

お試しアカウント付き
並列プログラミング講習会
GPUプログラミング入門

東京大学 情報基盤センター

担当：山崎一哉

kyamazaki @ cc.u-tokyo.ac.jp

(内容に関するご質問はこちらまで)

講習会スケジュール

■ 開催日時

- ✓ 6月11日（火） 10:00 – 17:00

■ プログラム

- ✓ 10:00 - 10:50 スパコンの使い方など
- ✓ 11:00 - 11:50 GPUとOpenACC基礎（座学）
- ✓ （昼休み）
- ✓ 13:30 – 14:20 OpenACC演習Ⅰ
- ✓ 14:30 – 15:20 OpenACC演習Ⅱ
- ✓ 15:30 – 16:20 OpenACC演習Ⅲ
- ✓ 16:30 – 17:00 質問など

講習会について

■ 本講習会は

- ✓ GPUに関する基礎知識
- ✓ OpenACCを用いたGPUプログラミングの基礎を中心に扱います。

■ その他の講習会

<https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/events/lectures/>

■ スパコンイベント情報メール配信サービス

<https://regist.cc.u-tokyo.ac.jp/announce/>

- ✓ 講習会や研究会の案内、トライアルユースの実施のお知らせなどを配信しています。



Youtubeにて過去の講習会を配信中！

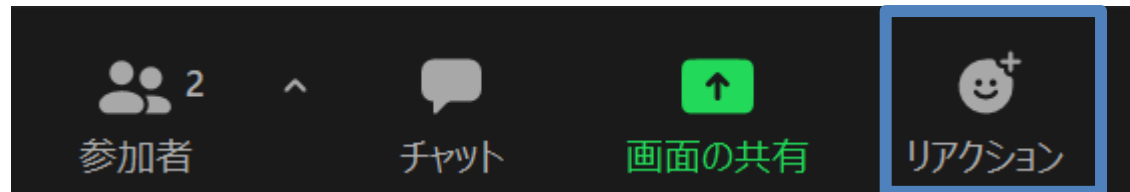
<https://www.youtube.com/channel/UC2CHaGp1AO-vqRIV7wmU0-w/videos?view=0&sort=p&flow=grid>

講習会の進め方

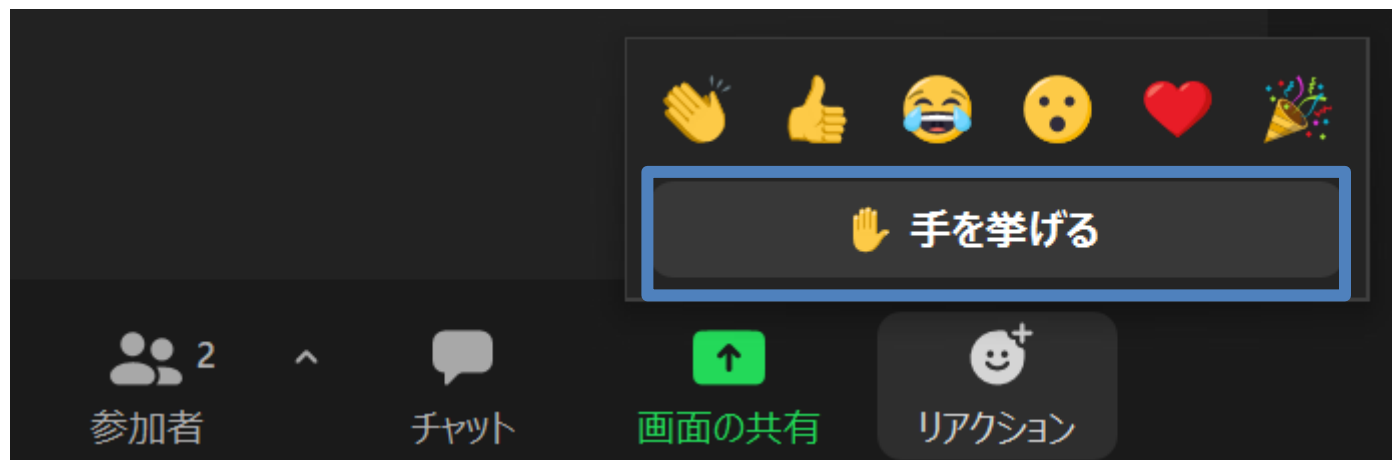
- Zoomを利用したオンライン講習会です
 - ✓ この講義は録画されています
 - ✓ 質問があるとき以外はミュートでお願いします
 - ✓ ビデオもオフを推奨します
- slackを使って質問に対応します
 - ✓ slackはリンクを知っている人は誰でも使える設定になっています
 - ✓ slackのリンクをzoomのチャットに貼るので、未登録の場合は今のうちに登録をお願いします
 - ✓ slackの登録メールの配送に小一時間かかることがあります

Zoom: 「手を挙げる」方法

1. Zoomメニュー中の「リアクション」をクリック

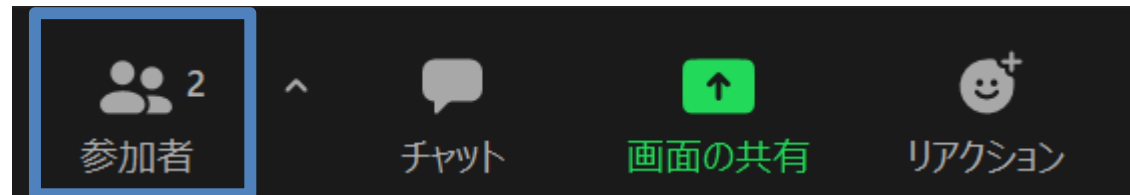


2. ポップアップで表示された「手を挙げる」をクリック

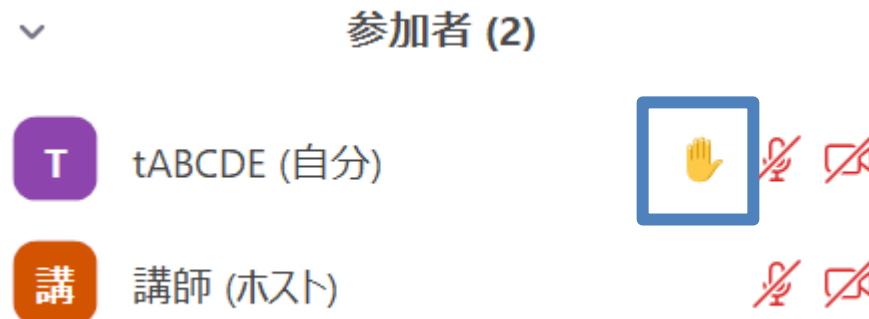


Zoom: 手が挙がっていることの確認方法

1. Zoomメニュー中の「参加者」をクリックして、参加者一覧を表示

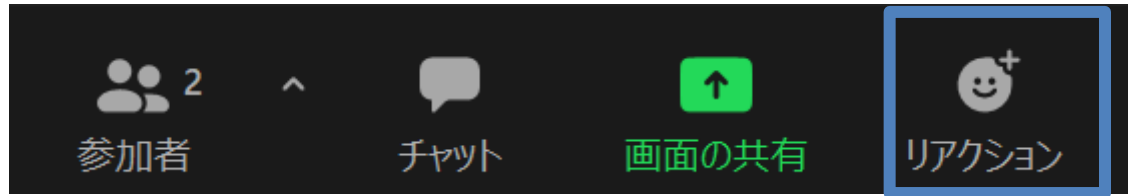


2. 表示された参加者一覧の、自分のところを見ると手が挙がっている



Zoom: 「手を降ろす」方法

1. Zoomメニュー中の「リアクション」をクリック



2. ポップアップで表示された「手を降ろす」をクリック



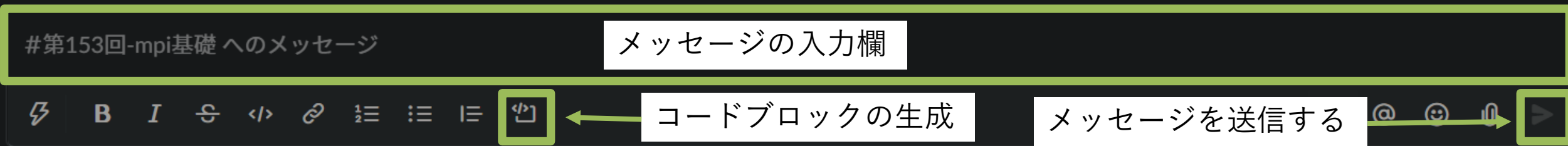
Slack: 質疑応答チャンネルへの移動

- 左側のメニューバーのチャンネル一覧内に「第226回-gpuプログラミング入門」があるので、クリック

- 表示されていない場合
 1. 「チャンネルを追加する」をクリック
 2. 「チャンネル一覧を確認する」をクリック
 3. 「第226回-gpuプログラミング入門」があるので、「参加する」をクリック

Slack: メッセージの入力方法

- 最下部に入力欄があるので、質問内容を記載して Ctrl+Enter
 - 入力後に右下の「メッセージを送信する」をクリックしても同じ
(メッセージ入力前には、「メッセージを送信する」は押せない)



- コードを入力する際には、「コードブロック」がおすすめ
 - 枠が生成されるので、この中にコピペするのが簡単かつ見やすい
 - `` (JIS配列ならばShift+@を3連打) しても枠が生成される

サンプルコードのダウンロード

- 講習会で使うサンプルコードはGitHubにあります

- https://github.com/kazuya-yamazaki/lecture_openacc

- ダウンロード手順

1. `$ ssh tXXXXXX@wisteria.cc.u-tokyo.ac.jp`

- wisteriaへのssh。tXXXXXXはアカウント名

2. `$ cd /work/gt00/tXXXXXX`

3. `$ git clone https://github.com/kazuya-yamazaki/lecture_openacc.git`

4. `$ cd lecture_openacc/`

5. `$ cd C or F`

- CまたはFortran好きな方を利用してください。

東大情報基盤センターの スパコン概要

2001-2005

2006-2010

2011-2015

2016-2020

2021-2025

2026-2030

Hitachi SR8000
1,024 GF

Hitachi SR11000
J1, J2
5.35 TF, 18.8 TF

Hitachi SR16K/M1
Yayoi
54.9 TF

Hitachi
SR2201
307.2GF

Hitachi
SR8000/MPP
2,073.6 GF

OBCX
(Fujitsu)
6.61 PF

Hitachi HA8000
T2K Todai
140 TF

Oakforest-
PACS (Fujitsu)
25.0 PF

Miyabi (Fujitsu)
80.1 PF

Fujitsu FX10
Oakleaf-FX
1.13 PF

 **Wisteria**
BDEC-01 Fujitsu
33.1 PF

BDEC-
02

Reedbush-
U/H/L (SGI-HPE)
3.36 PF

Ipomoea-01 25PB

Ipomoea-02?

東京大学情報基盤
センターのスパコン
利用者2,600+名
55%は学外



2001-2005

2006-2010

2011-2015

2016-2020

2021-2025

2026-2030

Hitachi SR8000

SR8000

Hitachi SR11000
J1, J2

IBM Power5+

Hitachi SR16K/M1
Yayoi

IBM Power7

Hitachi
SR2201

HARP-1E

Hitachi
SR8000/MPP

SR8000

Intel CLX

OBCX
(Fujitsu)
6.61 PFHitachi HA8000
T2K Todai
140 TF

AMD Opteron

Oakforest-
PACS (Fujitsu)
1.1 PF

Intel Xeon Phi

Miyabi (Fujitsu)
80.1 PF

Accelerators

Fujitsu FX10
Oakleaf-FX
1.13 PF

SPACR64 IXfx

疑似ベクトル

汎用CPU

加速装置付

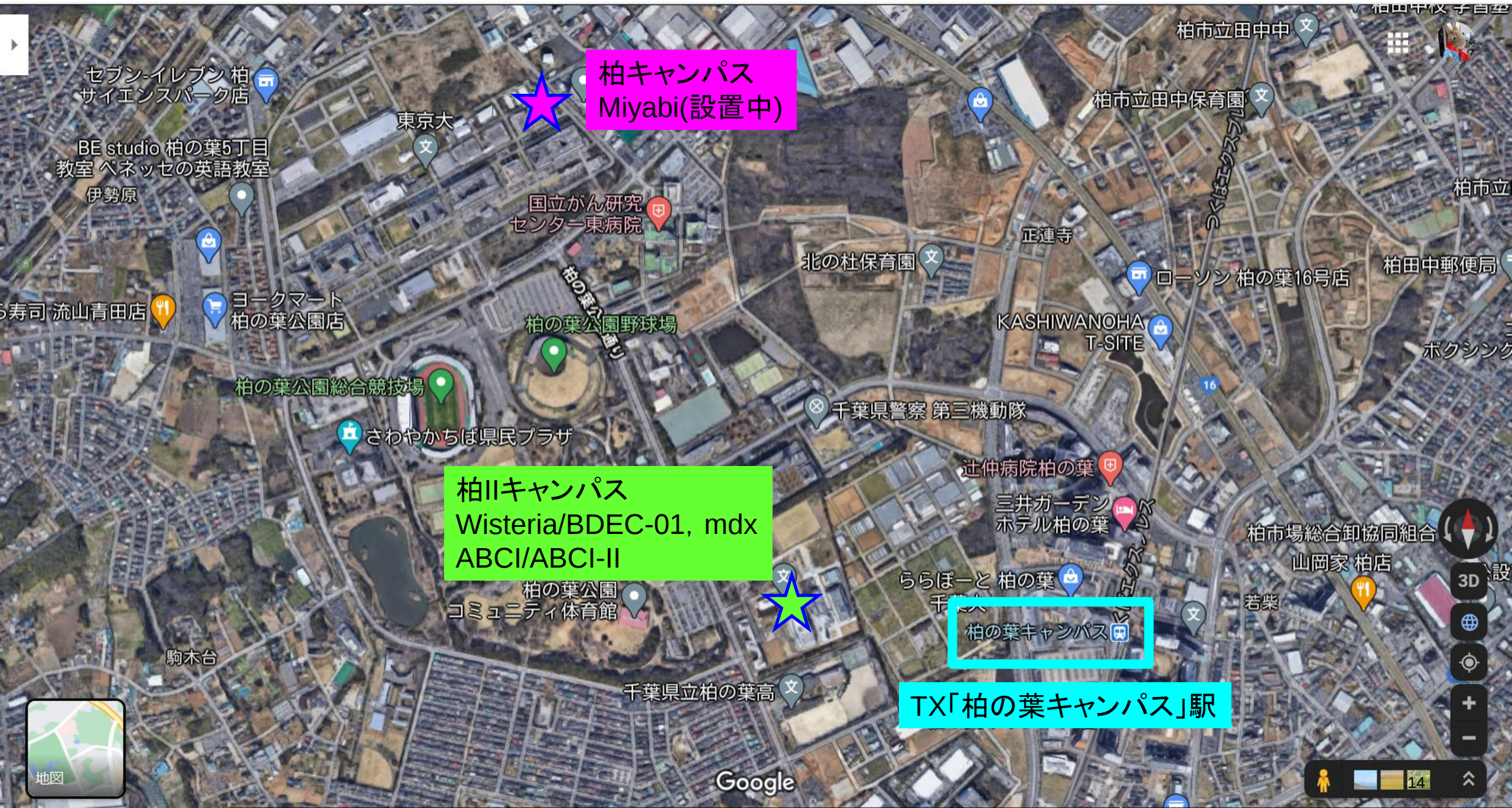
Wisteria
BDEC-01 Fujitsu
33.1 PFBDEC-
02

Accelerators

A64FX,
Intel Icelake+
NVIDIA A100Reedbush-
U/H/L (SGI-HPE)
3.36 PFIntel BDW +
NVIDIA P100

Ipomoea-01 25PB

Ipomoea-02?





Platform for Integration of (S+D+L)
Big Data & Extreme Computing

Shared File System (SFS)
25.8 PB, 500 GB/s

Simulation Nodes: Odyssey
Fujitsu/Arm A64FX
25.9PF, 7.8 PB/s

2.0 TB/s

Data/Learning Nodes: Aquarius
Intel Ice Lake + NVIDIA A100
7.20 PF, 578.2 TB/s

Fast File System (FFS)
1 PB, 1.0 TB/s

800 Gbps

External Resources



External Network



External Resources



Wisteria BDEC-01



Wisteria BDEC-01

Simulation Nodes (Odyssey)

Data/Learning Nodes (Aquarius)



東京大学
THE UNIVERSITY OF TOKYO



東京大学情報基盤センター
INFORMATION TECHNOLOGY CENTER, THE UNIVERSITY OF TOKYO

Reedbush (HPE, Intel BDW + NVIDIA P100 (Pascal))

- データ解析・シミュレーション融合スーパーコンピュータ
- 2016年7月～2021年11月末(引退)
- 東大ITC初のGPUクラスター, ピーク性能3.36 PF

Oakforest-PACS (OFP) (Fujitsu, Intel Xeon Phi (KNL))

- JCAHPC (筑波大CCS・東大ITC), 2016年10月～2022年3月末(引退)
- 25 PF, #39 in 58th TOP 500 (November 2021)

Oakbridge-CX (OBCX) (Fujitsu, Intel Xeon CLX)

- 2019年7月～2023年6月末(引退)
- 6.61 PF, #110 in 58th TOP500-June 2023 (Plan)



Wisteria/BDEC-01 (Fujitsu)

- シミュレーションノード群 (Odyssey) : A64FX (#17)
- データ・学習ノード群 (Aquarius) : Intel Icelake+NVIDIA A100 (#106)
- 33.1 PF, #13 in 57th TOP 500, 2021年5月14日運用開始
- 「計算・データ・学習 (S+D+L)」融合のためのプラットフォーム
- 革新的ソフトウェア基盤「h3-Open-BDEC」
(科研費基盤 (S) 2019年度～2023年度)



Reedbush



Oakforest-PACS

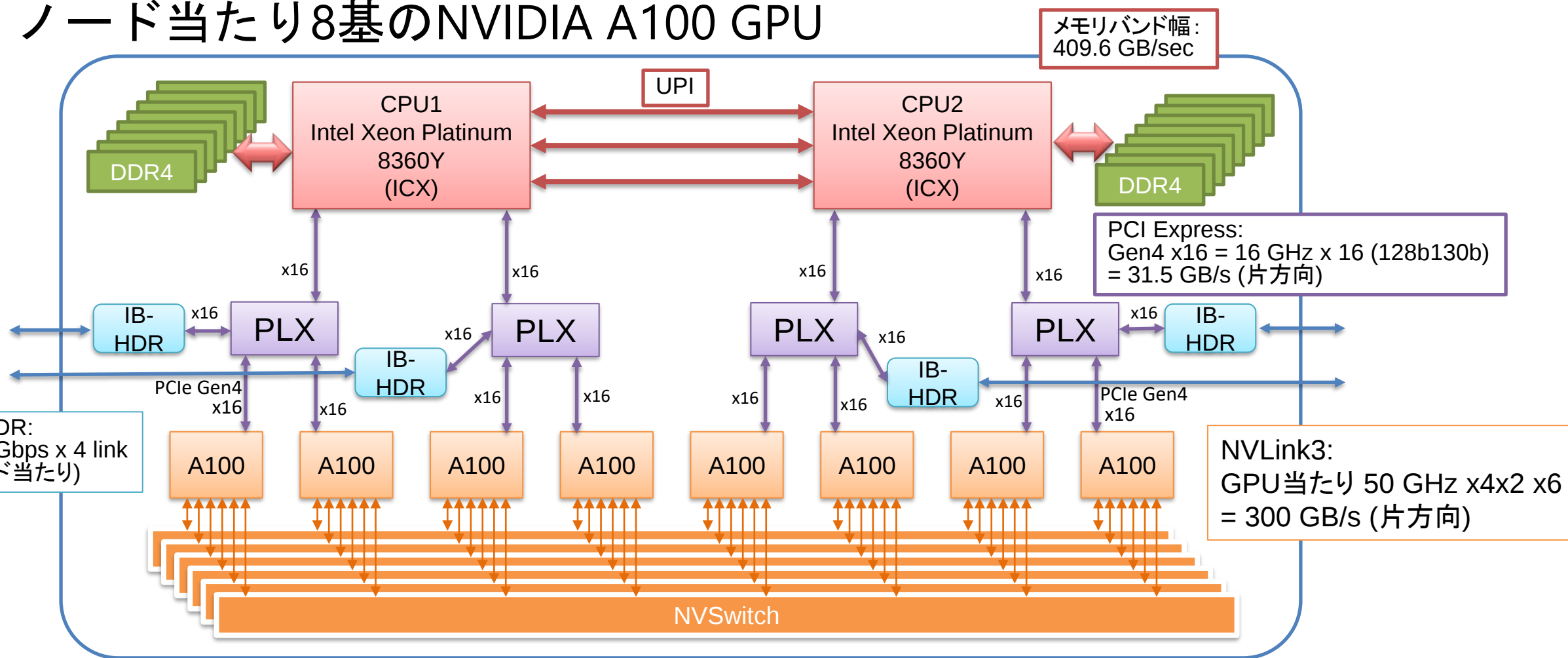


Oakbridge-CX 15



Aquariusの構成

- Intel Xeon Platinum 8360Y (36c 2.4GHz) x 2ソケット, 512GBメモリ
- ノード当たり8基のNVIDIA A100 GPU



Wisteria 利用上の注意（１）

- ディレクトリについて（home と work）
 - ✓ ログイン時のディレクトリ（/**home**/gt00/txxxxx）にはログイン時に必要なファイルのみを置く
 - ✓ プログラム作成や実行などに必要なファイルは /work 以下のディレクトリ（/**work**/gt00/txxxxx）に置く
 - ✓ /home は計算ノードからは参照できない

Wisteria 利用上の注意（２）

■ コンパイルおよび実行のための環境準備

- ✓ コンパイルおよび実行のための環境を準備するために module コマンドを使用する。これによって様々な環境を簡単に切り替えて使用できる。

\$ module load <module_name>

モジュール名 <module_name> のモジュールをロードして環境を準備。環境変数PATHなどが設定される。

\$ module avail

使用可能なモジュール一覧を表示する。

\$ module list

使用中のモジュールを表示する。

Wisteriaでのプログラムの実行

- ジョブスクリプト(〇〇.sh)を作成し、ジョブとして投入、実行する。

```
$ pjsub ./〇〇.sh
```

- 投入されたジョブを確認する。 (**qstatではないので注意**)

```
$ pjstat
```

- 実行が終了すると、以下のファイルが生成される。

```
〇〇.sh.?????.out
```

```
〇〇.sh.?????.err (?????? はジョブID)
```

- 上記の標準出力ファイルの中身を確認する。

```
$ cat 〇〇.sh.?????.out
```

- 必要に応じて、上記のエラー出力ファイルの中身を確認する。

```
$ cat 〇〇.sh.?????.out
```

コンパイラの種類と実行(Aquarius)

- ログインノードとAquarius計算ノードとでは、CPUの命令セットが（ほぼ）同じ
 - ログインノード：命令セットアーキテクチャ **Intel** CascadeLake+AVX512, **x86_64**
 - Aquarius計算ノード：命令セットアーキテクチャ **Intel** IceLake+AVX512, **x86_64**
- コンパイラ: GPU向けには主にNVIDIAを推奨 (gcc+CUDAも利用可能)
\$ module load nvidia cuda nvmpi または
\$ module load gcc cuda omp-cuda

言語	GNUコンパイラ	Intelコンパイラ	NVIDIA コンパイラ (旧PGI)	CUDAコンパイラ
C	gcc	icc	nvc (pgcc)	nvcc
C++	g++	icpc	nvc++(pgc++)	
Fortran	gfortran	ifort	nvfortran (pgfortran)	
OpenACC			○	

JOBスクリプトサンプルの説明 (Aquarius, MPIなし)

```
#!/bin/bash
#PJM -L rscgrp=lecture-a
#PJM -L gpu=2
#PJM -L elapse=00:01:00
#PJM -g gt00

module load nvidia
./a.out
```

リソースグループ名
:lecture-a

利用GPU数

実行時間制限: 1分
(講習会では最大10分)

利用グループ名
:gt00

GPUプログラミングを始める前に！

1. 並列プログラミングって？

GPUプログラミングを始める前に！

- GPUは**並列計算機**です！ よって本講習会で学ぶのは**並列プログラミング**になります！
 - 並列プログラミングの例： MPI, OpenMP など
- 並列プログラミングは、**プログラムを高速化**するために行います！



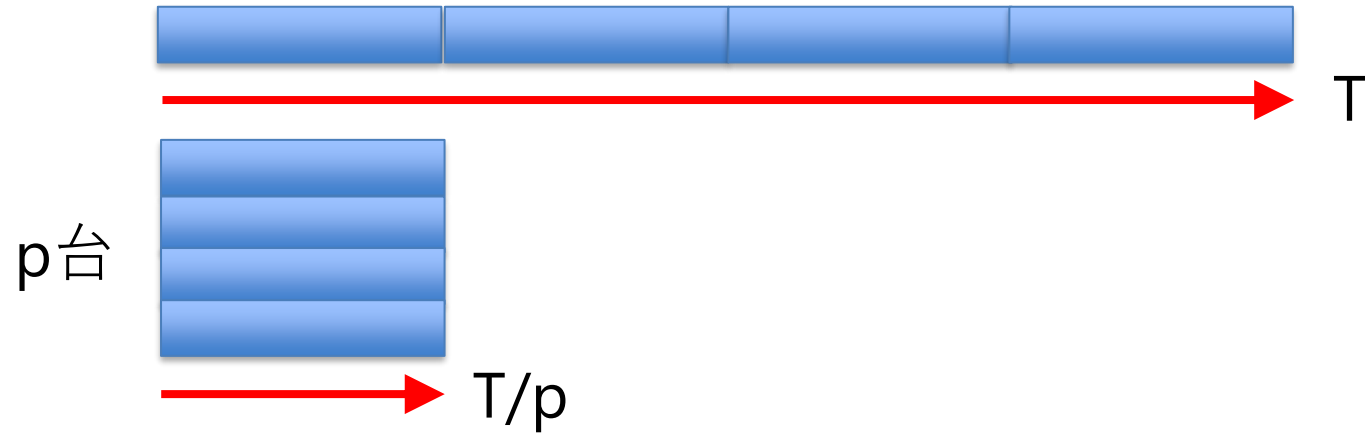
並列プログラミングについての解説動画はこちら

<https://www.youtube.com/channel/UC2CHaGp1AO-vqRIV7wmU0-w/videos?view=0&sort=p&flow=grid>

**並列プログラミング・
高性能計算について
の事前知識があると
有利！**

並列計算

- 実行時間 T の逐次処理のプログラムを p 台の計算機で並列計算することで、実行時間を T/p にする。



- 実際にできるかどうかは、処理内容（アルゴリズム）による。アルゴリズムによって難易度は異なる。
 - ✓ 並列化できないアルゴリズム、通信のオーバーヘッド
 - ✓ 部分的にでも並列化できないアルゴリズムがあると、どれだけ並列数を上げてても、その時間は短縮されない。
- 並列処理（計算）の種類
 - ✓ 「タスク並列」と「データ並列」

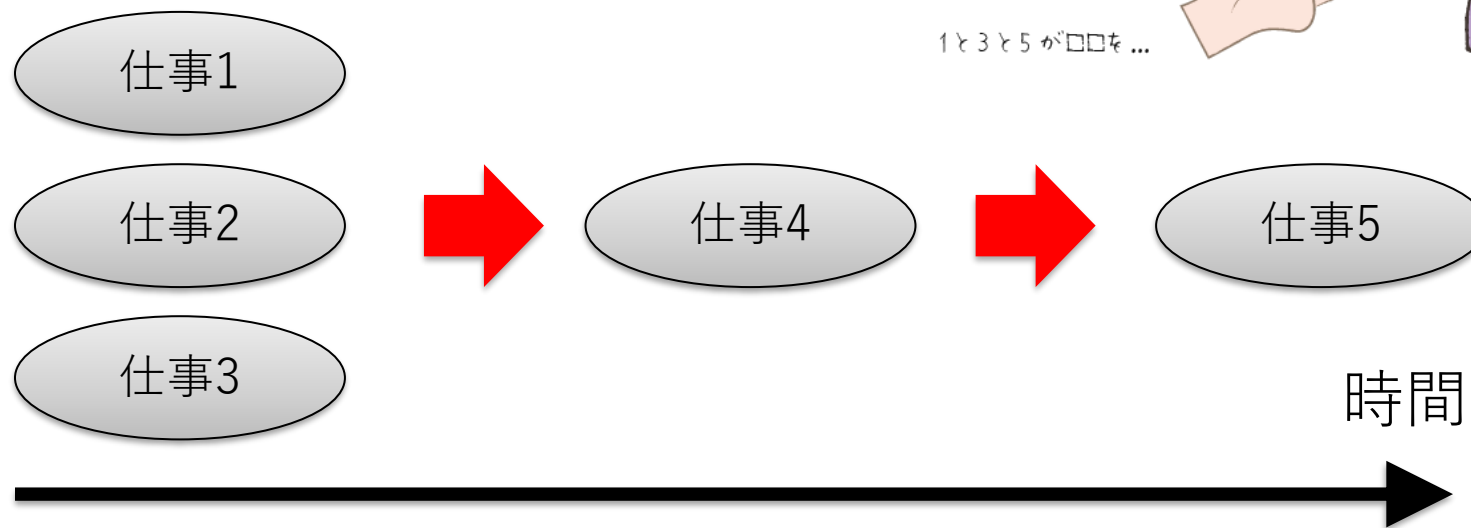
タスク並列

- タスク（仕事）を分割することで並列化する。

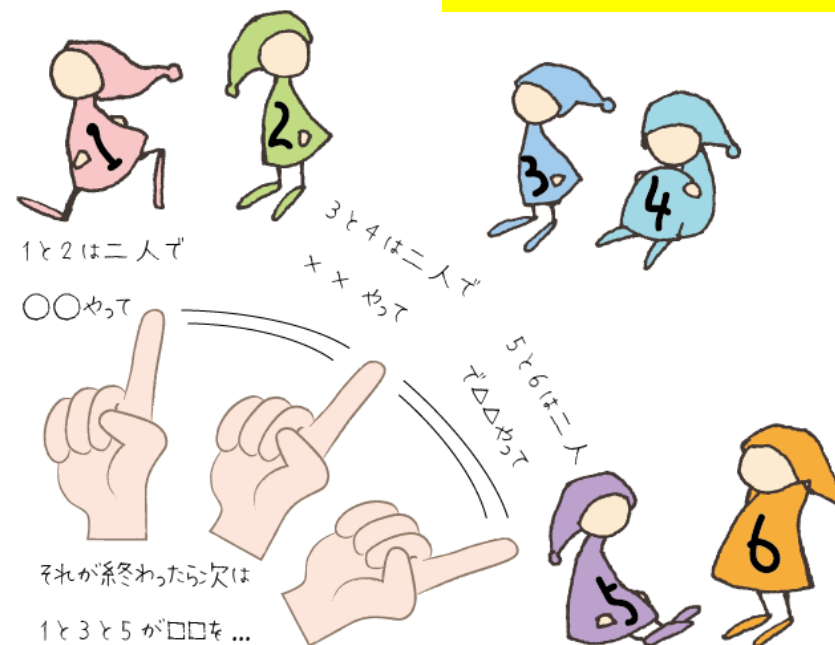
- タスク並列の例：カレーを作る

- ✓ 仕事1：野菜を切る
- ✓ 仕事2：肉を切る
- ✓ 仕事3：水を沸騰させる
- ✓ 仕事4：野菜と肉を入れて煮込む
- ✓ 仕事5：カレーのルーを入れる

