OpenMPによる並列化実装

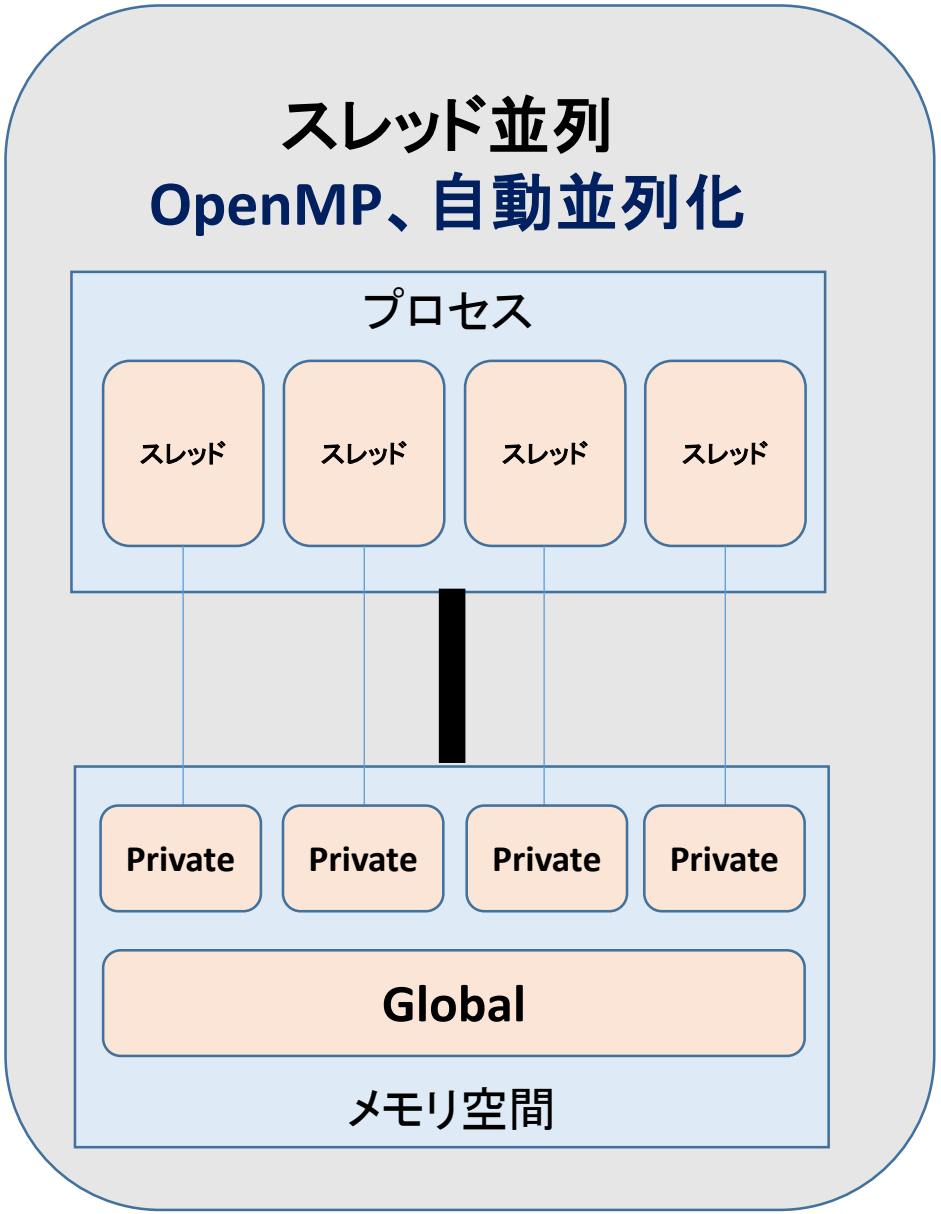
八木学
（理化学研究所 計算科学研究機構）

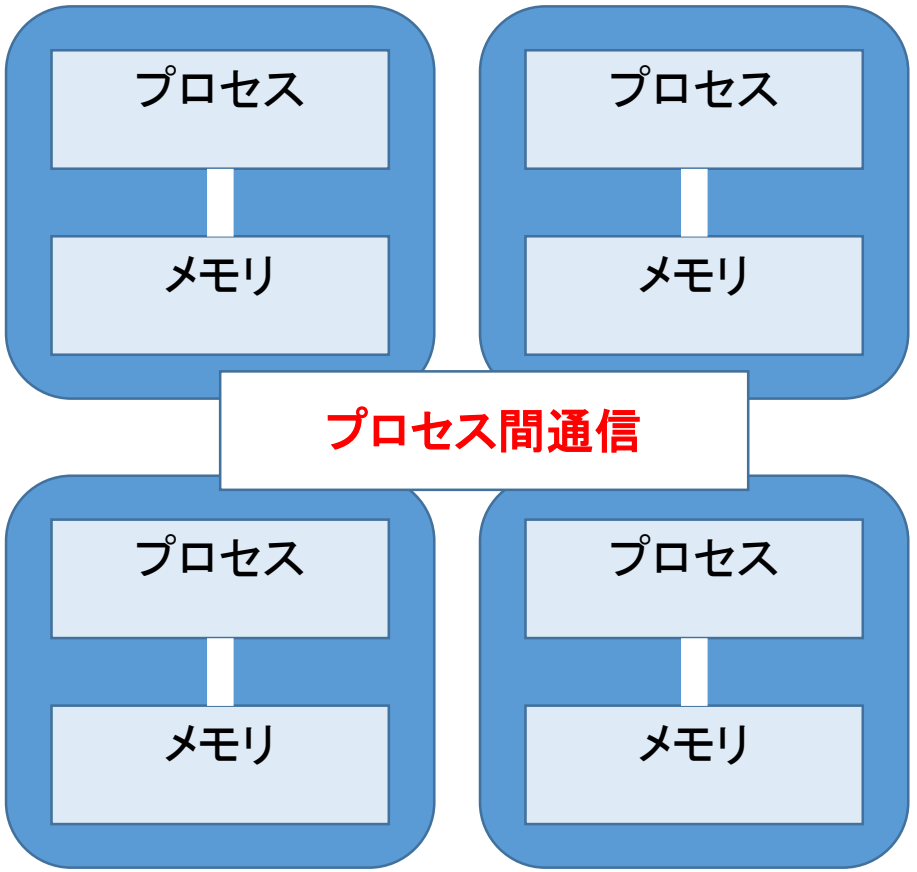
謝辞

松本洋介氏（千葉大学）

KOBE HPC Spring School 2018
2018年3月15日　神戸大学計算科学教育センター

スレッド並列とプロセス並列





並列計算について

・CPUをN個使って並列計算した時、計算速度がN倍になるのが理想だが・・・

- 並列化率の問題（アムダールの法則）
- 通信時間ボトルネック

・京のような大型計算機を有効利用するためには、如何に計算速度をN倍に近づけられるかが重要

アムダールの法則

プログラムの並列化できる割合を P とし、プロセッサ数を n とすると、並列計算した時の性能向上率は

$$\frac{1}{(1-P)+\frac{P}{n}}$$

で与えられる。

9割並列化できるが、1割逐次処理が残ってしまうような場合、どれだけプロセッサを投入しても計算速度は10倍以上にはならない。

OpenMPとは

- 共有メモリ型計算機用の並列計算API
  →ノード内の並列（ノード間は不可）
- ユーザーが明示的に並列のための指示を与える
  →コンパイラの自動並列とは異なる
- 標準化された規格であり、広く使われている
- 指示行の挿入で並列化できるため、比較的手軽

スレッド数の指定

・シェルの環境変数で与える（推奨）

export OMP_NUM_THREADS=16 （bashの場合）

setenv OMP_NUM_THREADS 16 （tcshの場合）

・プログラム内部で設定することも可能

```
!$use omp_lib
integer, parameter :: nthrd = 16


call omp_set_num_threads(nthrd)
```

