GPUプログラミング実践編(OpenACC)

プロメテック・ソフトウェア株式会社　南 将平　Version 2024.07.04

本資料は以下の資料をベースにプロメテック・ソフトウェア株式会社が本講習会に適した情報となるよう加筆修正等を行ったものです。

OpenACC Official Training Materials

- Below slides are released by NVIDIA Corporation under CC BY 4.0
- Slides: https://drive.google.com/open?id=1d_eIwIRfScHxfJu6pnR28JrV3cMIwkIL
- CC BY 4.0: https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/deed.ja

OpenACC
More Science, Less Programming

自己紹介

南 将平 (Minami Shohei)

- プロメテック・ソフトウェア株式会社
  AI/HPCプラットフォーム事業開発本部 シニアエンジニア

- 専門: HPC

  スーパーコンピュータのコンパイラ
  運用管理ソフトウェア（ジョブスケジューラなど)
  CAE向けHPC Webソリューション等
  HPCアプリの性能チューニング

- 経歴

  ～2017年3月　東北大学 航空宇宙専攻 博士課程前期修了
  ～2021年12月 富士通株式会社
  　スーパーコンピュータのコンパイラ開発やHPCアプリの性能最適化に従事
  2022年1月～　現職

OpenACC
More Science, Less Programming

弊グループ紹介

- 会社名　　プロメテック・ソフトウェア株式会社
- 設立年月日　2004年10月29日
- 所在地　　本社：東京都文京区本郷三丁目34番3号　本郷第一ビル8階
- 事業　　科学技術計算用ソフトウェア開発・販売とコンサルティング

PROMETECH

GDEP Solution

大学との共同研究開発協力体制
東京大学・東北大学・京都大学・東京理科大学・東洋大学・琉球大学・横浜国立大学　など

グループ企業
GDEPソリューションズ株式会社
CAD/CAEなどをターゲットとしたNVIDIA社GPU製品を活用したITソリューションの提供

OpenACC
More Science, Less Programming

事業内容

- 流体・粉体解析ソフトウェアの開発・販売・サポート

- 解析コンサルティングサービス
- 可視化・映像制作サービス
- HPC関連サービス

ソフテック社より継承した旧PGIコンパイラの技術活用によるコンパイラのサポート

前回の入門編講習会の内容

OpenACCの入門的な講習

1. GPUのプログラミングの概要
2. OpenACCを使ったプログラムの並列化
3. CPU-GPU間のデータ転送の最適化
4. ループの並列化
5. OpenACCによる並列化の進め方

✓FortranまたはC言語の知識を前提とし、講習はFortranベース

✓OpenACCを用いるターゲットはNVIDIA CUDA GPU (NVIDIA A100)

OpenACC
More Science, Less Programming

今回の講習会の内容

OpenACCの実践的な講習

1. ループの最適化
2. 非同期処理
3. CUDAとの連携（Interoperability）
4. マルチGPU計算の基礎
5. 開発における実装方針のススメ

✓前回入門編の知識をベースに話を進める

✓FortranまたはC言語の知識を前提とし、講習はFortranベース

✓OpenACCを用いるターゲットはNVIDIA CUDA GPU (NVIDIA A100)

OpenACC
More Science, Less Programming

1. ループの最適化

OpenACC
More Science, Less Programming

ループの最適化はなぜ重要か

OpenACC
More Science, Less Programming

ループの並列化

- 多くのソフトウェアの実行時間は大部分がループ処理に費やされる
- 各ループは定型化されたものもあるが、非常に様々な方法で記述される
- OpenACCのループ最適化を使用することで、コード中の最も時間がかかる箇所を高速化することができる

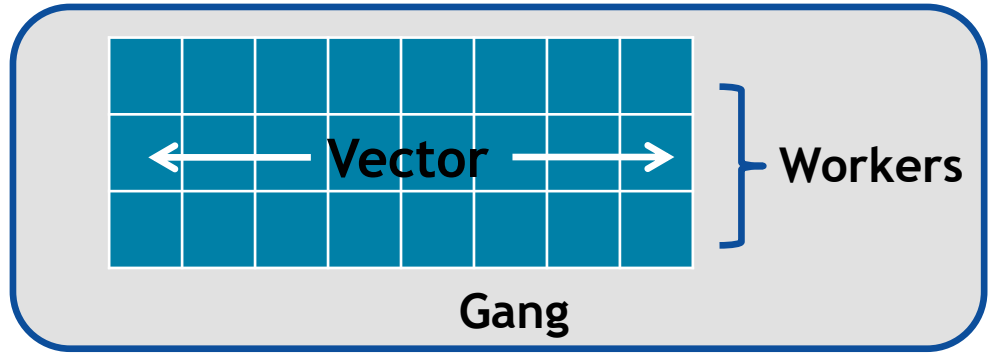
OpenACC
More Science, Less Programming

ループの最適化

OpenACC
More Science, Less Programming

Gang - Worker - Vector について

- OpenACCにおける、複数階層の並列性のこと
  Gang -> Worker -> Vector
- 多重ループ(階層的構造を持つ)を並列化する場合に、効率よく並列化を定義できる
- OpenACCは様々なハードウェアに適用できるようにGang / Worker / Vectorモデルを定義する
- （今回はNVIDIA GPUを想定して説明）

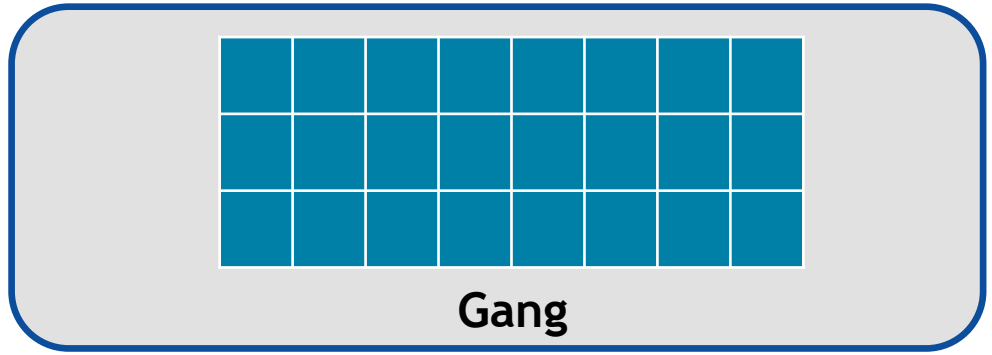


Gang - Worker - Vector について

- ループを並列化するときの最高位の並列性を**Gang-level parallelism**と呼ぶ

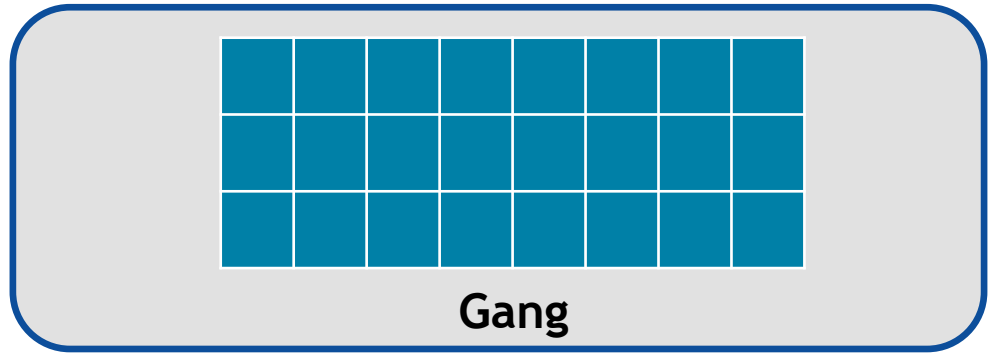
→ コンパイラは、典型的には最外(Outermost)ループを Gang として並列化する

- kernels/parallelディレクティブを指定すると複数のGangが生成され、ループがGangによって分散実行される
- 多くのアーキテクチャではGangは完全に独立、もしくはプライベートなメモリを持っている



Gang - Worker - Vector について

- 右図のコードでは最外ループにGang節を適用している
- 最外ループに任意のGangが割り当てられ、並行して互いに独立に計算を実行する
- kernels/parallelディレクティブによって並列領域が生成される度に、Gangが生成される
- ユーザーはいくつのGangを生成するかを指定することも可能
- 指定せずにコンパイラに任せた方が無難




```
!$acc parallel loop gang
do i = 1, N
  do j = 1, M
     < loop code >
  end do
end do
```

OpenACC
More Science, Less Programming

Gang - Worker - Vector について

- 最下層の並列性を**Vector-level parallelism**と呼ぶ

→ コンパイラは、典型的には最内(Innermost)ループを Vector として並列化する

- すべてのGangは最低でも**1つのVectorを持つ**
- また各Vectorは複数のデータ要素に対し1つの命令を実行可能

Gang - Worker - Vector について

- 右図のコードでは内部ループがVector並列化される
- 二重ループの並列化は互いに並行して実行されることになる
- Vector loopの内側にあるループはこれ以上並列化されず、**逐次処理が行われる**


```
!$acc parallel loop gang
do i = 1, N
  !$acc loop vector
  do j = 1, M
     < loop code >
  end do
end do
```

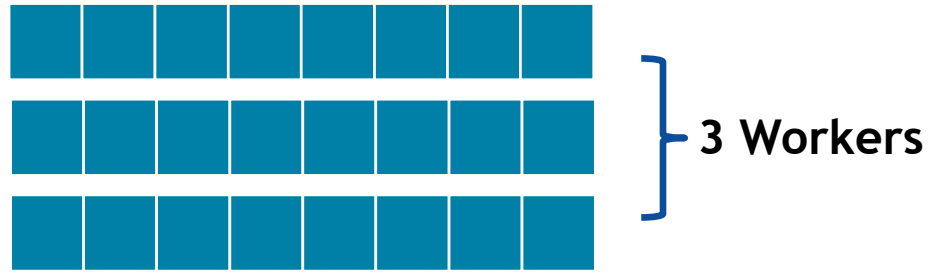
OpenACC
More Science, Less Programming

Gang - Worker - Vector について

- Worker節はGang内に複数のVectorを持つための機能
- Workerの用途は、主に1つの大きなVectorを複数の小さなVectorに分割すること

→ 後ほど具体例

- 内側ループが非常に小さく、大きなVectorを持つことにメリットがない場合に有効なことがある



OpenACC
More Science, Less Programming

Gang - Worker - Vector について

- 右図のコードは、Gang/Worker levelの並列性を最外ループに適用している
- 先ほどのコードとの違いは、最内ループを実行するVectorを小さくできること

→ 後ほど具体例

- 内側のループが比較的小さい場合に性能向上を狙える


```
!$acc parallel loop gang worker
do i = 1, N
  !$acc loop vector
  do j = 1, M
     < loop code >
  end do
end do
```

OpenACC
More Science, Less Programming

parallelディレクティブの場合

- parallelディレクティブの場合 **num_gangs(N)**, **num_workers(M)**, **vector_length(Q)** で Gang, Worker, Vectorの数を指定する
- それぞれがどのループに属するかを **gang**, **worker**, **vector** で指定する

```
!$acc parallel num_gangs(2) num_workers(2) vector_length(32)
  !$acc loop gang worker
  do x = 1, 4
    !$acc loop vector
    do y = 1, 32
       array(x,y) = array(x,y) + 1
    end do
  end do
```

OpenACC
More Science, Less Programming

kernelsディレクティブの場合

- kernelsディレクティブを使用する場合は処理が簡単化される
- **gang(N), worker(M), vector(Q)** でループ位置と数を同時に指定可能
- parallelディレクティブを同じ方法で指定することも可能
- 数を指定しない場合はコンパイラが自動的に決定する

```
!$acc kernels loop gang(2) worker(2)
do x = 1, 4
  !$acc loop vector(32)
  do y = 1, 32
     array(x,y) = array(x,y) + 1
  end do
end do
!$acc end kernels
```

OpenACC
More Science, Less Programming

kernelsディレクティブの場合：複数の多重ループ

- kernelsディレクティブを使用する場合は処理が簡単化される
- **gang(N), worker(M), vector(Q)** でループ位置と数を同時に指定可能
- parallelディレクティブを同じ方法で指定することも可能
- 数を指定しない場合はコンパイラが自動的に決定する
- ループごとにGang, Worker, Vectorの値は変更可能

```
!$acc kernels

  !$acc loop gang(2) worker(2)
  do x = 1, 4
    !$acc loop vector(32)
    do y = 1, 32
       array(x,y) = array(x,y) + 1
    end do
  end do

  !$acc loop gang(4) worker(4)
  do x = 1, 16
    !$acc loop vector(16)
    do y = 1, 16
       array2(x,y) = array2(x,y) + 1
    end do
  end do
!$acc end kernels
```

OpenACC
More Science, Less Programming

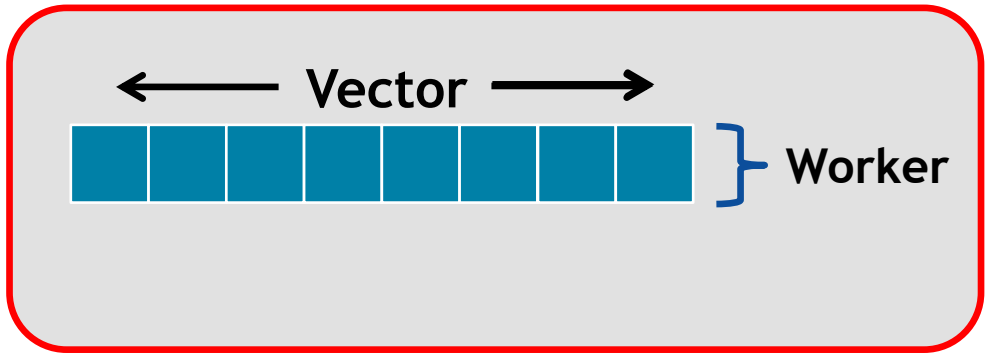
Gang - Worker - Vector の動作例

```
!$acc kernels loop gang worker(1)
do x = 1, 4
  !$acc loop vector(8)
  do y = 1, 8
     array(x,y) = array(x,y) + 1
  end do
end do
!$acc end kernels
```

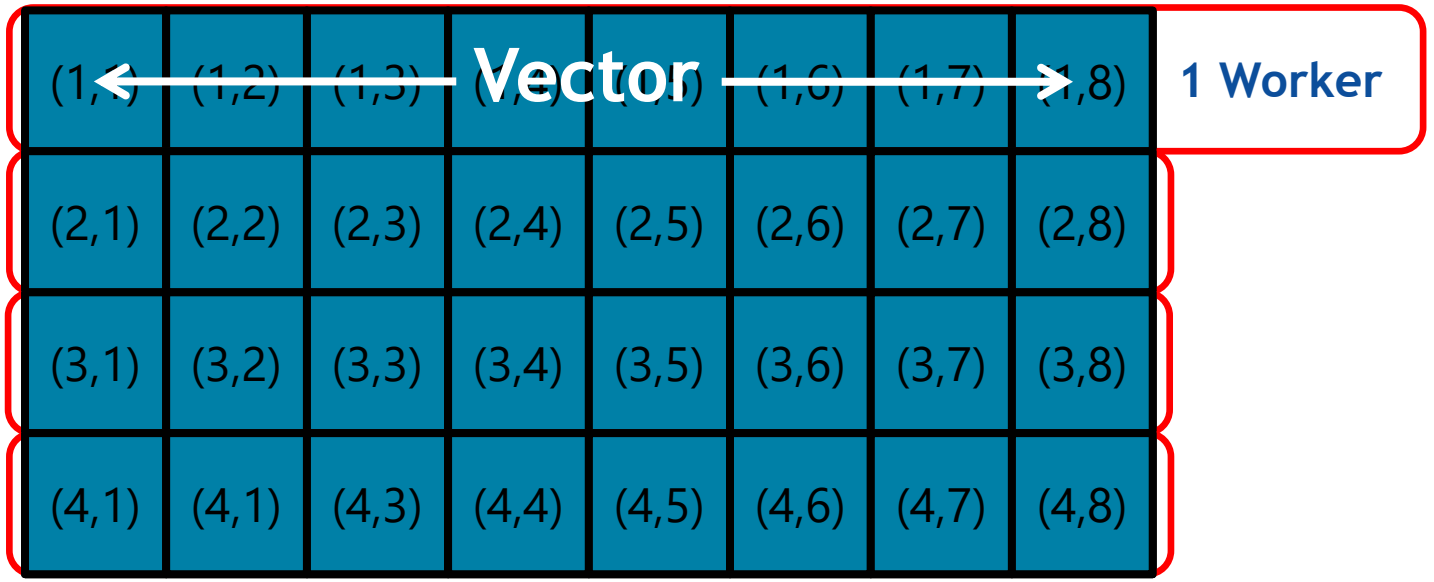
- 二重ループの並列化
- **1 worker, 8 vector length** と定義
- 生成する gang の数を指定しないため**ループをカバーするのに十分な数のgangをコンパイラが生成する**

