5. Parallelprogrammierung II und q-gram Indizes

AlDaBi Praktikum

Inhalt

- Parallelprogrammierung II
- q-gram Indizes

- Bemerkungen zur P-Aufgabe

PARALLELPROGRAMMIERUNG II

OpenMP - Eine Einführung in die parallele Programmierung mit C/C++

Simon Hoffmann und Rainer Lienhart, http://www.springer.com/computer/book/978-3-540-73122-1

David Weese

René Rahn
WS 2014/15

Einführung

- Es sollen Fibonacci-Zahlen berechnet werden:

```
vec[0] = 1;
vec[1] = 1;
for (int i = 2; i < vec.size(); ++i)
    vec[i] = vec[i-1] + vec[i-2];
```

- Der Wert an Stelle i hängt offensichtlich von Stelle i-1 und i-2 ab
  - Datenabhängigkeit zwischen den Iterationen (*read-after-write*)
  - Die Iterationen i-1 und i-2 müssen vor i ausgeführt werden
  - Kein Problem wenn Schleife seriell ausgeführt wird

- Lässt sich die Schleife parallelisieren?

Einführung (II)

- So geht es nicht:

```
vec[0] = 1;
vec[1] = 1;
#pragma omp parallel for
for (int i = 2; i < n; ++i)
    vec[i] = vec[i-1] + vec[i-2];
```

- Warum nicht?
  - Angenommen t Threads teilen sich den Indexraum gleichmäßig auf
    - Thread k bearbeitet zusammenhängendes Teilstücke $i=a_k,\ldots,a_{k+1}-1$
    - $a_0 = 2$ und $a_t = n$
  - Starten alle gleichzeitig, hat nur Thread 0 die benötigten 2 vorherigen Einträge
  - Threads 1,...,t-1 verletzen *read-after-write* Abhängigkeit (race condition)

Einführung (III)

- Lösung:
  - Man müsste die Einträge a_k-1 und a_k-2 vorab initialisieren
    - Im Allgemeinen schwierig
    - Hier ginge es mit expliziter Formel für Fibonacci-Zahlen von Moivre-Binet

$$vec[i] = \frac{1}{\sqrt{5}}\left[\left(\frac{1+\sqrt{5}}{2}\right)^i - \left(\frac{1-\sqrt{5}}{2}\right)^i\right]$$

    - Aufteilung muss vorab bekannt sein (manuelles Aufteilen erforderlich)

```
int total_threads = omp_get_num_threads();
int this_thread = omp_get_thread_num();
```

Arten der Datenabhängigkeit

- Direkte (Fluss-)Abhängigkeit:
  - read-after-write (2 nach 1, 3 nach 2)

```
a = 7;          // 1
b = a + 1;      // 2
c = b;          // 3
```

Arten der Datenabhängigkeit

- Direkte (Fluss-)Abhängigkeit:
  - read-after-write (2 nach 1, 3 nach 2)

```
a = 7;          // 1
b = a + 1;      // 2
c = b;          // 3
```

- Indirekte oder Gegenabhängigkeit:
  - write-after-read (5 nach 4)

```
b = a + 1;      // 4
a = 3;          // 5
```

Arten der Datenabhängigkeit

- Direkte (Fluss-)Abhängigkeit:
  - read-after-write (2 nach 1, 3 nach 2)

```
a = 7;          // 1
b = a + 1;      // 2
c = b;          // 3
```

- Indirekte oder Gegenabhängigkeit:
  - write-after-read (5 nach 4)

```
b = a + 1;      // 4
a = 3;          // 5
```

- Ausgabeabhängigkeit:
  - write-after-write (7 nach 6)

```
a = 10;         // 6
a = 20;         // 7
```

Parallelisierung

- Ausführungsreihenfolge von datenabhängigen Instruktionen darf nicht verändert werden
  - In seriellen Programmen immer gegeben
  - In parallelen Programmen Aufgabe des Programmierers

- Nur unabhängige Instruktionen können vertauscht werden
  - Parallel ausgeführte Instruktionen müssen also unabhängig sein
  - Suche nach unabhängigen Variablen, Berechnungen, Teilproblemen
  - Parallelisiere diese

- Datenabhängigkeit wird erkannt und benutzt von
  - Prozessoren mit Pipelining
  - Compilern beim Optimieren von Code
  - Parallelisierenden Compilern

Auflösen von Datenabhängigkeiten

- Direkte (Fluss-)Abhängigkeit:
  - Lässt sich nicht auflösen

```
a = 7;          // 1
b = a + 1;      // 2
c = b;          // 3
```

Auflösen von Datenabhängigkeiten

- Direkte (Fluss-)Abhängigkeit:
  - Lässt sich nicht auflösen

```
a = 7;          // 1
b = a + 1;      // 2
c = b;          // 3
```

- Indirekte oder Gegenabhängigkeit:
  - Umbenennen

```
b = a + 1;      // 4
a2 = 3;         // 5
```