- 並列化



GPUは苦手



データ並列

- データを分割することで並列化する。
 - ✓ データは異なるが計算の手続きは同じ。
- データ並列の例：手分けをして算数ドリルを解く
 - ✓ 数字だけ異なるが計算の手続きは同じ。

$$2 + 1$$

$$3 + 19$$

$$4 + (-6)$$

$$-8 + 10$$

$$10 + 3$$

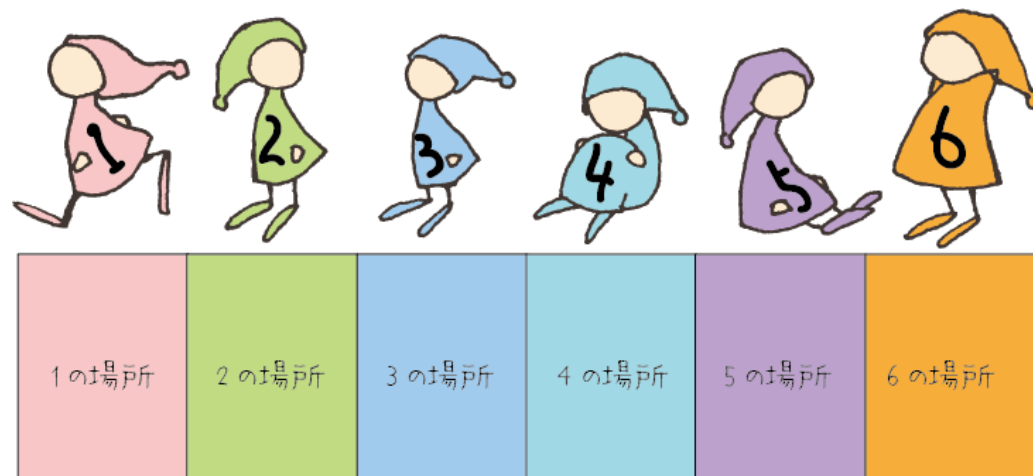
$$12 + (-8)$$

$$-20 + 29$$

$$4 + 10$$

$$-32 + 12$$

$$-5 + 5$$

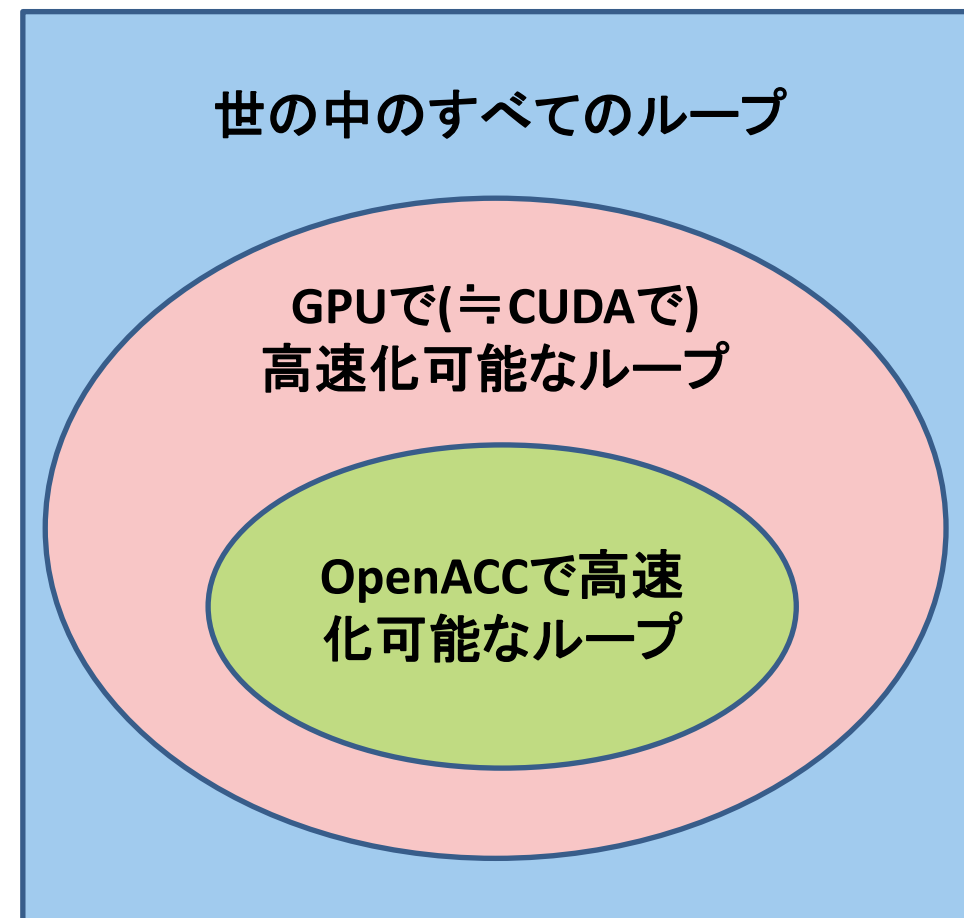


全員、自分の場所で〇〇やって

GPUの並列計算はこれが原則。
プログラムでは普通、配列とループで記述する
`for (i = 0; i < N; i++) C[i] = A[i] + B[i];`

GPUにおけるループ並列化

- GPU における高速化は通常、プログラム中の重たいループ構造を並列化することで達成する
- 今回学ぶOpenACC は**特定のループ構造を簡単に並列化**できる
 - 全てのループ構造を並列化できるわけではない
 - どのようなループなら並列化可能か知る必要がある



OpenACCで並列化できるループ

データ独立なループの例

```
for ( i = 0; i < N; i++)  
  C[i] = A[i] + B[i];
```

リダクションの必要なループの例

```
sum = 0;  
for ( i = 0; i < N; i++)  
  sum += A[i];
```

データ依存のあるループの例

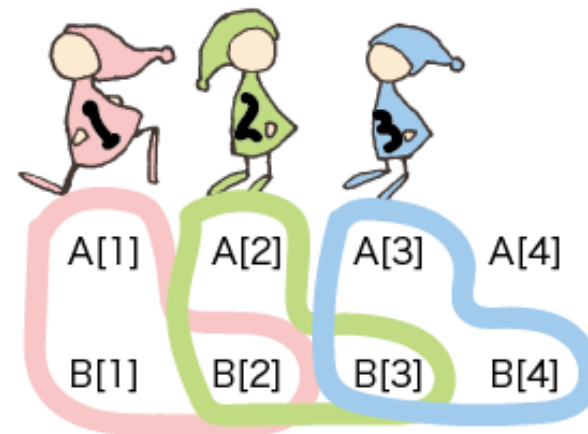
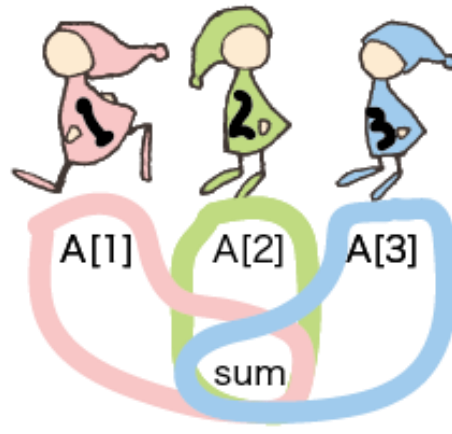
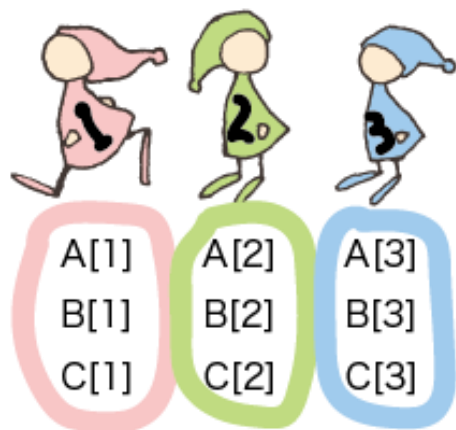
```
B[0] = 0;  
for ( i = 0; i < N; i++)  
  B[i+1] = B[i] + A[i];
```

※OpenACCでも、GPUで正しく動くコードを書くことはできる。しかし遅いので意味がない

OpenACCで簡単に並列化できる

CUDAでも比較的簡単に並列化できる

CUDAで高速実装可能だが難しい (shared memory や warp shuffle を駆使する必要がある)



簡単に並列化できるループ

```
for ( i = 0; i < 3; i++)  
    A[i] = A[i] + 1;
```

$A[0] = A[0] + 1;$

$A[1] = A[1] + 1;$

$A[2] = A[2] + 1;$



分担で計算を行う
スレッドさん

メモリ

3	6	1
---	---	---

A[0] A[1] A[2]

簡単に並列化できるループ

```
for ( i = 0; i < 3; i++)  
  A[i] = A[i] + 1;
```

$A[0] = A[0] + 1;$



A[0]て
なんや

$A[1] = A[1] + 1;$



A[1]て
なんや

$A[2] = A[2] + 1;$



A[2]て
なんや

メモリ

3	6	1
---	---	---

A[0] A[1] A[2]

簡単に並列化できるループ

```
for ( i = 0; i < 3; i++)  
  A[i] = A[i] + 1;
```

$A[0] = A[0] + 1;$



$A[1] = A[1] + 1;$



$A[2] = A[2] + 1;$



メモリ

3	6	1
---	---	---

A[0] A[1] A[2]

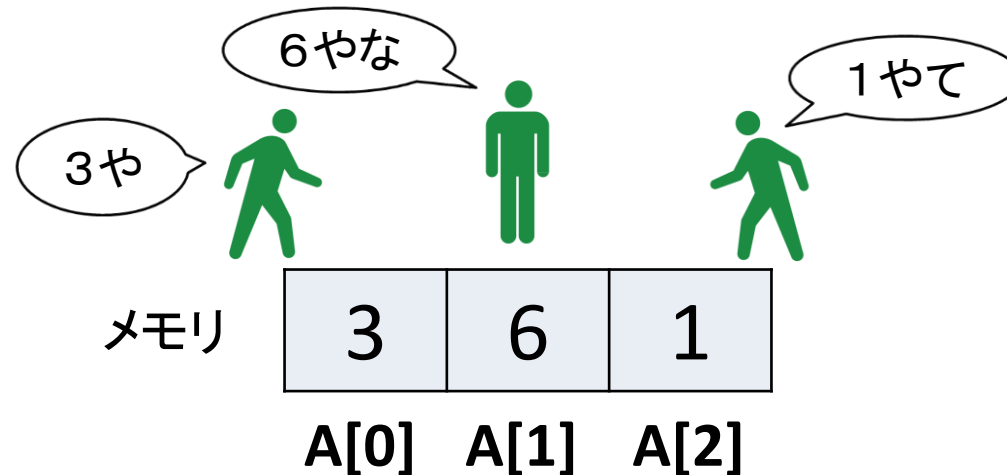
簡単に並列化できるループ

```
for ( i = 0; i < 3; i++)  
  A[i] = A[i] + 1;
```

$A[0] = A[0] + 1;$

$A[1] = A[1] + 1;$

$A[2] = A[2] + 1;$



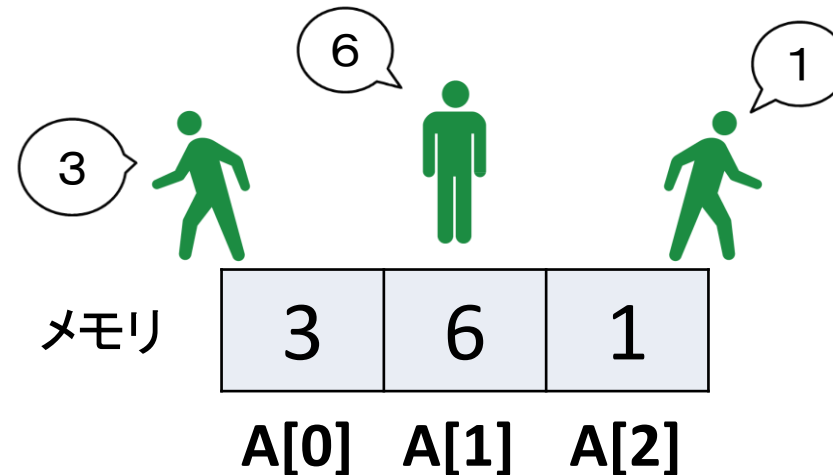
簡単に並列化できるループ

```
for ( i = 0; i < 3; i++)  
    A[i] = A[i] + 1;
```

$A[0] = A[0] + 1;$

$A[1] = A[1] + 1;$

$A[2] = A[2] + 1;$



簡単に並列化できるループ

```
for ( i = 0; i < 3; i++)  
  A[i] = A[i] + 1;
```

$$A[0] = \text{3} + 1;$$


$$A[1] = \text{6} + 1;$$


$$A[2] = \text{1} + 1;$$

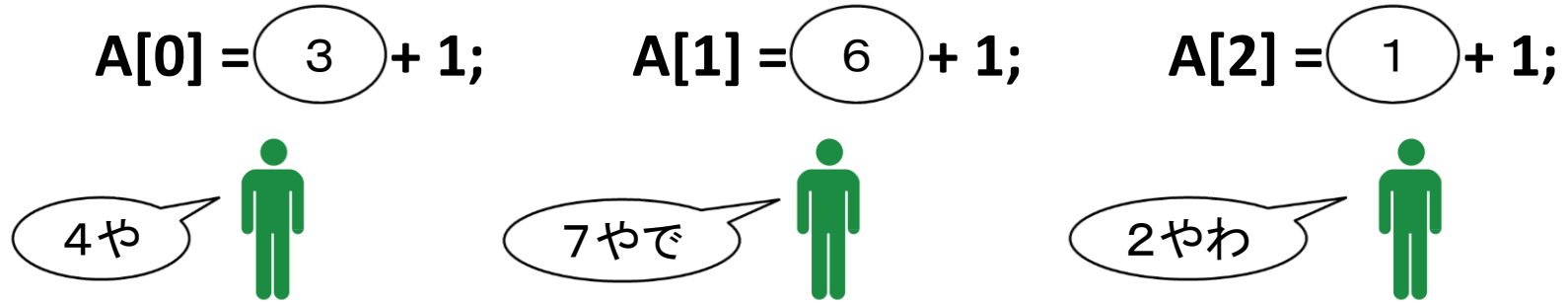

メモリ

3	6	1
---	---	---

A[0] A[1] A[2]

簡単に並列化できるループ

```
for ( i = 0; i < 3; i++)  
  A[i] = A[i] + 1;
```



メモリ

3	6	1
A[0]	A[1]	A[2]

簡単に並列化できるループ

```
for ( i = 0; i < 3; i++)  
  A[i] = A[i] + 1;
```

$A[0] = 3 + 1;$



$A[1] = 6 + 1;$



$A[2] = 1 + 1;$



メモリ

3	6	1
---	---	---

A[0] A[1] A[2]

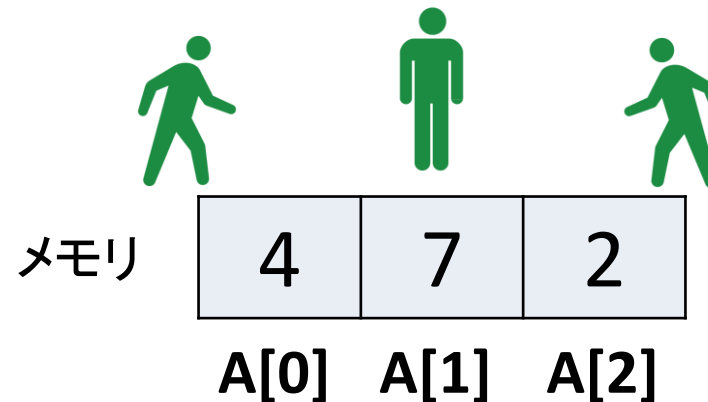
簡単に並列化できるループ

```
for ( i = 0; i < 3; i++)  
  A[i] = A[i] + 1;
```

$$A[0] = \textcircled{3} + 1;$$

$$A[1] = \textcircled{6} + 1;$$

$$A[2] = \textcircled{1} + 1;$$



簡単に並列化できるループ

```
for ( i = 0; i < 3; i++)  
  A[i] = A[i] + 1;
```

$$A[0] = \textcircled{3} + 1;$$

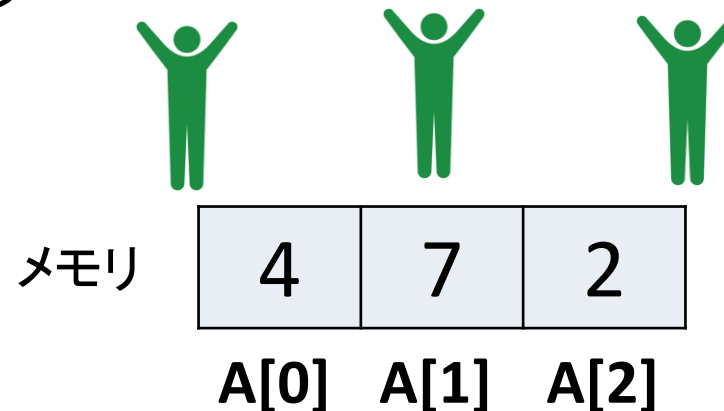
$$A[1] = \textcircled{6} + 1;$$

$$A[2] = \textcircled{1} + 1;$$

このようなデータ並列を簡単に適用できるループを、

- データ独立(**independent**)なループ
 - 依存性のないループ
 - 自明な並列性を持つループ
- などと呼ぶ

成功 !



簡単に並列化できないループ

```
for ( i = 0; i < 3; i++)  
  A[0] = A[0] + 1;
```

$A[0] = A[0] + 1;$



$A[0] = A[0] + 1;$



$A[0] = A[0] + 1;$



A[0]に3回1を足してるだけなので、
最終結果は $3 + 1 + 1 + 1 = 6$ 。

足し算なのでどんな順番で足しても
結果は変わらないはずだが...

メモリ

3	6	1
---	---	---

A[0] A[1] A[2]

簡単に並列化できないループ

```
for ( i = 0; i < 3; i++)  
  A[0] = A[0] + 1;
```

$A[0] = A[0] + 1;$



A[0]て
なんや

$A[0] = A[0] + 1;$



A[0]て
なんや

$A[0] = A[0] + 1;$



A[0]て
なんや

メモリ

3	6	1
---	---	---

A[0] A[1] A[2]

簡単に並列化できないループ

```
for ( i = 0; i < 3; i++)  
  A[0] = A[0] + 1;
```

$A[0] = A[0] + 1;$



$A[0] = A[0] + 1;$



$A[0] = A[0] + 1;$



少し休ん
でからで
ええか

メモリ

3	6	1
---	---	---

A[0] A[1] A[2]

簡単に並列化できないループ

```
for ( i = 0; i < 3; i++)  
  A[0] = A[0] + 1;
```

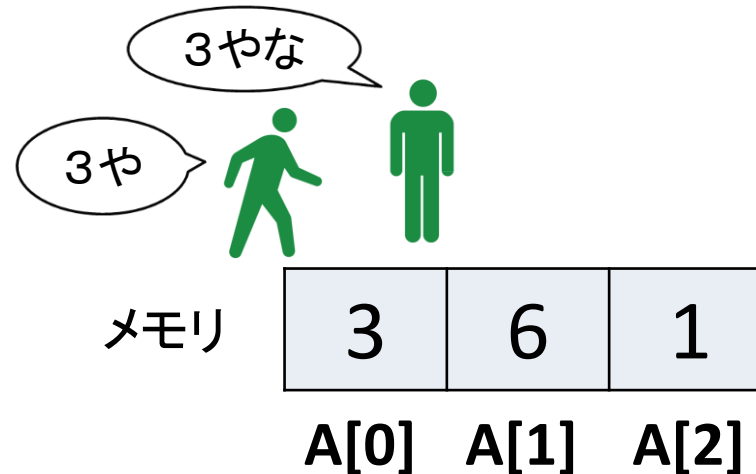
$A[0] = A[0] + 1;$

$A[0] = A[0] + 1;$

$A[0] = A[0] + 1;$



少し休ん
でからで
ええか



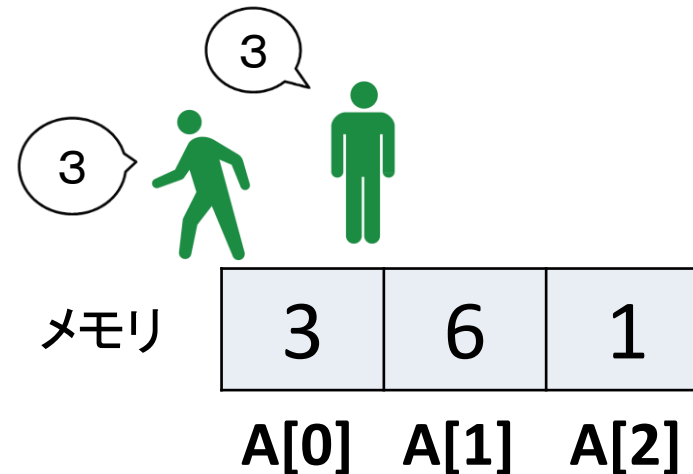
簡単に並列化できないループ

```
for ( i = 0; i < 3; i++)  
  A[0] = A[0] + 1;
```

$A[0] = A[0] + 1;$

$A[0] = A[0] + 1;$

$A[0] = A[0] + 1;$



簡単に並列化できないループ

```
for ( i = 0; i < 3; i++)  
  A[0] = A[0] + 1;
```

$A[0] =$  $+ 1;$

$A[0] =$  $+ 1;$

$A[0] = A[0] + 1;$

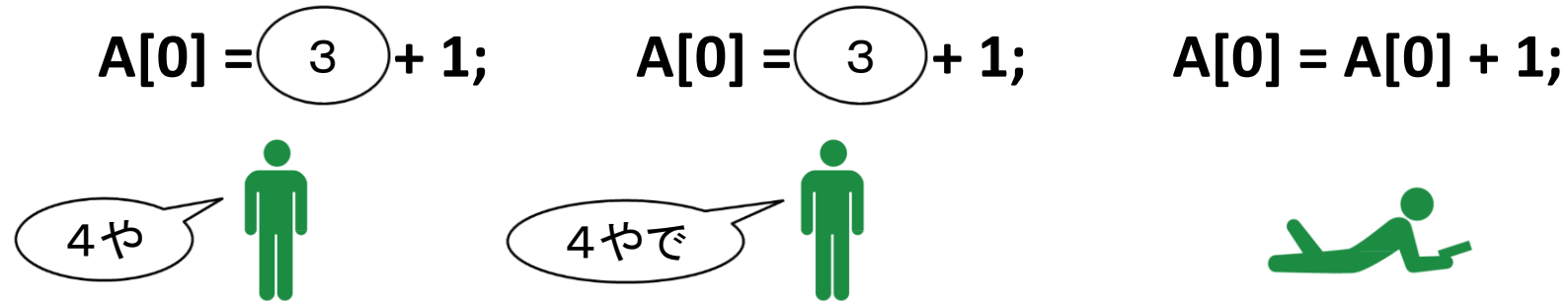


メモリ

3	6	1
A[0]	A[1]	A[2]

簡単に並列化できないループ

```
for ( i = 0; i < 3; i++)  
  A[0] = A[0] + 1;
```



メモリ

3	6	1
A[0]	A[1]	A[2]

簡単に並列化できないループ

```
for ( i = 0; i < 3; i++)  
  A[0] = A[0] + 1;
```

$A[0] = 3 + 1;$



$A[0] = 3 + 1;$



$A[0] = A[0] + 1;$



そろそろ
行くか

メモリ

3	6	1
---	---	---

A[0] A[1] A[2]

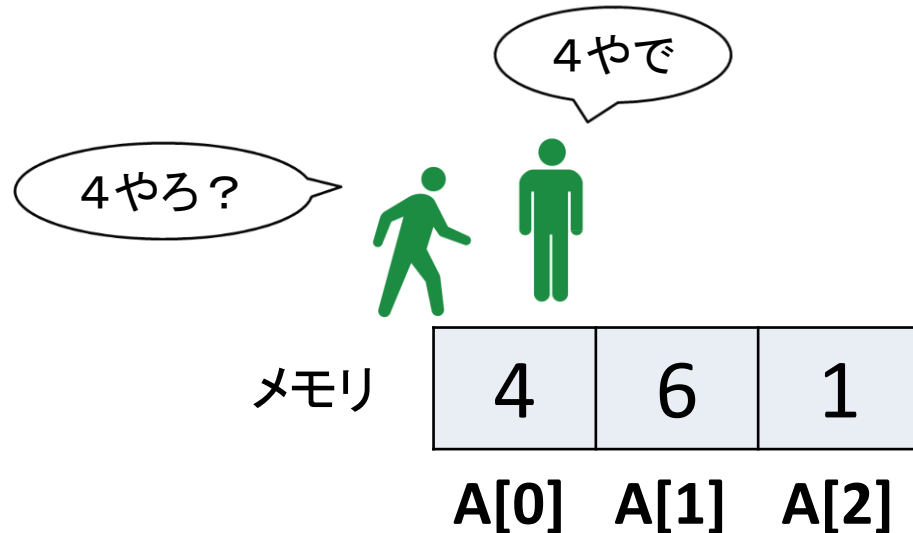
簡単に並列化できないループ

```
for ( i = 0; i < 3; i++)  
  A[0] = A[0] + 1;
```

$A[0] = 3 + 1;$

$A[0] = 3 + 1;$

$A[0] = A[0] + 1;$



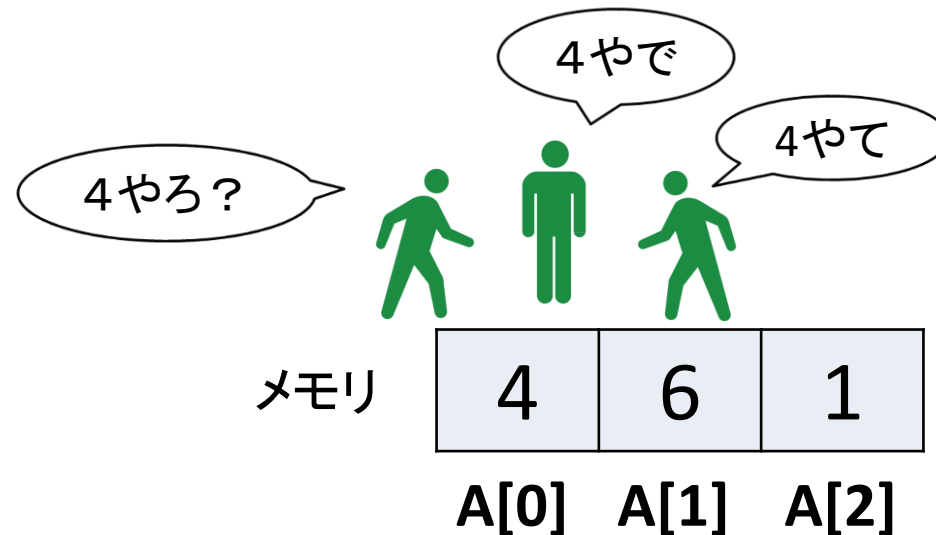
簡単に並列化できないループ

```
for ( i = 0; i < 3; i++)  
  A[0] = A[0] + 1;
```

$A[0] = 3 + 1;$

$A[0] = 3 + 1;$

$A[0] = A[0] + 1;$



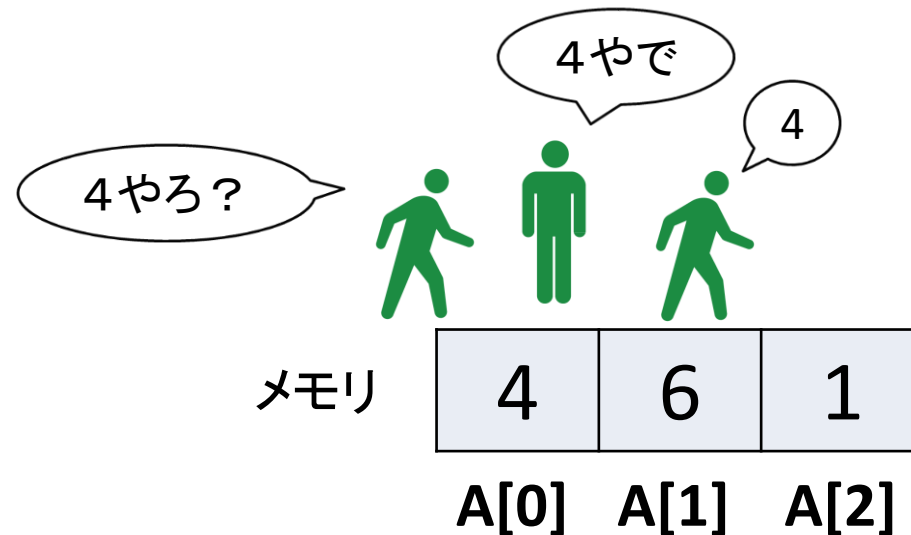
簡単に並列化できないループ

```
for ( i = 0; i < 3; i++)  
  A[0] = A[0] + 1;
```

$A[0] = \textcircled{3} + 1;$

$A[0] = \textcircled{3} + 1;$

$A[0] = A[0] + 1;$



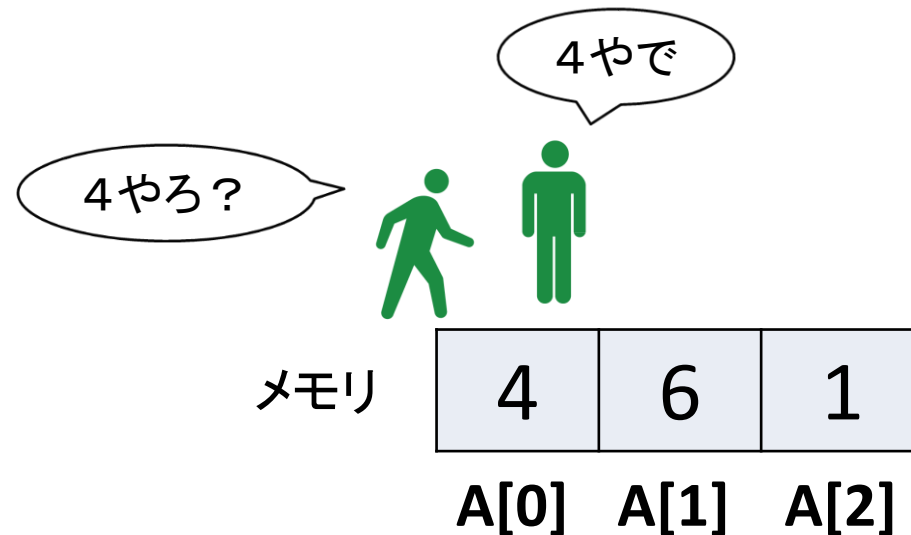
簡単に並列化できないループ

```
for ( i = 0; i < 3; i++)  
  A[0] = A[0] + 1;
```

$A[0] = 3 + 1;$

$A[0] = 3 + 1;$

$A[0] = 4 + 1;$



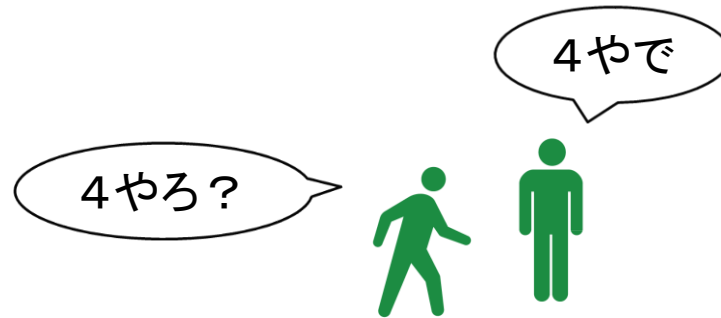
簡単に並列化できないループ

```
for ( i = 0; i < 3; i++)  
  A[0] = A[0] + 1;
```

$$A[0] = \textcircled{3} + 1;$$

$$A[0] = \textcircled{3} + 1;$$

$$A[0] = \textcircled{4} + 1;$$



メモリ

4	6	1
---	---	---

A[0] A[1] A[2]

