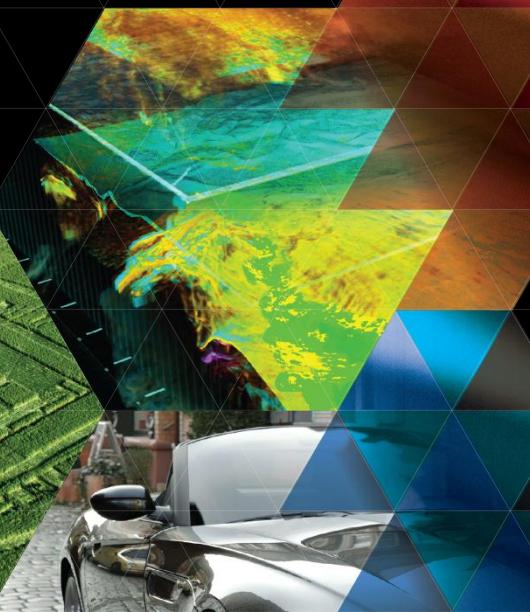


OPENACC・CUDAによる GPUコンピューティング

Akira Naruse
NVIDIA Developer Technologies

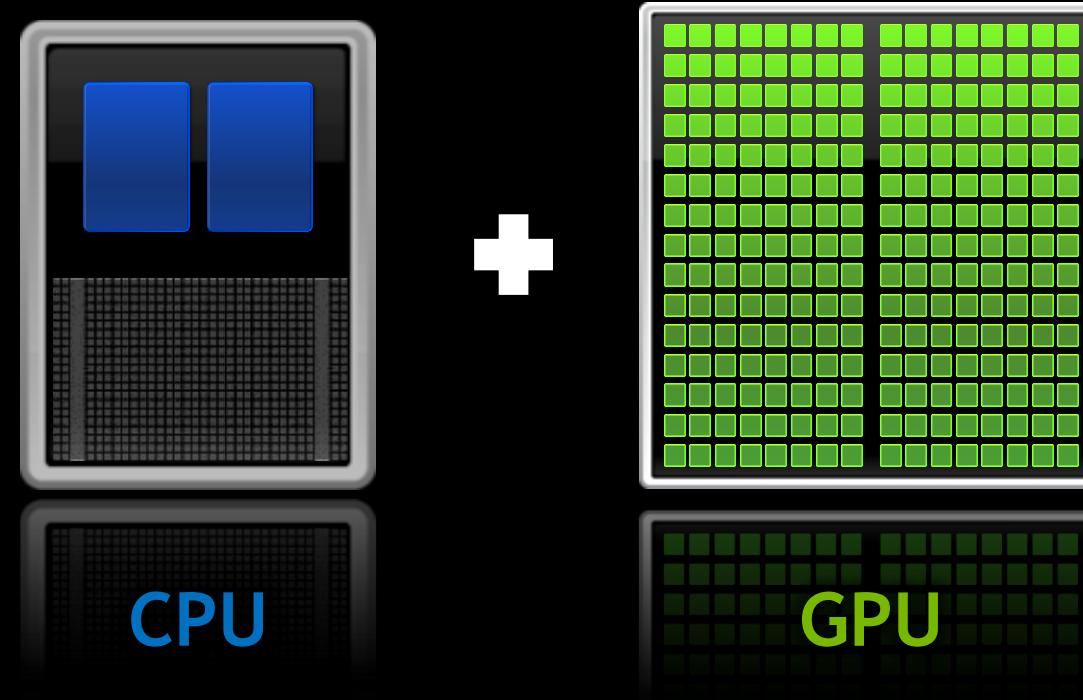


AGENDA

- GPUコンピューティング、CUDAの概要
- OpenACC

GPUコンピューティング

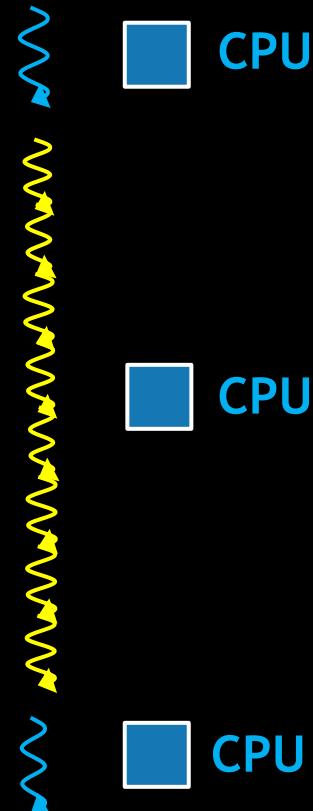
Low latency + High throughput



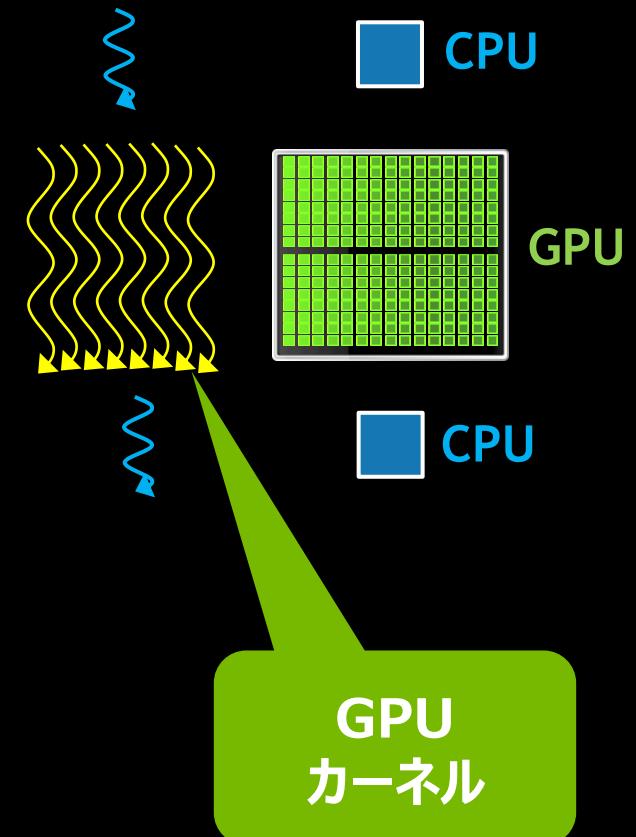
アプリケーション実行の流れ

```
Program myscience  
... serial code ...  
  
do k = 1,n1  
  do i = 1,n2  
    ... parallel code ...  
  enddo  
enddo  
  
... serial code ...  
  
End Program myscience
```

