OpenMP 并行编程

（一）

—— 并行编程介绍

—— 并行域与工作共享

目录页

Contents

- OpenMP Specifications, https://www.openmp.org/specifications
- Using OpenMP – The Next Step, van der Pas et al, 2017
- Using OpenMP, Chapman, Jost, and Van Der Pas, 2007

目录页

Contents

1 OpenMP 介绍

OpenMP 简介

https://www.openmp.org

- 通过在源代码（串行）中**添加 OpenMP 指令和调用 OpenMP 库函数**来实现在共享内存系统上的并行。
- 为**共享内存并行**程序员提供了一种简单灵活的开发并行应用的接口模型，使程序既可以在台式机上执行，也可以在超级计算机上执行，具有良好的可移植性。

Jointly defined by a group of major computer hardware and software vendors and major parallel computing user facilities, the OpenMP API is a portable, scalable model that gives shared-memory parallel programmers a simple and flexible interface for developing parallel applications on platforms ranging from embedded systems and accelerator devices to multicore systems and shared-memory systems. https://www.openmp.org

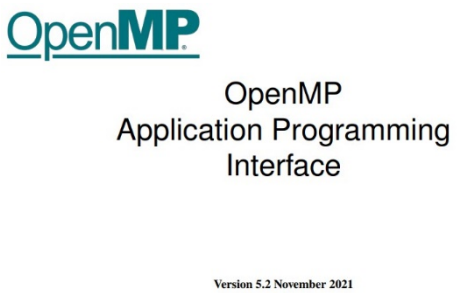
API：Application Programming Interface

使用说明

- FORTRAN/C/C++ 自带程序库，无需另外安装
- 编译时不打开 OpenMP 编译选项，则编译器将忽略 OpenMP 指令，从而生成串行可执行程序（串行等价性）
- 打开 OpenMP 编译选项，编译器将对 OpenMP 指令进行处理，编译生成 OpenMP 并行可执行程序
- 并行线程数可以在程序启动时利用环境变量等方法进行动态设置
- 编程方式：增量并行
- 支持与 MPI 混合编程

发展历史

- 起源于 ANSI X3H5（1994）草案，1997年，部分设备商和编译器开发商组成 ARB（架构审查委员会），着手制定 OpenMP 标准化规范
- 目标：编程简单，增量化并行，移植性好，扩展性好，支持主流编译器
- 支持 Unix，Linux，Windows 等操作系统
- ARB 成员：AMD，ARM，Intel，IBM，Cray，NEC，HP，NVIDIA，...



- FORTRAN version 1.0 (1997)，C/C++ version 1.0 (1998)
- FORTRAN version 2.0 (2000)，C/C++ version 2.0 (2002)
- OpenMP 3.0 – (May 2008)
- OpenMP 3.1 – (July 2011) // 本讲义以此版本为主
- OpenMP 4.0 – (July 2013)
- OpenMP 4.5 – (Nov 2015)
- OpenMP 5.0 – (Nov 2018)
- OpenMP 5.2 – (Nov 2021)

