第133回　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：星野哲也

hoshino @ 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
  - ✓ **10月16日（水）10:00 – 18:00**

- 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。

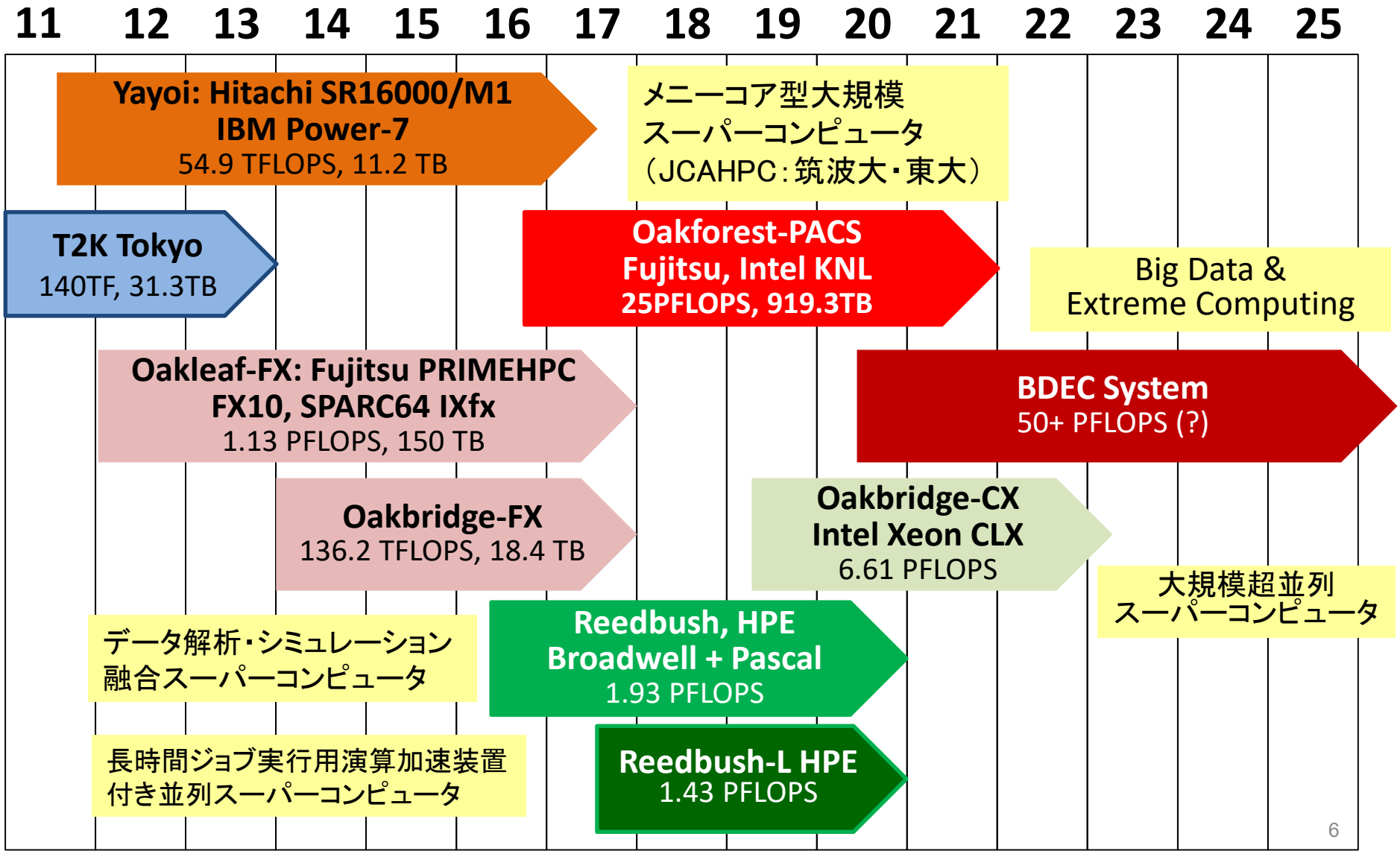
講習会の進め方

- **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
  - ✓ スクリーンショットなどで画像を共有することで、質問対応します
    - ✓ **Windows**：**Alt + PrtScn** で作業中ウィンドウのスクショがクリップボードにコピーされます。**slack**のチャット部分で貼り付け**(Ctrl + V)**することで画像をアップロードできます
    - ✓ **Mac : command + shift + control + 4** の同時押し、その後撮りたいウィンドウ上で**space**を押すことで、スクリーンショットがクリップボードにコピーされます。**slack**のチャット部分で貼り付け**(command + V)**することで画像をアップロードできます

東大情報基盤センターの
スパコン概要

東大センターのスパコン

2基の大型システム，6年サイクル(だった)



3システム：利用者2,000+，学外50+%

- **Reedbush (SGI, 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
  - **3.36 PF, 2016年7月～ 2021年3月末（予定）**
  - **東大ITC初のGPUシステム (2017年3月より), DDN IME (Burst Buffer)**

- **Oakforest-PACS (OFP) (富士通, Intel Xeon Phi (KNL))**
  - **JCAHPC (筑波大CCS＆東大ITC)**
  - **25 PF, TOP 500で6位 (2016年11月) (日本1位登場時）**
  - **Omni-Path アーキテクチャ, DDN IME (Burst Buffer)**

- **Oakbridge-CX (富士通, Intel Xeon Platinum 8280)**
  - 大規模超並列スーパーコンピュータシステム
  - **6.61 PF, 2019年7月 ～ 2023年6月**
  - **全1,368ノードの内128ノードにSSDを搭載**

東京大学情報基盤センター スパコン（1/2）

Reedbush（SGI Rackable クラスタシステム）

Reedbush-U (2016/7/1 ~)
- 理論性能：508TFlops
- ノード数：420
- ノード構成：Intel Xeon Broadwell x2

Reedbush-H (2017/3/1 ~)
- 理論性能：1418TFlops
- ノード数：120
- ノード構成：Intel Xeon Broadwell x2 + **NVIDIA P100 GPU x2**

Reedbush-L (**2017/10/1 ~**)
- 理論性能：1435TFlops
- ノード数：64
- ノード構成：Intel Xeon Broadwell x2 + **NVIDIA P100 GPU x4**

東京大学情報基盤センター スパコン（2/2）

筑波大学計算科学研究センターと共同運用

Oakforest-PACS （Fujitsu PRIMERGY CX600）

Total Peak performance	: 25 PFLOPS
Total number of nodes	: 8,208
Total memory	: 897.7 TB
Peak performance per node	: 3.046 TFLOPS
Main memory per node	: 96 GB (DDR4)
	+ 16 GB(MCDRAM)
Disk capacity	: 26.2 PB
File Cache system (SSD)	: 960 TB

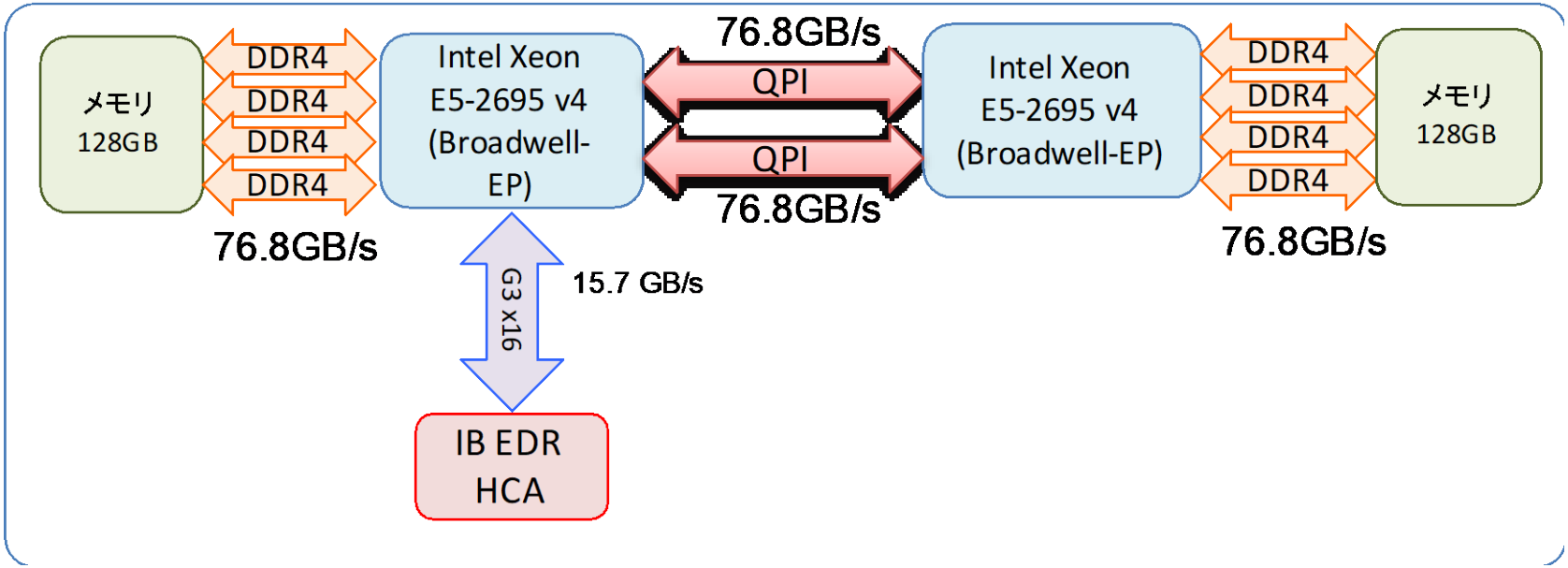
Intel Xeon Phi 7250 1.4 GHz 68 core x1 socket

2016年12月1日試験運転開始

2017年4月3日正式運用開始

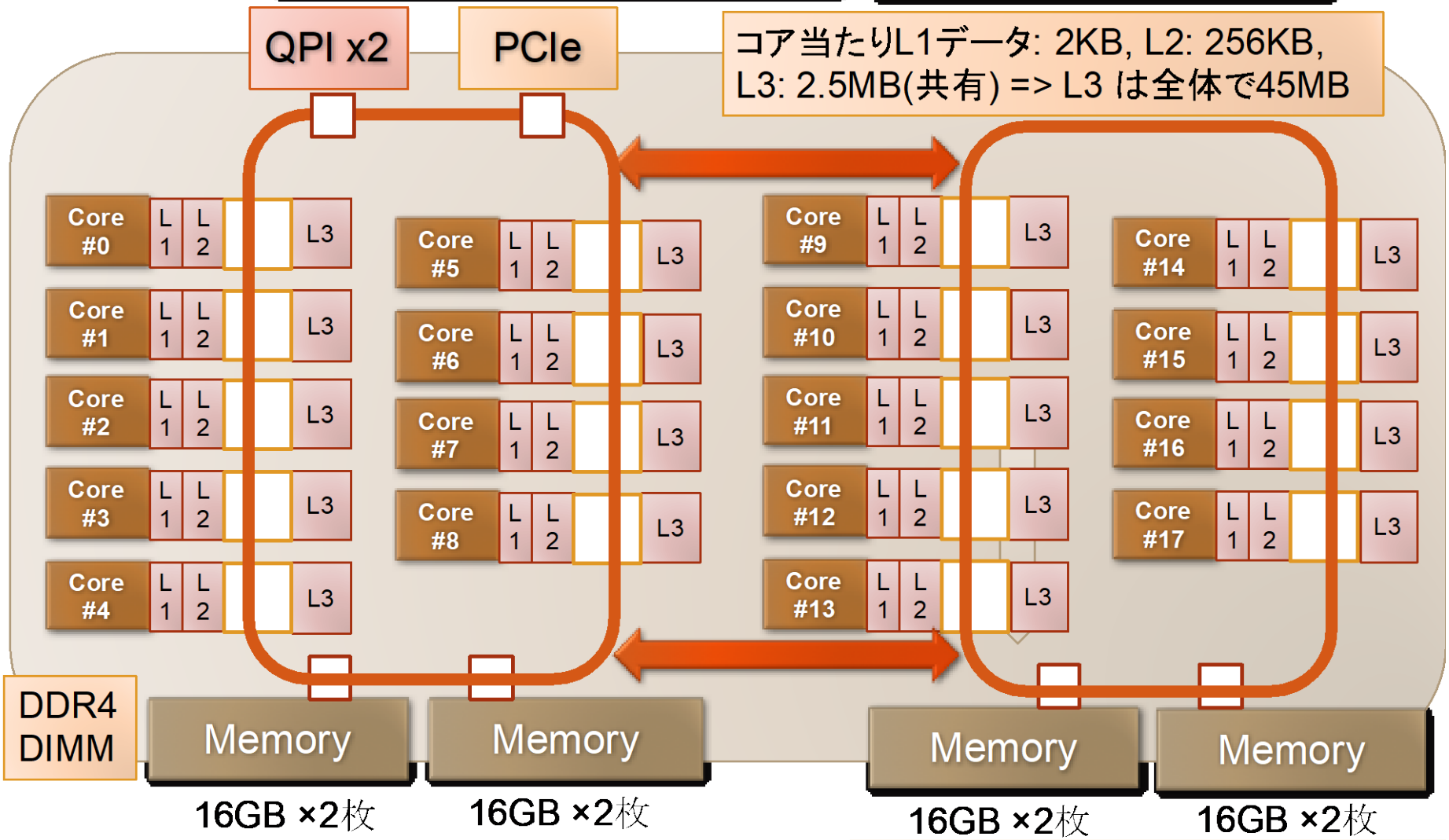
Reedbush-Uノードのブロック図

- メモリのうち、「近い」メモリと「遠い」メモリがある
  => NUMA (Non-Uniform Memory Access)
  (FX10はフラット)



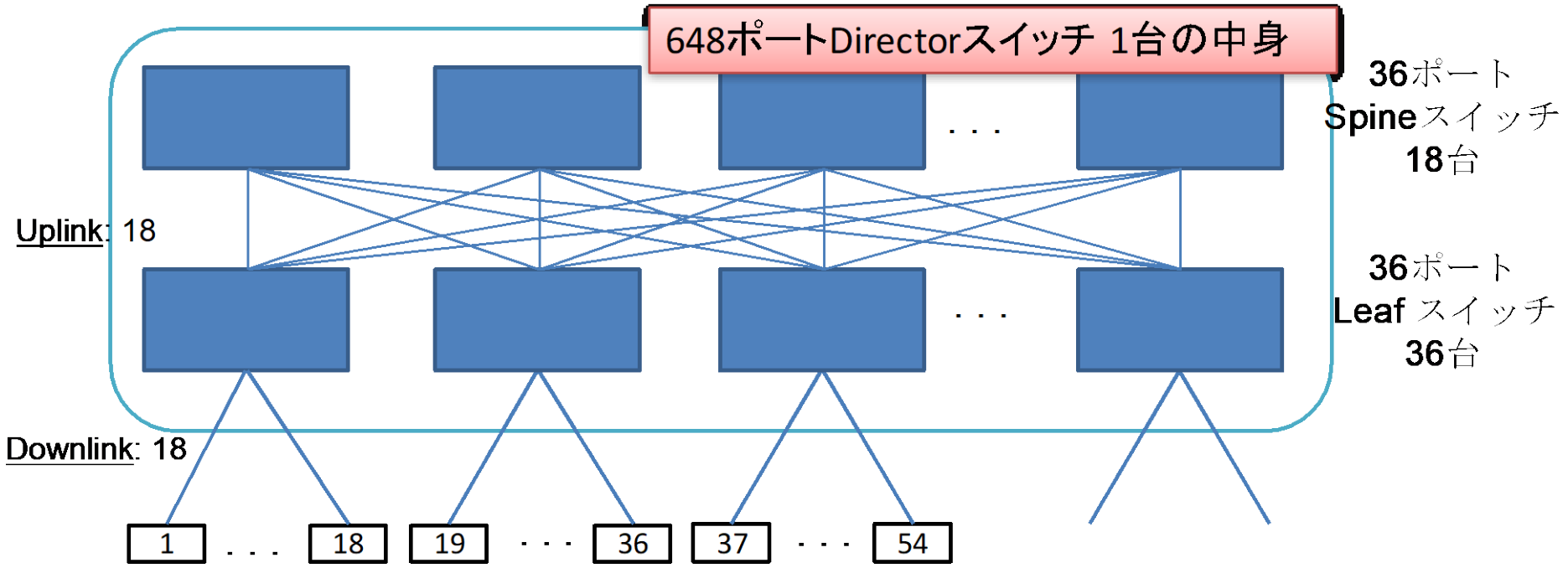
Broadwell-EPの構成

1ソケットのみを図示

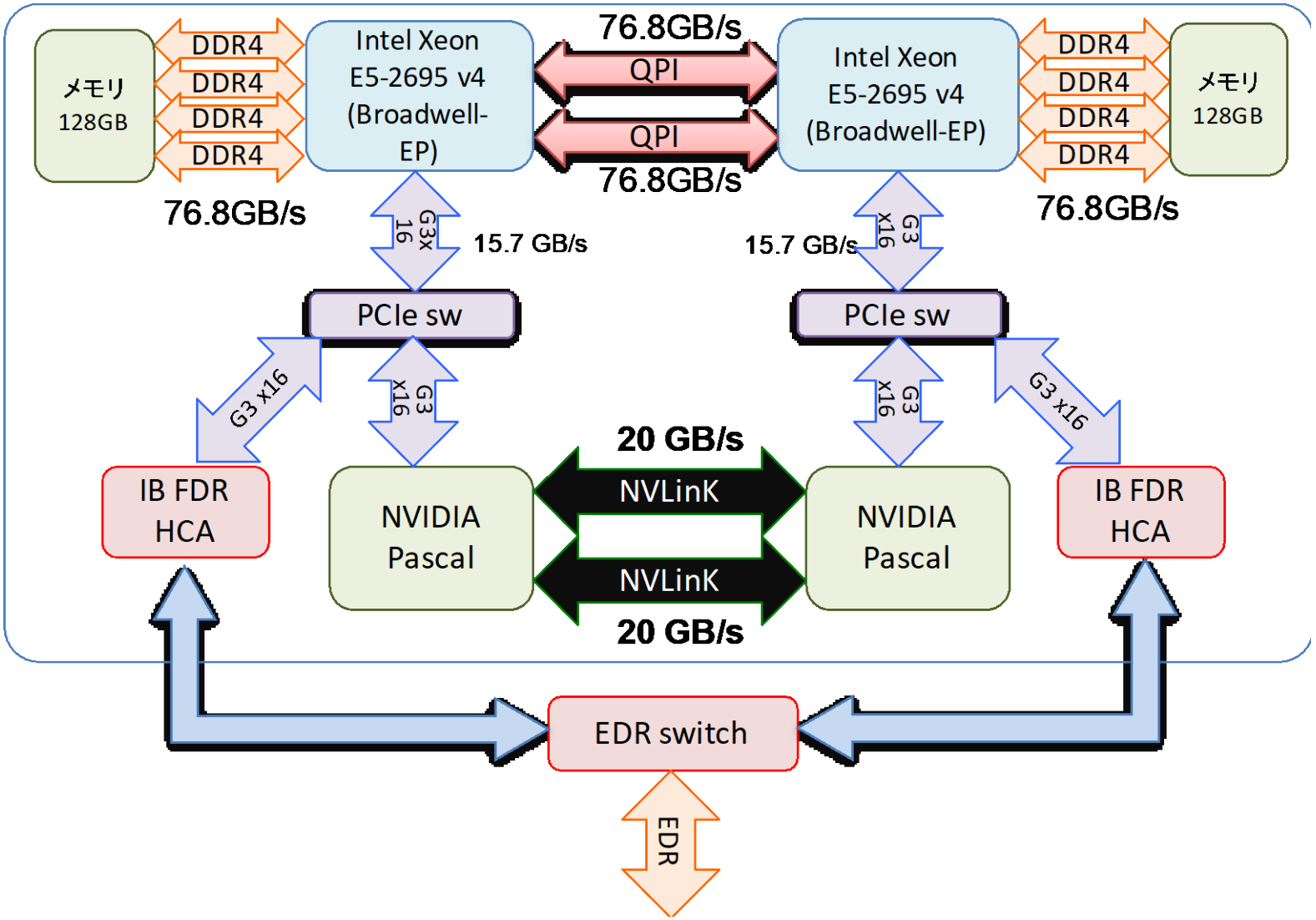


Reedbush-Uの通信網

- フルバイセクションバンド幅を持つFat Tree網
  - ✓ どのように計算ノードを選んでも互いに無衝突で通信が可能
- **Mellanox InfiniBand EDR 4x CS7500: 648ポート**
  - ✓ 内部は**36**ポートスイッチ **(SB7800)**を **(36+18)**台組み合わせたものと等価



Reedbush-Hノードのブロック図



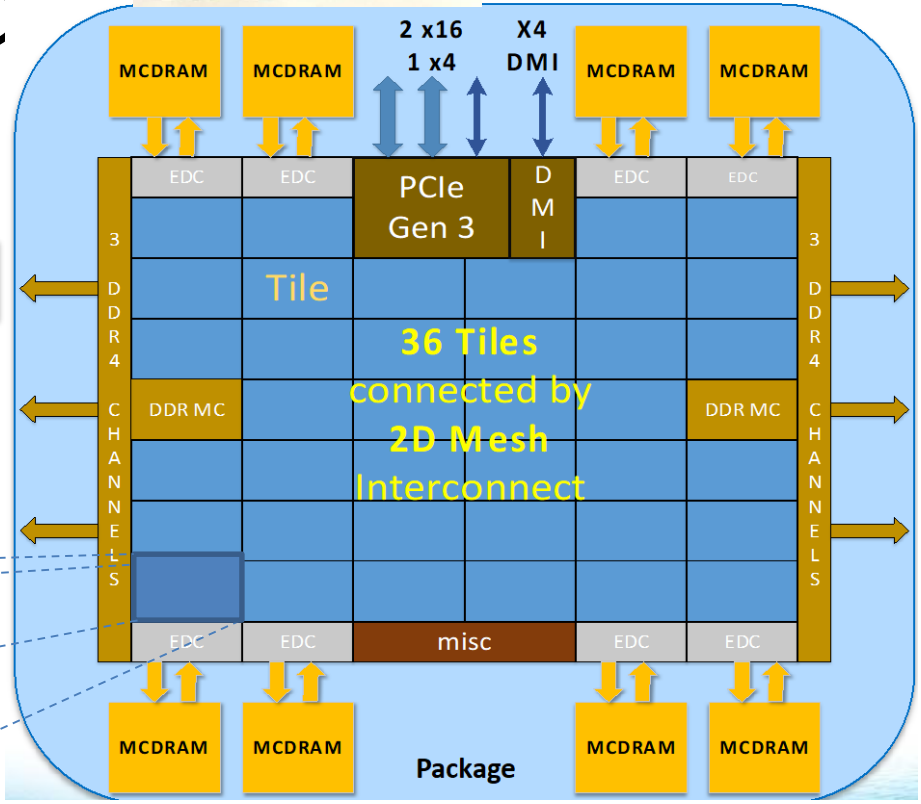
Oakforest-PACS 計算ノード

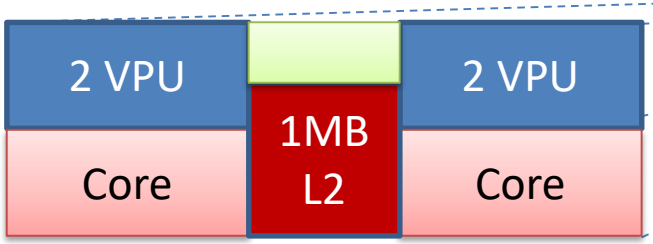
- **Intel Xeon Phi (Knights Land**
  - **1ノード1ソケット**
- **MCDRAM: オンパッケージ の高バンド幅メモリ16GB + DDR4メモリ**

