

5. Parallelprogrammierung II und q-gram Indizes

AIDaBi 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
© 2010/11

Sascha Meiers
WS 2013/14

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 $i=a_k, \dots, a_{k+1}-1$
 - $a_0 = 2$ und $a_t = n$
 - Starten alle gleichzeitig, hat nur Thread 0 die benötigten 2 vorherigen Einträge
 - Threads $1, \dots, t-1$ 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 expliziter Formel für Fibonacci-Zahlen von Moivre-Binet

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

- 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
```

- 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
```

- Indirekte oder Gegenabhängigkeit:

- Umbenennen

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

- Ausgabeabhängigkeit:

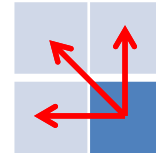
- Umbenennen

```
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 $M_{i+1,j-1}$



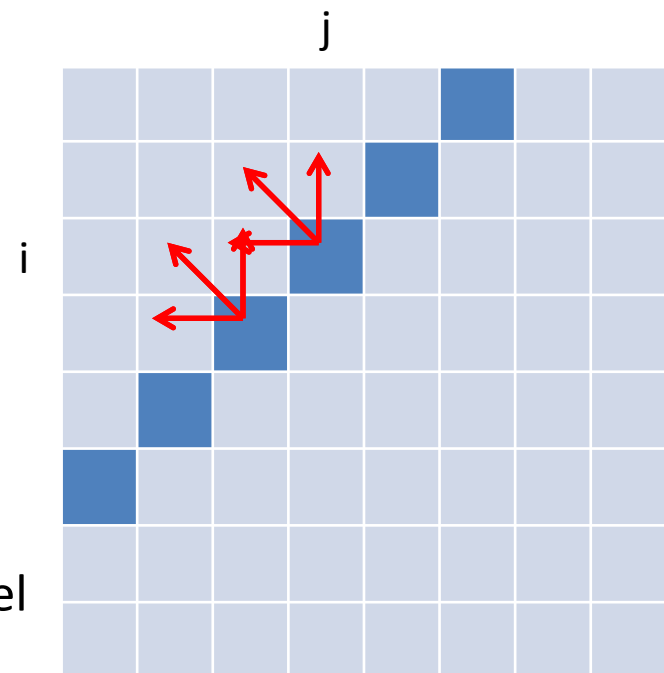
- Alle Elemente auf einer Antidiagonalen sind voneinander **unabhängig**

- 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 Ressourcen 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 zum 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
© 2010/11

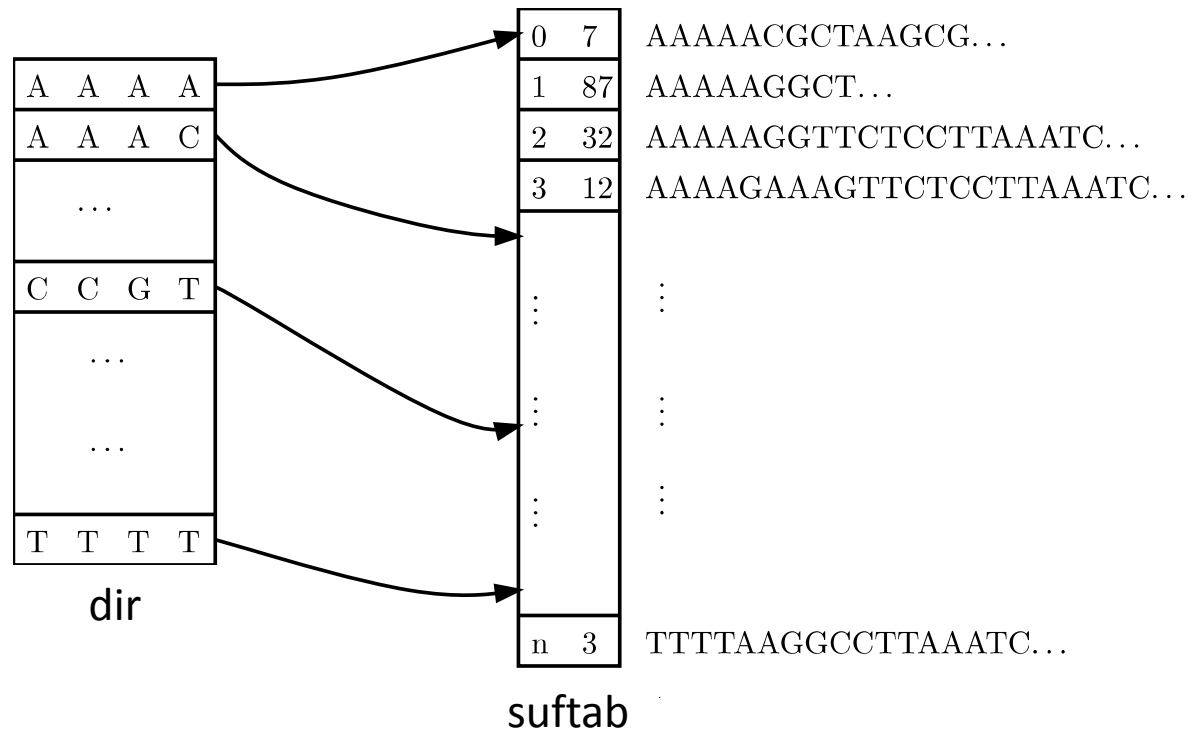
Sascha Meiers
WS 2013/14

Begriffe