目录页

Contents

2 并行编程模式

- OpenMP 并行方式
- OpenMP 编译指导
- 子句
- 变量属性

OpenMP 并行方式

OpenMP 是基于线程的并行编程模型。

OpenMP 采用 Fork-Join 并行执行方式

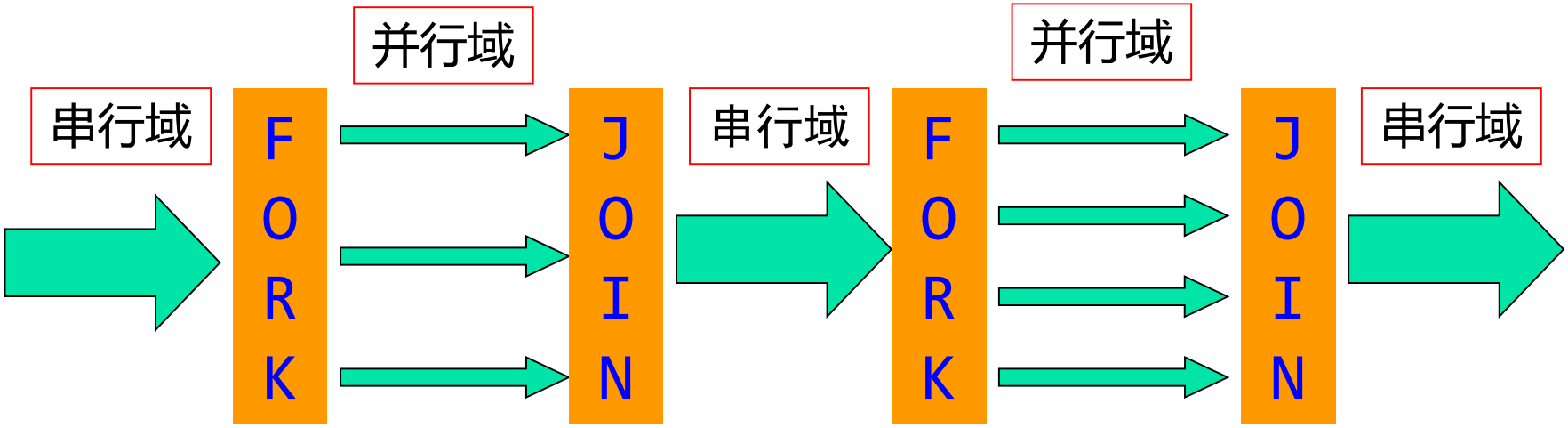
① OpenMP 程序开始于一个单独的主线程（Master Thread），然后主线程一直**串行**执行（**串行域**）

② 直到遇见第一个**并行域**（Parallel Region），然后开始并行执行并行域

③ 并行域代码执行完后再回到主线程，执行**串行域**，直到遇到下一个并行域

④ 以此类推，直至程序运行结束。

Fork-Join



- **Fork**：主线程创建一个并行线程队列，然后并行域中的代码在不同的线程上并行执行
- **Join**：当并行域执行完之后，它们或被同步，或被中断，最后只有主线程继续执行

† 并行域可以嵌套

C 举例

```c
#include <omp.h>
#include <stdio.h>
int main()
{
  int nthreads, tid;
  #pragma omp parallel private(nthreads,tid)
  {
    tid=omp_get_thread_num(); // 获取线程号
    printf("Hello world from OpenMP thread %d\n", tid);
    if (tid==0)
    {
      nthreads=omp_get_num_threads(); // 获取线程个数
      printf("Number of threads %d\n", nthreads);
    }
  }
  return 0;
}
```

- 头文件：omp.h
- OpenMP 指令标识符 #pragma omp

- 编译
  gcc -fopenmp OMP_hello.c

几点说明

OpenMP 程序编写

- 通常采用**增量并行**方法：逐步改造现有的串行程序，每次只对部分代码进行并行化，这样可以逐步改造，逐步调试。
- C/C++ 的 OpenMP 指令标识符为 #pragma omp
- C/C++ 程序中，OpenMP 指令区分大小写
- 每个 OpenMP 指令后是一个结构块（用大括号括起来）

源程序编译

```
gcc -fopenmp OMP_hello.c -o OMP_hello
icc -openmp OMP_hello.c -o OMP_hello  // Intel C
```

OpenMP 编程三要素

- 编译指导（Compiler Directive）
- 运行库函数（Runtime Library Routines）
- 环境变量（Environment Variables）

编译指导指令

OpenMP 通过对串行程序添加编译指导指令实现并行化

编译指导指令分类

- 并行域指令：创建并行域，即产生多个线程以并行方式执行任务，所有并行任务必须放在并行域中才能被并行执行
- 工作共享指令：负责任务划分，并分发给各个线程，工作共享指令不能产生新线程，因此必须位于并行域中
- 同步指令：负责并行线程之间的同步
- 数据环境：负责并行域内的变量的属性（共享或私有），以及边界上（串行域与并行域）的数据传递

并行域

- 并行域指令 **Parallel Constructs**

`parallel`	创建一个并行域

```
#pragma omp parallel private(tid)
{
    tid=omp_get_thread_num(); // Obtain thread id
    printf("Hello world from OpenMP thread %d\n", tid);
    if (tid==0) // Only master thread does this
    {
        nthreads=omp_get_num_threads();
        printf("Number of threads: %d\n", nthreads);
    }
}
```

