

GPUification avec OpenACC

section efficace de capture d'électrons dans les supernovae

Vincent LAFAGE
Luz Angela GUEVARA RIVEROS* (en disponibilité)
Frédéric BASTIER** (retraité)

¹D2I, Institut de Physique Nucléaire
Université Paris-Sud



3 avril 2019

Capture d'électrons & supernovae

```
! Electron capture rates based on finite temperature
! Hartree-Fock and finite temperature random-phase
! approximation using Skyrme interactions
!
! Electron capture code based on mixed version between
! Fortran (ftchrpa.f) and C codes (eccalc.cpp, mult_me.cpp,
! multred.cpp, etc...)
!
! 21/11/2008 Nils Paar
```

Stellar electron-capture rates calculated with the
finite-temperature relativistic random-phase approximation

Y. F. Niu¹, N. Paar², D. Vretenar², and J. Meng^{3,1,4*}

¹*State Key Laboratory of Nuclear Physics and Technology,*

[Workshop] - 12 Apr 2011

Calculation of stellar electron-capture cross sections on nuclei

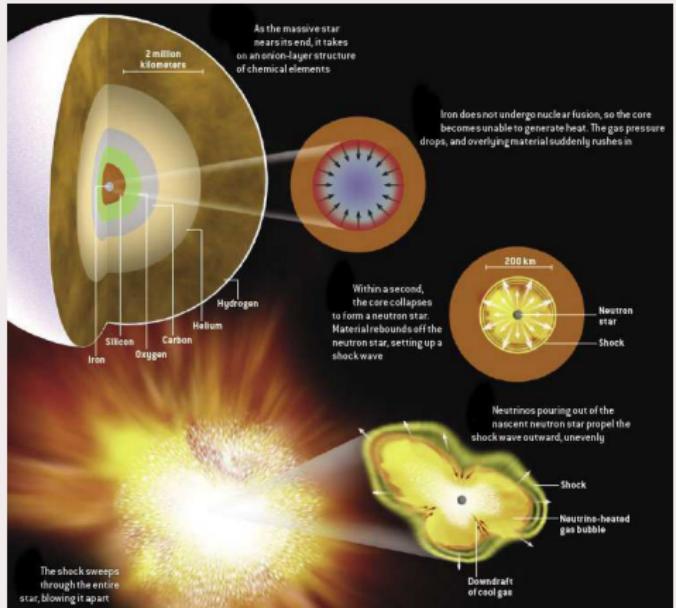
⁴*Dep* based on microscopic Skyrme functionals

N. Paar

Physics Department, Faculty of Science, University of Zagreb, Croatia

IPNO の理論部
 計算天体物理学
 恒星内元素合成：
 中性子星になるとき
 $e^- + p \rightarrow n + \nu_e$?
 ⇒
 $e^- + \frac{A}{Z} \rightarrow \frac{A}{Z-1} + \nu_e$
 千原子核の種類
 温度 : [0.5, 5] MeV,
 50 ステップ
 ⇒ CPU 千年 !

⇒ $\text{スピ}^\circ - \text{ト}^\circ \text{アップ}^\circ > 55$
 ⇒ 後で、CPU 20 年だけ
 $\nu_e + \frac{A}{Z-1} \rightarrow \frac{A}{Z} + e^-$



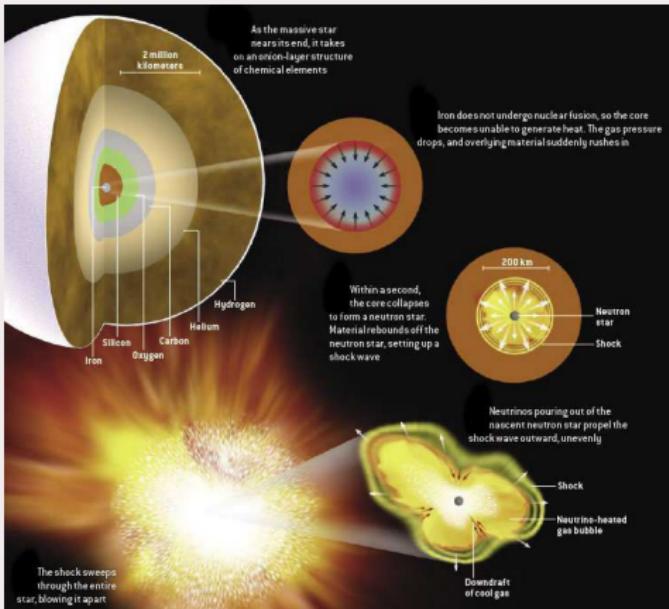
Capture d'électrons & supernovae

Groupe théorie IPNO

Simulation :