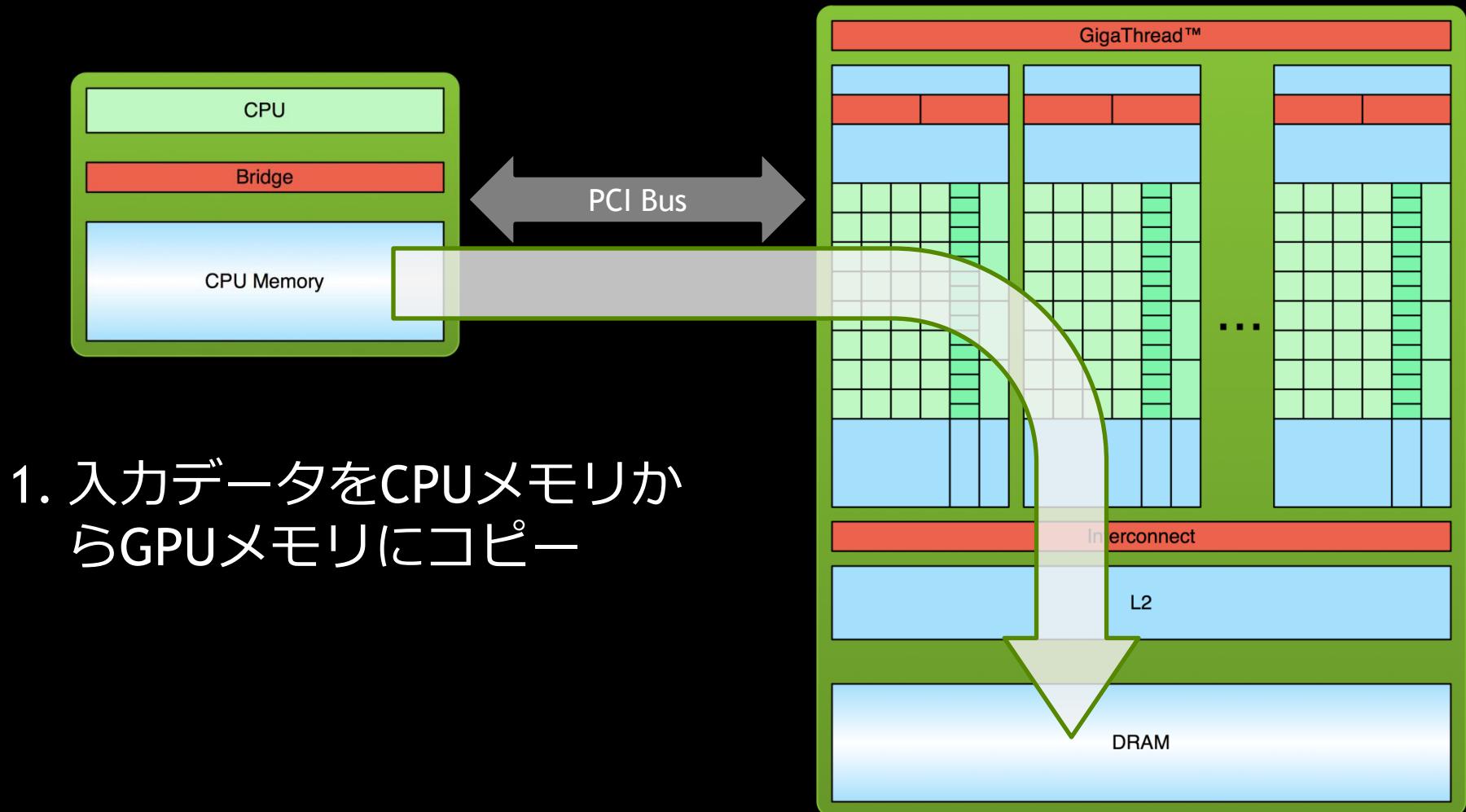
CPU Computing



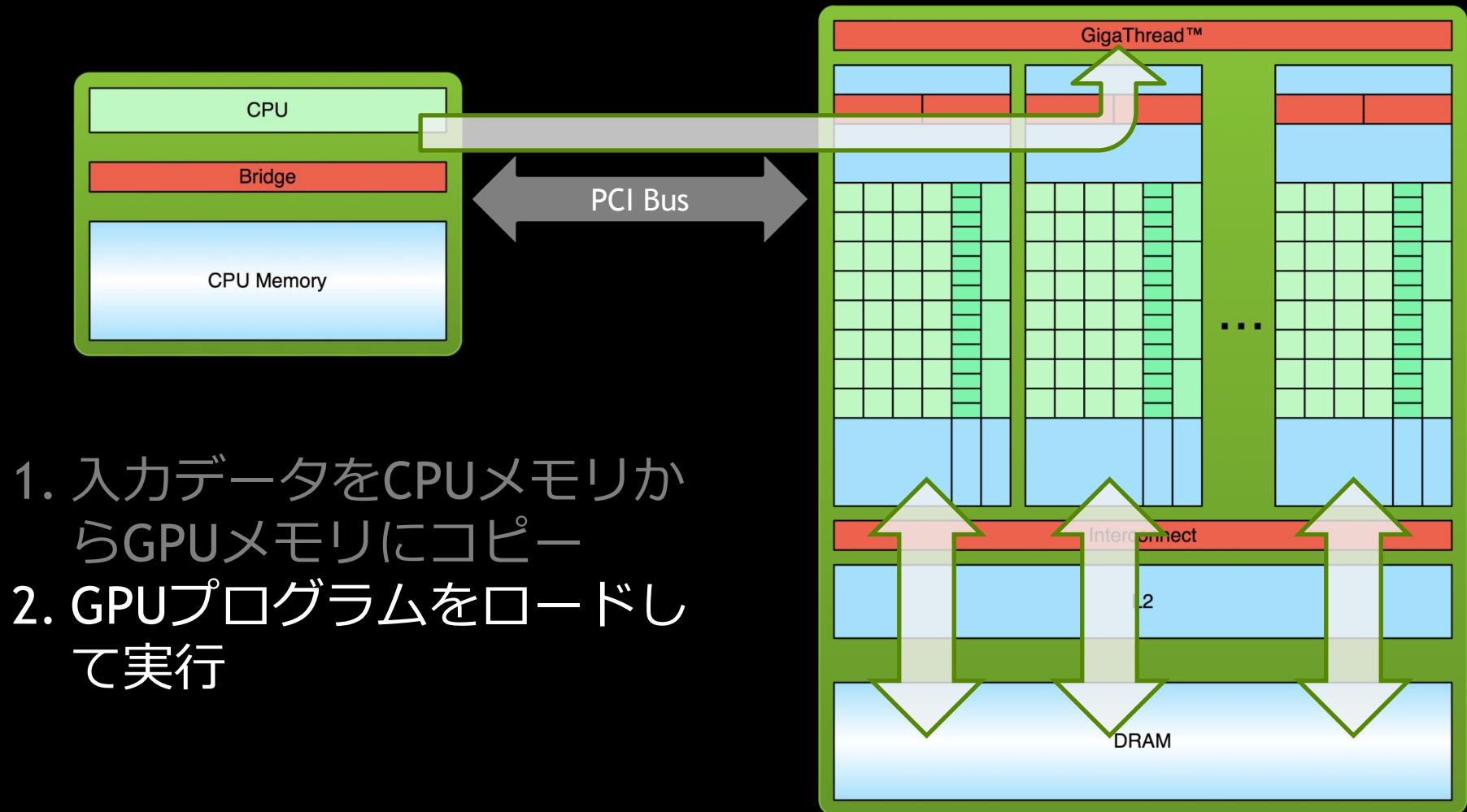
GPU Computing



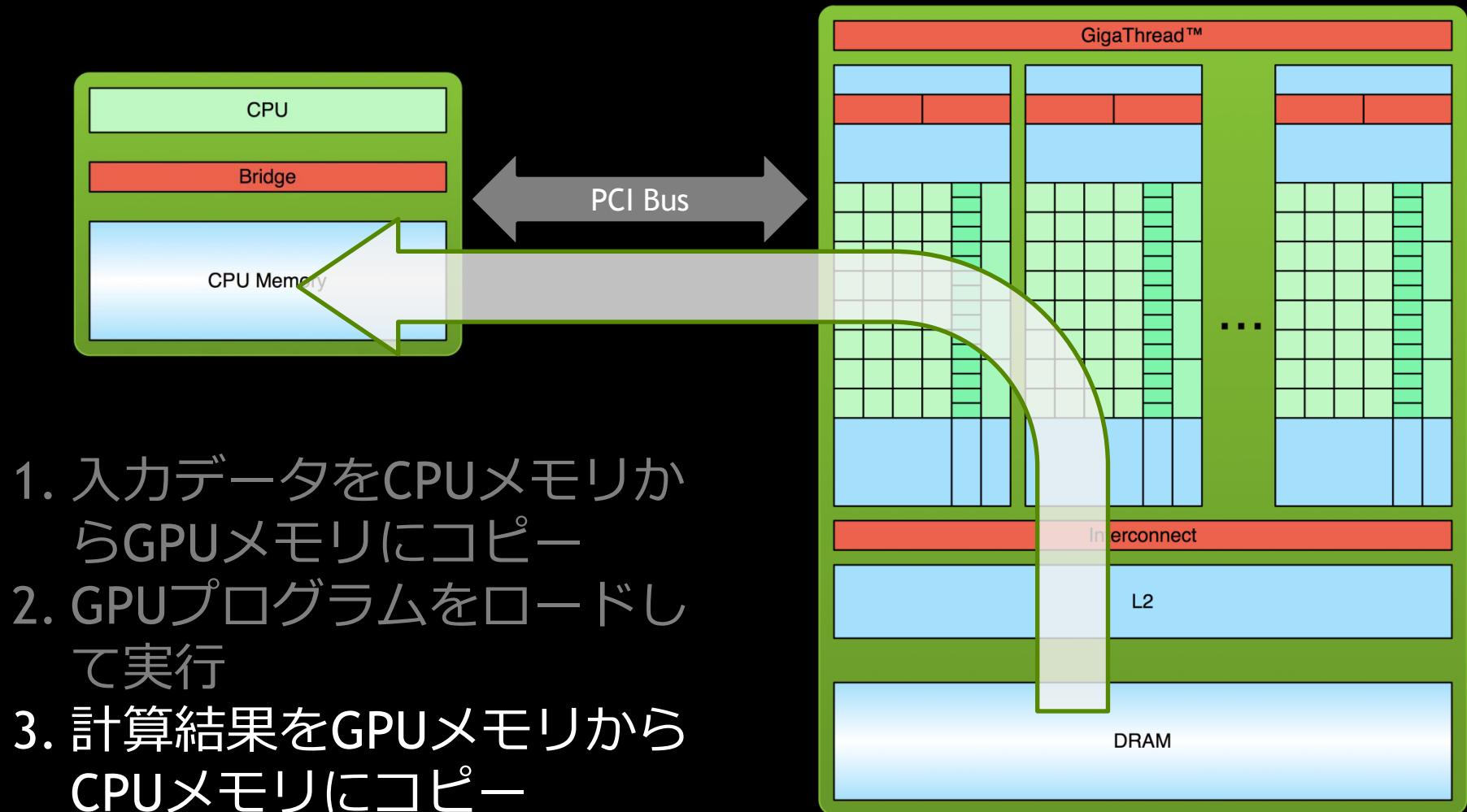
GPUカーネル実行の流れ



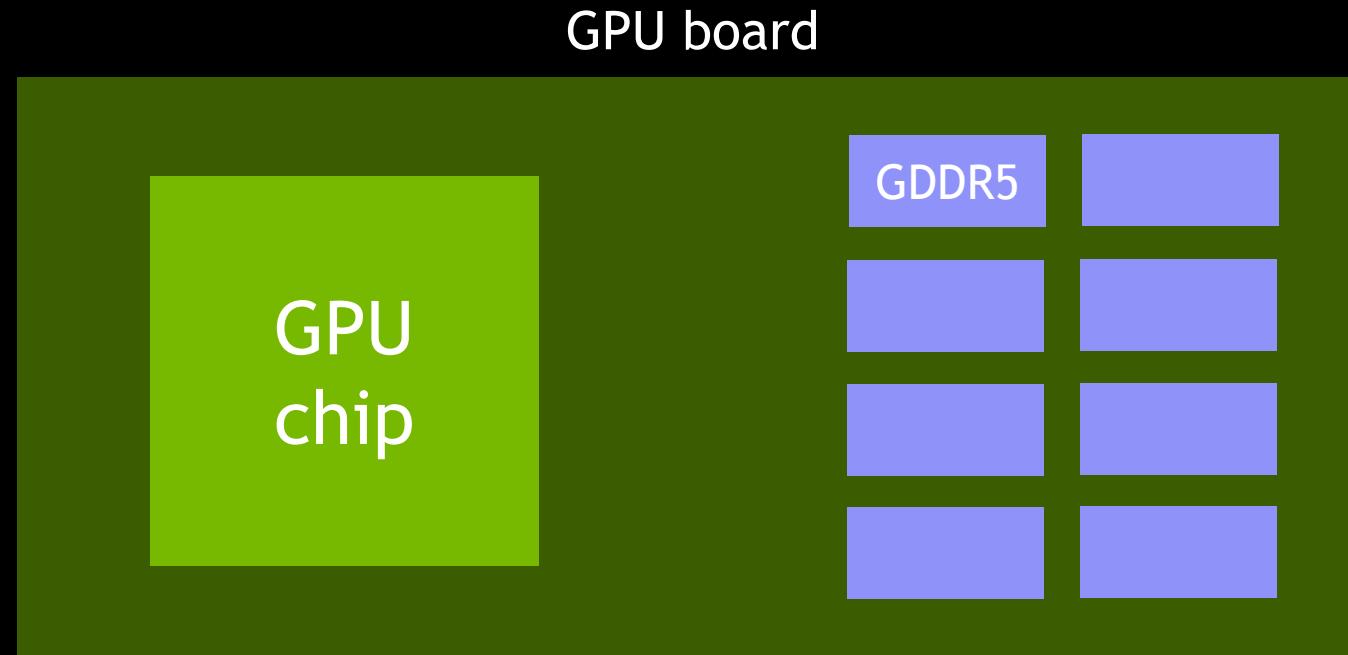
GPUカーネル実行の流れ



GPUカーネル実行の流れ



GPUの構造



1.43 TFLOPS (DP)
4.29 TFLOPS (SP)

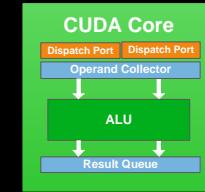
12 GB
288 GB/s

(*) Tesla K40

GPUの構造

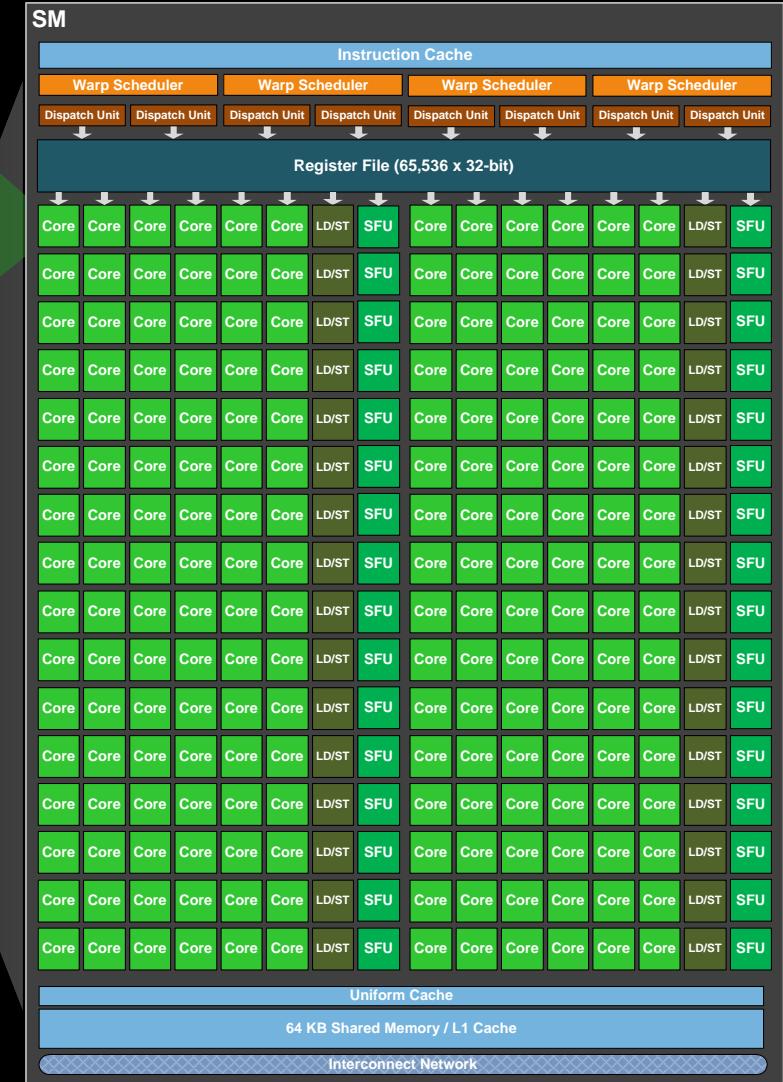
192 CUDA core/SMX

2880 CUDA core
並列性の抽出が鍵



15 SMX/chip

(*) Tesla K40



アプリをGPU対応する方法

Application

CUDA

主要処理をCUDAで記述
高い自由度

OpenACC

既存コードにディレクティブを挿入
簡単に加速

Library

GPU対応ライブラリにチェンジ
簡単に開始

CUDAプログラミングモデル

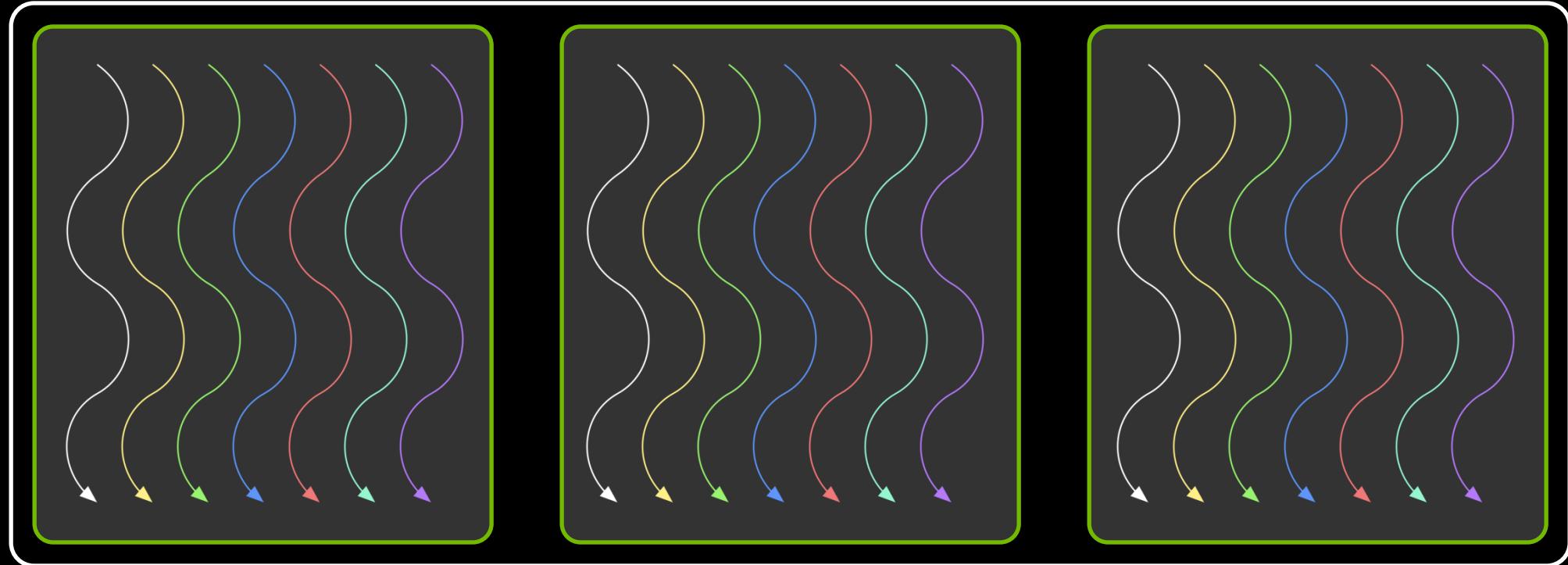


CUDAプログラミングモデル



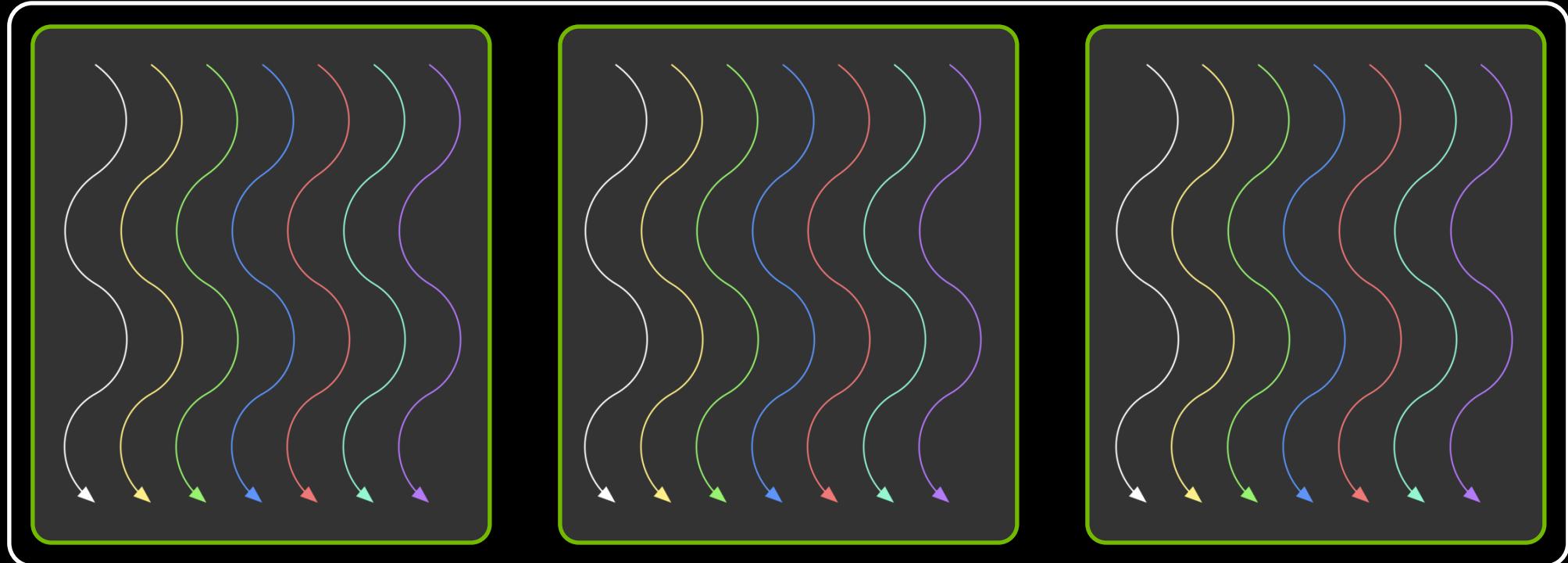
- スレッドの集合がブロック

CUDAプログラミングモデル



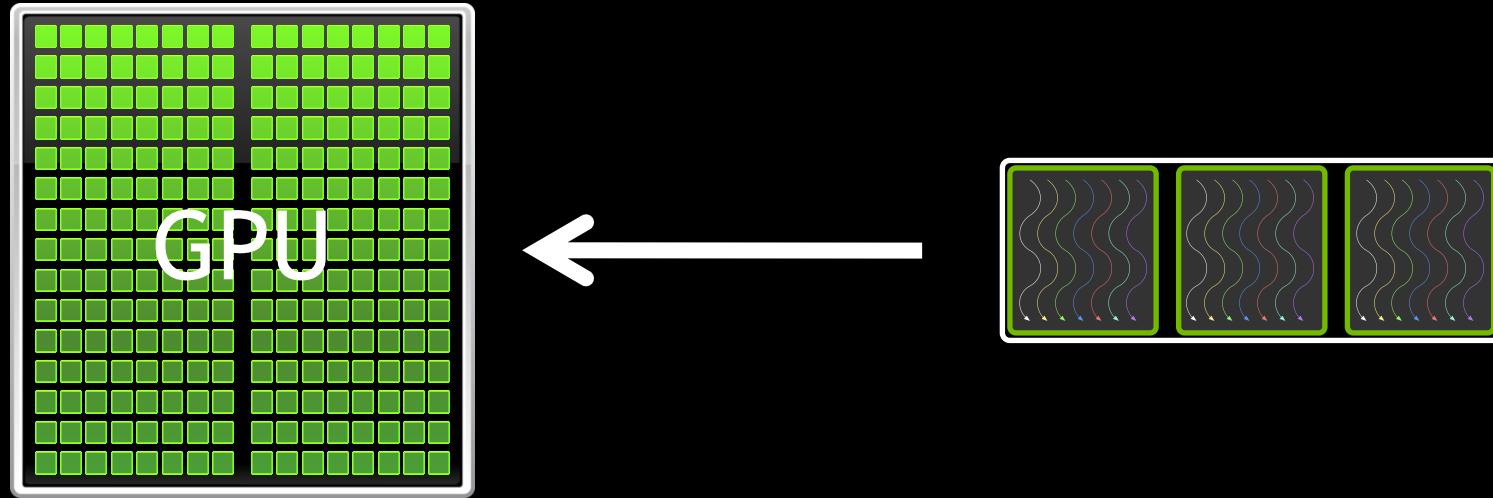
- スレッドの集合がブロック
- ブロックの集合がグリッド

CUDAプログラミングモデル



- スレッドの集合がブロック
- ブロックの集合がグリッド
- CUDAカーネルは1つのグリッドとしてGPU上で実行される

CUDAプログラミングモデル



- スレッドの集合がブロック
- ブロックの集合がグリッド
- CUDAカーネルは1つのグリッドとしてGPU上で実行される

SAXPY ($Y = A \cdot X + Y$)