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

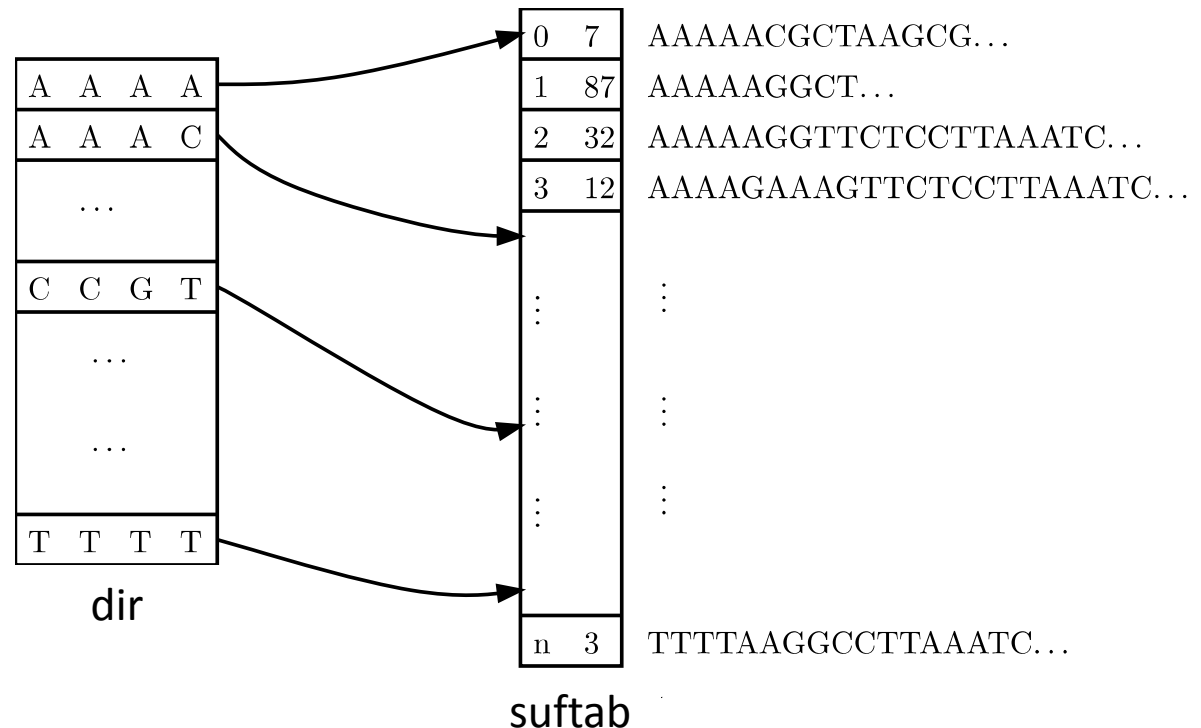
q-gram Index

- 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:

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

- 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 $\text{ord}(x)$ zu
 - Beispiel $\Sigma_{\text{DNA}}=\{A,C,G,T\}$: $\text{ord}(A) = 0$
 $\text{ord}(C) = 1$
 $\text{ord}(G) = 2$
 $\text{ord}(T) = 3$
 - Für q-gram Q gilt dann:

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

- 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

ACGTAC**G**

...

- 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:

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

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
- Wie sortiert man effizient alle Suffixe nach den ersten q Zeichen?
 - Quick Sort
 - **suftab** mit Werten $0, \dots, n-q$ 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  $|\Sigma|^q$  // 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]++

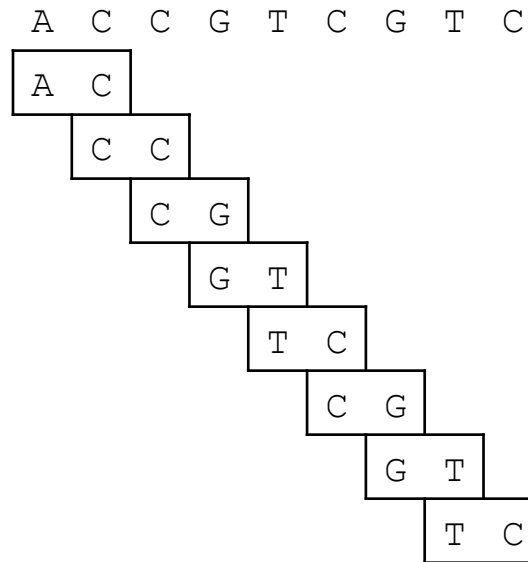
for j=1 to  $|\Sigma|^q$  // 3. Kumulative Summe bilden
    dir[j] += dir[j-1]

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

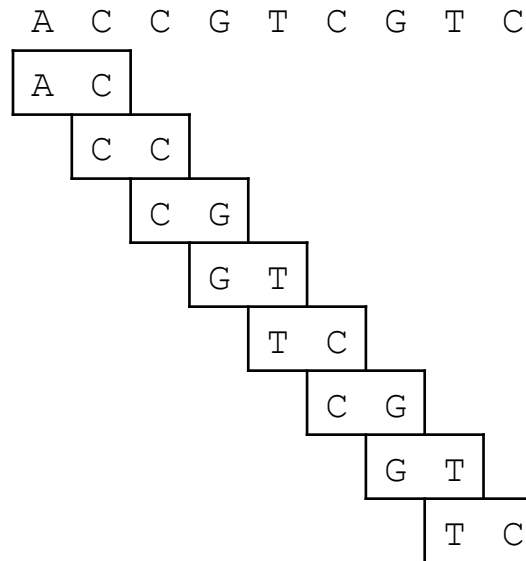


A	A	0
A	C	0
A	T	0
A	G	0
C	A	0
C	C	0
C	G	0
C	T	0
G	A	0
G	C	0
G	G	0
G	T	0
T	A	0
T	C	0
T	G	0
T	T	0