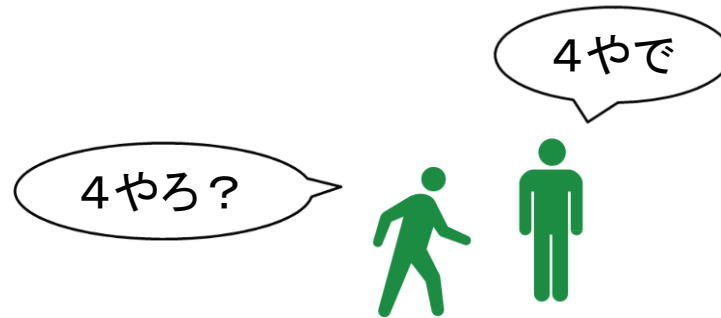
簡単に並列化できないループ

```
for ( i = 0; i < 3; i++)  
  A[0] = A[0] + 1;
```

$$A[0] = \textcircled{3} + 1;$$

$$A[0] = \textcircled{3} + 1;$$

$$A[0] = \textcircled{4} + 1;$$



メモリ

4	6	1
---	---	---

A[0] A[1] A[2]

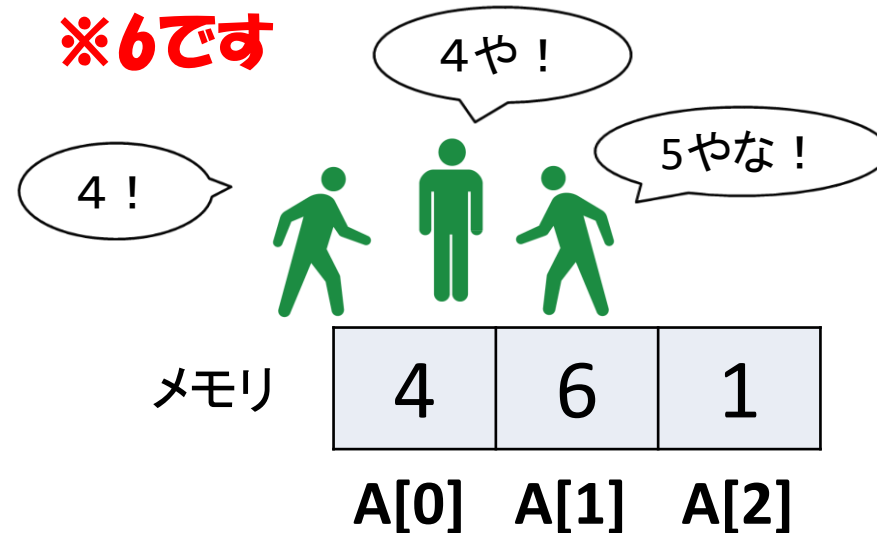
簡単に並列化できないループ

```
for ( i = 0; i < 3; i++)  
  A[0] = A[0] + 1;
```

$A[0] = \textcircled{3} + 1;$

$A[0] = \textcircled{3} + 1;$

$A[0] = \textcircled{3} + 1;$



CPUで実行される足し算は、

1. データの読み込み
2. 足し算
3. データの書き込み

の3パートからなる。

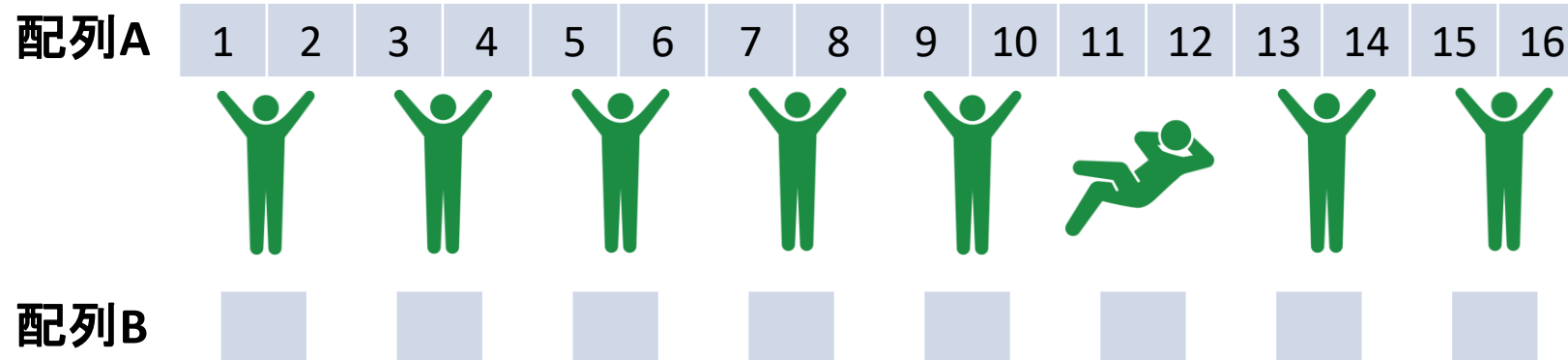
スレッドは各々独立に 1 ~ 3 を実行するため、**タイミングによって結果が変わる!**

(この例の場合は4,5,6のいずれかになる)

どうやって並列化するか？

例えば以下を8スレッドで並列化

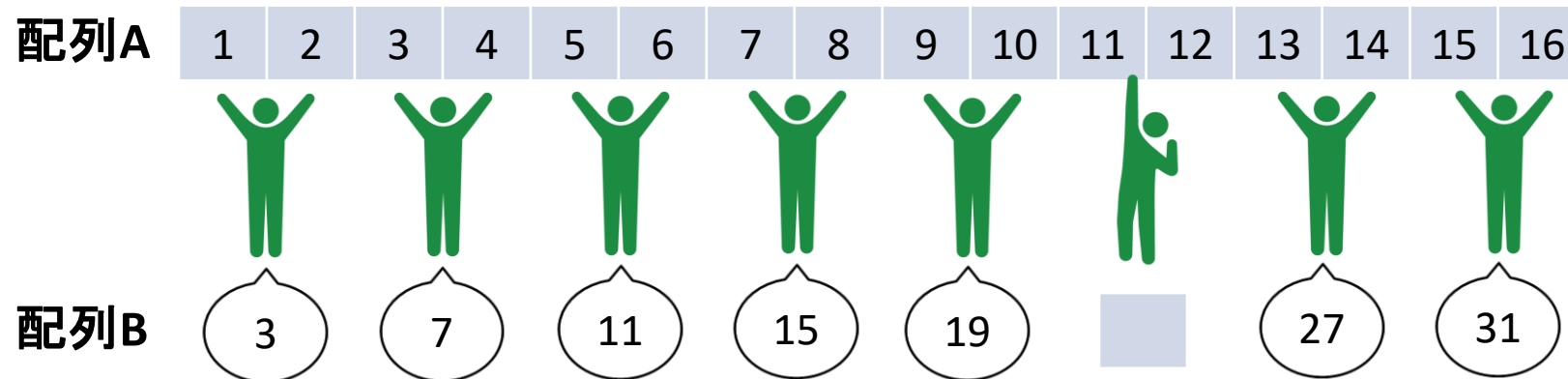
```
sum = 0;  
for ( i = 0; i < 16; i++)  
    sum = sum + A[i];
```



どうやって並列化するか？

例えば以下を8スレッドで並列化

```
sum = 0;  
for ( i = 0; i < 16; i++)  
    sum = sum + A[i];
```

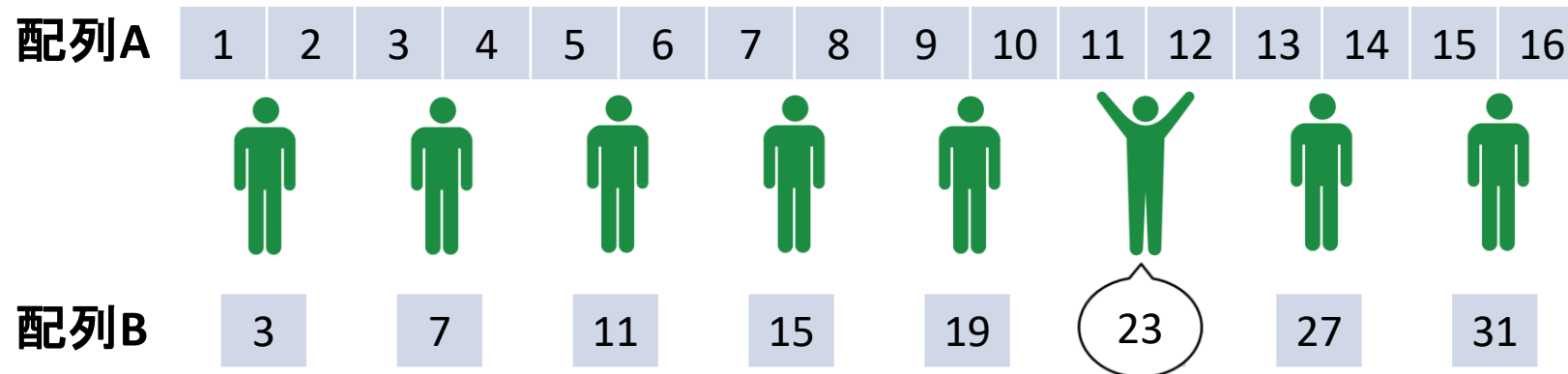


1. 各々自分の担当領域で足し算（結果を別の場所に保存）

どうやって並列化するか？

例えば以下を8スレッドで並列化

```
sum = 0;  
for ( i = 0; i < 16; i++)  
    sum = sum + A[i];
```

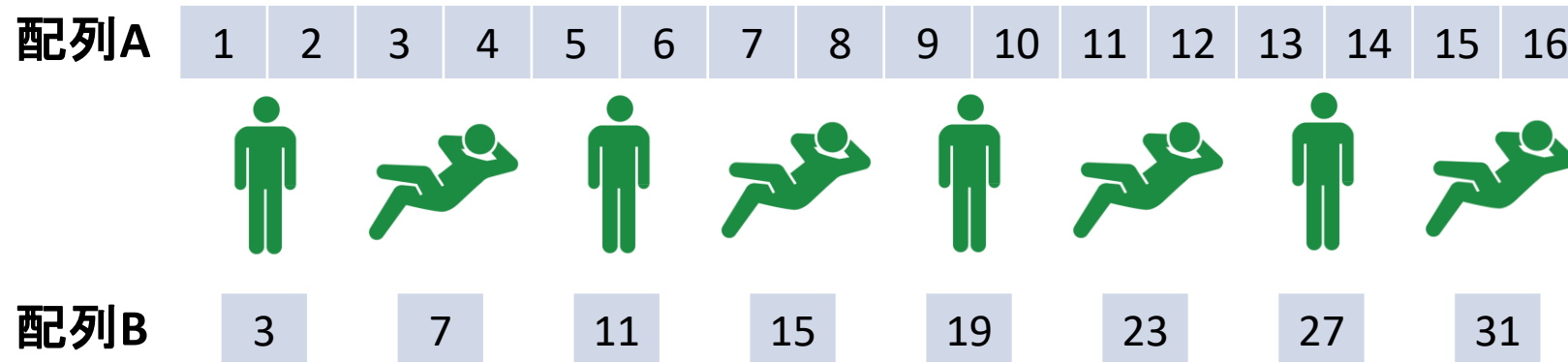


1. 各々自分の担当領域で足し算（結果を別の場所に保存）
2. 遅れているスレッドを待つ！（これを**同期(thread synchronization)**という）

どうやって並列化するか？

例えば以下を8スレッドで並列化

```
sum = 0;  
for ( i = 0; i < 16; i++)  
    sum = sum + A[i];
```



配列C



1. 各々自分の担当領域で足し算（結果を別の場所に保存）
2. 遅れているスレッドを待つ！（これを**同期(thread synchronization)**という）
3. 一部のスレッドを寝かせて、起きてるスレッドで(1)から繰り返し

どうやって並列化するか？

例えば以下を8スレッドで並列化

```
sum = 0;  
for ( i = 0; i < 16; i++)  
    sum = sum + A[i];
```

配列A

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16
---	---	---	---	---	---	---	---	---	----	----	----	----	----	----	----

配列B

3		7		11		15		19		23		27		31	
---	--	---	--	----	--	----	--	----	--	----	--	----	--	----	--

配列C

	10			26				42					58		
--	----	--	--	----	--	--	--	----	--	--	--	--	----	--	--

配列D

		36								100					
--	--	----	--	--	--	--	--	--	--	-----	--	--	--	--	--

sum 136

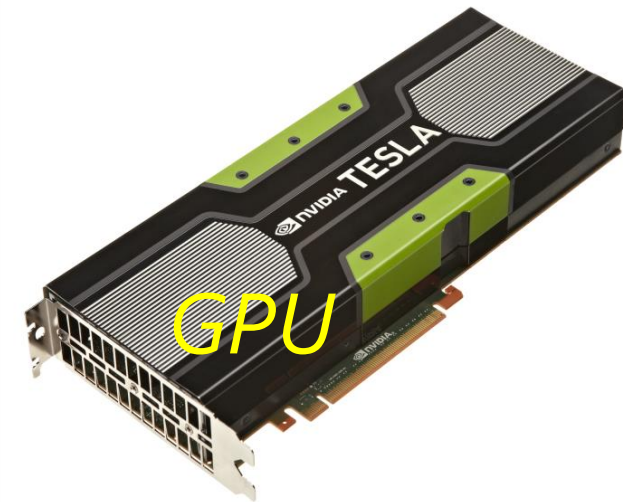
- これは一般的にリダクションと呼ばれる演算パターン
- 一番働くスレッドが4回の足し算。逐次の場合と比較して4倍の高速化
- メモリなどを介してスレッドの間でデータのやり取りをすることをスレッド間通信という

スレッドの同期・通信が入
ると途端に難しくなる！

GPU入門

What's GPU ?

- Graphics Processing Unit
- もともと PC の3D描画専用の装置
- パソコンの部品として量産されている = 非常に安価だった



GPUコンピューティング

- GPUはグラフィックスやゲームの画像計算のために進化を続けている。
- CPUがコア数が2-12個程度に対し、GPUは1000以上のコアがある。
- GPUを一般のアプリケーションの高速化に利用することを「GPUコンピューティング」「GPGPU (General Purpose computation on GPU)」などという。
- 2007年にNVIDIA社のCUDA言語がリリースされて大きく発展
- 最近、ディープラーニング（深層学習）、機械学習、AI（人工知能）などでも注目を浴びている。



抑えておくべきGPUの特徴

■ 最低限知っておくべきこと

✓ 超並列計算が必須！

- 物理コア数が1000以上、**論理コア数（スレッド）は数十万以上**
- プログラムの並列性（スレッド分割可能数）が小さいと速くならない

✓ CPU と GPUの間での**データ転送**が必須！

- GPU は CPU の指示なしでは動けない
- CPU と GPU は独立に動く
 - ✓ CPUとGPUの同期を行い、データの一貫性を保つ必要がある

■ さらなる高速化のためには

- 階層的スレッド管理と同期・通信
- Warp 単位の実行
- コアレスドアクセス

これらはプログラミング言語が CUDA か OpenACCに関わらず、GPUプログラミングでは考慮する必要がある。

- 108 SM (Streaming Multiprocessor)

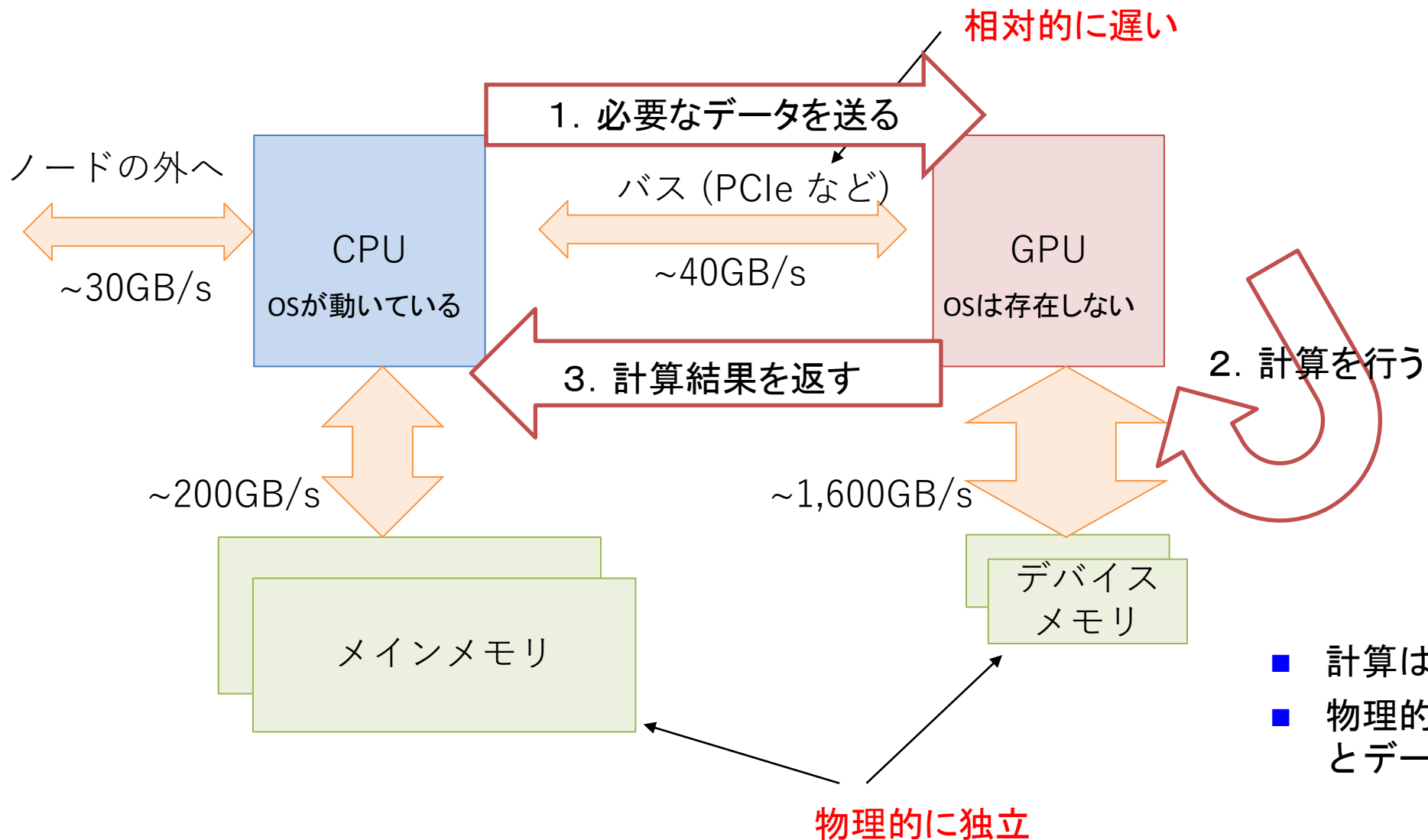


NVIDIA A100 Tensor Core GPU (2/2)

- 倍精度にも対応したTensor Coreを搭載
 - 19.5 TF @ FP64, FP32
 - 156 TF @ TF32 (実質19bit)
 - 312 TF @ FP16, BF16
 - 624 TF @ INT8
 - 1248 TF @ INT4
- メモリ HBM2 40GB 搭載
 - 1.555 TB/s



CPUと独立のGPUメモリ



- 計算はOSのあるCPUから始まる
- 物理的に独立のデバイスメモリとデータのやり取り必須

どんなアプリならGPUで高速化できる？

- 原則：GPUに一度送ったデータを使い回せるアプリケーション
 - 最低でも100回は使いまわしたい
 - 例：データ量 N に対して計算量 $O(N^2)$ 以上の計算（行列積、多体問題など）や、反復法など

■ 思考実験

- 次のプログラムを、右の表のコンピュータの

(1) CPUを使った時の実行時間は？

(2) GPUを使った時の実行時間は？

```
double precision :: A(1:N), B(1:N)
if(GPU) BをCPUからGPUにコピー
do i = 1, N
    A(i) = B(i)
end do
if(GPU) AをGPUからCPUにコピー
```

あるコンピュータの性能

	データ転送性能
CPUのメモリ	100 GB/sec
GPUのメモリ	1000 GB/sec
CPU-GPU間のバス	20 GB/sec

(1) 配列A・Bのbyte数 / CPUのメモリ性能
= $N * 2 * 8 / 100$

(2) 配列A・Bのbyte数 / GPUのメモリ性能
+ 配列A・Bのbyte数 / CPU-GPU間バスのメモリ性能
= $N * 2 * 8 / 1000 + N * 2 * 8 / 20$

$N = 10^9$ (1G) なら？

(1) 0.16 sec (2) 0.816 sec

どんなアプリならGPUで高速化できる？

- 原則：GPUに一度送ったデータを使い回せるアプリケーション
 - 最低でも100回は使いまわしたい
 - 例：データ量 N に対して計算量 $O(N^2)$ 以上の計算（行列積、多体問題など）や、反復法など

■ 思考実験

- 次のプログラムを、右の表のコンピュータの

(1) CPUを使った時の実行時間は？

(2) GPUを使った時の実行時間は？

あるコンピュータの性能

	データ転送性能
CPUのメモリ	100 GB/sec
GPUのメモリ	1000 GB/sec
CPU-GPU間のバス	20 GB/sec

```
double precision :: A(1:N), B(1:N)
```

```
if(GPU) BをCPUからGPUにコピー
```

```
do t = 1, 100
```

```
do i = 1, N
```

```
    A(i) = B(i)
```

```
end do
```

```
end do
```

```
if(GPU) AをGPUからCPUにコピー
```

100回使い
回してみる

(1) $100 * \text{配列A・Bのbyte数} / \text{CPUのメモリ性能}$
 $= 100 * N * 2 * 8 / 100$

(2) $100 * \text{配列A・Bのbyte数} / \text{GPUのメモリ性能}$
 $+ \text{配列A・Bのbyte数} / \text{CPU-GPU間バスのメモリ性能}$
 $= 100 * N * 2 * 8 / 1000 + N * 2 * 8 / 20$

$N = 10^9$ (1G) なら？

(1) 16 sec (2) 2.4 sec

OPENACC入門

GPUコンピューティングの方法

- ライブラリの利用（CUFFT, CUBLAS など）
 - ✓ GPU用ライブラリを呼ぶだけで、すぐに利用できる。
 - ✓ ライブラリ以外の部分は高速化されない。
- 指示文ベース（OpenACC）
 - ✓ 指示文（ディレクティブ）を挿入するだけである程度高速化。
 - ✓ 既存のソースコードを活用できる。
- プログラミング言語（CUDA、OpenCLなど）
 - ✓ GPUの性能を最大限に活用。
 - ✓ プログラミングにはGPGPU用言語を使用する必要あり。

簡単



難しい

OpenACC

■ OpenACCとは

- ✓ アクセラレータ（≒GPU）用プログラミングインターフェース
- ✓ OpenMP のようなディレクティブ（指示文）ベース
- ✓ C 言語/C++, Fortran に対応
- ✓ 2011年秋に OpenACC1.0、現在は 2.7が広く利用
- ✓ コンパイラ：PGI → **NVIDIA HPC SDK (無料)**, Cray, GCC
- ✓ WEBサイト：<http://www.openacc.org/>

■ 指示文ベースの利点

- ✓ 指示文：コンパイラへのヒント
- ✓ アプリケーションの開発や移植が比較的簡単
- ✓ ホスト（CPU）用コード、複数のアクセラレータ用コードを単一コードとして記述。メンテナンスが容易。高生産性。

C言語

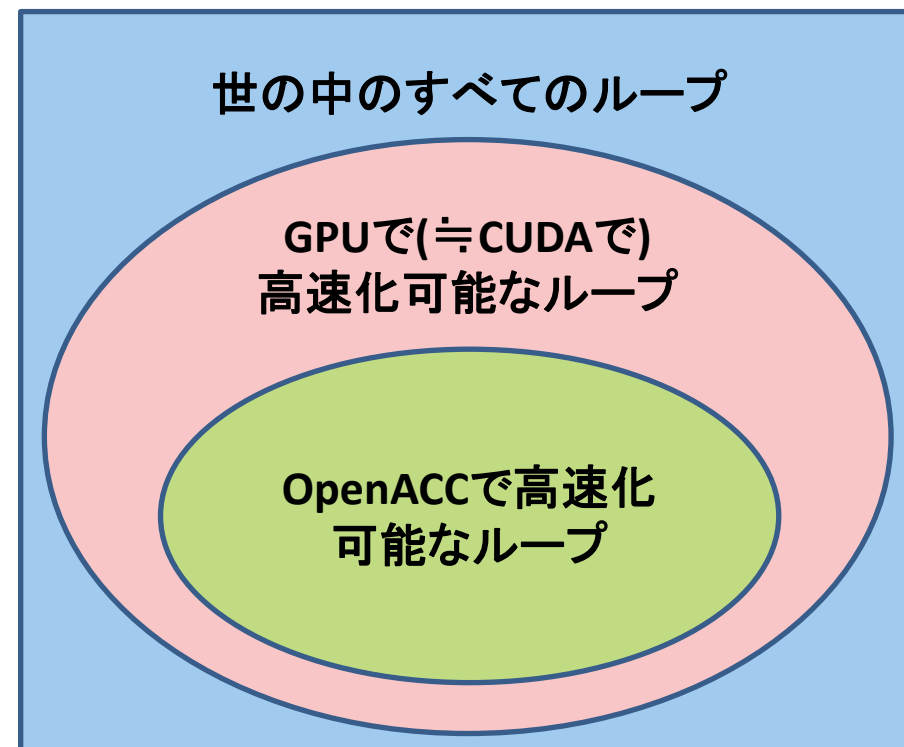
```
#pragma acc directive-name [clause, ...]  
{  
    // C code  
}
```

Fortran

```
!$acc directive-name [clause, ...]  
    ! Fortran code  
!$acc end directive-name
```

OpenACCでできること

- OpenACC は**特定のループ構造を簡単に並列化**できる
 - ✓ 全てのループ構造を並列化できるわけではない
- 主に以下の3つを記述できる
 - ✓ どこを GPU で実行するか
 - ✓ どこでデータを移動するか
 - ✓ (GPUで実行する領域ないに出てくる) ループが、データ独立か、リダクションか、それ以外か



OpenACCでできないこと

- CUDAならshared memoryなど使って頑張れば並列化できる、**データ依存性のあるループの並列化**
 - 例外：atomic演算で解決可能な書き込み競合を含むループ
- shared memoryなど使った性能限界を目指す**最適化**

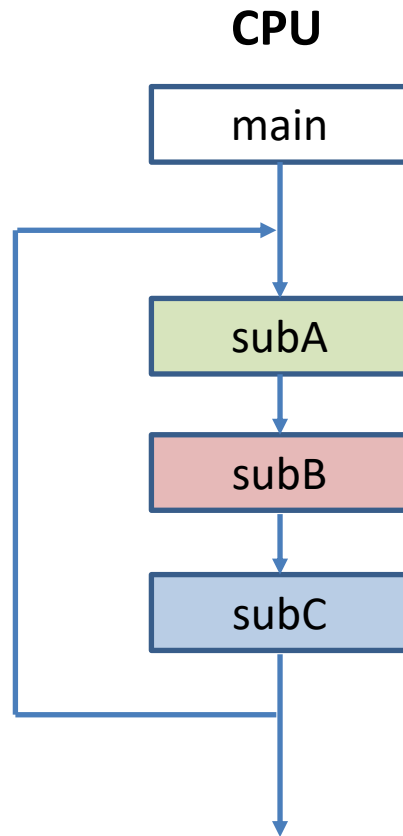
これが必要なのはアプリの一部であることが多いので、
ここだけCUDAやライブラリを使えば良い。

