Revize 2

C2115 Praktický úvod do superpočítání

XIII. lekce / Modul 2

Petr Kulhánek

kulhanek@chemi.muni.cz

Národní centrum pro výzkum biomolekul, Přírodovědecká fakulta,
Masarykova univerzita, Kotlářská 2, CZ-61137 Brno

Numerická integrace

paralelizace pomocí

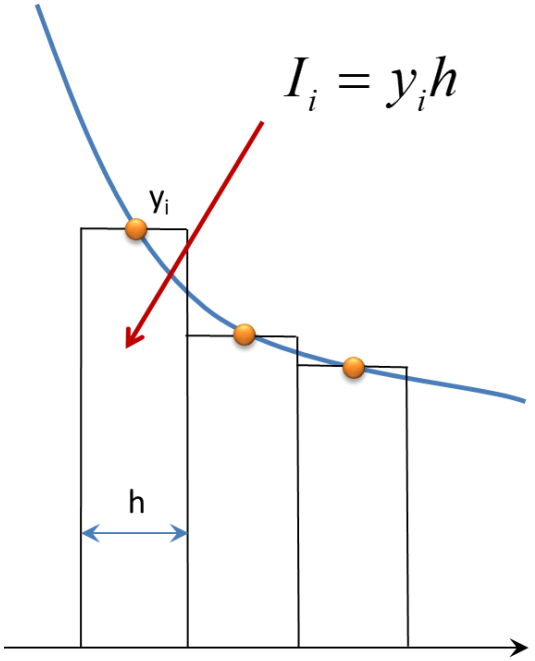
OpenMP

Sekvenční implementace

```
program integral

  implicit none
  integer(8)                  :: i
  integer(8)                  :: n
  double precision            :: rl,rr,h,v,y,x
  !-----------------------------------------------
  rl= 0.0d0
  rr= 1.0d0
  n = 2000000000
  h = (rr-rl)/n
  v = 0.0d0

  do i=1,n
    x = (i-0.5d0)*h + rl
    y = 4.0d0 / (1.0d0 + x**2)
    v = v + y*h
  end do

  write(*,*) 'integral = ',v

end program integral
```