OMP_hello.c

工作共享

- 工作共享结构 **Work-Sharing Constructs**

`for`	创建循环共享结构，代表典型的数据并行
`sections` `/section`	创建 **sections** 结构，将任务划分成独立的子任务(**section**)，每个子任务由一个线程执行，典型的任务并行
`single`	创建仅由一个线程执行的任务，先到先执行，其他线程等待其执行结束后再一起执行后面的任务
`master`	与 **single** 类似，但指定由主线程执行，而且其他线程无需等待
`task` `taskyield`	创建一个显式任务，可以立即被执行，也可以挂起并推迟执行，便于实现一些复杂结构，如递归。
`workshare`	仅适用 Fortran

同步结构

- 同步结构 **Synchronization Constructs**

`critical`	避免线程竞争，其包含的代码同一时刻只能有一个线程执行
`barrier`	障碍同步：用在并行域内，所有线程执行到 **barrier** 都要停下等待，直到所有线程都执行到 **barrier**，然后再继续往下执行
`atomic`	确保一个特殊存储单元只能原子更新，即不允许多线程同时去写，只能用于单一赋值语句等特殊情况
`flush`	确保线程存储的临时视图与共享存储中的数据一致，并且保证一个变量在共享存储中的读/写顺序
`ordered`	指定并行域的循环按迭代顺序执行
`taskwait`	可配合 **task** 结构使用，创建任务调度点

数据环境

- 数据环境指令 **Data Environment Constructs**

`threadprivate(list)`	将一个或多个私有变量声明为全局的，即在多个并行域中使用时，保留私有变量在上次并行域中的值； 可以与 **copyin** 子句联合使用，将主线程的值广播给其他线程。

OpenMP子句

子句（Clause）：

出现在编译制导指令之后，负责添加一些补充设置

数据共享属性子句

- 数据作用域属性子句 Data Sharing Attribute Clauses

`private(list)`	创建一个或多个变量的私有拷贝，即在每个线程中都创建一个同名局部变量，但没有初始值； 列表中的变量必须已定义，且不能是常量和引用； 列表中的多个变量用逗号隔开。
`firstprivate(list)`	**private** 的扩展， 创建私有拷贝的同时，将主线程中的同名变量的值作为初值。
`lastprivate(list)`	退出并行域时，将指定的私有拷贝的“最后”值复制到主线程中的同名变量中； “最后”：循环的最后一次迭代（按串行方式），或 **sections** 的最后一个 **section**（代码中）； 可能会增加额外开销，一般不建议使用，可以用共享变量等方式实现。

数据共享属性子句

- 数据作用域属性子句 Data Sharing Attribute Clauses

`shared(list)`	指定一个或多个变量为共享变量，即所有线程都可以访问这些变量
`default(...)`	指定并行域内的变量的缺省属性，C 语言支持 **shared** 和 **none**

变量的属性

- 如何决定哪些变量是共享哪些是私有？
  - 通常循环变量、临时变量、写变量一般应设置成私有的；
  - 数组变量、仅用于读的变量通常是共享的；
  - 能设置成共享的变量建议设置成共享的。
  - `default(none)` ：所有变量必须显式指定是私有或共享

† 紧跟 for 结构后面的循环变量默认是私有的，其他循环的循环变量需显式声明成私有的。

数据缺省属性

- 结构内变量的缺省属性

threadprivate 指定的变量	私有
结构内声明的自动存储持续变量	私有
动态存储持续变量	共享
静态数据成员	共享
紧跟 for 或 parallel for 的循环变量	私有
不包含可变成员的常量	共享
结构内声明的静态存储持续变量	共享

数据缺省属性

- 在并行域内，但不在结构内

threadprivate 指定的变量	私有
声明在调用函数中的静态存储持续变量	共享
声明在调用函数中的常量	共享
动态存储持续变量	共享
静态数据成员	共享
引用方式的形参	与实参相同
声明在调用函数中的其他变量	私有

数据共享属性子句

- 数据作用域属性子句（续）

`copyin(list)`	配合 **threadprivate**，用主线程同名变量的值对 **threadprivate** 的私有拷贝进行初始化
`copyprivate(list)`	配合 **single**，将 **single** 块中串行计算得到的变量值广播到并行域中其它线程的同名变量中
`reduction(op:list)`	创建一个或多个变量的私有拷贝，在并行结束后对这些变量执行指定的归约操作（如求和），并将结果返回给主线程中的同名变量

