



東邦大学

いのち
生命の科学で未来をつなぐ

アルゴリズムと並列



東邦大学

アルゴリズムで並列を考える

アルゴリズム = 計算手順

問題意識 1

並列化しにくいアルゴリズムが存在する？

問題意識 2

アルゴリズムが、必要以上に順序を指定している？

$$\begin{aligned} S^{(*)} &= 0 \\ S^{(0)} &= S^{(*)} + a[0] \\ S^{(1)} &= S^{(0)} + a[1] \\ S^{(2)} &= S^{(1)} + a[2] \\ S^{(3)} &= S^{(2)} + a[3] \\ &\vdots \\ S^{(99)} &= S^{(98)} + a[99] \end{aligned}$$

$\sum_{i=0}^{99} a[i]$ を求めたい

```
S = 0;
for (i=0; i<100; i++) {
    S = S + a[i];
}
```

??



並列化しやすいアルゴリズム例

- (たとえば) シミュレーションで
 - 時刻 $t=0$ から 1 ずつ進めながら
 - 3次元メッシュの各点について $t=t$ の時刻の状態を元にして $t+1$ の状態を計算する
 - 全ての点の計算が終わったら $t=t+1$ に進める
- この中では、ある時刻 $t=t$ での各点の計算はお互いに独立なので、並列処理可能
 - 3次元メッシュの点の数が多い \Rightarrow 並列度大