$$I = \int_0^1 \frac{4}{1+x^2} dx$$

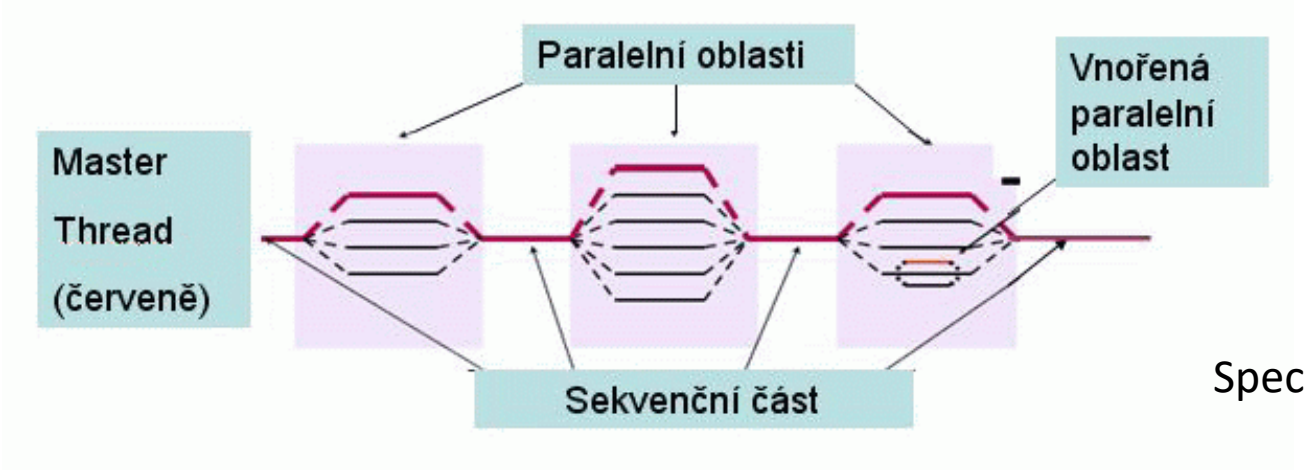
obdélníková metoda



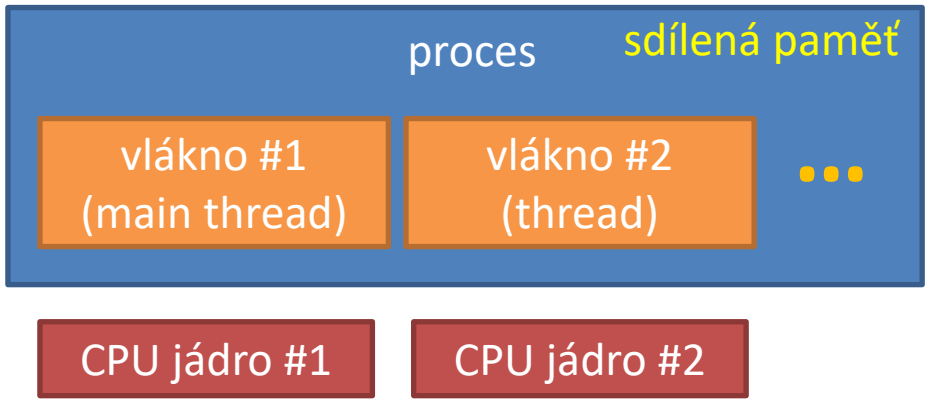
Paralelizace - OpenMP

OpenMP je soustava **direktiv** pro překladač a knihovních procedur pro paralelní programování. Jedná se o standard pro programování **počítačů se sdílenou pamětí**. OpenMP usnadňuje vytváření více vláknových programů v programovacích jazycích Fortran, C a C++.

www.wikipedia.org



Specifikace: **www.openmp.org**



OpenMP je omezeno na SMP výpočetní uzel a vícejaderné CPU, popř. jejich kombinaci.

OpenMP implementace

```
ncpu = 1
!$ ncpu = omp_get_max_threads()
write(*,*) 'Number of threads = ',ncpu

!$omp parallel

!$omp do private(i,x,y),reduction(+:v)
do i=1,n
  x = (i-0.5d0)*h + rl
  y = 4.0d0/(1.0d0+x**2)
  v = v + y*d
end do
!$omp end do

!$omp end parallel
write(*,*) 'integral = ',v
```

OpenMP kompilace

```
$ gfortran -O3  integral.f90 -o integral
$ ldd ./integral
        linux-vdso.so.1 =>
        libgfortran.so.3 => /usr/lib/x86_64-linux-gnu/libgfortran.so.3
        libc.so.6 => /lib/x86_64-linux-gnu/libc.so.6
        libquadmath.so.0 => /usr/lib/x86_64-linux-gnu/libquadmath.so.0
        libm.so.6 => /lib/x86_64-linux-gnu/libm.so.6
        /lib64/ld-linux-x86-64.so.2

$ gfortran -O3 -fopenmp integral.f90 -o integral
$ ldd ./integral
        linux-vdso.so.1 =>  (0x00007fff593ff000)
        libgfortran.so.3 => /usr/lib/x86_64-linux-gnu/libgfortran.so.3
        libgomp.so.1 => /usr/lib/x86_64-linux-gnu/libgomp.so.1
        libc.so.6 => /lib/x86_64-linux-gnu/libc.so.6
        libquadmath.so.0 => /usr/lib/x86_64-linux-gnu/libquadmath.so.0
        libm.so.6 => /lib/x86_64-linux-gnu/libm.so.6
        librt.so.1 => /lib/x86_64-linux-gnu/librt.so.1
        libpthread.so.0 => /lib/x86_64-linux-gnu/libpthread.so.0
        /lib64/ld-linux-x86-64.so.2
```

OpenMP spuštění

```
$ export OMP_NUM_THREADS=4
$ ./integral
 Number of threads =                    4
 integral =    3.141592596529 5672
```

počet vláken, které může aplikace využít

Poznámka: pokud není proměnná OMP_NUM_THREADS nastavena, použije se maximální počet dostupných CPU jader
(na klastru WOLF je však výchozí hodnota proměnné OMP_NUM_THREADS explicitně nastavena na 1)

OpenMP a dávkový systém PBSPro:

- podle konfigurace může dávkový systém hodnotu proměnné OMP_NUM_THREADS nastavit automaticky (dle hodnot ncpus a mpiprocs v definici bloku (chunk))
- hodnotu proměnné OMP_NUM_THREADS je možné nastavit explicitně:

export OMP_NUM_THREADS=$PBS_NCPUS

počet přidělených CPU, úloha musí požadovat pouze jeden výpočetní uzel

Cvičení M2.1

Zdrojové kódy:
/home/kulhanek/Documents/C2115/code/integral/openmp

1. Zkompilujte program **integral.f90** s optimalizací **-O3** a bez podpory OpenMP.
2. Určete dobu běhu aplikace potřebnou pro integraci. K měření doby použijte program **/usr/bin/time**.
3. Zkompilujte program **integral.f90** s optimalizací **-O3** a zapnutou podporou OpenMP.
4. Určete počet CPU jader na vašem počítači (lscpu).
5. Spouštějte program postupně pro 1, 2, 3, až N vláken, kde N je maximální dostupný počet CPU jader. Pro každé spuštění určete dobu běhu. Získaná data zapisujte do následující tabulky a vyhodnoťte.
6. Ovlivňuje počet CPU jader výslednou hodnotu integrálu? Proč tomu tak je?

naměřený čas

N	T_{real} [s]	Speedup	CPU effectivity [%]
1	27.8	1.0	100.0
2	14.7	1.9	94.8
3	11.0	2.5	84.1
4	8.2	3.4	84.7

$$Speedup = \frac{T_{real}(N=1)}{T_{real}} \qquad CPUeffectivity = \frac{Speedup}{N}100$$