REDUCTION

- 规约操作 **reduction**

```
#pragma omp parallel reduction(+:mysum) private(i,tid)
{
    nthreads = omp_get_num_threads();
    tid = omp_get_thread_num();

    for (i=tid+1; i<=n; i=i+nthreads)
    {  mysum = mysum + i;    }
}
```

OMP_reduction.c

- 在 **reduction** 子句中，编译器为每个线程创建变量 **mysum** 的私有拷贝
- 退出并行域时，将这些值加在一起并把结果加到原始变量 **mysum** 中
- **reduction** 中的 **op** 操作可以是：`+, -, *, &&, ||, &, |, ^` 和内置函数 `max, min`

REDUCTION

- 规约操作时私有变量的初始值

+	0
*	1
-	0
&&	1
||	0
&	~0
|	0
^	0
max	相应变量类型的最小值
min	相应变量类型的最大值

OpenMP子句

- 其它字句

`if(log_expr)`	条件并行，满足指定条件时才执行相关操作
`num_threads(int)`	指定并行域内线程的个数
`nowait`	忽略并行线程或其它制导指令中暗含的障碍同步，使用时需小心
`schedule(type,chunk)`	指定循环任务的分配规则
`ordered`	指定循环内的代码按循环顺序执行
`collapse(int)`	将多重循环转换为一层循环，然后进行任务划分

目录页

Contents

3 并行域

- 并行域创建
- 并行域举例
- 并行域嵌套

并行域

并行域的创建

```
#pragma omp parallel   // 创建并行域
```

- 产生多个线程，即生成一个并行域
- 并行域中的所有代码默认都将被所有线程并行执行
- 可以通过线程 **id** 给不同线程手工分配不同的任务
- 也可以利用工作共享指令给每个线程分配任务
- 并行域可以嵌套
- 并行域结束后，将回到主线程

PARALLEL

Fortran	!$omp parallel [clause clause ...] *structured-block* !$omp end parallel

C/C++	#pragma omp parallel [clause clause ...]
	{
	structured-block
	}

- 结尾处有隐式同步，可用的子句包括：

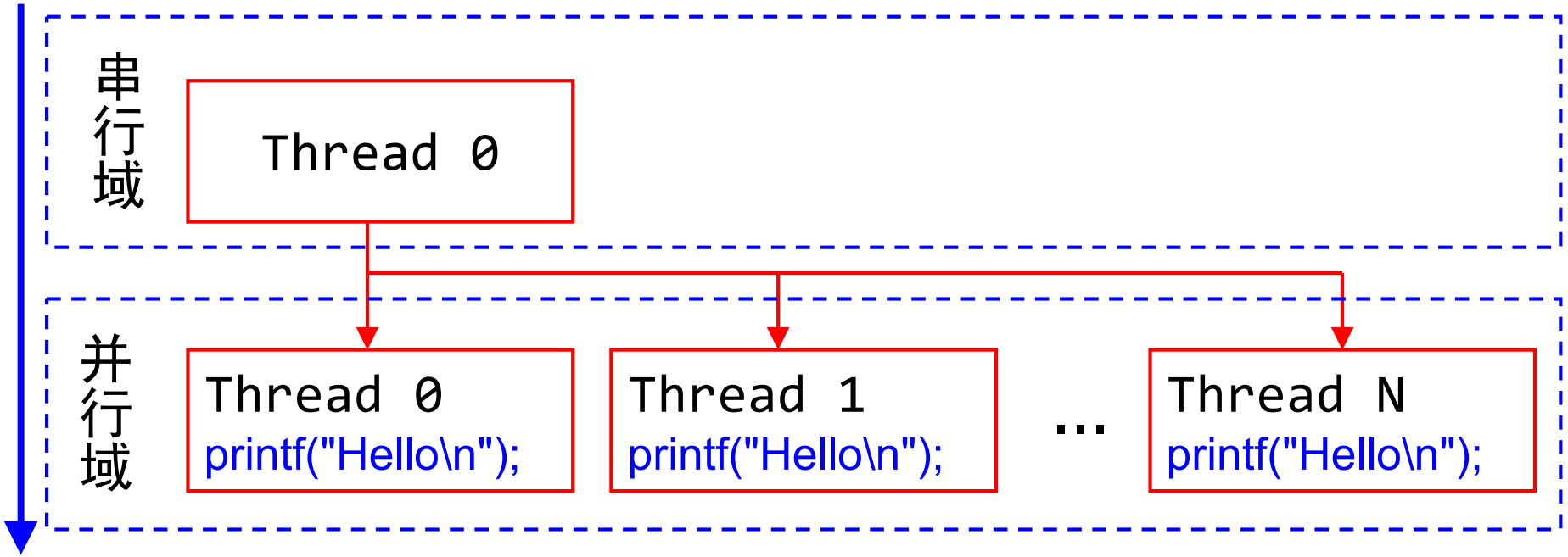
if (*scalar-logical-expression*)
num_threads(*scalar-integer-expression*)
default(shared | none)
private(*list*), firstprivate(*list*)
shared(*list*)
copyin(*list*)
reduction(*op* : *list*)