並列化しやすいアルゴリズム例

- (非常に人工的な例だが) 数値積分の例

- 数値積分 (区分求積法) で π を計算

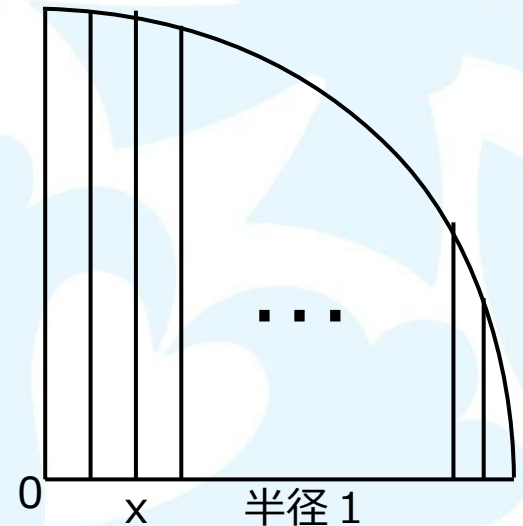
- 案 1 : 右の1/4円の面積S

- $\int_0^1 \sqrt{1-x^2} dx = \pi/4$

- 案 2 : 定理

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

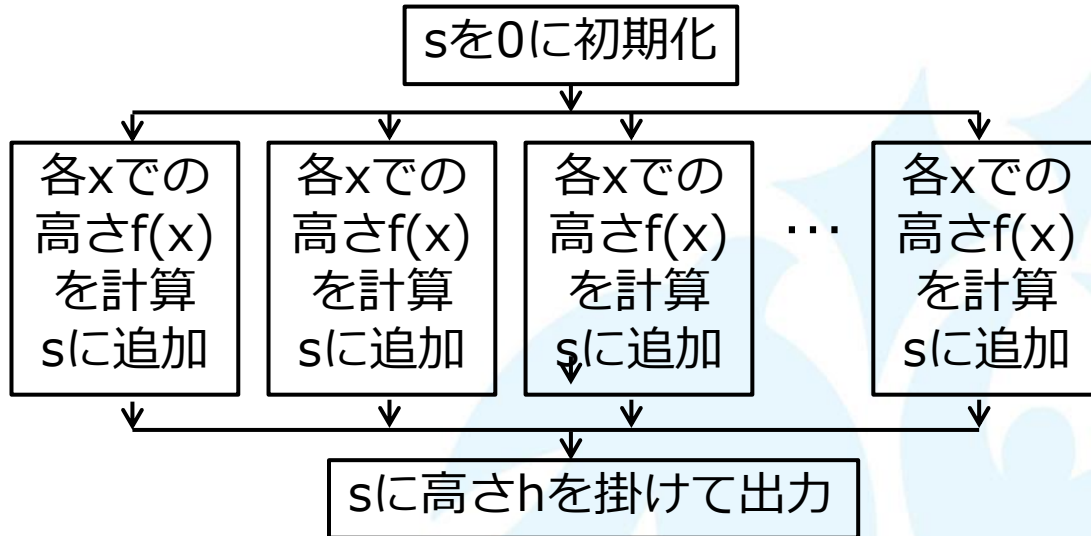
- 平坦なので端の誤差が小



- 並列化

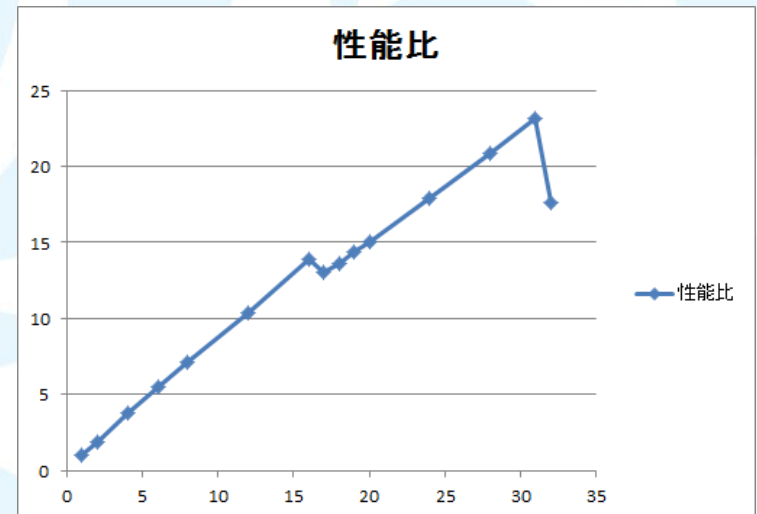
- 長方形がそれぞれ独立に計算可能 (依存性無し)

区分求積の例



16コア×2チップでの実行例

```
double f(double x) { return sqrt(1.0-x*x); }
double s = 0;
#pragma omp parallel for reduction(+:s)
for (i=0; i<=DIV; i++) {
    s = s + f(((double)i)/(double)DIV);
}
s = (s - (f(0.0) + f(1.0))/2.0) / ((double)DIV);
printf("pi=%2.18f¥n", s*4);
```



並列化しづらいアルゴリズム例

- 動的計画法 (Dynamic Programming)
 - 対象となる問題を帰納的に解く場合にくり返し出現する小さな問題例について、解を表に記録し表を埋めていく形で計算をすすめる、冗長な計算をはぶくアルゴリズムのことをいう。
特定のアルゴリズムを指すのではなく、上記のような手法を使うアルゴリズムの総称である。

(ウィキペディア 動的計画法)

(<https://ja.wikipedia.org/wiki/%E5%8B%95%E7%9A%84%E8%A%88%E7%94%BB%E6%B3%95>)

- 単純例 ⇒ フィボナッチ数列の計算

- $f(n) = f(n-1) + f(n-2)$ 但し $n \geq 2, f(0)=0, f(1)=1$



動的計画法

出発点は
問題を分割し
再帰的に計算

$$f(n) = f(n-1) + f(n-2)$$

定義通りに計算

```
int fib(int n) {  
    if (n==0) then return 0;  
    else if (n==1) then return 1;  
    else return fib(n-1)+fib(n-2);  
}
```



```
int fib(int n) {  
    int M[1000]; M[0] = 0; M[1] = 1;  
    for (i = 2; i <= n; i++) {  
        M[i] = M[i-1] + M[i-2];  
    }  
    return M[n];  
}
```

途中結果をメモし
再計算を避ける

```
fib(4)  
= fib(3) + fib(2)  
= (fib(2) + fib(1)) + fib(2)  
= ((fib(1) + fib(0)) + fib(1)) + ((fib(1) + fib(0)))  
= (((1) + (0)) + (1)) + ((1) + (0))  
= 3
```

```
M[0] = 0; M[1] = 1;  
M[2] = M[1] + M[0] = 1  
M[3] = M[2] + M[1] = 2  
M[4] = M[3] + M[2] = 3
```

nが増えると $O(2^n)$ で計算量が増える

nが増えても比例して増えるだけ



動的計画法

出発点は
問題を分割し
再帰的に計算

$$f(n) = f(n-1) + f(n-2)$$

定義通りに計算

```
int fib(int n) {  
    if (n==0) then return 0;  
    else if (n==1) then return 1;  
    else return fib(n-1)+fib(n-2);  
}
```

```
int fib(int n) {  
    int M[1000]; M[0] = 0; M[1] = 1;  
    for (i = 2; i <= n; i++) {  
        M[i] = M[i-1] + M[i-2];  
    }  
    return M[n];  
}
```

途中結果をメモし
再計算を避ける

```
fib(4)  
= fib(3) + fib(2)  
= (fib(2) + fib(1)) + fib(2)  
= ((fib(1) + fib(0)) + fib(1)) + ((fib(1) + fib(0)))  
= (((1) + (0)) + (1)) + ((1) + (0))  
= 3
```

```
M[0] = 0; M[1] = 1;  
M[2] = M[1] + M[0] = 1  
M[3] = M[2] + M[1] = 2  
M[4] = M[3] + M[2] = 3
```