Auflösen von Datenabhängigkeiten

- Direkte (Fluss-)Abhängigkeit:
  - Lässt sich nicht auflösen

```
a = 7;          // 1
b = a + 1;      // 2
c = b;          // 3
```

- Indirekte oder Gegenabhängigkeit:
  - Umbenennen

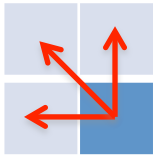
```
b = a + 1;      // 4
a2 = 3;         // 5
```

- Ausgabeabhängigkeit:
  - Umbenennen

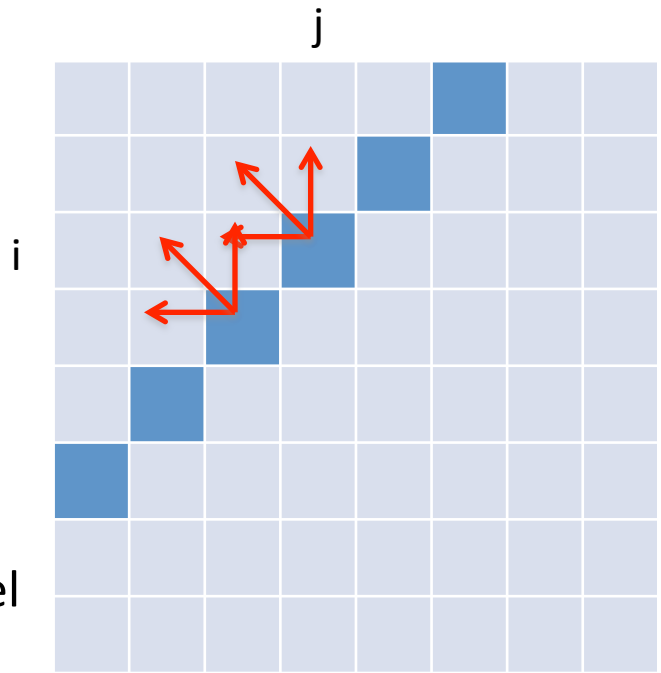
```
a = 10;         // 6
a2 = 20;        // 7
```

Abhängigkeiten in DP-Alignments

- Beispiel: Needleman-Wunsch Alignment
  - $M_{i,j}$ ist **flussabhängig** von $M_{i-1,j-1}$, $M_{i,j-1}$ und $M_{i-1,j}$
  - Keine Abhängigkeit zwischen $M_{i,j}$ und $M_{i+1,j-1}$
    - Alle Elemente auf einer Antidiagonalen sind voneinander **unabhängig**



- Mögliche Parallelisierung Needleman-Wunsch:
  - Berechne Matrix antidiagonalweise
  - Antidiagonale selbst kann mit **parallel for** berechnet werden



- Alternativ:
  - Jeder Thread berechnet ein Tile
    (siehe cache-aware DP-Alignment *P-VL 6*)
  - Berechne diagonal benachbarte Tiles parallel

Reduktion

- Szenario:
  - Parallel arbeitende Threads teilen sich manchmal eine Resource
  - Um Race Conditions zu vermeiden muss synchronisiert werden
    - #pragma omp critical
    - #pragma omp atomic
  - critical Bereiche können zum Flaschenhals werden, weil sich davor Threads stauen

- Beispiel (P-A5):
  - Parallelität auf Read-Ebene, Ausgabe der gefundenen Matches
  - Schreiben in Datei (`f.write()`) wird synchronisiert durch `omp critical`

Reduktion (II)

- Alternative (ohne Synchronisation):
  - Resource wird dupliziert, jeder Thread erhält eigene Resource
  - Am Ende des parallelen Bereichs werden lokale Resourcen zu einer globalen vereint (**Reduktion**)
  - Meist effizienter, weil Threads nicht warten müssen

- Beispiel (P-A5):
  - Jeder Thread erhält eigenen Vector zum Speichern
  - Master-Thread schreibt am Ende Vorkommen jedes Threads in die Datei
    - **Hier noch schneller:** Pro Thread in eigene Datei schreiben
    - Am Ende konkateniert der Master-Thread alle Dateien

Reduktion (III)

- Reduktion muss manuell implementiert werden
- Bei einfachen Reduktionen hilft OpenMP:
  - Direktive **reduction (op: var)** in einem parallelen Bereich

```
int summe = 0;

#pragma omp parallel for reduction (+:summe)
for (int i = 0; i < 10000; ++i)
    summe += A[i];
```

- Funktionsweise
  - Jeder Thread erhält lokale Kopien der Variable **var**
  - **op** ist Operation, die am Ende mit allen lokalen Variablen ausgeführt wird
  - Ergebnis wird mit der ursprüngliche, globale Variablen **var** verknüpft

Reduktionsoperationen

- In OpenMP (C++) gibt es folgende Reduktionsoperationen:

Operator	Initialwert der lok. Variablen
+	0
-	0
*	1
&	~0
|	0
^	0
&&	true
||	false

- Jede lokale Variable erhält zu Beginn der Reduktion den entsprechenden Initialwert