**OpenACC と CUDAやライブラリの併用など、
上級者は楽するためにOpenACCを使う**

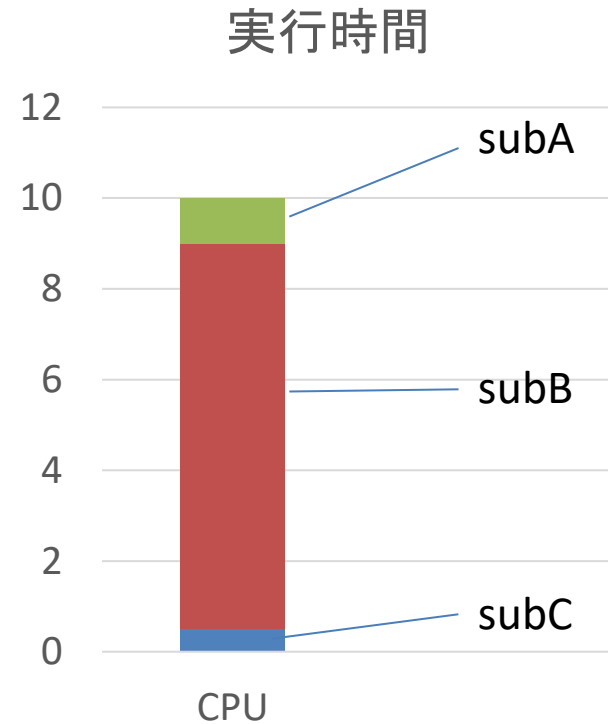
OpenACCを推奨する理由

- CPUプログラムの一般的なGPU化手順
 1. プログラムのプロファイリング（重い部分を特定する）
 2. 重い部分を並列化し、GPU上で実行する

OpenACCを推奨する理由

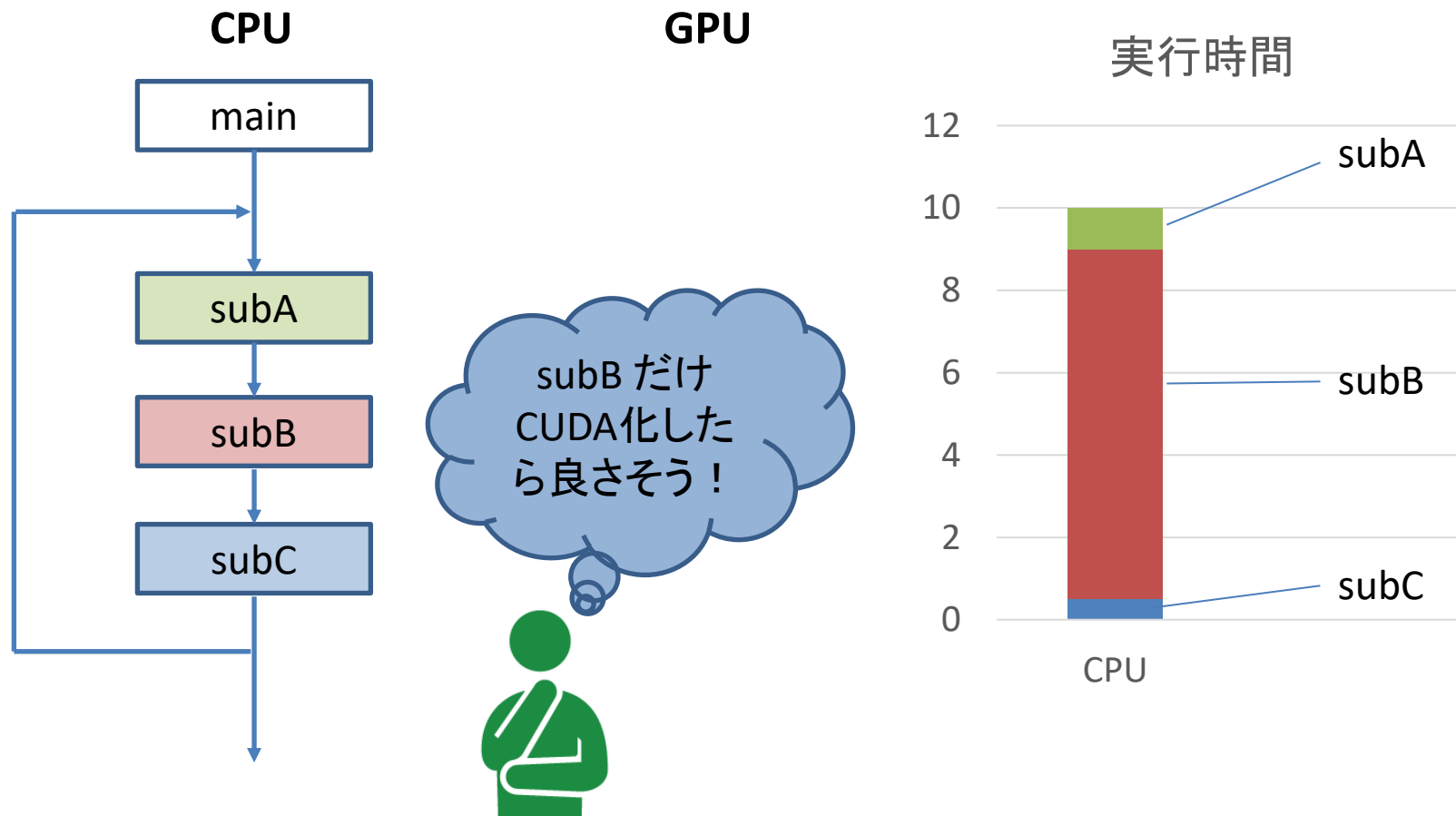


GPU

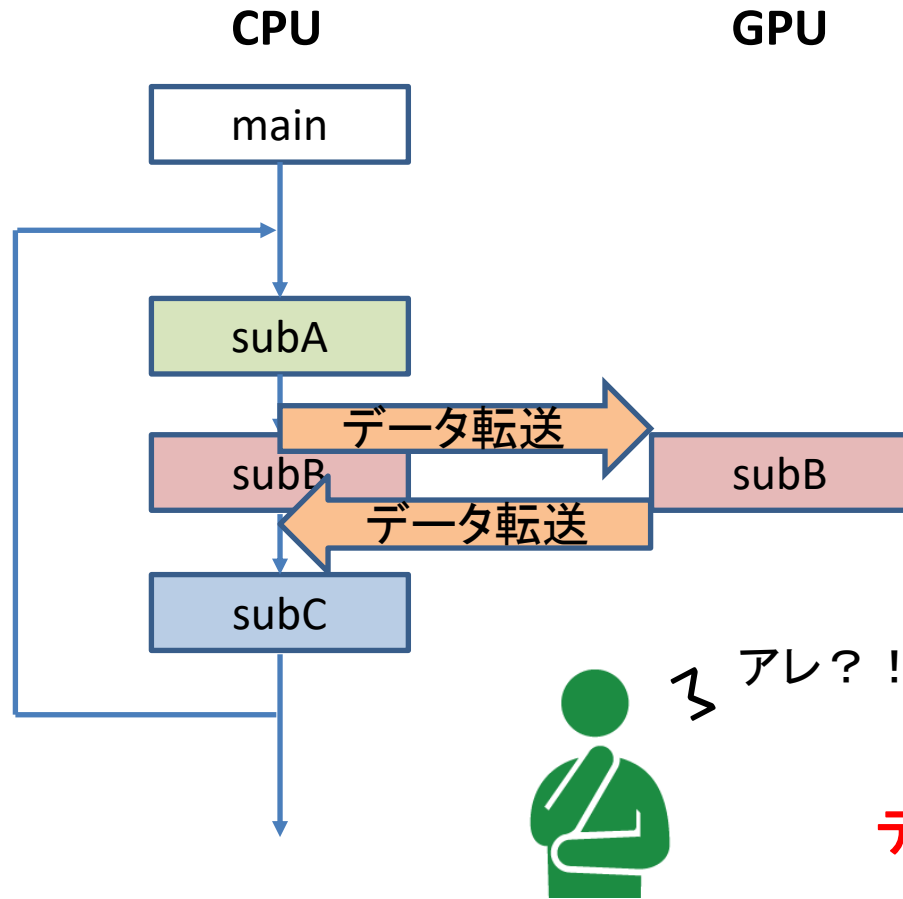


とあるプログラムの構造と実行時間を調べた結果

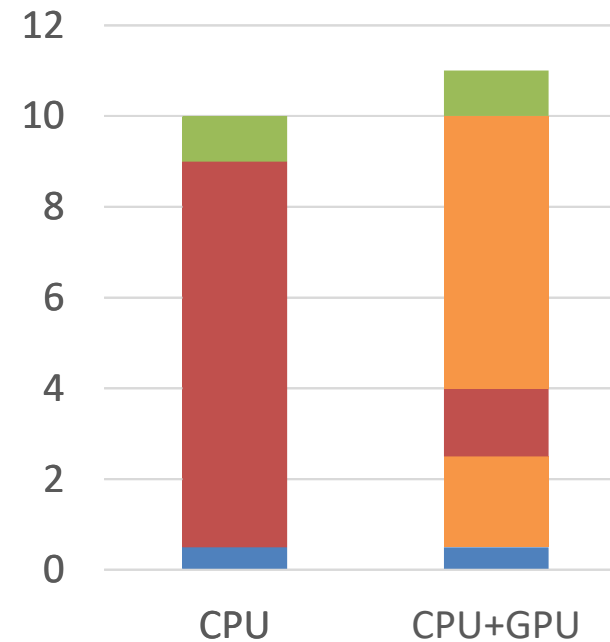
OpenACCを推奨する理由



OpenACCを推奨する理由



実行時間



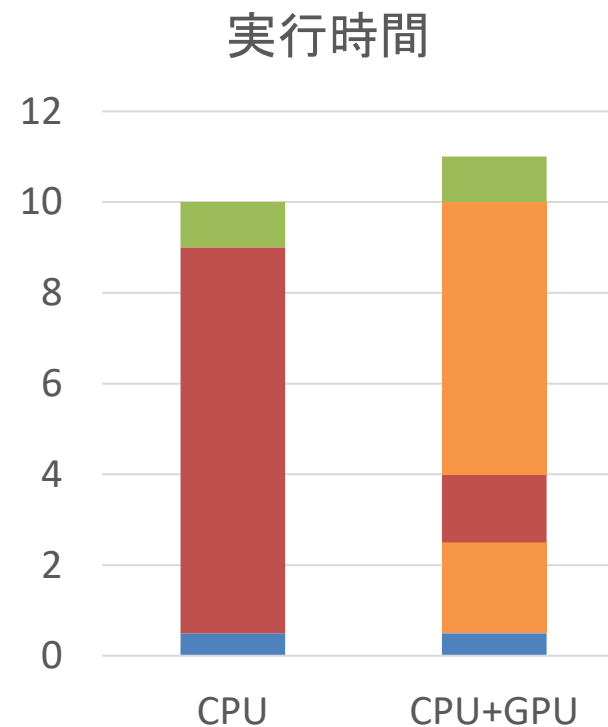
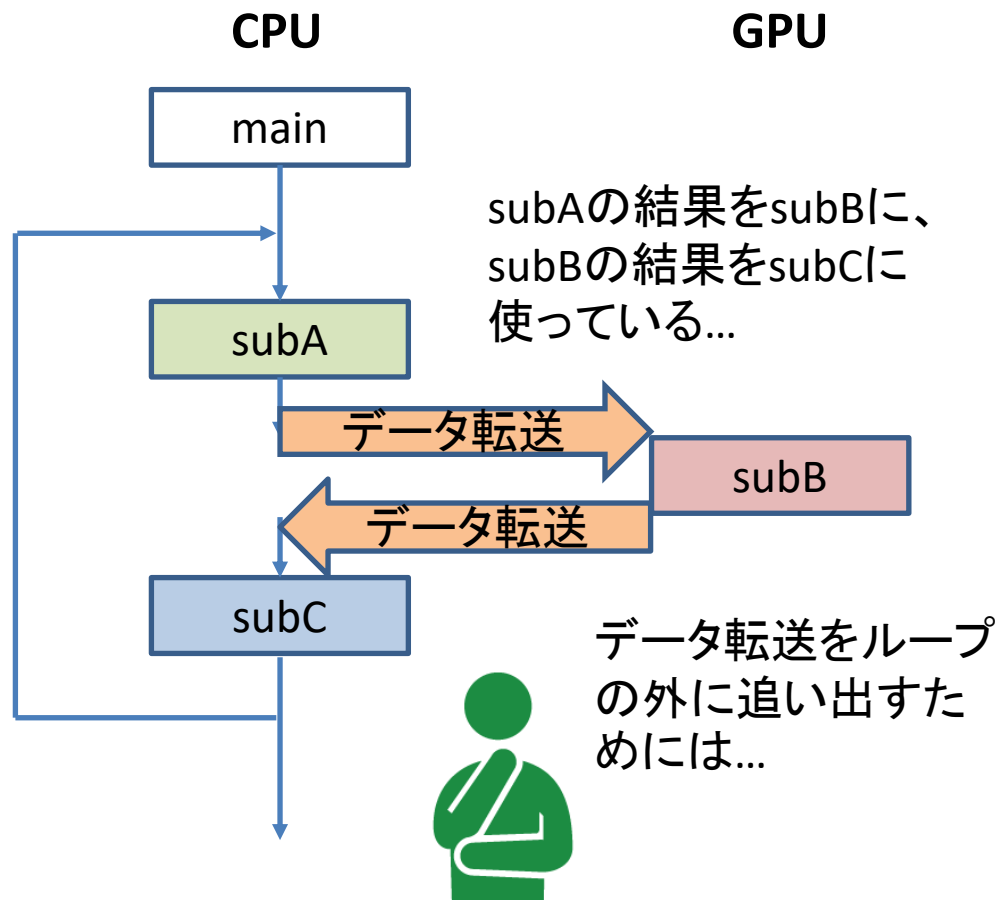
データ転送分遅くなった！

OpenACCを推奨する理由

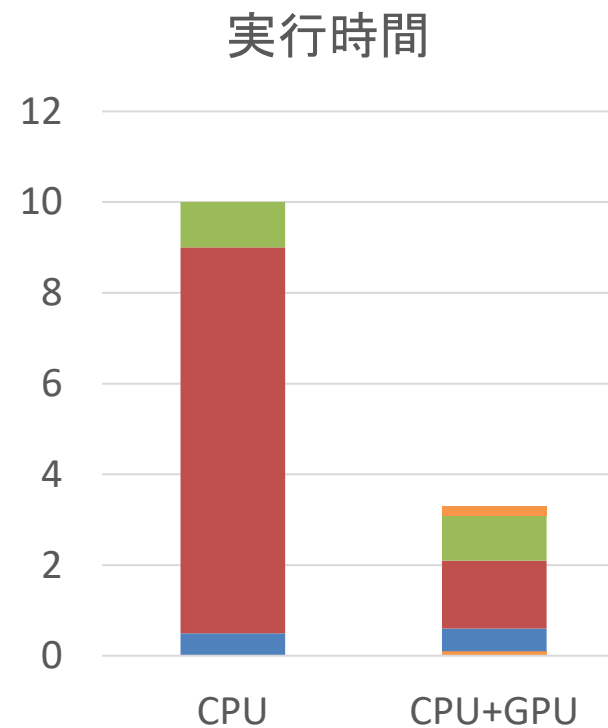
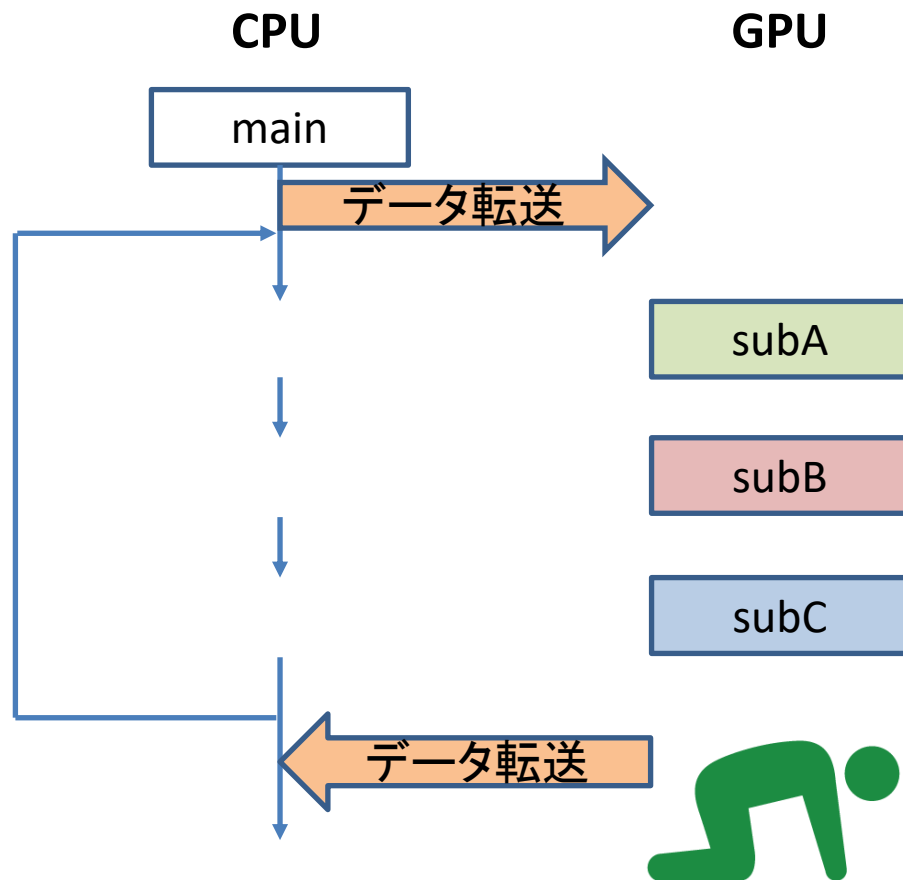
- CPUプログラムの一般的なGPU化手順
 1. プログラムのプロファイリング（重い部分を特定する）
 2. 重い部分を並列化し、GPU上で実行する
 3. CPU-GPU間のデータ転送を最小化する

**OpenACCであってもCUDAであっても、
結局ここまでが必須！**

OpenACCを推奨する理由



OpenACCを推奨する理由



結局全部CUDA化した...

OpenACCを推奨する理由

■ CPUプログラムの一般的なGPU化手順

1. プログラムのプロファイリング（重い部分を特定する）
2. 重い部分を並列化し、GPU上で実行する
3. CPU-GPU間のデータ転送を最小化する
4. GPU実行部でなお重い場所を最適化する

1,2,3をOpenACCで実装することで、最低限の実装までの工数を減らす。

4の最適化を場合によってはCUDAで行う。OpenACCにはCUDAと組み合わせるためのインターフェースが用意されている。

OpenACCを推奨する理由

- 実アプリをGPU化する場合、データ転送を最小化するためには、結局大部分をGPU化する必要がある
- しかし実アプリ全体をCUDA化するのは非常に工数が掛かるため、まずはOpenACCで全体をGPU化する
 - この時点で性能が十分であれば、GPU化を終了する
- OpenACCで並列化できないループや、OpenACCでは性能が十分ではないループに関して、CUDA化を行う
 - 多くの場合このようなループは、アプリケーションの一部に限られる

以上により、CUDA化と遜色ない性能を少ない工数で達成できる

OpenACC と CUDA の組み合わせ

- host_data指示文を使う : data指示文でCPU・GPUでペアで確保されたデータの、GPU側のアドレスをゲットできる → 後はやりたい放題
- GPU側のアドレスを使いたい例
 - ✓ GPU用のライブラリの呼び出し
 - ✓ CUDA で書かれた関数を呼ぶ
 - ✓ CUDA-aware MPIによる通信 (GPUDirectの利用)

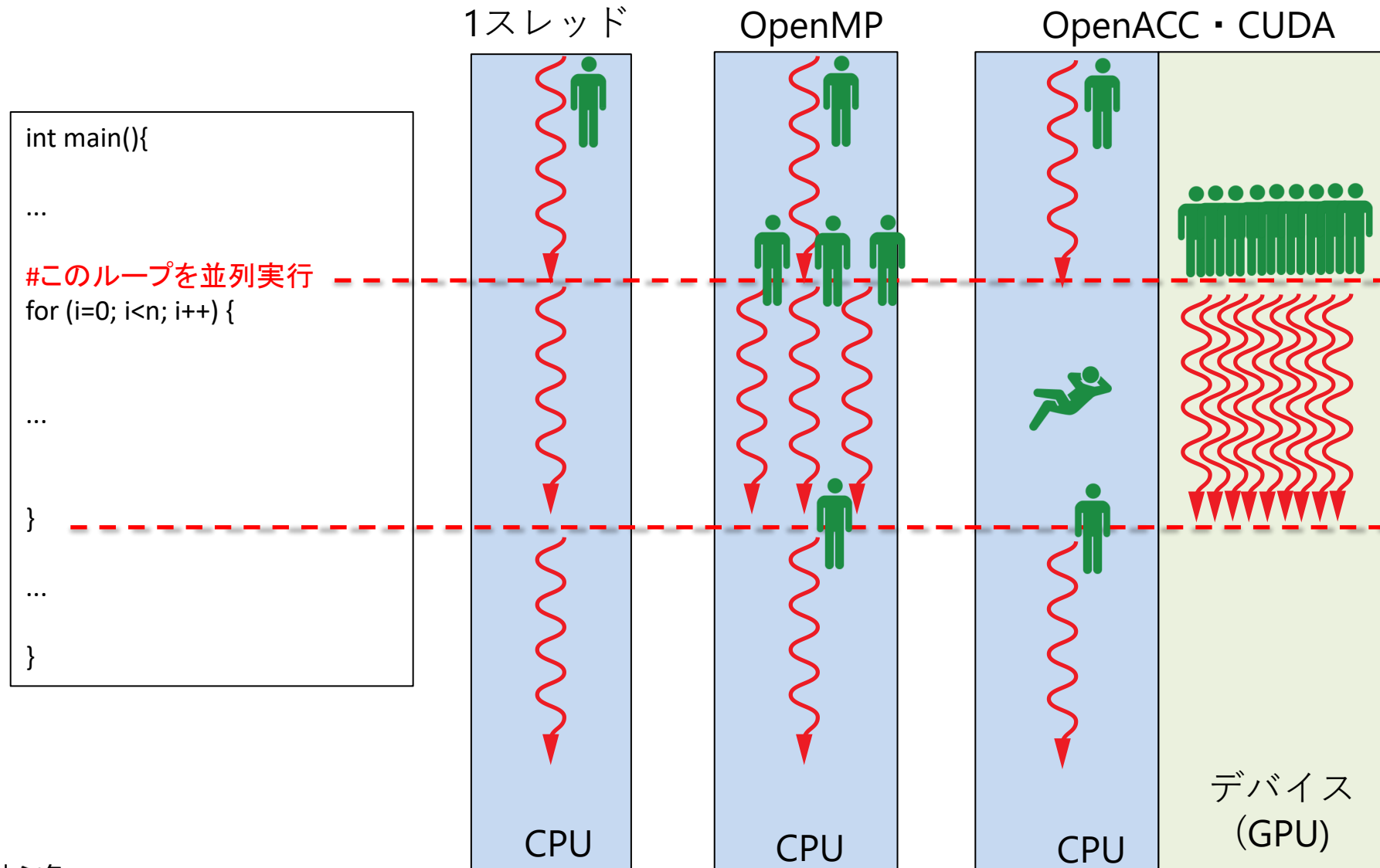
```
...  
#pragma acc data copy(a[0:n])  
{  
...  
#pragma acc host_data use_device(a)  
{  
    cuda_func(a, n)  
}  
...  
}
```

allocate, H->D

host_data 内ではホストコードにも関わらず **a** はデバイス側のアドレスが使われる。

deallocate

OpenACCの実行イメージ



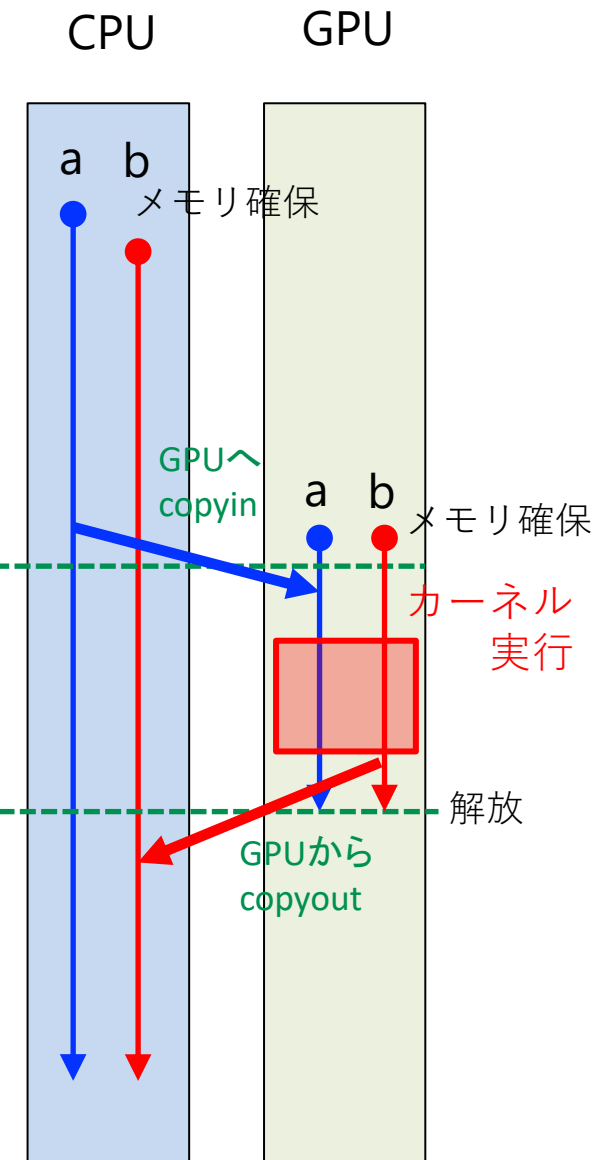
はじめてのOpenACCコード

openacc_hello/01_hello_acc

```
int main(){
    const int n = 1000;
    float *a = malloc(n*sizeof(float));
    float *b = malloc(n*sizeof(float));
    float c = 2.0;
    for (int i=0; i<n; i++) {
        a[i] = 10.0;
    }

    #pragma acc data copyin(a[0:n]), copyout(b[0:n])
    #pragma acc kernels
    #pragma acc loop independent
    for (int i=0; i<n; i++) {
        b[i] = a[i] + c;
    }

    double sum = 0;
    for (int i=0; i<n; i++) {
        sum += b[i];
    }
    fprintf(stdout, "%f¥n", sum/n);
    free(a); free(b);
    return 0;
}
```



はじめてのOpenACCコード

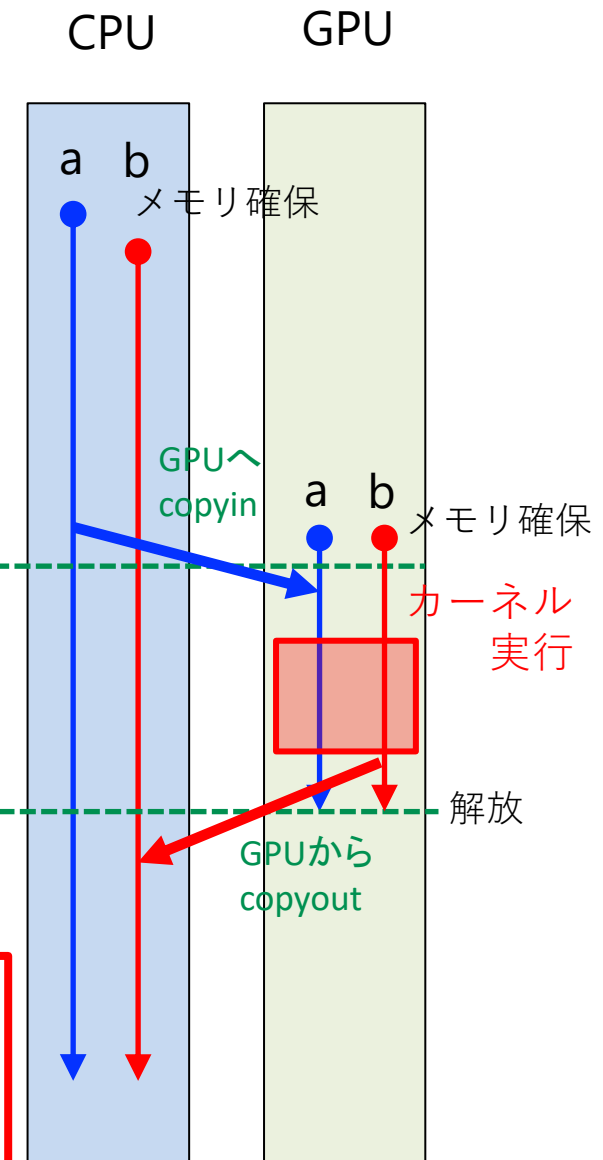
openacc_hello/01_hello_acc

```
int main(){
    const int n = 1000;
    float *a = malloc(n*sizeof(float));
    float *b = malloc(n*sizeof(float));
    float c = 2.0;
    for (int i=0; i<n; i++) {
        a[i] = 10.0;
    }

    #pragma acc data copyin(a[0:n]), copyout(b[0:n])
    #pragma acc kernels
    #pragma acc loop independent
    for (int i=0; i<n; i++) {
        b[i] = a[i] + c;
    }

    double sum = 0;
    for (int i=0; i<n; i++) {
        sum += b[i];
    }
}
```

コード上同じ a, b であっても、原則として
ホストコードはホストメモリで確保された a, b、GPUで実行される
並列領域（カーネル）はデバイスメモリで確保された a, b
を参照しに行く。



OpenACCの主な指示文

- アクセラレータ（GPU）実行領域指定指示文（必須）
 - ✓ `kernels`, `parallel`
- ループ最適化指示文（オプションだがほぼ必須）
 - ✓ `loop`
- データ移動指示文（オプションだがほぼ必須）
 - ✓ `data`, `enter data`, `exit data`, `update`
- その他
 - ✓ `host_data`, `atomic`, `routine`, `declare`

赤字：この講習会で扱うもの

アクセラレータ実行領域の指定

■ kernels 指示文 (必須)

- ✓ 囲まれた領域がアクセラレータで実行されるカーネルに
- ✓ 複数のループネストを囲んだ時、一般にはそれぞれのループネストが別々のカーネルに
 - ✓ 右の例ではカーネルが2つ生成されると思われるが、コンパイラの実装次第であるため、2つに分ける必要があるならkernels指示文を2つ使うべき
- ✓ **推奨**：基本的には、ループネスト一つにつき一つのkernels指示文
- ✓ **注意点**：kernels 指示文終了時に暗黙の**同期 (GPU内のスレッド)** が取られる。
- ✓ 似た指示文として、領域内が一つのカーネルとして生成される parallel 指示文もある

```
int main() {  
  #pragma acc kernels  
  {  
    for (int i=0; i<n; i++) {  
      A[i] = 0;  
    }  
  
    for (int i=0; i<n; i++) {  
      B[i] = 0;  
    }  
  }  
}
```

kernel

ループネストが独立なら、まとめて囲んでも大丈夫。どのように実行されるかはコンパイラ次第。

```
int main() {  
  #pragma acc kernels  
  {  
    for (int i=0; i<n; i++) {  
      A[i] = 0;  
    }  
  }  
  #pragma acc kernels  
  {  
    for (int i=0; i<n; i++) {  
      B[i] = A[i];  
    }  
  }  
}
```

kernel1

kernel2

推奨

ここで同期。つまり kernel1 の終了が保証される。

kernel2 が kernel1 に依存している

openacc_hello/01_hello_acc

```
int main(){
    const int n = 1000;
    float *a = malloc(n*sizeof(float));
    float *b = malloc(n*sizeof(float));
    float c = 2.0;
    for (int i=0; i<n; i++) {
        a[i] = 10.0;
    }
```

```
#pragma acc kernels
    for (int i=0; i<n; i++) {
        b[i] = a[i] + c;
    }
```

```
    double sum = 0;
    for (int i=0; i<n; i++) {
        sum += b[i];
    }
    fprintf(stdout, "%f¥n", sum/n);
    free(a); free(b);
    return 0;
}
```

■ ループのOpenACC 化

1. GPUで実行したいループを kernelsで囲む

kernels直後の{}で囲まれる領域がGPU上で実行される

ループはベストエフォートで並列化される(C言語ではほとんどされない)

必要なデータ転送はベストエフォートで行われる(C言語ではよく失敗する)

openacc_hello/01_hello_acc

```
program main
  implicit none
  ! 変数宣言
  allocate(a(n),b(n))
  c = 2.0

  do i = 1, n
    a(i) = 10.0
  end do
```

!\$acc kernels

```
  do i = 1, n
    b(i) = a(i) + c
  end do
```

!\$acc end kernels

```
  sum = 0.d0
  do i = 1, n
    sum = sum + b(i)
  end do
  print *, sum/n
  deallocate(a,b)
end program main
```

■ ループのOpenACC 化

1. GPUで実行したいループを
kernelsで囲む

Fortranの場合、kernels ~ end kernels の
間がGPUで実行される

ループはベストエフォートで並列化される(Fortranでは概ね成功する)

必要なデータ転送はベストエフォートで行われる(Fortranでは概ね成功する)

ループ指示文による並列化

C

openacc_hello/01_hello_acc

```
int main(){
    const int n = 1000;
    float *a = malloc(n*sizeof(float));
    float *b = malloc(n*sizeof(float));
    float c = 2.0;
    for (int i=0; i<n; i++) {
        a[i] = 10.0;
    }
}
```

```
#pragma acc data copyin(a[0:n]), copyout(b[0:n])
```

```
#pragma acc kernels
```

```
#pragma acc loop independent
```

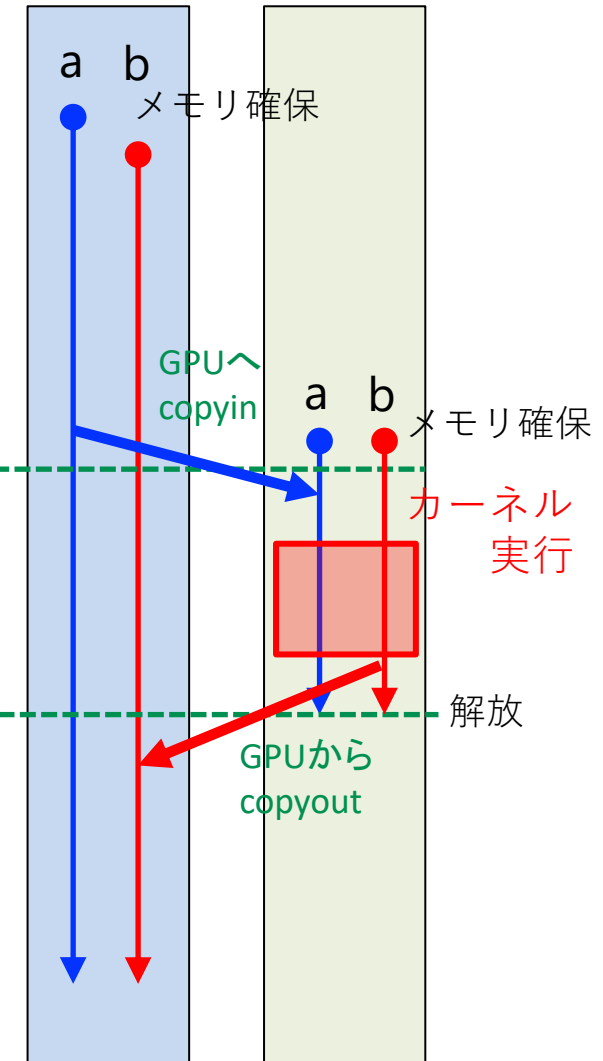
```
for (int i=0; i<n; i++) {
    b[i] = a[i] + c;
}
```

loop指示文

```
double sum = 0;
for (int i=0; i<n; i++) {
    sum += b[i];
}
fprintf(stdout, "%f\n", sum/n);
free(a); free(b);
return 0;
```