子句用来添加一些补充信息。若有多个，则用空格隔开。

若没有指定线程个数，则产生最大可能的线程个数。

PARALLEL举例

```
#pragma omp parallel
{
    printf("Hello\n");
}
```



PARALLEL举例

例：指定线程个数，设置变量属性

```
#pragma omp parallel private(tid) num_threads(3)
{
    . . . . . .
}
```

OMP_parallel_01.c

PARALLEL 嵌套

- PARALLEL 可以嵌套

OMP_parallel_02.c

```
omp_set_nested(1); // 打开并行域嵌套功能
#pragma omp parallel private(tid) num_threads(2)
{
    tid=omp_get_thread_num();
    printf("Hello world from OpenMP thread %d\n", tid);

    #pragma omp parallel private(tid) num_threads(3)
    {
        tid=omp_get_thread_num();
        printf("Hello math from OpenMP thread %d\n", tid);
    }
}
```

- 缺省不支持嵌套，需要利用 OpenMP 的 API 过程 **omp_set_nested** 开启嵌套功能（该过程的缺省值是 **false**）

目录页

Contents

4 工作共享结构

- 工作共享指令分类
- 循环共享结构
- SCHEDULE 任务调度
- 数据的共享和私有
- 规约操作

工作共享指令

工作共享指令

- 负责任务的划分和分配，
- 在每个工作分享结构入口处无需同步
- 每个工作分享结构结束处会隐含障碍同步

- `for` 指令：自动划分和分配循环任务
- `sections` 指令：手动划分任务
- `single` 指令：指定并行域中的串行任务
- `master` 指令：指定仅由主线程执行的串行任务

循环共享

Fortran	!$omp do [clause clause ...] *do-loops* !$omp end do

C/C++	#pragma omp for [clause clause ...]
	{
	for-loops
	}

- 只负责工作分享，不负责并行域的产生和管理，一般需放在并行域中
- 如果不放在并行域内，则只能串行执行
- 结尾处有隐式同步，可用的子句（clause）包括：

private(*list*), firstprivate(*list*), lastprivate(*list*)
reduction(*op* : *list*)
schedule(*kind[, chunk_size]*)
ordered
nowait

循环

串行循环

- 将循环变量从初始值开始，逐次递增或递减，直至满足结束条件，其间对每个循环变量的取值都将执行一次循环体内的代码，且循环体内的代码是依次串行执行的

OpenMP 并行循环

- 假定总共有 **N** 次循环，**OpenMP** 对循环的任务分配就是将这 **N** 次循环进行划分，然后让每个并发线程各自负责其中的一部分循环工作，因此必须确保每次循环之间的数据的相互独立性！

† 循环变量只能是整型或指针

† 将任务划分后分发给并发进程称为“调度”（schedule）

循环共享举例

OMP_for.c

```
#include <omp.h>
#include <stdio.h>
#define N 10000
int main()
{
    int A[N], B[N], i;
    #pragma omp parallel num_threads(4)
    {
      if (!omp_get_thread_num())
        printf("Number of threads: %d\n", omp_get_num_threads());
      #pragma omp for
      for(i=0; i<N; i++)
      {  B[i]=i; A[i]=2*B[i];  }
    }
    printf("A[n]=%d, B[n]=%d\n", A[N-1], B[N-1]);
    return 0;
}
```

for (循环变量赋初值; 循环条件; 循环变量增量)