Q-GRAM INDEX

David Weese

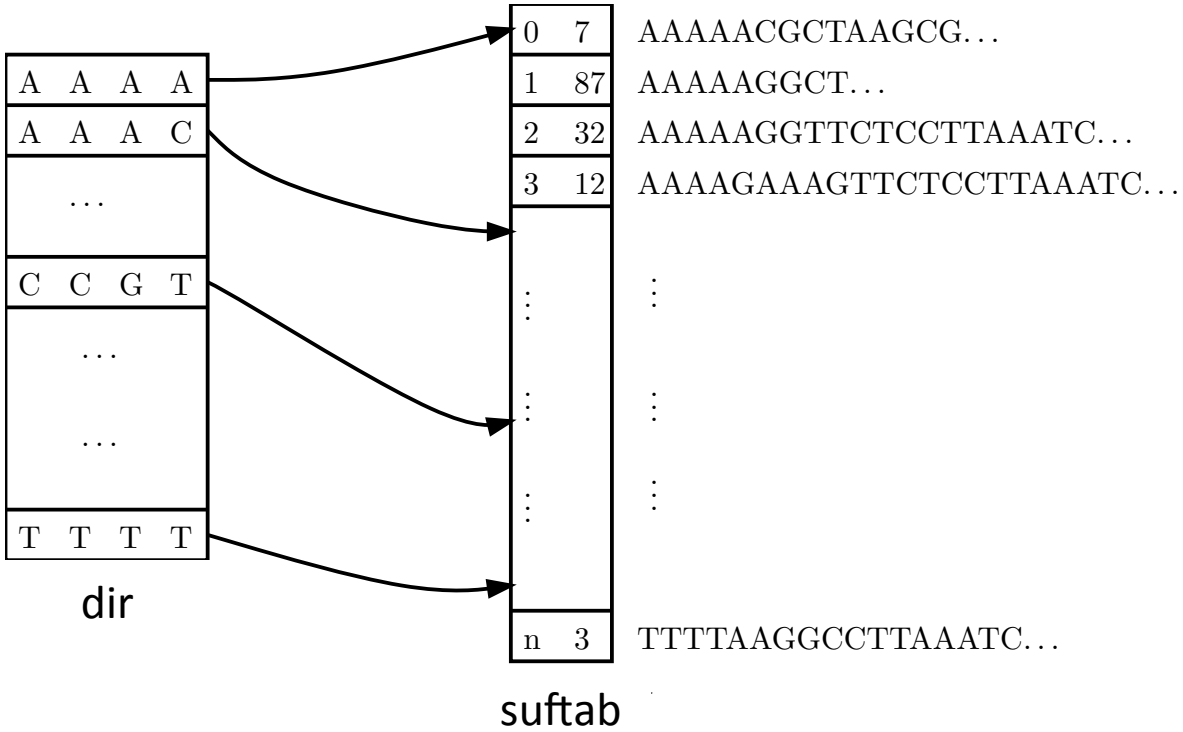
René Rahn
WS 2014/15

Begriffe

- q-gram
  - Kurzer String der Länge q
- q-gram Index
  - Speichert und liefert effizient alle Vorkommen eines gegeben q-grams in einem Text