スレッド数の指定

・シェルの環境変数で与える（推奨）

export OMP_NUM_THREADS=16　（bashの場合）

setenv OMP_NUM_THREADS 16　（tcshの場合）

・プログラム内部で設定することも可能

```
#include <omp.h>
omp_set_num_threads(16);
```

C

コンパイル

・コンパイルオプションでOpenMPを有効にする

gfortran/gcc -fopenmp test.f90

frtpx/fccpx -Kopenmp test.f90

・オプションを指定しない場合はOpenMPの指示行はコメントとして認識される。

```
!$OMP PARALLEL DO
do i = 1, 100
   a(i) = b(i) + c
enddo
!$OMP END PARALLEL DO
```

指示行はFortranの場合 !$OMP から始まる。
行頭の！は通常はコメントを意味する。

Cの場合は #pragma omp という形になるが、
Cでは行頭の # はコメントになる。

コンパイル

・コンパイルオプションでOpenMPを有効にする

gfortran/gcc -fopenmp test.f90

frtpx/fccpx -Kopenmp test.f90

・オプションを指定しない場合はOpenMPの指示行はコメントとして認識される。

```
#pragma omp parallel for
for (i=0; i<100; i++) {
    a[i] = b[i] + c;
}
```

C

指示行はFortranの場合 !$OMP から始まる。
行頭の！は通常はコメントを意味する。

Cの場合は #pragma omp という形になるが、
Cでは行頭の # はコメントになる。

OpenMPの基本関数

[F] use omp_lib　　OpenMPモジュールをロード

[C] #include <omp.h>

最大スレッド数取得(Integer)

[F][C] nthreads = omp_get_num_threads()

自スレッド番号取得(Integer)

[F][C] myid = omp_get_thread_num()

OpenMPの基本関数

時間を測る(倍精度型)

[F][C] time = **omp_get_wtime()**

```
real(8) :: dts, dte
dts = omp_get_wtime()
  ・・・ 処理 ・・・
dte = omp_get_wtime()
print *, dte-dts
```

F

```
double dts;
double dte;
dts = omp_get_wtime();
  ・・・ 処理 ・・・
dte = omp_get_wtime();
```

C

OpenMPの基本命令

並列化の開始(スレッド生成)・終了

[F] !$OMP PARALLEL ~ !$OMP END PARALLEL

[C] #pragma omp parallel

{ ~ }

Do/For ループを並列に計算する

[F] !$OMP DO ～ !$OMP END DO

[C] #pragma omp for

OpenMPの基本命令

スレッド生成とループ並列を1行で記述

[F] !$OMP PARALLEL
[F] !$OMP DO
[F]　→!$OMP PARALLEL DO とまとめて書ける

[C] #pragma omp parallel
[C] #pragma omp for
[C]　→#pragma omp parallel for でもよい

OpenMPの基本命令

スレッドの同期待ちをしない

[F] !$OMP DO ~ !$OMP END DO NOWAIT

[C] #pragma omp for nowait

スレッドの同期をとる

[F] !$OMP BARRIER

[C] #pragma omp barrier

＊ OMP DO, OMP SECTION, OMP SINGLEは、nowaitを明示的に記述しない限り、自動的に同期をとる

OpenMPの基本命令

1スレッドのみで処理

[F] !$OMP SINGLE ~ $OMP END SINGLE

[C] #pragma omp single

{ ~ }

プライベート変数を指定

[F] !$OMP DO PRIVATE(a) ~ !$OMP END DO

[C] #pragma omp parallel for private(a)

OpenMPの基本命令

Section構文
スレッドごとに処理を分岐させる

```
!$OMP PARALLEL SECTIONS
!$OMP SECTION
    処理1
!$OMP SECTION
    処理2
!$OMP SECTION
    ・・・
!$OMP END PARALLEL
SECTIONS
```

F

```
#pragma omp parallel sections
{
#pragma omp section
  処理1;
#pragma omp section
  処理2;
#pragma omp section
  ・・・;
}
```

C

OpenMPの基本命令

```
!$OMP PARALLEL
!$OMP DO
do i = 1, 100
   a(i) = i
enddo
!$OMP END DO

!$OMP SINGLE
call output(a)
!$OMP END SINGLE

!$OMP DO
do i = 1, 100
.....
!$OMP END DO
!$OMP END PARALLEL
```