循环体 // 循环体中不能修改循环变量的值

SCHEDULE

- 在循环共享结构中，将任务划分后分发给各个线程称为调度(schedule)
- 任务调度的方式直接影响程序的效率：（1）任务的均衡程度；（2）循环体内数据访问顺序与相应的 cache 冲突情况。

循环体任务的调度基本原则

- 分解代价低：分解方法要快速，尽量减少分解任务而产生的额外开销
- 任务计算量要均衡
- 尽量避免高速缓存（cache）冲突，提高 cache 命中率。

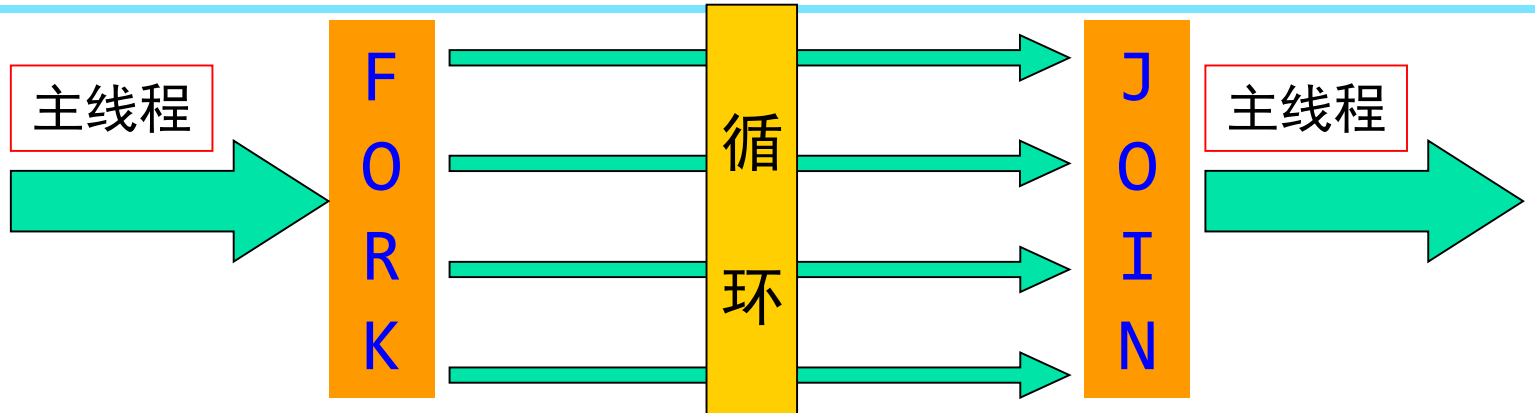
高速缓存 cache

高速缓存（cache）的关键特性是以连续单元的数据块的形式组成的，当处理器需要引用某个数据块的一个或几个字节时，这个块的所有数据就会被传送到高速缓存中。因此，如果接下来需要引用这个块中的其他数据，则不必再从主存中调用它，这样就可以提高执行效率。

在多处理机系统中，不同的处理器可能需要同一个数据块的不同部分（不是相同的字节），尽管实际数据不共享（处理器有各自的高速缓存），但如果一个处理器对该块的其他部分写入，由于高速缓存的一致性协议，这个块在其他高速缓存上的拷贝就要全部进行更新或者使无效，这就是所谓的“假共享”，它对系统的性能有负面的影响。

比如：两个处理器 A 和 B 访问同一个数据块的不同部分，如果处理器A修改了数据，则高速缓存一致协议将更新或者使处理器 B 中的高速缓存块无效。而在此时处理器 B 可能也修改了数据，则高速缓存一致协议反过来又要将处理器 A 中的高速缓存块进行更新或者使无效。如此往复，就会导致高速缓存块的乒乓效应（ping-pong effect）。

SCHEDULE



- 任务调度 SCHEDULE
  - SCHEDULE(static, chunk)
    静态分配，chunk 为任务块的大小，每个任务块被轮转分配给各线程
  - SCHEDULE(dynamic, chunk)
    动态分配，chunk 为任务块的大小，按先来先服务原则分配
  - SCHEDULE(guided, chunk)
    动态分配，任务块大小可变，先大后小，chunk 指定最小任务的大小
  - SCHEDULE(runtime)
    具体调度方式到运行时才进行，由环境变量 OMP_SCHEDULE 确定