CPU

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

...
saxpy(N, 3.0, x, y);
...
```

SAXPY ($Y = A \cdot X + Y$)

CPU

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

...
saxpy(N, 3.0, x, y);
...
```

CUDA

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

...
size_t size = sizeof(float) * N;
cudaMemcpy(d_x, x, size, cudaMemcpyHostToDevice);
cudaMemcpy(d_y, y, size, cudaMemcpyHostToDevice);
saxpy<<< N/256, 256 >>>(N, 3.0, d_x, d_y);
cudaMemcpy(y, d_y, size, cudaMemcpyDeviceToHost);
...
```

SAXPY ($Y = A \cdot X + Y$)

CPU

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

データ転送(H2D)

カーネル投入 <<<GS,BS>>>
GS: グリッドサイズ(ブロック数)
BS: ブロックサイズ(スレッド数)

データ転送(D2H)

GPUカーネル

CUDA

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

...
size_t size = sizeof(float) * N;
cudaMemcpy(d_x, x, size, cudaMemcpyHostToDevice);
cudaMemcpy(d_y, y, size, cudaMemcpyHostToDevice);
saxpy<<< N/256, 256 >>>(N, 3.0, d_x, d_y);
cudaMemcpy(y, d_y, size, cudaMemcpyDeviceToHost);
...
```