OpenACC
More Science, Less Programming

Gang - Worker - Vector の動作例




```
!$acc kernels loop gang worker(1)
do x = 1, 4
   !$acc loop vector(8)
   do y = 1, 8
      array(x,y) = array(x,y) + 1
   end do
end do
!$acc end kernels
```

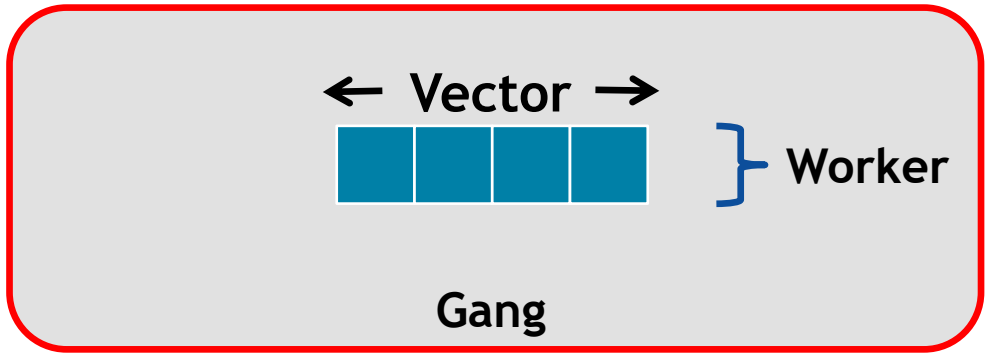


Gang

- ループサイズからコンパイラは理論的には**4 gangs**を生成する

OpenACC
More Science, Less Programming

Gang - Worker - Vector の動作例: ベクトルサイズ < ループ長




```
!$acc kernels loop gang worker(1)
do x = 1, 4
  !$acc loop vector(4)
  do y = 1, 8
    array(x,y) = array(x,y) + 1
  do
do
!$acc end kernels
```

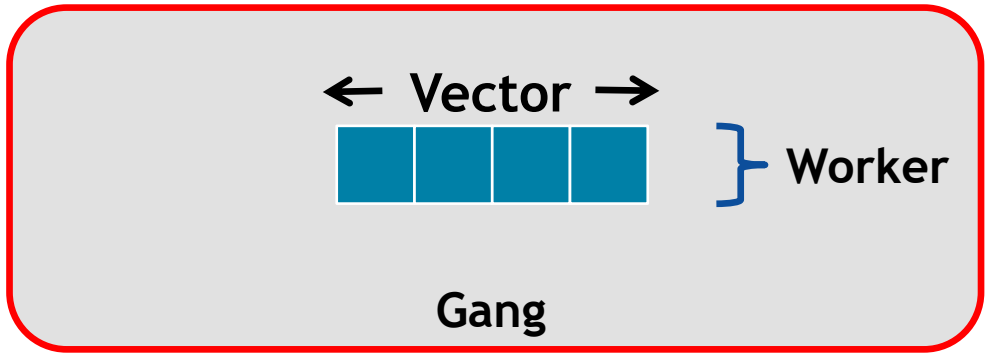
- ベクトルサイズを小さくした時の動作を見てみる

→ 実際のプログラムで、ベクトルサイズよりも最内ループ長が大きい場合と考えください

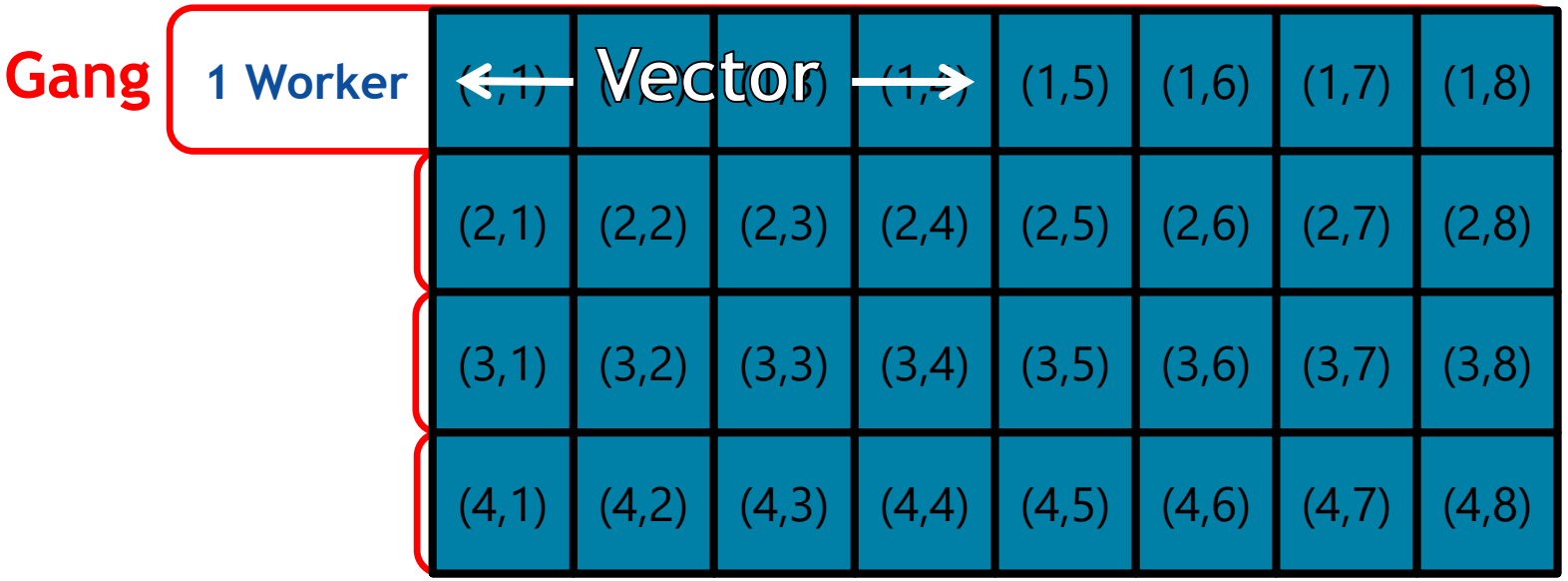
- **4 vector length**に減らす。その他は同じ
- 最外ループの次元は変わらないので gang の数は 4 のまま

OpenACC
More Science, Less Programming

Gang - Worker - Vector の動作例: ベクトルサイズ < ループ長



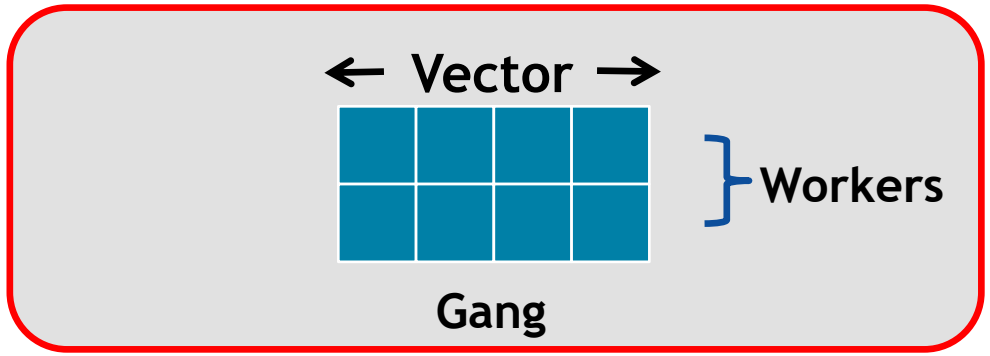

```
!$acc kernels loop gang worker(1)
do x = 1, 4
   !$acc loop vector(4)
   do y = 1, 8
      array(x,y) = array(x,y) + 1
   end do
end do
!$acc end kernels
```



- 4つの gang を生成したが各vector は2回のループ反復を行う
- より多くの gang を生成するためには最外ループのサイズを大きくする必要がある

OpenACC
More Science, Less Programming

Gang - Worker - Vector の動作例: 複数ワーカー

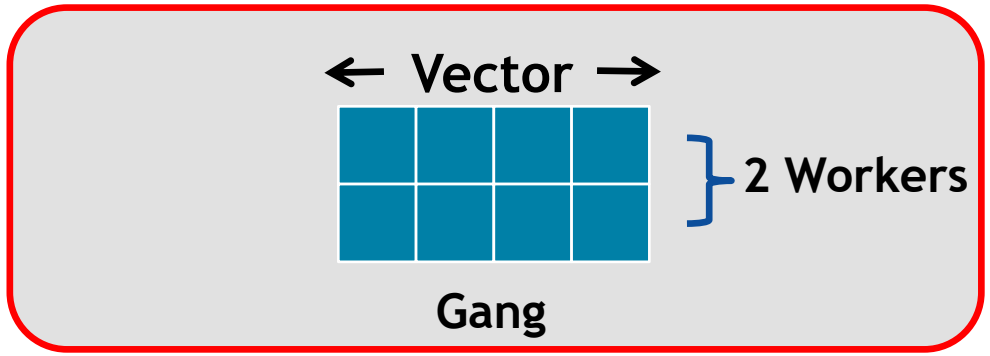



```
!$acc kernels loop gang worker(2)
do x = 1, 4
  !$acc loop vector(4)
  do y = 1, 8
     array(x,y) = array(x,y) + 1
  end do
end do
!$acc end kernels
```

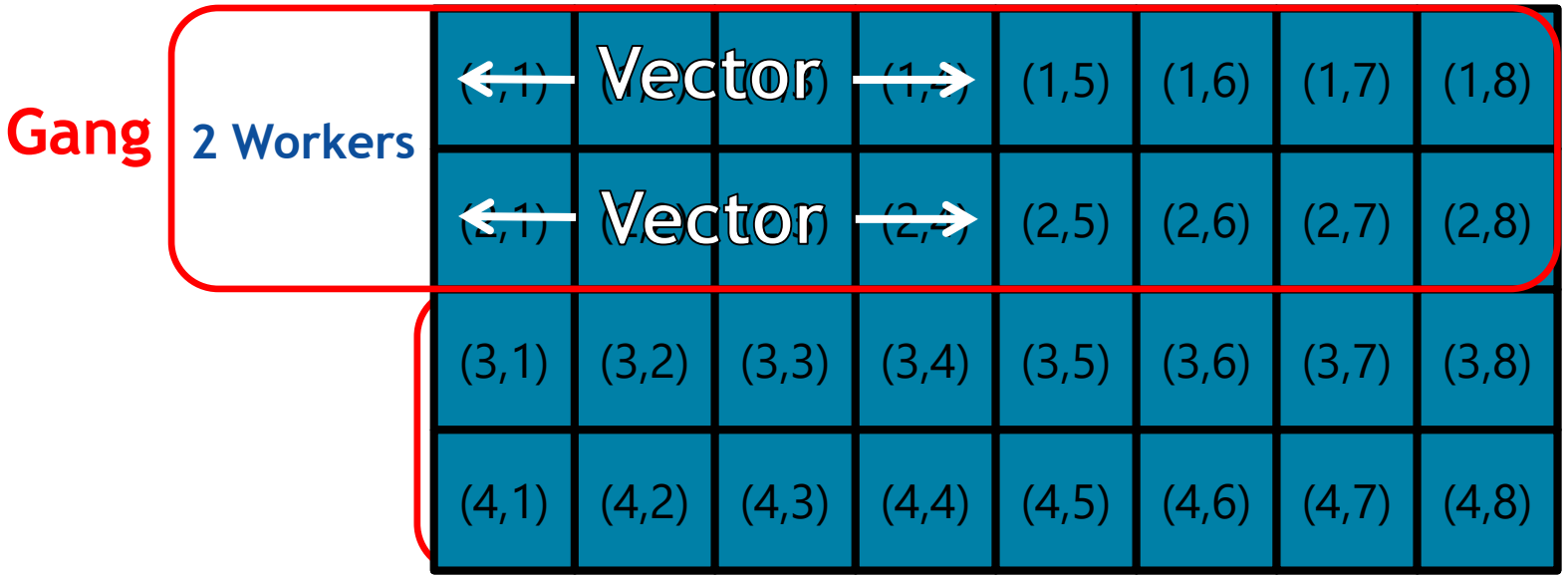
- **2 workers**に増やしてみる
- **gang あたり 2 vectors**が生成される。各vector の長さは4

OpenACC
More Science, Less Programming

Gang - Worker - Vector の動作例: 複数ワーカー



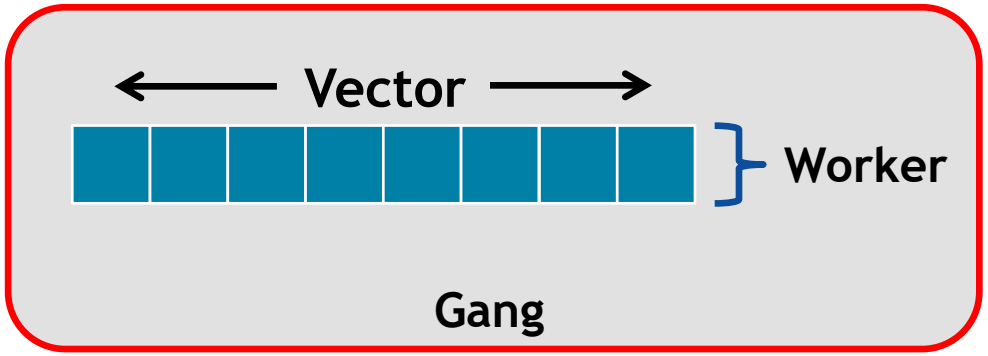

```
!$acc kernels loop gang worker(2)
do x = 1, 4
   !$acc loop vector(4)
   do y = 1, 8
      array(x,y) = array(x,y) + 1;
   end do
end do
!$acc end kernels
```



- worker を増やした結果 gang は2個しか生成されなくなる

OpenACC
More Science, Less Programming

Gang - Worker - Vector の動作例: ベクトルサイズ > ループ長

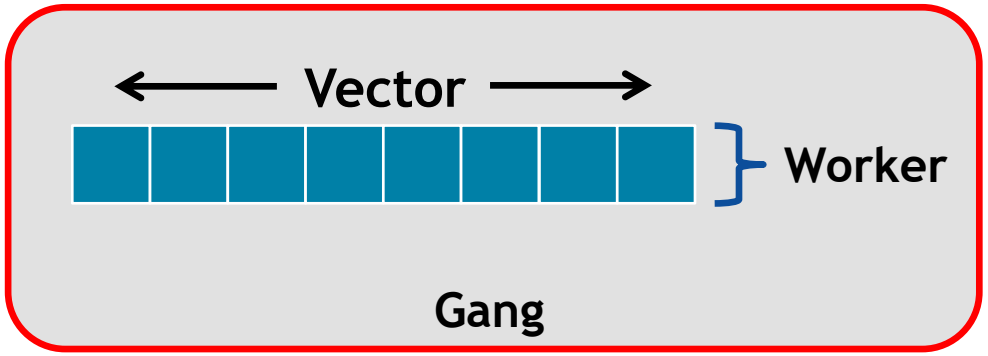


- 最内ループサイズを4の場合
- ベクトルの長さを8にすると？

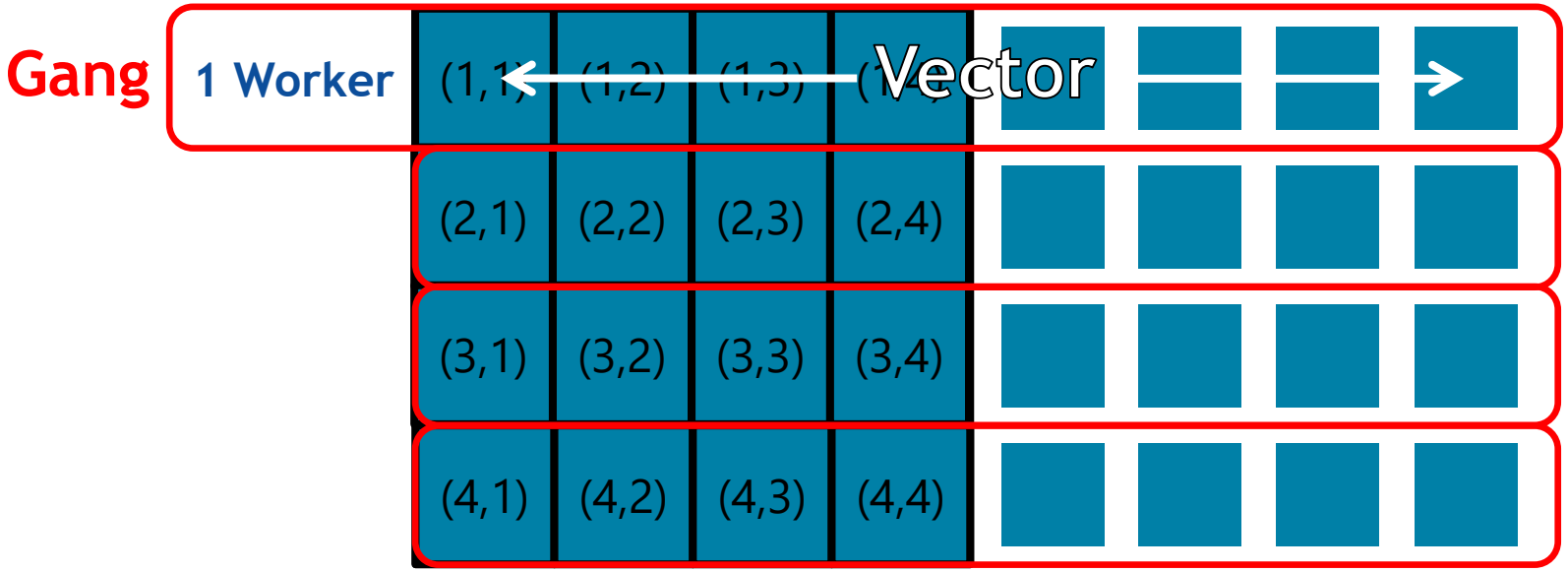
```
!$acc kernels loop gang worker(1)
do x = 1, 4
  !$ acc loop vector(8)
  do y = 1, 4
     array(x,y) = array(x,y) + 1
  end do
end do
!$acc end kernels
```