CPU

GPU



ループ指示文による並列化

F

openacc_hello/01_hello_acc

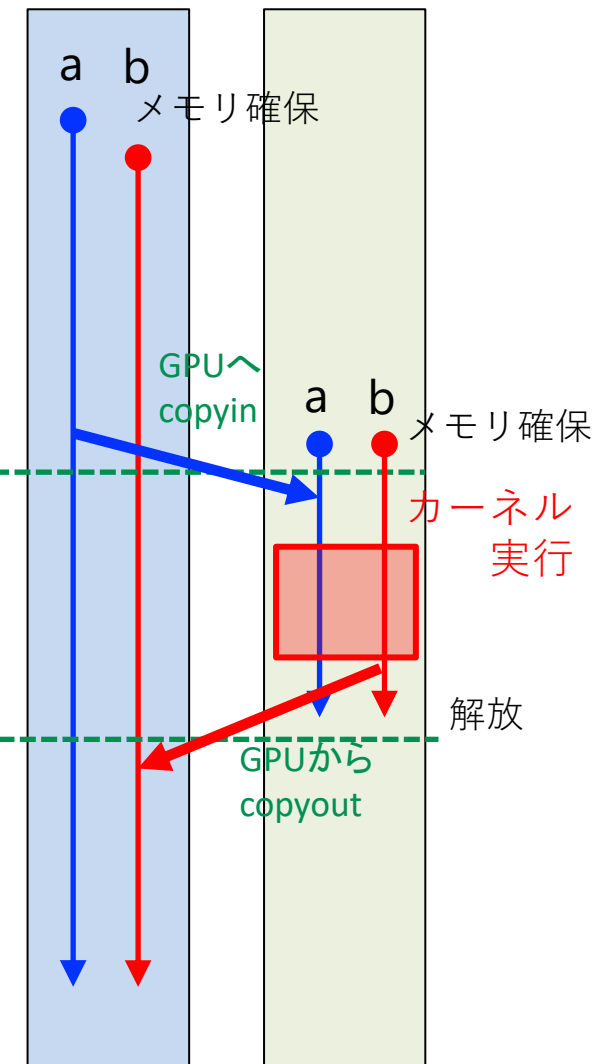
```
program main
  implicit none
  ! 変数宣言
  allocate(a(n),b(n))
  c = 2.0

  do i = 1, n
    a(i) = 10.0
  end do
  !$acc data copyin(a) copyout(b)
  !$acc kernels
  !$acc loop independent
  do i = 1, n
    b(i) = a(i) + c
  end do
  !$acc end kernels
  !$acc end data
  sum = 0.d0
  do i = 1, n
    sum = sum + b(i)
  end do
  print *, sum/n
  deallocate(a,b)
end program main
```

loop指示文

CPU

GPU



ループ最適化指示文

■ loop 指示文（オプションだがほぼ必須）

- ✓ ループの並列化の可否を教える
 - データ独立なループ(independent)
 - リダクションループ (reduction)
 - 並列化すべきでないループ (seq)
- ✓ ループマッピングのパラメータの調整
 - 難しいので、最初は考える必要はない
 - コンパイラがある程度最適な値を決定してくれるので任せていい
 - gang, worker, vector を用いて指定する
 - gang: CUDA で言う thread block 数の指定。グループ単位での処理の分散を行う際に用いる。よほどの玄人以外はgangの数まで指定すべきではない。
 - worker: GPU では使わない
 - vector: CUDA で言う thread block 内の thread 数の指定。グループ内での処理の分散を行う際に用いる。数を指定するなら、1024以下の32の倍数が良い。

ループ指示文指定例

```
#pragma acc kernels
#pragma acc loop independent
for (int i=0; i<n; i++) {
    A[i] = 0;
}
```

データ独立ループ

```
double sum = 0;
#pragma acc kernels
#pragma acc loop reduction(+:sum)
for (int i=0; i<n; i++) {
    sum += A[i];
}
```

リダクションループ

```
double sum = 0;
#pragma acc kernels
#pragma acc loop independent gang
#pragma acc loop independent vector(64)
for (int j=0; j<n; j++) {
    for (int i=0; i<n; i++) {
        sum += A[i];
    }
}
```

多重ループへの
gang, vector適用

データの独立性

■ independent 指示節 により指定

- ✓ ループがデータ独立であることを明示する
- ✓ コンパイラが並列化できないと判断したときに使用する

```
#pragma acc kernels
#pragma acc loop independent
for (int i=0; i<n; i++) {
    b[i] = a[i] + c;
}
```

並列化可能（データ独立）なので、**independent** を指定
（コンパイラは並列化可能とは判断してくれなかった）

✓ データ独立でない（並列化可能でない）例

```
// これは正しくない

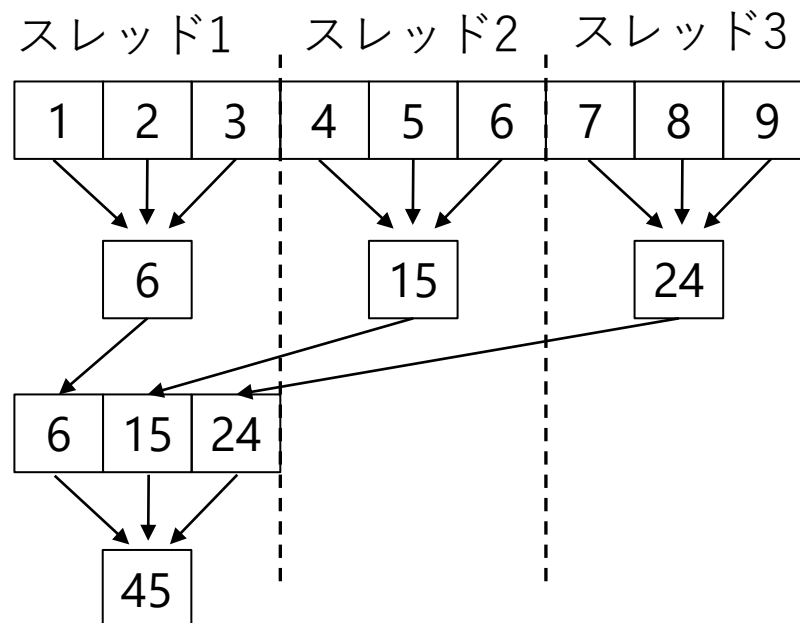
#pragma acc kernels
#pragma acc loop independent
for (int i=1; i<n; i++) {
    d[i] = d[i-1];
}
```

リダクション計算（１）

■ リダクション計算

- ✓ 配列の全要素から一つの値を抽出
- ✓ 総和、総積、最大値、最小値など
- ✓ 出力が一つのため、並列化に工夫が必要（CUDAでの実装は煩雑）

```
double sum = 0.0;  
for (unsigned int i=0; i<n; i++) {  
    sum += array[i];  
}
```



1. 各スレッドが担当する領域をリダクション
2. 一時配列に移動
3. 一時配列をリダクション
4. 出力を得る

リダクション計算（２）

- loop 指示文に reduction 指示節を指定
 - ✓ reduction 演算子と変数を組み合わせて指定

```
double sum = 0.0;
#pragma acc kernels
#pragma acc loop reduction(+:sum)
for (unsigned int i=0; i<n; i++) {
    sum += array[i];
}
```

- Reduction 指示節
 - ✓ acc loop reduction(+:sum)
 - ✓ 演算子と対象とする変数（スカラー変数）を指定する。
- 利用できる主な演算子と初期値
 - ✓ 演算子: +, 初期値: 0
 - ✓ 演算子: *, 初期値: 1
 - ✓ 演算子: max, 初期値: least
 - ✓ 演算子: min, 初期値: largest

openacc_hello/01_hello_acc

```
int main(){
    const int n = 1000;
    float *a = malloc(n*sizeof(float));
    float *b = malloc(n*sizeof(float));
    float c = 2.0;
    for (int i=0; i<n; i++) {
        a[i] = 10.0;
    }
```

#pragma acc kernels

#pragma acc loop independent

```
    for (int i=0; i<n; i++) {
        b[i] = a[i] + c;
    }
```

```
    double sum = 0;
    for (int i=0; i<n; i++) {
        sum += b[i];
    }
    fprintf(stdout, "%f\n", sum/n);
    free(a); free(b);
    return 0;
```

■ ループのOpenACC 化

1. GPUで実行したいループを kernelsで囲む
2. loop independent でループが並列化可能であることを教える

ループが並列化可能と見なされる(並列化可能でないループにindependent を付けると結果が間違う)

必要なデータ転送はベストエフォートで行われる(C言語ではよく失敗する)

openacc_hello/01_hello_acc

```
program main
  implicit none
  ! 変数宣言
  allocate(a(n),b(n))
  c = 2.0
```

```
  do i = 1, n
    a(i) = 10.0
  end do
```

!\$acc kernels

!\$acc loop independent

```
  do i = 1, n
    b(i) = a(i) + c
  end do
```

!\$acc end kernels

```
  sum = 0.d0
  do i = 1, n
    sum = sum + b(i)
  end do
  print *, sum/n
  deallocate(a,b)
end program main
```

■ ループのOpenACC 化

1. GPUで実行したいループを kernelsで囲む
2. loop independent でループが並列化可能であることを教える

ループが並列化可能と見なされる(並列化可能でないループに independent を付けると結果が間違う)

必要なデータ転送はベストエフォートで行われる(Fortranでは概ね成功する)

Kernels指示文の自動データ転送

- kernels 構文に差し掛かると、
 - ✓ OpenACCコンパイラは実行に必要なデータを自動で転送する。
 - 往々にして失敗するため、後述のdata指示文、またはGPUのUnified memory機能を利用すべき
 - ✓ 配列はGPUのメモリに確保され、shared 変数として扱われる。
 - デバイスメモリに動的に確保され、スレッド間で共有。
 - デバイスからホストへコピーすることが可能。
 - C言語の場合特に、配列のサイズがわからないなどで失敗する。
 - 各スレッドでprivateに扱うべき小さな配列は、acc kernels **private(配列名)** とする。
 - ✓ スカラ変数は firstprivate または private 変数として扱われる。
 - ホストからデバイスへコピーが渡され初期化。ホストに戻せない。
 - スカラ変数に関しては、自動転送に任せていい
 - ✓ 構文に差し掛かるたびに転送を行う。data 指示文で制御できる。

■ data 指示文

- ✓ デバイス(GPU)メモリの確保と解放、ホスト(CPU)とデバイス(GPU)間のデータ転送を制御
kernels指示文では、データ転送は自動的に行われる。data指示文でこれを制御することで、不要な転送を避け、性能向上できる
- ✓ CUDA で言うところの cudaMalloc, cudaMemcpy に相当

```
int main(){
    const int n = 1000;
    float *a = malloc(n*sizeof(float));
    float *b = malloc(n*sizeof(float));
    float c = 2.0;
    for (int i=0; i<n; i++) {
        a[i] = 10.0;
    }

    #pragma acc data copyin(a[0:n]), copyout(b[0:n])
    #pragma acc kernels
    #pragma acc loop independent
    for (int i=0; i<n; i++) {
        b[i] = a[i] + c;
    }
```

openacc_hello/01_hello_acc

直後の { のタイミングで、mallocと
CPU -> GPUのデータコピーが行われる

直後の } の終了タイミングで、
GPU -> CPUのデータコピーと
Freeが行われる

■ data 指示文

- ✓ デバイス(GPU)メモリの確保と解放、ホスト(CPU)とデバイス(GPU)間のデータ転送を制御
kernels指示文では、データ転送は自動的に行われる。data指示文でこれを制御することで、不要な転送を避け、性能向上できる
- ✓ CUDA で言うところの cudaMalloc, cudaMemcpy に相当

```
program main
  implicit none
  integer,parameter :: n = 1000
  real(KIND=4),allocatable,dimension(:) :: a,b
  real(KIND=4) :: c
  integer :: i
  real(KIND=8) :: sum
  allocate(a(n),b(n))
  c = 2.0
  do i = 1, n
    a(i) = 10.0
  end do
  !$acc data copyin(a) copyout(b)
  !$acc kernels
  !$acc loop independent
  do i = 1, n
    b(i) = a(i) + c
  end do
  !$acc end kernels
  !$acc end data
```

openacc_hello/01_hello_acc

Fortranでは配列サイズ情報が変数に付随するため(lbound,ubound,sizeなどの組み込み関数をサポートしている)、基本的にサイズを書く必要がない。

data 指示文の指示節

- copy
 - ✓ allocate, memcpy(H->D), memcpy(D->H), deallocate
- copyin
 - ✓ allocate, memcpy(H->D), deallocate
 - ✓ 解放前にホストへデータをコピーしない
- copyout
 - ✓ allocate, memcpy(D->H), deallocate
 - ✓ 確保後にホストからデータをコピーしない
- create
 - ✓ allocate, deallocate
 - ✓ コピーしない
- present
 - ✓ 何もしない。既にデバイス上で確保済みであることを伝える。
- copy/copyin/copyout/create は既にデバイス上確保されているデータに対しては何もしない。
present として振る舞う。（OpenACC2.5以降）

data 指示文の指示節

xxxの選択肢は

copy

copyin

copyout

create

present



```
#pragma acc data XXX(a[0:N])
{

    /* C コード */

}
```



```
if(配列aのペア、a_GPUがGPU上にまだない) {
    if(XXX == copy, copyin, copyout, create){
        a_GPU を GPU上に確保
    }
    if(XXX == copy, copyin){
        a_GPU[0:N] = a[0:N];
    }
    if(XXX == present){
        print(エラー! a はGPU上にありません! );
    }
}
{

    /* C コード */

}
if(上のif文がtrueだった時) {
    if(XXX == copy, copyout){
        a[0:N] = a_GPU[0:N];
    }
    if(XXX == copy, copyin, copyout, create){
        free(a_GPU);
    }
}
```

データの移動範囲の指定

■ ホストとデバイス間でコピーする範囲を指定

- ✓ 部分配列の転送が可能
- ✓ Fortran と C言語で指定方法が異なるので注意

■ 二次元配列A転送する例

- ✓ Fortran: 下限と上限を指定

```
!$acc data copy(A(lower1:upper1, lower2:upper2) )  
...  
!$acc end data
```

- ✓ C言語: 始点とサイズを指定

```
#pragma acc data copy(A[begin1:length1][begin2:length2])  
...
```

Unified Memory

■ Unified Memory とは...

- ✓ 物理的に別物のCPUとGPUのメモリをあたかも一つのメモリのように扱う機能
- ✓ NVIDIA A100 GPUではハードウェアサポート
 - ページフォルトが起こると勝手にマイグレーションしてくれる

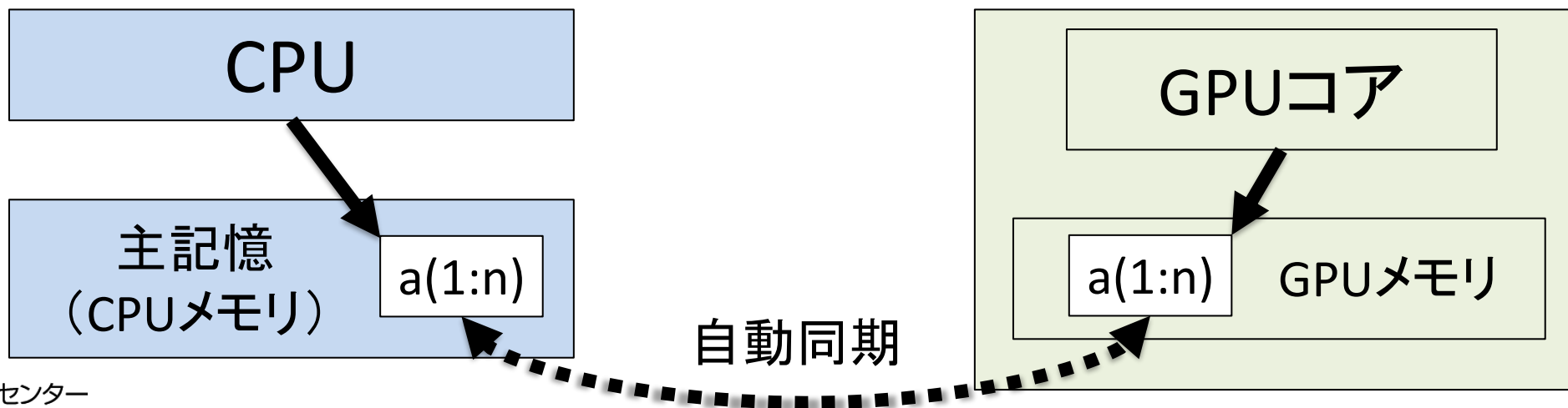
■ OpenACC と Unified Memory

- ✓ OpenACCの仕様にUnified Memoryを直接使う機能はない
 - nvidia コンパイラではオプションを与えることで使える
 - nvfortran -acc -gpu=managed
- ✓ 使うとデータ指示文が無視され、代わりにUnified Memoryを使う
 - ハイエンドのNVIDIA GPU + NVIDIA compilerの環境が揃いさえすれば、データ転送を考える必要がなく非常に楽 (Wisteria環境では利用推奨)
 - data指示文が間違ったOpenACCコードでも正しく動いてしまう
 - Unified memory を使うと、GPU direct というMPIの直接通信機能が使えない
 - CPU側のメモリアロケーションを全部監視してるので、遅くなるケースがある

(発展: Managed MemoryとUnified Memory)

- “真の” Unified Memoryが最近登場
 - ✓ CPUとGPUのメモリをOSのレベルで共通で扱う
 - ✓ データは片方のメモリのみに置き、CPU・GPU双方から直接アクセス
 - ✓ NVIDIA GH200 (Grace-Hopper superchip)では標準装備。他の機種で使うのは厄介
 - ✓ GH200上では、`nvfortran -acc -gpu=unified` で使用可能
- 従来からの Unified Memory Mode は Managed Memory Mode と呼ばれるようになったが、呼び方は混在している

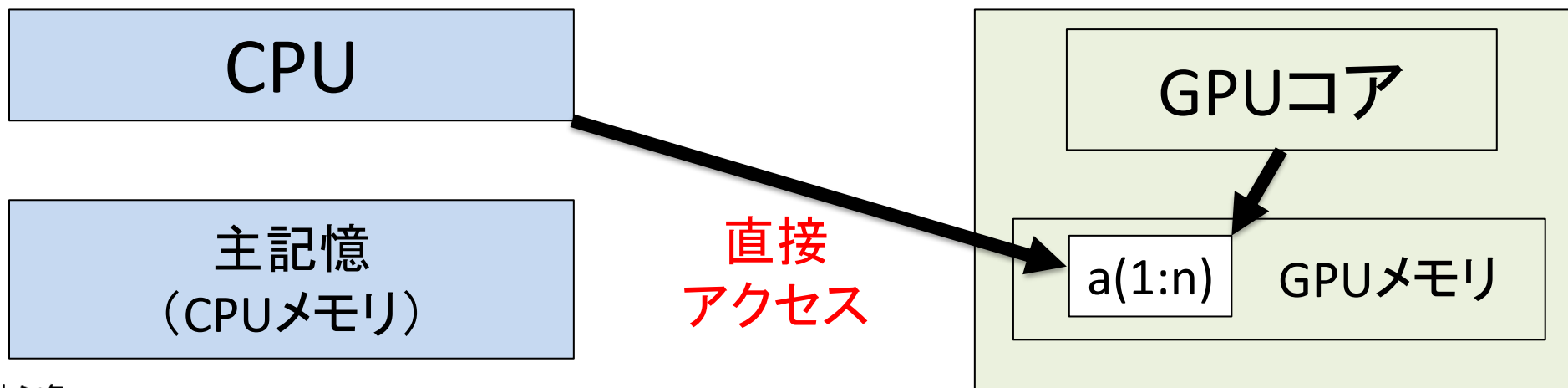
従来からの Unified Memory (最近はManaged Memoryとも呼ばれる)



(発展: Managed MemoryとUnified Memory)

- “真の” Unified Memoryが最近登場
 - ✓ CPUとGPUのメモリをOSのレベルで共通で扱う
 - ✓ データは片方のメモリのみに置き、CPU・GPU双方から直接アクセス
 - ✓ NVIDIA GH200 (Grace-Hopper superchip)では標準装備。他の機種で使うのは厄介
 - ✓ GH200上では、`nvfortran -acc -gpu=unified` で使用可能
- 従来からの Unified Memory Mode は Managed Memory Mode と呼ばれるようにもなったが、呼び方は混在している

新しい Unified Memory (GH200で標準装備)



openacc_hello/01_hello_acc

```
int main(){
    const int n = 1000;
    float *a = malloc(n*sizeof(float));
    float *b = malloc(n*sizeof(float));
    float c = 2.0;
    for (int i=0; i<n; i++) {
        a[i] = 10.0;
    }

    #pragma acc data copyin(a[0:n]), copyout(b[0:n])
    #pragma acc kernels
    #pragma acc loop independent
    for (int i=0; i<n; i++) {
        b[i] = a[i] + c;
    }

    double sum = 0;
    for (int i=0; i<n; i++) {
        sum += b[i];
    }
    fprintf(stdout, "%f¥n", sum/n);
    free(a); free(b);
    return 0;
}
```

■ ループのOpenACC 化

1. GPUで実行したいループを kernelsで囲む
2. loop independent でループが並列化可能であることを教える
3. data 指示文でデータ転送を行う
 - このケースではあまり data 指示文の意味はない。後の最適化で本領発揮。

openacc_hello/01_hello_acc

```
program main
  implicit none
  ! 変数宣言
  allocate(a(n),b(n))
  c = 2.0

  do i = 1, n
    a(i) = 10.0
  end do
  !$acc data copyin(a) copyout(b)
  !$acc kernels
  !$acc loop indepnedent
  do i = 1, n
    b(i) = a(i) + c
  end do
  !$acc end kernels
  !$acc end data
  sum = 0.d0
  do i = 1, n
    sum = sum + b(i)
  end do
  print *, sum/n
  deallocate(a,b)
end program main
```

■ ループのOpenACC 化

1. GPUで実行したいループを kernelsで囲む
2. loop independent でループが並列化可能であることを教える
3. data 指示文でデータ転送を行う
 - このケースではあまり data 指示文の意味はない。後の最適化で本領発揮。

参考：OpenACC 化とCUDA化の比較

```
// OpenACC

void calc(int n, const float *a,
const float *b, float c, float *d)
{
#pragma acc kernels present(a, b, d)
#pragma acc loop independent
  for(int i=0; i<n; i++) {
    d[i] = a[i] + c*b[i];
  }
}

int main()
{
  ...
#pragma acc data copyin(a[0:n], b[0:n]) copyout(d[0:n])
  {
    calc(n, a, b, c, d);
  }
  ...
}
```

kernel

- ✓ **kernels** 指示文でGPUでの実行領域を指定。
- ✓ **loop** 指示文でループの並列化
- ✓ **data** 指示文でデータ転送を制御。

```
// CUDA

__global__
void calc_kernel(int n, const float *a, const float *b, float c, float *d)
{
  const int i = blockIdx.x * blockDim.x + threadIdx.x;

  if (i < n) {
    d[i] = a[i] + c*b[i];
  }
}

void calc(int n, const float *a, const float *b, float c, float *d)
{
  dim3 threads(128);
  dim3 blocks((n + threads.x - 1) / threads.x);

  calc_kernel<<<blocks, threads>>>(n, a, b, c, d);
  cudaThreadSynchronize();
}

int main()
{
  ...

  float *a_d, *b_d, *d_d;
  cudaMalloc(&a_d, n*sizeof(float));
  cudaMalloc(&b_d, n*sizeof(float));
  cudaMalloc(&d_d, n*sizeof(float));

  cudaMemcpy(a_d, a, n*sizeof(float), cudaMemcpyDefault);
  cudaMemcpy(b_d, b, n*sizeof(float), cudaMemcpyDefault);
  cudaMemcpy(d_d, d, n*sizeof(float), cudaMemcpyDefault);

  calc(n, a_d, b_d, c, d_d);

  cudaMemcpy(d, d_d, n*sizeof(float), cudaMemcpyDefault);
  ...
}
```

OpenACCコードのコンパイル

■ NVIDIAコンパイラによるコンパイル

- ✓ WisteriaではOpenACCはNVIDIAコンパイラで利用できます。

```
$ module load nvidia  
$ nvc -O3 -acc -Minfo=accel -gpu=cc80 -c main.c
```

-acc: OpenACCコードであることを指示

-Minfo=accel:

OpenACC指示文からGPUコードが生成できたかどうか等のメッセージを出力する。このメッセージがOpenACC化では大きなヒントになる。

-gpu=cc80:

GPUの種類を指定する。compute capability 8.0 (cc80) のコードを生成する。

■ Makefileでコンパイル

講習会のサンプルコードには Makefile がついているので、コンパイルするためには、単純に下記を実行すれば良い。

```
$ module load nvidia  
$ make
```

簡単なOpenACCコード

■ サンプルコード: openacc_basic/

- ✓ OpenACC指示文 **ernels**, **data**, **loop** を利用したコード
- ✓ 計算内容は簡単な四則演算

C

```
for (unsigned int j=0; j<ny; j++) {  
    for (unsigned int i=0; i<nx; i++) {  
        const int ix = i + j*nx;  
        c[ix] += a[ix] + b[ix];  
    }  
}
```

F

```
do j = 1,ny  
    do i = 1,nx  
        c(i,j) = c(i,j) + a(i,j) + b(i,j)  
    end do  
end do
```

✓ ソースコード

openacc_basic/01_original

CPUコード。

openacc_basic/02_kernels

OpenACCコード。上にkernels指示文のみ追加。

openacc_basic/03_kernels_copy

OpenACCコード。上にcopy指示節追加。

openacc_basic/04_loop

OpenACCコード。上にloop指示文を追加。

openacc_basic/05_data

OpenACCコード。上にdata指示文を明示的に追加。

openacc_basic/06_present

OpenACCコード。上でpresent指示節を使用。

openacc_basic/07_reduction

OpenACCコード。上にreduction指示節を使用。

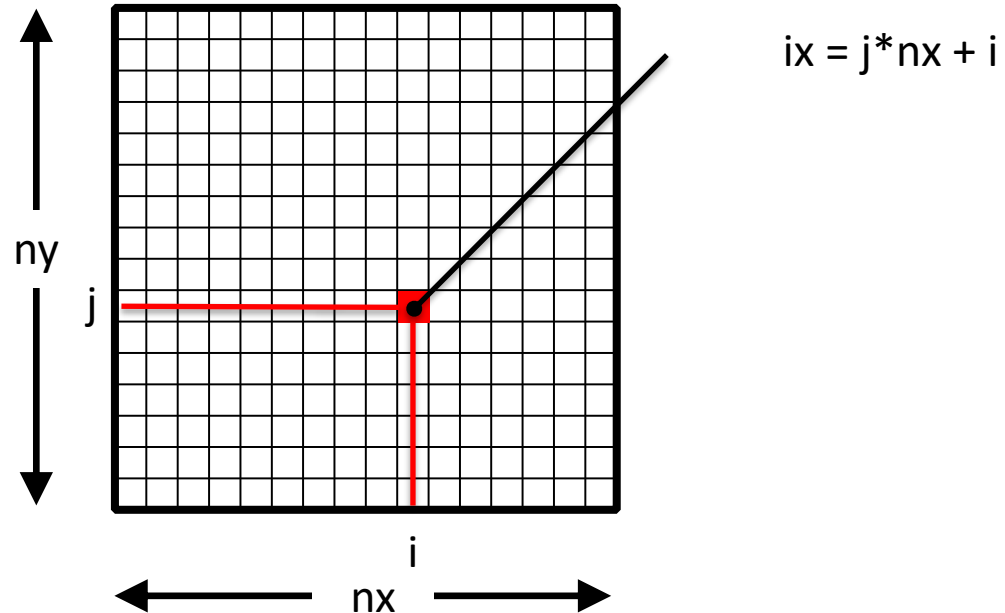
配列のインデックス計算

C

■ サンプルコード: openacc_basic/

- ✓ OpenACC指示文 **ernels**, **data**, **loop** を利用したコード
- ✓ 計算内容は簡単な四則演算

```
void calc(unsigned int nx, unsigned int ny, const float *a, const float *b, float *c){  
    for (unsigned int j=0; j<ny; j++) {  
        for (unsigned int i=0; i<nx; i++) {  
            const int ix = i + j*nx;  
            c[ix] += a[ix] + b[ix];  
        }  
    }  
}
```



■ サンプルコード: openacc_basic/

- ✓ OpenACC指示文 **kernels**, **data**, **loop** を利用したコード
- ✓ 計算内容は簡単な四則演算

```
subroutine calc(nx, ny, a, b, c)
  implicit none
  integer,intent(in) :: nx,ny
  real(KIND=4),dimension(:,:),intent(in) :: a,b
  real(KIND=4),dimension(:,:),intent(out) :: c
  integer :: i,j

  do j = 1,ny
    do i = 1,nx
      c(i,j) = c(i,j) + a(i,j) + b(i,j)
    end do
  end do

end subroutine calc
```

Fortran版では多次元配列を利用

簡単なOpenACC: CPUコード

■ CPUコードのコンパイルと実行

- ✓ 配列の平均値と実行時間が出力されています。

```
$ cd openacc_basic/01_original  
$ make  
$ pjsub ./run.sh  
$ cat run.sh.?????.out  
mean = 3000.00  
Time = 12.105 [sec]
```

? の数字はジョブごとに
変わります。

← 答えは常に3000.0

openacc_basic/01_original

■ 計算内容

- ✓ 配列 a、b、cをそれぞれ 1.0, 2.0, 0.0 で初期化
- ✓ calc関数内で $c += a + b$ を $nt(=1000)$ 回実行。
- ✓ この実行時間を測定

簡単なOpenACC: kernels 指示文 (1)

C**F**

■ 02_kernelsコード: calc関数

✓ CPUコードにkernels 指示文の追加

openacc_basic/02_kernels

C

```
void calc(unsigned int nx, unsigned int ny, const float *a, const float *b, float *c){  
    const unsigned int n = nx * ny;  
    #pragma acc kernels  
    for (unsigned int j=0; j<ny; j++) {  
        for (unsigned int i=0; i<nx; i++) {  
            const int ix = i + j*nx;  
            c[ix] += a[ix] + b[ix];  
        }  
    }  
}
```

F

```
subroutine calc(nx, ny, a, b, c)  
    implicit none  
    integer,intent(in) :: nx,ny  
    real(KIND=4),dimension(:,:),intent(in) :: a,b  
    real(KIND=4),dimension(:,:),intent(out) :: c  
    integer :: i,j  
    !$acc kernels  
    do j = 1,ny  
        do i = 1,nx  
            c(i,j) = c(i,j) + a(i,j) + b(i,j)  
        end do  
    end do  
    !$acc end kernels  
end subroutine calc
```

OpenACC コンパイラは配列 (a, b, c)
を shared 変数として自動で転送し
てくれるはずだが...