threadIdx: スレッドID
blockDim: ブロックサイズ
blockIdx: ブロックID

アプリをGPU対応する方法

Application

CUDA

主要処理をCUDAで記述
高い自由度

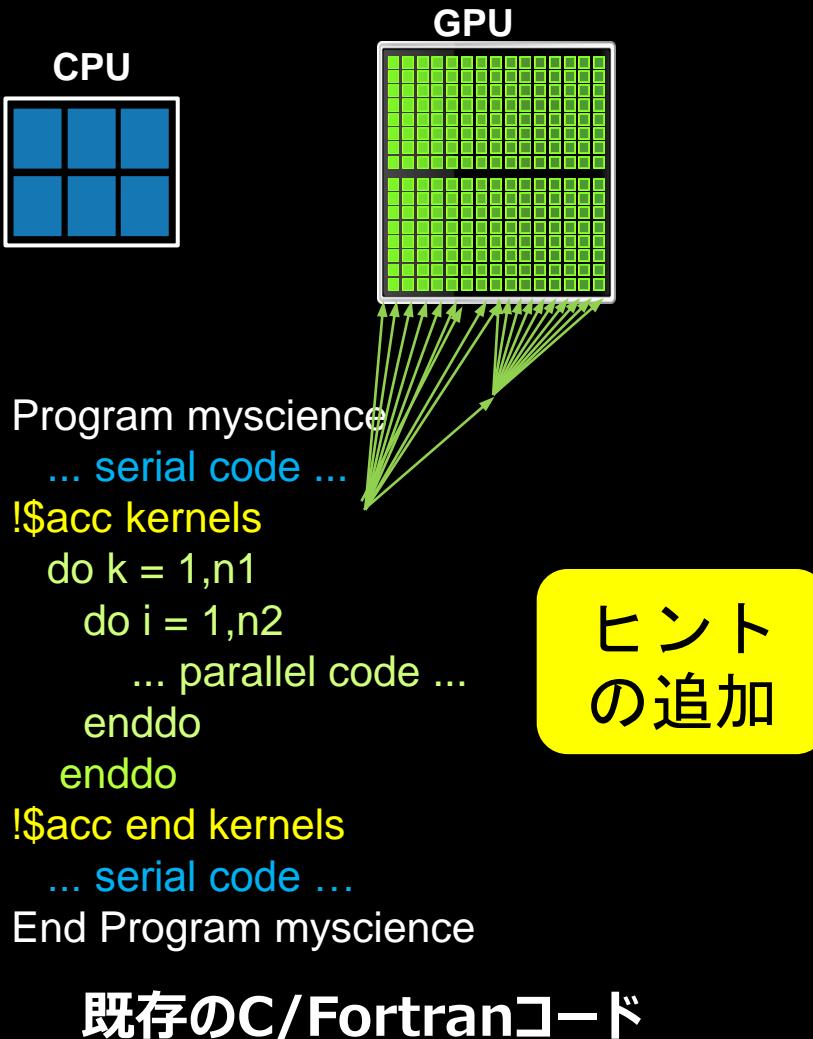
OpenACC

既存コードにディレクティブを挿入
簡単に加速

Library

GPU対応ライブラリにチェンジ
簡単に開始

OPENACC

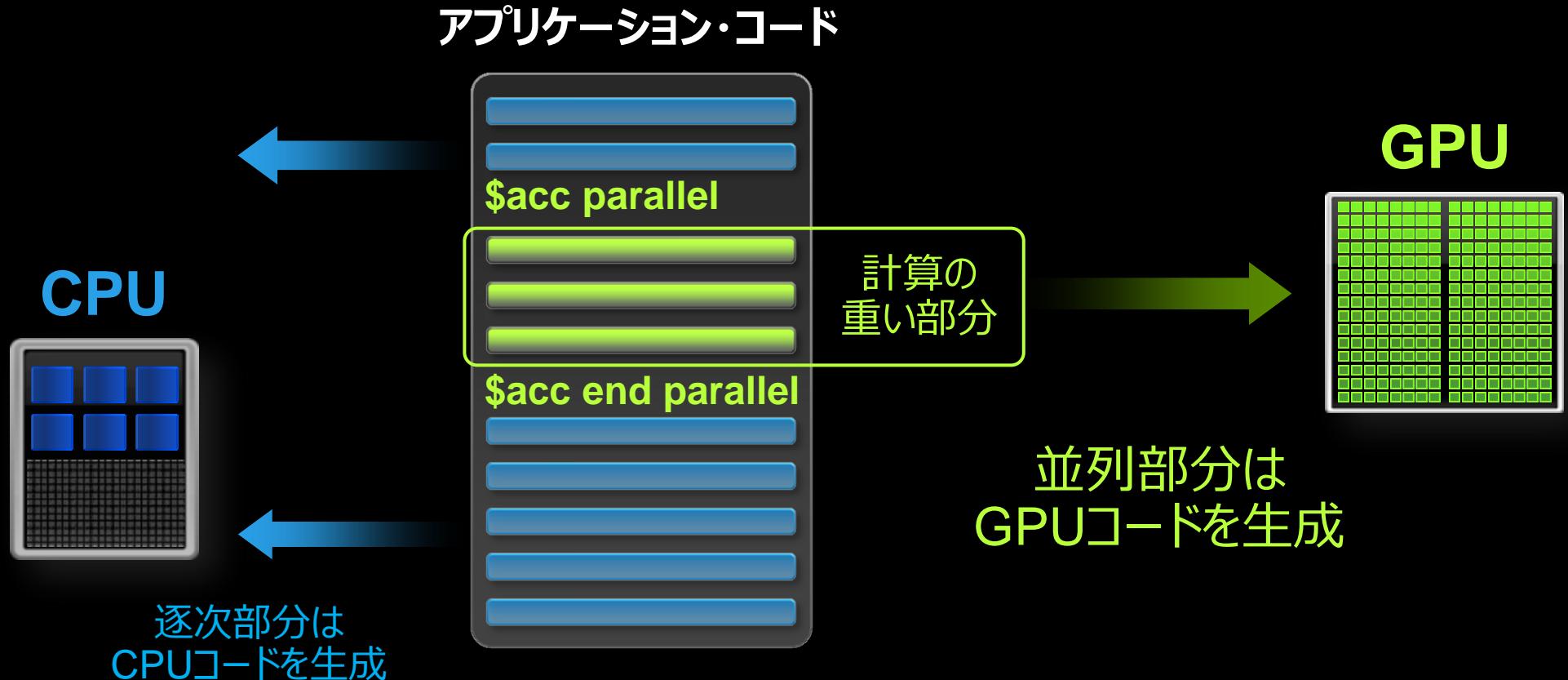


簡単: 既存のコードに
コンパイラへのヒントを追加

強力: そごそこの労力で、コンパイラが
コードを自動で並列化

オープン: 複数コンパイラベンダが、
複数アクセラレータをサポート
NVIDIA, AMD, Intel(予定)

実行モデル



SAXPY ($Y = A \cdot X + Y$)

CPU

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

...
saxpy(N, 3.0, x, y);
...
```

CUDA

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

...
size_t size = sizeof(float) * N;
cudaMemcpy(d_x, x, size, cudaMemcpyHostToDevice);
cudaMemcpy(d_y, y, size, cudaMemcpyHostToDevice);
saxpy<<< N/256, 256 >>>(N, 3.0, d_x, d_y);
cudaMemcpy(y, d_y, size, cudaMemcpyDeviceToHost);
...
```

SAXPY ($Y = A \cdot X + Y$)

OpenMP

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

...
saxpy(N, 3.0, x, y);
...
```

OpenACC

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

...
saxpy(N, 3.0, x, y);
...
```

SAXPY ($Y = A \cdot X + Y$, FORTRAN)

OpenMP

```
subroutine saxpy(n, a, X, Y)
  real :: a, X(:), Y(:)
  integer :: n, i

  !$omp parallel do
  do i=1,n
    Y(i) = a*X(i)+Y(i)
  enddo
  !$omp end parallel do
end subroutine saxpy

...
call saxpy(N, 3.0, x, y)
...
```

OpenACC

```
subroutine saxpy(n, a, X, Y)
  real :: a, Y(:), Y(:)
  integer :: n, i

  !$acc parallel copy(Y(:)) copyin(X(:))
  do i=1,n
    Y(i) = a*X(i)+Y(i)
  enddo
  !$acc end parallel
end subroutine saxpy

...
call saxpy(N, 3.0, x, y)
...
```

OPENMPとの併用

OpenMP / OpenACC

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

...
saxpy(N, 3.0, x, y);
...
```

簡単にコンパイル

OpenMP / OpenACC

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

```
$ pgcc -Minfo -acc saxpy.c  
saxpy:  
 16, Generating present_or_copy(y[:n])  
    Generating present_or_copyin(x[:n])  
    Generating Tesla code  
 19, Loop is parallelizable  
    Accelerator kernel generated  
 19, #pragma acc loop gang, vector(128) /* blockIdx.x threadIdx.x */
```

...

簡単に実行

OpenMP / OpenACC

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

```
$ nvprof ./a.out  
==10302== NVPROF is profiling process 10302, command: ./a.out  
==10302== Profiling application: ./a.out  
==10302== Profiling result:  
Time(%)      Time      Calls      Avg      Min      Max  Name  
 62.95%  3.0358ms           2  1.5179ms  1.5172ms  1.5186ms  [CUDA memcpy HtoD]  
 31.48%  1.5181ms           1  1.5181ms  1.5181ms  1.5181ms  [CUDA memcpy DtoH]  
  5.56%  268.31us           1  268.31us  268.31us  268.31us  saxpy_19_gpu
```

簡単に高速

Automotive

Real-Time Object
Detection

Global Manufacturer of Navigation
Systems



Financial

Valuation of Stock Portfolios
using Monte Carlo

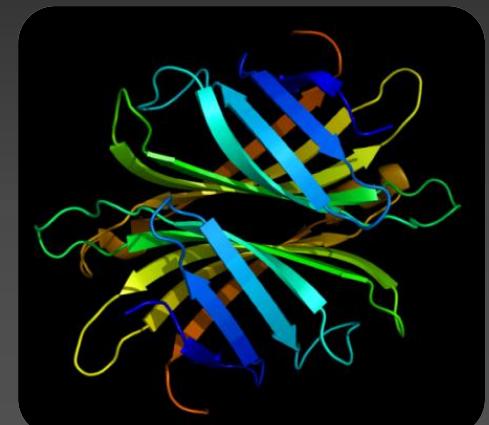
Global Technology Consulting Company



Life Science

Interaction of Solvents and
Biomolecules

University of Texas at San Antonio



40時間で5倍

4時間で2倍

8時間で5倍

コンパイラとツール



2013年10月～

コンパイラ



2013年12月～

OpenACC 2.0対応



2014年1月～



2015年(予定)

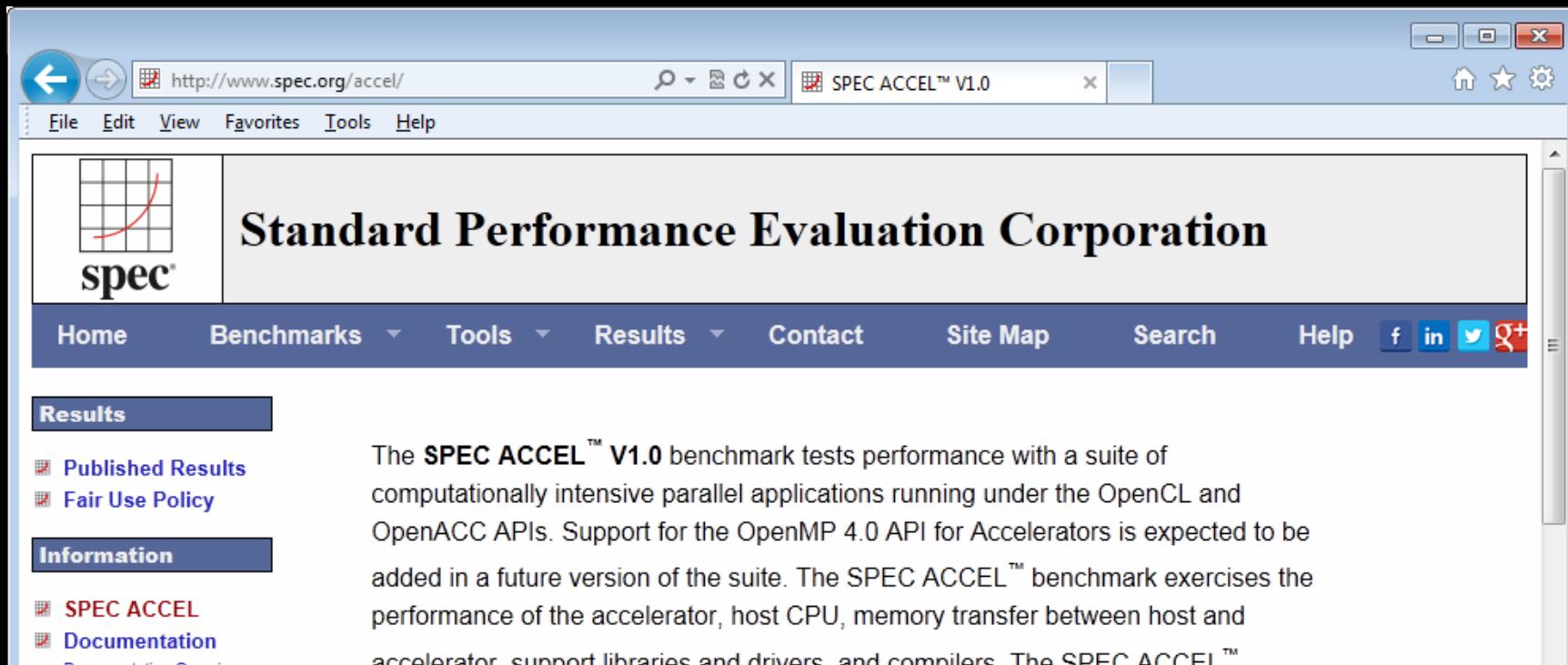
デバッグツール



SPEC ACCEL

- 15本のOpenACCベンチマーク

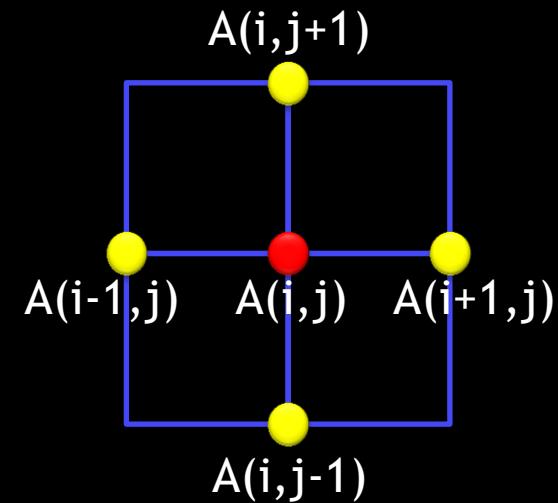
www.spec.org/accel/



OPENACCでどこまで出来るの？

例: JACOBI ITERATION

```
while ( error > tol ) {  
    error = 0.0;  
  
    for (int j = 1; j < N-1; j++) {  
        for (int i = 1; i < M-1; i++) {  
            Anew[j][i] = (A[j][i+1] + A[j][i-1] +  
                           A[j-1][i] + A[j+1][i]) * 0.25;  
            error = max(error, abs(Anew[j][i] - A[j][i]));  
        }  
    }  
  
    for (int j = 1; j < N-1; j++) {  
        for (int i = 1; i < M-1; i++) {  
            A[j][i] = Anew[j][i];  
        }  
    }  
}
```



並列領域 (KERNELS CONSTRUCT)