OpenACC
More Science, Less Programming

Gang - Worker - Vector の動作例: ベクトルサイズ > ループ長



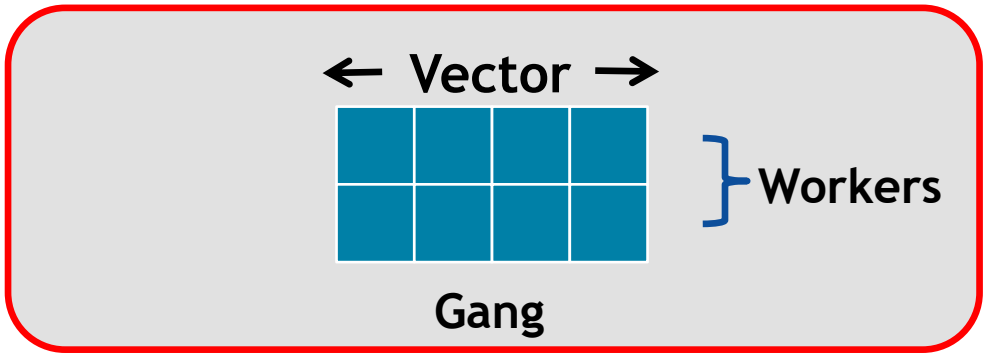

```
!$acc kernels loop gang worker(1)
do x = 1, 4
   !$acc loop vector(8)
   do y = 1, 4
      array(x,y) = array(x,y) + 1
   end do
end do
!$acc end kernels
```



- **vector** の長さが最内ループより大きい
→ 最内ループが小さい
- vector の半分を無駄にしており、半分の性能しか出せない
- うまく性能を出すには？

OpenACC
More Science, Less Programming

Gang - Worker - Vector の動作例: 最内ループが小さい場合

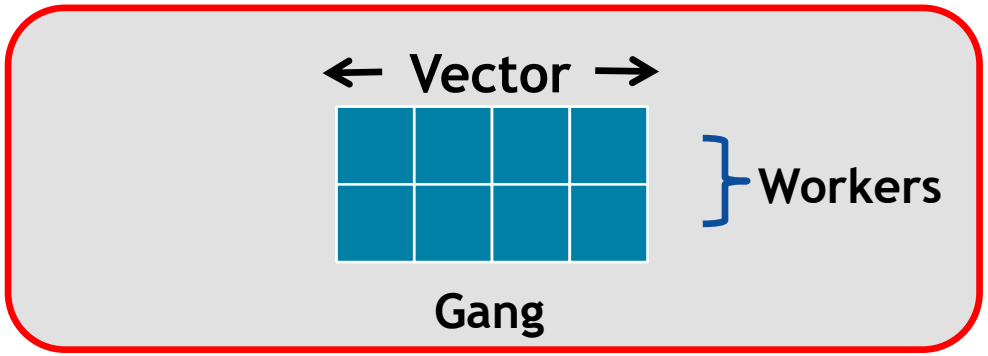



```
!$acc kernels loop gang worker(2)
do x = 1, 4
  !$acc loop vector(4)
  do y = 1, 4
     array(x,y) = array(x,y) + 1
  end do
end do
!$acc end kernels
```

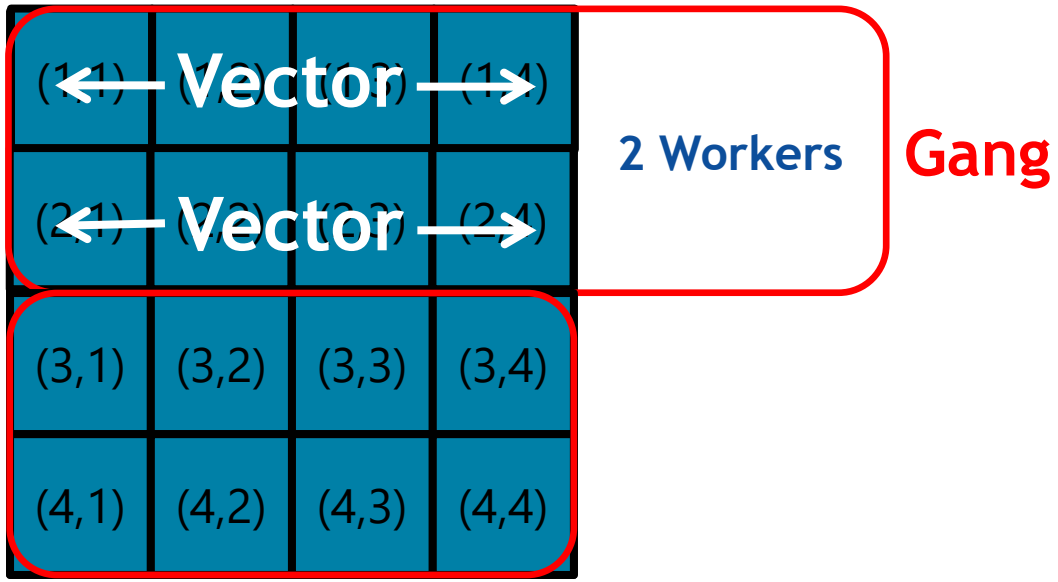
- 性能を引き出すためには vector を2 workersに分割する必要がある
- 1つの長い vector から、2つの短い vector へ
- ループ構成に適した設定にできた

OpenACC
More Science, Less Programming

Gang - Worker - Vector の動作例: 最内ループが小さい場合



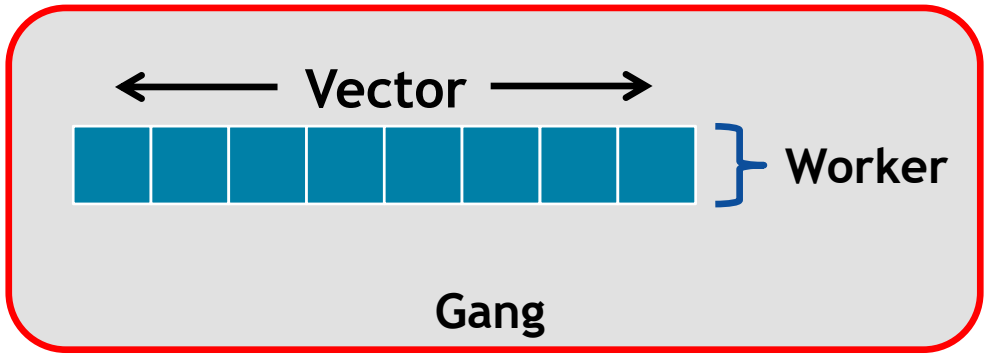

```
!$acc kernels loop gang worker(2)
do x = 1, 4
   !$acc loop vector(4)
   do y = 1, 4
      array(x,y) = array(x,y) + 1
   end do
end do
!$acc end kernels
```



- vectorが小さくなったことでループサイズにマッチし無駄を省けた
- gang, worker, vectorサイズの選択＝ループ長にマッチした値を考える必要がある

OpenACC
More Science, Less Programming

Gang - Worker - Vector の動作例: collapse句を使用する場合

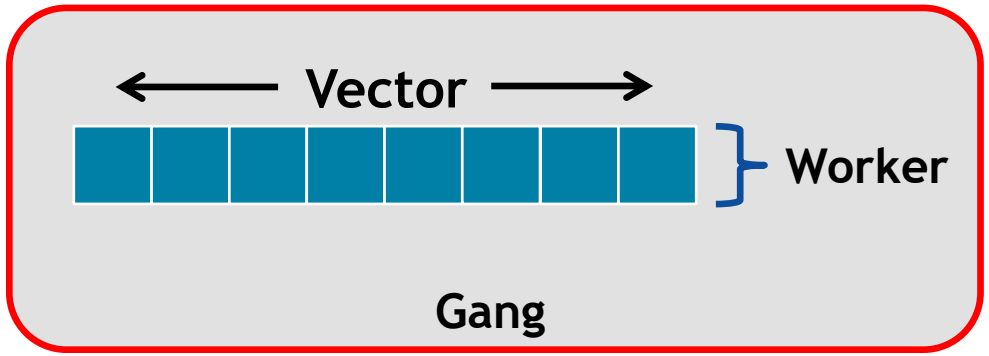


- 多重ループには **collapse句** というループ一重化の機能がある

```
!$acc kernels loop collapse(2) gang worker(1) vector(8)
do x = 1, 4
  do y = 1, 4
     array(x,y) = array(x,y) + 1
  end do
end do
!$acc end kernels
```

OpenACC
More Science, Less Programming

Gang - Worker - Vector の動作例: collapse句を使用する場合




```
!$acc kernels loop collapse(2) gang worker(1) vector(8)
do x = 1, 4
   do y = 1, 4
      array(x,y) = array(x,y) + 1
   end do
end do
!$acc end kernels
```

collapse(2)

(1,1)	(1,2)	(1,3)	(1,4)	(2,1)	(2,2)	(2,3)	(2,4)	(3,1)	(3,2)	(3,3)	(3,4)	(4,1)	(4,2)	(4,3)	(4,4)

(2,1)	(2,2)	(2,3)	(2,4)
(3,1)	(3,2)	(3,3)	(3,4)
(4,1)	(4,2)	(4,3)	(4,4)

- **collapse句**により2つの小さいループを1つの大きなループにまとめることが可能
- 並列性を高め、より長いvectorを指定可能になる

OpenACC
More Science, Less Programming

Warp: GPUスレッドの実行単位

- 実際にはGang - Worker - Vectorの数はより大きいものが割り当てられる
- NVIDIA GPU向けにプログラムする場合、 **Warps** を十分に活用できるように常にVectorのサイズを32の倍数に固定する
- 簡単には32スレッドのグループのことを Warp と呼ぶ

device_type 節: 複数種類のターゲット対応

- **device_type (<type>)**
- これ以降に指定された節は実行がtypeで指定した device の場合にのみ適用される
- 例えばNVIDIA GPU向けに最適化したとしても、CPUなど別の device の性能を損なうことがなくなる
- 1つのディレクティブで複数の device について個別の最適化節を記述可能

```
!$acc parallel loop collapse(3) device_type(nvidia) vector_length(256)
do i = 1, size
  do j = 1, size
    do k = 1, size
       c(i,j) = c(i,j) + a(i,k) * b(k,j);
   end do
  end do
end do
```

OpenACC
More Science, Less Programming

ループ最適化の進め方

- gang の数を設定する必要はほぼないのでコンパイラに任せる
- ほとんどの場合は vector の長さ指定だけで並列ループを効果的に最適化可能
- workerループを使うことは稀。vector が非常に短い場合に worker で全体の並列性を高めることに役立つ
- vectorループでは、可能な限り配列を同時にする必要がある(SIMD)
- device_type句により、あるアーキテクチャへの最適化が他のアーキテクチャに影響しないように配慮する

2. 非同期プログラミング

OpenACC
More Science, Less Programming

非同期プログラミング

2つ以上の関連性のない操作が独立、または同時に行われても、すぐには同期が取る必要のないプログラミングのこと

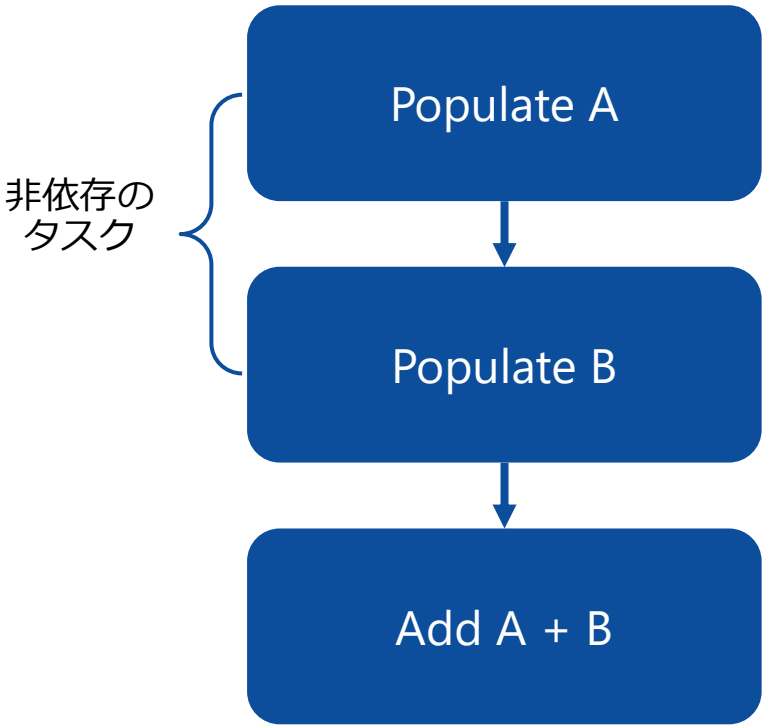
現実世界での例：

- 料理：他の食材の準備をしながらじゃがいもを茹でる
- プロジェクト：ある歴史上の有名な人物の研究に取り組む3人の学生がそれぞれ幼少期、青年期、壮年期について研究する
- 自動車の組み立て：各作業領域毎に独立して部品を作成し、最後にマージすることで車が完成するようにする