M[2]が無いと
M[3]できない

M[3]が無いと
M[4]できない

nが増えると $O(2^n)$ で計算量が増える

それぞれのM[i]の計算は
並列にはできない



つまり

- 問題を、小さな問題に分割し、再帰的に解決することで、解けるケースがある
- その時、途中結果をうまく記憶できれば
指数時間⇒線形時間にできる
この工夫を「動的計画法」と呼ぶ
- ところが、記憶を次のステップで使うので
ステップ間の並列化はできない

動的計画法の形で、並列化は難しそうだ。
別の方法を思いつくだろうか？



アルゴリズム = 問題を解く手順

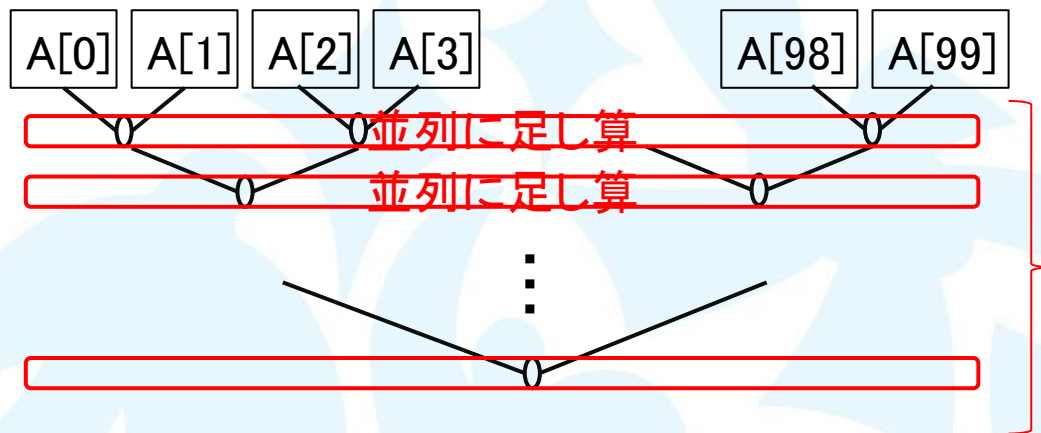
- 「手順」って何だろう？
- 例： バブルソート
 - 左端から順番に、
 - 隣同士を比較し、逆順なら左右を入替える
 - 右端に到達したら、もう一度左端から同じ処理
 - 1回も左右入替えが起こらなければ、終了
- 「順番に」処理することを前提??
 - 従来は直列手順 (並列を考える場合を除き)
⇒ 並列で何が起こるかは考慮の範囲外？

足し算のアイデア

$\sum_{i=0}^{100} a[i]$ を求めたい

```
S = 0;  
for (i=0; i<100; i++) {  
    S = S + a[i];  
}
```

直列に99回足し算



$\log_2 100 (=6.6) \div 7$ 段足し算

並列度 (横幅) は最大50

$50 \Rightarrow 25 \Rightarrow 12 \Rightarrow \dots$

(注) ソフトでこれを制御すると
制御のオーバーヘッドが大きい

ソートの例

是非、参考書「並列コンピューティング技法」の
第8章「ソート」pp131-182、第9章「サーチ」pp183-198 を
自分で細かく見てみてください

- バブルソート？
 - データを分割？
 - データはそのまま、ただswapを複数並列に？
 - それぞれ問題がある⇒バブルは並列に向かない？
- 奇遇転置ソート？
 - Swapを奇数フェーズと偶数フェーズに分ける
 - フェーズ内のデータ並列性が大⇒うまくゆく
- クイックソート？
 - 再帰呼出しを並列化する工夫
 - さらにいろいろな工夫をする余地（が書かれている）
- 基数（ラディックス）ソート？

動的計画法をむりやり並列化

- 2つのDNA塩基配列 S_1, S_2 の位置合せ問題

S1:	A	-	C	G	T	S1の側に空欄 (-) を入れる S2の側に空欄 (-) を入れる 文字の違いを許す
S2:	A	T	C	C	T	

- 不一致のペナルティ ↓ を足し合わせる

$$\begin{array}{ll}
 w(x, -) = -1, & w(-, x) = -1, & \text{一方が空欄なら-1} \\
 w(x, x) = +1, & w(x, y) = -1 \text{ if } x \neq y & \text{一致なら+1、不一致なら-1}
 \end{array}$$

$$D[i, j] = \max \left\{ \begin{array}{l}
 \leftarrow \text{ある点}[i, j] \text{の評価}D \text{は、下記3ケースの最大値} \\
 D[i-1, j] + w(S1[i], -) \quad \leftarrow S2 \text{の側が空欄、ペナルティ-1} \\
 D[i, j-1] + w(-, S2[j]) \quad \leftarrow S1 \text{の側が空欄、ペナルティ-1} \\
 D[i-1, j-1] + w(S1[i], S2[j]) \quad \leftarrow \begin{array}{l} \text{両方文字、一致なら+1} \\ \text{不一致なら-1} \end{array}
 \end{array} \right\}$$

