0.66_DP) then
    x(i+1) = x(i) * 0.5_DP - 1.0_DP
    y(i+1) = y(i) * 0.5_DP
  else
    x(i+1) = x(i) * 0.5_DP
    y(i+1) = y(i) * 0.5_DP + 1.0_DP
  end if
end do
time1 = omp_get_wtime()

print *, time1-time0

!do i = 1,n
! print *, x(i), y(i)
!end do
end program
```

赤と青の部分を別々のプロセッサで実行.

早めに終わった人は、出力部分を変更して gnuplot で表示.

課題の説明

プログラムは以下のランダムウォークの軌跡を計算：

- 確率 1/3 で

$$x^{(n+1)} = \frac{1}{2}x^{(n)} + 1, y^{(n+1)} = \frac{1}{2}y^{(n)}.$$

- 確率 1/3 で

$$x^{(n+1)} = \frac{1}{2}x^{(n)} - 1, y^{(n+1)} = \frac{1}{2}y^{(n)}.$$

- 確率 1/3 で

$$x^{(n+1)} = \frac{1}{2}x^{(n)}, y^{(n+1)} = \frac{1}{2}y^{(n)} + 1.$$

実は、軌跡がシェルピンスキーギャスケットという絵になる。

一つのスレッドだけで実行 (!\$omp single)

```
!$omp parallel  
val = 1.0_DP  
!$omp do  
do j=1,n  
  do i=1,n  
    A(i,j) = val  
  end do  
end do  
!$omp end do  
!$omp end parallel
```



```
!$omp parallel  
!$omp single  
val = 1.0_DP ← (1スレッドだけで実行, 他は待機)  
!$omp end single  
!$omp do  
do j=1,n  
  do i=1,n  
    A(i,j) = val  
  end do  
end do  
!$omp end do  
!$omp end parallel
```

左側のコードでは **val** の値に全てのスレッドが同時に書き込む

- 理論的には大丈夫だが,
- 同じアドレスに同時にアクセス ➡ パフォーマンスの低下

マスタースレッドだけで実行 (!\$omp master)

single を利用

master を利用

```
!$omp parallel  
val = 1.0_DP  
(何か別の処理)  
!$omp do  
do j=1,n  
  do i=1,n  
    A(i,j) = val  
  end do  
end do  
!$omp end do  
!$omp end parallel
```



```
!$omp parallel  
!$omp single  
val = 1.0_DP  
!$omp end single  
(何か別の処理)  
!$omp do  
do j=1,n  
  do i=1,n  
    A(i,j) = val  
  end do  
end do  
!$omp end do  
!$omp end parallel
```

```
!$omp parallel  
!$omp master  
val = 1.0_DP  
!$omp end master  
(何か別の処理)  
!$omp do  
do j=1,n  
  do i=1,n  
    A(i,j) = val  
  end do  
end do  
!$omp end do  
!$omp end parallel
```

- !\$omp master: マスタースレッドだけで実行. 他は待たない.
- 次の処理を進められる場合に有効.
(何か別の処理)の部分では val を使ってはいけない (更新が終わっていないため). val にアクセスする際は, 次に説明する barrier が必要.

スレッドの同期と制御

- **!\$omp barrier** : 全てのスレッドがここに来るまで待機.
 - **!\$omp end do**, **!\$omp end single** などの後には, 自動的に **barrier** が設置される.
 - **!\$omp end do nowait** などとすることで, 設置しないようにもできる.
- **!\$omp critical** : 同時に2つ以上のスレッドが実行しないようにする.
- **!\$omp atomic** : 同時書き込みの禁止 (スカラー値の更新のみ).

```
real(DP) :: sval, pval
real(DP), dimension(n) :: svec
!$omp parallel shared(sval, svec) private(pval)
  (pval の値を各スレッドで計算)
  !$omp critical
  svec(:) = pval * svec(:)
  !$omp end critical
  !$omp atomic
  sval = sval + pval
  omp end atomic は書かない
!$omp end parallel
```

演習 3 : reduction を使わない総和計算

【課題】 下記のプログラムを次の3通りに修正し、6スレッドで実行。

- 1 そのまま実行。
- 2 **omp atomic** の部分を削除して実行。
- 3 **omp atomic** の代わりに **omp critical**, **omp end critical** を用いたプログラムを作成し、実行。

```
program summation
integer, parameter :: SP=kind(1.0)
integer, parameter :: DP=selected_real_kind(2*precision(1.0_SP))
integer, parameter :: n=1000
real(DP) :: sval, pval
real(DP), dimension(n) :: svec
svec(:) = 1.0_DP
sval = 0.0_DP
!$omp parallel shared(sval, svec) private(pval)
pval=0.0_DP
!$omp do
do i=1,n
pval = pval + svec(i)
end do
!$omp end do
!$omp atomic
sval = sval + pval
!$omp end parallel
print *, sval
end program
```

ソースファイルは /tmp/openmp2/sum.f90 に置いてあります。

宿題

- 1 演習 4 .
- 2 **【発展課題】** 演習 5 .
- 3 プログラムと実行結果を, 1つのテキストファイル (例えば result.txt) に入れて, その内容を yaguchi までメール.
【メールの送り方】 mail yaguchi < result.txt

**【締切】 6月11日 (水), 午後5時.
なるべくこの時間中に終わらせましょう!**

演習4 (宿題): 演習3のプログラムの高速化

`omp end do` の後には **barrier** が置かれるが, ここで全員が揃うまで待っている必要はない → **nowait** を挿入することで **barrier** を除去.