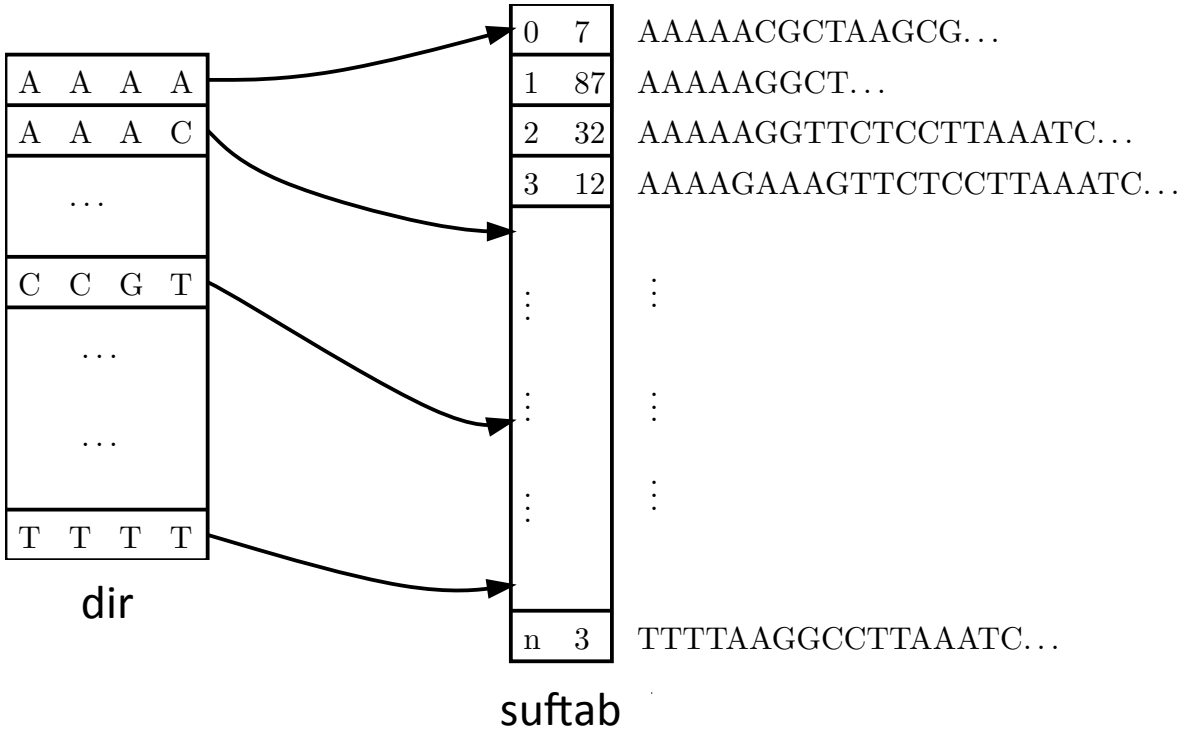
q-gram Index

- Kann über ein Suffixarray implementiert werden
  - **suftab** speichert die Positionen alle Suffixe
    - Mindestens **nach den ersten q Buchstaben** sortiert
  - **dir** speichert zu jedem q-gram Q die Position des ersten Suffix in **suftab**, das mit Q beginnt



q-gram Index (II)

- Abfrage aller Vorkommen eines q-grams Q im Text
  - Ermittle Position h(Q) des zu Q gehörenden Eintrags in **dir** (mittels q-gram hash)
  - Alle Vorkommen von Q stehen in **sufab** zwischen (einschließlich) **dir**[h(Q)] und (ausschließlich) **dir**[h(Q)+1].



q-gram Hashing

- Wie findet man effizient den zu Q gehörenden Eintrag in **dir**?
  - **dir** enthält alle möglichen q-gramme in lex. Ordnung
  - man braucht eine bijektive Funktion h, die die Menge aller q-gramme auf Positionen in **dir** abbildet:

$$h : \Sigma^q \rightarrow [0, |\Sigma|^q - 1]_{\mathrm{N}}$$

  - h muss die Ordnung der q-gramme erhalten:

$$Q_1 < Q_2 \Rightarrow h(Q_1) < h(Q_2)$$

  - h(Q) heißt Hashwert oder Rang von Q

q-gram Hashing (II)

- Lösung: Interpretiere q-gram als Zahl zur Basis $|\Sigma|$:
  - Weise jedem Buchstaben x aus Σ seinen Rang ord(x) zu
    - Beispiel Σ_{DNA}={A,C,G,T}: ord(A) = 0
      ord(C) = 1
      ord(G) = 2
      ord(T) = 3
  - Für q-gram Q gilt dann:

$$h(Q) = \sum_{i=0\ldots q-1} ord(Q[i]) \cdot |\Sigma|^{q-1-i}$$

q-gram Hashing (II)

- Lösung: Interpretiere q-gram als Zahl zur Basis $|\Sigma|$:
  - Weise jedem Buchstaben x aus Σ seinen Rang ord(x) zu
    - Beispiel Σ_{DNA}={A,C,G,T}: ord(A) = 0
      ord(C) = 1
      ord(G) = 2
      ord(T) = 3
  - Für q-gram Q gilt dann:

$$h(Q) = \sum_{i=0\ldots q-1} ord(Q[i]) \cdot |\Sigma|^{q-1-i}$$

- Beispiel Σ_{DNA}:

$$\begin{aligned} h(GATTACA) &= 2033010_4 \\ &= 2 \cdot 4^6 + 3 \cdot 4^4 + 3 \cdot 4^3 + 1 \cdot 4^1 \\ &= 9156 \end{aligned}$$

q-gram Hashing (II)

- Lösung: Interpretiere q-gram als Zahl zur Basis $|\Sigma|$:
  - Weise jedem Buchstaben x aus Σ seinen Rang ord(x) zu
    - Beispiel Σ_{DNA}={A,C,G,T}: ord(A) = 0
      ord(C) = 1
      ord(G) = 2
      ord(T) = 3
  - Für q-gram Q gilt dann:

$$h(Q) = \sum_{i=0\ldots q-1} ord(Q[i]) \cdot |\Sigma|^{q-1-i}$$

- Beispiel Σ_{DNA}:

$$\begin{aligned} h(GATTACA) &= 2033010_4 \\ &= 2 \cdot 4^6 + 3 \cdot 4^4 + 3 \cdot 4^3 + 1 \cdot 4^1 \\ &= 9156 \end{aligned}$$

Hashwerte aller 2-gramme über Σ_{DNA}:

Q	H(Q)
A A	0
A C	1
A T	2
A G	3
C A	4
C C	5
C G	6
C T	7
G A	8
G C	9
G G	10
G T	11
T A	12
T C	13
T G	14
T T	15

q-gram Hashing (III)