ソケット当たりメモリ量：16GB × 6 ＝ 96GB

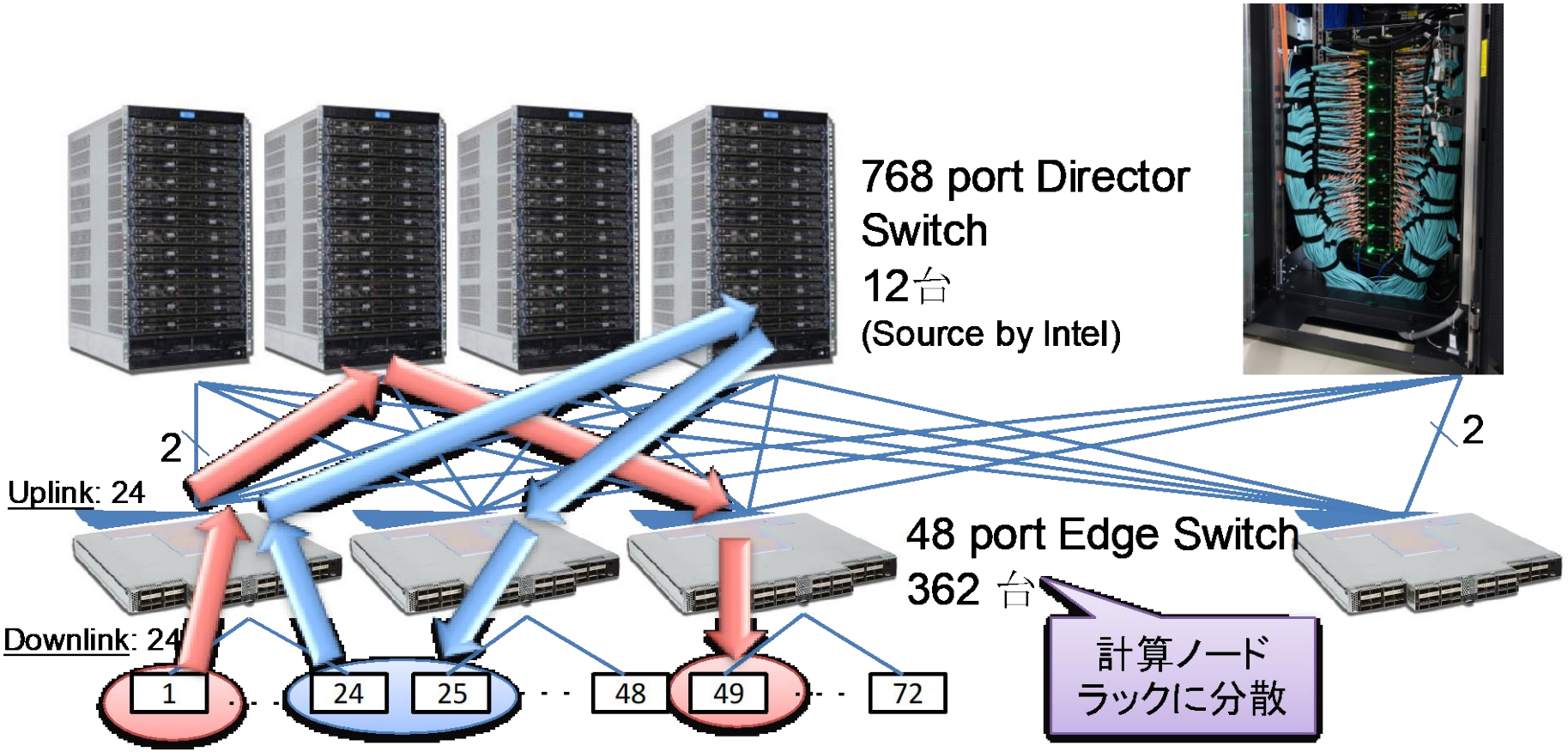
MCDRAM: 490GB/秒以上（実測）
DDR4: 115.2 GB/秒
=(8Byte × 2400MHz × 6 channel)

HotChips27
KNLスライドより





Oakforest-PACS: Intel Omni-Path Architecture によるフルバイセクションバンド幅Fat-tree網



コストはかかるがフルバイセクションバンド幅を維持
- システム全系使用時にも高い並列性能を実現
- 柔軟な運用：ジョブに対する計算ノード割り当ての自由度が高い

スパコン料金表（2020年4月時点）

- 最小セット料金表

	トークン	料金	ストレージ容量	利用期間
Reedbush	720*	6,300円	1TB	年度末まで
Oakforest-PACS	720	4,200円	1TB	年度末まで
Oakbride-CX	720	8,400円	4TB	年度末まで

- 「トークン制」で運営
  - トークン≒ノード時間。**720**トークンなら、**1**ノードを**720**時間利用できる。（* ただし、**Reedbush-H,L**にはそれぞれ**2.5, 4.0**の消費係数が設定されていて、消費係数倍のトークンを消費する。つまり、**H**の場合は**720/2.5=288**時間, **L**の場合は**720/4=180**時間しか利用できない）
  - トークン、容量共に料金積み増しで増量可能。詳しくは以下

http://www.cc.u-tokyo.ac.jp/supercomputer/ofp/service/

http://www.cc.u-tokyo.ac.jp/supercomputer/reedbush/service/

http://www.cc.u-tokyo.ac.jp/supercomputer/obcx/service/

Reedbush 利用上の注意（1）

- ディレクトリについて（**home** と **lustre)**
  - ✓ 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 **/lustre** 以下のディレクトリ（**/lustre/gt00/txxxxx**）に置く
  - ✓ **/home** は計算ノードからは参照できない
  - ✓ **cdw** コマンドで **Lustre**ファイルシステムへ移動できる。

    $ cdw

Reedbush 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。

Reedbushでのプログラムの実行

- ジョブスクリプトを作成し、ジョブとして投入、実行する。

  $ qsub ./run.sh

- 投入されたジョブを確認する。（**qstat**ではないので注意）

  $ rbstat

- 実行が終了すると、以下のファイルが生成される。

  run.sh.o??????

  run.sh.e??????　（?????? は数字）

- 上記の標準出力ファイルの中身を確認する。

  $ cat run.sh.o??????

- 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 run.sh.e??????

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！

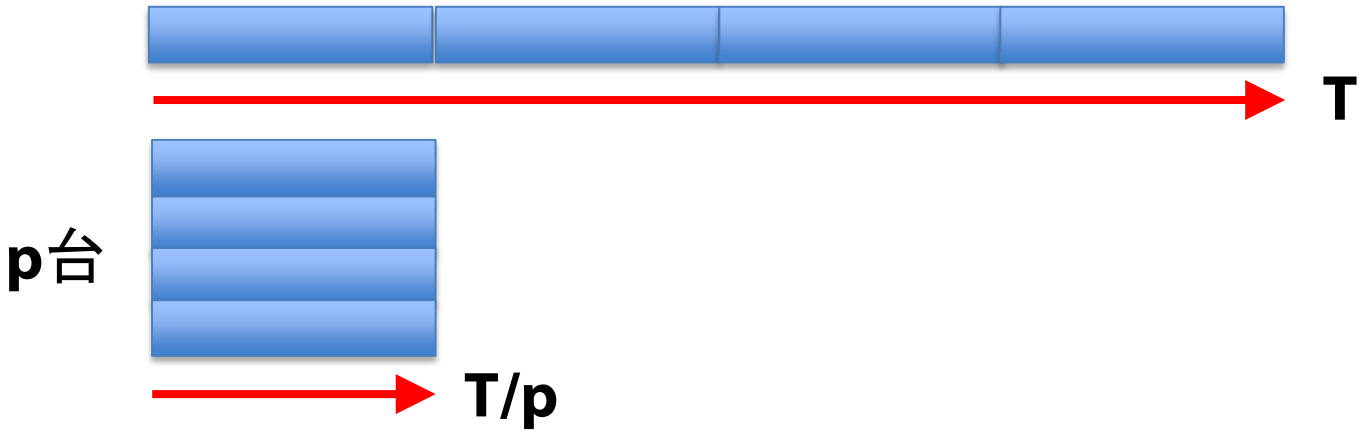
- GPUは**並列計算機**です！よって本講習会で学ぶのは**並列プログラミング**になります！
  - 並列プログラミングの例：**MPI, OpenMP, pthread** など

- 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・高性能プログラミング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。

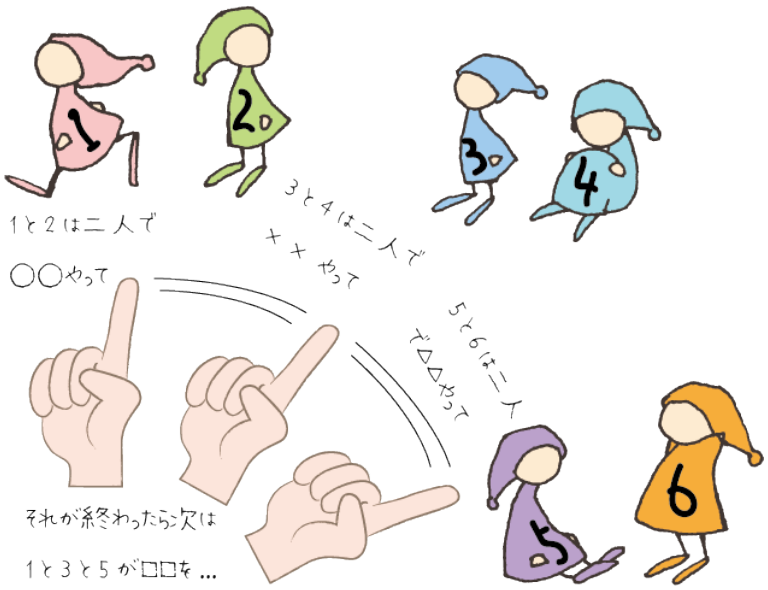


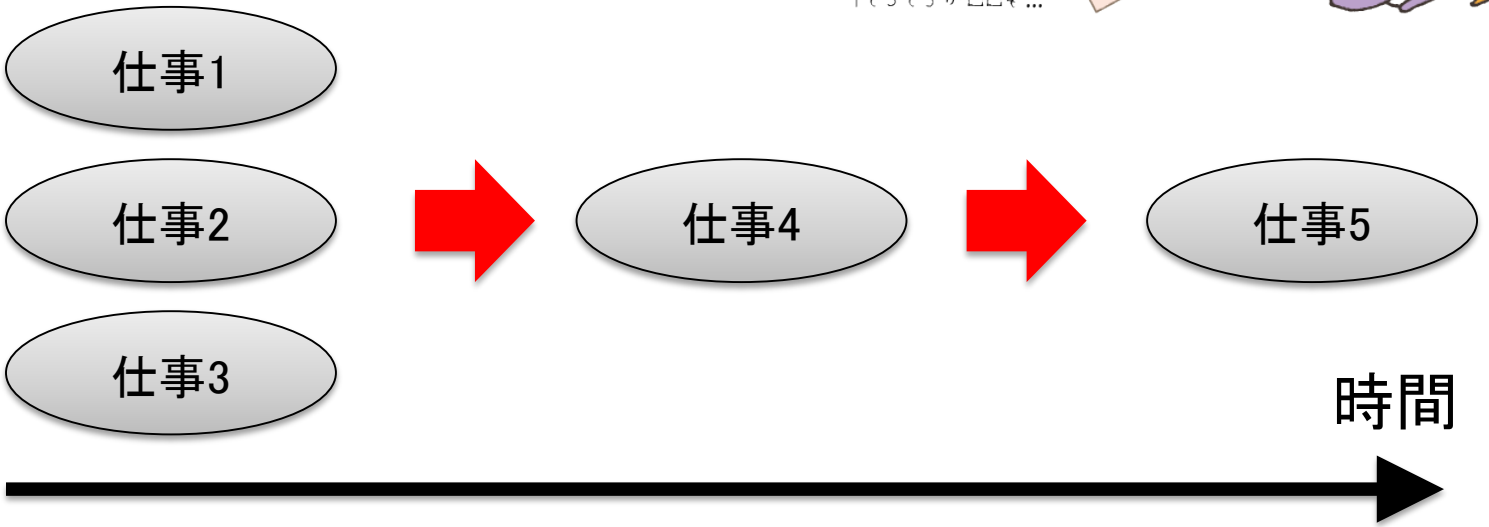
- 実際にできるかどうかは、処理内容（アルゴリズム）による。アルゴリズムによって難易度は異なる。
  - ✓ 並列化できないアルゴリズム、通信のオーバーヘッド
  - ✓ 部分的にでも並列化できないアルゴリズムがあると、どれだけ並列数を上げても、その時間は短縮されない。
- 並列処理（計算）の種類
  - ✓ 「タスク並列」と「データ並列」

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:カレーのルウを入れる
- 並列化

GPUは苦手

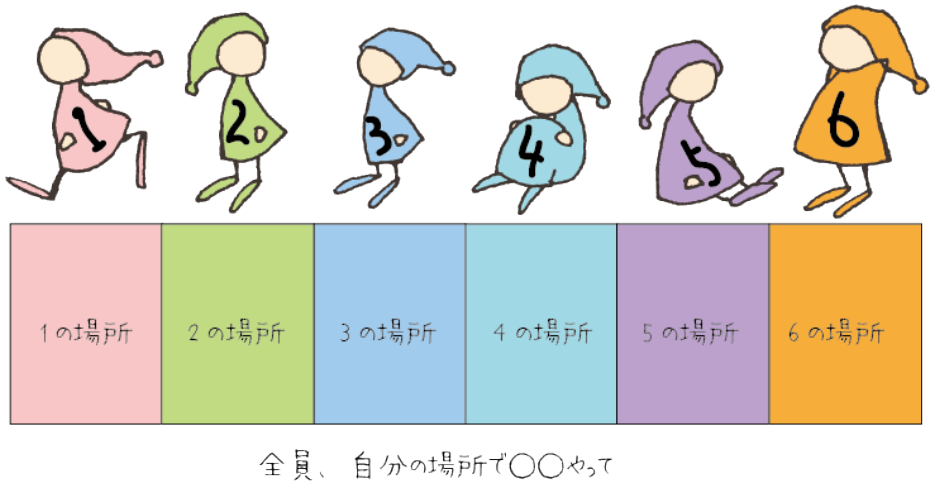




データ並列

- 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。

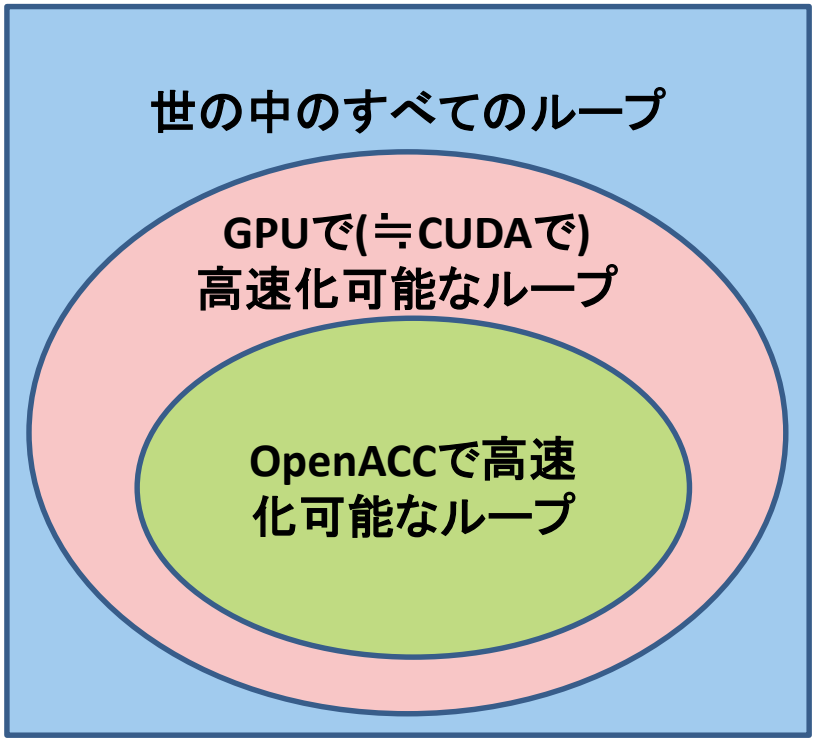
2 + 1 =	12 + (−88)=
3 + 19 =	-20 + 29 =
4 + (-6) =	4 + 10 =
-8 + 10 =	-32 + 12 =
10 + 3 =	-5 + 5 =



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 での高速化は通常、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];
```

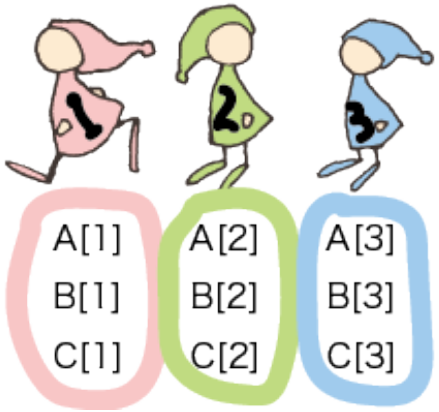
データ依存のある
ループの例

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

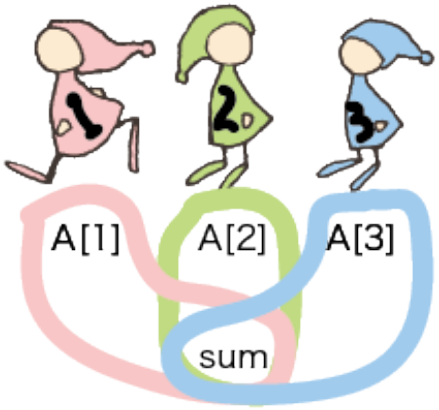
※OpenACCでも、GPUで正しく動くコードを書くことはできる。しかし遅いので意味がない

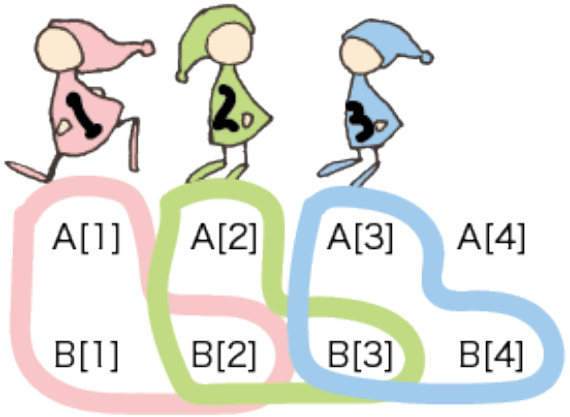
OpenACCで簡単に並列化できる

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)

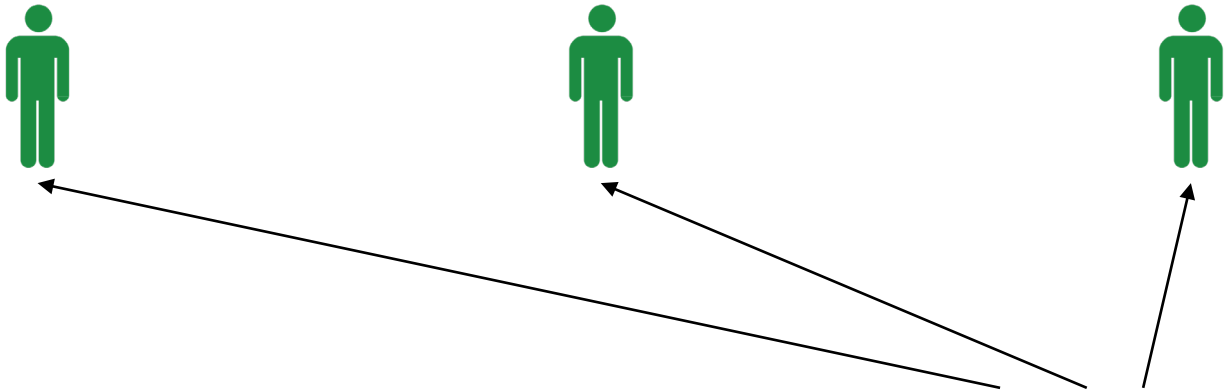




簡単に並列化できるループ

```
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;

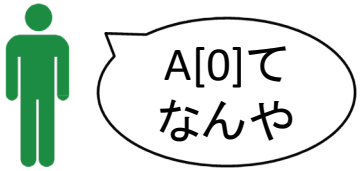


分担で計算を行う
スレッドさん

簡単に並列化できるループ

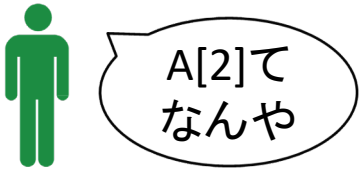
```
for ( i = 0; i < 3; i++)
    A[i] = A[i] + 1;
```

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;