```
!$omp parallel shared(sval, svec) private(pval)
pval=0.0_DP
!$omp do
do i=1,n
pval = pval + svec(i)
end do
!$omp end do nowait
!$omp atomic
sval = sval + pval
!$omp end parallel
```

【課題】 演習3のプログラムについて **nowait** を入れた場合, 入れない場合の実行速度 (6スレッド) を比較.

発展課題：数列の計算

```
program sierpinski
implicit none
! 変数の定義など
do i=1,n
  call random_number(myrand(i))
end do

time0 = omp_get_wtime()
do i=1,n-1
  if (myrand(i) < 0.33_DP) then
    x(i+1) = x(i) * 0.5_DP + 1.0_DP
    y(i+1) = y(i) * 0.5_DP
  else if (myrand(i) > 0.66_DP) then
    x(i+1) = x(i) * 0.5_DP - 1.0_DP
    y(i+1) = y(i) * 0.5_DP
  else
    x(i+1) = x(i) * 0.5_DP
    y(i+1) = y(i) * 0.5_DP + 1.0_DP
  end if
end do
time1 = omp_get_wtime()

print *, time1-time0

!do i = 1,n
! print *, x(i), y(i)
!end do
end program
```

青い部分の do ループも、
一見、独立に計算できそうなので、
並列化できそう。

➡ 本当に独立に計算できる？

乱数は「乱数っぽい数列」

- 通常、計算機上の乱数は疑似乱数 = 乱数っぽいけど規則的な数列.
- 例) 乗算合同法

$$r^{(n+1)} = ar^{(n)} + c \pmod{m} \quad (a, c, m \text{ は適当な整数.})$$

- ➡ 乱数同士には依存関係があり、すぐには並列化できない.
(サブルーチン `random_numer()` はスレッドセーフとは限らない.)

並列化法 : recursive doubling

$$\begin{aligned} r^{(n+1)} &= a(ar^{(n-1)} + c) + c \pmod{m} \\ &= a^2r^{(n-1)} + (a+1)c \pmod{m} \quad =: a'r^{(n-1)} + c' \pmod{m} \end{aligned}$$

こうすると偶数項と奇数項を並列に計算可能 !

演習 5 (宿題. 発展課題): シェルピンスキーギャスケット II

【課題】

- 1 演習 2 のプログラム冒頭の乱数生成部分を, 下のように変更.
- 2 2 スレッドを用い, 乱数生成部分を偶数・奇数に分けることで並列化.
 - 偶数・奇数に分けるために, 2 ステップ後の値を計算する漸化式を作成 (前のスライドの a' , c' を求める).
 - **!\$omp sections** で並列化.
- 3 1 スレッド, 2 スレッドで実行した場合について計算時間を比較.

```
do i=1,n
  call random_number(myrand(i))
end do
```



```
integer, parameter :: a = 109
integer, parameter :: c = 1021
integer, parameter :: m = 2**15
integer :: tmp

tmp = 15
do i=1,n
  tmp = mod(tmp*a+c,m)
  myrand(i) = real(tmp,DP) / (m-1)
end do
```

(これを, さらに偶奇に分けたプログラムに変更.)

宿題（再掲）

- 1 演習 4 .
- 2 【発展課題】 演習 5 .
- 3 プログラムと実行結果を， 1つのテキストファイル（例えば result.txt）に入れて， その内容を yaguchi までメール。
【メールの送り方】 **mail yaguchi < result.txt**

【締切】 6月11日（水）， 午後5時。
なるべくこの時間中に終わらせましょう！

- 南里豪志, 天野浩文. OpenMP 入門 (1), (2), (3),
<http://www.cc.kyushu-u.ac.jp/scp/system/library/OpenMP/OpenMP.html>.
- 黒田久泰. C 言語による OpenMP 入門,
http://www.cc.u-tokyo.ac.jp/publication/kosyu/03/kosyu-openmp_c.pdf.
- 北山洋幸. OpenMP 入門- マルチコア CPU 時代の並列プログラミング, 秀和システム, 2009.
- Barbara Chapman, Gabriele Jost and Ruud van der Pas (Foreword by David J. Kuck). Using OpenMP –Portable Shared Memory Parallel Programming–, The MIT Press, 2007.

質問は yaguchi@pearl.kobe-u.ac.jp まで.