- Effizientes Hashing
  - Polynomauswertung nach dem Horner-Schema

$$
\begin{aligned}
h(GATG) &= 2 \cdot 4^3 + 0 \cdot 4^2 + 3 \cdot 4^1 + 2 \cdot 4^0 \\
&= (((((2 \cdot 4) + 0) \cdot 4) + 3) \cdot 4) + 2
\end{aligned}
$$

- Pseudo-Code:

```
hashValue = 0;

for(c in Q from left to right) {
    hashValue *= |Σ|;
    hashValue += ord(c);
}
```

q-gram Hashing (IV)

- Spezialfall $|\Sigma| = 2^k$
  - Ersetze Addition, Subtraktion und Multiplikation durch schnellere Bit-Operationen
  - Beispiel für $|\Sigma| = 4$
    - Shift-Operator

```
hashValue *= 4;
```

```
hashValue <<= 2;
```

    - Bitwise &

```
hashValue += ord(c);
```

```
hashValue |= ord(c);
```

    - „Abschneiden“ der vorderen Bits (Subtraktion bei überlappenden q-grams)

```
unsigned mask = ~0 << 2*q; // for q=3: ...11111000000
hashValue &= ~mask;
```

Überlappendes q-gram Hashing

- Rang von sich überlappenden q-grammen wird benötigt
  - Aufbau des q-gram Index
  - In QUASAR während des Scans einer Sequenz

```
CATCGTAGCGACTGATCGACTACGTACGTCGAT
                    CTACGTA
                     TACGTAC
                      ACGTACG
                       ...
```

Überlappendes q-gram Hashing

- Rang von sich überlappenden q-grammen wird benötigt
  - Aufbau des q-gram Index
  - In QUASAR während des Scans einer Sequenz

```
CATCGTAGCGACTGATCGACTACGTACGTCGAT
                  CTACGTA
                   TACGTAC
                    ACGTACG
                      ...
```

- Gegeben: Q_0, Q_1 und $h(Q_0)$
  - Es gilt $Q_0[1..q-1] = Q_1[0..q-2]$

Überlappendes q-gram Hashing

- Rang von sich überlappenden q-grammen wird benötigt
  - Aufbau des q-gram Index
  - In QUASAR während des Scans einer Sequenz

```
CATCGTAGCGACTGATCGACTACGTACGTCGAT
                  CTACGTA
                   TACGTAC
                    ACGTACG
                     ...
```

- Gegeben: Q_0, Q_1 und $h(Q_0)$
  - Es gilt $Q_0[1..q-1] = Q_1[0..q-2]$

- Lässt sich $h(Q_1)$ in konstanter Zeit berechnen?
  - Ja, durch anpassen des Rangs:

$$h(Q_1) = h(Q_0) \cdot |\Sigma| - \mathrm{ord}(Q_0[0]) \cdot |\Sigma|^q + \mathrm{ord}(Q_1[q-1])$$

q-gram Index Erzeugen

- Anmerkungen zum q-gram Index mit Suffix Array
  - Im Suffix Array sind alle Suffixe vollständig lex. Sortiert
  - Sortierung nach den ersten q Zeichen genügt
    - Um Größenordnungen schneller als Konstruktion des ganzen Suffixarrays

q-gram Index Erzeugen

- Anmerkungen zum q-gram Index mit Suffix Array
  - Im Suffix Array sind alle Suffixe vollständig lex. Sortiert
  - Sortierung nach den ersten q Zeichen genügt
    - Um Größenordnungen schneller als Konstruktion des ganzen Suffixarrays

- Wie sortiert man effizient alle Suffixe nach den ersten q Zeichen?
  - Quick Sort
    - **suftab** mit Werten 0,...,n-q initialisieren
    - **suftab** mit std::sort und eigenem Vergleichsfunktor sortieren, der höchstens die ersten q Zeichen der entsprechenden Suffixe vergleicht
    - Schreibe den Bucket-Anfang jedes q-grams Q an die Stelle h(Q) in **dir** (linearer Scan über **suftab** und **dir**)
  - Counting Sort

Counting Sort

- Sortiert Elemente nicht über Vergleiche sondern über ihren Rang h(Q)
  - Laufzeit ist $O(n+|\Sigma|^q)$ statt $O(n \cdot \log n)$
  - Funktioniert nur für kleine Alphabete (DNA) und kleine q (q<14)

- Funktionsweise:
  1. Fülle **dir** mit Nullen
  2. Scanne Text und zähle q-gramme mittels **dir**
  3. Berechne kumulative Summe der Zähler in **dir**, so dass der Eintrag an Stelle h(Q) das Bucket-Ende zum q-gram Q ist
  4. Scanne Text und verringere Eintrag an Stelle h(Q) in **dir**, um Bucket in **suftab** von hinten nach vorne mit Textposition zu füllen