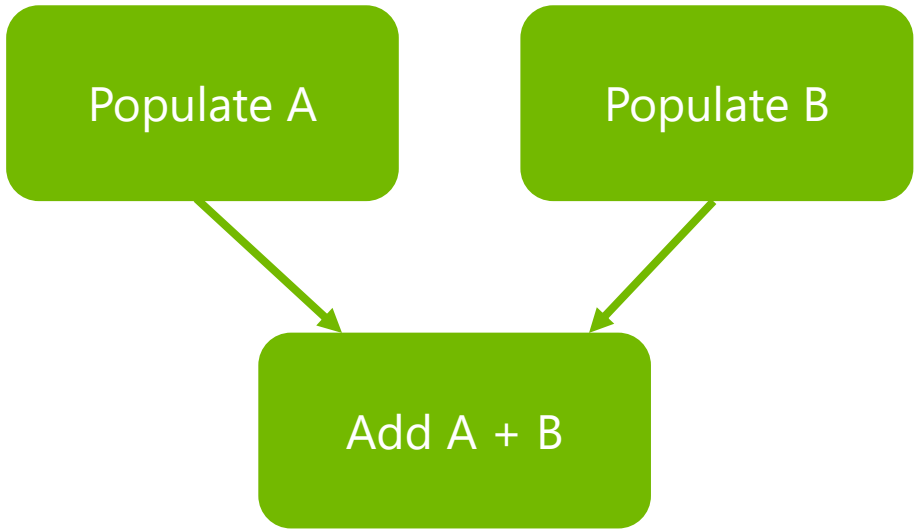
OpenACC
More Science, Less Programming

非同期の例

SYNCHRONOUS



ASYNCHRONOUS



タスクを非同期に行うためには、お互いに
完全に独立な処理でなければならない

OpenACC
More Science, Less Programming

OpenAcc async および wait 節

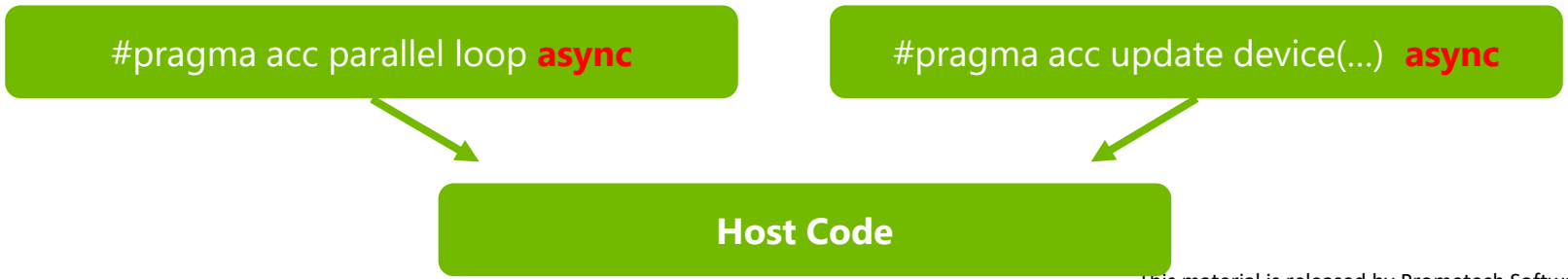
OpenACC
More Science, Less Programming

async 節の文法

```
C/C++:   #pragma acc <directive> <clauses> async(n)
Fortran: !$acc <directive> <clauses> async(n)
```

Async launches work asynchronously in queue n, then returns to host

- OpenACCはasyncによりいくつかの処理を同時に実行可能
- Device上の計算とHost上の計算を同時に実行、あるいはDevice上で計算するのと同時にデータ転送を行うことが可能
- キューn が指定されない場合はデフォルトキュー（後述）が指定される

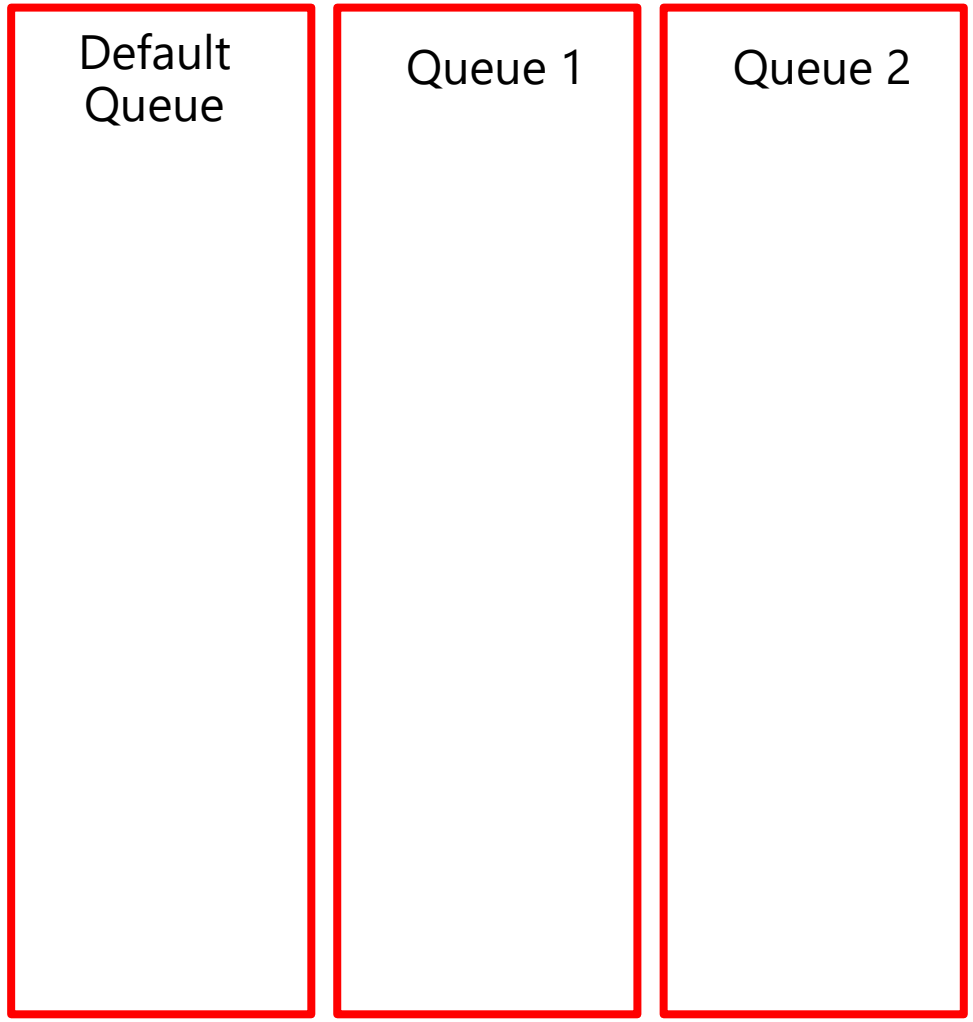


非同期処理の実現: キューについて

- 非同期処理の実行は、キューと呼ばれる待ち行列を複数用意して実行する
- 非同期処理しないコードは1つのキュー（デフォルトキュー）しか使用しない

→ これまで紹介したプログラムはデフォルトキューを使用

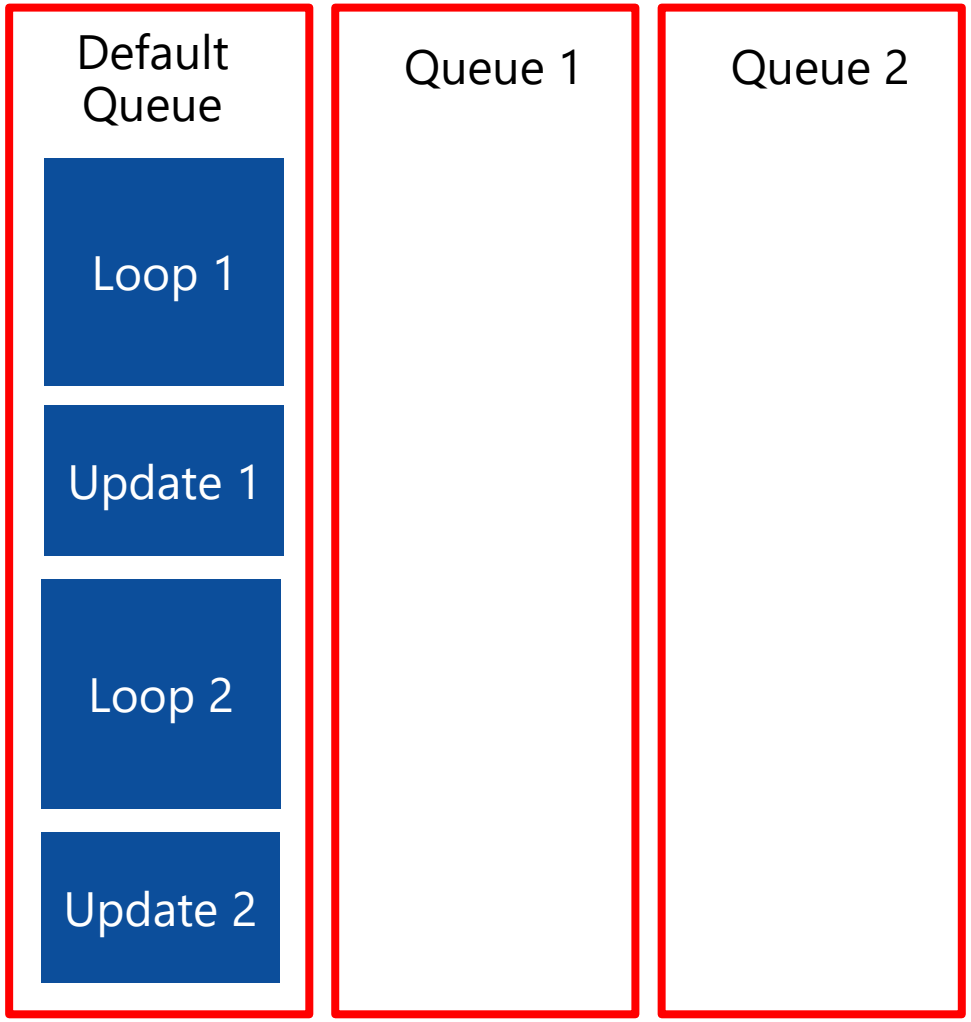
- 必要に応じキューをいくつも生成できるが、生成にはオーバーヘッドが生じる
- 通常は必要最小限のキューを生成するのが良い



OpenACC
More Science, Less Programming

非同期処理を使用しない場合

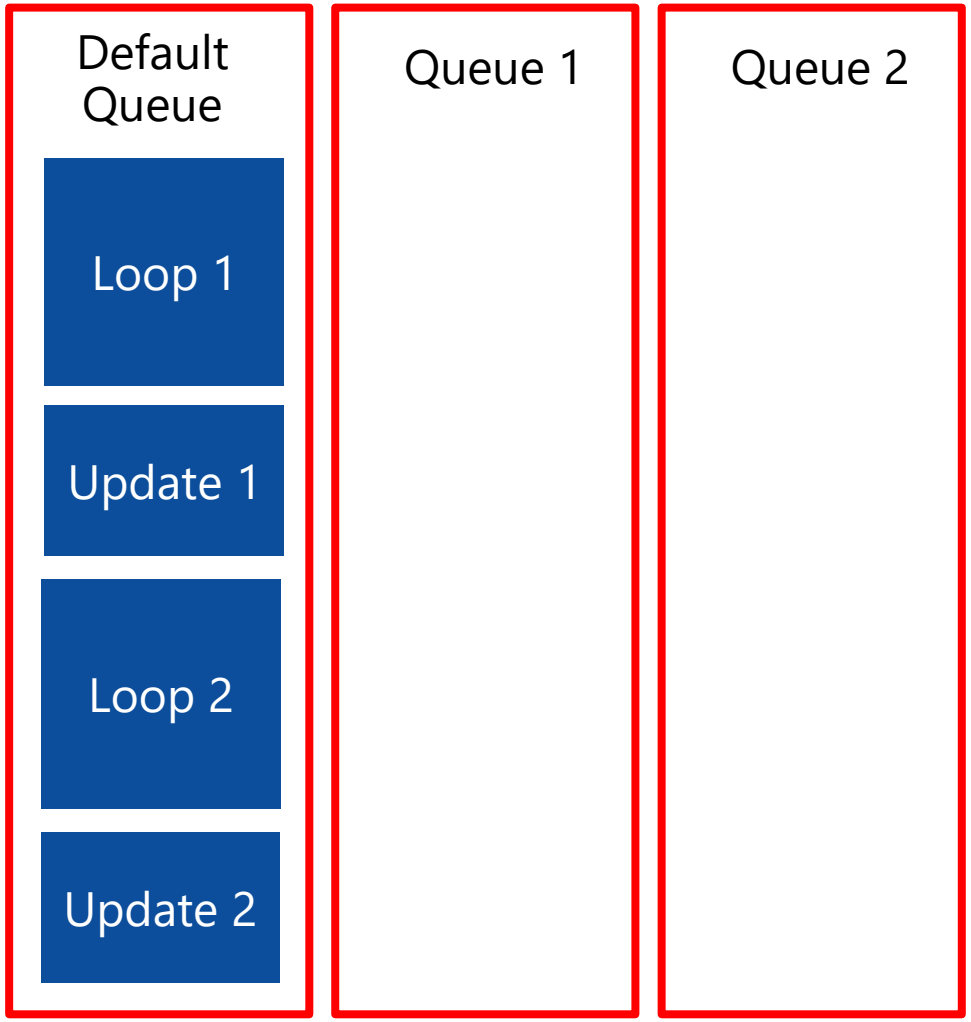
```
!$acc parallel loop
do i = 1, 100
    X(i) = ...
end do
!$acc update self(X[1:100])

!$acc parallel loop
do i = 101, 200
    X(i) = …
end do
!$acc update self(X[101:200])

call print_array(X)
```



OpenACC
More Science, Less Programming

非同期処理を使用しない場合

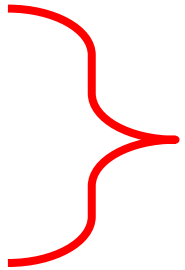
- 各処理は前の処理が終了するのを待つ
- OpenACCのデフォルト動作



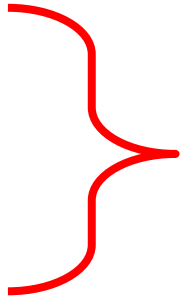
OpenACC
More Science, Less Programming

非同期処理の例：二つを並行処理

```
!$acc parallel loop async(1)
do i = 1, 100
    X(i) = ...
end do
!$acc update self(X[1:100]) async(1)

!$acc parallel loop async(2)
do i = 101, 200
    X(i) = ...
end do
!$acc update self(X[101:200]) async(2)

call print_array(X)
```