```
while ( error > tol ) {  
    error = 0.0;  
  
    #pragma acc kernels  
    for (int j = 1; j < N-1; j++) {  
        for (int i = 1; i < M-1; i++) {  
            Anew[j][i] = (A[j][i+1] + A[j][i-1] +  
                           A[j-1][i] + A[j+1][i]) * 0.25;  
            error = max(error, abs(Anew[j][i] - A[j][i]));  
        }  
    }  
  
    #pragma acc kernels  
    for (int j = 1; j < N-1; j++) {  
        for (int i = 1; i < M-1; i++) {  
            A[j][i] = Anew[j][i];  
        }  
    }  
}
```

- Parallels と Kernels
 - 並列領域を指示
- Parallels
 - 並列実行スタート
- Kernels
 - 複数のカーネル

並列領域 (KERNELS CONSTRUCT)

```
while ( error > tol ) {  
    error = 0.0;  
  
    #pragma acc kernels  
    for (int j = 1; j < N-1; j++) {  
        for (int i = 1; i < M-1; i++) {  
            Anew[j][i] = (A[j][i+1] + A[j][i-1] +  
                           A[j-1][i] + A[j+1][i]) * 0.25;  
            error = max(error, abs(Anew[j][i] - A[j][i]));  
        }  
    }  
}
```

```
$ pgcc -Minfo=acc -acc jacobi.c  
jacobi:  
60, Loop carried scalar dependence for 'error' at line 64  
...  
Accelerator scalar kernel generated  
61, Loop carried scalar dependence for 'error' at line 64  
...  
Accelerator scalar kernel generated
```

- Parallels と Kernels
 - 並列領域を指示
- Parallels
 - 並列走行の開始
- Kernels

リダクション (REDUCTION CLAUSE)

```
while ( error > tol ) {
    error = 0.0;

    #pragma acc kernels
    #pragma acc loop reduction(max:error)
    for (int j = 1; j < N-1; j++) {
        #pragma acc loop reduction(max:error)
        for (int i = 1; i < M-1; i++) {
            Anew[j][i] = (A[j][i+1] + A[j][i-1] +
                           A[j-1][i] + A[j+1][i]) * 0.25;
            error = max(error, abs(Anew[j][i] - A[j][i]));
        }
    }

    #pragma acc kernels
    for (int j = 1; j < N-1; j++) {
        for (int i = 1; i < M-1; i++) {
            A[j][i] = Anew[j][i];
        }
    }
}
```

■ 演算の種類

+	和
*	積
Max	最大
Min	最小
	ビット和
&	ビット積
^	XOR
	論理和
&&	論理積

リダクション (REDUCTION CLAUSE)

```
while ( error > tol ) {  
    error = 0.0;  
  
    #pragma acc kernels  
    #pragma acc loop reduction(max:error)  
    for (int j = 1; j < N-1; j++) {  
        #pragma acc loop reduction(max:error)
```

```
$ pgcc -Minfo=acc -acc jacobi.c
```

```
jacobi:
```

```
 59, Generating present_or_copyout(Anew[1:4094][1:4094])
```

```
  Generating present_or_copyin(A[:][:])
```

```
  Generating Tesla code
```

```
 61, Loop is parallelizable
```

```
 63, Loop is parallelizable
```

```
 Accelerator kernel generated
```

```
 61, #pragma acc loop gang /* blockIdx.y */
```

```
 63, #pragma acc loop gang, vector(128) /* blockIdx.x threadIdx.x */
```

```
 Max reduction generated for error
```

■ 演算の種類

+ 和

* 積

Max 最大

データ転送方法 (DATA CLAUSE)

```
while ( error > tol ) {  
    error = 0.0;  
  
    #pragma acc kernels  
    #pragma acc loop reduction(max:error)  
    for (int j = 1; j < N-1; j++) {  
        #pragma acc loop reduction(max:error)
```

```
$ pgcc -Minfo=acc -acc jacobi.c  
jacobi:  
    59, Generating present_or_copyout(Anew[1:4094][1:4094])  
        Generating present_or_copyin(A[:][:])  
        Generating Tesla code  
    61, Loop is parallelizable  
    63, Loop is parallelizable  
        Accelerator kernel generated  
    61, #pragma acc loop gang /* blockIdx.y */  
    63, #pragma acc loop gang, vector(128) /* blockIdx.x threadIdx.x */  
        Max reduction generated for error
```

データ転送方法 (DATA CLAUSE)

```
while ( error > tol ) {  
    error = 0.0;  
  
    #pragma acc kernels \  
        pcopyout(Anew[1:N-2][1:M-2]) pcopyin(A[0:N][0:M])  
    #pragma acc loop reduction(max:error)  
    for (int j = 1; j < N-1; j++) {  
        #pragma acc loop reduction(max:error)  
        for (int i = 1; i < M-1; i++) {  
            Anew[j][i] = (A[j][i+1] + A[j][i-1] +  
                           A[j-1][i] + A[j+1][i]) * 0.25;  
            error = max(error, abs(Anew[j][i] - A[j][i]));  
        }  
    }  
  
    #pragma acc kernels \  
        pcopyout(A[1:N-2][1:M-2]) pcopyin(Anew[1:N-2][1:M-2])  
    for (int j = 1; j < N-1; j++) {  
        for (int i = 1; i < M-1; i++) {  
            A[j][i] = Anew[j][i];  
        }  
    }  
}
```

- copyin (Host→GPU)
- copyout (Host←GPU)
- copy
- create
- present

- pcopyin
- pcopyout
- pcopy
- pcreate

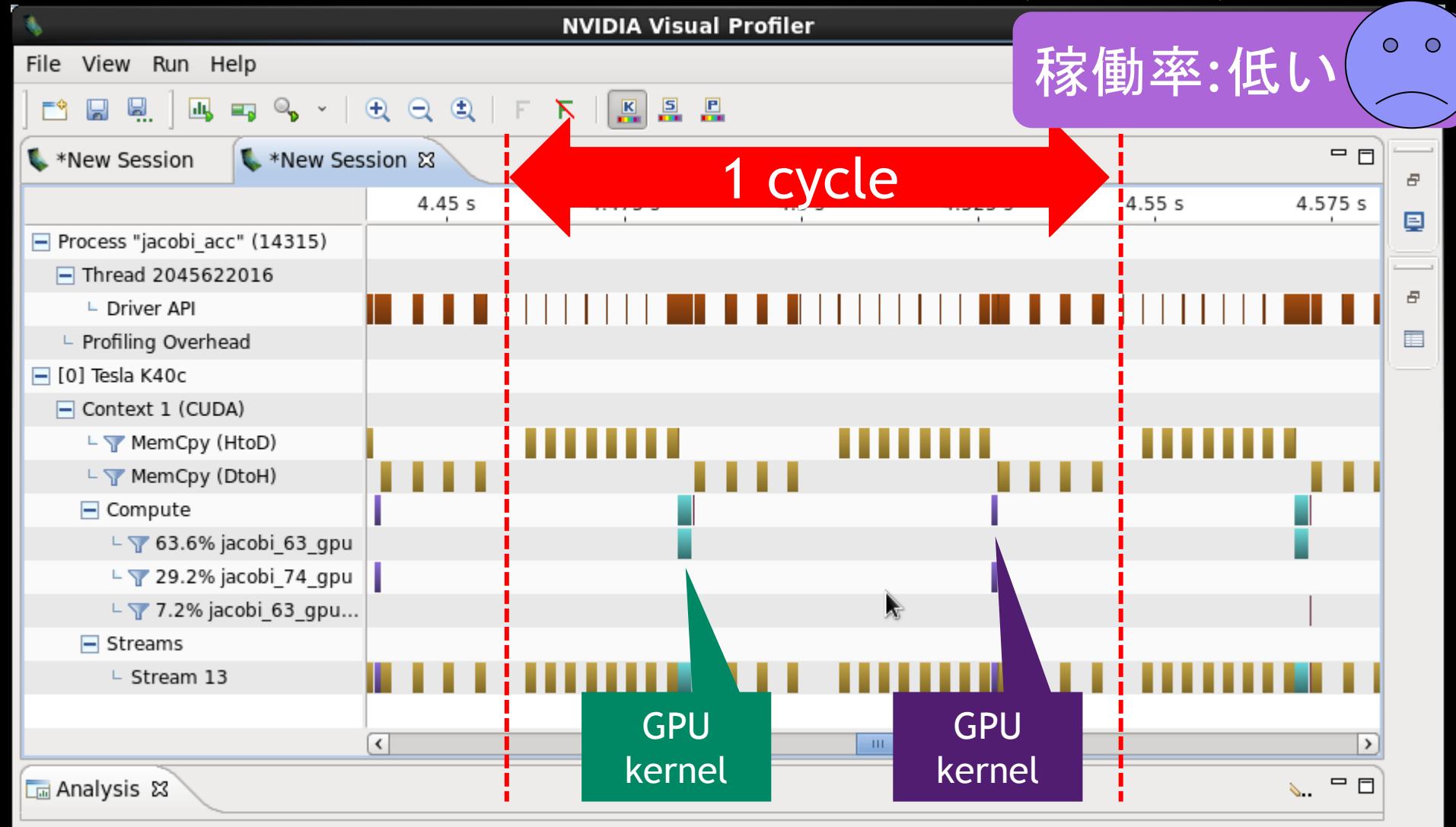
データ転送方法 (DATA CLAUSE)

```
while ( error > tol ) {  
    error = 0.0;  
  
    #pragma acc kernels \  
        pcopy(Anew[:,:]) pcopyin(A[:,:])  
    #pragma acc loop reduction(max:error)  
    for (int j = 1; j < N-1; j++) {  
        #pragma acc loop reduction(max:error)  
        for (int i = 1; i < M-1; i++) {  
            Anew[j][i] = (A[j][i+1] + A[j][i-1] +  
                            A[j-1][i] + A[j+1][i]) * 0.25;  
            error = max(error, abs(Anew[j][i] - A[j][i]));  
        }  
    }  
  
    #pragma acc kernels \  
        pcopy(A[:,:]) pcopyin(Anew[:,:])  
    for (int j = 1; j < N-1; j++) {  
        for (int i = 1; i < M-1; i++) {  
            A[j][i] = Anew[j][i];  
        }  
    }
```

- copyin (Host→GPU)
- copyout (Host←GPU)
- copy
- create
- present

- pcopyin
- pcopyout
- pcopy
- pcreate

データ転送がボトルネック (NVVP)



過剰なデータ転送

Host

```
while ( error > tol ) {  
    error = 0.0;  
  
    #pragma acc kernels \  
        pcopy(Anew[:, :]) \  
        pcopyin(A[:, :])  
    {  
  
    }  
  
    #pragma acc kernels \  
        pcopy(A[:, :]) \  
        pcopyin(Anew[:, :])  
    {  
  
    }  
}
```

GPU

```
#pragma acc loop reduction(max:error)  
for (int j = 1; j < N-1; j++) {  
    #pragma acc loop reduction(max:error)  
    for (int i = 1; i < M-1; i++) {  
        Anew[j][i] = (A[j][i+1] + A[j][i-1] +  
                      A[j-1][i] + A[j+1][i]) * 0.25;  
        error = max(error, abs(Anew[j][i] - A[j][i]));  
    }  
  
    for (int j = 1; j < N-1; j++) {  
        for (int i = 1; i < M-1; i++) {  
            A[j][i] = Anew[j][i];  
        }  
    }  
}
```

copyin

copyout

copyin

copyout



データ領域 (DATA CONSTRUCT)

```
#pragma acc data pcopy(A) create(Anew)
while ( error > tol ) {
    error = 0.0;

#pragma acc kernels pcopy(Anew[:, :]) pcopyin(A[:, :])
#pragma acc loop reduction(max:error)
for (int j = 1; j < N-1; j++) {
    #pragma acc loop reduction(max:error)
    for (int i = 1; i < M-1; i++) {
        Anew[j][i] = (A[j][i+1] + A[j][i-1] +
                      A[j-1][i] + A[j+1][i]) * 0.25;
        error = max(error, abs(Anew[j][i] - A[j][i]));
    }
}