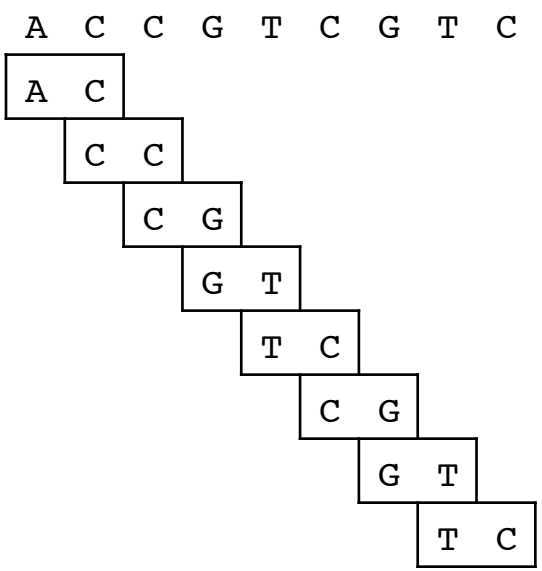
Counting Sort (II)

- Pseudo Code:

```
for j=0 to |Σ|^q                    // 1. Zähler auf Null setzen
   dir[j] = 0

for i=0 to n-q                      // 2. q-gramme zählen
   j = h(T[i..i+q-1])
   dir[j]++

for j=1 to |Σ|^q                    // 3. Kumulative Summe bilden
   dir[j] += dir[j-1]

for i=0 to n-q                      // 4. Vorkommen einsortieren
   j = h(T[i..i+q-1])
   dir[j]--
   suftab[dir[j]] = i
```

- Siehe auch: http://de.wikipedia.org/wiki/Countingsort

Beispiel (Schritt 1)

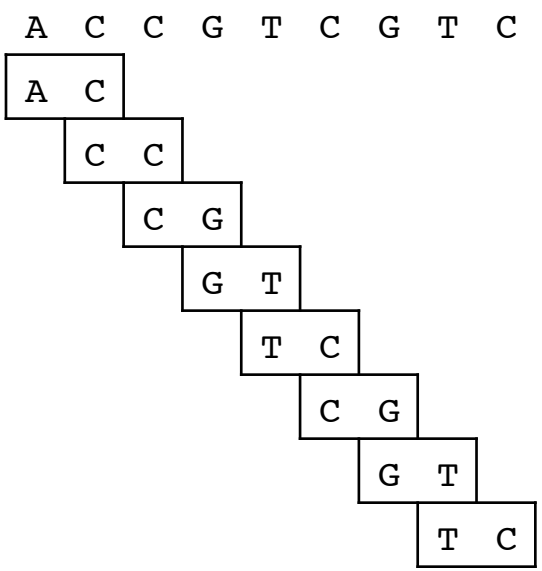


dir nach Initialisierung

A	A	**0**
A	C	**0**
A	T	**0**
A	G	**0**
C	A	**0**
C	C	**0**
C	G	**0**
C	T	**0**
G	A	**0**
G	C	**0**
G	G	**0**
G	T	**0**
T	A	**0**
T	C	**0**
T	G	**0**
T	T	**0**

```
for j=0 to |Σ|^q
   dir[j] = 0
```

Beispiel (Schritt 2)

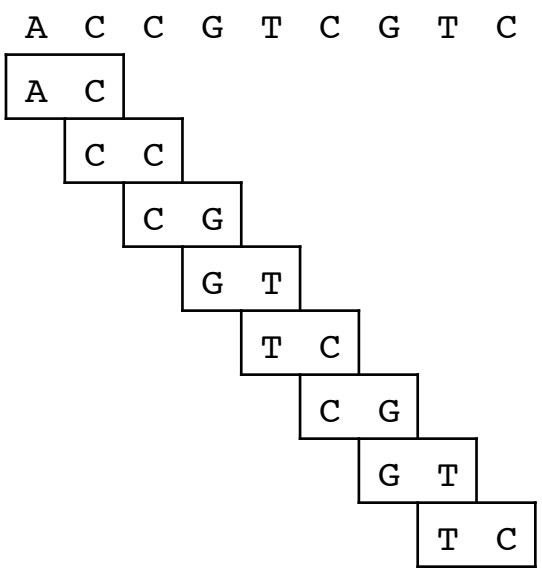


dir nach Zählung

A	A	**0**
A	C	**1**
A	T	**0**
A	G	**0**
C	A	**0**
C	C	**1**
C	G	**2**
C	T	**0**
G	A	**0**
G	C	**0**
G	G	**0**
G	T	**2**
T	A	**0**
T	C	**2**
T	G	**0**
T	T	**0**

```
for i=0 to n-q
   j = h(T[i..i+q-1])
   dir[j]++
```

Beispiel (Schritt 3)



kumulative Summe

A	A	**0**
A	C	**1**
A	T	**1**
A	G	**1**
C	A	**1**
C	C	**2**
C	G	**4**
C	T	**4**
G	A	**4**
G	C	**4**
G	G	**4**
G	T	**6**
T	A	**6**
T	C	**8**
T	G	**8**
T	T	**8**

```
for j=1 to |Σ|^q
   dir[j] += dir[j-1]
```

Beispiel (Schritt 4)