キュー1へ投入

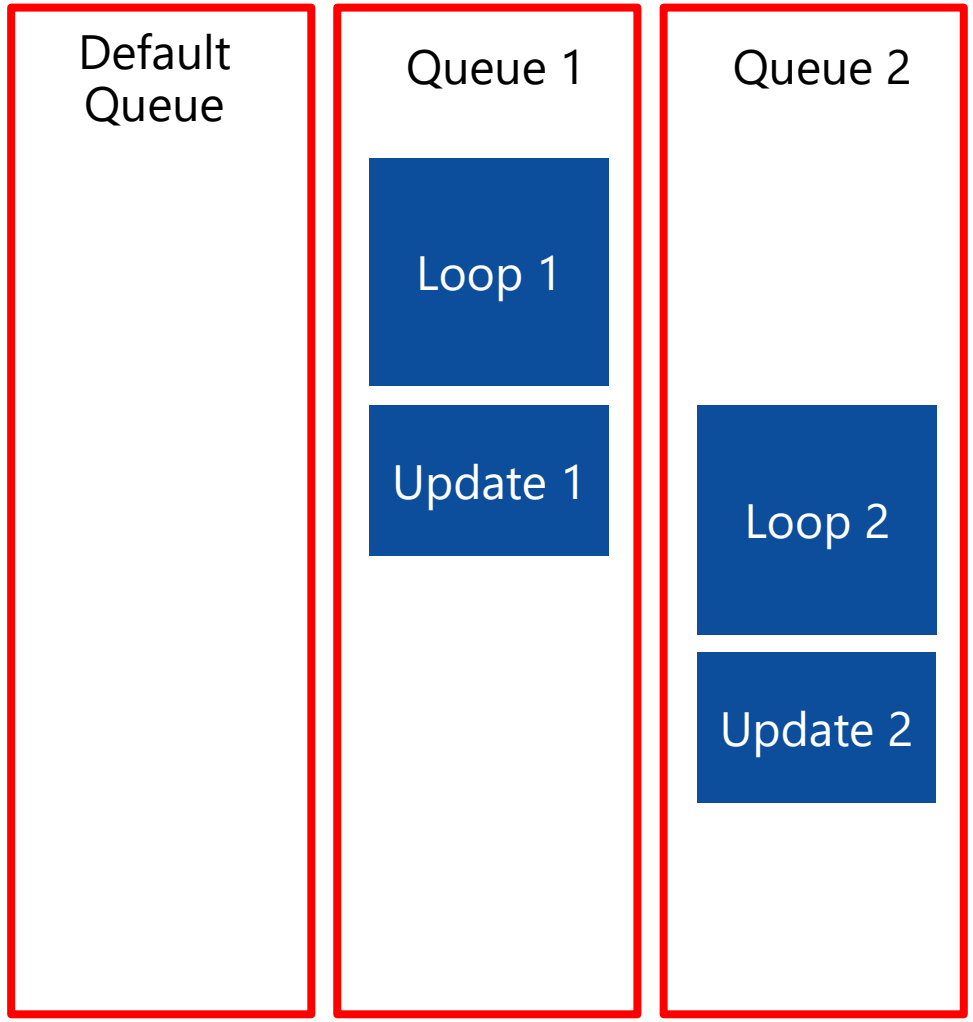


キュー2へ投入

OpenACC
More Science, Less Programming

非同期処理の例：二つを並行処理

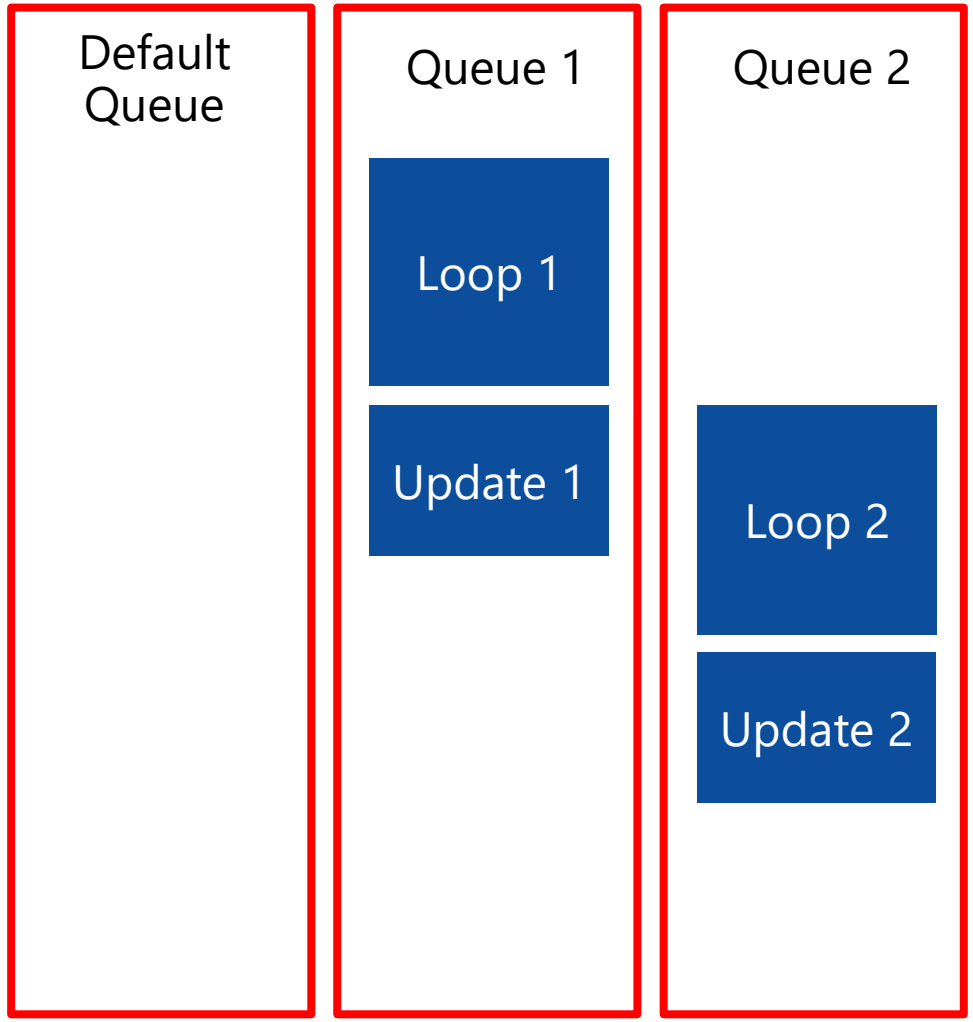
```
!$acc parallel loop async(1)
do i = 1, 100
    X(i) = ...
end do
!$acc update self(X[1:100]) async(1)

!$acc parallel loop async(2)
do i = 101, 200
    X(i) = ...
end do
!$acc update self(X[101:200]) async(2)

call print_array(X)
```



OpenACC
More Science, Less Programming

非同期処理の例：二つを並行処理

- async節により、Loop 1とLoop 2を同時に実行できた
- asyncを使用しない場合に比べ、Loop 2をすぐに開始できたが…



OpenACC
More Science, Less Programming

非同期処理の例：ホスト処理の落とし穴

```
!$acc parallel loop async(1)
do i = 1, 100
    X(i) = ...
end do
!$acc update self(X[1:100]) async(1)

!$acc parallel loop async(2)
do i = 101, 200
    X(i) = ...
end do
!$acc update self(X[101:200]) async(2)

call print_array(X)
```

- async節により処理を異なるキューに入るが、その後のコードはすべて連続して実行される
- 左図のコードでは、ループや更新が終わる前に**print_array**関数が呼び出されてしまう
- これは **wait** ディレクティブで回避できる

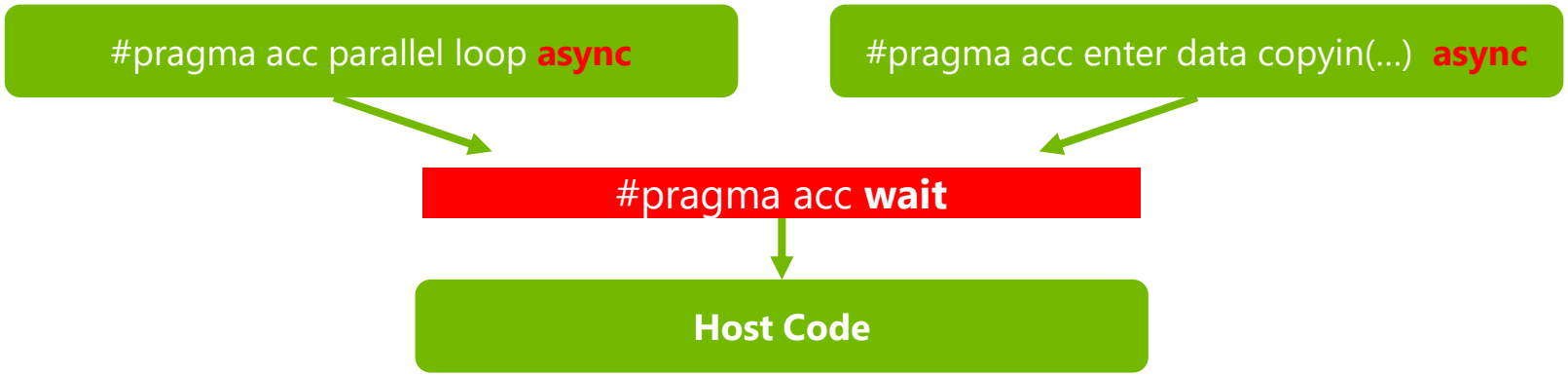
OpenACC
More Science, Less Programming

wait ディレクティブ

```
C/C++:   #pragma acc wait(n)
Fortran: !$acc wait(n)
```

Wait blocks host until all operations in queue *n* have completed

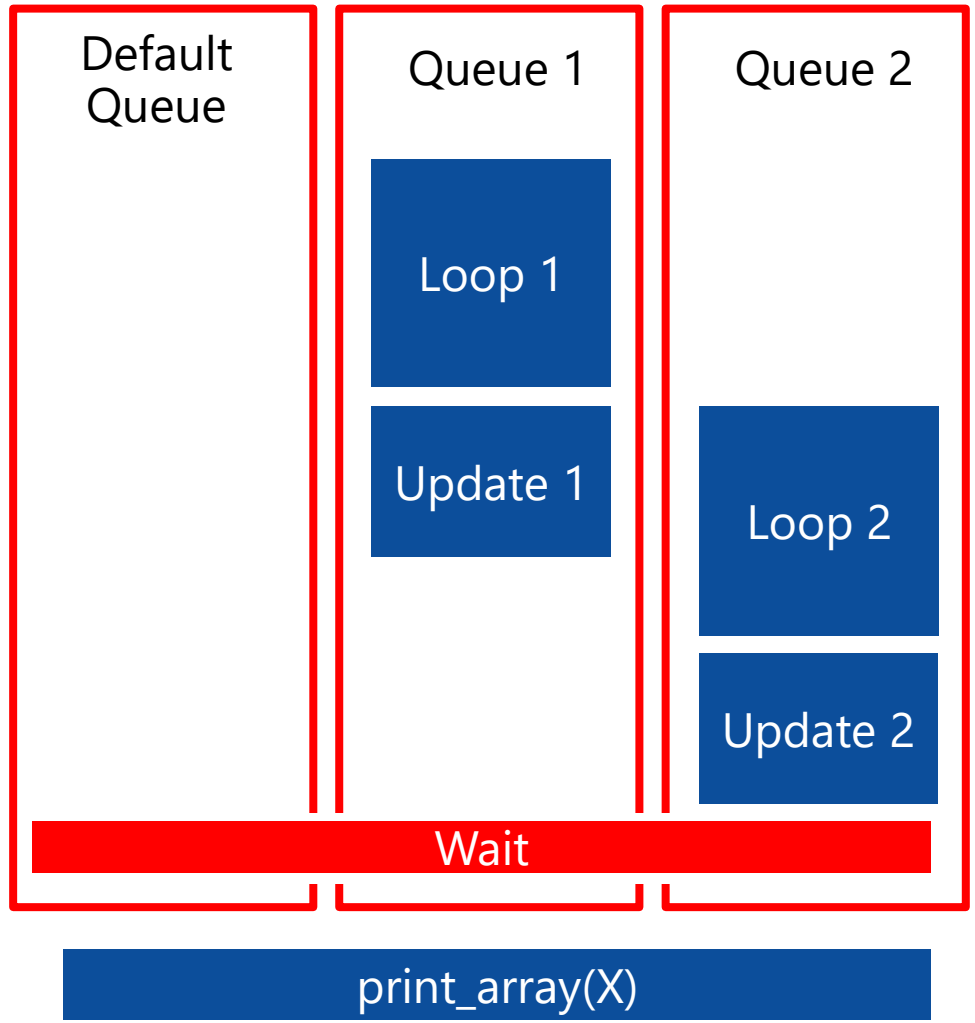
- wait はそれまでの非同期処理がすべて完了するまでプログラムを待機状態にする
- n を指定しない場合は、その時点のすべてのキューが完了するまで待機する



OpenACC
More Science, Less Programming

非同期処理の例：wait による同期

```
!$acc parallel loop async(1)
do i = 1, 100
    X(i) = ...
end do
!$acc update self(X[1:100]) async(1)

!$acc parallel loop async(2)
do i = 101, 200
    X(i) = ...
end do
!$acc update self(X[101:200]) async(2)
!$acc wait
call print_array(X)
```



OpenACC
More Science, Less Programming

3. CUDAとの連携（Interoperability）

OpenACC
More Science, Less Programming

Interoperabilityの重要性

既存のCUDA資産の流用や、性能向上を考える場合に

OpenACCは、

- 自己完結のプログラミングモデル
- メインのプログラミングモデルとしての使用
- ネイティブのCUDAデータの直接操作 ← CUDAプログラムへ素早く機能追加する手段
- CUDAデバイス関数の呼び出し ← 既存資産の流用
- CUDAからOpenACC関数の呼び出し ← CUDAプログラムへ素早く機能追加する手段

を可能とする

OpenACC
More Science, Less Programming

Interoperability の考え方

データから見たとき

データシェアリング

- 複数のプログラミングモデル間でデバイス上のデータをやり取りする

カーネルシェアリング

- 別のプログラミングモデルで割り当てられたデータを使ってカーネルを呼び出す

具体的な相互利用のシチュエーション

OpenACCを用いて開発しているアプリケーションで

- CUDAでさらなる計算の最適化を行いたい　⇒　OpenACC管理のデータを共有

CUDAを用いて開発しているアプリケーションで

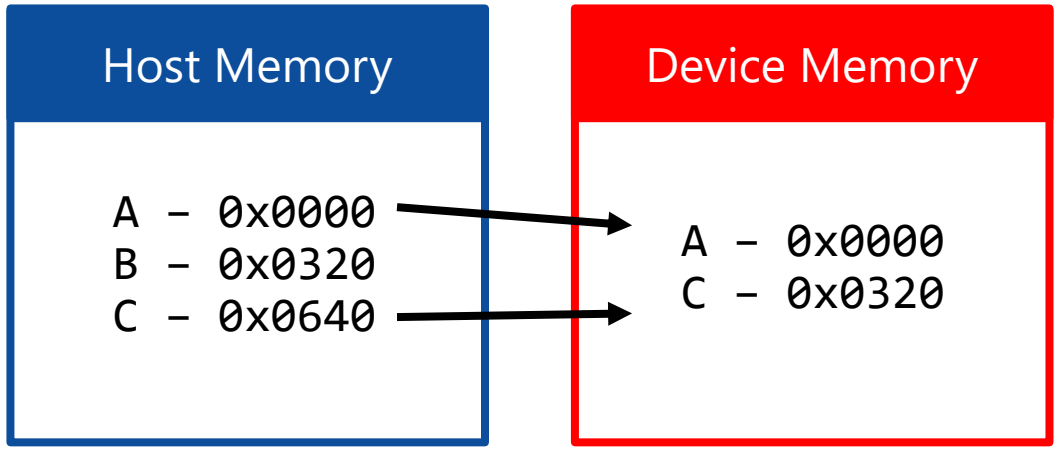
- OpenACCで新たな計算カーネルを追記したい　⇒　CUDA管理のデータを共有

OpenACC管理のデータを共有
- OpenACCからCUDAを呼び出す

OpenACC
More Science, Less Programming

OpenACCのデータを共有する

- OpenACC はプログラム上でHostとDeviceのメモリは1つのポインタで管理されるため、異なるポインタを持つ必要がない（変数は1つ）
- Device上にデータを割り当てたとき、HostとDeviceのアドレスのマッピングが作成される

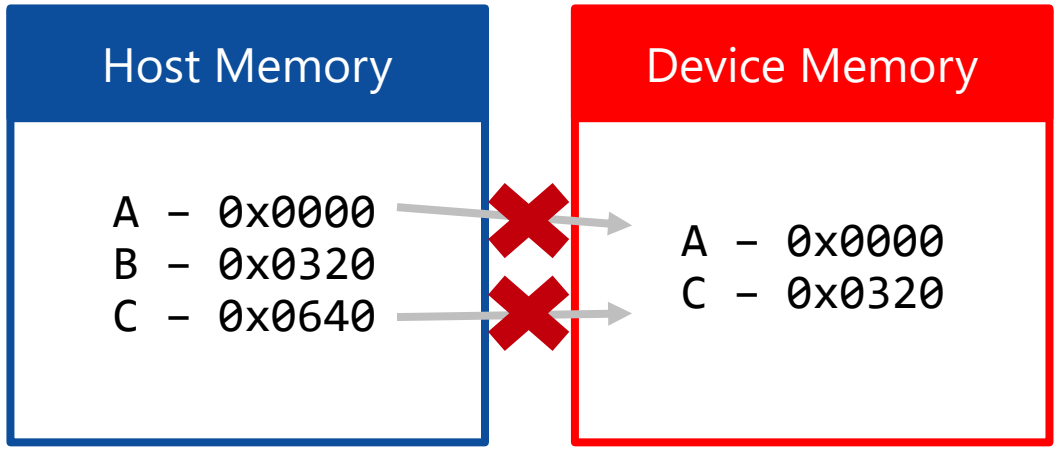


- HostとDeviceどちらのメモリプールが使われるかはポインタが参照されるコンテキストによって変わる
- Hostコードでポインタ参照した場合はHostのアドレスが、
- Deviceコードでポインタ参照した場合はDeviceのアドレスが使用される

OpenACC
More Science, Less Programming

OpenACCのデータを共有する

- CUDAの場合、Host・Deviceで二つの変数があり、このようなマッピングは存在しない。したがって、CUDAを呼び出す場合、Deviceのアドレスを明示的に使用する必要がある
- OpenACCで確保したデータを使ってOpenACCコード内からCUDAカーネルを起動する場合、Deviceのアドレスを明示的に取得してCUDAカーネルに渡さなければならない



- **host_data** ディレクティブはOpenACCのDeviceデータへのアドレスを取得するために使用する
- **host_data** ディレクティブはHostの代わりにDeviceのポインタを使用するようコンパイラに指示する