```
for j=0 to  $|\Sigma|^q$   
  dir[j] = 0
```

Beispiel (Schritt 2)

dir nach Zählung

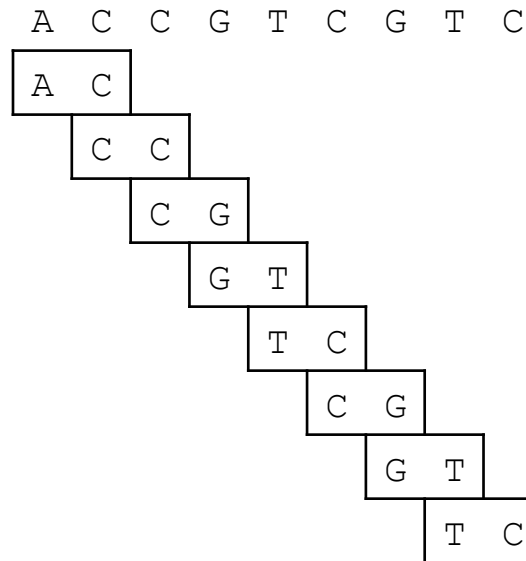


A	A	0
A	C	1
A	T	0
A	G	0
C	A	0
C	C	1
C	G	2
C	T	0
G	A	0
G	C	0
G	G	0
G	T	2
T	A	0
T	C	2
T	G	0
T	T	0

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

Beispiel (Schritt 3)

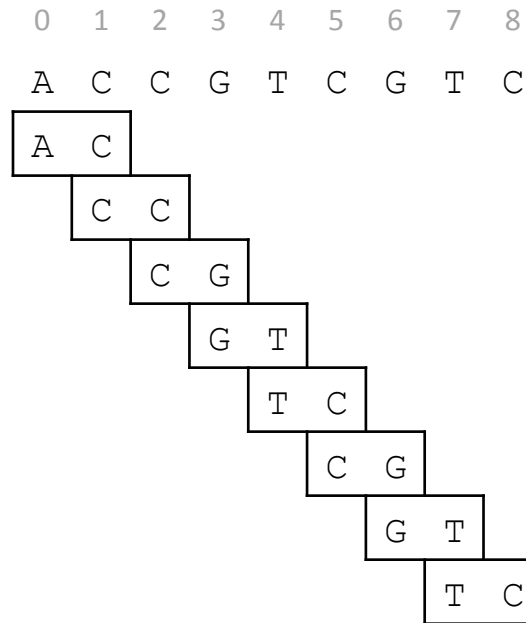
kumulative Summe



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  $|\Sigma|^q$   
  dir[j] += dir[j-1]
```