0	1	2	3	4	5	6	7	8
A	C	C	G	T	C	G	T	C
A	C							
	C	C						
		C	G					
			G	T				
				T	C			
					C	G		
						G	T	
							T	C

```
for i=0 to n-q
   j = h(T[i..i+q-1])
   dir[j]--
   suftab[dir[j]] = i
```

Fertiges **dir**

A	A	**0**
A	C	**0**
A	T	**1**
A	G	**1**
C	A	**1**
C	C	**1**
C	G	**2**
C	T	**4**
G	A	**4**
G	C	**4**
G	G	**4**
G	T	**4**
T	A	**6**
T	C	**6**
T	G	**8**
T	T	**8**

Fertiges **sa**

0	**0**
1	**1**
2	**5**
3	**2**
4	**6**
5	**3**
6	**7**
7	**4**

q-gramme Finden

0	1	2	3	4	5	6	7	8
A	C	C	G	T	C	G	T	C

A	C
C	C
C	G
G	T
T	C
C	G
G	T
T	C

Fertiges **dir**

A	A	**0**
A	C	**0**
A	T	**1**
A	G	**1**
C	A	**1**
C	C	**1**
C	G	**2**
C	T	**4**
G	A	**4**
G	C	**4**
G	G	**4**
G	T	**4**
T	A	**6**
T	C	**6**
T	G	**8**
T	T	**8**

Fertiges **sa**

0	**0**
1	**1**
2	**5**
3	**2**
4	**6**
5	**3**
6	**7**
7	**4**

Paralleles Counting Sort

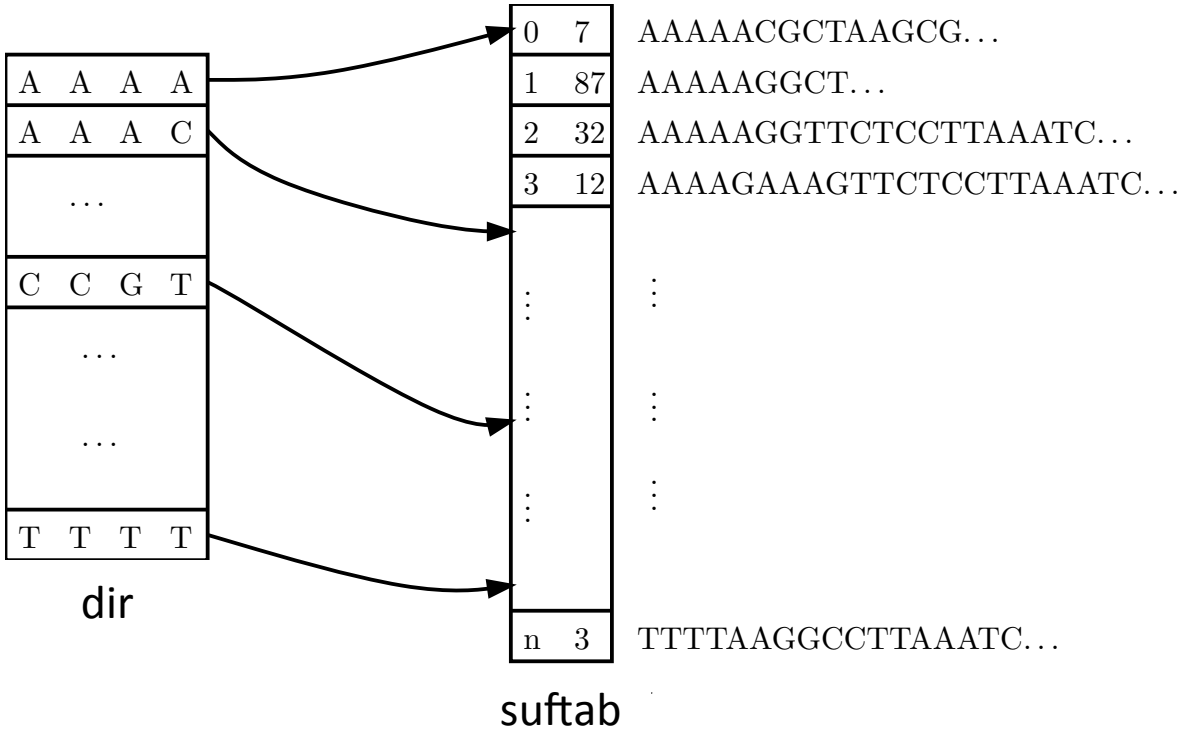
- Paralleles Counting Sort mit k Threads:
  1. Zerlege Text in k Teile (Überlappung in q-1 Zeichen) und erzeuge k Felder $dir_1,...,dir_k$
  2. Ordne Teile den k Threads zu. Für jeden Thread t:
     1. Fülle dir_t mit Nullen auf
     2. Zähle q-gramme in eigenem Teil
  3. Berechne aus lokalen Zählern gemeinsame kumulative Summe in den dir_t
  4. Für jeden Thread t:
     1. Scanne Teiltext und verringere Eintrag an Stelle h(Q) in $\mathbf{dir_t}$, um Teilbucket in **suftab** von hinten nach vorne mit Textposition zu füllen
  5. dir_1 wird endgültiges **dir**. Gib $dir_2,...,dir_k$ frei.