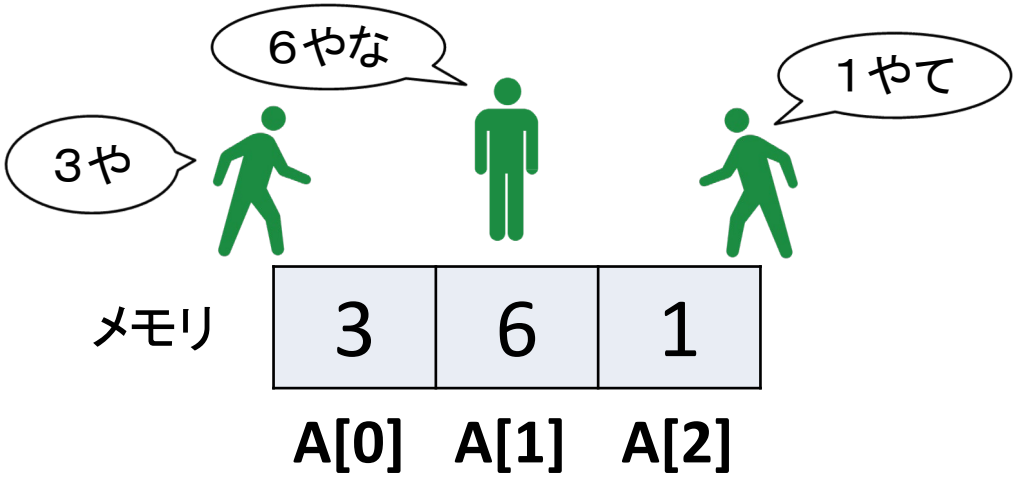
メモリ

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;
```

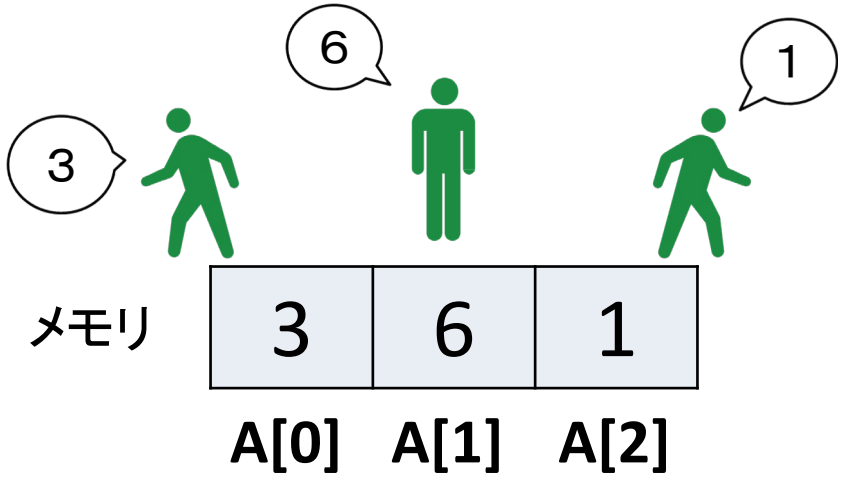
A[0] = A[0] + 1;　　**A[1] = A[1] + 1;**　　**A[2] = A[2] + 1;**



簡単に並列化できるループ

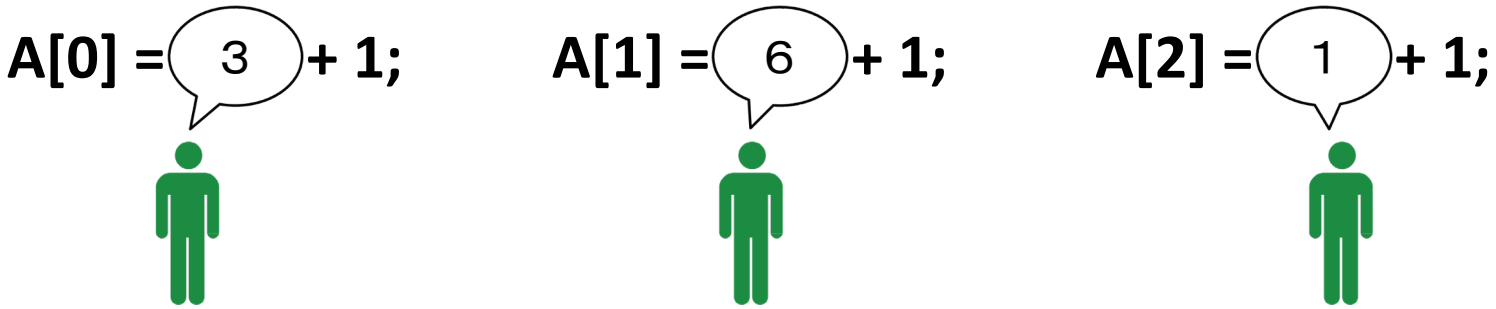
```
for ( i = 0; i < 3; i++)
    A[i] = A[i] + 1;
```

A[0] = A[0] + 1;　　**A[1] = A[1] + 1;**　　**A[2] = A[2] + 1;**



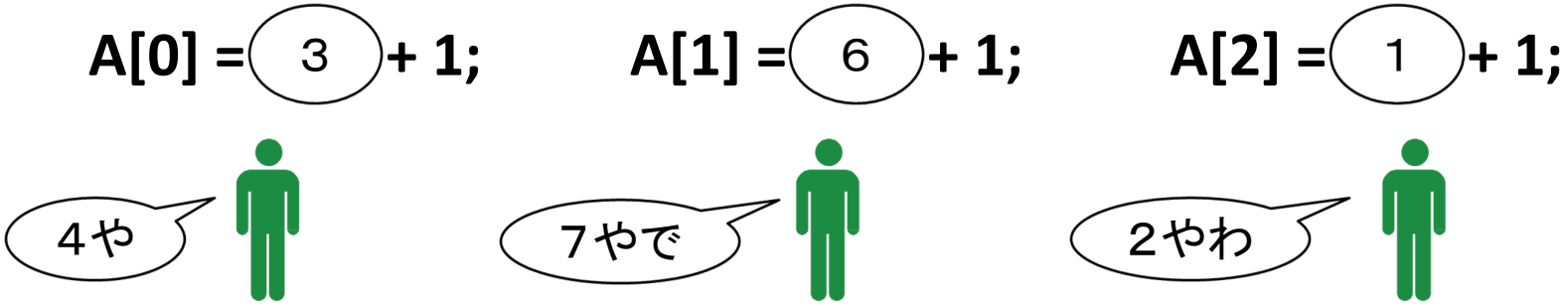
簡単に並列化できるループ

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



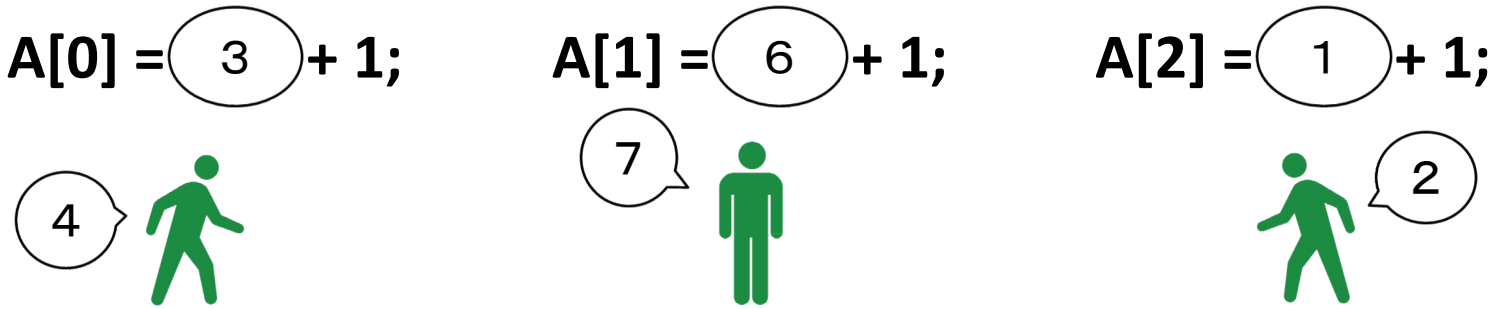
簡単に並列化できるループ

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



簡単に並列化できるループ

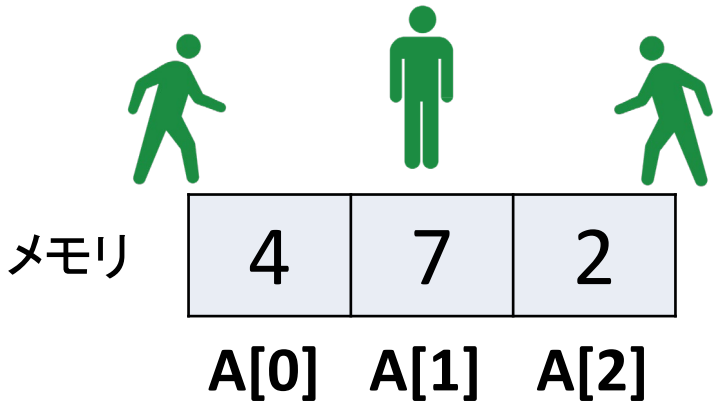
```
for ( i = 0; i < 3; i++)
    A[i] = A[i] + 1;
```



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] = (3) + 1;　　A[1] = (6) + 1;　　A[2] = (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] = (3) + 1;　　A[1] = (6) + 1;　　A[2] = (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

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;



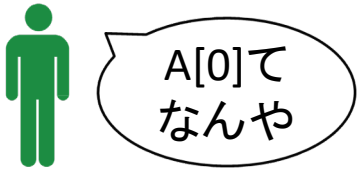
A[0]に3回1を足してるだけなので、
最終結果は 3 + 1 + 1 + 1 = 6。

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…

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;

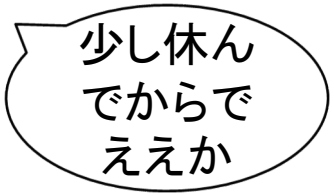
メモリ

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;



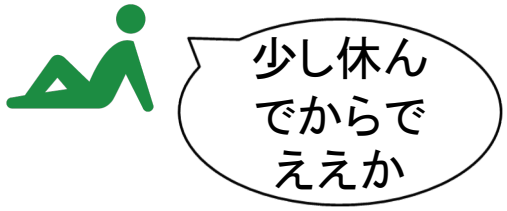
メモリ

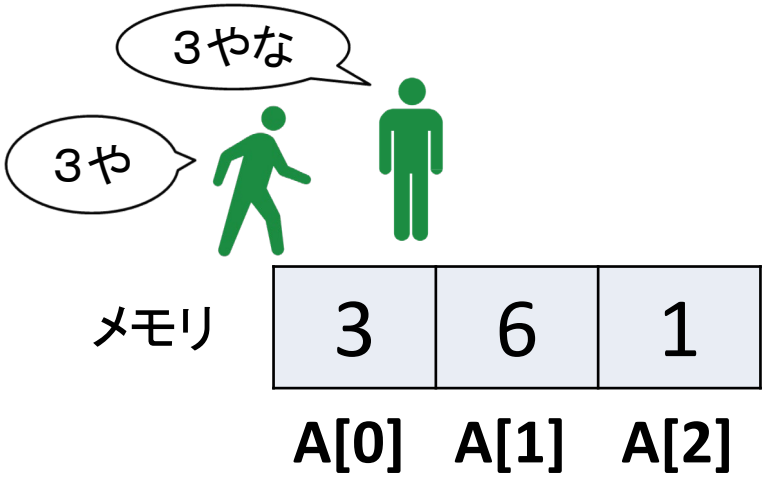
3	6	1
A[0]	A[1]	A[2]

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;

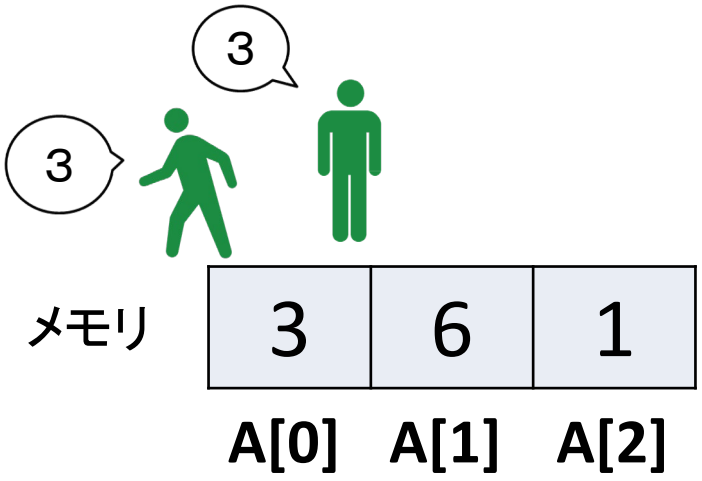




簡単に並列化できないループ

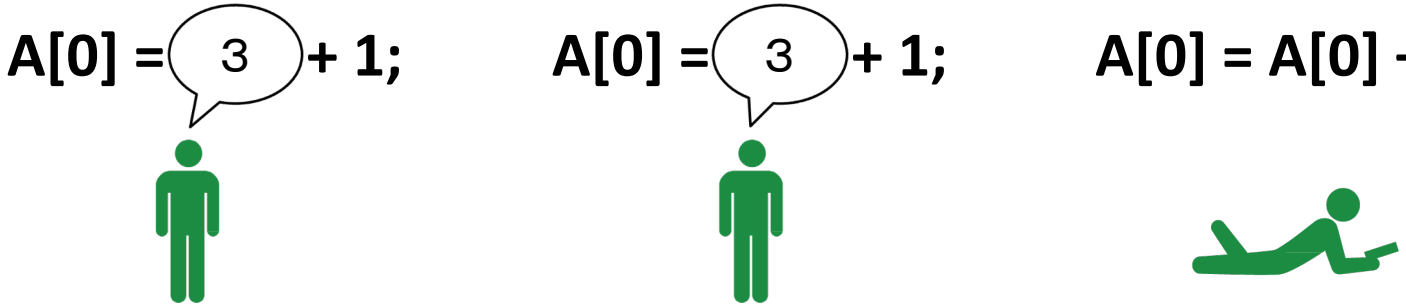
```
for ( i = 0; i < 3; i++)
    A[0] = A[0] + 1;
```

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;
```



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;

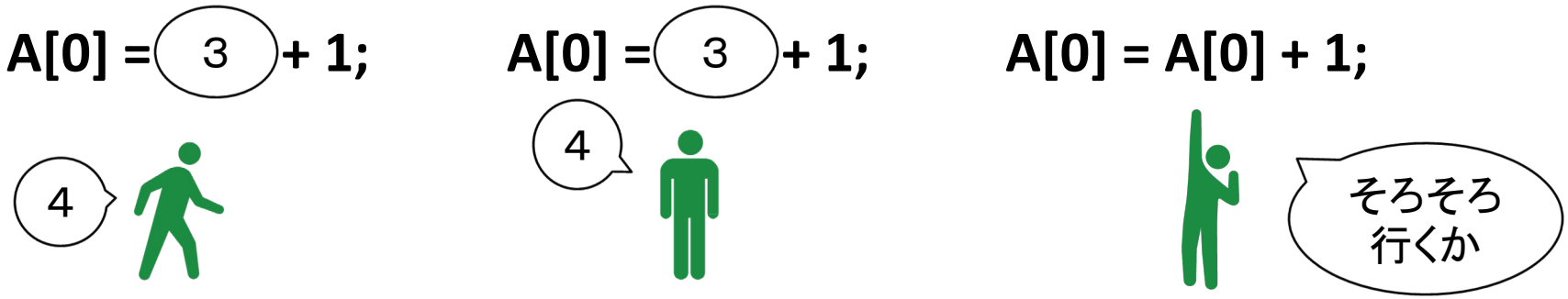
A[0] = A[0] + 1;

メモリ

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

簡単に並列化できないループ

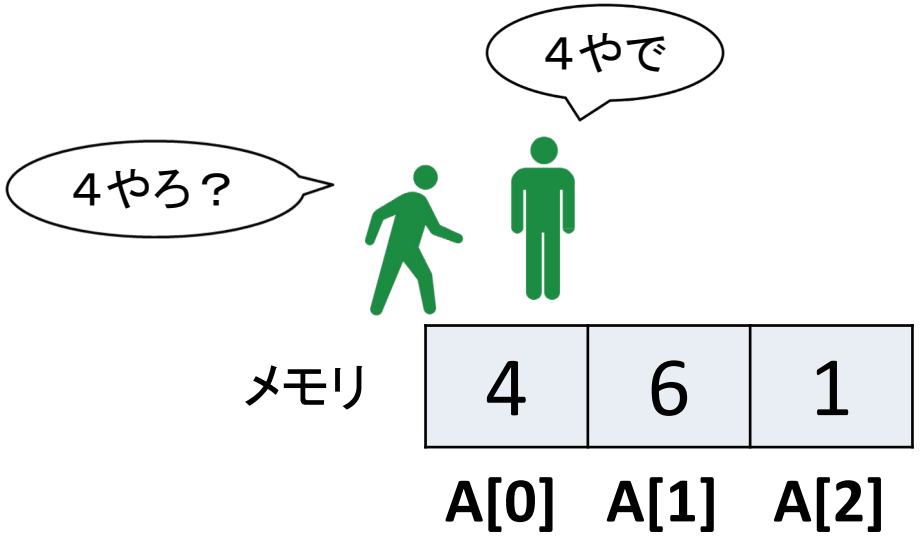
```
for ( i = 0; i < 3; i++)
    A[0] = A[0] + 1;
```



簡単に並列化できないループ

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

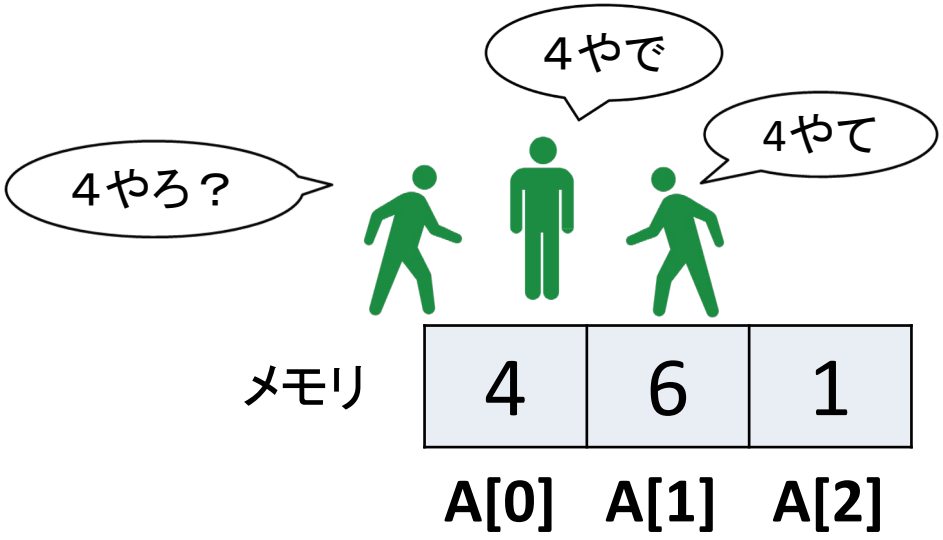
A[0] = (3) + 1;　　A[0] = (3) + 1;　　A[0] = A[0] + 1;



簡単に並列化できないループ

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

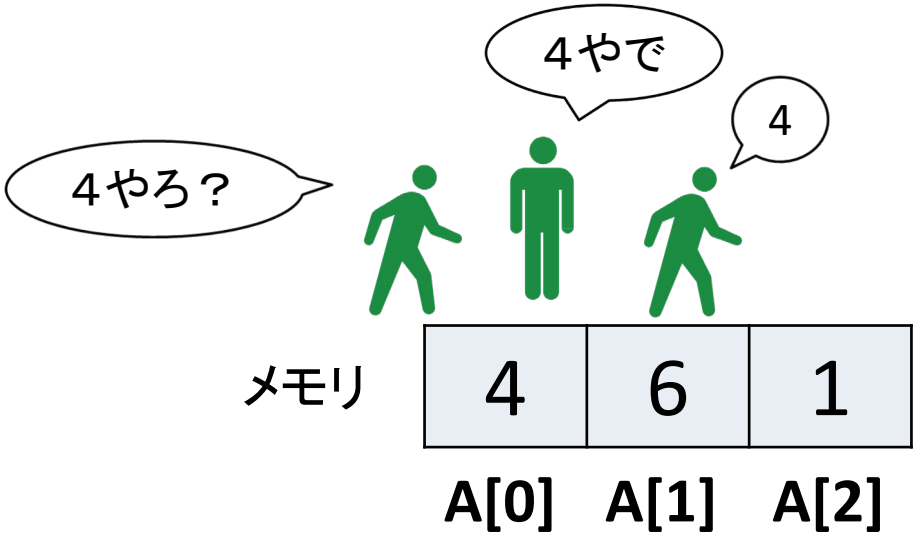
A[0] = (3) + 1;　　A[0] = (3) + 1;　　A[0] = A[0] + 1;



簡単に並列化できないループ

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

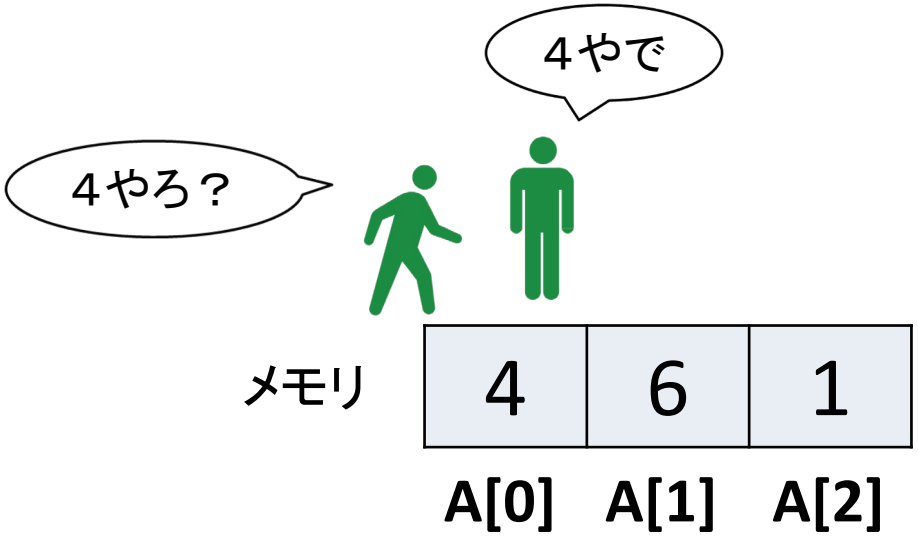
A[0] = (3) + 1;　　A[0] = (3) + 1;　　A[0] = A[0] + 1;



簡単に並列化できないループ

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

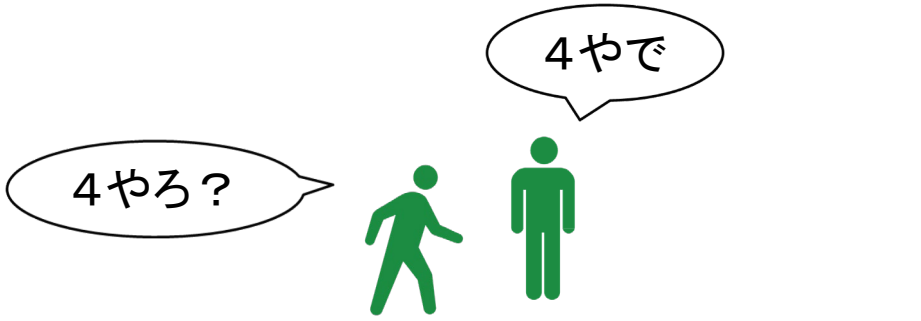
A[0] = (3) + 1;　　A[0] = (3) + 1;　　A[0] = (4) + 1;



簡単に並列化できないループ

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

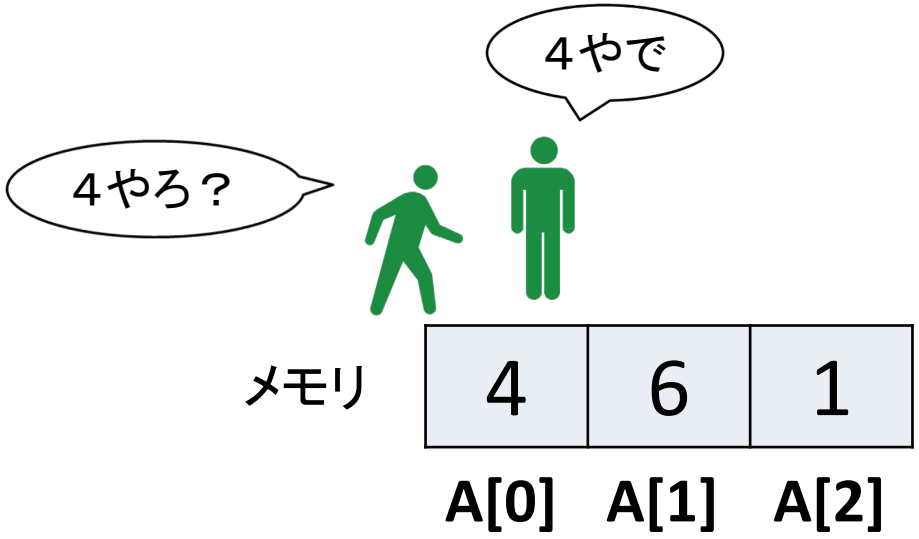
A[0] = (3) + 1;　　A[0] = (3) + 1;　　A[0] = (4) + 1;



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] = (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] = (3) + 1;　　A[0] = (3) + 1;　　A[0] = (3) + 1;

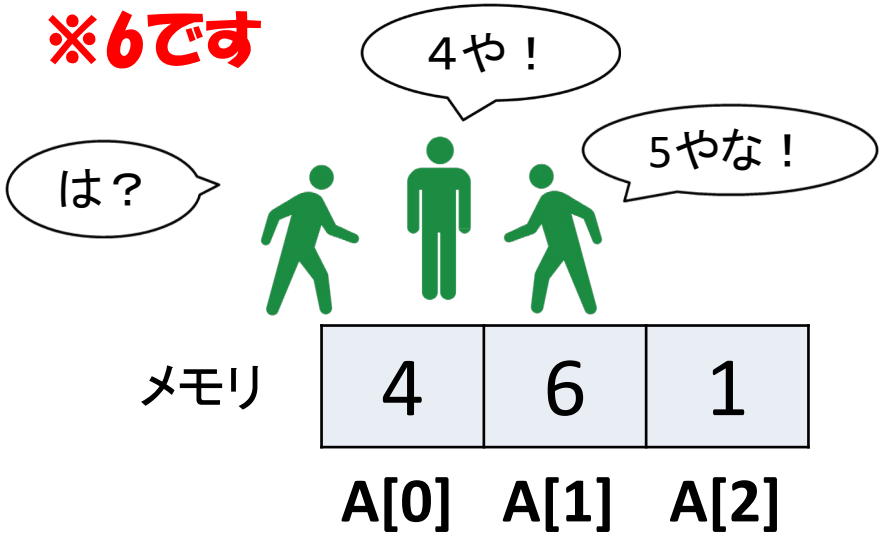
CPUで実行される足し算は、

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！

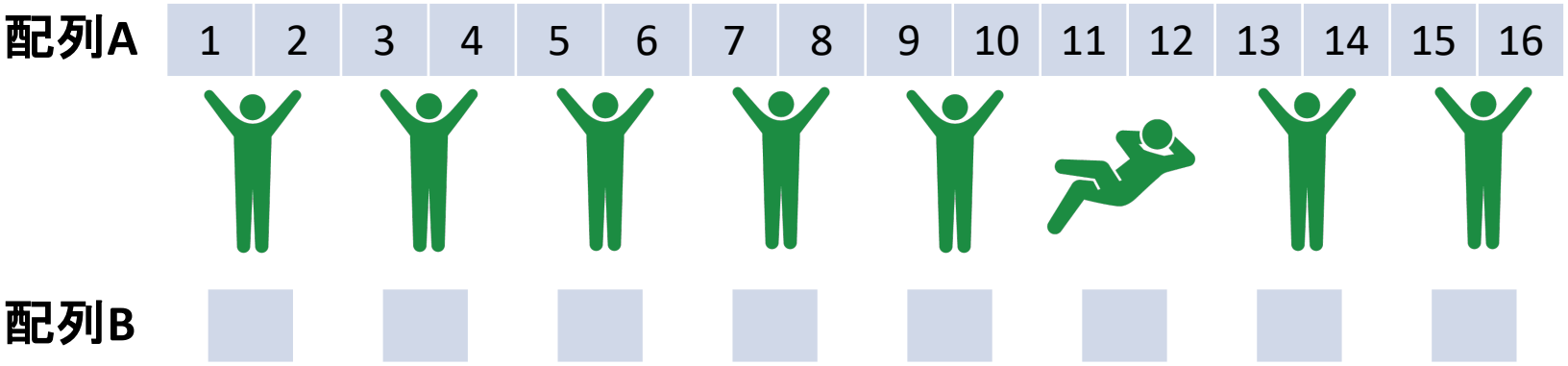
（この例の場合は4,5,6のいずれかになる）



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

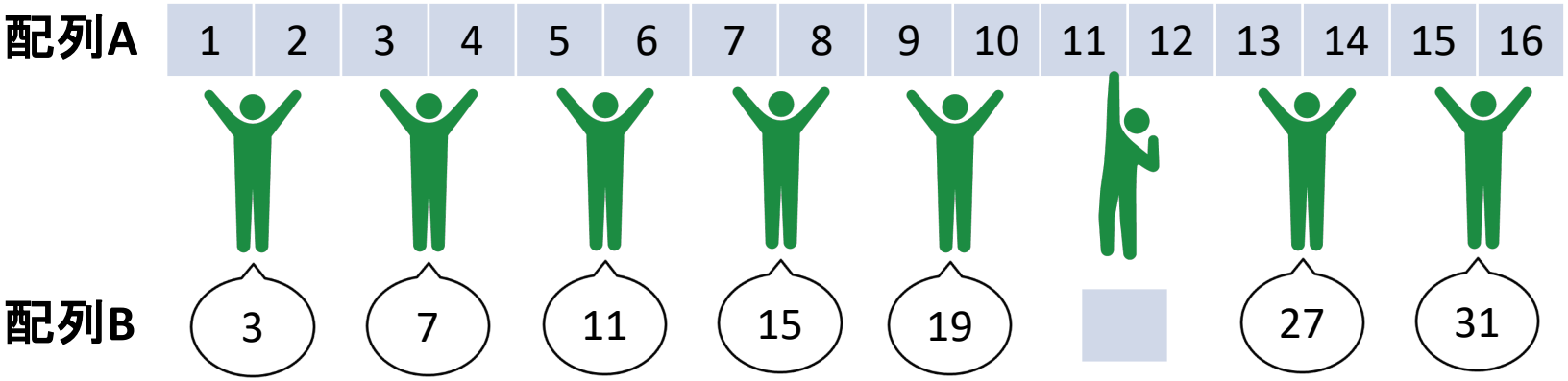
```
sum = 0;
for ( i = 0; i < 16; i++)
    sum = sum + A[i];
```