#pragma acc kernels pcopy(A[:, :]) pcopyin(Anew[:, :])
for (int j = 1; j < N-1; j++) {
    for (int i = 1; i < M-1; i++) {
        A[j][i] = Anew[j][i];
    }
}
```

- copyin (CPU→GPU)
- copyout (CPU←GPU)
- copy
- create
- present
- pcopyin
- pcopyout
- pcopy
- pcreate

適正なデータ転送

Host

```
#pragma acc data \
    pcopy(A) create(Anew)
while ( error > tol ) {
    error = 0.0;

    #pragma acc kernels \
        pcopy(Anew[:, :]) \
        pcopyin(A[:, :])
    {

    }

    #pragma acc kernels \
        pcopy(A[:, :]) \
        pcopyin(Anew[:, :])
    {
    }
}
```

copyin

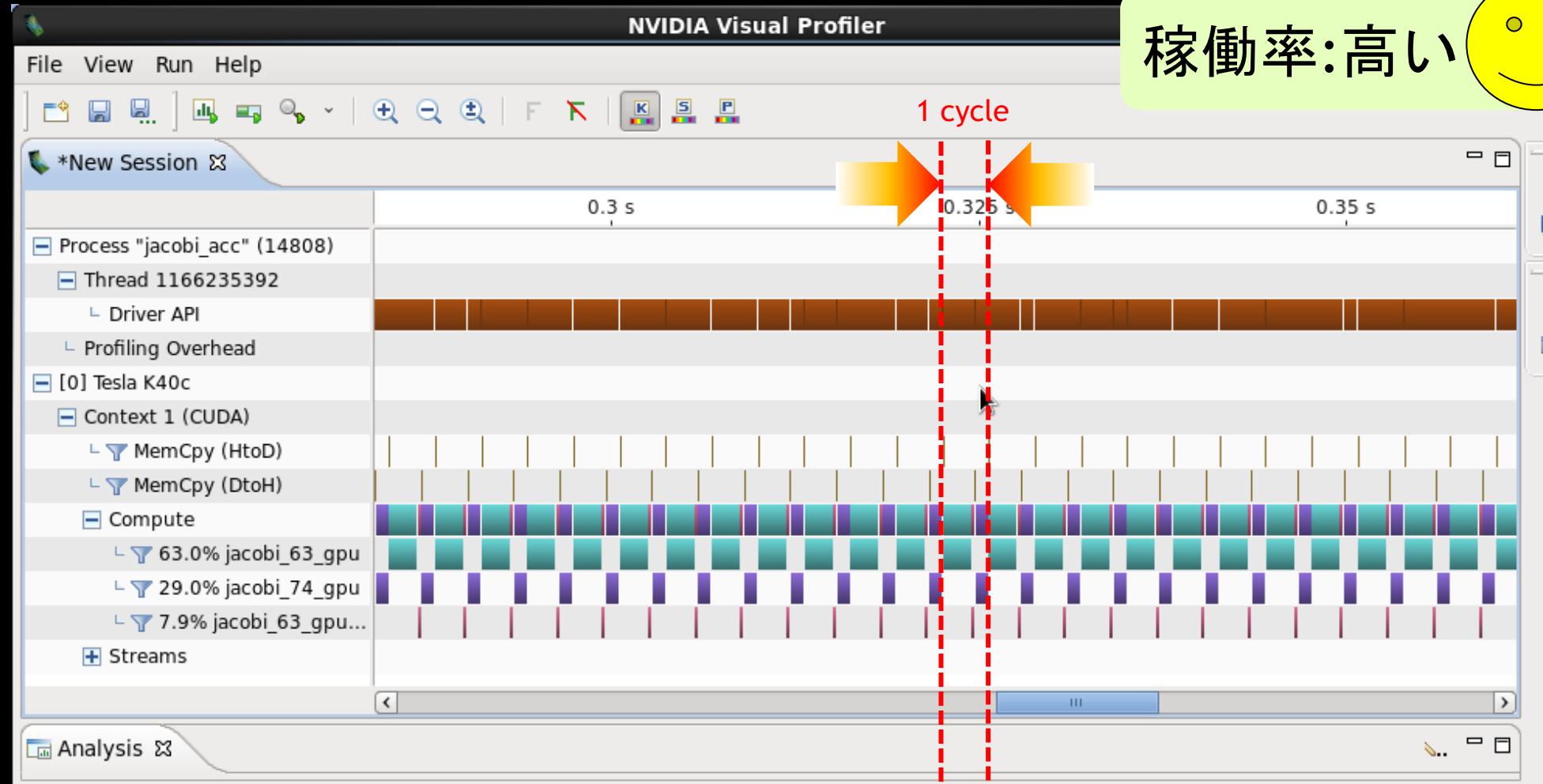
GPU

```
#pragma acc loop reduction(max:error)
for (int j = 1; j < N-1; j++) {
    #pragma acc loop reduction(max:error)
    for (int i = 1; i < M-1; i++) {
        Anew[j][i] = (A[j][i+1] + A[j][i-1] +
                      A[j-1][i] + A[j+1][i]) * 0.25;
        error = max(error, abs(Anew[j][i] - A[j][i]));
    }
}

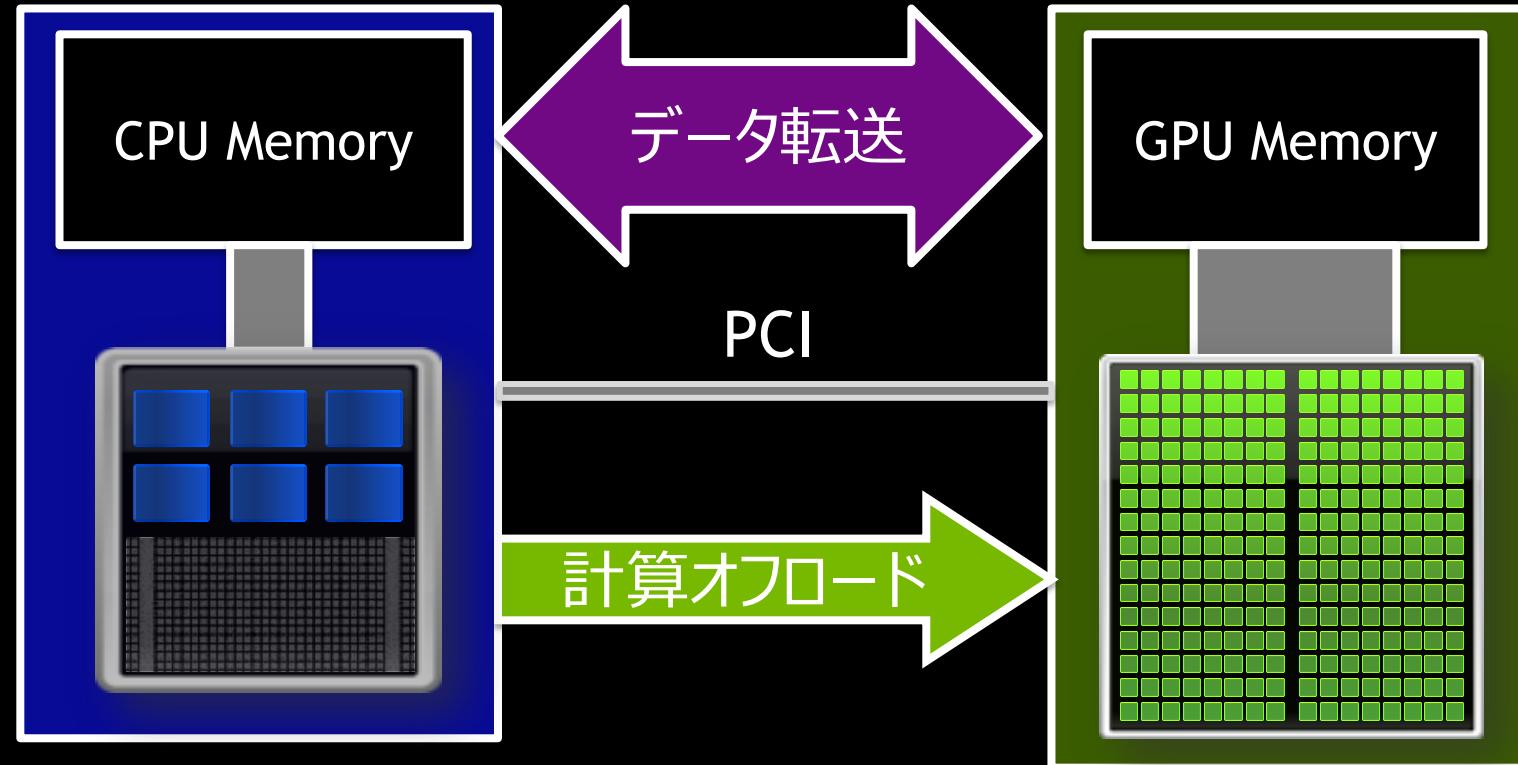
for (int j = 1; j < N-1; j++) {
    for (int i = 1; i < M-1; i++) {
        A[j][i] = Anew[j][i];
    }
}
```

copyout

データ転送の削減 (NVVP)



2つの処理



計算オフロード、データ転送、両方を考慮する必要がある

カーネルチューニング

カーネルチューニング (LOOP CONSTRUCT)

```
#pragma acc data pcopy(A) create(Anew)
while ( error > tol ) {
    error = 0.0;

    #pragma acc kernels pcopy(Anew[:,:]) pcopyin(A[:,:])
    #pragma acc loop reduction(max:error)
    for (int j = 1; j < N-1; j++) {
        #pragma acc loop reduction(max:error)
        for (int i = 1; i < M-1; i++) {
            Anew[j][i] = (A[j][i+1] + A[j][i-1] +
                           A[j-1][i] + A[j+1][i]) * 0.25;
            error = max(error, abs(Anew[j][i] - A[j][i]));
        }
    }
    ...
}
```

カーネルチューニング (LOOP CONSTRUCT)

```
#pragma acc data pcopy(A) create(Anew)
while ( error > tol ) {
    error = 0.0;

    #pragma acc kernels pcopy(Anew[:, :]) pcopyin(A[:, :])
    #pragma acc loop reduction(max:error)
```

```
$ pgcc -Minfo=acc -acc jacobi.c
jacobi:
  59, Generating present_or_copyout(Anew[1:4094][1:4094])
      Generating present_or_copyin(A[:, :])
      Generating Tesla code
  61, Loop is parallelizable
  63, Loop is parallelizable
      Accelerator kernel generated
  61, #pragma acc loop gang /* blockIdx.y */
  63, #pragma acc loop gang, vector(128) /* blockIdx.x threadIdx.x */
      Max reduction generated for error
```

- Gang
- Worker
- Vector ... SIMD幅
- Independent

カーネルチューニング (LOOP CONSTRUCT)

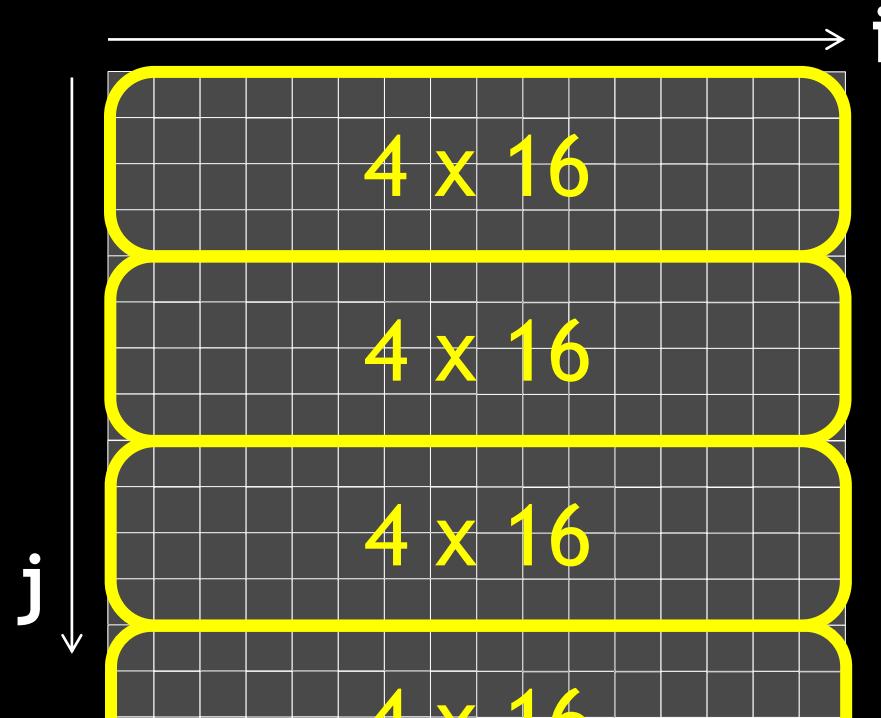
```
#pragma acc data pcopy(A) create(Anew)
while ( error > tol ) {
    error = 0.0;