OpenACC
More Science, Less Programming

呼び出したいCUDAコードの例: saxpy

- 右のような y = ax + y を計算するCUDAコードをOpenACCから呼び出したい
- CUDAから呼び出す場合、この関数にはDeviceポインタ(~GPUメモリに確保した変数)を渡す
- OpenACCから呼び出す場合、dataディレクティブによりCPUからGPUにデータ転送し、host_dataディレクティブを利用し、CUDAカーネルにDeviceポインタを渡す

```
__global__
void saxpy_kernel(int n, float a,
      float *x, float *y)
{
  int i = blockIdx.x*blockDim.x + threadIdx.x;
  if (i < n) y[i] = a*x[i] + y[i];
}

void saxpy(int n, float a,
      float *dx, float *dy)
{
  // Launch CUDA Kernel
  saxpy_kernel<<<4096,256>>>(n, a, dx, dy);
}
```

OpenACC
More Science, Less Programming

Interface: FortranからCUDAを呼び出すために

- Fortran モジュールインターフェースを記載することでFortranプログラムからCの関数を呼び出せる
- 引数 n や a は C言語バインディングで変数の値が渡される
- インターフェース文によりFortran配列dx, dy のメモリアドレスが Cの関数の引数として受け渡される

```
module saxpy_c_mod
interface
  subroutine saxpy(n, a, dx, dy) bind(c)
    use iso_c_binding
    implicit none
    integer(C_INT) :: n
    real(C_FLOAT)  :: a
    type(C_PTR)    :: dx, dy
  end subroutine saxpy
end interface
end module saxpy_c_mod
```

OpenACC
More Science, Less Programming

host_data ディレクティブの使用例

Fortran からCUDAを呼ぶ

```
program main
  use saxpy_c_mod
  integer, parameter :: n = 2**20
  real, dimension(N) :: x, y
  real               :: a = 2.0
  x = 1.0
  y = 0.0

  !$acc data copy(y) copyin(x)
  …
  !$acc host_data use_device(y,x)
  call saxpy(n, a, x, y)
  !$acc end host_data
  !$acc end data

end program
```

- !$acc data copy(y) copyin(x) Deviceにデータのコピーを作成する
- !$acc host_data use_device(y,x) – ランタイムにxとyのDeviceアドレスをsaxpy関数で使うように指示する
- “!$acc host_data” および “!$acc end host_data” の領域内で追加された他の関数呼び出しは、同様にDeviceアドレスを受け取る

OpenACC
More Science, Less Programming

ライブラリ: cuBLAS

host_dataを用いた手段は既存のGPUに最適化されたライブラリとのインタフェースとのインターフェイスとしても使用できる

例えば:

- cuBLAS
- cuFFT
- MAGMA
- Thrust (more on this later!)
- Libsci_acc

OpenACC Main Calling cuBLAS

```
program main
  use cublas_v2
  integer, parameter :: n = 2**20
  real*4, dimension(N) :: x, y
  type(cublasHandle)       :: cublas_H
  integer                  :: status

  x = 1.0
  y = 0.0

  status = cublasCreate(cublas_H)
  !$acc data copy(y) copyin(x)
  !$acc host_data use_device(y,x)
  status = cublasSaxpy(cublas_H, n, 2.0, x, 1, y, 1)
  !$acc end host_data
  !$acc end data
  status = cublasDestroy(cublas_H)

end program
```

nvfortran -acc -cudalib=cublas saxpy_v2.f90

CUDA管理のデータを共有
- CUDAからOpenACCを呼び出す

OpenACC
More Science, Less Programming

CUDAのデータを共有する

Using CUDA addresses in OpenACC compute constructs

- CUDAのデータをOpenACCと共有する場合は？

- CUDAに割り当てられたデータをOpenACCで参照したい
- CUDAアドレスを使用する場合は以下の方法でマークをする必要がある：

1. **DevicePtrをOpenACCに明示する**
2. **DevicePtrをOpenACCランタイムオブジェクトと関連付ける**

呼び出したいOpenACCコードの例: saxpy

OpenACC Version

```
void saxpy(int n, float a,
    float *x, float *y)
{

#pragma acc parallel loop default(present)
    for(int i = 0; i < n; i++) {
        y[i] = a*x[i] + y[i];
    }

}
```

- 左のような y = ax + y を計算するOpenACCコードをCUDAから呼び出したい
- OpenACCから呼び出す場合は、この関数にHostポインタを与える。OpenACCランタイムがマップされたDeviceポインタに変換する
- しかしCUDAデバイスメモリを使用する場合、Deviceポインタしか使用できない
- **deviceptr**を用いることで、xとyがDeviceポインタであり変換が必要ないことをランタイムに伝えることが可能

OpenACC
More Science, Less Programming

deviceptr 節

deviceptr節はオブジェクトがすでにDevice上にあり変換は必要ないことをコンパイラに伝える

- deviceptrはparallel, kernels, dataディレクティブで使用できる

```
program main
  ……
  cudaMallocManaged((void*)&x,(size_t)n*sizeof(float));
  cudaMallocManaged((void*)&y,(size_t)n*sizeof(float));
  call saxpy(n, a, x, y)
  ……
end program
```

```
subroutine saxpy(n, a, x, y)
  integer :: n
  real    :: a, x(*), y(*)
  !$acc parallel loop deviceptr(y,x)
  do i = 1, n
    y(i) = y(i) + a * x(i)
  end do
  !$acc end parallel
end subroutine
```

XとYはすでにDeviceポインタとして使えるので直接使用する

OpenACC & Thrust

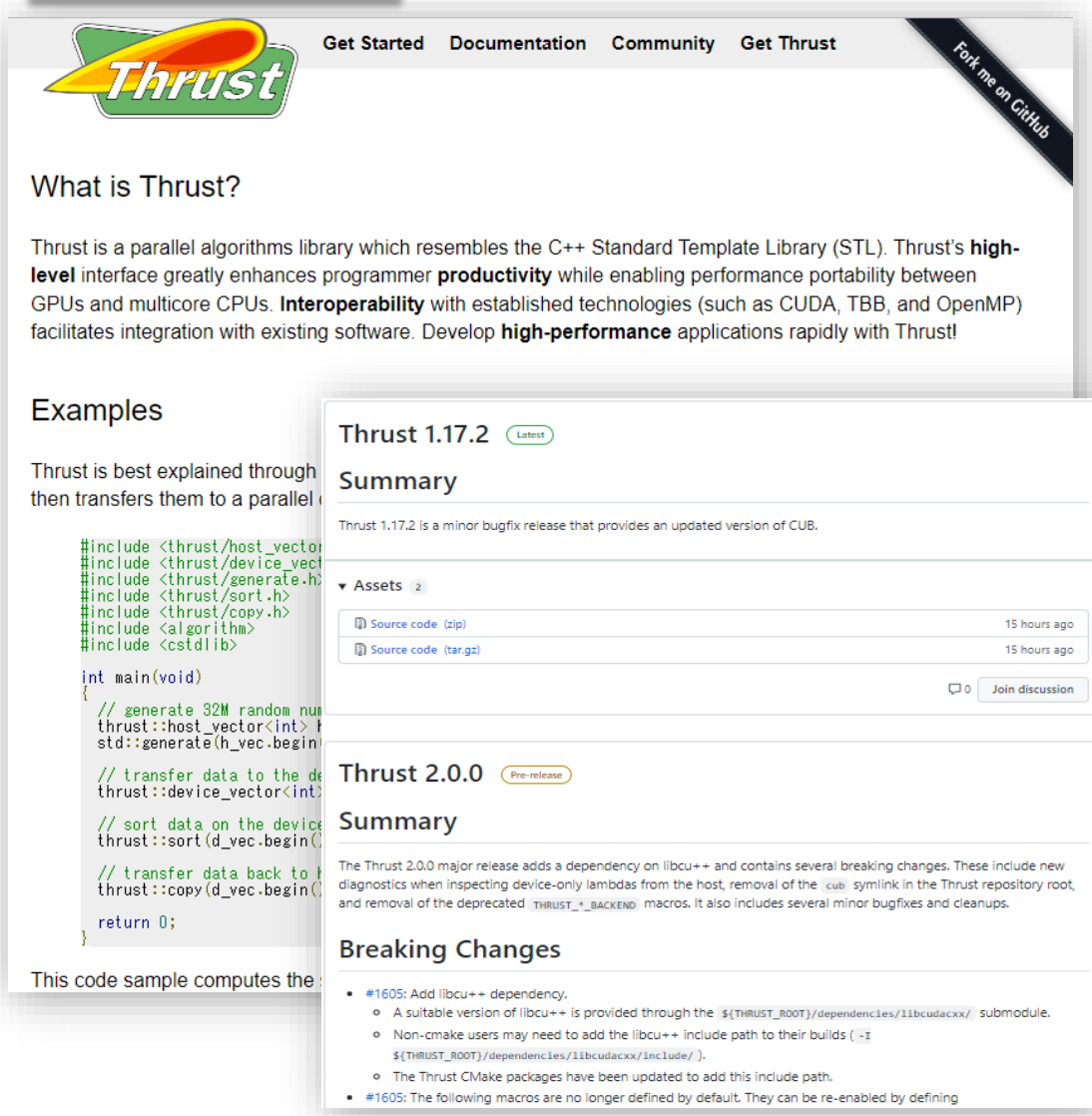
ThrustはC++のためのSTLライクなアクセラレータライブラリ

- High-level interface
- Host/Device container classes
- Common parallel algorithms

ThrustのvectorをDeviceポインタにキャストしてOpenACCで使用することが可能

```
void saxpy(int n, float a, float *x, float *y)
{
#pragma acc parallel loop deviceptr(y,x)
    for(int i = 0; i < n; i++) {
        y[i] = a*x[i] + y[i];
    }

}
```

thrust.github.io



OpenACC
More Science, Less Programming

OpenACC & Thrust

ThrustはC++のためのSTLライクなアクセラレータライブラリ

- High-level interface
- Host/Device container classes
- Common parallel algorithms

ThrustのVector型をDeviceポインタにキャストしてOpenACCで使用することが可能

```
subroutine saxpy(n, a, x, y) bind(c)
   integer :: n
   real    :: a, x(*), y(*)
   !$acc kernels deviceptr(y,x)
   do i = 1, n
     y(i) = y(i) + a * x(i)
   end do
   !$acc end kernels
 end subroutine
```

```
int N = 1<<20;
thrust::host_vector<float> x(N), y(N);
for(int i=0; i<N; i++)
{
  x[i] = 1.0f;
  y[i] = 0.0f;
}

// Copy to Device
thrust::device_vector<float> d_x = x;
thrust::device_vector<float> d_y = y;

saxpy(N,2.0, d_x.data().get(),
             d_y.data().get());

// Copy back to host
y = d_y;
```

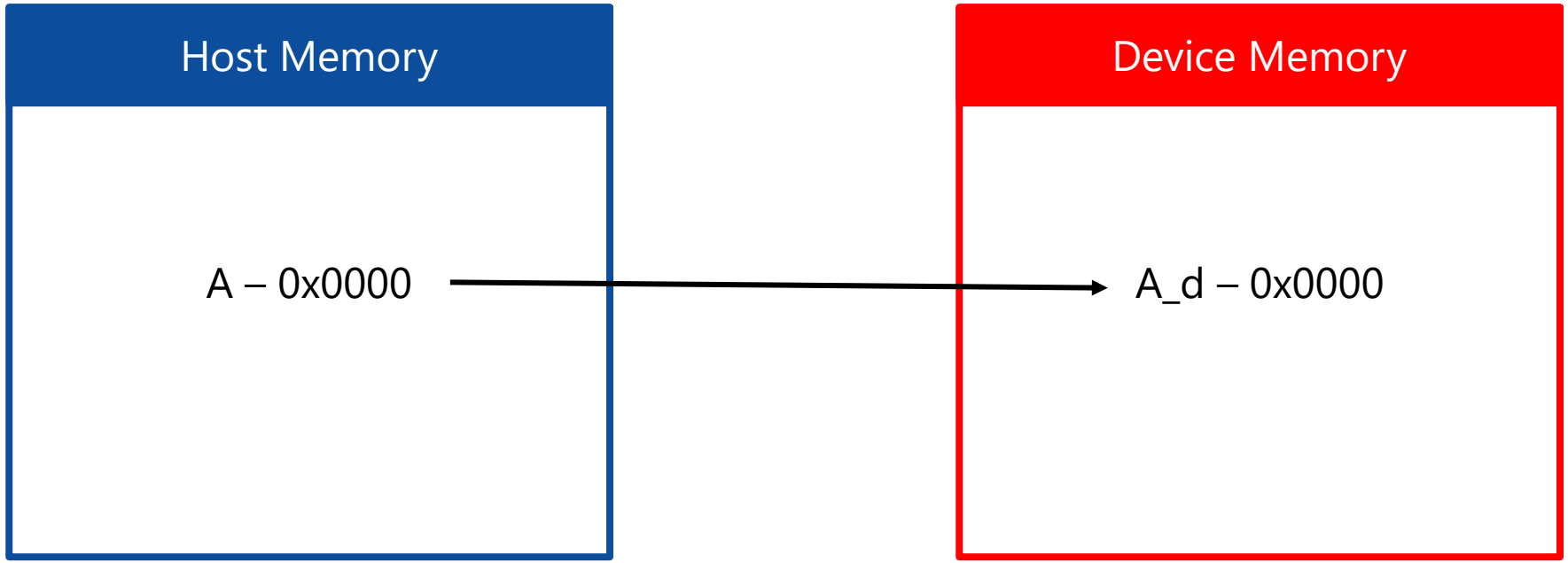
OpenACC
More Science, Less Programming

デバイスポインタのマッピング

- OpenACCはホストとデバイスのメモリアドレスのマッピングを行う
- 一方でCUDAはホストとデバイスのメモリアドレスのマッピングは行わない
- OpenACCとCUDAを相互に利用するために、CUDAのデバイスデータを、OpenACCでホストアドレス(ポインタ)と対応付けることができる

OpenACCの acc_map_data 関数

```
float A[100];
cudaMalloc((void*)&A_d,(size_t)100*sizeof(float));
acc_map_data(A, A_d, 100*sizeof(float));
```



OpenACC
More Science, Less Programming

OpenACCの acc_map_data 関数

- **acc_map_data** (**acc_unmap_data**) によりデバイスのメモリ割り当てをOpenACCの変数と対応付ける(map)または対応の解除(unmap)ができる
- データの対応付けをするために双方のポインタが有効である必要がある
- さらにメモリを解放する場合はデータの対応付けを解除する必要がある

対応付けにより、このループは自動的にxとyをそれぞれのデバイスアドレスに変換します

```
float x[n], y[n];

cudaMalloc((void*)&x_d,(size_t)n*sizeof(float));
cudaMalloc((void*)&y_d,(size_t)n*sizeof(float));

acc_map_data(x, x_d, n*sizeof(float));
acc_map_data(y, y_d, n*sizeof(float));

#pragma acc parallel loop
for(int i = 0; i < n; i++) {
    x[i] = x[i] * y[i];
}
```

OpenACC
More Science, Less Programming

device routinesの利用

OpenACC
More Science, Less Programming

acc routineによるCUDAとの連携

CUDA Code

```
extern “C” __device__ void
f1dev(float* a, float* b)
{
  *a = *b + 1.0;
}
```

nvcc -c –rdc true testsub.cu

同様にCUDA **__device__関数をacc routine** で宣言すればOpenACCから呼び出し可能

OpenACC Code

```
interface
subroutine f1dev( x, y )
!$acc routine seq
bind(c)
  use iso_c_binding
  implicit none
  type(C_PTR):: x, y
end subroutine f1dev
end interface
...
!$acc parallel loop copy(a(1:n))
copyin(b(1:n))
do i, 1, n
  call f1dev( a(i), b(i) )
end do
```

nvfortran -acc -cuda test.f90 testsub.o

OpenACC
More Science, Less Programming

acc routineによるCUDAとの連携

CUDA Code

```
extern “C” __device__ void
f1dev(float* a, float* b, int i)
{
  a[i] = .... b[i] .... ;
}
```