Beispiel (Schritt 4)



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

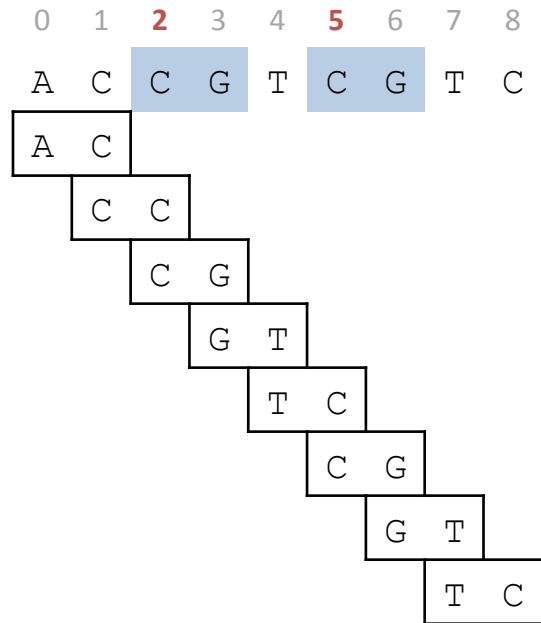
Fertiges dir

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

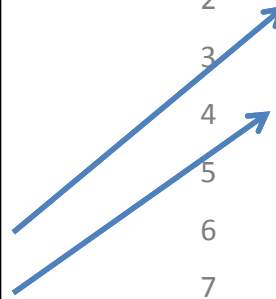


Fertiges dir

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



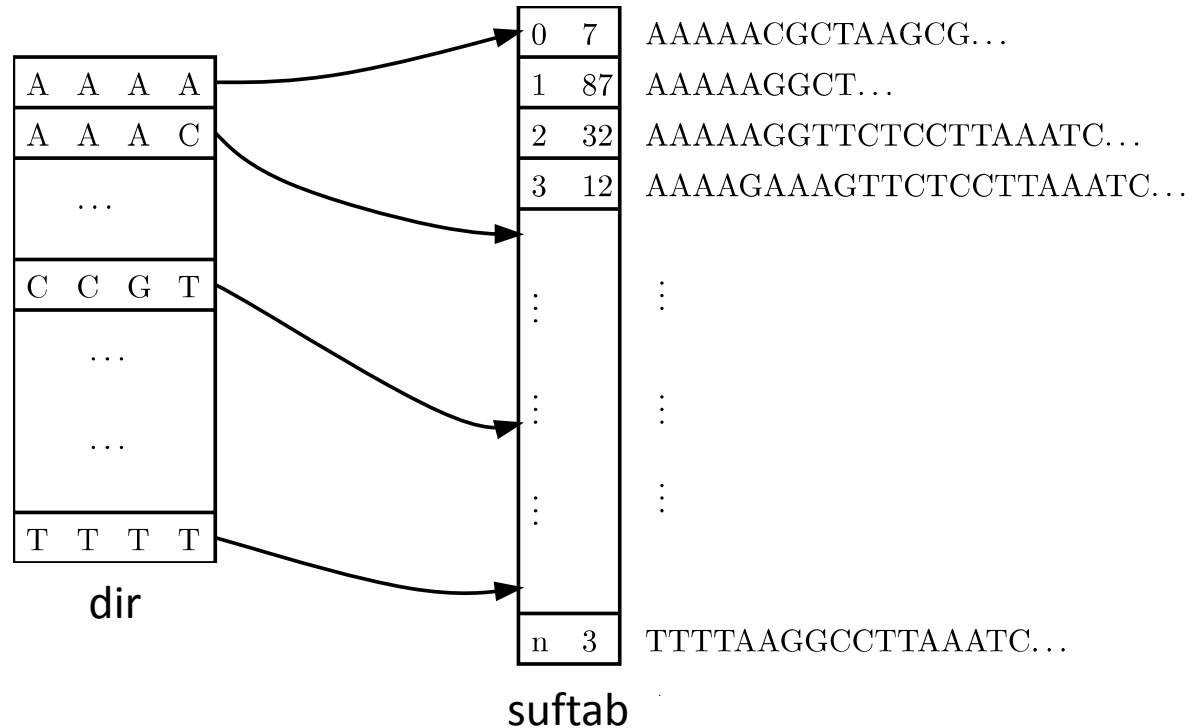
Paralleles Counting Sort

- Paralleles Counting Sort mit k Threads:
 1. Zerlege Text in k Teile (Überlappung in $q-1$ Zeichen) und erzeuge k Felder dir_1, \dots, 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 dir_t , um Teilbucket in **suftab** von hinten nach vorne mit Textposition zu füllen
