

# PSE Molekulardynamik

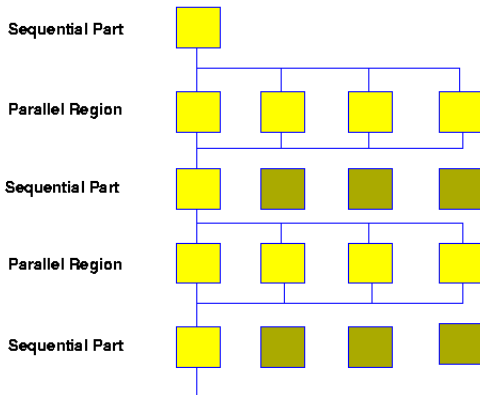
## OpenMP

Wolfgang Eckhardt  
Thomas Auckenthaler

Technische Universität München, Germany



## OpenMP Execution Model



# Überblick

- Compiler-Direktiven

```
#pragma omp ... [clause[,] clause]...
```

- Work-sharing

```
#pragma omp for ..., u.a.
```

- Synchronisation

```
#pragma omp barrier, u.a.
```

- Data Scope Clauses

```
shared, private, firstprivate, reduction, u.a.
```

- Bibliotheksroutinen

```
omp_get_num_treads(),  
omp_get_tread_num(), u.a.
```

# Compilieren und ausführen

- compilieren mit zusätzlichem Compiler-Flag `-openmp`:  
`icc -openmp -o my_alg my_alg.c`
- ausführen:  
`export OMP_NUM_THREADS=number_of_threads(default = 1)`  
`./my_alg`

# Parallel Region Construct, OpenMP API

```
#pragma omp parallel [clause[[,] clause]...]
structured block
```

- Anweisungen innerhalb einer `parallel region` werden von **allen** Threads ausgeführt

## Beispiel

```
#include <omp.h>
...
#pragma omp parallel private(size, rank)
{
    size = omp_get_num_threads();
    rank = omp_get_thread_num();
    printf("Hello World! (Thread %d of %d)", rank,
size);
}
```

# OpenMP data scope clauses

- `private(list)`: deklariert die Variablen in `list` als private für jeden Thread.
- `shared(list)`: Variablen aus `list` werden von allen Threads gemeinsam genutzt.
- `firstprivate(list)`: private Variablen, die mit dem letztem Wert vor dem parallelen Abschnitt initialisiert werden.
- `lastprivate(list)`: nach dem Verlassen des parallelen Abschnitts übernimmt die Variable den Wert von dem Thread, der die letzte Schleifeniteration ausgeführt hat.
- default data scope clause ist `shared`, mit Ausnahmen...
  - lokale Variablen sind `private`
  - Schleifen-Variablen der parallelisierten `for`-Schleifen sind `private`

# synchronization constructs

- `#pragma omp barrier`
  - blockiert, bis alle Threads die barrier erreicht haben
- ...

# Bibliotheksroutinen

- `omp_get_num_threads()`  
liefert die Anzahl der aktiven Threads
- `omp_get_thread_num()`  
liefert die jeweilige Thread-ID
- `omp_get_wtime()`  
Zeitmessung