1000 types de noyaux
50 valeurs de T
⇒ 1000 ans de CPU

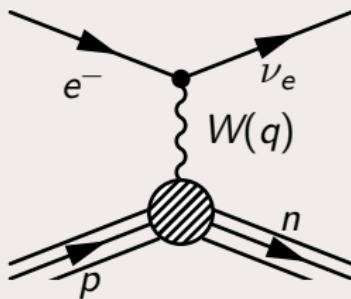
- * *profiling*
 - * audit bibliothèques
 - * gestion mémoire
 - * vectorisation



⇒ facteur > 55

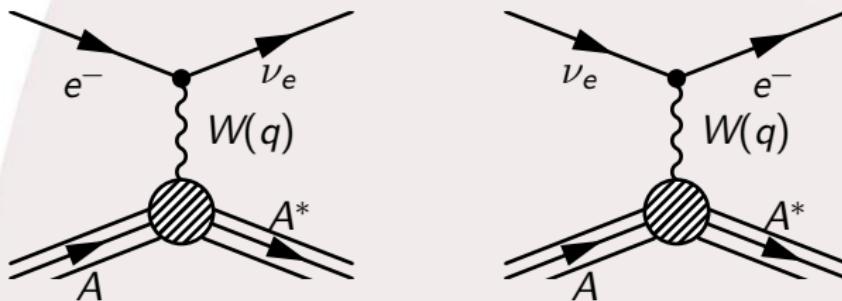
⇒ 20 ans de CPU après accélération

Processus



« Quand la pression gravitationnelle dépasse la pression de dégénérescence des électrons, ceux-ci sont capturés par les protons »

Processus effectif



$$< p_e, n_{pA} | \mathcal{M} | \cos \theta_\nu, n_{nA^*}, r, J^\pi; T > 0$$

$$< p_e, n_{pA}(J^\pi; T) |\mathcal{M}| \cos \theta_\nu, n_{nA^*}(J^\pi; T), r >$$

$$\forall J^\pi, T \quad \sigma \propto \int dp_e d\cos\theta_\nu dr \sum_{n_{pA}, n_{nA^*}} | \langle p_e, n_{pA} | \mathcal{M} | \cos\theta_\nu, n_{nA^*}, r \rangle |^2$$

(en incluant les fonctions de structures)

Structure du programme

```
(... boucles sur J, II ...)           ! 6
(... calcul de structure nucléaire selon un modèle RPA : ...)
(... occupations des niveaux d'énergies, fonctions d'ondes wf / dwf ...)
do idxenergy0 = 0, nbenergystep - 1    ! 150 énergies electron
  do energyc = 1, nconf                ! 153 / 405 / 540 états d'énergie du noyau
    do k_simps = 0, n_simps            ! 31 angles electron-neutrino
      do pairc = 1, nconf              ! 153 / 405 / 540 états d'énergie du noyau T < 1 MeV
                                         ! 182 / 476 / 637 états d'énergie du noyau T = 2 MeV
                                         ! 232 / 609 / 821 états d'énergie du noyau T = 3 MeV
                                         ! 386 / 1041 / 1448 états d'énergie du noyau T = 4 MeV
      do i = 1, maxr                  ! 168 mailles radiales de fonction d'onde
        ... à fond de boucles, fonctions de bessel sphériques : > 92% du temps
```

$$j_\ell(qr)$$

nid de 5 boucles indépendantes
⇒ paradis des parallélistes

entre 121 millions et 11 milliards d'itérations seulement pour les 4
boucles internes

Bessel Sphérique

$$\begin{aligned}
 j_0(z) &= \frac{\sin z}{z} \\
 j_1(z) &= \frac{\sin z}{z^2} - \frac{\cos z}{z} \\
 j_2(z) &= \left(\frac{3}{z^3} - \frac{1}{z} \right) \sin z - \frac{3}{z^2} \cos z \\
 &\dots
 \end{aligned}$$

Plus une fonction a de zéros, plus elle est difficile à évaluer précisément
 Là, une infinité de zéros...