!$OMP PARALLEL によるスレッドの立ち上げ回数は極力減らすほうがオーバーヘッドが少ない。

逐次処理やデータのファイル出力のような処理が入る場合は、!$OMP SINGLEで対処

OpenMPの基本命令

```
#pragma omp parallel
{
  #pragma omp for
  for (i=0; i<100; i++) {
      a[i] = i
  }

#pragma omp single
  {
    …
  }

  #pragma omp for
  for (…)
  …..
  }
}
```

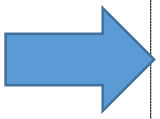
#pragma omp parallel によるスレッドの立ち上げ回数は極力減らすほうがオーバーヘッドが少ない。

逐次処理やデータのファイル出力のような処理が入る場合は、#pragma omp singleで対処

OpenMPの基本命令

起こりがちなミス

```
!$OMP PARALLEL DO
do i = 1, 100
  tmp = myfunc(i)
   a(i) = tmp
enddo
!$OMP END PARALLEL DO
```



```
!$OMP PARALLEL DO PRIVATE(tmp)
do i = 1, 100
  tmp = myfunc(i)
   a(i) = tmp
enddo
!$OMP END PARALLEL DO
```

tmpを上書きしてしまい、
正しい結果にならない

private宣言を入れる

並列化したループ内で値を設定・更新する場合は要注意
→privateにすべきではないか確認する必要あり

注意点等

・自動並列化と違い、並列化できるかどうかの判断はプログラマが行う

・依存関係などにより並列化できないループであっても、明示してしまえば並列化されてしまう。

・スレッド内でのグローバル変数、プライベート変数を間違えるとRunごとに結果が変わってしまう。

→数回実行し、結果が変わらないことを確認

・OpenMPは手軽だが、デバッグには注意が必要

演習問題2-1

次のサンプルプログラムをOpenMPで並列化せよ

Fortran： 2018spring/code/f90/basic/1d_adv_mod.f90

C言語： 2018spring/code/c/basic/1d_adv_mod.c

*演習1にて各自作成したコードをベースとしても良い

移流が出来たら流体にも挑戦！

1d_fluid_rk　　：　1次元流体

2d_fluid　　：　2次元流体

補足：πコンピュータ上の操作

コンパイル・ジョブの投入（Fortran）

[xxxx@pi]$ frtpx **-Kopenmp** 1d_adv_omp.f90
[xxxx@pi]$ pjsub run.sh

run.sh

```
#!/bin/sh
#PJM -L "node=1"                          ノード数
#PJM -L "elapse=00:01:00"                 実行時間
#PJM =L "rscgrp=small"                    実行キュー
#PJM -j
#PJM -o "output.lst"                      標準出力ファイル名

export OMP_NUM_THREADS=16                 スレッド数を指定
./a.out                                   実行ファイル
```

補足：πコンピュータ上の操作

コンパイル・ジョブの投入（C言語）

[xxxx@pi]$ fccpx **-Kopenmp** 1d_adv_omp.c
[xxxx@pi]$ pjsub run.sh

run.sh

```
#!/bin/sh
#PJM -L "node=1"                          ノード数
#PJM -L "elapse=00:01:00"                 実行時間
#PJM =L "rscgrp=small"                    実行キュー
#PJM -j
#PJM -o "output.lst"                      標準出力ファイル名

export OMP_NUM_THREADS=16                 スレッド数を指定
./a.out                                   実行ファイル
```

演習問題2-1

解答例

Fortran: 2018spring/code/f90/openmp/1d_adv_omp.f90

C言語: 2018spring/code/c/openmp/1d_adv_omp.c

演習問題2-2

OpenMPを用いて並列化したプログラムを、スレッド数を変えて実行し処理時間を計測せよ

スレッド数の指定方法：スクリプト run.sh の
export OMP_NUM_THREADS=xx　の数値を変更

処理時間の計測

```
dts = omp_get_wtime()
  ・・・　処理　・・・
dte = omp_get_wtime()
print *, dte-dts
```