表に書く (前に計算したものを残す)

- 空の配列 \Rightarrow 文字0で表す
- 点数はわかったものを加える
- 矢印はmaxを選んだ向き

$$\begin{aligned} \cdot w(x, -) &= w(-, x) = -1 \\ \cdot w(x, x) &= 1 \\ \cdot w(x, y) &= -1 \quad (x \neq y) \end{aligned}$$

	0	A	C	G	T
0	0	-1	-2	-3	-4
A	-1				
T	-2				
C	-3				
C	-4				
T	-5				

	0	A	C	G	T
0	0	-1	-2	-3	-4
A	-1	+1	0	-1	-2
T	-2	0	0	-1	0
C	-3	-1	+1	0	-1
C	-4	-2	0	0	-1
T	-5	-3	-1	-1	+1

$$\begin{aligned} \blacksquare D[i,j] &= \max \{ \\ &D[i-1,j] + w(S1[i], -) \\ &D[i,j-1] + w(-, S2[j]) \\ &D[i-1,j-1] + \\ &w(S1[i], S2[j]) \} \end{aligned}$$

初期条件(縦端・横端)を計算

内部を次々に計算
左上から右下に向かって
計算する(前の結果利用)



動的計画法をむりやり並列化

- 表を埋める処理を並列化したい？
 - 矢印の前の位置の結果を使うので
計算が済まないといけないと次の位置が計算できない
(データ依存のため、並列化できない)
- データ依存性は波 (リップル) 状に斜めに伝搬する

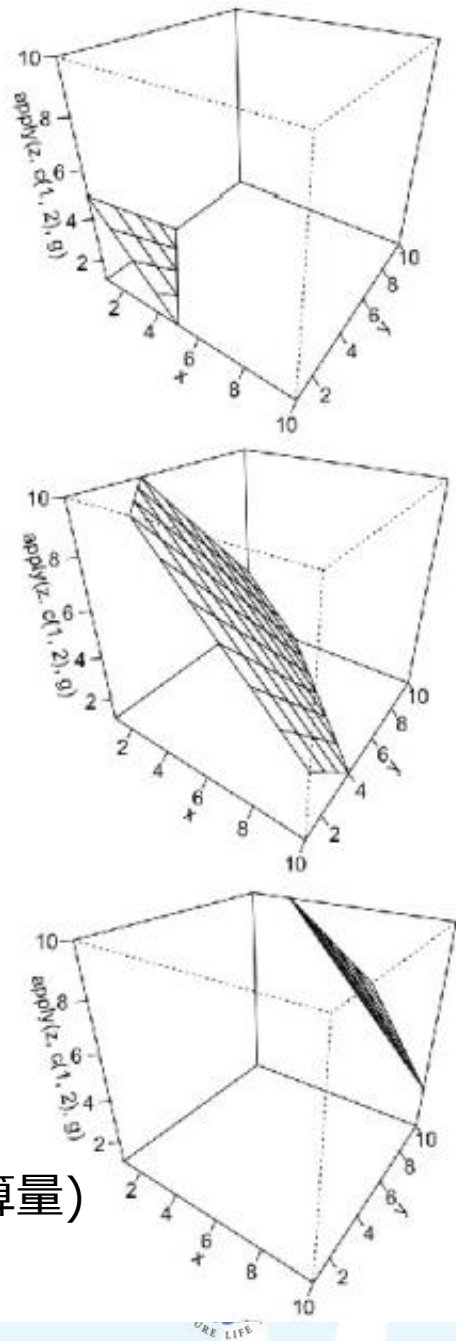
- 原点から同じ距離にある
点は、同時に計算できる

	0	A	C	G	T
0	0	-1	-2	-3	-4
A	-1	+1	0	-1	-2
T	-2	0	0	-1	0
C	-3	-1	+1	0	-1
C	-4	-2	0	0	-1
T	-5	-3	-1	-1	+1

動的計画法を むりやり並列化

- 前頁（2つの配列の位置合せ）は斜め線上（リップルの波頭）の要素数は少ない \Rightarrow 並列度小
↓
- 多数(≥ 3)の配列の位置合せならN次元空間での動的計画法になりリップルの波頭は超平面になり要素数は多いだろう
 \Rightarrow 並列度を稼げる

この問題では、
(超平面に載る点の抽出の手間) > (それぞれの点での計算量)
だったため、並列の効果は出なかった



3次元動的計画法のリップル波頭超平面の移動

アルゴリズム？

- KnuthのThe Art of Programming か？