簡単なOpenACC: kernels 指示文 (2)

C

F

■ コンパイル

データサイズがわからずコンパイルエラー
C言語では配列サイズの指定がほぼ必須！

C

```
$ make
nvc -O3 -acc -Minfo=accel -ta=tesla,cc80 -c main.c
NVC++-S-0155-Compiler failed to translate accelerator region (see -Minfo messages): Could not find allocated-variable index for
symbol - b (main.c: 11)
calc:
14, Complex loop carried dependence of a->,c->,b-> prevents parallelization
Accelerator serial kernel generated
Generating Tesla code
14, #pragma acc loop seq
15, #pragma acc loop seq
15, Accelerator restriction: size of the GPU copy of c,b,a is unknown
Complex loop carried dependence of a->,c->,b-> prevents parallelization
NVC++-F-0704-Compilation aborted due to previous errors. (main.c)
NVC++/x86-64 Linux 21.3-0: compilation aborted
make: *** [Makefile:33: main.o] エラー 2
```

F

```
$ make
nvfortran -O3 -mp -acc -ta=tesla,cc80 -Minfo=accel -c main.f90
calc:
13, Generating implicit copyin(b(:nx,:ny)) [if not already present]
Generating implicit copy(c(:nx,:ny)) [if not already present]
Generating implicit copyin(a(:nx,:ny)) [if not already present]
14, Loop is parallelizable
15, Loop is parallelizable
Generating Tesla code
14, !$acc loop gang, vector(128) collapse(2) ! blockidx%x threadidx%x
15, ! blockidx%x threadidx%x auto-collapsed
```

データサイズを検知して自動転送
Fortranではサイズ情報が配列に付
随するため

簡単なOpenACC: kernels 指示文 (3)

C

■ 03_kernels_copyコード: calc関数

- ✓ 配列サイズを明示的に指定

openacc_basic/03_kernels_copy

```
void calc(unsigned int nx, unsigned int ny, const float *a, const float *b, float *c){  
    const unsigned int n = nx * ny;  
    #pragma acc kernels copy(a[0:n], b[0:n], c[0:n])  
    for (unsigned int j=0; j<ny; j++) {  
        for (unsigned int i=0; i<nx; i++) {  
            const int ix = i + j*nx;  
            c[ix] += a[ix] + b[ix];  
        }  
    }  
}
```

allocate, H -> D

D->H, deallocate

- ✓ kernels 指示文では data 指示文の指示節が使える
- ✓ 上の場合は、copy を指定
 - ✓ カーネル前後でGPUとCPU間のメモリ転送が行われる。

簡単なOpenACC: kernels 指示文 (4)

C**F**

■ 03_kernels_copyコード:初期化

- ✓ CPUコードにkernels 指示文の追加

openacc_basic/03_kernels_copy

C

```
int main(int argc, char *argv[])
{
    ...
    #pragma acc kernels copyout(b[0:n], c[0:n])
    {
        for (unsigned int i=0; i<n; i++) {
            b[i] = b0;
        }
        for (unsigned int i=0; i<n; i++) {
            c[i] = 0.0;
        }
    }
    ...
}
```

b0 はスカラー変数のため自動的に
各スレッドへコピーが渡される。

F

```
program main
...
!$acc kernels copyout(b,c)
do j = 1,ny
  do i = 1,nx
    b(i,j) = b0
  end do
end do

c(:, :) = 0.0
!$acc end kernels
...
end program
```

Fortranの配列代入形式も使える

簡単なOpenACC: kernels 指示文 (5)

C

■ コンパイル

- ✓ データの独立性がコンパイラにはわからず、並列化されない。

```
$ make
nvc -O3 -acc -Minfo=accel -ta=tesla,cc80 -c main.c
calc:
  11, Generating copy(a[:n],c[:n],b[:n]) [if not already present]
  14, Complex loop carried dependence of a-> prevents parallelization
    Loop carried dependence due to exposed use of c[:n] prevents parallelization
    Complex loop carried dependence of c->,b-> prevents parallelization
    Accelerator serial kernel generated
    Generating Tesla code
    14, #pragma acc loop seq
    15, #pragma acc loop seq
  15, Complex loop carried dependence of a->,c->,b-> prevents parallelization
    Loop carried dependence due to exposed use of c[:i1+n] prevents parallelization
main:
  44, Generating copyout(c[:16777216],b[:16777216]) [if not already present]
  45, Loop is parallelizable
    Generating Tesla code
    45, #pragma acc loop gang, vector(128) /* blockIdx.x threadIdx.x */
  48, Loop is parallelizable
    Generating Tesla code
    48, #pragma acc loop gang, vector(128) /* blockIdx.x threadIdx.x */
```

■ コンパイル

- ✓ データの独立性を見切り、並列化。

```
nvfortran -O3 -mp -acc -ta=tesla,cc80 -Minfo=accel -c main.f90
calc:
  13, Generating copyin(a(:,,:)) [if not already present]
      Generating copyout(c(:,,:)) [if not already present]
      Generating copyin(b(:,,:)) [if not already present]
  14, Loop is parallelizable
  15, Loop is parallelizable
      Generating Tesla code
      14, !$acc loop gang, vector(128) collapse(2) ! blockidx%x threadidx%x
      15, ! blockidx%x threadidx%x auto-collapsed
main:
  61, Generating copyout(b(:,,:),c(:,,:)) [if not already present]
  62, Loop is parallelizable
  63, Loop is parallelizable
      Generating Tesla code
      62, !$acc loop gang, vector(128) collapse(2) ! blockidx%x threadidx%x
      63, ! blockidx%x threadidx%x auto-collapsed
  68, Loop is parallelizable
      Generating Tesla code
      68, ! blockidx%x threadidx%x auto-collapsed
      !$acc loop gang, vector(128) collapse(2) ! blockidx%x threadidx%x
```

Tips: なぜデータの独立性を見切れないか

■ エイリアス（変数の別名）

✓ 主にポインタの利用

- 右は一見データ独立でも...
- `foo(&a[0], &a[1])` のような呼び出しをすればデータ独立でない！

これってデータ独立？

```
void foo(float *a, float *b){  
    for (int i=0; i<N; i++)  
        b[i] = a[i];  
}
```

■ 不明瞭な書き込み参照先

✓ インデックス計算

- 計算結果がループ変数に対して独立かどうかわからない
- Fortranでも、多次元配列を一次元化すると起こる
- 逆にCでも、多次元配列を使えば独立性を見切れる

インデックス計算

```
for (int i=0; i<N; i++){  
    j = i % 10;  
    b[j] = a[i];  
}
```

間接参照

```
for (int i=0; i<N; i++){  
    b[idx[i]] = a[i];  
}
```

✓ 間接参照

簡単なOpenACC: loop 指示文 (1)

C

■ 04_loopコード

- ✓ 03_kernelsコードにloop independent の追加

openacc_basic/04_loop

```
void calc(unsigned int nx, unsigned int ny, const float *a, const float *b, float *c){
    const unsigned int n = nx * ny;
    #pragma acc kernels copy(a[0:n], b[0:n], c[0:n])
    #pragma acc loop independent
    for (unsigned int j=0; j<ny; j++) {
        #pragma acc loop independent
        for (unsigned int i=0; i<nx; i++) {
            const int ix = i + j*nx;
            c[ix] += a[ix] + b[ix];
        }
    }
}
```

```
// main 関数内
#pragma acc kernels copyout(b[0:n], c[0:n])
{
    #pragma acc loop independent
    for (unsigned int i=0; i<n; i++) {
        b[i] = b0;
    }
    #pragma acc loop independent
    for (unsigned int i=0; i<n; i++) {
        c[i] = 0.0;
    }
}
```

簡単なOpenACC: loop 指示文 (1)

■ 04_loopコード

- ✓ 03_kernelsコードに**loop independent** の追加

openacc_basic/04_loop

```
subroutine calc(nx, ny, a, b, c)
...
!$acc kernels copyin(a,b) copyout(c)
!$acc loop independent
  do j = 1,ny
!$acc loop independent
    do i = 1,nx
      c(i,j) = a(i,j) + b(i,j)
    end do
  end do
!$acc end kernels
end subroutine
```

```
! main 関数内
!$acc kernels copyout(b,c)
!$acc loop independent
  do j = 1,ny
!$acc loop independent
    do i = 1,nx
      b(i,j) = b0
    end do
  end do

  c(:, :) = 0.0
!$acc end kernels
```

各次元についてloop指示文を指定する
(並列サイズなどを指定したいなど)場合、
do文で書き下す必要がある。

簡単なOpenACC: loop 指示文 (2)

C

■ コンパイル

openacc_basic/04_loop

- ✓ ループが並列化され、カーネルが生成された。

```
$ make
nvc -O3 -acc -Minfo=accel -ta=tesla,cc80 -c main.c
calc:
  11, Generating copy(a[:n],c[:n],b[:n]) [if not already present]
  15, Loop is parallelizable
  17, Loop is parallelizable
    Generating Tesla code
    15, #pragma acc loop gang, vector(128) collapse(2) /* blockIdx.x threadIdx.x */
    17, /* blockIdx.x threadIdx.x auto-collapsed */
main:
  46, Generating copyout(c[:16777216],b[:16777216]) [if not already present]
  48, Loop is parallelizable
    Generating Tesla code
    48, #pragma acc loop gang, vector(128) /* blockIdx.x threadIdx.x */
  52, Loop is parallelizable
    Generating Tesla code
    52, #pragma acc loop gang, vector(128) /* blockIdx.x threadIdx.x */
```

※Fortran版は既に並列化されていたため省略。loop independent をつける事による挙動の変化はない。

簡単なOpenACC: loop 指示文 (3)

■ 04_loopコードの実行

openacc_basic/04_loop

- ✓ 答えは正しいが、実行時間が大変長い。

```
$ pjsub ./run.sh
$ cat run.sh.?????.out
mean = 3000.00
Time = 42.990 [sec]
```

- ✓ ソースコードをみると、calc関数でカーネル前後にGPUとCPU間のデータ転送が発生する。これが性能低下させている。

```
void calc(unsigned int nx, unsigned int ny, const float *a, const float *b, float *c){
    const unsigned int n = nx * ny;
    #pragma acc kernels copy(a[0:n], b[0:n], c[0:n])
    #pragma acc loop independent
    for (unsigned int j=0; j<ny; j++) {
        #pragma acc loop independent
        for (unsigned int i=0; i<nx; i++) {
            const int ix = i + j*nx;
            c[ix] += a[ix] + b[ix];
        }
    }
}
```

allocate, H -> D

D->H, deallocate

簡単なOpenACC: data指示文 (1)

C

■ 05_dataコード

✓ 04_loopにdata指示文追加

openacc_basic/05_data

```
// main関数内
#pragma acc data copyin(a[0:n]) create(b[0:n]) copyout(c[0:n])
{
    #pragma acc kernels copyout(b[0:n], c[0:n])
    {
        #pragma acc loop independent
        for (unsigned int i=0; i<n; i++) {
            b[i] = b0;
        }
        #pragma acc loop independent
        for (unsigned int i=0; i<n; i++) {
            c[i] = 0.0;
        }
    }

    for (unsigned int icnt=0; icnt<nt; icnt++) {
        calc(nx, ny, a, b, c);
    }
}
```

a: allocate, H -> D
b: allocate
c: allocate

present として振舞う。

a: deallocate
b: deallocate
c: D->H, deallocate

✓ copy/copyin/copyout/create は既にデバイス上確保されているデータに対しては何もしない。present として振舞う。(OpenACC2.5以降)

✓ 配列 a, b, c は利用用途に合わせた指示節を指定。

簡単なOpenACC: data指示文 (1)

F

■ 05_dataコード

✓ 04_loopにdata指示文追加

openacc_basic/05_data

```
! main関数内
!$acc data copyin(a) create(b) copyout(c)
!$acc kernels copyout(b,c)
!$acc loop independent
do j = 1,ny
!$acc loop independent
  do i = 1,nx
    b(i,j) = b0
  end do
end do

c(:, :) = 0.0
!$acc end kernels

do icnt = 1,nt
  call calc(nx, ny, a, b, c)
end do

!$acc end data
```

← a: allocate, H -> D
b: allocate
c: allocate

present として振舞う。

a: deallocate
b: deallocate
← c: D->H, deallocate

- ✓ copy/copyin/copyout/create は既にデバイス上確保されているデータに対しては何もしない。present として振舞う。（OpenACC2.5以降）
- ✓ 配列 a, b, c は利用用途に合わせた指示節を指定。

簡単なOpenACC: data指示文 (2)

■ 05_dataコードの実行

- ✓ 答えは正しく、速度が上がった。

openacc_basic/05_data

```
$ pjsub ./run.sh  
$ cat run.sh.?????.out  
mean = 3000.00  
Time = 0.376 [sec]
```

簡単なOpenACC: present指示節

■ 06_presentコード

✓ 05_dataコードで present 指示節を使用

openacc_basic/06_present

C

```
void calc(unsigned int nx, unsigned int ny, const float *a, const float *b, float *c){  
    const unsigned int n = nx * ny;  
    #pragma acc kernels present(a, b, c)  
    #pragma acc loop independent  
    for (unsigned int j=0; j<ny; j++) {  
        #pragma acc loop independent  
        for (unsigned int i=0; i<nx; i++) {  
            const int ix = i + j*nx;  
            c[ix] += a[ix] + b[ix];  
        }  
    }  
}
```

present へ変更

F

```
subroutine calc(nx, ny, a, b, c)  
    ...  
    !$acc kernels present(a, b, c)  
    !$acc loop independent  
    do j = 1,ny  
        !$acc loop independent  
        do i = 1,nx  
            c(i,j) = c(i,j) + a(i,j) + b(i,j)  
        end do  
    end do  
    !$acc end kernels  
end subroutine
```

- ◆ データ転送の振る舞いは変化しないため、性能変化はなし。
- ◆ present ではメモリ確保、データ転送をしないため、配列サイズの指定は不要。
- ◆ コードとしては見通しがよい。

簡単なOpenACC: reduction指示節 (1)

C

■ 07_reductionコード

- ✓ 総和計算部分もreductionを使いGPU化

openacc_basic/07_reduction

```
// main 関数内
for (unsigned int icnt=0; icnt<nt; icnt++) {
    calc(nx, ny, a, b, c);
}

#pragma acc kernels
#pragma acc loop reduction(+:sum)
for (unsigned int i=0; i<n; i++) {
    sum += c[i];
}
```

- ✓ data 指示文の範囲を総和計算部分にも広げ、配列c を create に変更。

■ 07_reductionコード

- ✓ リダクションコードが生成された。

```
$ make
nvc -O3 -acc -Minfo=accel -ta=tesla,cc80 -c main.c
(省略)
main:
(省略)
67, Loop is parallelizable
Generating Tesla code
67, #pragma acc loop gang, vector(128) /* blockIdx.x threadIdx.x */
Generating reduction(+:sum)
```

簡単なOpenACC: reduction指示節 (1)

F

■ 07_reductionコード

- ✓ 06_presentコードで reductionを使用

openacc_basic/07_reduction

```
sum = 0
!$acc kernels present(c)
!$acc loop reduction(+:sum)
do j = 1,ny
!$acc loop reduction(+:sum)
  do i = 1,nx
    sum = sum + c(i,j)
  end do
end do
!$acc end kernels
```

並列ループ毎にreduction

- ✓ data 指示文で c を create に変更。

■ 07_reductionコード

- ✓ リダクションコードが生成された。

```
$ make
nvfortran -O3 -mp -acc -ta=tesla,cc80 -Minfo=accel -c main.f90
(省略)
main:
(省略)
86, Loop is parallelizable
Generating Tesla code
84, !$acc loop gang, vector(128) collapse(2) ! blockidx%x threadidx%x
Generating reduction(+:sum)
86, ! blockidx%x threadidx%x auto-collapsed
```

簡単なOpenACC: reduction指示節（2）

■ 07_reductionコードの実行

- ✓ 答えは正しく、速度が上がった。
- ✓ 配列 c の転送が削減されたこと、リダクションがGPU上で行われることによる性能向上。

openacc_basic/07_reduction

```
$ pjsub ./run.sh  
$ cat run.sh.?????.out  
mean = 3000.00  
Time = 0.353 [sec]
```

OpenACC化のステップのまとめ

- OpenACC化のための3つの指示文の適用
 - ✓ **kernels** 指示文を用いてGPUで実行する領域を指定
 - ✓ **data** 指示文を用い、ホスト-デバイス 間の通信を最適化
 - ✓ **loop** 指示文を用い、並列処理の指定

```
#pragma acc data copyin(a[0:n]) create(b[0:n], c[0:n])
{
    #pragma acc kernels
    {
        #pragma acc loop independent
        for (unsigned int i=0; i<n; i++) {
            b[i] = b0;
        }
        #pragma acc loop independent
        for (unsigned int i=0; i<n; i++) {
            c[i] = 0.0;
        }
    }

    for (unsigned int icnt=0; icnt<nt; icnt++) {
        calc(nx, ny, a, b, c);
    }

    #pragma acc kernels
    #pragma acc loop reduction(+:sum)
    for (unsigned int i=0; i<n; i++) {
        sum += c[i];
    }
}
```

openacc_basic/07_reduction

OpenACC化のステップのまとめ

- OpenACC化のための3つの指示文の適用
 - ✓ **kernels** 指示文を用いてGPUで実行する領域を指定
 - ✓ **data** 指示文を用い、ホスト-デバイス間の通信を最適化
 - ✓ **loop** 指示文を用い、並列処理の指定

```
!$acc data copyin(a) create(b,c)
!$acc kernels present(b,c)
!$acc loop independent
do j = 1,ny
!$acc loop independent
do i = 1,nx
b(i,j) = b0
end do
end do

c(:, :) = 0.0
!$acc end kernels

do icnt = 1,nt
call calc(nx, ny, a, b, c)
end do

!続く
```

```
!続き

sum = 0
!$acc kernels present(c)
!$acc loop reduction(+:sum)
do j = 1,ny
!$acc loop reduction(+:sum)
do i = 1,nx
sum = sum + c(i,j)
end do
end do
!$acc end kernels
!$acc end data
```

openacc_basic/07_reduction

OPENACC入門実習

- 3次元拡散方程式のOpenACC化
 - ✓ サンプルコード : [openacc_diffusion/01_original](#)
- 3次元拡散方程式のCPUコードにOpenACC の **kernels**, **data**, **loop** 指示文を追加し、GPUで高性能で実行しましょう。

```
for(int k = 0; k < nz; k++) {  
  for (int j = 0; j < ny; j++) {  
    for (int i = 0; i < nx; i++) {  
      const int ix = nx*ny*k + nx*j + i;  
      const int ip = i == nx - 1 ? ix : ix + 1;  
      const int im = i == 0 ? ix : ix - 1;  
      const int jp = j == ny - 1 ? ix : ix + nx;  
      const int jm = j == 0 ? ix : ix - nx;  
      const int kp = k == nz - 1 ? ix : ix + nx*ny;  
      const int km = k == 0 ? ix : ix - nx*ny;  
  
      fn[ix] = cc*f[ix]  
        + ce*f[ip] + cw*f[im]  
        + cn*f[jp] + cs*f[jm]  
        + ct*f[kp] + cb*f[km];  
    }  
  }  
}
```

diffusion.c, diffusion3d 関数内

[openacc_diffusion/01_original](#)

- 3次元拡散方程式のOpenACC化
 - ✓ サンプルコード : [openacc_diffusion/01_original](#)
- 3次元拡散方程式のCPUコードにOpenACC の **kernels**, **data**, **loop** 指示文を追加し、GPUで高性能で実行しましょう。

```
do k = 1, nz
  do j = 1, ny
    do i = 1, nx

      w = -1; e = 1; n = -1; s = 1; b = -1; t = 1;
      if(i == 1) w = 0
      if(i == nx) e = 0
      if(j == 1) n = 0
      if(j == ny) s = 0
      if(k == 1) b = 0
      if(k == nz) t = 0
      fn(i,j,k) = cc * f(i,j,k) + cw * f(i+w,j,k) &
        + ce * f(i+e,j,k) + cs * f(i,j+s,k) + cn * f(i,j+n,k) &
        + cb * f(i,j,k+b) + ct * f(i,j,k+t)

    end do
  end do
end do
```

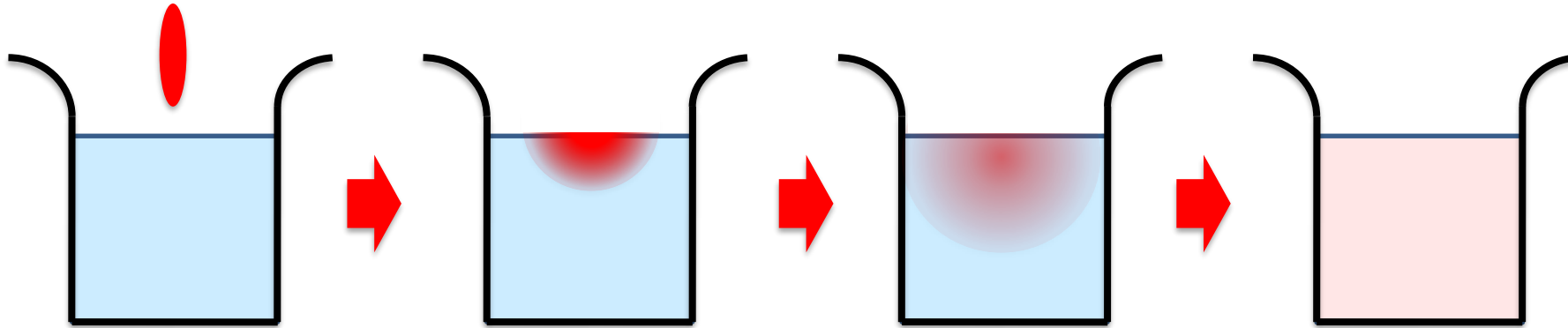
diffusion.f90, diffusion3d 関数内

[openacc_diffusion/01_original](#)

拡散現象シミュレーション（１）

■ 拡散現象

- ✓ コップの中に赤インクを落とすと水中で拡がる
- ✓ 次第に拡散し赤インクは拡がり、最後は均一な色になる。



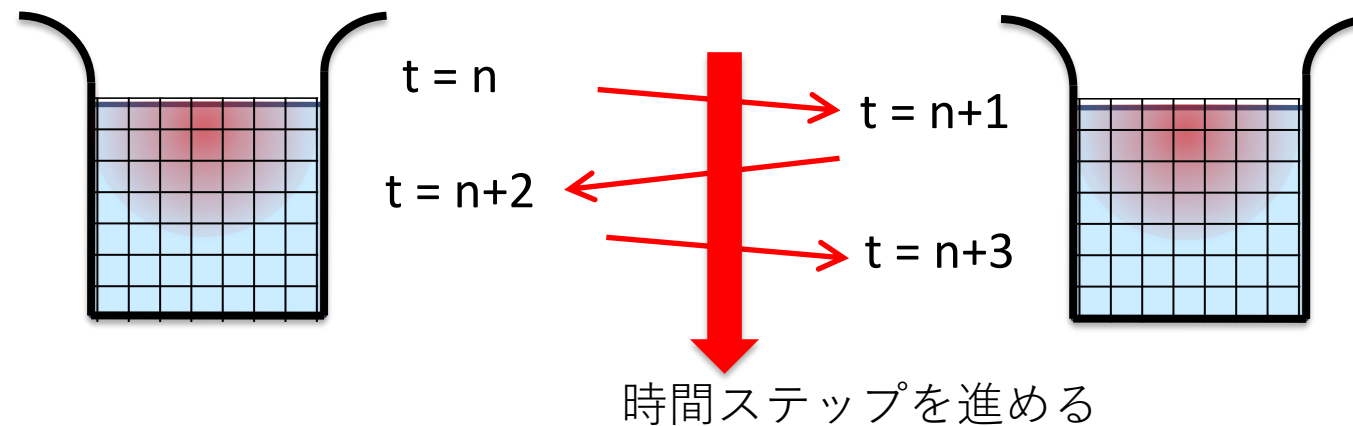
■ 拡散方程式のシミュレーション

- ✓ 各点のインク濃度の時間変化を計算する

拡散現象シミュレーション（２）

■ データ構造

- ✓ 計算したい空間を格子に区切り、一般に配列で表す。
- ✓ 計算は3次元であるが、C言語では1次元配列として確保することが一般的。
- ✓ 2ステップ分の配列を使い、タイムステップを進める（ダブルバッファ）。



■ サンプルコードは、

- ✓ 計算領域: $n_x * n_y * n_z$ (3次元)
 - ✓ 最大タイムステップ: nt
- となっている。

拡散現象シミュレーション（3）

■ 2次元拡散方程式の離散化の一例

$$f_{i,j}^{n+1} = (f_{i-1,j}^n + f_{i+1,j}^n + f_{i,j-1}^n + f_{i,j+1}^n + 4f_{i,j}^n) / 8$$

平均後の
自分自身の値

上下左右の値

自分自身の値の4倍

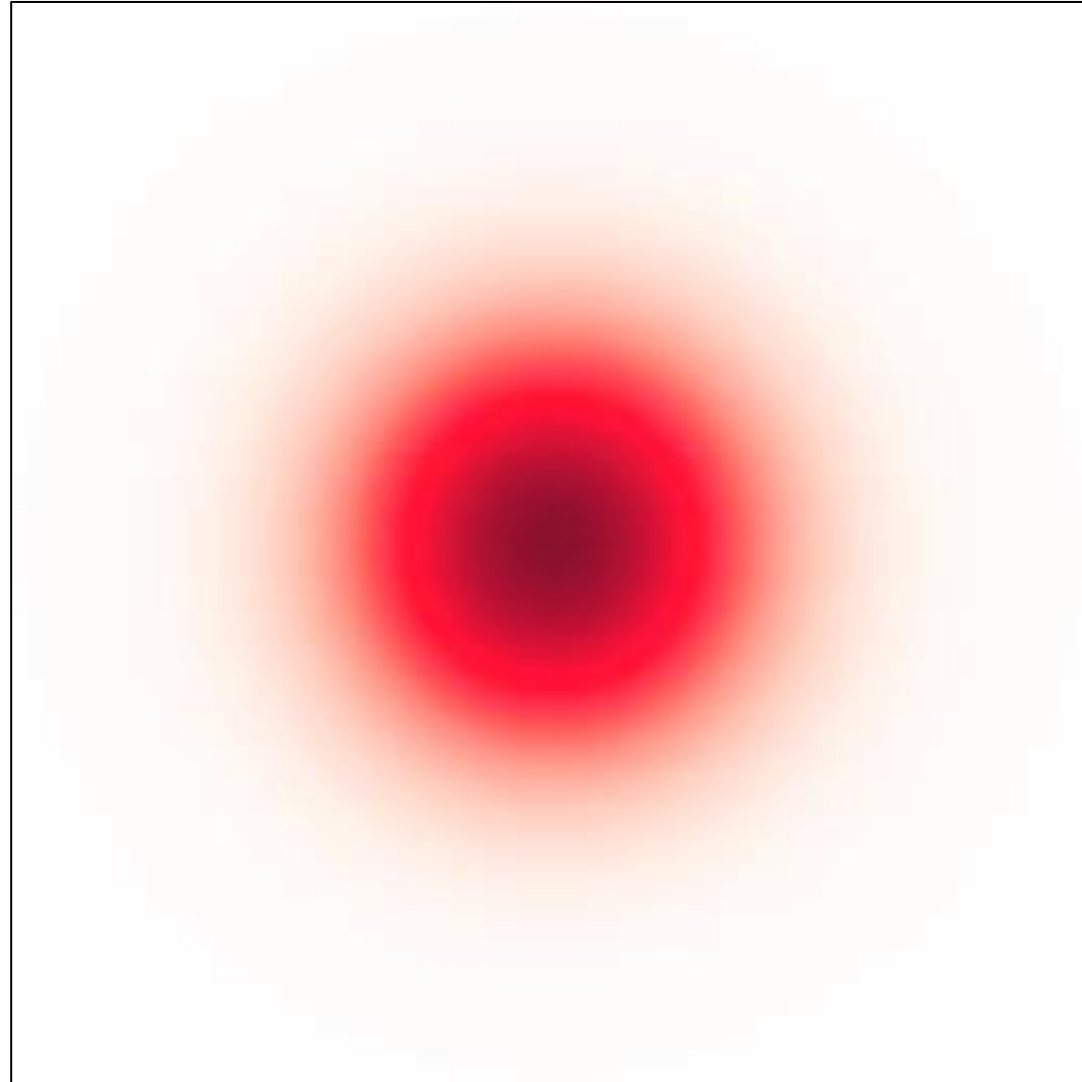
1	0	0	1	0	0
2	0	2	8	2	0
3	1	8	20	8	1
4	0	2	8	2	0
5	0	0	1	0	0
	1	2	3	4	5

2回目の平均後

繰り返し平均化を行うと、
インクが拡散します。

拡散現象シミュレーション（４）

■ 2次元拡散方程式の計算例



CPUコード

■ CPUコードのコンパイルと実行

```
$ cd openacc_diffusion/01_original
$ make
$ pjsub ./run.sh
# cat run.sh.?????.out
time( 0) = 0.00000
time(100) = 0.00610
time(200) = 0.01221
...
time(1000) = 0.06104
time(1100) = 0.06714
time(1200) = 0.07324
time(1300) = 0.07935
time(1400) = 0.08545
time(1500) = 0.09155
time(1600) = 0.09766
Time = 8.677 [sec]
Performance= 5.15 [GFlops]
Error[128][128][128] = 4.556413e-06
```

← 実行性能
← 解析解との誤差

■ OpenACCコードでは、どのくらいの実行性能が達成できるでしょうか？

OpenACC化(0): Makefile の修正

- Makefile に OpenACC をコンパイルするよう `-acc` などを追加しましょう

C

```
CC = nvc
CXX = nvc++
GCC = gcc
RM = rm -f
MAKEDEPEND = makedepend

CFLAGS = -O3 -acc -Minfo=accel -gpu=cc80
GFLAGS = -Wall -O3 -std=c99
CXXFLAGS = $(CFLAGS)
LDFLAGS =
...
```

F

```
F90 = nvfortran
RM = rm -f

FFLAGS = -O3 -mp -acc -gpu=cc80 -Minfo=accel
...
```

■ diffusion3d関数に kernelsを追加しましょう

```
#pragma acc kernels copyin(f[0:nx*ny*nz]) copyout(fn[0:nx*ny*nz])
for(int k = 0; k < nz; k++) {
    for (int j = 0; j < ny; j++) {
        for (int i = 0; i < nx; i++) {
            const int ix = nx*ny*k + nx*j + i;
            const int ip = i == nx - 1 ? ix : ix + 1;
            const int im = i == 0 ? ix : ix - 1;
            const int jp = j == ny - 1 ? ix : ix + nx;
            const int jm = j == 0 ? ix : ix - nx;
            const int kp = k == nz - 1 ? ix : ix + nx*ny;
            const int km = k == 0 ? ix : ix - nx*ny;

            fn[ix] = cc*f[ix]
                + ce*f[ip] + cw*f[im]
                + cn*f[jp] + cs*f[jm]
                + ct*f[kp] + cb*f[km];
        }
    }
}

return (double)(nx*ny*nz)*13.0;
}
```

diffusion.c, diffusion3d 関数内

make して実行してみましょう。

- diffusion3d関数に kernelsを追加しましょう

```
!$acc kernels copyin(f) copyout(fn)
do k = 1, nz
  do j = 1, ny
    do i = 1, nx

      w = -1; e = 1; n = -1; s = 1; b = -1; t = 1;
      if(i == 1) w = 0
      if(i == nx) e = 0
      if(j == 1) n = 0
      if(j == ny) s = 0
      if(k == 1) b = 0
      if(k == nz) t = 0
      fn(i,j,k) = cc * f(i,j,k) + cw * f(i+w,j,k) &
        + ce * f(i+e,j,k) + cs * f(i,j+s,k) + cn * f(i,j+n,k) &
        + cb * f(i,j,k+b) + ct * f(i,j,k+t)

    end do
  end do
end do
!$acc end kernels
```

diffusion.f90, diffusion3d 関数内

make して実行してみましょう。

OpenACC化(2): loop

C

■ diffusion3d関数に loopを追加しましょう

```
#pragma acc kernels copyin(f[0:nx*ny*nz]) copyout(fn[0:nx*ny*nz])
#pragma acc loop independent
for(int k = 0; k < nz; k++) {
#pragma acc loop independent
for (int j = 0; j < ny; j++) {
#pragma acc loop independent
for (int i = 0; i < nx; i++) {
    const int ix = nx*ny*k + nx*j + i;
    const int ip = i == nx - 1 ? ix : ix + 1;
    const int im = i == 0 ? ix : ix - 1;
    const int jp = j == ny - 1 ? ix : ix + nx;
    const int jm = j == 0 ? ix : ix - nx;
    const int kp = k == nz - 1 ? ix : ix + nx*ny;
    const int km = k == 0 ? ix : ix - nx*ny;

    fn[ix] = cc*f[ix]
        + ce*f[ip] + cw*f[im]
        + cn*f[jp] + cs*f[jm]
        + ct*f[kp] + cb*f[km];
    }
}
}

return (double)(nx*ny*nz)*13.0;
}
```

diffusion.c, diffusion3d 関数内

高速化よりも、まずは正しい計算を行うコードを保つことが大事です。
末端の関数から修正を進めます。

make してジョブ投入 pjsub ./run.sh してみましょう。遅いですが実行できます。

OpenACC化(2): loop

- diffusion3d関数に loopを追加しましょう

```
!$acc kernels copyin(f) copyout(fn)
!$acc loop independent
do k = 1, nz
!$acc loop independent
do j = 1, ny
!$acc loop independent
do i = 1, nx

    w = -1; e = 1; n = -1; s = 1; b = -1; t = 1;
    if(i == 1) w = 0
    if(i == nx) e = 0
    if(j == 1) n = 0
    if(j == ny) s = 0
    if(k == 1) b = 0
    if(k == nz) t = 0
    fn(i,j,k) = cc * f(i,j,k) + cw * f(i+w,j,k) &
        + ce * f(i+e,j,k) + cs * f(i,j+s,k) + cn * f(i,j+n,k) &
        + cb * f(i,j,k+b) + ct * f(i,j,k+t)

end do
end do
end do
!$acc end kernels
```

diffusion.f90, diffusion3d 関数内

高速化よりも、まずは正しい計算を行うコードを保つことが大事です。末端の関数から修正を進めます。

make してジョブ投入 pjsub ./run.sh してみましょう。遅いですが実行できます。

OpenACC化(3): データ転送の最適化(1)