SCHEDULE方式

SCHEDULE(static, chunk)
SCHEDULE(static)

- 循环任务被划分为 chunk 大小的子任务，然后被轮转的分配给各个线程
- 省略 chunk，则循环任务被划分成（近似）相同大小的子任务，每个线程被分配一个子任务；

例：假如线程数为 4，总任务量为 40，则

schudule(static)

T0	T1	T2	T3

schudule(static, 4)

T0	T1	T2	T3	T0	T1	T2	T3	T0	T1

SCHEDULE方式

SCHEDULE(dynamic, chunk)
SCHEDULE(dynamic)

- 基于先来先服务方式分配给各线程；
- 当省略 chunk 时，默认值为 1

SCHEDULE(guided, chunk)
SCHEDULE(guided)

$$S_k = \frac{R_k}{N}$$

- 类似 dynamic，但任务块开始较大，然后变小，划分方式取决于编译器
- chunk 指定最小任务的大小，省略时默认值为 1

GCC：S_k 第 k 块任务大小，
N 线程个数，R_k 剩余循环次数

SCHEDULE(runtime)

- 调度延迟到运行时，调度方式取决于环境变量 OMP_SCHEDULE 的值

并行域与循环合并

- 如果并行域中只有循环共享结构，则可以合写在一起

Fortran	!$omp parallel do [clause clause ...] *do-loops* !$omp end parallel do

C/C++	#pragma omp parallel for [clause clause ...]
	{
	for-loops
	}

循环举例

OMP_parallel_for.c

```
#define N 100000000
int main()
{
    static int A[N], B[N], i;
    clock_t t0, t1;

    t0 = clock();
    #pragma omp parallel for num_threads(4)
        for(i=0; i<N; i++)
            {  B[i]=i; A[i]=2*B[i]; }

    t1 = clock();
    printf("A[n]=%d, B[n]=%d\n", A[N-1], B[N-1]);
    printf("Elapsed time: %.2e\n", (double)(t1-t0)/CLOCKS_PER_SEC);
}
```

举例：PI

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

$$h = \frac{b-a}{n}$$

$$x_i = a + ih$$

- 中点公式：$\int_a^b f(x)dx \approx h\sum_{i=1}^{n} f\left(\frac{x_{i-1}+x_i}{2}\right)$

- 梯形公式：$\int_a^b f(x)dx \approx h\sum_{i=1}^{n} \frac{f(x_{i-1})+f(x_i)}{2}$

$$= \frac{h}{2}\left(f(x_0)+f(x_n)\right) + h\sum_{i=1}^{n-1} f(x_i)$$

PI 串行程序

C_pi.c

```
const int n=1000000;
inline double f(double x)
{  return 4/(x*x+1); }

int main()
{
    double a=0.0, b=1.0, h=(b-a)/n, mypi=0.0;
    int i;

    mypi = f(a) + f(b);
    for(i=1; i<=n; i++)
    {  mypi = mypi + f(a+i*h);  }
    mypi = h*mypi;
    printf("mypi=%.10f\n", mypi);
    return 0;
}
```

PI 并行：for + critical

```
#pragma omp parallel for private(i) shared(a,h,mypi)
for(i=1; i<n; i++)
{
    #pragma omp critical
    mypi = mypi + f(a+i*h);
}
mypi = mypi + (f(a) + f(b))/2;
mypi = h*mypi;
```

OMP_pi_critical.c

PI 并行：for

```
double mypi[nthreads];
#pragma omp parallel num_threads(nthreads) private(i,tid) shared(a,h,mypi)
{
    tid = omp_get_thread_num();
    #pragma omp for
    for(i=1; i<n; i++)
    {
        mypi[tid] = mypi[tid] + f(a+i*h);
    }
}
for(i=1; i<nthreads; i++)
    mypi[0] = mypi[0] + mypi[i];
mypi[0] = mypi[0] + (f(a) + f(b))/2;
mypi[0] = h*mypi[0];
```

OMP_pi_for.c

OpenMP编程举例：加速比

OMP_parallel_for_speedup_01.c

OMP_parallel_for_speedup_02.c

OMP_parallel_for_speedup_03.c

OMP_parallel_for_speedup_04.c