同様にCUDA **__device__関数をacc routine** で
宣言すればOpenACCから呼び出し可能

OpenACC Code

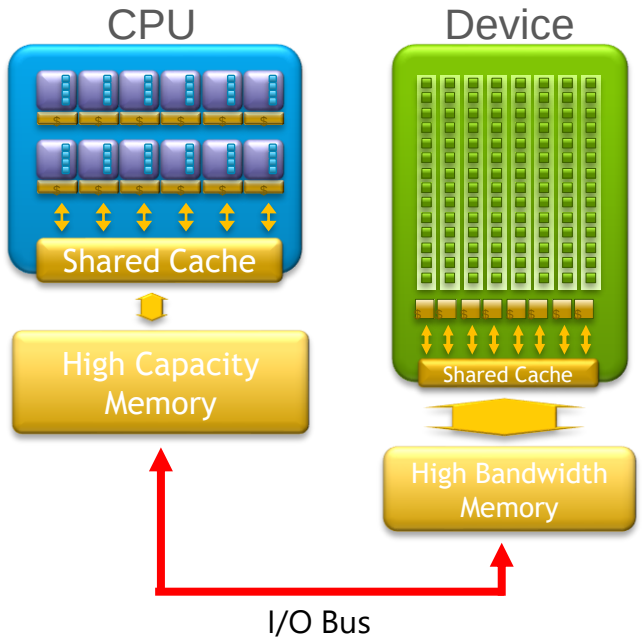
```
interface
subroutine f1dev( a, b, i )
!$acc routine seq
bind(c)
  use iso_c_binding
  implicit none
  integer(C_INT) :: i
  type(C_PTR):: a, b
end subroutine f1dev
end interface
...
!$acc parallel loop present(
a(1:n), b(1:n) )
do i, 1, n
  call f1dev( a, b, i )
end do
```

OpenACC
More Science, Less Programming

4. マルチGPU計算の基礎

OpenACC
More Science, Less Programming

複数デバイスを持つ計算機を利用する

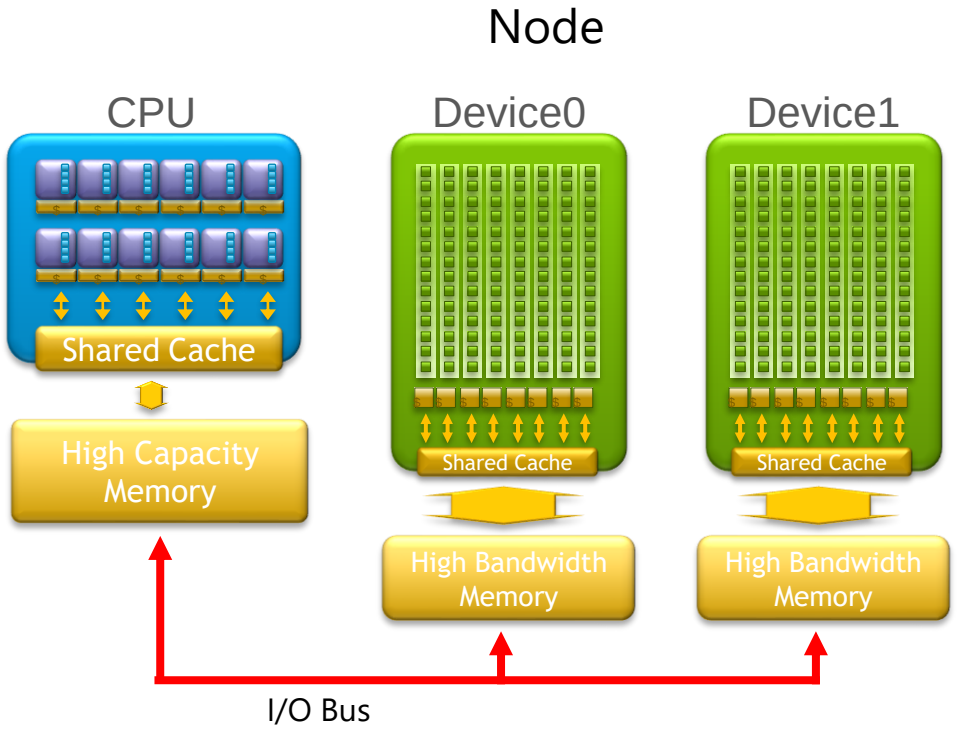


- ここまでは1台のDeviceを想定、複数Device、複数計算機は考慮していなかった
- しかし昨今、計算機は複数のDeviceが持つことが一般的となった
- いくつかの異なる方法でのMulti-Deviceなプログラミング手法を説明する

OpenACC
More Science, Less Programming

複数デバイスを持つ計算機を利用する

- **Multi-Deviceを実現する3つの選択肢**
- OpenACCの組み込み関数とasyncを用いたMulti-Device操作
- OpenMPで各スレッドに別のDeviceを割り当てる
- MPIを使用しMPIランクごとに別のデバイスを割り当てる（**弊社推奨**）



OpenACC
More Science, Less Programming

OpenACC のみでマルチGPUを使う

OpenACC のみでマルチGPUを使う

- OpenACCの組み込み関数を用いて実装する
- 非同期プログラミング (async-wait) も使用する必要がある

使用可能なDevice数を調べる

```
int num_devices = acc_get_num_devices(acc_device_default);
```

- 計算機上の各Deviceには“**ゼロ始まり**”で固有の番号が割り当てられる
- これらに計算を分割割り当てることで、Multi-Devices処理を行う

```
+-----------------------------------------------------------------------------+
| NVIDIA-SMI 515.43.04    Driver Version: 515.43.04    CUDA Version: 11.7     |
|-------------------------------+----------------------+----------------------+
| GPU  Name        Persistence-M| Bus-Id        Disp.A | Volatile Uncorr. ECC |
| Fan  Temp  Perf  Pwr:Usage/Cap|         Memory-Usage | GPU-Util  Compute M. |
|                               |                      |               MIG M. |
|===============================+======================+======================|
|   0  NVIDIA A100-SXM...  On   | 00000000:01:00.0 Off |                    0 |
| N/A   43C    P0   140W / 400W |   4812MiB / 40960MiB |     82%      Default |
|                               |                      |             Disabled |
+-------------------------------+----------------------+----------------------+
|   1  NVIDIA A100-SXM...  On   | 00000000:41:00.0 Off |                    0 |
| N/A   31C    P0    55W / 400W |      0MiB / 40960MiB |      0%      Default |
|                               |                      |             Disabled |
+-------------------------------+----------------------+----------------------+
|   2  NVIDIA A100-SXM...  On   | 00000000:81:00.0 Off |                    0 |
| N/A   28C    P0    53W / 400W |      0MiB / 40960MiB |      0%      Default |
|                               |                      |             Disabled |
+-------------------------------+----------------------+----------------------+
|   3  NVIDIA A100-SXM...  On   | 00000000:C1:00.0 Off |                    0 |
| N/A   28C    P0    52W / 400W |      0MiB / 40960MiB |      0%      Default |
|                               |                      |             Disabled |
+-------------------------------+----------------------+----------------------+
```

OpenACC
More Science, Less Programming

Deviceの切り替え

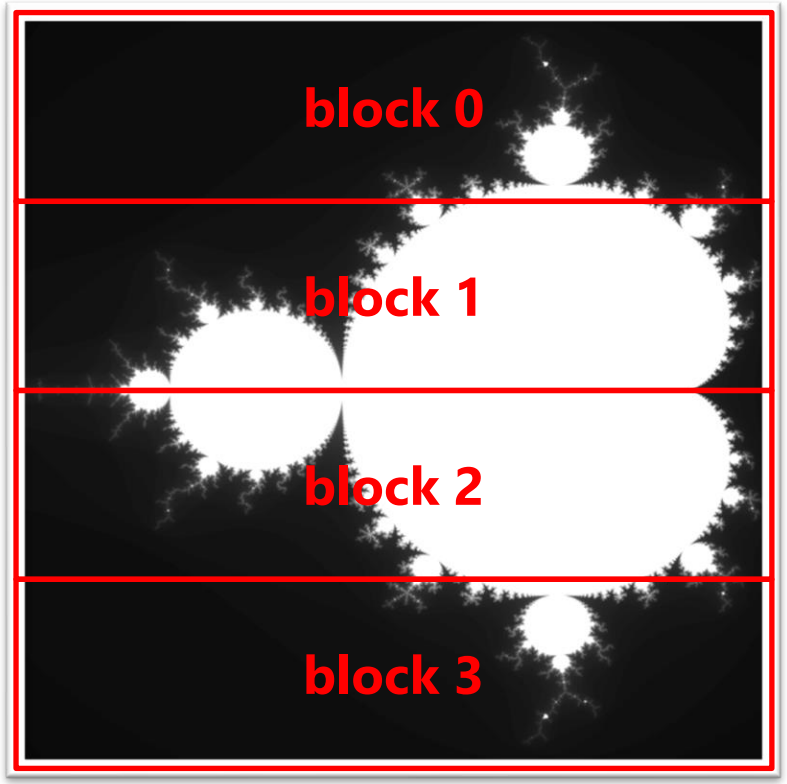
```
acc_set_device_num(device_num, acc_device_default);
```

```
acc_set_device_num(0, acc_device_default);
#pragma acc parallel loop async
for(int i = 0; i < size; i++) {
    ...
}

acc_set_device_num(1, acc_device_default);
#pragma acc parallel loop async
for(int j = 0; j < size; j++) {
    ...
}
```

- acc_set_device_numでアクティブなDeviceを切り替える
- Deviceカーネルをキューに登録してから、別のDeviceに切り替えられる
- asyncループにすることで他のDeviceの処理を待たずに各Deviceの処理を起動することが可能

OpenACC
More Science, Less Programming

Mandelbrot集合のマルチGPU化



- マンデルブロ集合を例にMulti-Device化を考える
- コードの目的は画像をいくつかのブロックへ分割し、各ブロックを別々のデバイスで計算し高速化
- シンプルにMulti-Device化が可能

OpenACC
More Science, Less Programming

Mandelbrot集合のマルチGPU化: データ

acc enter/exit dataを使用

全Deviceの計算用メモリを確保

全Deviceのメモリを解放

```
int main() {
      ...
      int ndevices = acc_get_num_devices(acc_device_default);
      int block_size = WIDTH*HEIGHT/ndevices;
      for(int device=0; device < ndevices; device++) {
            acc_set_device_num(device, acc_device_default);
#pragma acc enter data create(image[block_size*device:block_size])
      }

      ... // Compute

      for(int device=0; device < ndevices; device++) {
            acc_set_device_num(device, acc_device_default);
#pragma acc exit data delete(image)
      }
}
```

OpenACC
More Science, Less Programming

Mandelbrot集合のマルチGPU化: データ

acc enter/exit dataを使用

- Deviceにより非同期にメモリの割当と解放が行われるとは限らない
- 事前にメモリを割り当てる
- この計算では、各Deviceは配列全体ではなく部分配列を持てば良い

```
int main() {
      ...
      int ndevices = acc_get_num_devices(acc_device_default);
      int block_size = WIDTH*HEIGHT/ndevices;
      for(int device=0; device < ndevices; device++) {
            acc_set_device_num(device, acc_device_default);
#pragma acc enter data create(image[block_size*device:block_size])
      }

      ... // Compute

      for(int device=0; device < ndevices; device++) {
            acc_set_device_num(device, acc_device_default);
#pragma acc exit data delete(image)
      }
}
```

OpenACC
More Science, Less Programming

Mandelbrot集合のマルチGPU化: 計算部分

全Deviceループ処理

計算開始 (**async**)

データ転送開始 (**async**)

次のDeviceへ

```
int main() {
     int ndevices = acc_get_num_devices(acc_device_default);
     int block_size = WIDTH*HEIGHT/ndevices;
     ... // Allocate Data
     for(int device=0; device<ndevices; device++) {
          int yStart = device*(HEIGHT/ndevices);
          int yEnd   = yStart+(HEIGHT/ndevices);
          acc_set_device_num(device, acc_device_default);
#pragma acc parallel loop async
          for(int y=yStart;y<yEnd;y++) {
               for(int x=0;x<WIDTH;x++) {
                    image[y*WIDTH+x]=mandelbrot(y,x);
               }
          }
#pragma acc update ¥
 host(image[yStart*WIDTH:block_size]) async


     }
     ... // Wait
     ... // Deallocate Data
}
```

OpenACC
More Science, Less Programming

Mandelbrot集合のマルチGPU化: 計算部分

- Multi-Devicesで非同期処理を行う場合は各Deviceが個別に*async queue*を持つ
- `#pragma acc parallel loop async`
- 各Deviceにとってデフォルトのasync queueとなる
- 最後に、Multi-Deviceの場合には次の処理を行う前にすべてのDeviceが処理を終了したことを確かめる必要がある

```
int main() {
     int ndevices = acc_get_num_devices(acc_device_default);
     int block_size = WIDTH*HEIGHT/ndevices;
     ... // Allocate Data
     for(int device=0; device<ndevices; device++) {
          int yStart = device*(HEIGHT/ndevices);
          int yEnd   = yStart+(HEIGHT/ndevices);
          acc_set_device_num(device, acc_device_default);
#pragma acc parallel loop async
          for(int y=yStart;y<yEnd;y++) {
               for(int x=0;x<WIDTH;x++) {
                    image[y*WIDTH+x]=mandelbrot(y,x);
               }
          }
#pragma acc update ¥
 host(image[yStart*WIDTH:block_size]) async


     }
     ... // Wait
     ... // Deallocate Data
}
```

OpenACC
More Science, Less Programming

Mandelbrot集合のマルチGPU化: waitによる同期

- 単体のwaitでは最後のDeviceの終了のみを待機してしまう
- 全Deviceの計算終了を確実に調べるために全*async queue*について**wait**を発行

全デバイスで**wait**を呼び出す

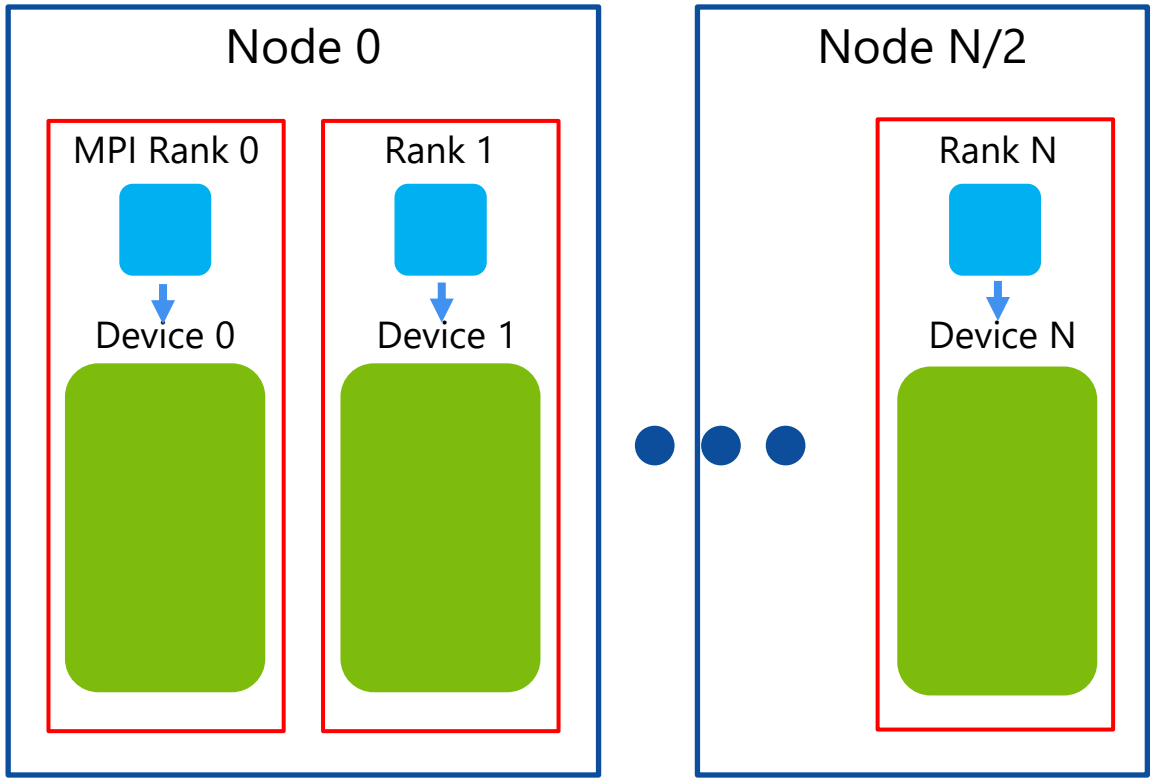
```
int main() {
     int ndevices = acc_get_num_devices(acc_device_default);
     int block_size = WIDTH*HEIGHT/ndevices;
     ... // Allocate Data

     ... // Compute

     for(int device=0; device < ndevices; device++) {
          acc_set_device_num(device, acc_device_default);
          #pragma acc wait
     }

     ... // Deallocate Data
}
```