C

- diffusion3d関数で present とし、main関数で data を追加

```
#pragma acc kernels present(f, fn)
#pragma acc loop independent
for(int k = 0; k < nz; k++) {
#pragma acc loop independent
  for (int j = 0; j < ny; j++) {
#pragma acc loop independent
    for (int i = 0; i < nx; i++) {
      const int ix = nx*ny*k + nx*j + i;
      const int ip = i == nx - 1 ? ix : ix + 1;
      const int im = i == 0 ? ix : ix - 1;
      const int jp = j == ny - 1 ? ix : ix + nx;
      const int jm = j == 0 ? ix : ix - nx;
      const int kp = k == nz - 1 ? ix : ix + nx*ny;
      const int km = k == 0 ? ix : ix - nx*ny;

      fn[ix] = cc*f[ix]
        + ce*f[ip] + cw*f[im]
        + cn*f[jp] + cs*f[jm]
        + ct*f[kp] + cb*f[km];
    }
  }
}

return (double)(nx*ny*nz)*13.0;
}
```

diffusion.c, diffusion3d 関数内

OpenACC化(3): データ転送の最適化(1)

- diffusion3d関数で present とし、main関数で data を追加

```
!$acc kernels copyin(f) copyout(fn)
```

diffusion.f90, diffusion3d 関数内

```
!$acc loop independent
```

```
do k = 1, nz
```

```
!$acc loop independent
```

```
do j = 1, ny
```

```
!$acc loop independent
```

```
do i = 1, nx
```

```
    w = -1; e = 1; n = -1; s = 1; b = -1; t = 1;
```

```
    if(i == 1) w = 0
```

```
    if(i == nx) e = 0
```

```
    if(j == 1) n = 0
```

```
    if(j == ny) s = 0
```

```
    if(k == 1) b = 0
```

```
    if(k == nz) t = 0
```

```
    fn(i,j,k) = cc * f(i,j,k) + cw * f(i+w,j,k) &  
                + ce * f(i+e,j,k) + cs * f(i,j+s,k) + cn * f(i,j+n,k) &  
                + cb * f(i,j,k+b) + ct * f(i,j,k+t)
```

```
end do
```

```
end do
```

```
end do
```

```
!$acc end kernels
```

なお、present にしなくても期待通りに動作します。

OpenACC化(4): データ転送の最適化(2)

C

- diffusion3d関数で present とし、main関数で data を追加

```
#pragma acc data copy(f[0:n]) create(fn[0:n])
{
    start_timer();

    for (; icnt<nt && time + 0.5*dt < 0.1; icnt++) {
        if (icnt % 100 == 0)
            fprintf(stdout, "time(%4d) = %7.5f¥n", icnt, time);

        flop += diffusion3d(nx, ny, nz, dx, dy, dz, dt, kappa, f, fn);

        swap(&f, &fn);

        time += dt;
    }

    elapsed_time = get_elapsed_time();
}
```

main.c, main 関数内

copy/create など適切なものを選びます。

make して実行してみましょう。どのくらいの実行性能が
出ましたか？

OpenACC化の例は、openacc_diffusion/02_openacc

OpenACC化(4): データ転送の最適化(2)

- diffusion3d関数で present とし、main関数で data を追加

```
!$acc data copy(f) create(fn)
```

```
call start_timer()
```

main.f90, main 関数内

```
do icnt = 0, nt-1
```

```
  if(mod(icnt,100) == 0) write (*,"(A5,I4,A4,F7.5)", "time(",icnt,") = ",time
```

```
  flop = flop + diffusion3d(nx, ny, nz, dx, dy, dz, dt, kappa, f, fn)
```

```
call swap(f, fn)
```

```
time = time + dt
```

```
if(time + 0.5*dt >= 0.1) exit
```

```
end do
```

```
elapsed_time = get_elapsed_time()
```

```
!$acc end data
```

copy/create など適切なものを選びます。

make して実行してみましょう。 どのくらいの実行性能が
出ましたか？

OpenACC化の例は、openacc_diffusion/02_openacc

NVCOMPILER_ACC_TIME によるOpenACC 実行の確認

- NVIDIAコンパイラを利用する場合、OpenACCプログラムがどのように実行されているか、環境変数NVCOMPILER_ACC_TIMEを設定すると簡単に確認することができる。
- Linuxなどでは、環境変数NVCOMPILER_ACC_TIME を1に設定し、プログラムを実行する。

```
$ export NVCOMPILER_ACC_TIME=1  
$ ./run
```
- Wisteria でジョブに環境変数NVCOMPILER_ACC_TIME を設定する場合は、ジョブスクリプト中に記載する。

```
$ cat run.sh  
...  
  
export NVCOMPILER_ACC_TIME=1  
./run
```

サンプルコードは、`openacc_diffusion/03_openacc_nvcompiler_acc_time`

NVCOMPILER_ACC_TIME によるOpenACC 実行の確認

- ジョブ実行が終わると、標準エラー出力にメッセージが出力される。

```
$ cat run.sh.?????.err
Accelerator Kernel Timing data
/work/01/gt00/z30108/openacc_samples_test/openacc_samples/C/openacc_diffusion/03_openacc_pgi_
acc_time/main.c
main NVIDIA devicenum=0
time(us): 725
39: data region reached 2 times
    39: data copyin transfers: 1
        device time(us): total=342 max=342 min=342 avg=342
    53: data copyout transfers: 1
        device time(us): total=383 max=383 min=383 avg=383
/work/01/gt00/z30108/openacc_samples_test/openacc_samples/C/openacc_diffusion/03_openacc_pgi_
acc_time/diffusion.c
diffusion3d NVIDIA devicenum=0
time(us): 0
17: compute region reached 1638 times
    25: kernel launched 1638 times
        grid: [16384] block: [128]
        elapsed time(us): total=67,084 max=54 min=40 avg=40
    17: data region reached 3276 times
```

← データ移動の回数

← 起動したスレッド

← カーネル
実行時間

Unified MemoryによるOpenACC 実行の確認

- NVIDIA compiler で Unified memory を利用する場合、-gpu オプションに managed を付けるだけ！
 - ✓ data指示文が無視されるようになる
 - ✓ サンプルコードでは、data指示文をコメントアウトしている
 - ✓ 性能はどのくらい違うだろうか？

C

```
CC = nvc
CXX = nvc++
GCC = gcc
RM = rm -f
MAKEDPEND = makedepend

CFLAGS = -O3 -acc -Minfo=accel -gpu=cc80,managed
...
```

F

```
F90 = nvfortran
RM = rm -f

FFLAGS = -O3 -mp -acc -gpu=cc80,managed -Minfo=accel
...
```

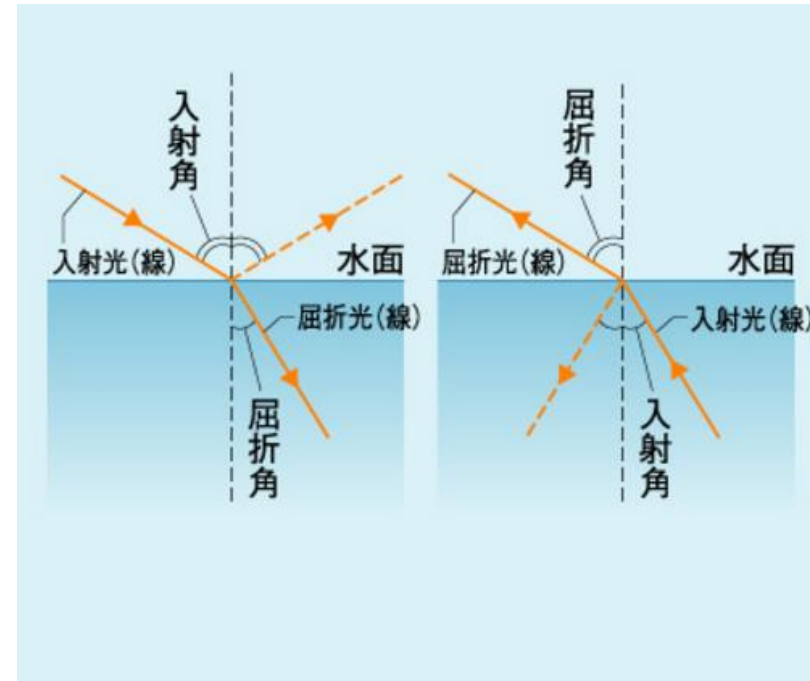
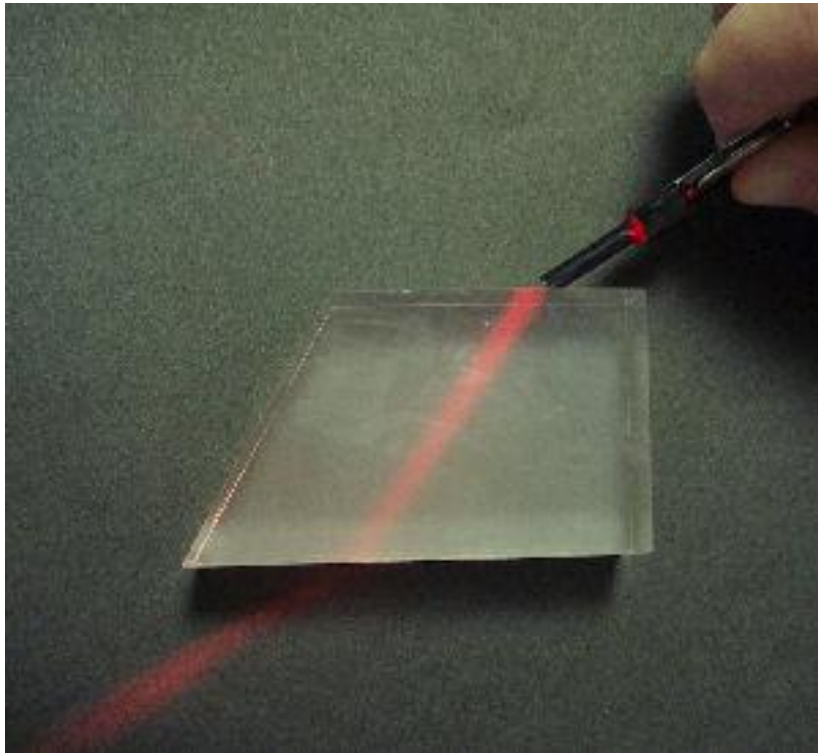
サンプルコードは、`openacc_diffusion/04_openacc_managed`

**チャレンジ課題：GPUを用いた
FDTD法による電磁波伝搬計算
(C言語版のみ)**

光の屈折と回折（１）

■ 屈折

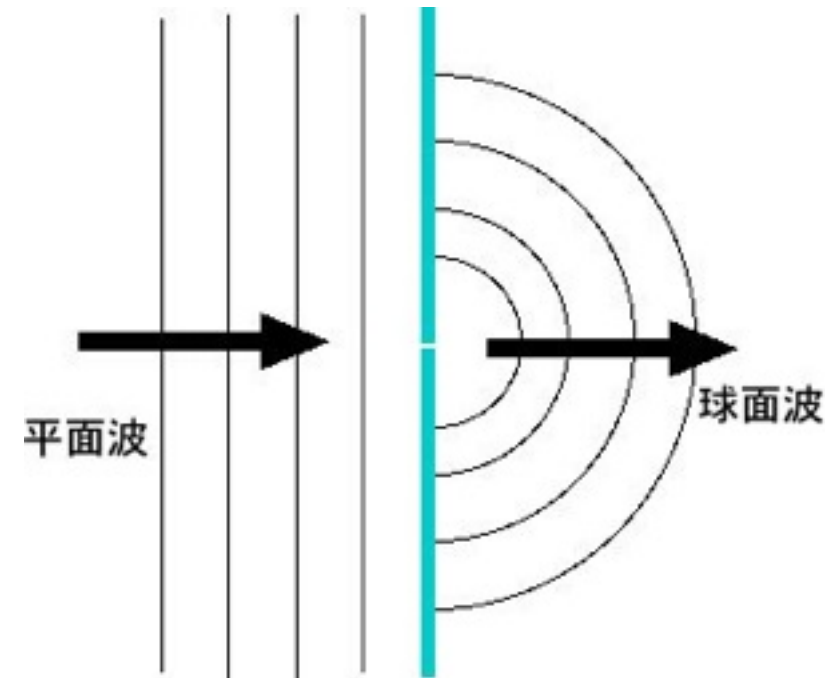
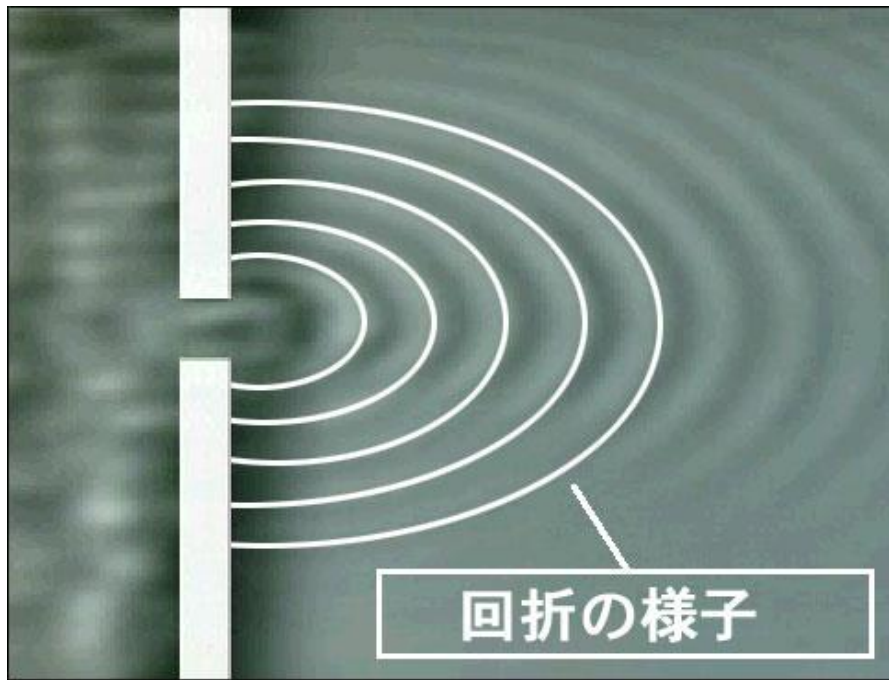
- ✓ 光が異なる媒質の境界で進行方向を変えること
- ✓ 波の進む速度（位相速度）が媒質によって異なるため



光の屈折と回折（２）

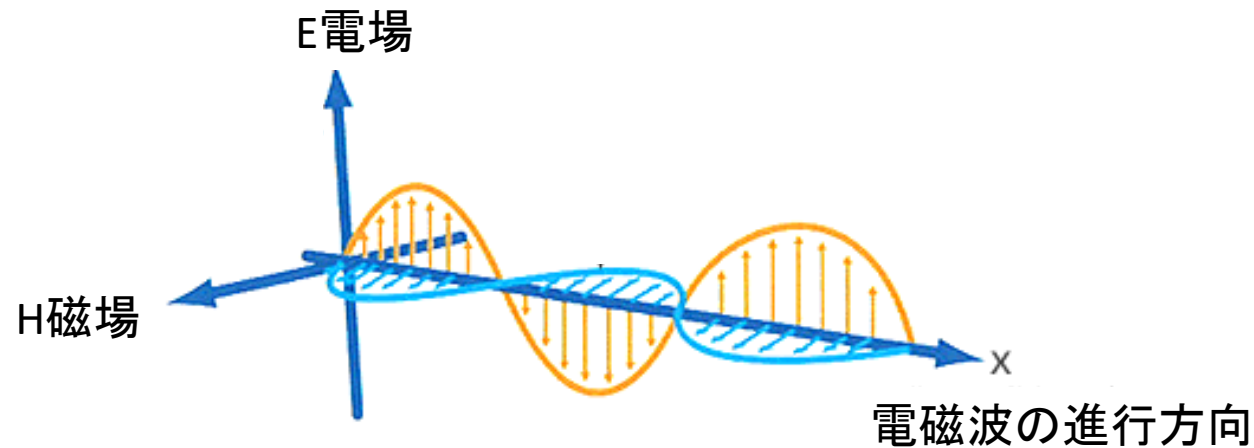
■ 回折

- ✓ 光の進路に障害物があるとき、その障害物の陰など、一見すると幾何学的には到達できない領域に回り込んで伝わる現象



電磁波の伝播

- 光は電磁波の一種
- 電場と磁場と電磁波の進行方向



- ✓ 電磁波は、空間の電場と磁場がお互いの電磁誘導によって相互に発生して、空間を横波となって伝播する

電磁波の方程式

■ 真空での電場Eと磁場Hの時間発展 Maxwell 方程式の一部

$$\frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} = \frac{1}{\varepsilon} \nabla \times \mathbf{H} \qquad \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial t} = -\frac{1}{\mu} \nabla \times \mathbf{E}$$

(ε : 誘電率) (μ : 透磁率)

この方程式を、2次元FDTD法（Finite-difference time-domain 法）*を用いて解いていきます。

* K. S. Yee, "Numerical Solution of Initial Boundary Value Problems Involving Maxwell's Equations in Isotropic Media," IEEE Trans. on Antennas and Propagat., vol. 14, pp. 302-307, May 1966.

FDTD法 (1)

■ EとHの時間発展

$$\frac{\mathbf{E}^n - \mathbf{E}^{n-1}}{\Delta t} = \frac{1}{\varepsilon} \nabla \times \mathbf{H}^{n-\frac{1}{2}}$$

$$\frac{\mathbf{H}^{n+\frac{1}{2}} - \mathbf{H}^{n-\frac{1}{2}}}{\Delta t} = -\frac{1}{\mu} \nabla \times \mathbf{E}^n$$

変形して、

$$\mathbf{E}^n = \mathbf{E}^{n-1} + \frac{\Delta t}{\varepsilon} \nabla \times \mathbf{H}^{n-\frac{1}{2}}$$

$$\mathbf{H}^{n+\frac{1}{2}} = \mathbf{H}^{n-\frac{1}{2}} - \frac{\Delta t}{\mu} \nabla \times \mathbf{E}^n$$

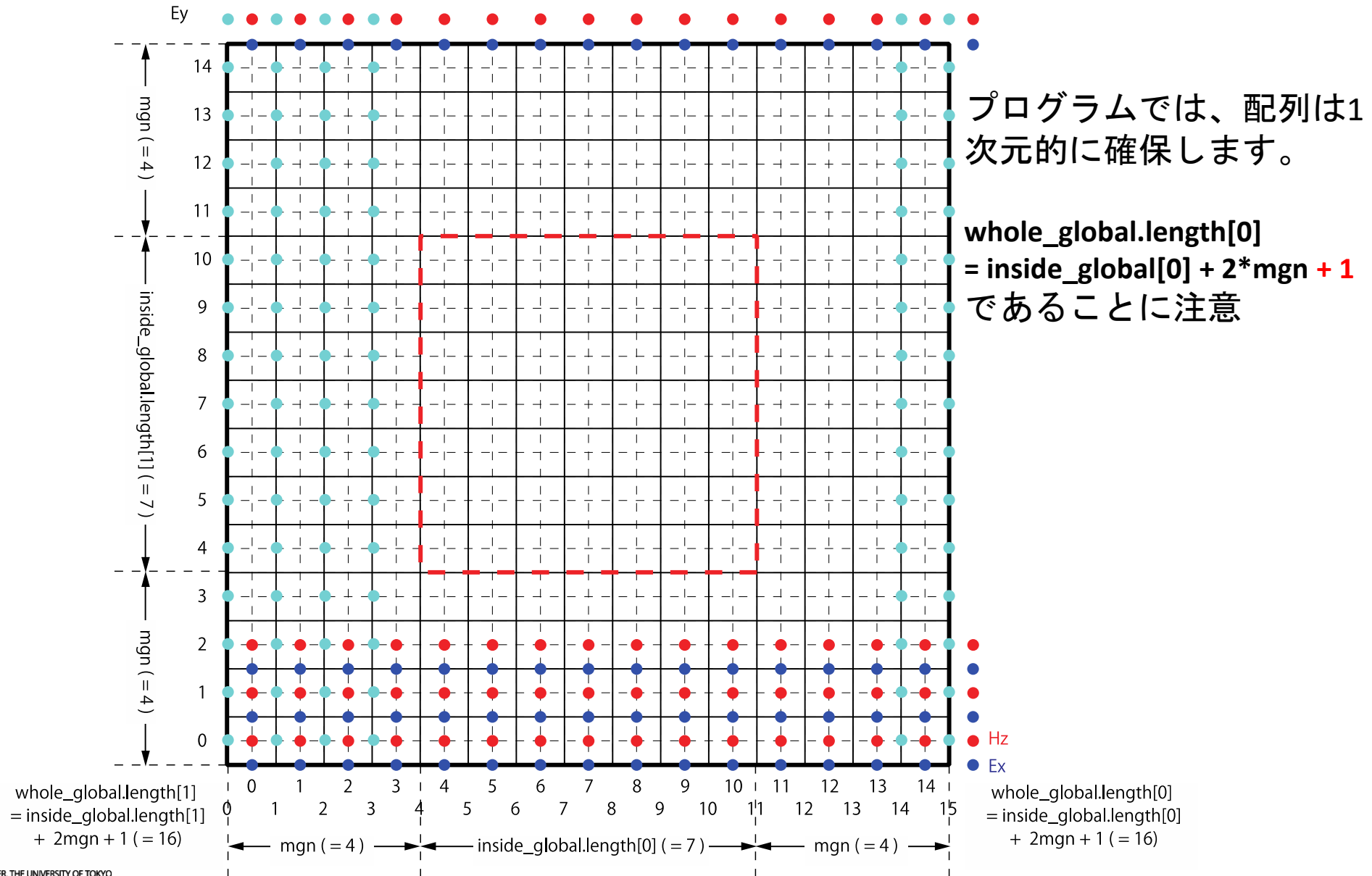
FDTD法 (2)

■ 例えば、

$$E_x^n(i + \frac{1}{2}, j) = E_x^{n-1}(i + \frac{1}{2}, j) + \frac{\Delta t}{\varepsilon(i + \frac{1}{2}, j)} \left(\frac{H_z^{n-\frac{1}{2}}(i + \frac{1}{2}, j + \frac{1}{2}) - H_z^{n-\frac{1}{2}}(i + \frac{1}{2}, j - \frac{1}{2})}{\Delta y} \right)$$

$$H_z^{n+\frac{1}{2}}(i + \frac{1}{2}, j + \frac{1}{2}) = H_z^{n-\frac{1}{2}}(i + \frac{1}{2}, j + \frac{1}{2}) - \frac{\Delta t}{\mu(i + \frac{1}{2}, j + \frac{1}{2})} \left(\frac{E_y^n(i + 1, j + \frac{1}{2}) - E_y^n(i, j + \frac{1}{2})}{\Delta x} - \frac{E_x^n(i + \frac{1}{2}, j + 1) - E_x^n(i + \frac{1}{2}, j)}{\Delta y} \right)$$

2次元FDTD法の変数配置



ソースコード（１）

- サンプルコード: openacc_fdttd/
 - ✓ OpenACCを利用したFDTD法（電磁波解析）

openacc_fdttd/01_original	CPUコード。
openacc_fdttd/02_openacc1	calc_ex_ey, pml_boundary_ex, pml_boundary_ey, がOpenACC。
openacc_fdttd/03_openacc2	時間更新ループ全体が OpenACC。
openacc_fdttd/04_openacc3	初期化を含め OpenACC。
openacc_fdttd/05_openacc4	データ移動の最適化。

ソースコード（２）

■ それぞれのファイルの内容

main.c	プログラムのメインコード
fdtd2d.{c, h}	2次元 FDTD の 計算コード
fdtd2d_sources.{c, h}	入射光設定のための関数
setup.c	計算条件の設定と変数の初期化
config.{c, h}	物理定数の定義
output.{cc, h}	計算結果出力のための関数
bitmap*	BMPファイル作成のための関数

本講習では、“main.c”、“fdtd2d.c”、“fdtd2d_sources.c”、“setup.c” のソースコードを追記・修正していきます。

計算条件

■ 2次元波動伝搬

- ✓ 成分: E_x 、 E_y 、 H_z
- ✓ y 方向下側から平面波を入射

電磁波の境界での非物理的な反射を防ぐための吸収境界条件 (PML)

$$dx = lx/nx$$
$$dy = ly/ny$$

デフォルト設定:

$$nx = 512$$

$$ny = 512$$

$$mgn = 8$$

$$lnx = 529$$

$$lny = 529$$

プログラム中では下記の変数が使われているので注意

$$\text{inside_global.length}[0] = nx0$$

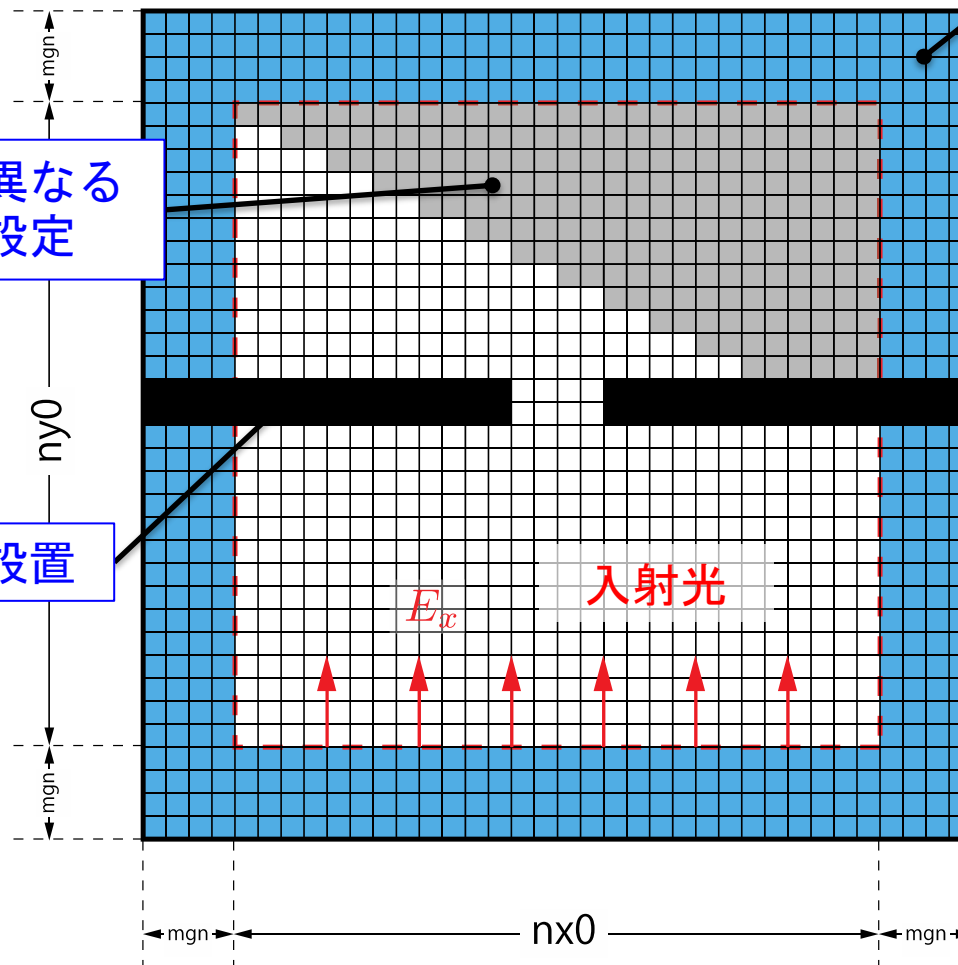
$$\text{inside_global.length}[1] = ny0$$

$$\text{whole_global.length}[0] = nx0 + 2 * mgn + 1$$

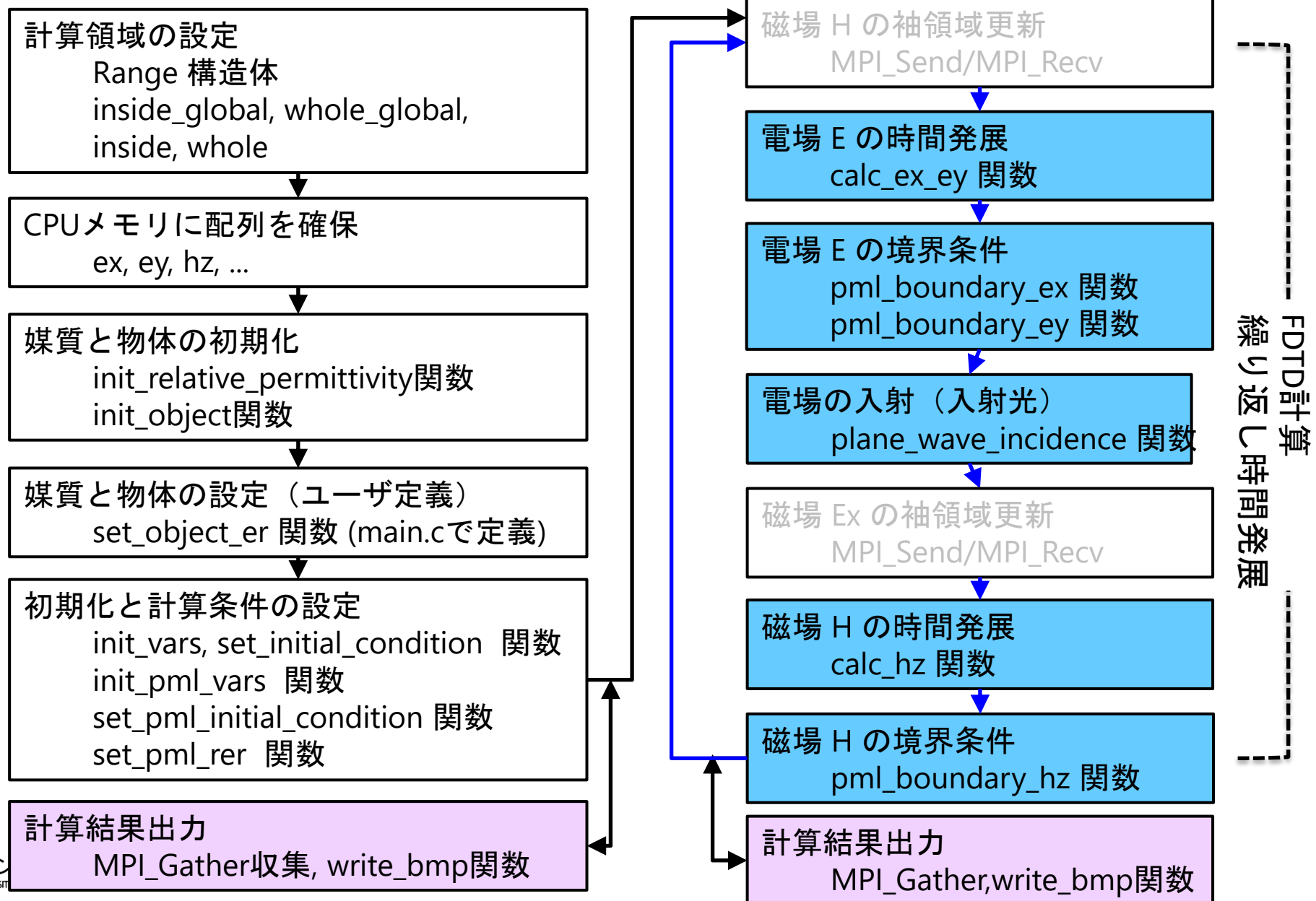
$$\text{whole_global.length}[1] = ny0 + 2 * mgn + 1$$