    #pragma acc kernels pcopy(Anew[:,:]) pcopyin(A[:,:])
    #pragma acc loop reduction(max:error) gang vector(1)
    for (int j = 1; j < N-1; j++) {
        #pragma acc loop reduction(max:error) gang vector(128)
        for (int i = 1; i < M-1; i++) {
            Anew[j][i] = (A[j][i+1] + A[j][i-1] +
                           A[j-1][i] + A[j+1][i]) * 0.25;
            error = max(error, abs(Anew[j][i] - A[j][i]));
        }
    }
    ...
}
```

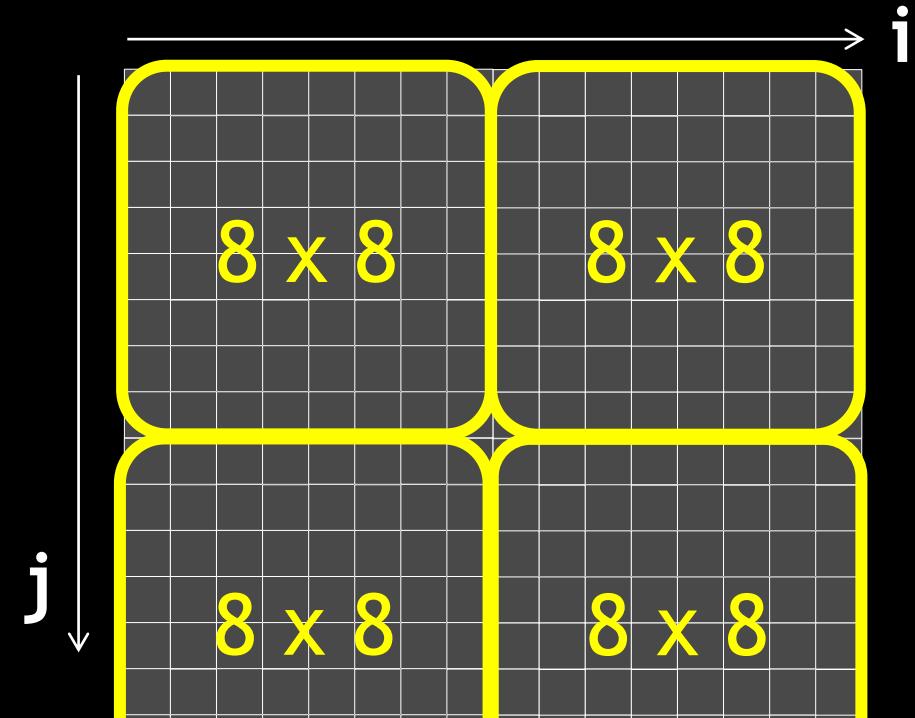
- Gang
- Worker
- Vector ... SIMD幅
- Collapse
- Independent
- Seq
- Cache
- Tile

実行条件設定 (VECTOR CLAUSE)

```
#pragma acc loop gang vector(4)
for (j = 0; j < 16; j++) {
    #pragma accloop gang vector(16)
    for (i = 0; i < 16; i++) {
        ...
    }
}
```



```
#pragma acc loop gang vector(8)
for (j = 1; j < 16; j++) {
    #pragma accloop gang vector(8)
    for (i = 0; i < 16; i++) {
        ...
    }
}
```



カーネルチューニング (LOOP CONSTRUCT)

```
#pragma acc data pcopy(A) create(Anew)
while ( error > tol ) {
    error = 0.0;

    #pragma acc kernels pcopy(Anew[:,:]) pcopyin(A[:,:])
    #pragma acc loop reduction(max:error) \
        collapse(2) gang vector(128)
    for (int j = 1; j < N-1; j++) {
        for (int i = 1; i < M-1; i++) {
            Anew[j][i] = (A[j][i+1] + A[j][i-1] +
                           A[j-1][i] + A[j+1][i]) * 0.25;
            error = max(error, abs(Anew[j][i] - A[j][i]));
        }
    }
    ...
}
```

- Gang
- Worker
- Vector ... SIMD幅
- Collapse
- Independent
- Seq
- Cache
- Tile
- ...

カーネルチューニング (LOOP CONSTRUCT)

```
#pragma acc data pcopy(A) create(Anew)
while ( error > tol ) {
    error = 0.0;

    #pragma acc kernels pcopy(Anew[:,:]) pcopyin(A[:,:])
    #pragma acc loop reduction(max:error) independent
    for (int jj = 1; jj < NN-1; jj++) {
        int j = list_j[jj];
        #pragma acc loop reduction(max:error)
        for (int i = 1; i < M-1; i++) {
            Anew[j][i] = (A[j][i+1] + A[j][i-1] +
                           A[j-1][i] + A[j+1][i]) * 0.25;
            error = max(error, abs(Anew[j][i] - A[j][i]));
        }
    }
    ...
}
```

- Gang
- Worker
- Vector ... SIMD幅
- Collapse
- Independent
- Seq
- Cache
- Tile
- ...

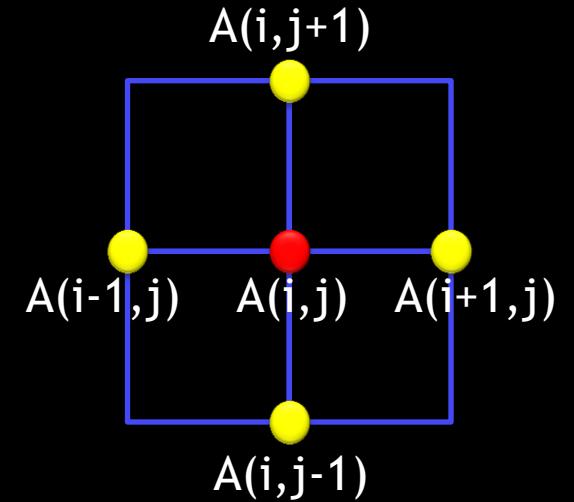
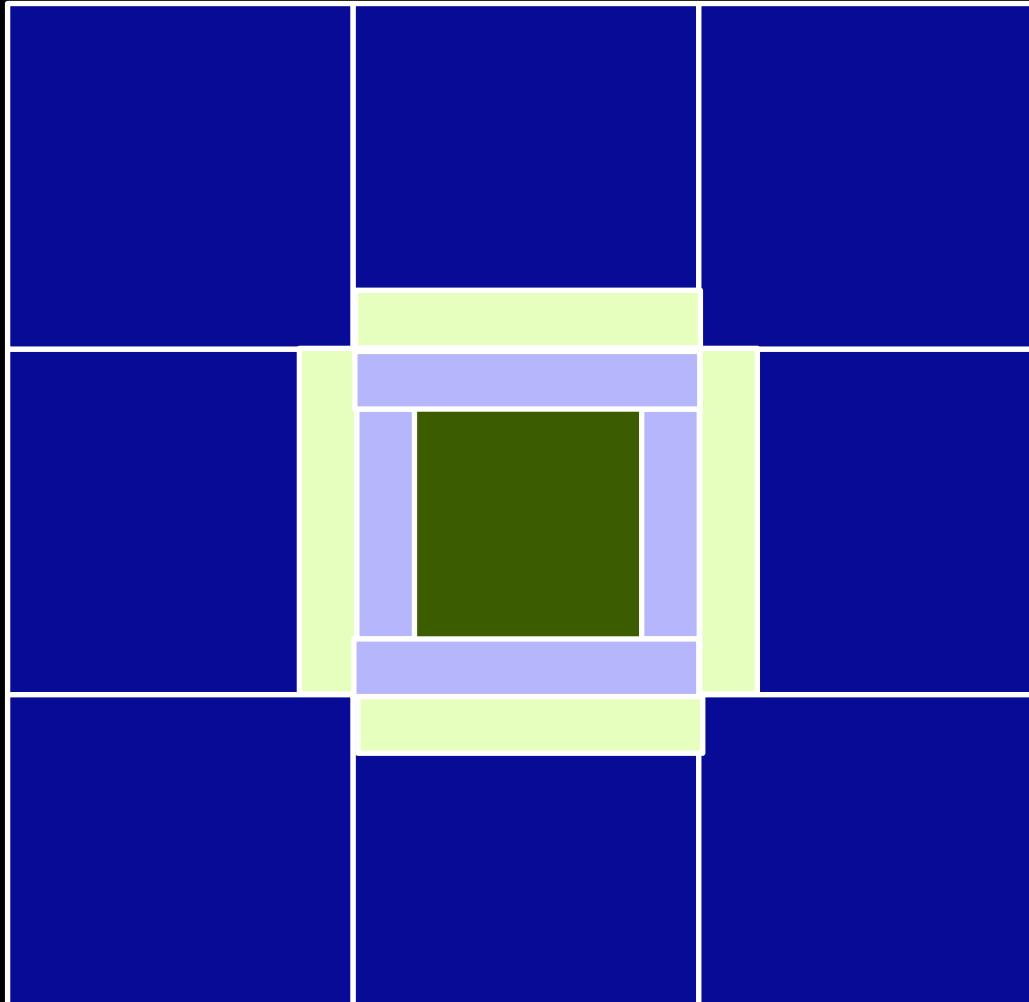
カーネルチューニング (LOOP CONSTRUCT)

```
#pragma acc kernels pcopy(Anew[:, :]) pcopyin(A[:, :])
#pragma acc loop seq
for (int k = 3; k < NK-3; k++) {
    #pragma acc loop
    for (int j = 0; j < NJ; j++) {
        #pragma acc loop
        for (int i = 0; i < NI; i++) {
            Anew[k][j][i] = func(
                A[k-1][j][i], A[k-2][j][i], A[k-3][j][i],
                A[k+1][j][i], A[k+2][j][i], A[k+3][j][i], ...
            );
        }
    }
}
```

- Gang
- Worker
- Vector ... SIMD幅
- Collapse
- Independent
- Seq
- Cache
- Tile
- ...

MPIとは簡単に併用できるの？

MPI並列 (HALO EXCHANGE)



- ブロック分割
- 各プロセスは1ブロック担当
- 境界部(halo)のデータ交換

MPI JACOBI ITERATION

```
#pragma acc data pcopy(A) create(Anew)
while ( error > tol ) {

    #pragma acc kernels pcopy(Anew) pcopyin(A)
    calc_new_A( Anew, A, ... );

    #pragma acc kernels pcopy(A) pcopyin(Anew)
    update_A( A, Anew );
}
```

MPI JACOBI ITERATION

```
#pragma acc data pcopy(A) create(Anew)
while ( error > tol ) {

    pack_data_at_boundary( send_buf, A, ... );
    exchange_data_by_MPI( recv_buf, send_buf, ... );
    unpack_data_to_halo( A, recv_buf, ... );
    #pragma acc kernels pcopy(Anew) pcopyin(A)
    calc_new_A( Anew, A, ... );
    #pragma acc kernels pcopy(A) pcopyin(Anew)
    update_A( A, Anew );
}
```

1.送信データ
の梱包

GPU

2.データの交換

MPI

3.受信データ
の開梱

GPU

MPI JACOBI ITERATION

```
#pragma acc data pcopy(A) create(Anew)
while ( error > tol ) {
    #pragma acc kernels pcopyin(A) pcopyout(send_buf)
    pack_data_at_boundary( send_buf, A, ... );

    exchange_data_by_MPI( recv_buf, send_buf, ... );

    #pragma acc kernels pcopy(A) pcopyin(recv_buf)
    unpack_data_to_halo( A, recv_buf, ... );

    #pragma acc kernels pcopy(Anew) pcopyin(A)
    calc_new_A( Anew, A, ... );