Benchmark de Bessel Sphérique

langage	algo	valeur	correct ?	-03 (ns)
Mathematica		0.06596800707652196074158...		
C++	g++ tr1::sph_bessel_L	0.0659680070765219607 530	62	794
C++	boost::sph_bessel	0.06596800707652196 45	53	
C	gsl_sf_bessel_jl = ROOT	0.06596800707652196	56	1065
C	NR sphbes $\mu=10^{-10}$ rtpio+O3	0.06596800707652196	56	559
C++	g++ tr1::sph_bessel	0.0659680070765219 367	51	661
Fortran	SPHBR	0.06596800707652196 4	54	3240
Fortran	SPHBES	0.0659680070765219 51	52	747
Fortran	SPHBES $\mu=10^{-10}$ rtpio+	0.06596800707652 67385 ???	52	669
Fortran	SBESJY	0.06596800707652 2006	50	439
Fortran	SBESJH	0.06596800707652196 4	54	3130
Fortran	SBESJH	0.06596800707652 2020	50	
Fortran	SBESJ	0.0659680070765219 51	52	440
C	NR sphbes $\mu=10^{-10}$ rtpio+	0.06596800707652 67385	43	699
C	NR sphbes $\mu=10^{-10}$	0.06596800 511243080	25	699

DSE Bessel sphérique

CUDA

$$j_n(z) = z^n \sum_{k=0} \frac{(\frac{1}{2}z^2)^k}{k!(2n+2k+1)!!}$$

```

module bessel
use, intrinsic :: ISO_C_BINDING
implicit none
integer, parameter :: pr = c_double ! precision
integer, parameter :: &
    nmax = 19, &
    lmax = 10
integer(kind=c_int), protected, bind (C, NAME = "lsize")    :: C_lsize   = lmax
integer(kind=c_int), protected, bind (C, NAME = "nsize")    :: C_nsize   = nmax

integer, parameter :: ep = 16
real (ep), parameter :: &
    Qpi     = 4 * atan (1.0_ep), &
    Qlog2   = log (2.0_ep)

real (c_double), dimension (0:lmax, 0:nmax), save, protected, target, bind (C, NAME = "coeff")
fincoeff = reshape (source = real (exp (- (/ &
    log_gamma (n+1.0_ep) + &
    log_gamma (n+l+1.5_ep) + (2*n+l+1) * Qlog2 - log (Qpi) / 2.0_ep, l = 0, lmax), n = 0
    shape = shape (fincoeff)))
type (C_PTR), save, protected, bind (C, NAME = "coeffBessel0") :: coeffBesselPtr != C_LOC
...

```

Constantes

Constante	Initiale	Actuelle		Δ	bits	incertitude	bits
TanCab	0.25	0.23125(87)		7.50e-02	3.7	3.76e-03	8.1
neutronmass	939.0	939.565 4133(58)	MeV	6.02e-04	10.7	2.24e-08	27.3
alphainv	137.0	137.035 999 139(31)		2.63e-04	11.9	3.21e-10	32.0
hbc	197.3	197.3269788(12)	MeV·fm	1.37e-04	12.8	2.23e-08	27.3
Vud	0.97419	0.97427(21)		8.21e-05	13.6	2.16e-04	12.2
dblMasse...	0.04823	0.0482264271(32)		7.41e-05	13.7	6.70e-08	24.8
Gf	1.16639e-11	1.166 3787e-11(6)	MeV ⁻²	2.23e-05	15.5	4.29e-05	20.9
protonmass	938.2796	938.272 0813(58)	MeV	8.05e-06	16.9	2.24e-08	27.3
emass	0.511003	0.5109989461(31)	MeV	7.97e-06	16.9	2.15e-08	27.3
clight	2.99792e23	2.99792458e23	fm·s ⁻¹	1.53e-06	19.3		

Constantes 2019

Constante	Initiale	Actuelle		Δ	bits	incertitude	bits
TanCab	0.25	0.23125(87)		7.50e-02	3.7	3.76e-03	8.1
neutronmass	939.0	939.565 4133(58)	MeV	6.02e-04	10.7	2.24e-08	27.3
alphainv	137.0	137.035 999 139(31)		2.63e-04	11.9	3.21e-10	32.0
hbc	197.3	197.3269799666552...	MeV·fm	1.37e-04	12.8		
Vud	0.97419	0.97427(21)		8.21e-05	13.6	2.16e-04	12.2
dblMasse...	0.04823	0.0482264271(32)		7.41e-05	13.7	6.70e-08	24.8
Gf	1.16639e-11	1.166 3787e-11(6)	MeV ⁻²	2.23e-05	15.5	4.29e-05	20.9
protonmass	938.2796	938.272 0813(58)	MeV	8.05e-06	16.9	2.24e-08	27.3
emass	0.511003	0.5109989461(31)	MeV	7.97e-06	16.9	2.15e-08	27.3
clight	2.99792e23	2.99792458e23	fm·s ⁻¹	1.53e-06	19.3		
<i>h</i>		6.62607015e-34	J·s				
<i>e</i>		1.602176638e-19	C				
<i>N_A</i>		6.02214076e23	mol				