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];
```

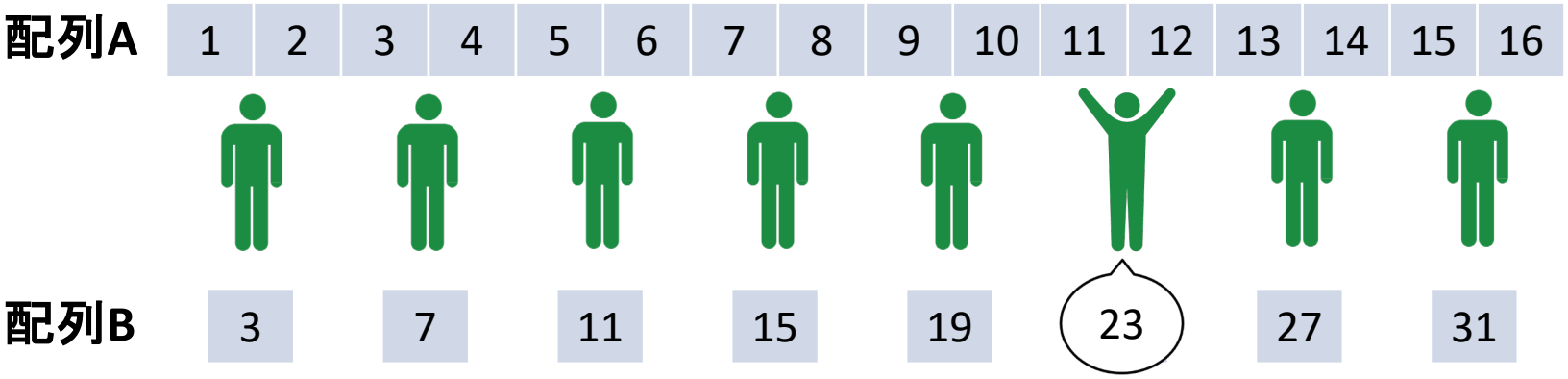


1. 各々自分の担当領域で足し算（結果を別の場所に保存）

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];
```

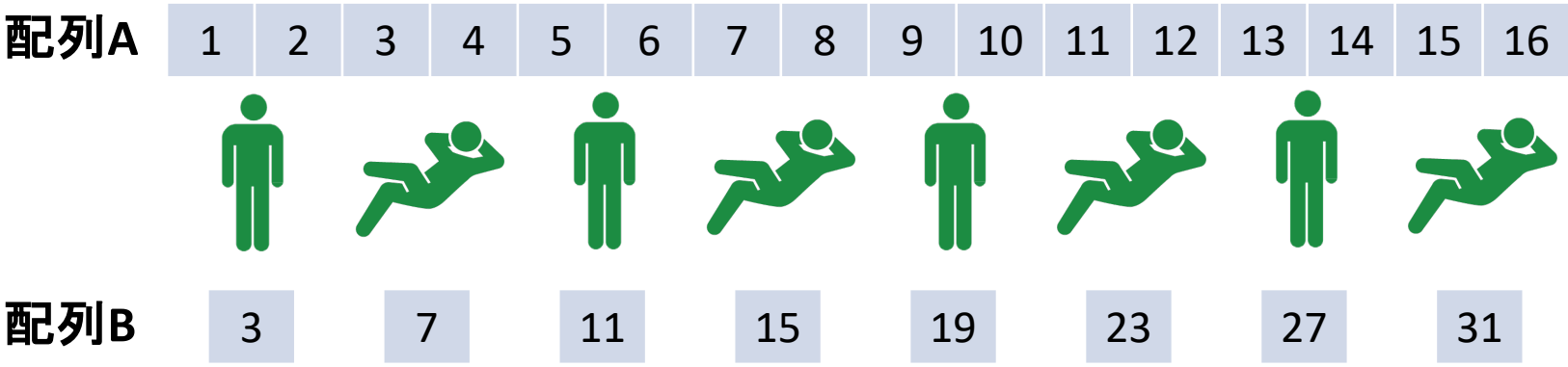


1. 各々自分の担当領域で足し算（結果を別の場所に保存）
2. 遅れているスレッドを待つ！（これを**同期(thread synchronization)**という）

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];
```



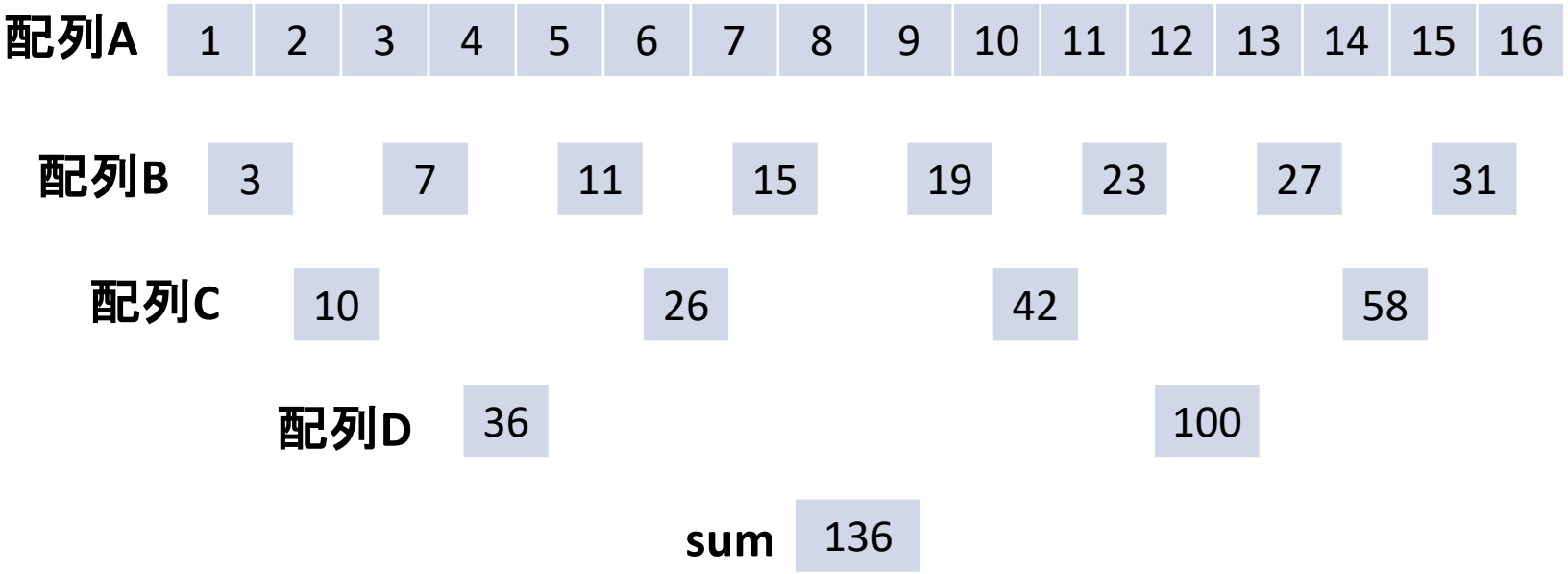
配列C

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];
```



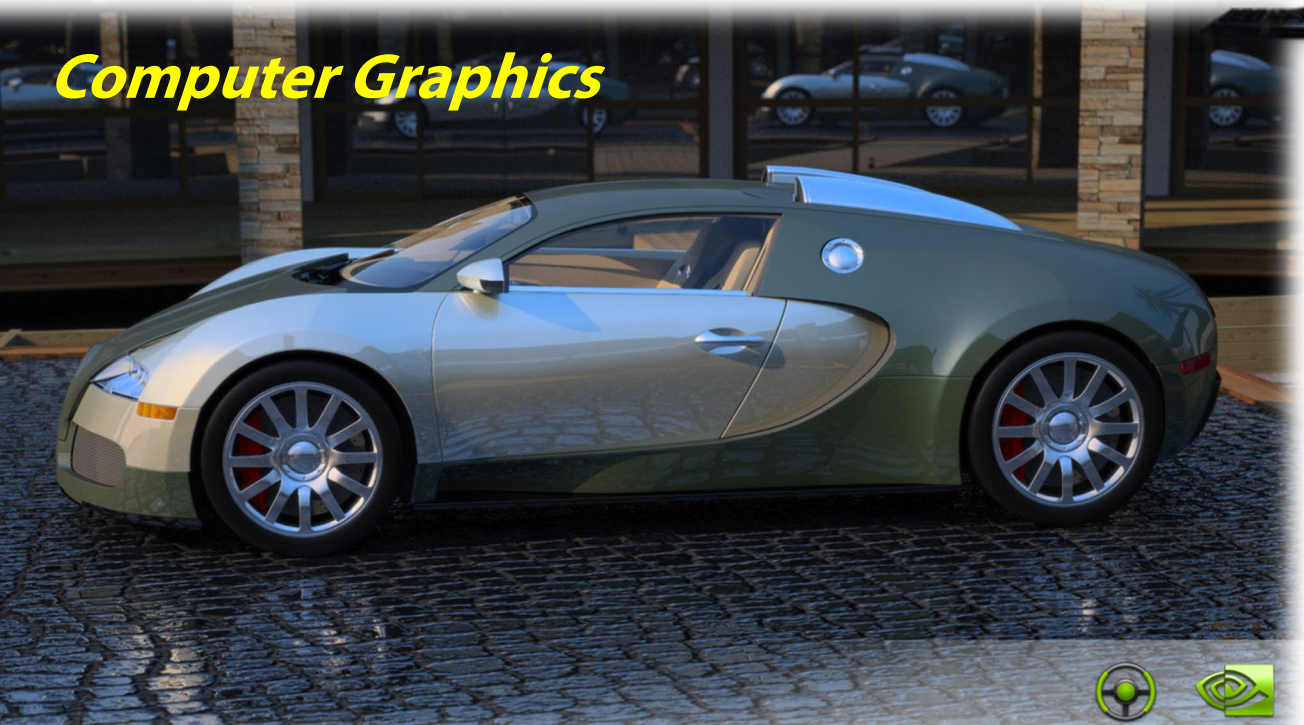
- これは一般的にリダクションと呼ばれる演算パターン
- 一番働くスレッドが4回の足し算。逐次の場合と比較して4倍の高速化
- メモリなどを介してスレッドの間でデータのやり取りをすることをスレッド間通信という

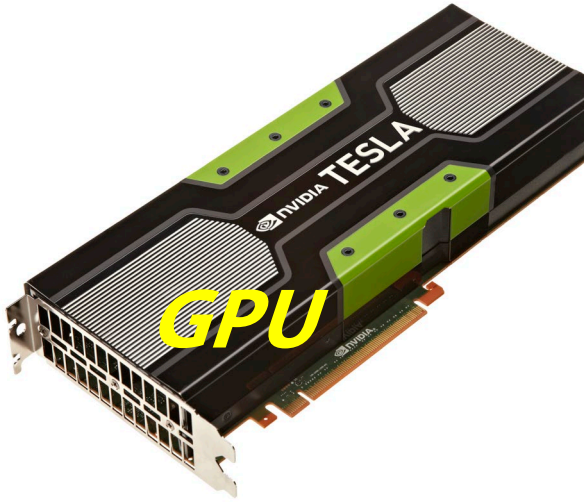
スレッドの同期・通信が入ると途端に難しくなる！

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る。
  = 非常に安価





http://www.nvidia.co.jp

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
- ここ数年、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

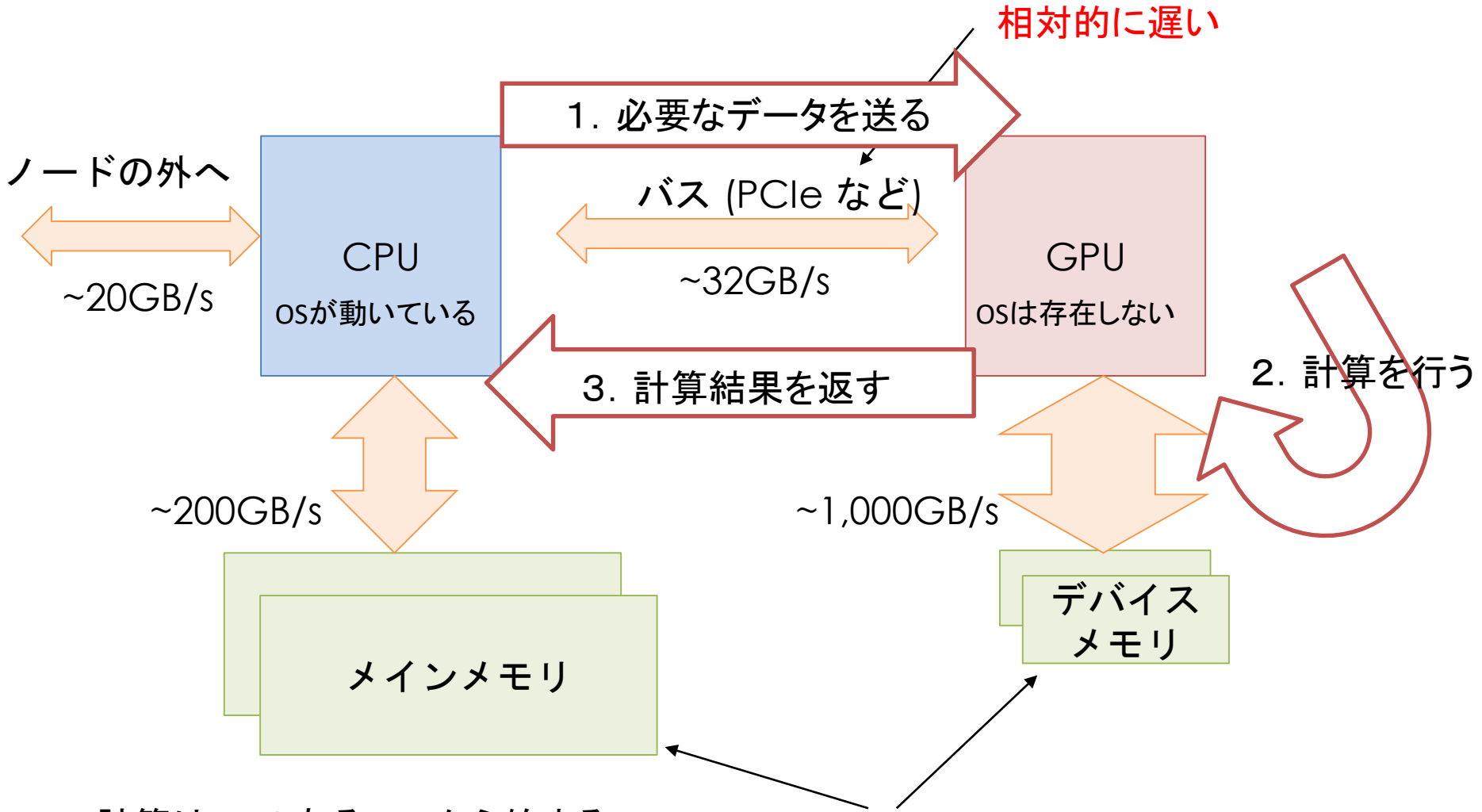
これらはプログラミング言語がCUDAかOpenACCに関わらず、GPUプログラミングでは考慮する必要がある。

NVIDIA Tesla P100

- **56 SMs, 3584 CUDAコア, 16 GByte**

Tesla P100 whitepaper より

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何度も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 **(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	65 GB/sec
GPUのメモリ	540 GB/sec
CPU-GPU間のバス	10 GB/sec

```
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
```

(1) 2 * 8 * N / 65

(2) 2 * 8 * N / 540
+ 2 * 8 * N / 10

N = 10^9 (1G) なら？

(1) 0.246 sec (2) 1.629 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何度も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 (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	65 GB/sec
GPUのメモリ	540 GB/sec
CPU-GPU間のバス	10 GB/sec

```
if(GPU) BをCPUからGPUにコピー
do time_step = 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
```

(1) 2 * 8 * N * 100/ 65

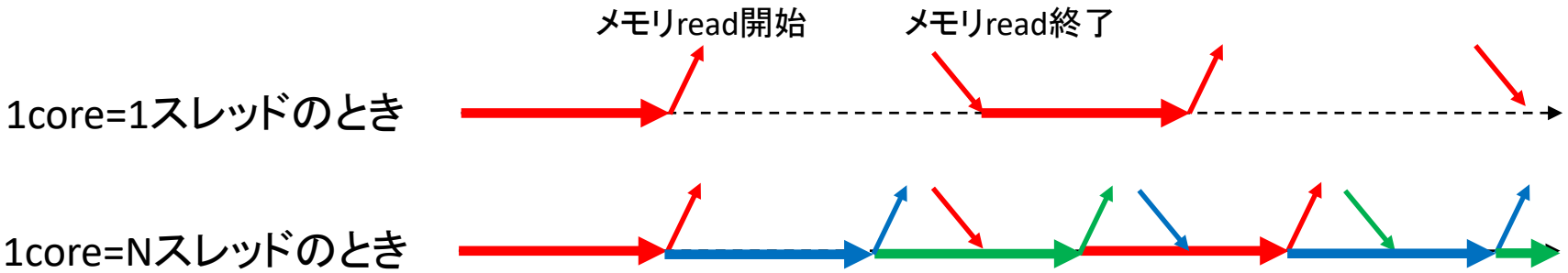
(2) 2 * 8 * N *100 / 540
+ 2 * 8 * N / 10

$N = 10^9$ (1G) なら？

(1) 24.6 sec (2) 4.56 sec

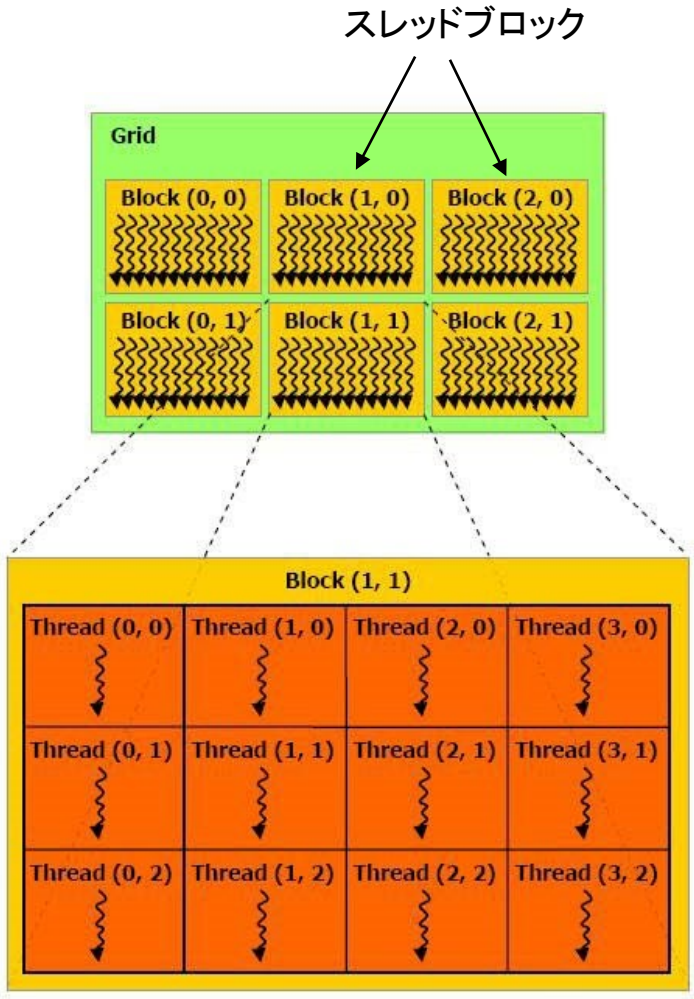
性能を出すためにはスレッド数>>コア数

- 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

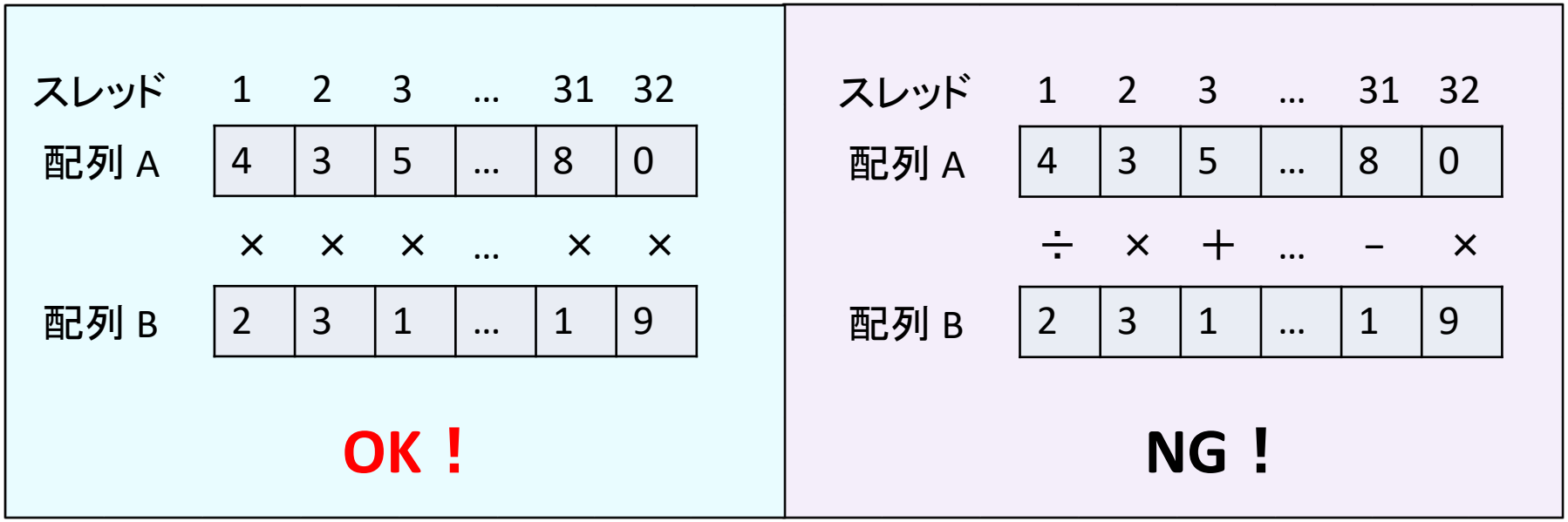
- 階層的なコア/スレッド管理
  - **P100は56 SMを持ち、1 SMは64 CUDA coreを持つ。トータル3584 CUDA core**
  - **1 SMが複数のスレッドブロックを担当し、1 CUDA core が複数スレッドを担当**
- スレッド間のコミュニケーション
  - 同一スレッドブロック内のスレッドは高速コミュニケーション可能
  - 異なるスレッドブロックに属するスレッド間はコミュニケーションが低速
    - いったんメモリに書き出したり、**CPU**に処理を戻さなくてはならない



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

Warp 単位の実行

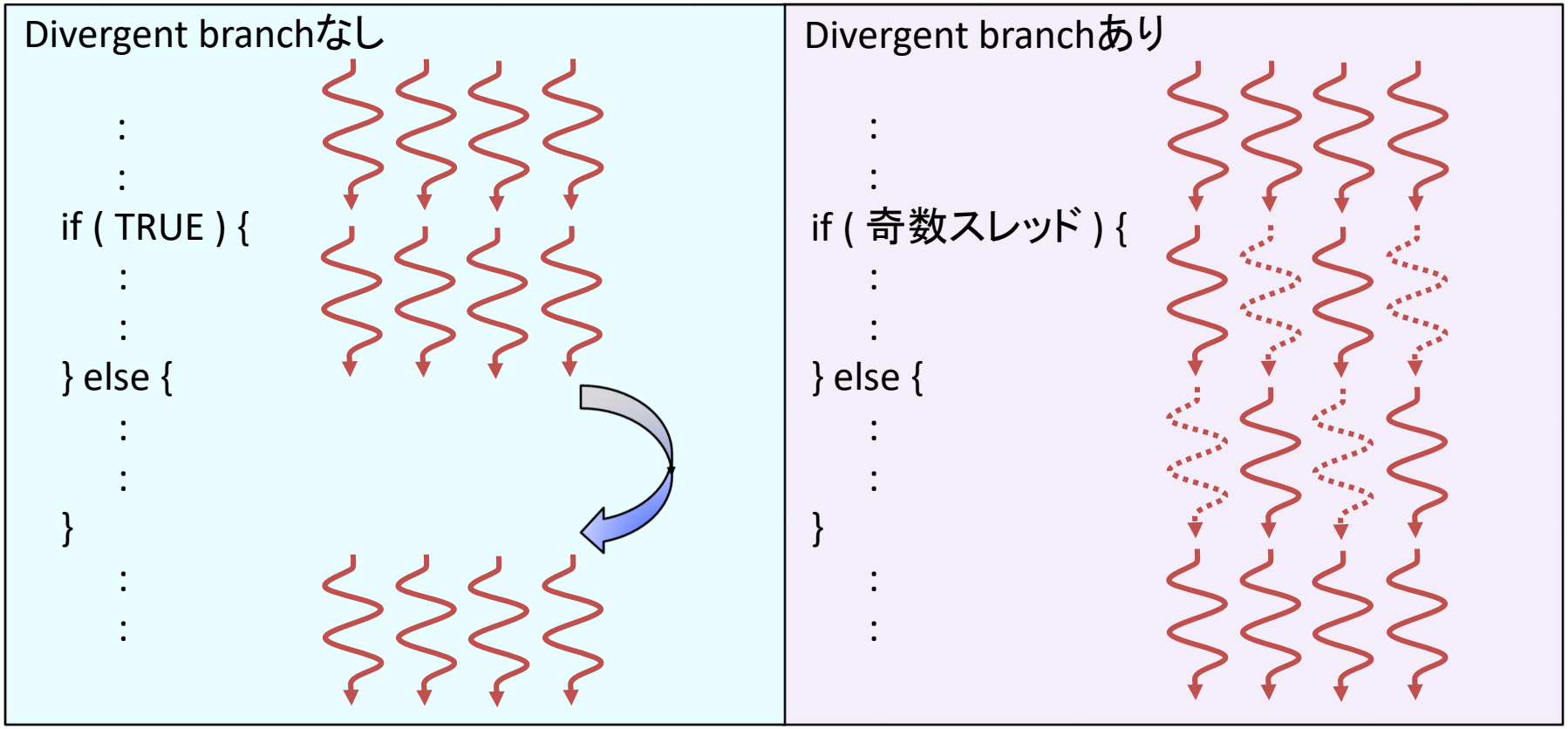
- 連続した32スレッドを1単位＝Warpと呼ぶ
- このWarpは足並み揃えて動く
  - 実行する命令は32スレッド全て同じ
  - データは違ってもいい