真空と異なる
媒質を設定

物体を設置



コード全体の流れ (main.c 内)



※MPIは
OFFにして
あります

計算領域の設定（１）

■ Range 構造体

- ✓ 計算領域の始点と大きさを保持

```
// config.h
struct Range {
    int length[2];
    int begin [2];
};

// main.c
const struct Range inside_global = { { atoi(argv[1]), atoi(argv[2]) },
                                       { 0, 0 } };
const struct Range whole_global = { { inside_global.length[0] + 2*mgn + 1,
                                       inside_global.length[1] + 2*mgn + 1,
                                       { inside_global.begin[0] - mgn ,
                                       inside_global.begin[1] - mgn } };

const struct Range inside      = { { inside_global.length[0],
                                       inside_global.length[1]/nsubdomains },
                                       { 0,
                                       inside_global.length[1]/nsubdomains * rank } };
const struct Range whole      = { { inside.length[0] + 2*mgn + 1,
                                       inside.length[1] + 2*mgn + 1,
                                       { inside.begin[0] - mgn ,
                                       inside.begin[1] - mgn } };
```

全領域の中心領域

全領域の
全体領域

分割領域の
中心領域

分割領域の
全体領域

計算領域の設定 (2)

■ Range 構造体

- ✓ 計算領域の始点と大きさを保持

```
struct Range {  
    int length[2];  
    int begin [2];  
};  
  
const struct Range inside  = { { inside_global.length[0],  
                                inside_global.length[1]/nsubdomains },  
                                { 0,  
                                inside_global.length[1]/nsubdomains * rank } };  
const struct Range whole   = { { inside.length[0] + 2*mgn + 1,  
                                inside.length[1] + 2*mgn + 1,  
                                { inside.begin[0] - mgn ,  
                                inside.begin[1] - mgn } } };
```

プログラムでは
下記の通り

`inside.length[0] = nx`
`inside.length[1] = ny`

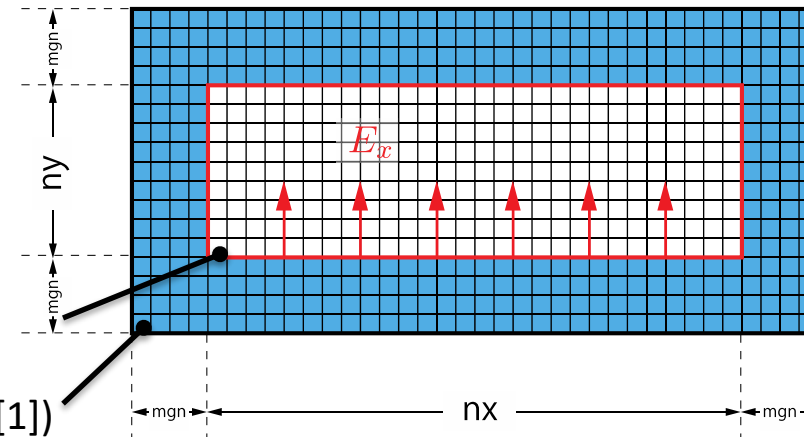
`whole.length[0] = nx + 2*mgn + 1`
`whole.length[1] = ny + 2*mgn + 1`

分割領域の
中心領域

分割領域の
全体領域

座標(`inside.begin[0]`, `inside.begin[1]`)

座標(`whole.begin[0]`, `whole.begin[1]`)



配列の確保

■ 物理変数配列は main.c で確保

```
// main.c
const int nelems = whole.length[0] * whole.length[1];
const int nelems_x = whole.length[0];
const int nelems_y = whole.length[1];
const size_t size = sizeof(FLOAT)*nelems;
const size_t size_x = sizeof(FLOAT)*nelems_x;
const size_t size_y = sizeof(FLOAT)*nelems_y;
const size_t size_global = sizeof(FLOAT)* whole_global.length[0] * whole_global.length[1];

FLOAT *ex = (FLOAT *)malloc(size); // 電場 Ex
FLOAT *ey = (FLOAT *)malloc(size); // 電場 Ey
FLOAT *hz = (FLOAT *)malloc(size); // 磁場 Hz
...
// For output
FLOAT *ex_global = (FLOAT *)malloc(size_global);
FLOAT *ey_global = (FLOAT *)malloc(size_global);
FLOAT *hz_global = (FLOAT *)malloc(size_global);
```

- 多くの配列は `whole.length[0] * whole.length[1]`
- `ex_global`, `ey_global`, `hz_global` はファイル出力に使うため、`whole_global.length[0] * whole_global.length[1]`

時間発展 (1)

■ 前半

- ✓ 電場Eの時間発展 (calc_ex_ey) 、境界条件(pml_boundary...)
- ✓ 入射光 (plane_wave_incidence)

※MPIは
OFFにして
あります

```
while (icnt < nt) {  
  
    MPI_Status status;  
    const int tag = 0;  
    const int nhalo    = whole.length[0];  
    const int inside_end1 = inside.begin[1] + inside.length[1];  
  
    const int src_hz    = whole.length[0] * (inside_end1 - whole.begin[1] - 1);  
    const int dst_hz    = whole.length[0] * (inside.begin[1] - whole.begin[1] - 1);  
  
    MPI_Send(&hz[src_hz], nhalo, MPI_FLOAT_T, rank_up , tag, MPI_COMM_WORLD);  
    MPI_Recv(&hz[dst_hz], nhalo, MPI_FLOAT_T, rank_down, tag, MPI_COMM_WORLD, &status);  
  
    calc_ex_ey(&whole, &inside, hz, cexly, ceylx, ex, ey);  
    pml_boundary_ex(&whole, &inside, hz, cexy, cexyl, rer_ex, ex, exy);  
    pml_boundary_ey(&whole, &inside, hz, ceyx, ceysl, rer_ey, ey, eyx);  
  
    const int j_in = 0;  
    plane_wave_incidence(&whole, &inside, time, j_in, wavelength, ex, ey);  
    time += 0.5*dt;
```

(後半へ)

時間発展（２）

※MPIは
OFFにして
あります

■ 後半

- ✓ 磁場Hの時間発展（calc_hz）、境界条件(pml_boundary_hz)

（前半から）

```
const int src_ex  = whole.length[0] * (inside.begin[1] - whole.begin[1]);
const int dst_ex  = whole.length[0] * (inside_end1 - whole.begin[1]);

MPI_Send(&ex[src_ex], nhalo, MPI_FLOAT_T, rank_down, tag, MPI_COMM_WORLD);
MPI_Recv(&ex[dst_ex], nhalo, MPI_FLOAT_T, rank_up , tag, MPI_COMM_WORLD, &status);

calc_hz(&whole, &inside, ey, ex, chzlx, chzly, hz);
pml_boundary_hz(&whole, &inside, ey, ex, chzx, chzxl, chzy, chzyl, hz, hzx, hzy);
time += 0.5*dt;

icnt++;

（出力など）
}
```


**チャレンジ課題:GPUを用いた
FDTD法による電磁波伝搬計算
の実習（C言語版のみ）**

プログラムのコンパイルと実行 (1)

■ CPUコードのコンパイルと実行

openacc_fdttd/01_original

```
$ module load nvidia cuda nvmpi
$ cd openacc_mpi_fdttd/01_original
$ make
$ pjsub ./run.sh
$ cat run.sh.?????.out
Rank 0: hostname = a090
Rank 1: hostname = a090
Rank 2: hostname = a091
Rank 3: hostname = a091
Calculation condition
  nx_global   = 512
```

(省略)

```
icnt = 4900, time = 2.3115e-14 [sec]
icnt = 5000, time = 2.3587e-14 [sec]
```

```
-----
Domain    = 512 x 512
nsubdomains = 4
output_file = 1
Time      = 4.103535 [sec]
-----
```

← MPIのmoduleが必要

← ? の数字はジョブごとに変わります。

← 利用したノード

← 計算領域サイズ、領域分割数、出力の有無、計算時間

なお、`pjsub ./run_no_out.sh` すると出力なしで実行する。性能測定用。

プログラムのコンパイルと実行（２）

■ プログラムの実行時オプション

```
$ cat run.sh  
#!/bin/sh  
#PJM -L lecture-a  
#PJM -L gpu=1
```

（省略）

```
mkdir -p sim_run  
cd sim_run
```

```
nprocs=1  
mpirun -np $nprocs ../run 512 512 $nprocs 5000 50
```

openacc_fdttd/01_original

`mpirun -np <nprocs> ../run <nx> <ny> <nprocs> <nt> <nout>`

nprocs: 全ランク数（=分割数） ※今回は 1

nx, ny: 計算領域サイズ

nt: 全時間ステップ

nout: 出力を行うタイムステップ数。50 の場合、50ステップに1回出力する。0 を指定すると出力しない。

計算結果の表示

- 計算結果は sim_run に BMP として出力される

```
$ cd sim_run/
```

```
openacc_fdttd/01_original
```

- 計算結果の表示

- ✓ 1枚のBMPを見る

```
$ display e05000.bmp
```

- ✓ 複数のBMPファイルをアニメーションで表示

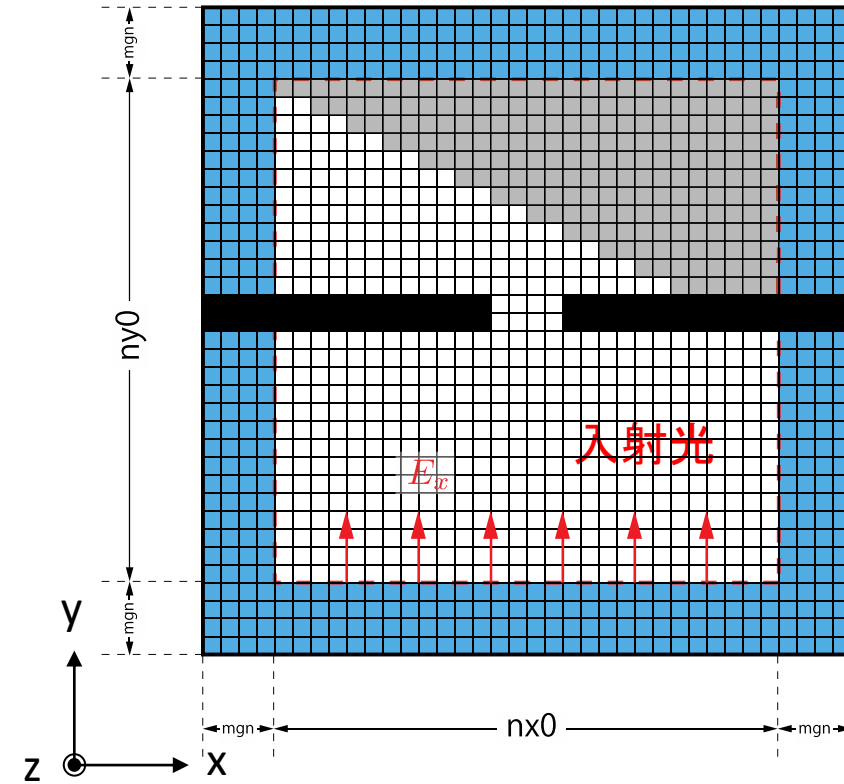
```
$ animate *.bmp
```

なお

```
ssh -Y txxxxx@wisteria.cc.u-tokyo.ac.jp
```

と -Y をつけていないと表示されない。うまく表示できない場合は画像を手元にコピーして表示してください。

- 出力されたBMPファイルの一例
 - ✓ Ex（電場の x 成分）の出力



実習1

- `calc_ex_ey`, `pml_boundary_ex`, `pml_boundary_ey` を OpenACC化しましょう。
- Makefile
 - ✓ コンパイルオプションの修正
- `main.c`
 - ✓ OpenACCヘッダーの追加
 - ✓ `data` 指示文の追加
- `fdtd2d.c`
 - ✓ `kernels` 指示文、`loop` 指示文の追加

実行速度が遅くても、動くプログラムである状態を保ちながらOpenACC化します。末端の関数からOpenACC化するのがよいでしょう。

解答例は、`openacc_fdtd/02_openacc1`

kernels, loop指示文

■ fdtd2d.c 内の関数

```
void calc_ex_ey(const struct Range *whole, const struct Range *inside,
               const FLOAT *hz, const FLOAT *cexly, const FLOAT *ceylx, FLOAT *ex, FLOAT *ey)
{
    const int nx  = inside->length[0];
    const int ny  = inside->length[1];
    const int mgn[] = { inside->begin[0] - whole->begin[0],
                       inside->begin[1] - whole->begin[1] };
    const int lnx  = whole->length[0];

    #pragma acc kernels present(hz, cexly, ex)
    #pragma acc loop independent
    for (int j=0; j<ny+1; j++) {
        #pragma acc loop independent
        for (int i=0; i<nx; i++) {
            const int ix = (j+mgn[1])*lnx + i+mgn[0];
            const int jm = ix - lnx;
            //ex[ix] += cexly[ix]*(hz[ix]-hz[jm]) - cexlz[ix]*(hy[ix]-hy[km]);
            ex[ix] += cexly[ix]*(hz[ix]-hz[jm]);
        }
    }

    (省略)

}
```

実習2

- main 関数内の while 内をすべて OpenACCにしましょう。
- main.c
 - ✓ data 指示文の移動と copyin などの最適化
- fdtd2d.c
 - ✓ 残りの関数にkernels 指示文、loop 指示文の追加
- fdtd2d_sources.c
 - ✓ kernels 指示文、loop 指示文の追加

解答例は、`openacc_fdtd/03_openacc2`

data 指示文

■ main関数のwhile 外に data を移動

```
#pragma acc data ¥
copyin(ex[0:nelems], ey[0:nelems], hz[0:nelems]) ¥
copyin(cexly[0:nelems], ceylx[0:nelems], chzlx[0:nelems], chzly[0:nelems]) ¥
copyin(exy[0:nelems], eyx[0:nelems], hzx[0:nelems], hzy[0:nelems]) ¥
copyin(cexy[0:nelems_y], ceyx[0:nelems_x], chzx[0:nelems_x], chzy[0:nelems_y]) ¥
copyin(cexyl[0:nelems_y], ceysl[0:nelems_x], chzxl[0:nelems_x], chzyl[0:nelems_y]) ¥
copyin(obj[0:nelems], er[0:nelems]) ¥
copyin(rer_ex[0:nelems], rer_ey[0:nelems])
{

while (icnt < nt) {

    MPI_Status status;
    const int tag = 0;
    const int nhalo = whole.length[0];
    const int inside_end1 = inside.begin[1] + inside.length[1];

    const int src_hz = whole.length[0] * (inside_end1 - whole.begin[1] - 1);
    const int dst_hz = whole.length[0] * (inside.begin[1] - whole.begin[1] - 1);

#pragma acc host_data use_device(hz)
    {
        MPI_Send(&hz[src_hz], nhalo, MPI_FLOAT_T, rank_up, tag, MPI_COMM_WORLD);
        MPI_Recv(&hz[dst_hz], nhalo, MPI_FLOAT_T, rank_down, tag, MPI_COMM_WORLD, &status);
    }
}
```

実習3

- 初期化を含めて全てOpenACCにします。ただし、set_object_er がCPU上のユーザ定義関数のため、これ以降の初期化関数をOpenACCにします。
- main.c
 - ✓ data 指示文の移動と最適化（多くが create になるはずです）
- setup.c
 - ✓ kernels 指示文、loop 指示文の追加

解答例は、openacc_fdttd/04_openacc3

実習4

- 計算領域のサイズなどを変更して性能測定してみましょう。
- OpenACCコードをさらに最適化しましょう。
 - ✓ NVCOMPILER_ACC_TIMEも活用しましょう。
 - ✓ 実は単純に fdtd2d.c に kernels と loop を入れても、いくつかの関数で暗黙の copyin が発生します。これも修正していきましょう。

```
$ make
calc_ex_ey:
  25, Generating present(ex[:],cexly[:])
    Generating implicit copyin(mgn[:])
    Generating present(hz[:])
  27, Loop is parallelizable
  29, Loop is parallelizable
    Accelerator kernel generated
    Generating Tesla code
    27, #pragma acc loop gang, vector(4) /* blockIdx.y threadIdx.y */
    29, #pragma acc loop gang, vector(32) /* blockIdx.x threadIdx.x */
  37, Generating present(ey[:],ceylx[:])
    Generating implicit copyin(mgn[:])
```

解答例は、openacc_fdtd/05_openacc4

実習5

- 実はUnified Memoryを利用するとずっと簡単に実装できます。
 - 実習2・3で行ったdata 指示文に関する実装する必要がないため
- -gpu=cc80,managed として性能を比較してみましょう
- 05_openacc4 で使っている update 指示文は、data 指示文で確保済みのデータを CPU-GPU間でコピーするための指示文です。Unified Memory (Managed Memory)使用時はこれも不要になります

```
#pragma acc update host(ex[src:sendnelems],ey[src:sendnelems],hz[src:sendnelems])  
for(i = 0;i < sendnelems;i++){  
    ex_global[dst+i] = ex[src+i];  
    ey_global[dst+i] = ey[src+i];  
    hz_global[dst+i] = hz[src+i];  
}
```

src から始まりsendnelems 個の
要素をhost(CPU)にコピーする

Q & A

- アカウントは1ヶ月有効です。
- 資料のPDF版はWEBページに掲載します。
 - <https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/events/lectures/226/>
 - アンケートへの協力をお願いします。

補足スライド

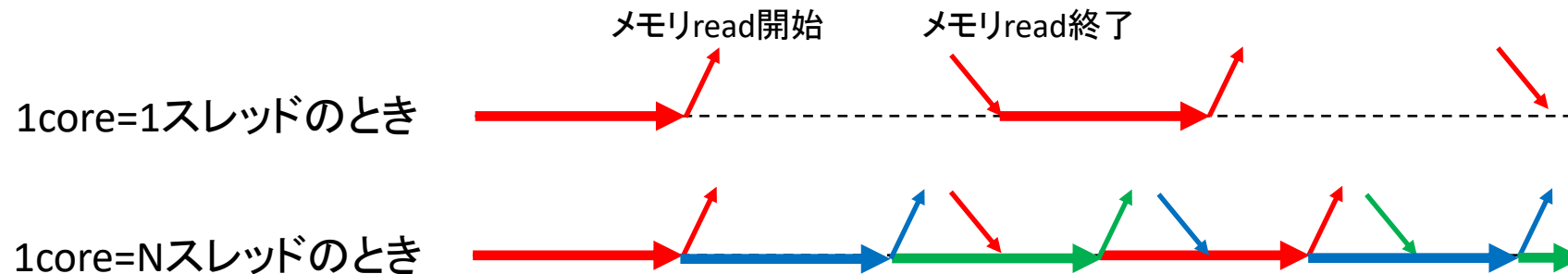
性能を出すためにはスレッド数>>コア数

■ 推奨スレッド数

- CPU : スレッド数=コア数 (高々数十スレッド)
- GPU : スレッド数>=コア数*4~ (数万~数百万スレッド)
 - 最適値は他のリソースとの兼ね合いによる

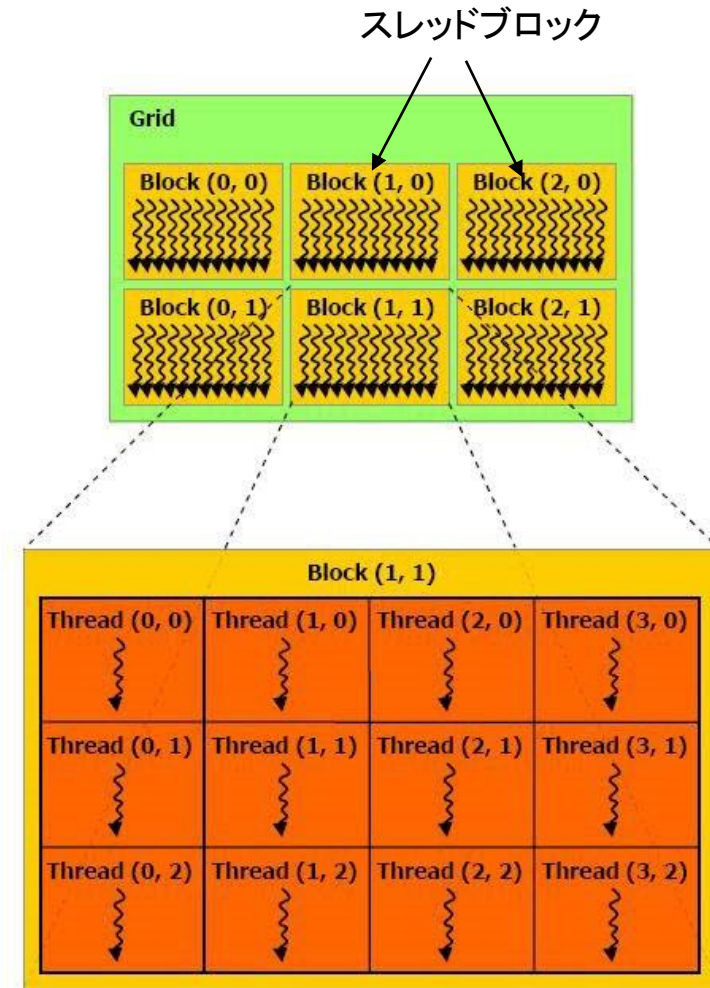
■ 理由 : 高速コンテキストスイッチによるメモリレイテンシ隠し

- CPU : レジスタ・スタックの退避はOSがソフトウェアで行う(遅い)
- GPU : ハードウェアサポートでコストほぼゼロ
 - メモリアクセスによる暇な時間(ストール)に他のスレッドを実行



階層的スレッド管理とコミュニケーション

- 階層的なコア/スレッド管理
 - P100は56 SMを持ち、1 SMは64 CUDA coreを持つ。トータル3584 CUDA core
 - 1 SMが複数のスレッドブロックを担当し、1 CUDA core が複数スレッドを担当
- スレッド間のコミュニケーション
 - 同ースレッドブロック内のスレッドは**高速コミュニケーション可能**
 - 異なるスレッドブロックに属するスレッド間には**コミュニケーションが低速**
 - いったんメモリに書き出したり、CPUに処理を戻さなくてはならない



cited from : <http://cuda-programming.blogspot.jp/2012/12/thread-hierarchy-in-cuda-programming.html>

Warp 単位の実行

- 連続した32スレッドを1単位 = Warp と呼ぶ
- このWarpは足並み揃えて動く
 - 実行する命令は32スレッド全て同じ
 - データは違っていてもいい

スレッド	1	2	3	...	31	32
配列 A	4	3	5	...	8	0
	×	×	×	...	×	×
配列 B	2	3	1	...	1	9
OK !						

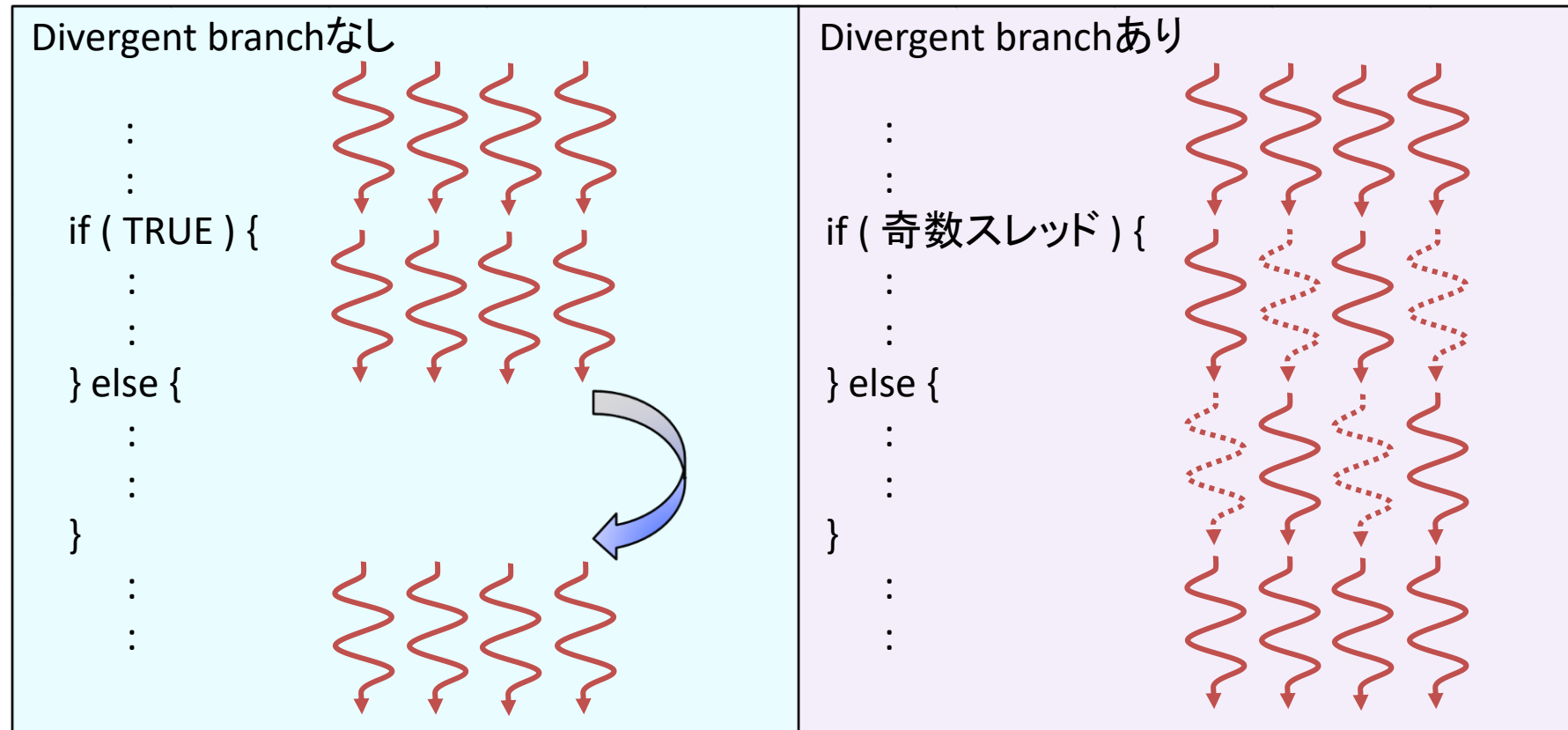
スレッド	1	2	3	...	31	32
配列 A	4	3	5	...	8	0
	÷	×	+	...	-	×
配列 B	2	3	1	...	1	9
NG !						

Warp内分岐

CUDA 8 以前のバージョン
CUDA 9 以上では多少マシになるが、
ペナルティがあることに変わりはない

■ Divergent Branch

- Warp 内で分岐すること。Warp単位に分岐ならOK。



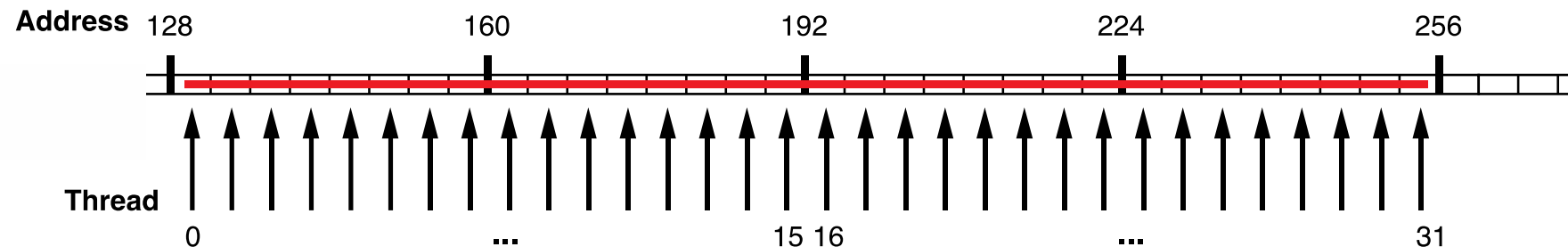
else 部分は実行せずジャンプ

一部スレッドを眠らせて全分岐を実行
最悪ケースでは32倍のコスト

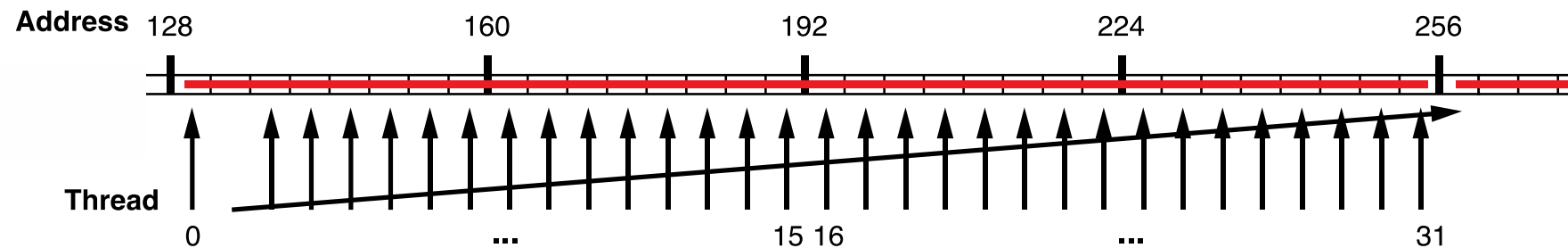
コアレスドアクセス

- 同じWarp内のスレッド（連続するスレッド）は近いメモリアドレスへアクセスすると効率的
 - ✓ コアレスドアクセス（coalesced access）と呼ぶ
 - ✓ メモリアクセスは128 Byte 単位で行われる。128 Byte に収まれば1回のアクセス、超えれば128 Byte アクセスをその分繰り返す。

128 byte x 1回のメモリアクセス



128 byte x 2回のメモリアクセス



ストライドアクセスがあるとなくなるか

- GPUはストライドアクセスに弱い！

```
void AoS_STREAM_Triad(STREAM_TYPE scalar)
{
    ssize_t i,j;
    #pragma omp parallel for private(i,j)
    #pragma acc kernels present(a_aos[0:STREAM_ARRAY_SIZE] ¥
        ,b_aos[0:STREAM_ARRAY_SIZE],c_aos[0:STREAM_ARRAY_SIZE])
    #pragma acc loop gang vector independent
    for (j=0; j<STREAM_ARRAY_SIZE/STRIDE; j++)
        for (i=0; i<STRIDE; i++)
            a_aos[j*STRIDE+i] = b_aos[j*STRIDE+i]+scalar*c_aos[j*STRIDE+i];
}
```

ストライドアクセス付き stream triad