OpenACC
More Science, Less Programming

OpenACCとMPIを用いたマルチGPU化

OpenACC
More Science, Less Programming

MPIによるマルチGPU化



- MPIは実装は難しいが、柔軟性と拡張性に優れる
- OpenACC単体でのマルチGPU化コードは制御が複雑化
- MPI + OpenACCは、**標準的なMPIプログラム上でSingle-Deviceコードを制御する。**OpenACC単体よりもシンプルな構造になると期待される
- 物理的な計算機に何台のGPUが乗っていても、**仮想的にSingle-Deviceの計算機が複数あるものとして扱える**

OpenACC
More Science, Less Programming

MPIによるマルチGPU化: 簡単な例

```
MPI_Init(&argc,&argv);
int rank, nranks;
MPI_Comm_size(MPI_COMM_WORLD, &nranks);
MPI_Comm_rank(MPI_COMM_WORLD, &rank);

acc_set_device_num(rank, acc_device_default);

MPI_Scatter(...);

#pragma acc parallel loop
for(int i = rank*N; i < rank*(N+1); i++)
    // Loop

MPI_Gather(...);
```

- 各MPIランクはループの一部分または全く異なるループを実行できる
- 複数のDeviceを使用する場合には各MPIランクに1つずつDeviceを割り当てることができる（最もベーシックなやり方）
- Deviceの計算リソースが十分活用されていない場合は、複数のMPIランクでDeviceを共有することもできる

OpenACC
More Science, Less Programming

MPIを用いたMandelbrot集合のマルチGPU化

MPIは分散メモリモデルのため、各MPIランクは計算領域の*sub-image*を持つ

計算後、sub-imageを集めて*single-image*とする

```
int main(int argc, char** argv ) {
     MPI_Init(&argc,&argv);
     int rank, nranks;
     MPI_Comm_size(MPI_COMM_WORLD, &nranks);
     MPI_Comm_rank(MPI_COMM_WORLD, &rank);
     int block_size = WIDTH*HEIGHT/nranks;
     double *subimage = new double[block_size];
     ...
     acc_set_device_num(rank, acc_device_default);
#pragma acc parallel loop
     for(int y=0; y<HEIGHT/nranks; y++) {
          for(int x=0; x<WIDTH; x++) {
               subimage[y*WIDTH+x]=mandelbrot(y,x*(HEIGHT/rank));
          }
     }
#pragma acc update host(subimage[0:block_size])
     MPI_Gather(subimage, ..., image, ...);
}
```

OpenACC
More Science, Less Programming

MPIを用いたMandelbrot集合のマルチGPU化

各MPIランクはIDに応じて異なるDeviceが使用可能

各MPIランクは*y*について部分領域を計算するためランクに応じて*y*の値を変更する

```
int main(int argc, char** argv ) {
     MPI_Init(&argc,&argv);
     int rank, nranks;
     MPI_Comm_size(MPI_COMM_WORLD, &nranks);
     MPI_Comm_rank(MPI_COMM_WORLD, &rank);
     int block_size = WIDTH*HEIGHT/nranks;
     double *subimage = new double[block_size];
     ...
     acc_set_device_num(rank, acc_device_default);
#pragma acc parallel loop
     for(int y=0; y<HEIGHT/nranks; y++) {
          for(int x=0; x<WIDTH; x++) {
               subimage[y*WIDTH+x]=mandelbrot(y,x*(HEIGHT/rank));
          }
     }
#pragma acc update host(subimage[0:block_size])
     MPI_Gather(subimage, ..., image, ...);
}
```

OpenACC
More Science, Less Programming

Device間のMPIデータ通信

- MPIは*host_data*ディレクティブと*use_device*句を使用してDevice間のデータ転送を簡単化できる
- MPI_GatherにDeviceメモリのポインタを渡すだけで、Device間のデータ転送が可能になる（Device memory supportがあるMPI処理系によって）

OpenACCのhost_dataとuse_deviceによりDevice間の直接データ転送を実現

```
int main(int argc, char** argv ) {
     MPI_Init(&argc,&argv);
     int rank, nranks;
     MPI_Comm_size(MPI_COMM_WORLD, &nranks);
     MPI_Comm_rank(MPI_COMM_WORLD, &rank);
     int block_size = WIDTH*HEIGHT/nranks;
     double *image = new double[WIDTH*HEIGHT];
     double *subimage = new double[block_size];
     if(rank == 0) {
#pragma acc enter data create(image[0:WIDTH*HEIGHT])
     }
#pragma acc enter data create(subimage[0:block_size])

     ... // GPU Computation on subimage

#pragma acc host_data use_device(subimage, image)
     MPI_Gather(subimage, block_size, image, WIDTH*HEIGHT,
       MPI_DOUBLE, 0, MPI_COMM_WORLD);
}
```

OpenACC
More Science, Less Programming

MPI処理系によるDeviceメモリ転送

CUDA-aware MPI, GDRについて

CUDA-aware MPI

- MPI処理系の内部でHostメモリを転送バッファとして使用し仮想的なDeviceメモリ転送を実現（Traditional）

GDR (GPU Direct RDMA)

- 各計算ノードに搭載された通信デバイス（e.g. InfiniBand）の機能を用いて、Hostメモリを介在せずにDeviceメモリを直接転送する

サポートしている代表的な処理系

- Open MPI, MVAPICH2, MVAPICH2-GDR

OpenACC
More Science, Less Programming

CUDA-aware MPI, GDRの使い方

Open MPI

```
# CUDA-aware MPI （Open MPIビルド時に設定されていれば自動的に有効化）
$ mpirun ... ./a.out

# GDR
$ mpirun --mca btl_openib_want_cuda_gdr 1 ... ./a.out
```

FAQ: Running CUDA-aware Open MPI (open-mpi.org)　https://www.open-mpi.org/faq/?category=runcuda

MVAPICH2

```
# CUDA-aware MPI
$ export MV2_USE_CUDA=1
$ mpirun_rsh ... ./a.out
```

MVAPICH2-GDR

```
# GDR
$ export MV2_PATH=$(basename $(which mpirun_rsh))
$ export MV2_USE_CUDA=1
$ mpirun_rsh -export ... ./a.out
```

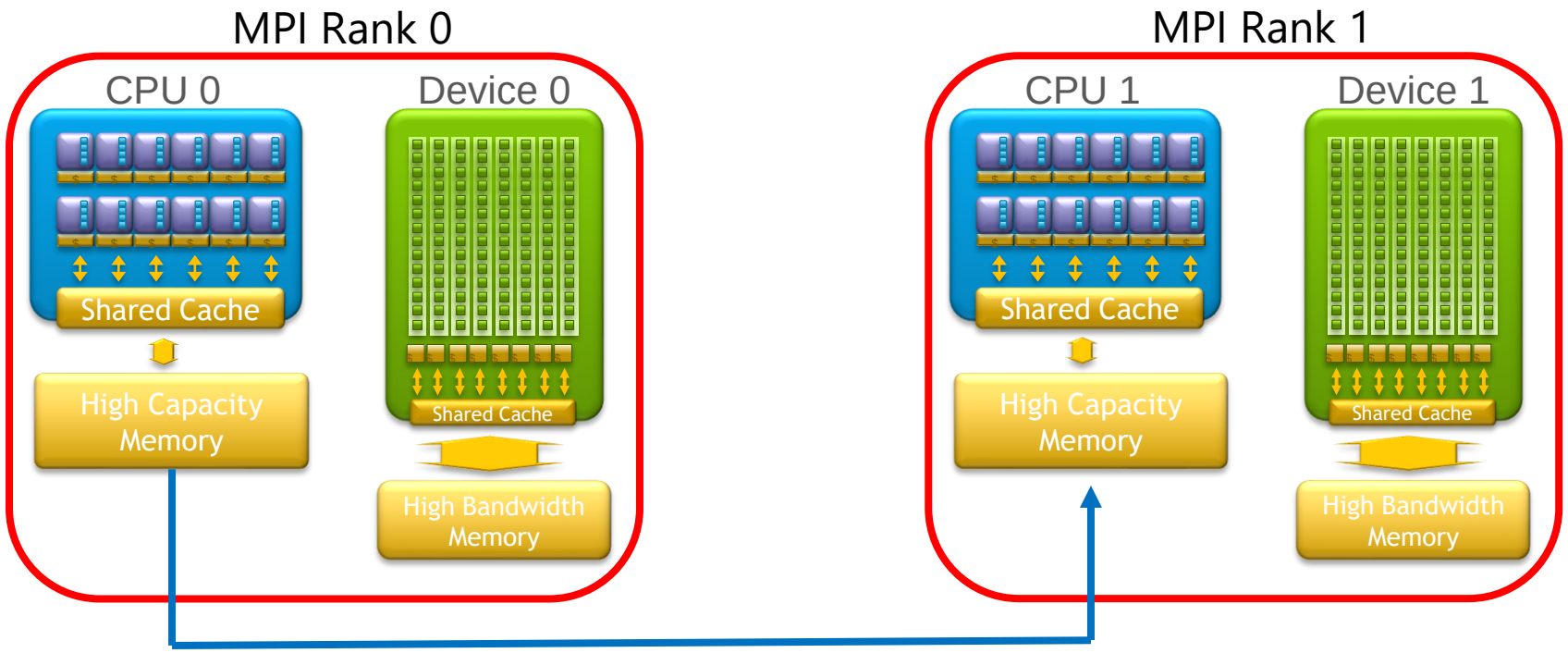
MVAPICH :: GDR Userguide (ohio-state.edu) http://mvapich.cse.ohio-state.edu/userguide/gdr/

※スーパーコンピューターなどシステムにより実行方法が
指定されている場合はそちらに従ってください

OpenACC
More Science, Less Programming

MPIによるホストデータの通信

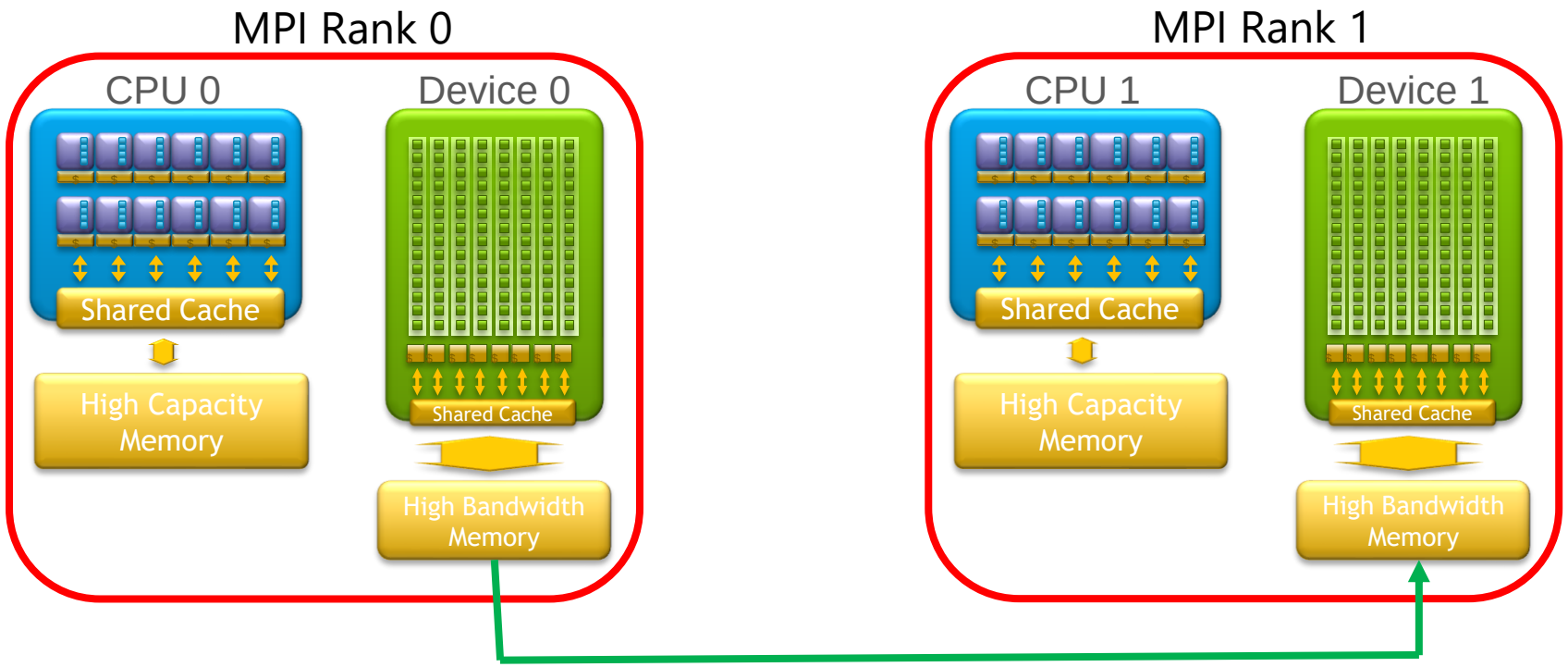
```
MPI_Send( /* From Rank 0 -> Rank 1 */ );
```



OpenACC
More Science, Less Programming

MPIによるデバイスデータの通信

```
#pragma acc host_data use_device(array)
MPI_Send( /* From Rank 0 -> Rank 1 */ );
```



OpenACC
More Science, Less Programming

5. 開発における実装方針のススメ

この節の注意

- あくまでもプロメテックの見解です
- 共同研究者・チームメンバーらと相談の上、進めてください
- 例えばHPC専任の開発者と相談するのも良いと思われます

前提条件

- 基本的には書きやすさ（保守性）優先、性能はもちろん欲しいがそのために極端に最適化する必要はない
- アプリケーション全体をOpenACCで実装することを推奨

- どちらがより皆さんの目的に沿うでしょうか？

1. 計算機が持つ100%の性能を得られる、ただしコードが複雑で保守できない
2. 計算機が持つ70%の性能を得られる、ただしコードは慣れた言語で実装

OpenACC
More Science, Less Programming

0. コンパイラの動作確認・結果検証

- 大半はIntel Fortranないしベンダ提供の Fortranと思います
- NVIDIA Fortranで計算結果・誤差に問題がないか検証が必要
- また、最適化オプション等は各コンパイラで書き方がまちまち

（一例）	ifort	nvfortran	nfort	frt/frtpx
最適化	-Ofast or -fast	-fast	-O3	-Kfast
OpenMP	-qopenmp	-mp	-fopenmp	-Kopenmp
アーキテクチャ	(-march=icelake)	(-march=skylake or -tp=skylake)	(Aurora TSUBASA)	(armv8.2+SVE)

OpenACC
More Science, Less Programming

1. OpenACCオプションの付与

- -accで計算結果が正しいか
- -mp -acc両方をつけて計算結果が正しいか

- -gpu=managed（managed memory）を使ってプログラムが動作するか
- 動作するなら、 -gpu=managedを指定した状態で次へ

2. OpenACC化

- まずは比較的重そうな単純ループについてacc kernelsで並列化していく、明示的なデータ転送が必要な場合がある
- Fortranの場合はshaped-arrayであれば自動的に転送されると考えられる

- cuBLASやcuFFTが使えそうな場合はacc host_data/use_deviceを使ってCUDAライブラリを呼び出す
- 行列積（cuBLAS）, 疎行列ベクトル積（cuSPARSE）, 1-3D FFT（cuFFT）

3. データ転送の最適化

- acc dataやacc enter/exit dataを使ってデータが本当に必要になる場合にHost-Device間転送を有効化していく
- managed memoryを使っている場合はオプションを外す
- いつどのタイミングでデータ転送が走っているかは、NVCOMPILER_ACC_NOTIFY環境変数に3を指定するとわかる
- https://docs.nvidia.com/hpc-sdk/compilers/openacc-gs/index.html#fortran-examples

4. CUDAカーネルの実装

- 本当に性能が必要なときのみ使う
- 最適化はできるが保守性が極端に落ちる
- 誰も手を加えられなくても大丈夫（枯れている）場合は問題ないが、頻繁に書き換える場合だと手がつけられなくなる

まとめ

本講習会で紹介した内容

- ループの最適化
- 非同期処理
- CUDAとの連携（Interoperability）
- マルチGPU計算の基礎
- 開発における実装方針のススメ

➢ OpenACCを用いたプログラムの開発イメージはつかめてきたでしょうか？

OpenACC
More Science, Less Programming

弊グループのHPCサポート

- 弊グループ（プロメテック・ソフトウェア、GDEPソリューションズ）にて複数のHPC関連のサポートを展開

- GPUサーバ https://www.gdep-sol.co.jp/
- NVIDIA HPCコンパイラサポートサービス https://hpcworld.jp/support/

ご清聴ありがとうございました

The free lunch is over. - Herb Sutter

OpenACC
More Science, Less Programming