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単位の分岐ならOK。**



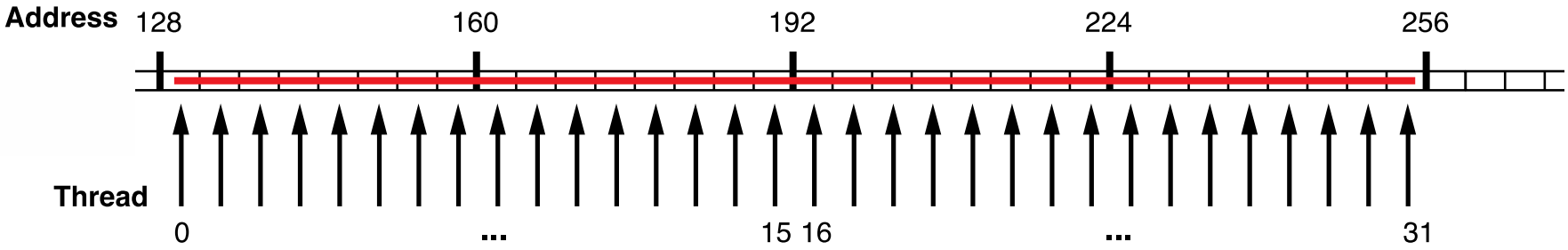
else 部分は実行せずジャンプ

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

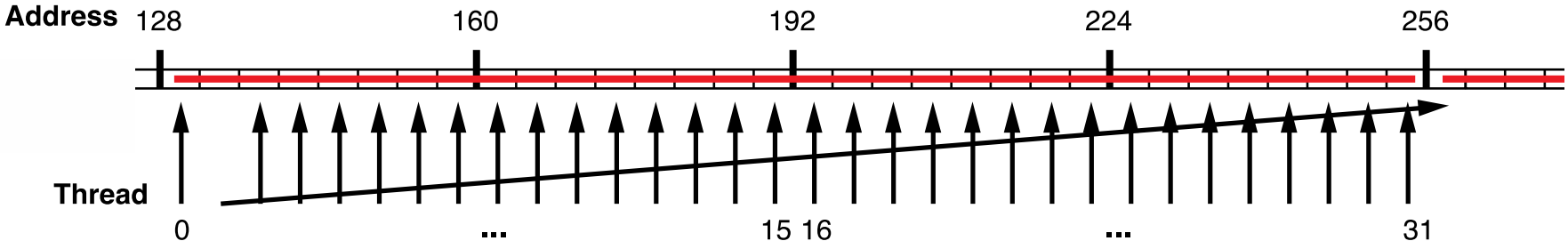
コアレスドアクセス

- 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

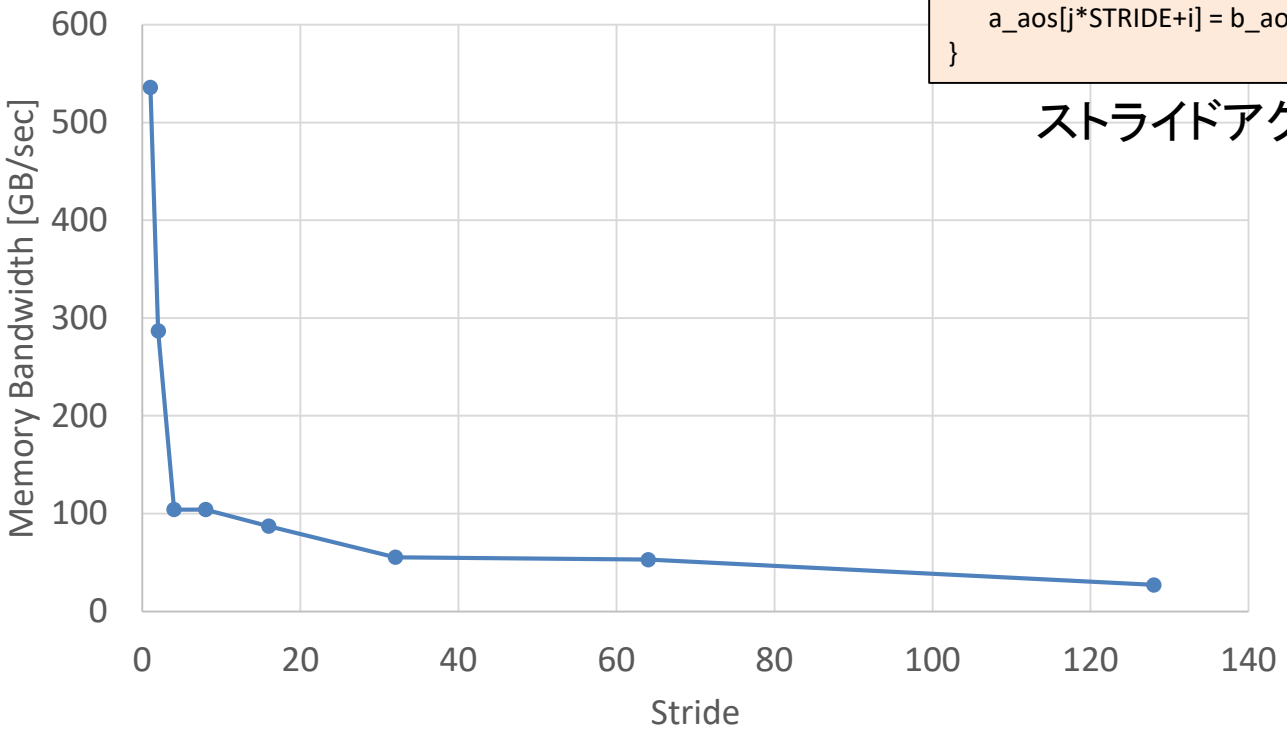


ストライドアクセスがあるとどうなるか

- **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



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。

OpenACC

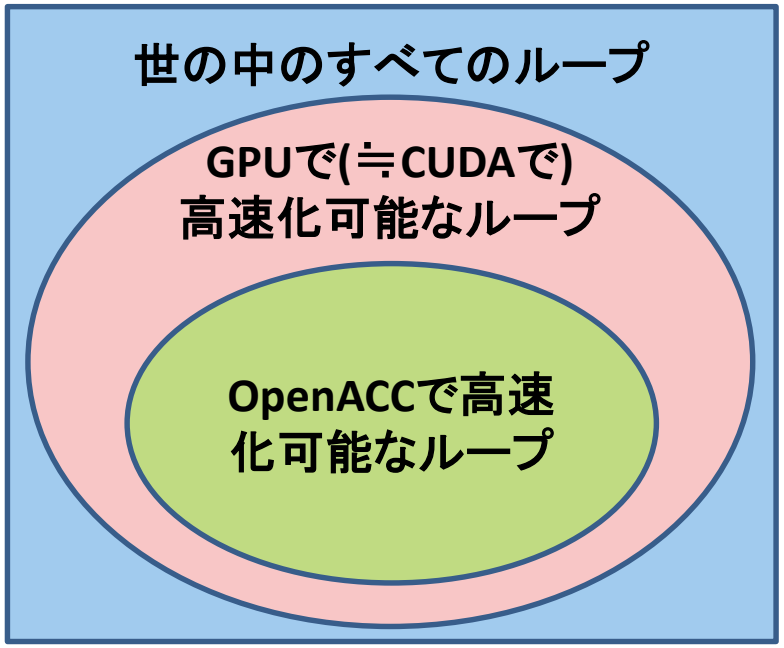
- **OpenACCとは**
  - ✓ 新しいアクセラレータ用プログラミングインターフェース
  - ✓ **OpenMP** のようなディレクティブ（指示文）・ベース
  - ✓ **C** 言語/**C++, Fortran** に対応
  - ✓ **2011**年秋に **OpenACC1.0**、最新は **2.5**
  - ✓ コンパイラ：[商用]**PGI, Cray,**[フリー]**GCC**（**PGI**は無料版あり）
  - ✓ **WEB**サイト：**http://www.openacc.org/**
- **指示文ベースの利点**
  - ✓ 指示文：コンパイラへのヒント
  - ✓ 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
  - ✓ **CPU-GPU** 間のデータ移動
  - ✓ **GPU** で実行する場所の指定
  - ✓ ループの **OpenACC** での並列化可否