 5. dir_1 wird endgültiges **dir**. Gib dir_2, \dots, 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 $4 \Sigma^q$ byte

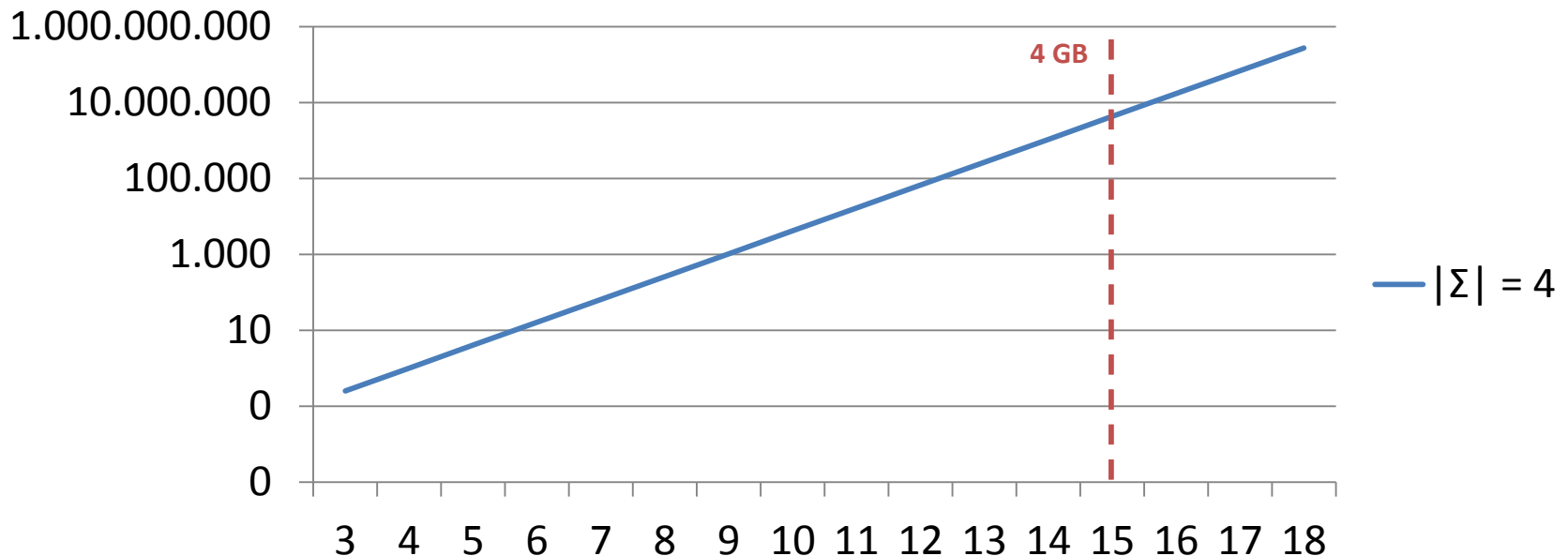
Kritische
Größe q



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 $4 \Sigma^q$ byte

Memory footprint of dir in KB



BEMERKUNGEN ZUR P-AUFGABE

David Weese
© 2010/11

Sascha Meiers
WS 2013/14

Bemerkungen zu Aufgabe 5

- Ergebnisse und Laufzeiten zu Aufgabe 4
 - erscheinen in den nächsten Tagen im Wiki
- Aufgabe 5:
 - Bearbeitungszeit 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 *<]:{)