    #pragma acc kernels pcopy(A) pcopyin(Anew)
    update_A( A, Anew );
}
```

1. GPU上でデータを送信バッファに梱包し、Hostに転送

GPU

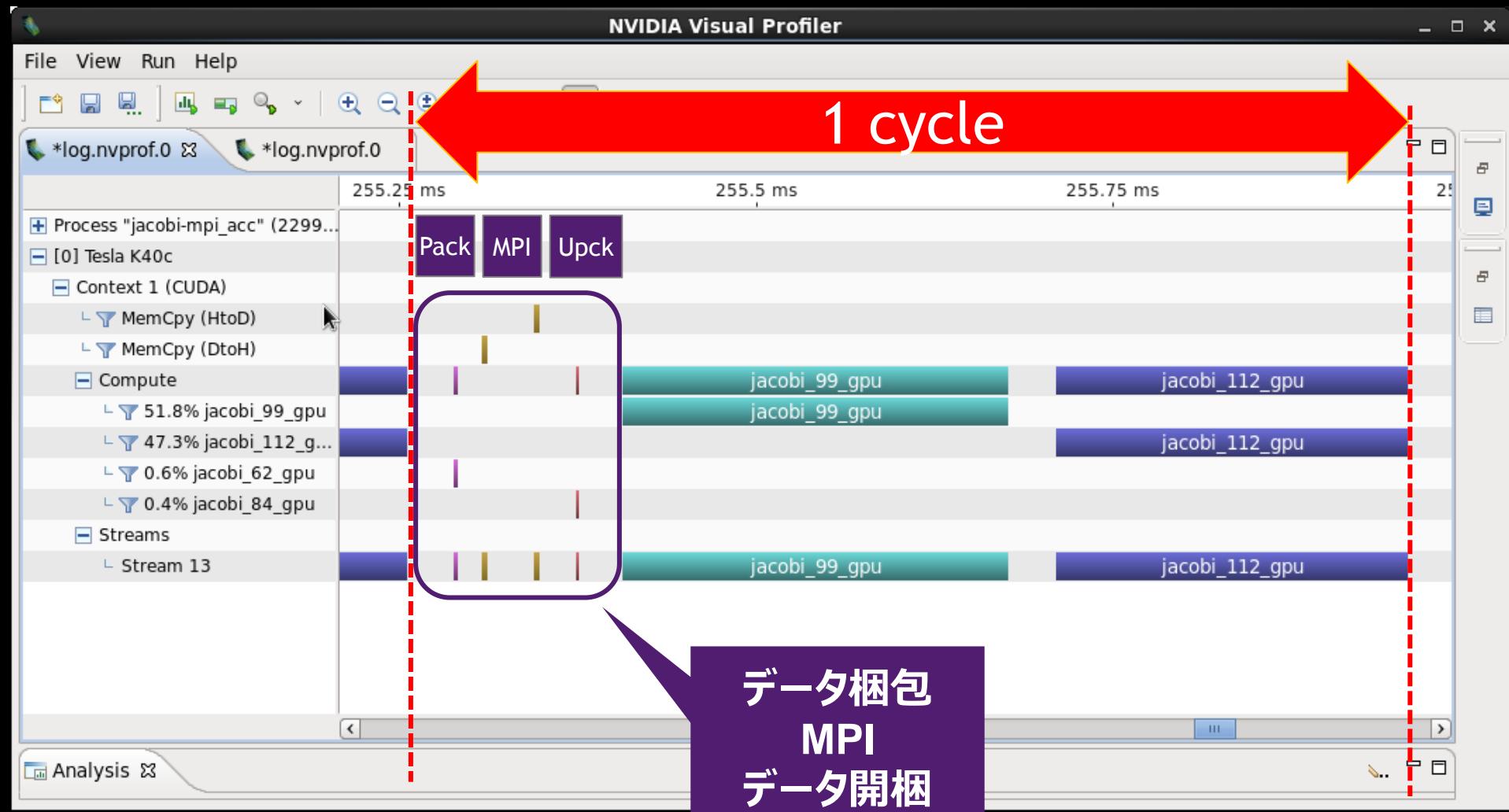
2. 隣接プロセスとデータ交換

MPI

3. GPUに転送、GPU上で受信バッファのデータを開梱

GPU

MPI JACOBI ITERATION (NVVP)



オーバーラップ[°] (ASYNC/WAIT CLAUSE)

```
while ( error > tol ) {  
    #pragma acc kernels pcopyin(A) pcopyout(send_buf)  
    pack_data_at_boundary( send_buf, A, ... );  
  
    exchange_data_by_MPI( recv_buf, send_buf, ... );  
  
    #pragma acc kernels pcopy(A) pcopyin(recv_buf)  
    unpack_data_to_halo( A, recv_buf, ... );  
  
    #pragma acc kernels pcopy(Anew) pcopyin(A)  
    calc_new_A( Anew, A, ... );  
  
    #pragma acc kernels pcopy(A) pcopyin(Anew)  
    update_A( A, Anew );  
}
```

オーバーラップ[°] (ASYNC/WAIT CLAUSE)

```
while ( error > tol ) {  
    #pragma acc kernels pcopyin(A) pcopyout(send_buf)  
    pack_data_at_boundary( send_buf, A, ... );  
  
    #pragma acc kernels pcopy(Anew) pcopyin(A)  
    calc_new_A_inside( Anew, A, ... );  
  
    exchange_data_by_MPI( recv_buf, send_buf, ... );  
  
    #pragma acc kernels pcopy(A) pcopyin(recv_buf)  
    unpack_data_to_halo( A, recv_buf, ... );  
  
    #pragma acc kernels pcopy(Anew) pcopyin(A)  
    calc_new_A_at_boundary( Anew, A, ... );  
  
    #pragma acc kernels pcopy(A) pcopyin(Anew)  
    update_A( A, Anew );  
}
```

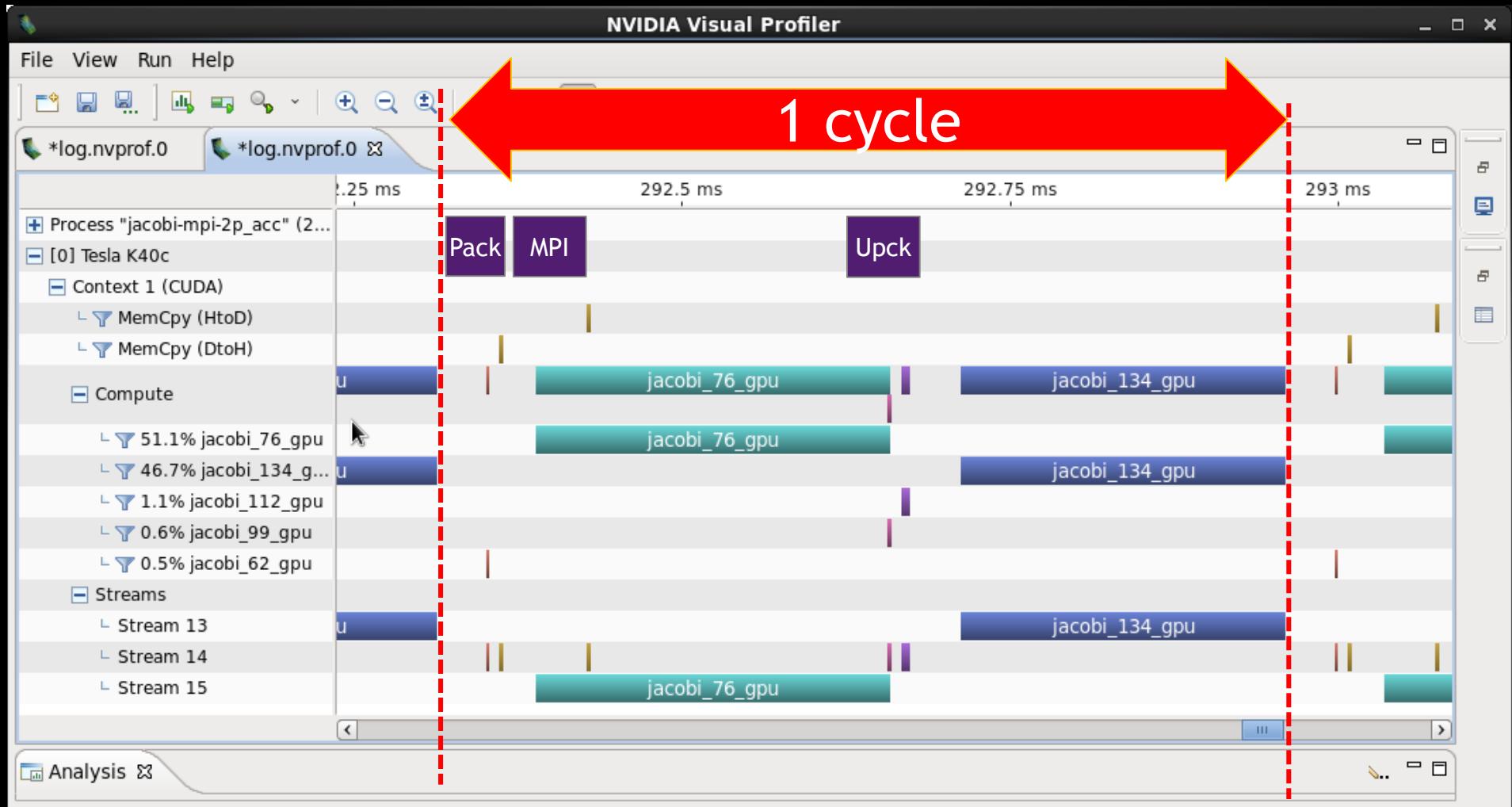
内部

境界部

オーバーラップ[°] (ASYNC/WAIT CLAUSE)

```
while ( error > tol ) {  
    #pragma acc kernels pcopyin(A) pcopyout(send_buf) async(2)  
    pack_data_at_boundary( send_buf, A, ... );  
  
    #pragma acc kernels pcopy(Anew) pcopyin(A) async(1)  
    calc_new_A_inside( Anew, A, ... );  
  
    #pragma acc wait(2)  
    exchange_data_by_MPI( recv_buf, send_buf, ... );  
  
    #pragma acc kernels pcopy(A) pcopyin(recv_buf) async(2)  
    unpack_data_to_halo( A, recv_buf, ... );  
  
    #pragma acc kernels pcopy(Anew) pcopyin(A) async(2)  
    calc_new_A_at_boundary( Anew, A, ... );  
  
    #pragma acc kernels pcopy(A) pcopyin(Anew) wait(1,2)  
    update_A( A, Anew );  
}
```

オーバーラップ(NVVP)



アプリをGPU対応する方法

Application

CUDA

主要処理をCUDAで記述
高い自由度

OpenACC

既存コードにディレクティブを挿入
簡単に加速

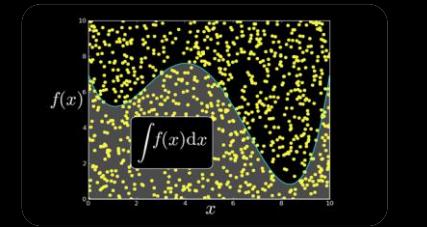
Library

GPU対応ライブラリにチェンジ
簡単に開始

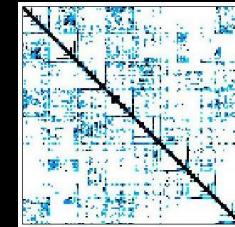
GPU対応のライブラリ (一部)



NVIDIA cuBLAS



NVIDIA cuRAND



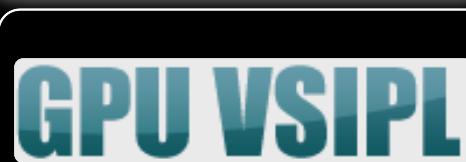
NVIDIA cuSPARSE



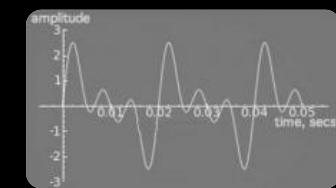
NVIDIA NPP



GPU Accelerated Linear Algebra

Vector Signal
Image Processing

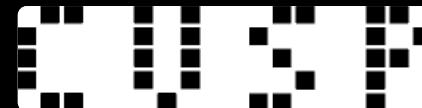
NVIDIA AmgX



NVIDIA cuFFT



IMSL Library

Matrix Algebra on
GPU and MulticoreC++ STL Features
for CUDA

CUDA計算ライブラリ

高性能な計算ライブラリを提供

- cuFFT Fast Fourier Transformsライブラリ
- cuBLAS BLASライブラリ
- cuSPARSE 疎行列ライブラリ
- cuRAND 乱数生成ライブラリ
- NPP 画像処理 Performance Primitives
- Thrust 並列アルゴリズム C++ STL
- math.h C99 浮動小数点ライブラリ

CUDAツールキットに標準搭載、フリー
developer.nvidia.com/cuda-downloads

まとめ

- GPUコンピューティングとCUDAの概要
- OpenACCの現状
 - 簡単: 既存コードへのディレクティブ追加
 - 強力: 少ない労力でGPU利用可能
 - オープン: 採用事例の増加