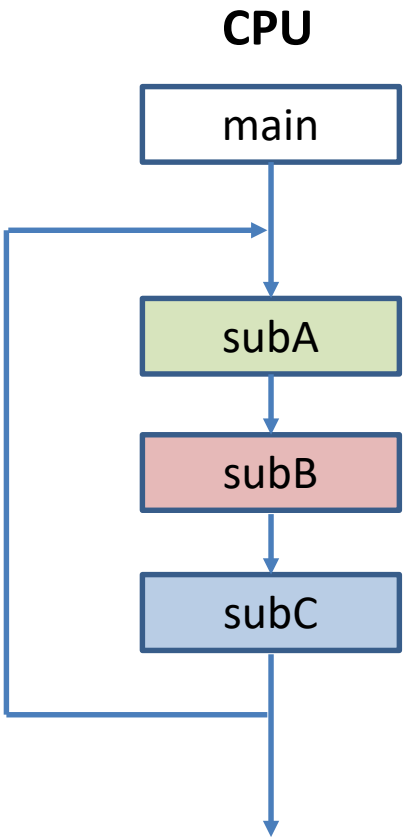


制約の大きい**OpenACC**をなぜ推奨するのか

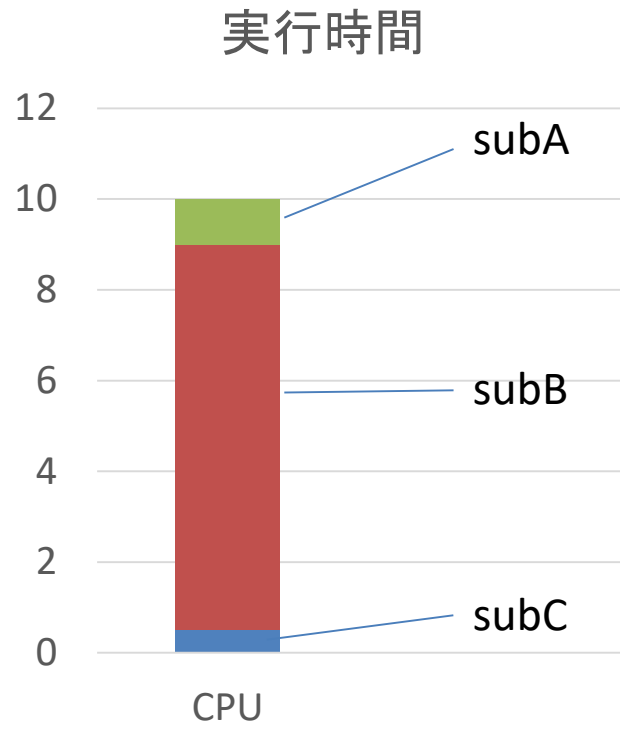
OpenACCを推奨する理由

- **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

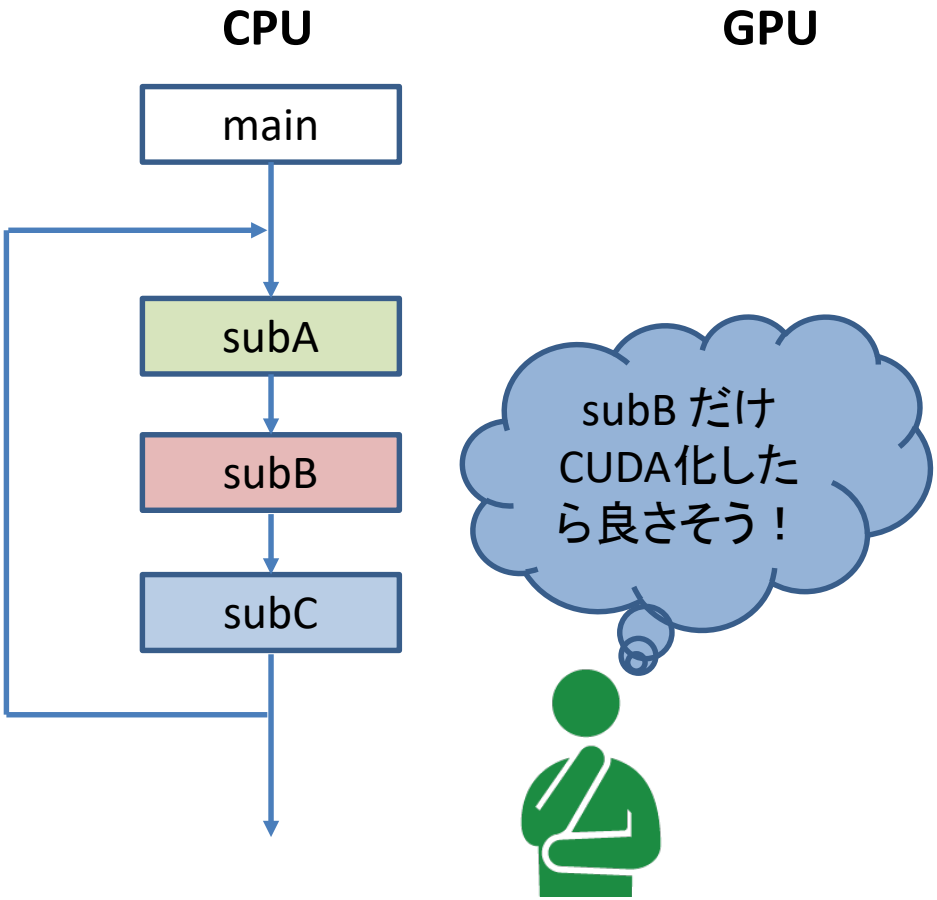


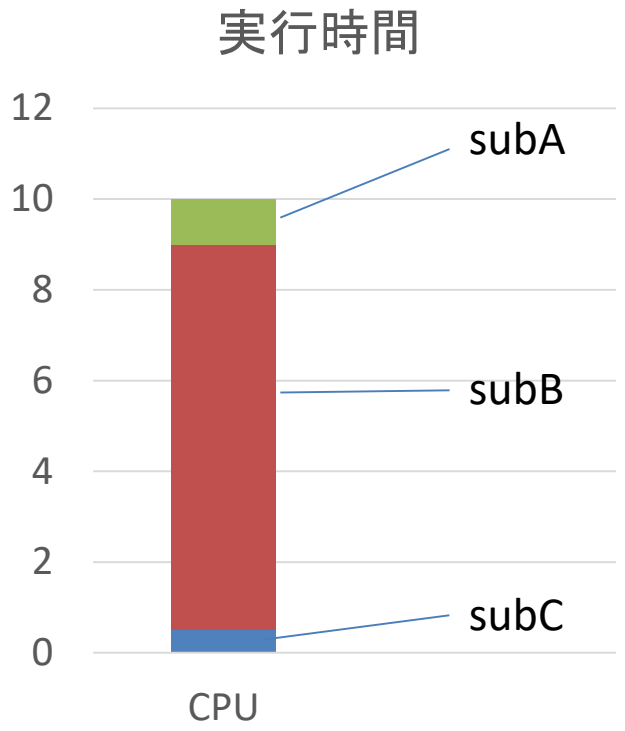
GPU



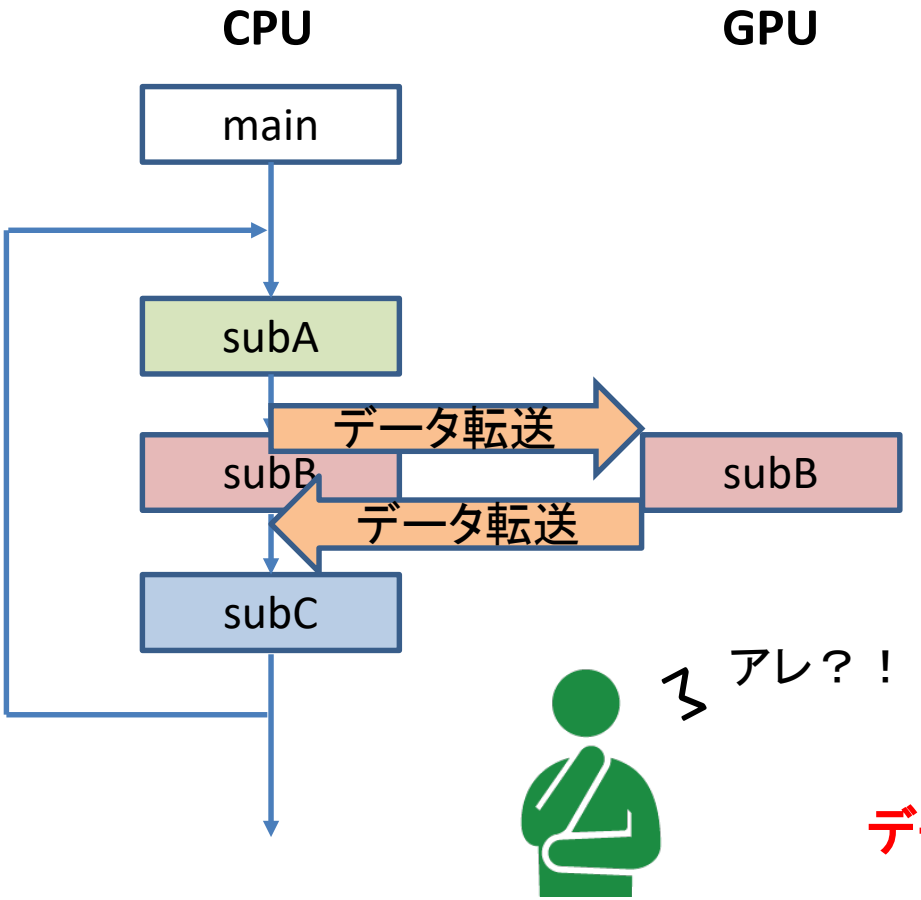
とあるプログラムの構造と実行時間を調べた結果

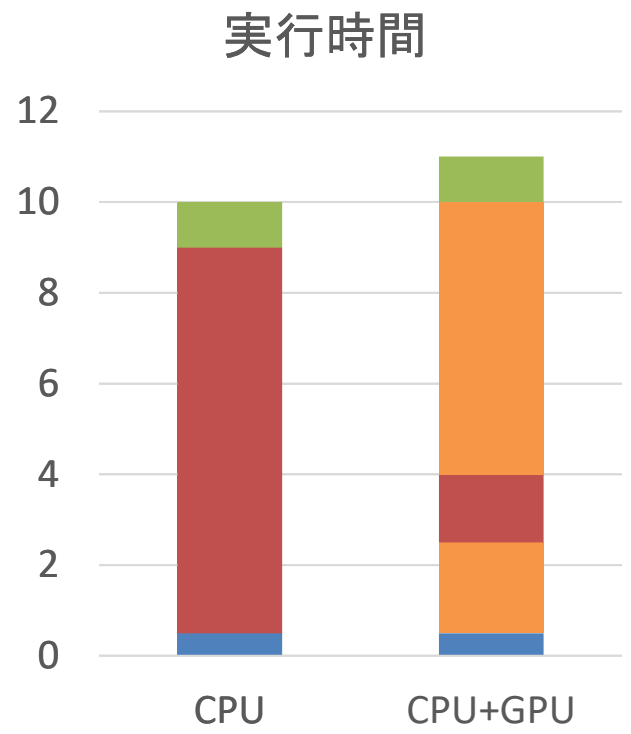
OpenACCを推奨する理由





OpenACCを推奨する理由





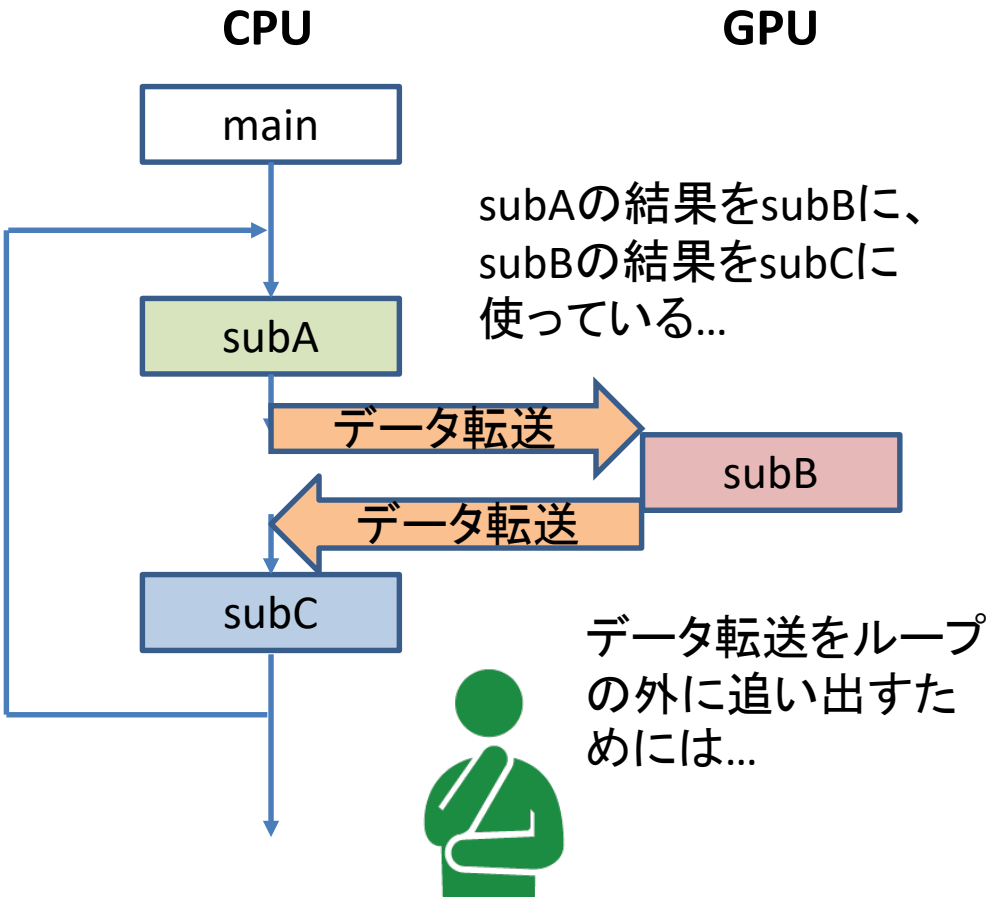
データ転送分遅くなった！

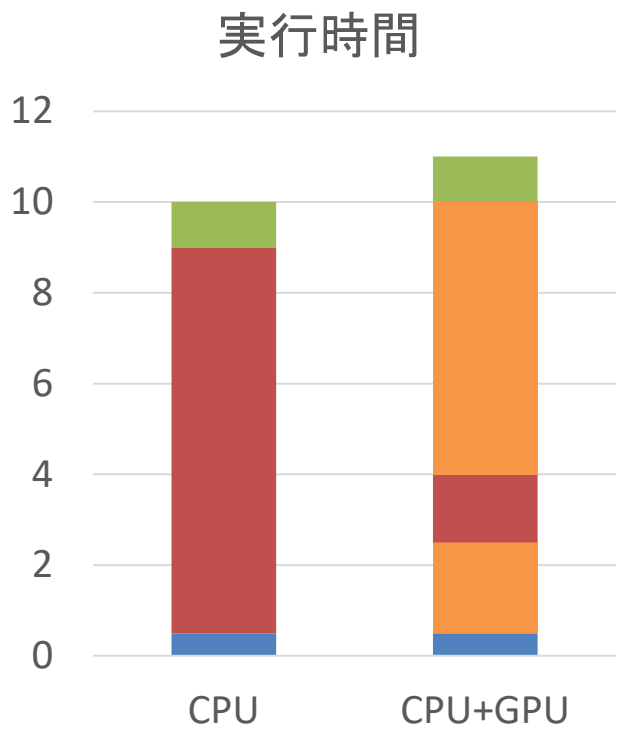
OpenACCを推奨する理由

- **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

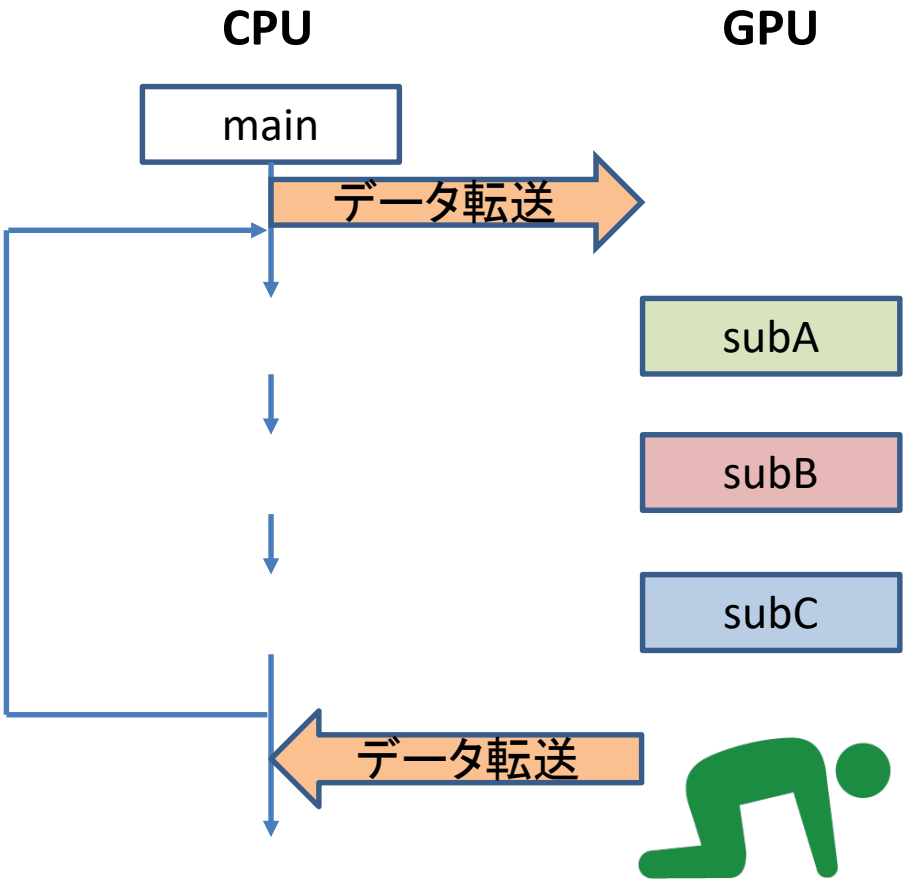
OpenACCであってもCUDAであっても、
結局ここまでが必須！

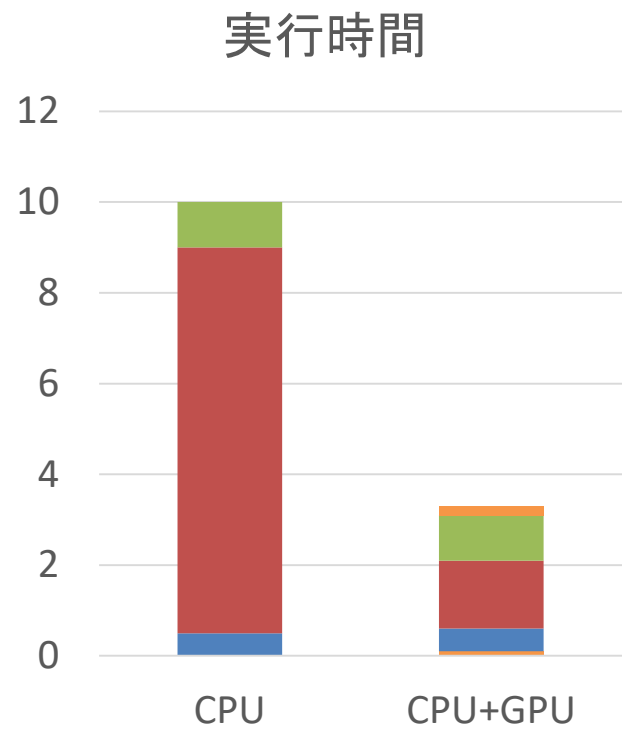
OpenACCを推奨する理由





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）

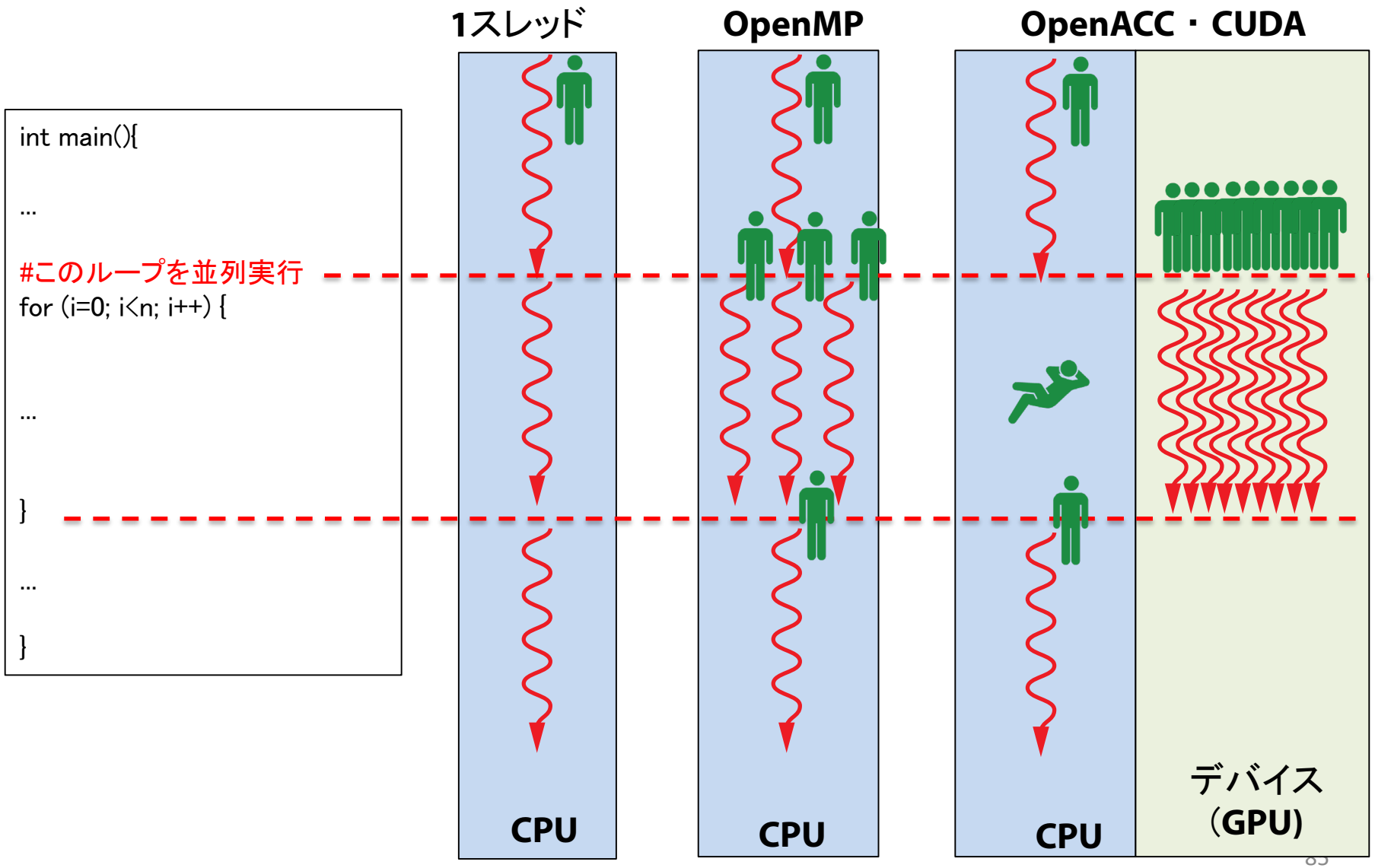
```
...
#pragma acc data copy(a[0:n])
{
...
#pragma acc host_data use_device(a)
{
    cuda_func(a, n)
}
...
}
...
```

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

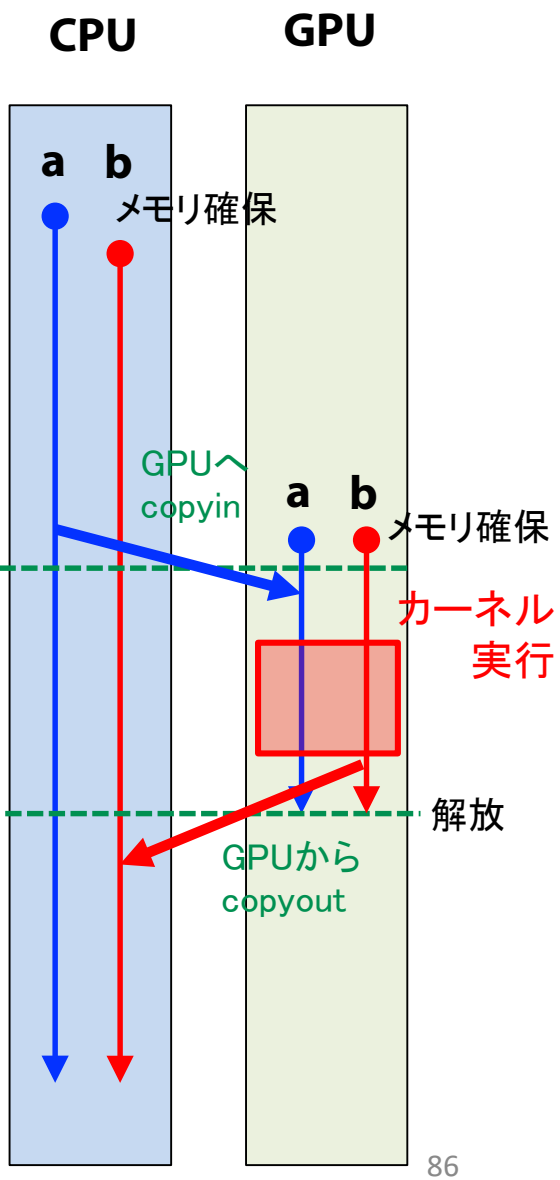
OpenACCの実行イメージ



はじめてのOpenACCコード

openacc_hello/01_hello_acc

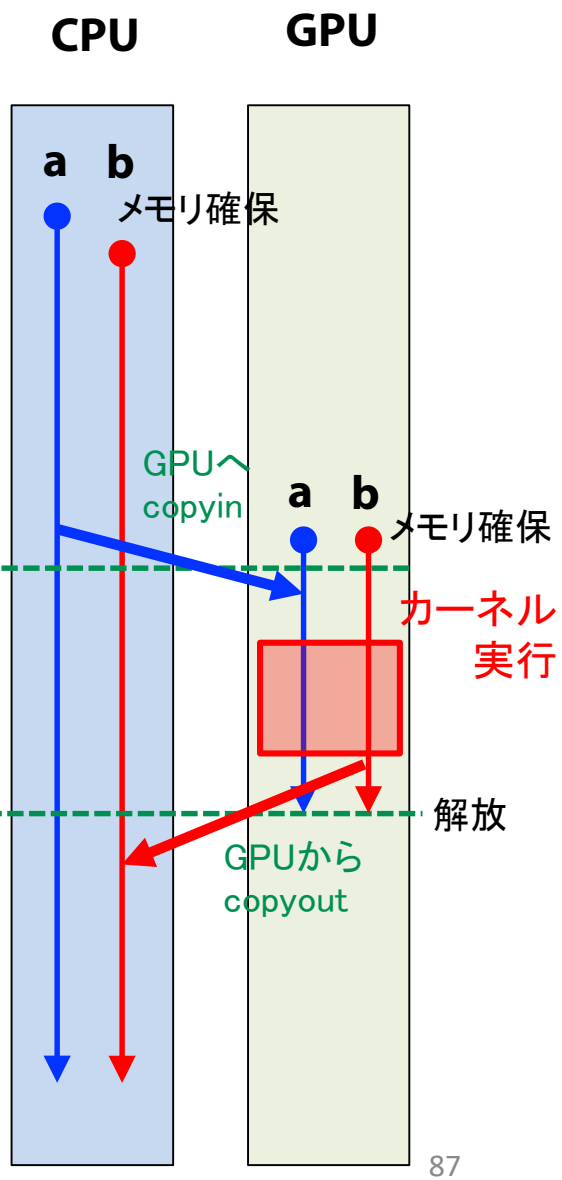
```
int main(){
    const int n = 1000;
    float *a = malloc(n*sizeof(float));
    float *b = malloc(n*sizeof(float));
    float  c = 2.0;
    for (int i=0; i<n; i++) {
        a[i] = 10.0;
    }

#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
を参照しにいく。

OpenACCの主な指示文

- 並列領域指定指示文
  - ✓ **kernels, parallel**
- データ管理・移動指示文
  - ✓ **data, enter data, exit data, update**
- 並列処理の指定
  - ✓ **loop**
- その他
  - ✓ **host_data, atomic, routine, declare**

赤字：この講習会で扱うもの

OpenACC によるアクセラレータでの実行

- **kernels** 指示文
  - ✓ 指定された領域がアクセラレータで実行されるカーネルへ
  - ✓ 一般には、それぞれのループが別々のカーネルへコンパイル

```
int main() {

#pragma acc kernels
{
    for (int i=0; i<n; i++) {
        A;
    }

    for (int i=0; i<n; i++) {
        B;
    }
}

}
```

kernel 1

kernel 2

  - ✓ 同様な指示文として、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

CPUコードのOpenACC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;
    }




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
  - ✓ 並列化したいループに**kernels, loop** 指示文を追加

CPUコードのOpenACC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 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
  - ✓ 並列化したいループに**kernels, loop** 指示文を追加

CPUコードのOpenACC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 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
  - ✓ 並列化したいループにkernels, loop 指示文を追加

カーネルとしてコンパイルされ、
GPU上で実行される
配列の1要素が1スレッドで処理されるイメージ

CPUコードのOpenACC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

!$acc kernels
!$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
```

Fortranも同じ

- ループのOpenACC 化
  - ✓ 並列化したいループに**kernels, loop** 指示文を追加

OpenACCのデフォルトの変数の扱い

- スカラ変数
  - ✓ **firstprivate** または **private**
  - ✓ 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。
- 配列
  - ✓ **shared**
  - ✓ 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。

- **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。
  - ✓ 配列はデバイスメモリに確保され、**shared** になる。
  - ✓ 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。

データ管理・移動

C

- **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

変数 c はスカラ変数のため、自動的に デバイスへコピーされ、プライベート変数となる。

データ管理・移動

F

- **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）

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])
...
```

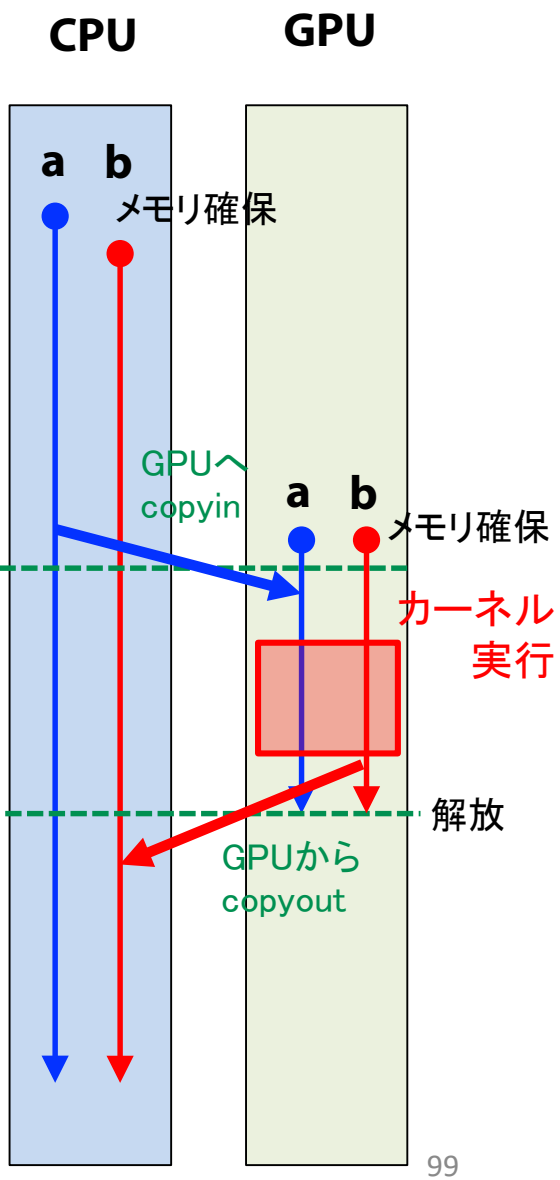
並列処理の指定

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;
    }

    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;
}
```

loop指示文



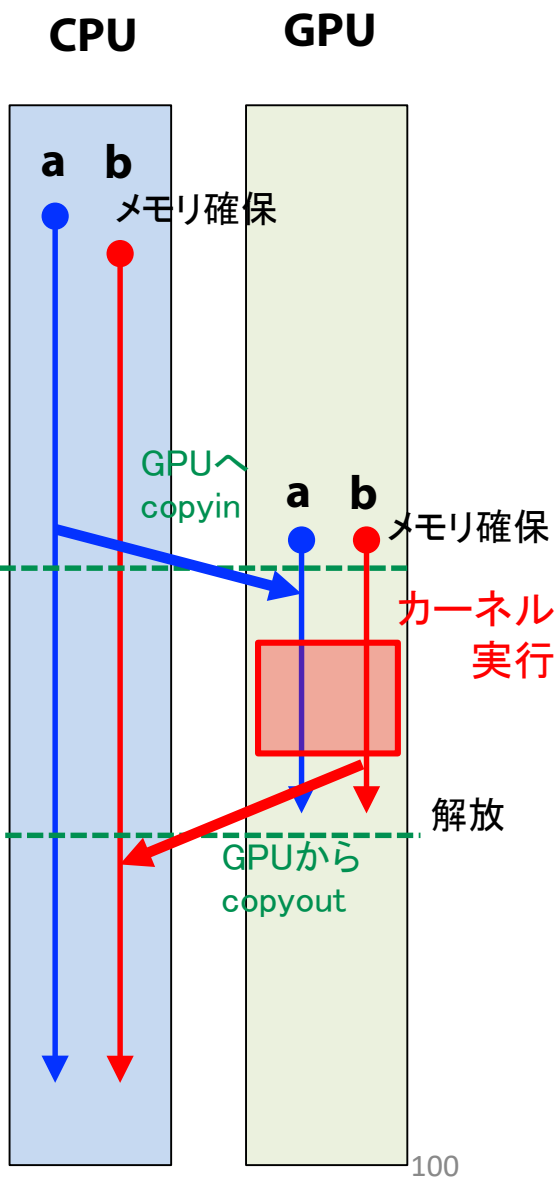
並列処理の指定

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



並列処理の指定：loop 指示文

- 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）
  - ✓ **gang, worker, vector** を用いて指定する。大まかに以下のように考えると良い。
    - **gang: CUDA の thread block 数の指定**
    - **vector: CUDA の block 内の threads 数の指定**
- ループの種類を指定
  - ✓ 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)**

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];
    }
```

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** 指示文で並列処理の最適化。
- ✓ **data** 指示文でデータ転送を制御。
  kernels 指示文でデータ転送を自動的に行うこともできる。

```
// 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

- **PGIコンパイラによるコンパイル**
  - ✓ **ReedbushではOpenACCはPGIコンパイラで利用できます。**

```
$ module load pgi/19.10
$ pgcc -O3 -acc -Minfo=accel -ta=tesla,cc60 -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。

-ta=tesla,cc60:

ターゲット・アーキテクチャの指定。**NVIDIA GPU Teslaをターゲットとし、compute capability 6.0 (cc60)** 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 pgi/19.10
$ make
```

簡単なOpenACCコード

- 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

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) = a(i,j) + b(i,j)
  end do
end do
```

  - ✓ ソースコード

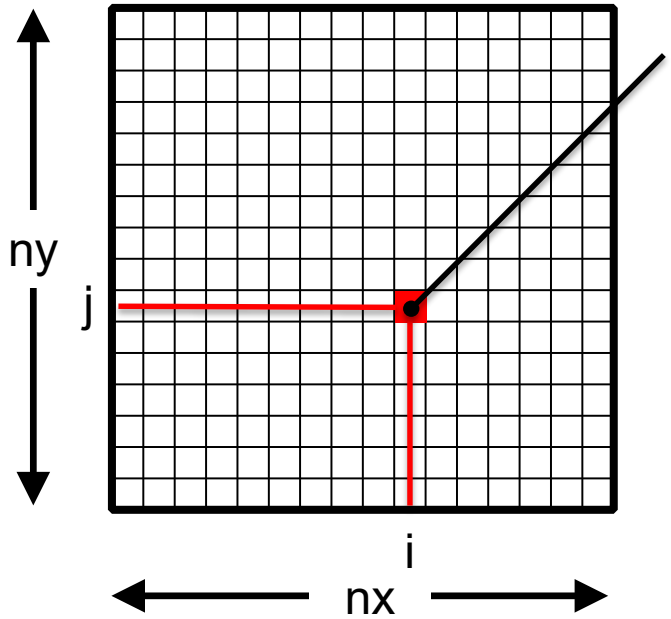
openacc_basic/01_original	CPUコード。
openacc_basic/02_kernels	OpenACCコード。上にkernels指示文のみ追加。
openacc_basic/03_kernels_copy	OpenACCコード。上にcopy指示節追加。
openacc_basic/04_loop	OpenACCコード。上にloop指示文を追加。
openacc_basic/05_data	OpenACCコード。上にdata指示文を明示的に追加。
openacc_basic/06_present	OpenACCコード。上でpresent指示節を使用。
openacc_basic/07_reduction	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 kernels, 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];
        }
    }
}
```



ix = j*nx + i

配列のインデックス計算

F

- 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) = 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
$ qsub ./run.sh
$ cat run.sh.o??????
mean = 3000.00
Time =    19.886 [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
  !$acc kernels
  do j = 1,ny
    do i = 1,nx
      c(i,j) = a(i,j) + b(i,j)
    end do
  end do
  !$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
pgcc -O3 -acc -Minfo=accel  -ta=tesla,cc60 -c main.c
PGC-S-0155-Compiler failed to translate accelerator region (see -Minfo messages): Could not find allocated-variable index for symbol (main.c: 13)
calc:
     14, Complex loop carried dependence of a->,c->,b-> prevents parallelization
         Accelerator serial kernel generated
         Accelerator 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
PGC-F-0704-Compilation aborted due to previous errors. (main.c)
PGC/x86-64 Linux 18.4-0: compilation aborted
make: *** [main.o] Error 2
```

F

```
$ make
pgfortran -O3 -mp -acc -ta=tesla,cc60 -Minfo=accel  -c main.f90
calc:
     13, Generating implicit copyin(b(:nx,:ny))
         Generating implicit copyout(c(:nx,:ny))
         Generating implicit copyin(a(:nx,:ny))
     14, Loop is parallelizable
     15, Loop is parallelizable
         Accelerator kernel generated
         Generating Tesla code
         14, !$acc loop gang, vector(4) ! blockidx%y threadidx%y
         15, !$acc loop gang, vector(32) ! blockidx%x threadidx%x
```

データサイズを検知して自動転送
Fotran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
pgcc -O3 -acc -Minfo=accel  -ta=tesla,cc60  -c main.c
calc:
     13, Generating copy(a[:n],c[:n],b[:n])
     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 scalar kernel generated
         Accelerator 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:
     43, Generating copyout(c[:n],b[:n])
     45, Loop is parallelizable
         Accelerator kernel generated
         Generating Tesla code
         45, #pragma acc loop gang, vector(128) /* blockIdx.x threadIdx.x */
     48, Loop is parallelizable
         Accelerator kernel generated
         Generating Tesla code
         48, #pragma acc loop gang, vector(128) /* blockIdx.x threadIdx.x */
pgcc -O3 -acc -Minfo=accel  -ta=tesla,cc60   main.o   -o run
```