Projet de résolution « Sur la révision du Système international d'unités (SI) »
<https://www.bipm.org/utils/fr/pdf/CGPM/Draft-Resolution-A-FR.pdf>
 3-16 novembre 2018 ==> 20 mai 2019

Projet de résolution A – 26^e réunion de la CGPM (13)

Projet de résolution A

Sur la révision du Système international d'unités (SI)

La Conférence générale des poids et mesures (CGPM), à sa 26^e réunion,
 considérant

- qu'il est essentiel de disposer d'un Système national d'unités accessible dans le monde entier, pour le commerce international, l'

Constantes

```

module physconst
use mod_precision
use, intrinsic :: ISO_C_BINDING
implicit none
real (pr), parameter :: &
    pi      = 4 * atan (1.0_pr), !  $\pi$ , Archimedes' constant
    sqrtpi = sqrt (pi),        !  $\sqrt{\pi}$ 
    sq4pi  = sqrt (4 * pi),    !  $\sqrt{4\pi}$ 
    Gf     = 1.1663787e-11_pr, ! GF, Fermi constant !  $1.166\ 3787(6) \times 10^{-11}$  MeV $^{-2}$  (2014 CODATA)
    hbc    = 197.3269788_pr,   ! hc                      !  $197.326\ 9788(12)$  MeV $\cdot$ fm (2014 CODATA)
    alphainv = 137.035999139_pr, !  $1/\alpha_{\text{em}}$            !  $137.035\ 999\ 139(31)$  (2014 CODATA)
    protonmass = 938.2720813_pr, !  $m_p$                   !  $938.272\ 0813(58)$  MeV (2014 CODATA)
    neutronmass = 939.5654133_pr, !  $m_n$                   !  $939.565\ 4133(58)$  MeV (2014 CODATA)
    TanCab = 0.23129_pr,        !  $\tan \theta_{\text{Cab}}$ , Cabibbo angle ! Is it  $\tan \theta_{\text{Cabibbo}}$ ? =>  $0.22534/0.9742$ 
    thetaC = atan (TanCab),    !  $\theta_{\text{Cab}}$ , Cabibbo angle
    emass  = 0.5109989461_pr, !  $m_e$                   !  $0.510\ 998\ 9461(31)$  MeV (2014 CODATA)
    clight  = 2.99792458e23_pr, ! c speed of light in vacuum !  $2.99792458 \times 10^{23}$  fm $\cdot$ s $^{-1}$  (1983 CGPM)
    Vud    = 0.97427_pr,       !  $V_{ud}$ , Cabibbo-Kobayashi-Maskawa up-down coupling matrix element
    gv     = 1.0_pr,           !  $G_F$ 
    Na     = 6.022140857e23_pr, ! Na, Avogadro constant !  $6.022\ 140\ 857(74) \times 10^{23}$  mol $^{-1}$  (2014 CODATA recon)
    deltanp = 1.29333205_pr,   !  $A_{np} = m_n - m_p$           !  $1.293\ 332\ 05(48)$  MeV (2014 CODATA)
    Rydberg = emass / alphainv**2 / 2.0_pr, !  $R = hc = 13.605\ 693\ 009(84) \times 10^{-9}$  MeV (2014 CODATA)
    deltanH = 0.78227_pr,      !  $A_{n^2H} = m_n - m_p - m_e$  ! deltanp - emass =  $0.78233310(48)$  or  $0.78234670(4$ 
    ion energy (2014 CODATA)
    ampi   = 138.0_pr,         ! around pion masses      =  $139.57018; // \pm 0.00035$  GeV //  $\pi^{+}$  (charged