- Siehe auch: http://snippets.dzone.com/tag/countingsort

Größe des q-gram Index

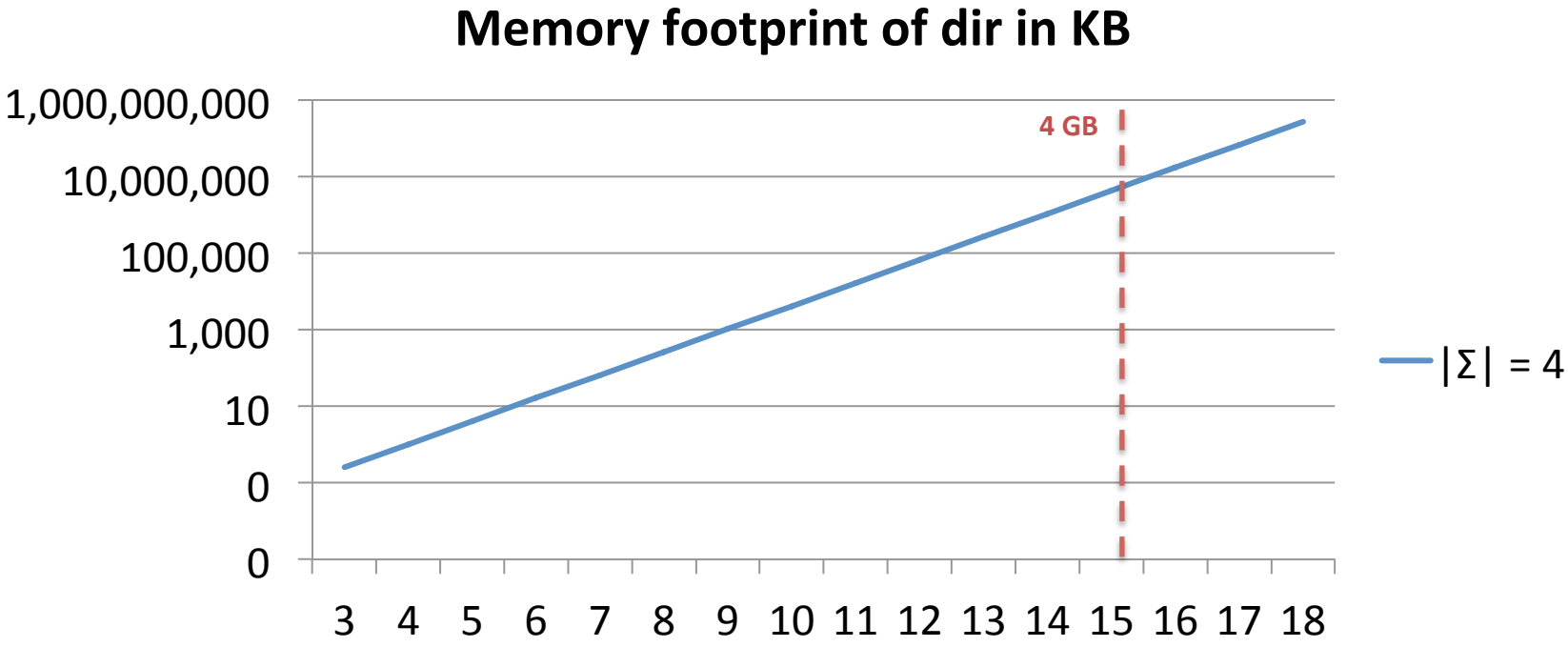
- Speicheraufwand von **suftab**
  - Genau wie das Suffixarray: *n log n* bit, also 4n byte
- Speicheraufwand von **dir**
  - Σ^q viele Einträge mit je *log n* bit, also 4 Σ^q byte

Kritische Größe q



Größe des q-gram Index (II)

- Speicheraufwand von **suftab**
  - Genau wie das Suffixarray: *n log n* bit, also 4n byte
- Speicheraufwand von **dir**
  - Σ^q viele Einträge mit je *log n* bit, also 4 Σ^q byte



BEMERKUNGEN ZUR P-AUFGABE

David Weese

René Rahn
WS 2014/15

Bemerkungen zu Aufgabe 5

- Ergebnisse zu Aufgabe 3 und 4
  - erscheinen in den nächsten Tagen im Wiki

- Aufgabe 5:
  - Bearbeitungzeit 5 Wochen, aber fangen Sie rechtzeitig an!
  - Doppelte Punktzahl

- Preis(e) für die schnellste Laufzeit (bei trotzdem korrekten Ergebnissen)
  - Gemessen wird auf einem 8-Kerne Rechner (Parallelisierung wird empfohlen)
  - Testdaten sowie Skript zum Überprüfen der Korrektheit stehen zur Verfügung

- Frohe Weihnachten und bis im nächsten Jahr *<]:{)