簡単なOpenACC: kernels 指示文（5）

F

- コンパイル
  - ✓ データの独立性を見切り、並列化。

```
pgfortran -O3 -mp -acc -ta=tesla,cc60 -Minfo=accel  -c main.f90
calc:
     13, Generating copyin(a(:,:))
         Generating copyout(c(:,:))
         Generating copyin(b(:,:))
     14, Loop is parallelizable
     15, Loop is parallelizable
         Accelerator kernel generated
         Generating Tesla code
         14, !$acc loop gang, vector(4) ! blockidx%y threadidx%y
         15, !$acc loop gang, vector(32) ! blockidx%x threadidx%x
main:
     61, Generating copyout(c(:,:),b(:,:))
     62, Loop is parallelizable
     63, Loop is parallelizable
         Accelerator kernel generated
         Generating Tesla code
         62, !$acc loop gang, vector(4) ! blockidx%y threadidx%y
         63, !$acc loop gang, vector(32) ! blockidx%x threadidx%x
     68, Loop is parallelizable
         Accelerator kernel generated
         Generating Tesla code
         68, !$acc loop gang, vector(4) ! blockidx%y threadidx%y
             !$acc loop gang, vector(32) ! blockidx%x threadidx%x
pgfortran -O3 -mp -acc -ta=tesla,cc60 -Minfo=accel  main.o -o run
```

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！
- 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
  - 間接参照

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];
}
```

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];
}
```

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）

F

- 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

openacc_basic/04_loop

- コンパイル
  - ✓ ループが並列化され、カーネルが生成された。

```
$ make
pgcc -O3 -acc -Minfo=accel  -ta=tesla,cc60  -c main.c
calc:
     13, Generating copy(a[:n],c[:n],b[:n])
     15, Loop is parallelizable
     17, Loop is parallelizable
         Accelerator kernel generated
         Generating Tesla code
         15, #pragma acc loop gang, vector(4) /* blockIdx.y threadIdx.y */
         17, #pragma acc loop gang, vector(32) /* blockIdx.x threadIdx.x */
main:
     45, Generating copyout(c[:n],b[:n])
     48, Loop is parallelizable
         Accelerator kernel generated
         Generating Tesla code
         48, #pragma acc loop gang, vector(128) /* blockIdx.x threadIdx.x */
     52, Loop is parallelizable
         Accelerator kernel generated
         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。（少なくともPGI compiler ver. 18.7 では）

簡単なOpenACC: loop 指示文（3）

openacc_basic/04_loop

- **04_loopコードの実行**
  - ✓ 答えは正しいが、実行時間が大変長い。

```
$ qsub ./run.sh
$ cat run.sh.o??????
mean = 3000.00
Time =   70.414 [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])
   {                                                          a: allocate, H -> D
#pragma acc kernels copyout(b[0:n], c[0:n])                   b: allocate
      {                                                       c: allocate
#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++) {            a: deallocate
         calc(nx, ny, a, b, c);                               b: deallocate
      }
   }                                                          c: D->H, deallocate
```

present として振舞う。

✓ **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

```
$ qsub ./run.sh
$ cat run.sh.o??????
mean = 3000.00
Time =    1.174 [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

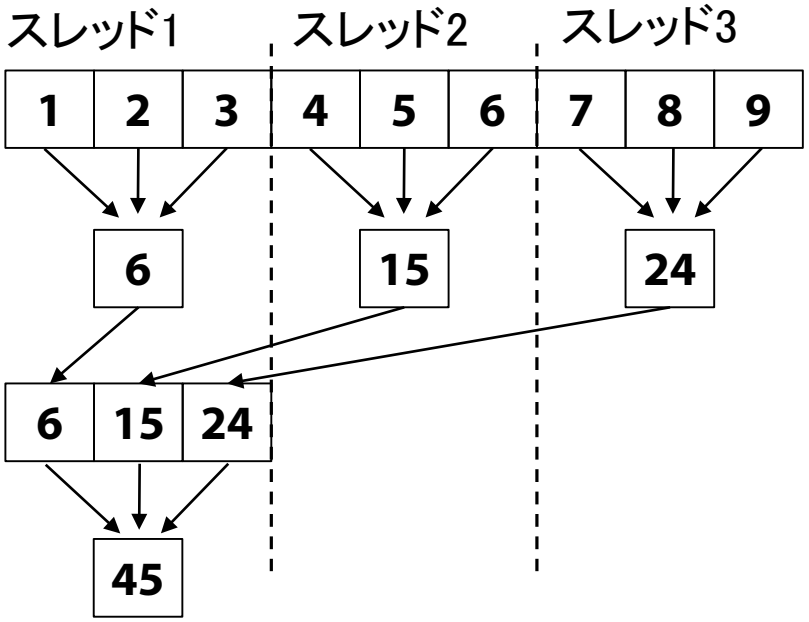
```
 subroutine calc(nx, ny, a, b, c)
  ...
!$acc kernels present(a, b, c)
!$acc loop independent
   do j = 1,ny
!$acc loop independent
      do i = 1,nx
        c(i,j) = a(i,j) + b(i,j)
      end do
   end do
!$acc end kernels
 end subroutine
```

- ◆ 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。

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**

簡単なOpenACC: reduction指示節（1）

C

- **07_reductionコード**
  - ✓ **06_presentコードで reductionを使用**

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
pgcc -O3 -acc -Minfo=accel  -ta=tesla,cc60  -c main.c
(省略)
main:
(省略)
67, Loop is parallelizable
        Accelerator kernel generated
        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
pgfortran -O3 -mp -acc -ta=tesla,cc60 -Minfo=accel  -c main.f90
(省略)
main:
(省略)
     86, Loop is parallelizable
         Accelerator kernel generated
         Generating Tesla code
         84, !$acc loop gang, vector(4) ! blockidx%y threadidx%y
         86, !$acc loop gang, vector(32) ! blockidx%x threadidx%x
             Generating reduction(+:sum)
```

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

```
$ qsub ./run.sh
$ cat run.sh.o??????
mean = 3000.00
Time =     1.089 [sec]
```

OpenACC化のステップのまとめ

C

- **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

F

- **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と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
  - Pascal 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にUnified Memoryを直接使う機能はない
    - PGIコンパイラではオプションを与えることで使える
    - pgfortran –acc –ta=tesla,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 + PGI 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
    - OpenACCのコードとして間違ったコードでも動いてしまう

OPENACC入門実習

実習

C

- 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。

diffusion.c, diffusion3d 関数内

```
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];
        }
    }
}
```

openacc_diffusion/01_original

実習

F

- 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。

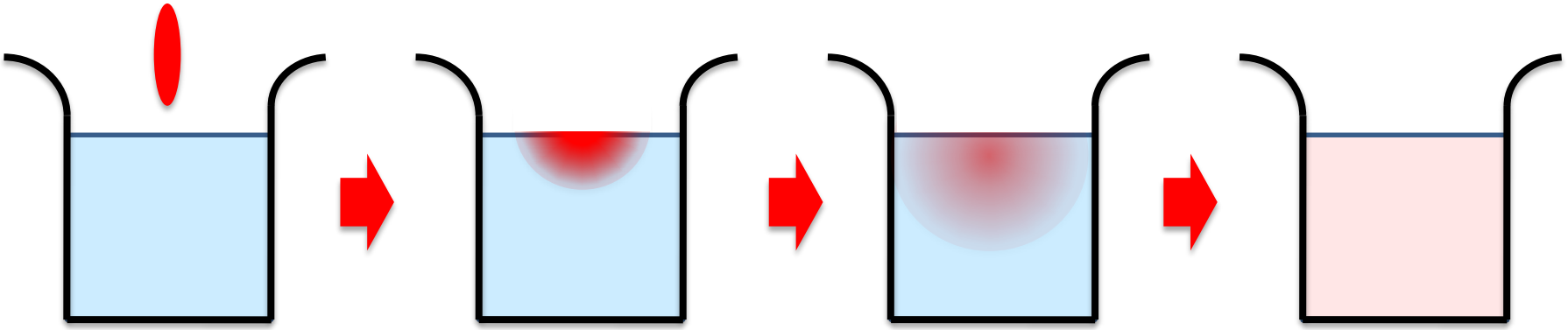
```
do k = 1, nz
  do j = 1, ny
    do i = 1, nx

      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）

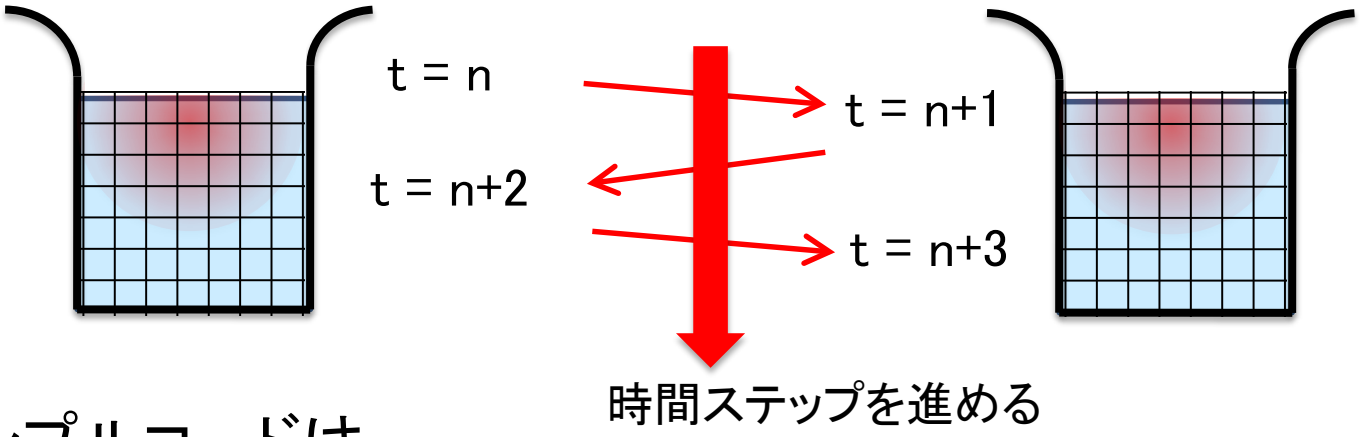
- 拡散現象
  - ✓ コップの中に赤インクを落とすと水中で拡がる
  - ✓ 次第に拡散し赤インクは拡がり、最後は均一な色になる。



- 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: **nx * ny * nz**（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

j \ i	1	2	3	4	5
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

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
$ qsub ./run.sh
# cat run.sh.o??????
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 =   20.564 [sec]
Performance=    2.17 [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   = pgcc
CXX  = pgc++
GCC  = gcc
RM   = rm -f
MAKEDEPEND = makedepend

CFLAGS    = -O3 -acc -Minfo=accel -ta=tesla,cc60
GFLAGS    = -Wall -O3 -std=c99
CXXFLAGS  = $(CFLAGS)
LDFLAGS   =
…
```

F

```
F90  = pgfortran
RM   = rm -f


FFLAGS    = -O3 -mp -acc -ta=tesla,cc60 -Minfo=accel
…
```

OpenACC化(1): kernels

C

- **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。

OpenACC化(1): kernels

F

- 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;
}
```

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。

diffusion.c, diffusion3d 関数内

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

OpenACC化(2): loop

F

- **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
```

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。

diffusion.f90, diffusion3d 関数内

makeしてジョブ投入 **qsub ./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**

diffusion.c, diffusion3d 関数内

```
#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;
}
```

なお、**present** にしなくても期待通りに動作します。

OpenACC化(3): データ転送の最適化(1)

F

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

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

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**

main.c, main 関数内

```
#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();
  }
```

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)

F

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

main.f90, main 関数内

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

  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

PGI_ACC_TIME によるOpenACC 実行の確認

- **PGI**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**PGI_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**PGI_ACC_TIME** を**1**に設定し、プログラムを実行する。

```
$ export PGI_ACC_TIME=1
$ ./run
```

- **Reedbush** でジョブに環境変数**PGI_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
...
 . /etc/profile.d/modules.sh
module load pgi/18.7
export PGI_ACC_TIME=1

./run
```

サンプルコードは、 **openacc_diffusion/03_openacc_pgi_acc_time**

PGI_ACC_TIMEによるOpenACC実行の確認

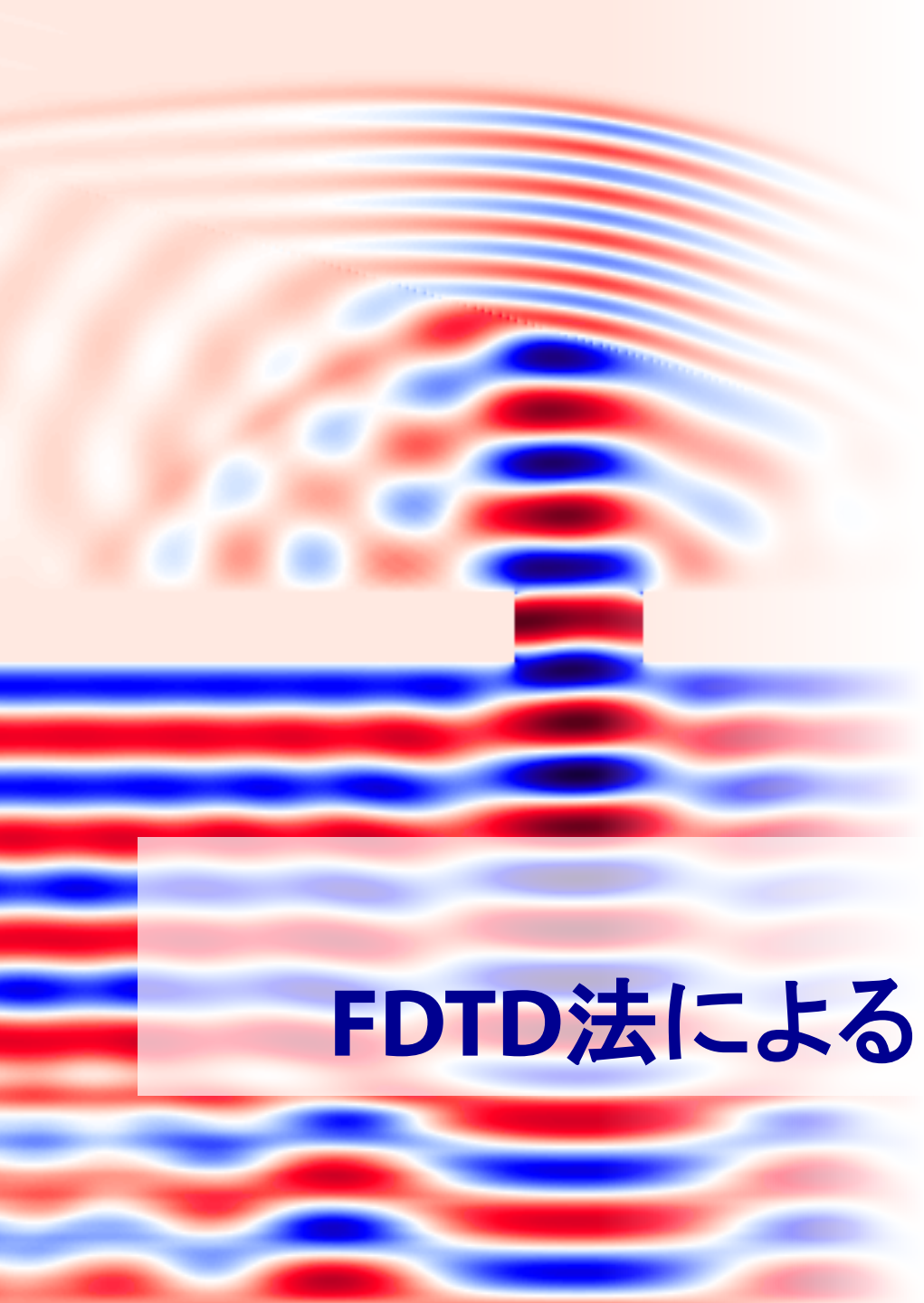
- ジョブ実行が終わると、標準エラー出力にメッセージが出力される。

```
$ cat run.sh.e??????
Accelerator Kernel Timing data
/lustre/pz0115/z30115/lecture/lecture_samples/openacc_diffusion/03_openacc_pgi_acc_time/main.c
  main  NVIDIA  devicenum=0
    time(us): 6,359
    38: data region reached 2 times
        38: data copyin transfers: 1
             device time(us): total=3,327 max=3,327 min=3,327 avg=3,327
        55: data copyout transfers: 1
             device time(us): total=3,032 max=3,032 min=3,032 avg=3,032
/lustre/pz0115/z30115/lecture/lecture_samples/openacc_diffusion/03_openacc_pgi_acc_time/diffusion.
c
  diffusion3d  NVIDIA  devicenum=0
    time(us): 101,731
    19: compute region reached 1638 times
        25: kernel launched 1638 times
            grid: [4x128x32]  block: [32x4]
             device time(us): total=101,731 max=64 min=62 avg=62
            elapsed time(us): total=136,255 max=540 min=81 avg=83
    19: data region reached 3276 times
```

データ移動の回数

起動したスレッド

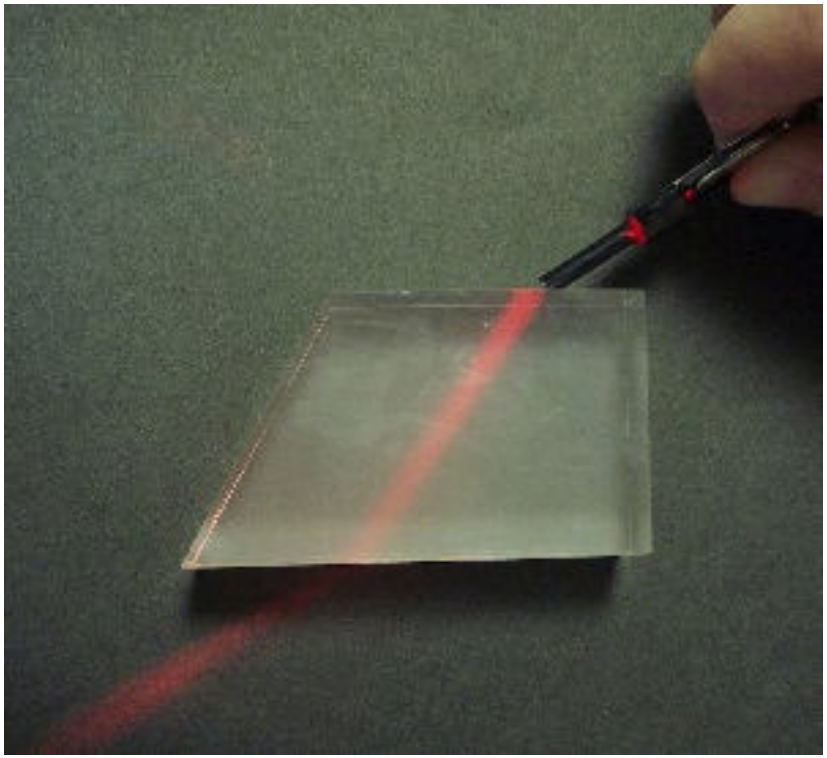
カーネル実行時間

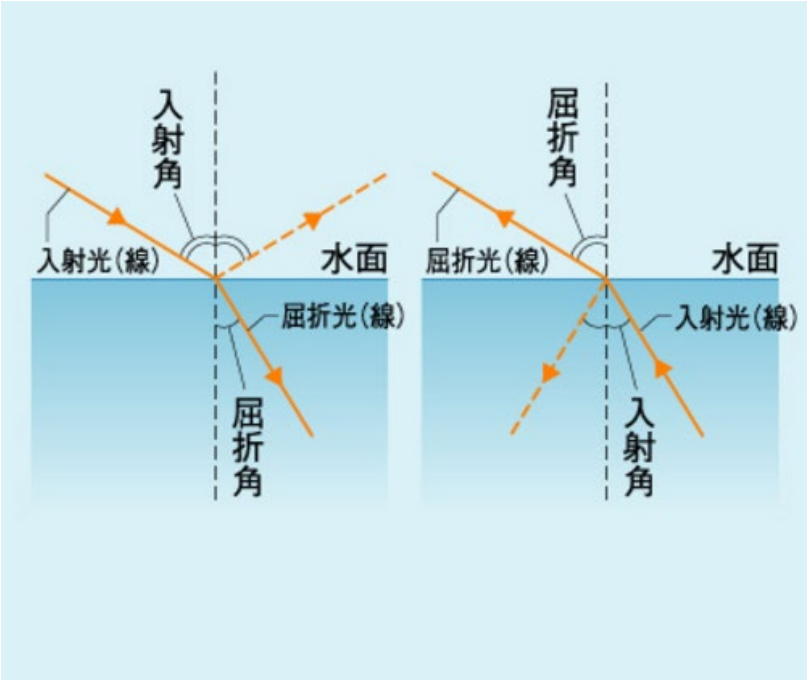


GPUを用いた FDTD法による電磁波伝搬計算

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）が媒質によってことなるため

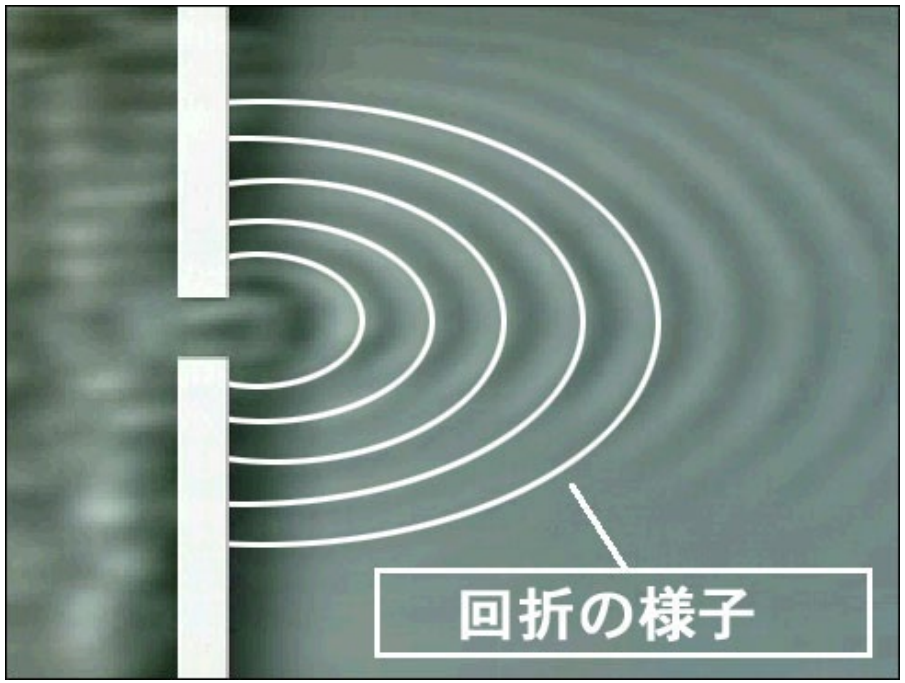


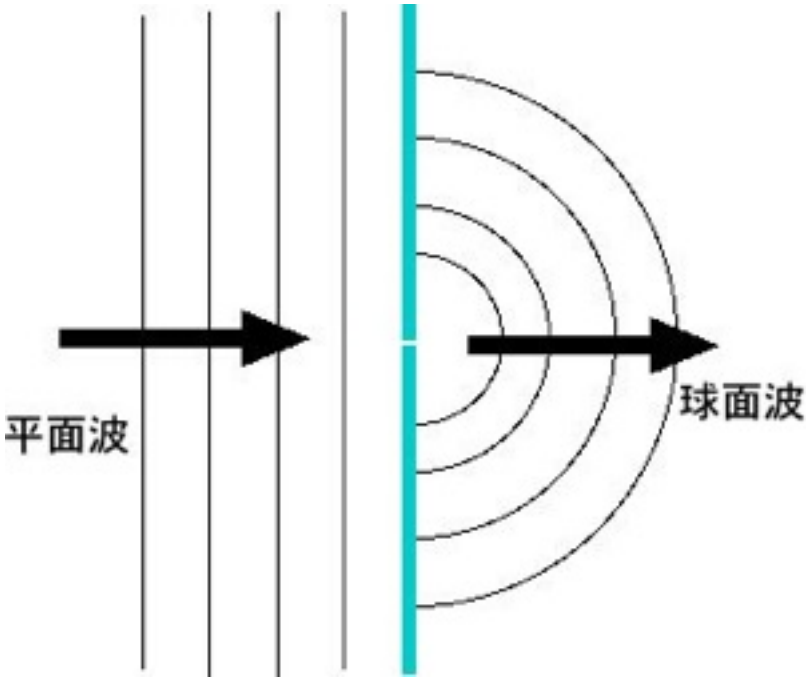


http://www.kagakunavi.jp
http://www2e.biglobe.ne.jp/~shinzo/jikken/pikatto/pikatto.html

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

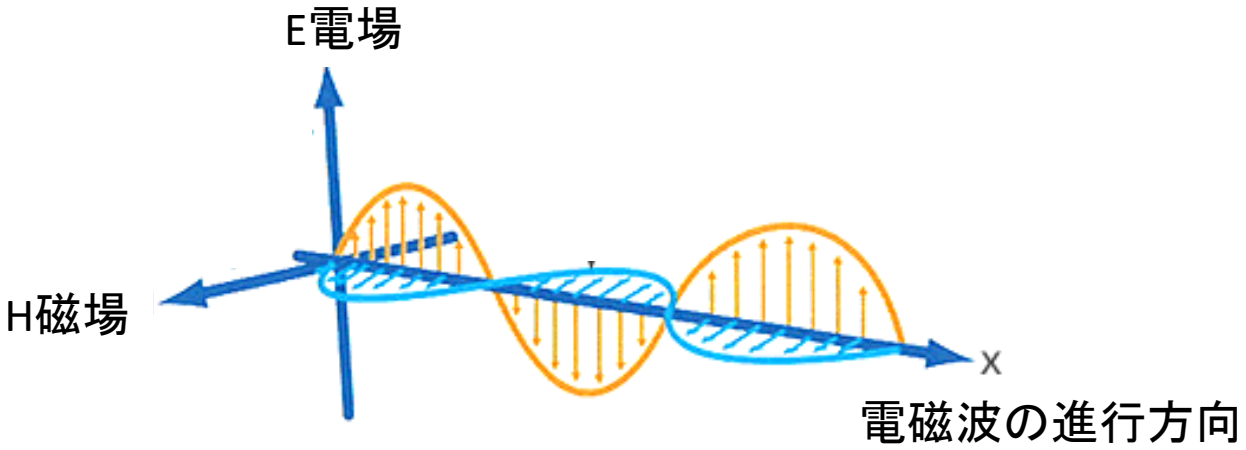




http://rikanet2.jst.go.jp
http://web.me.com/takeda_t/atelier_bonryu/PH_Salon_R.4.html

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

http://www.tecnoao-asia.com/about_abc.html

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

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

ε：誘電率　　μ：透磁率

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

*** 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

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

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

変形して、

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

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

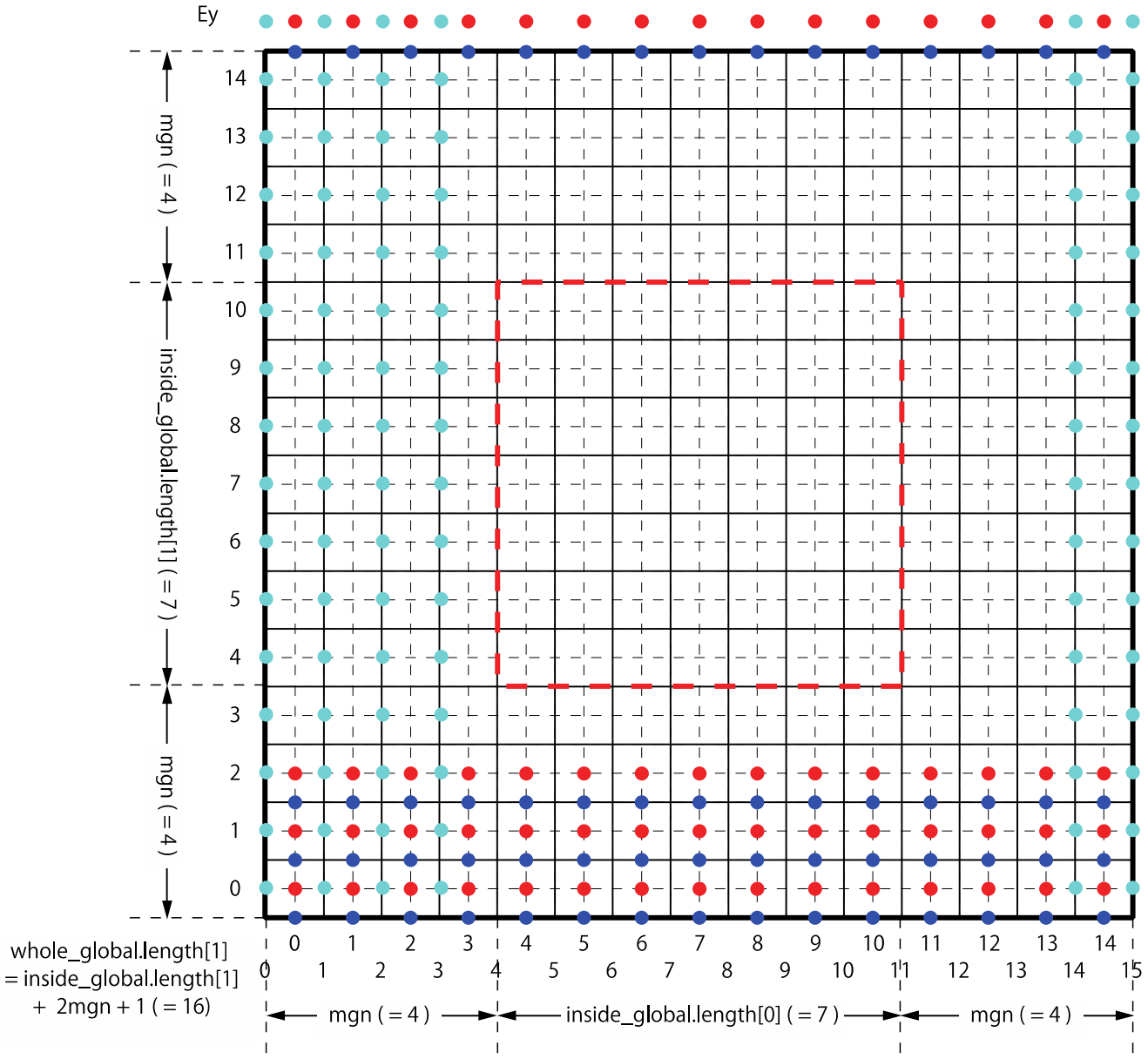
FDTD法（2）

- 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



プログラムでは、配列は1次元的に確保します。

whole_global.length[0]
= inside_global[0] + 2*mgn
+ 1
であることに注意

ソースコード（1）

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

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

※本プログラムは**MPI**化されていますが、本講習会では扱いません

ソースコード（2）

- それぞれのファイルの内容

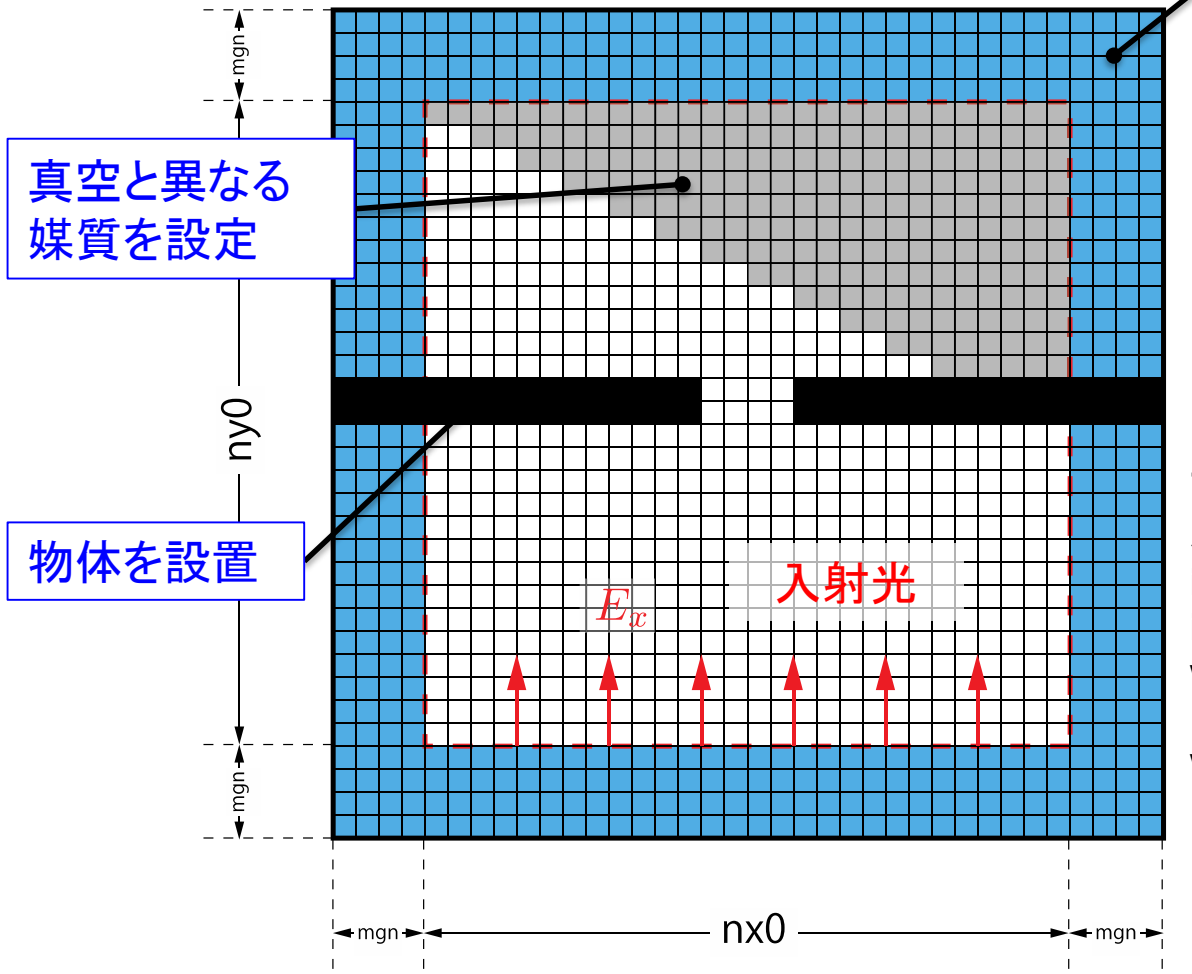
main.c	プログラムのメインコード
fdtd2d.{c, h}	**2次元 FDTD の 計算コード**
fdtd2d_sources.{c, h}	入射光設定のための関数
setup.c	計算条件の設定と変数の初期化
config.{c, h}	物理定数の定義
output.{cc, h}	計算結果出力のための関数
bitmap*	**BMPファイル作成のための関数**

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: Ex、Ey、Hz
  - ✓ 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）

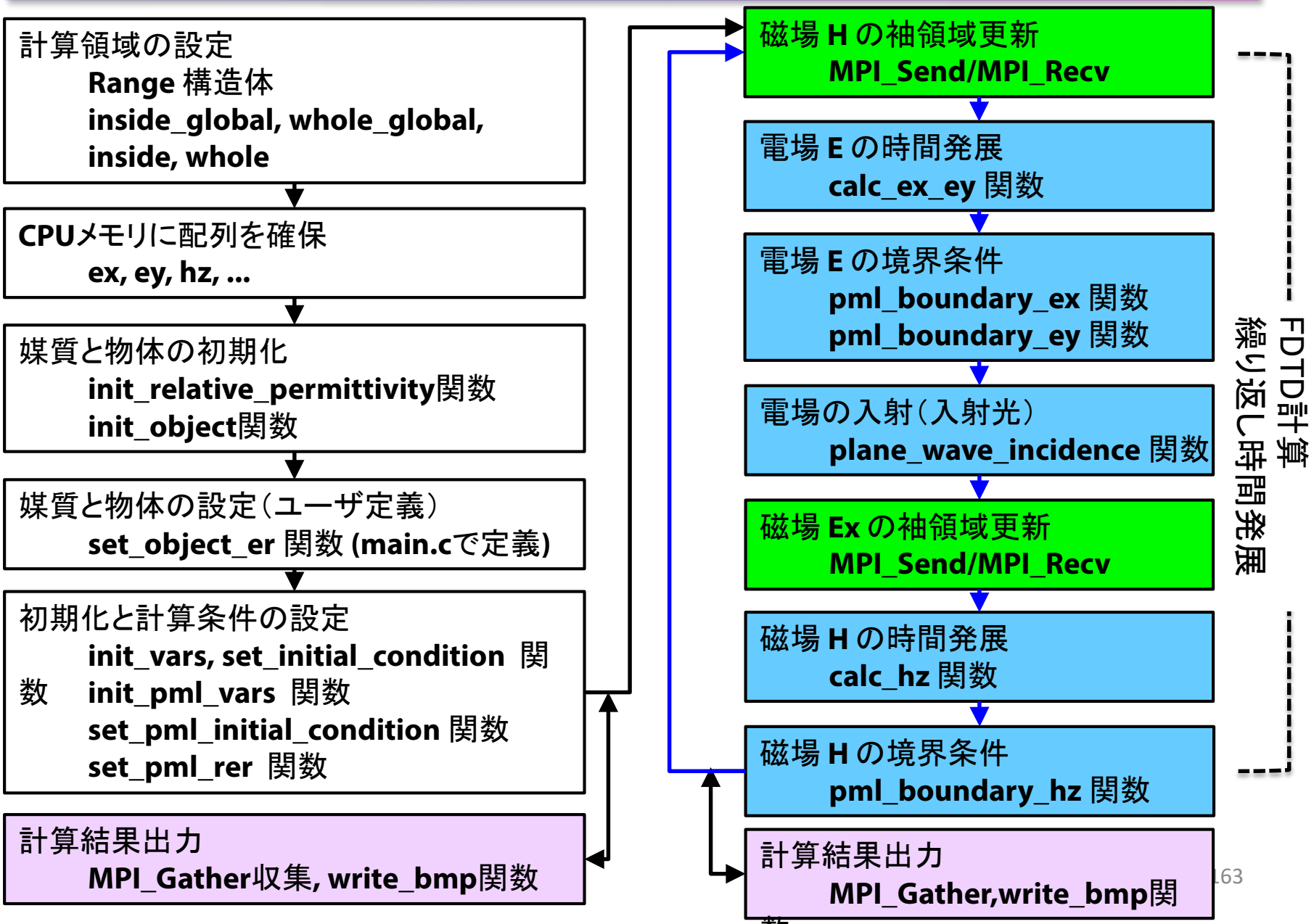


dx = lx/nx
dy = ly/ny

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
inside_global.length[0] = nx0
inside_global.length[1] = ny0
whole_global.length[0]
= nx0 + 2*mgn + 1
whole_global.length[1]
= ny0 + 2*mgn + 1

コード全体の流れ（main.c 内）



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    } };
```

分割領域の
中心領域

分割領域の
全体領域

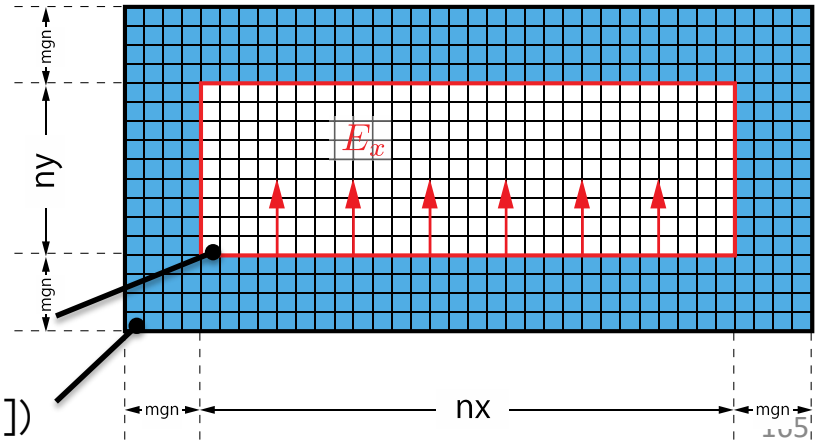
プログラムでは下記の通り

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

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

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)

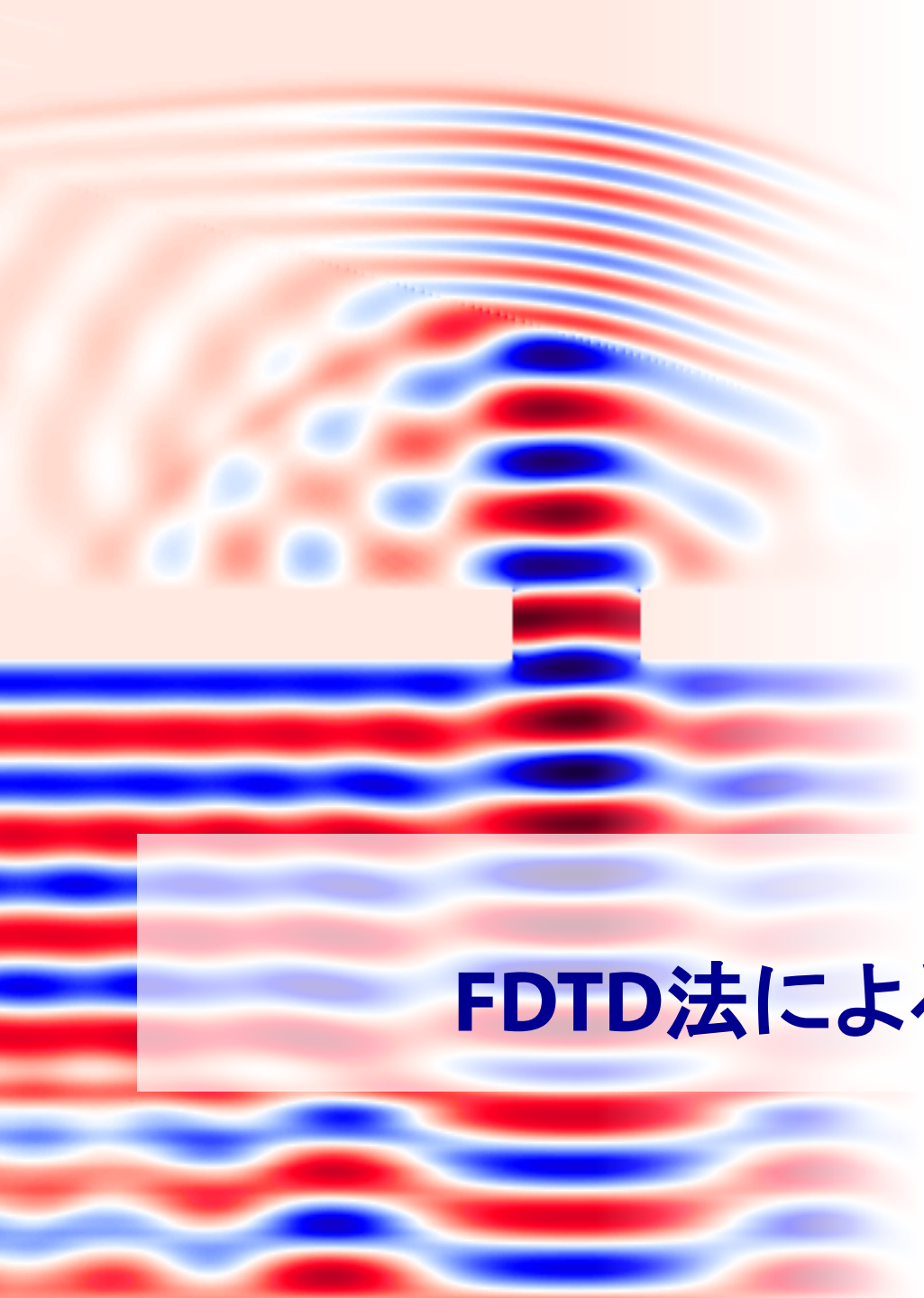
- 前半
  - ✓ 電場Eの時間発展(**calc_ex_ey**)、境界条件(**pml_boundary_...**)
  - ✓ 入射光(**plane_wave_incidence**)

```
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, ceyxl, 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）

- 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）
}
```



GPUを用いた FDTD法による電磁波伝搬計算の実習

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_fdtd/01_original

```
$ cd openacc_mpi_fdtd/01_original
$ make
$ qsub ./run.sh
$ cat run.sh.o??????
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]
------------------------------
```

？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、**qsub ./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

openacc_fdtd/01_original

```
$ cat run.sh
#! /bin/sh
#PBS -q h-tutorial
#PBS -l select=1:mpiprocs=1:ompthreads=0

（省略）

mkdir -p sim_run
cd sim_run

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

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_mpi_fdtd/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

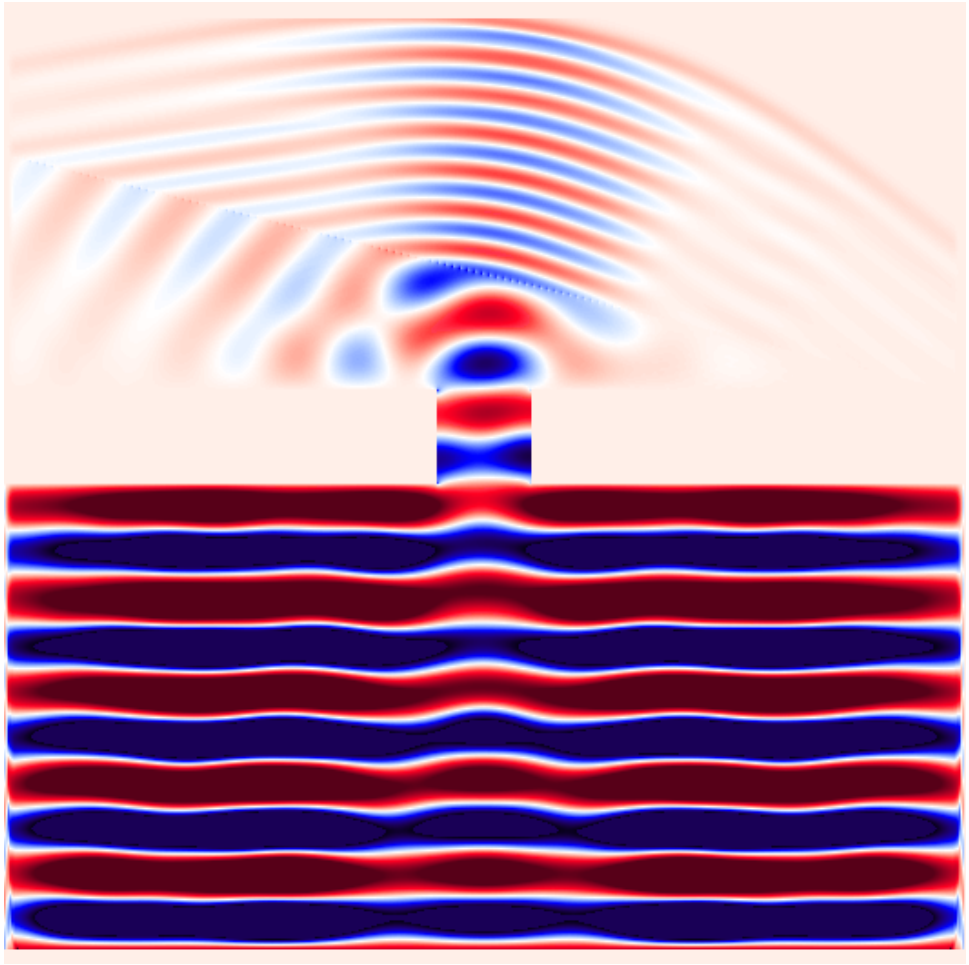
なお

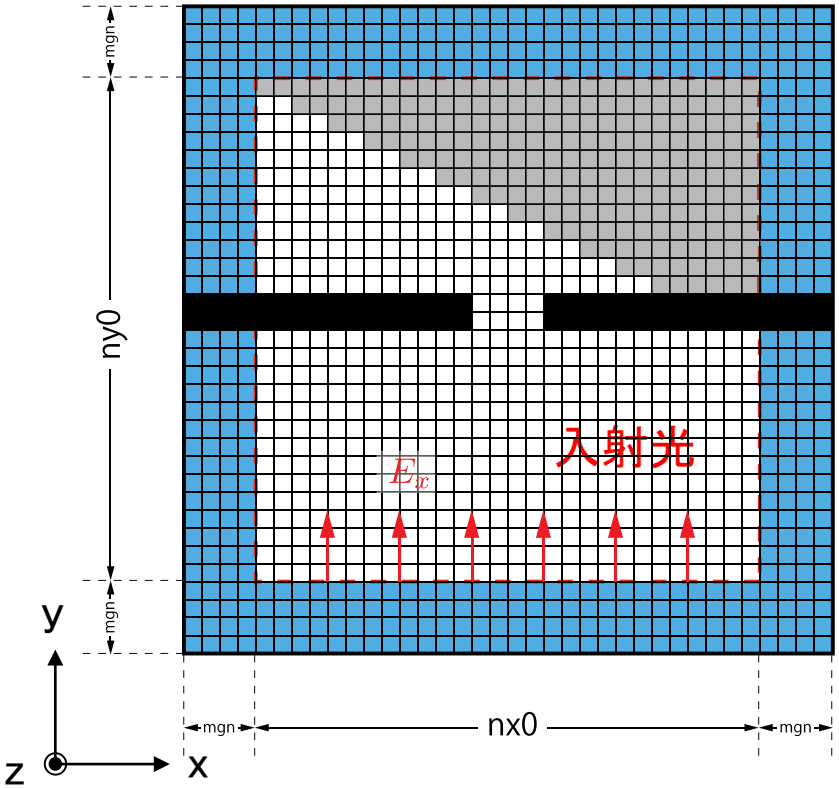
ssh -Y txxxxx@reedbush.cc.u-tokyo.ac.jp

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。

計算結果の例

- 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], ceyxl[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_fdtd/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。
  - ✓ **PGI_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**

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/133/
  - アンケートへの協力をお願いします。
    - とくにオンラインの講習会については初めてなので、不便な点等お知らせいただけますと幸いです。