```

Constantes

```

module physconst
use, intrinsic :: ISO_C_BINDING
implicit none
real (kind=C_DOUBLE), parameter :: ! (2014 CODATA)
    pi          = 4 * atan (1.d0), & ! , Archimedes' constant
    sqrtpi     = sqrt (pi),        & ! √
    sq4pi      = sqrt (4 * pi),   & ! √(4 )
    Gf          = 1.1663787d-11,  & ! GF, Fermi constant ! 1.166 3787(6) × 10-11 MeV2
    hbc         = 197.3269788d0,  & ! ! 197.326 9788(12) MeV·fm
    alphainv   = 137.035999139d0, & ! 1/ ! 137.035 999 139(31)
    protonmass = 938.2720813d0,  & ! m ! 938.272 0813(58) MeV
    neutronmass= 939.5654133d0,  & ! m ! 939.565 4133(58) MeV
    TanCab     = 0.23129d0,       & ! tan Cab, Cabibbo angle => 0.22534/0.97427
    thetaC      = atan (TanCab),  & ! Cab, Cabibbo angle
    emass       = 0.5109989461d0, & ! m ! 0.510 998 9461(31) MeV
    clight      = 2.99792458d23,  & ! speed of light in vacuum ! 2.99792458 × 1023 fm·s-1
    Vud         = 0.97427d0,       & ! V , Cabibbo-Kobayashi-Maskawa up-down coupling matrix element
    gv          = 1.0d0,           & ! g
    Na          = 6.022140857d23,  & ! N , Avogadro constant ! 6.022 140 857(74) × 1023 !
    ...
    factco     = (Gf * cos (thetaC) * hbc)**2 * 1d16 ! factor for cross sections
    ...
! Error: PARAMETER attribute conflicts with BIND(C) attribute
real(kind=C_DOUBLE), protected, bind (C, NAME = "hqc") :: C_hqc = hbc ! 197.3269788
    ...

```

Success story

- Code de capture d'électrons
9 kSLOC de Fortran, 5 kSLOC de C(++)
- Accélération avant //ⁿ
 - ... facteur 12 (stockage plutôt que recalcul)
 - ... facteur **25** ⇒ **55** au total
 - utiliser les bibliothèques standard (nearbyint)
 - Spherical Bessel Benchmark (15 codes, 9 algos)
 - vectorisation des boucles...
- amélioration de la précision

Méthode

Ces résultats sont le fruit d'une méthode :

- ⇒ on ne rentre pas dans 15 000 lignes de code comme dans un moulin : mise du code sous contrôle de version **svn**
- analyse statique **ftncheck, cppchecker**
 - * branches mortes (procédures, variables)
 - * métriques **sloccount**
- analyse dynamique “profiling” **gprof**
 - * identification des goulets d'étranglements
 - * optimisation de fond de boucles
- chasse aux problèmes de mémoire **valgrind**
- typographie, indentation, documentation **doxygen**
- pêche aux mauvaises pratiques numériques

D. GOLDBERG, *What every computer scientist should know about floating point arithmetic*

- * constantification des constantes : extraction des constantes en dur, uniformisation : combien de valeurs de π distinctes ?
- * accélération (Horner, Richardson, stockage intermédiaire...)

Parallélisation ?

La parallélisation a l'air facile \Rightarrow OpenMP

```
(... boucles sur J, II ...)
! 6
!$OMP PARALLEL PRIVATE (Eelectron, ecsun) SHARED (Energy_electron, sigma)
!$  & COPYIN (/energyidx/, /rpamix/, /bwf/, /occupa/, /qval/, /bdiam/,
!$  & /bqwf/, /bwu2/, /bnri/, /bnrir/, /bwu1/, /bwuir/, /blecp1/,
!$  & /blecp2/, /bptl/)
do idxenergy0 = 0, nbenergystep - 1      ! 150 énergies electron
  do energyc = 1, nconf                  ! 153 / 405 / 540 états d'énergie du noyau
    do k_simps = 0, n_simps              ! 31 angles electron-neutrino
      do pairc = 1, nconf                ! 153 / 405 / 540 états d'énergie du noyau
        do i = 1, maxr                  ! 168 mailles radiales de fonction d'onde
          ... à fond de boucles, fonctions de bessel sphériques : > 92% du temps
```

\Rightarrow segmentation fault :(

IDRIS \Rightarrow « Convertissez tout dans un seul langage »
 Fortran 90, validation des résultats, ajout de OpenMP

\Rightarrow segmentation fault :(

- * Faut-il simplifier le code ?
- * Dur avec des threads, facile avec des process
- * Threads pas si équivalents en durée...
- * Transformer le code pour exprimer une transformée rapide de Bessel Sphérique à la FFT ?
- * intégration numérique reposant des produits de matrice \Rightarrow utilisons le GPU
 CUDA, OpenCL, OpenACC?

- en amont des boucles, ftchrpa diagonalisation 30s
- $\forall i_e, E_e(i_e), p_e(i_e)$
- $\forall i_e, j_{Ai} E_\nu(i_e, j_{Ai}), p_\nu(i_e, j_{Ai})$
- $\forall i_e, j_{Ai} E_e(i_e) > m_e \quad \& \quad E_\nu(i_e, j_{Ai}) > m_\nu \quad \& \quad \dots$
- $\forall i_e, j_{Ai}, k_\theta \cos \theta(k_\theta), q(i_e, j_{Ai}, k_\theta)$
- $\forall i_e, j_{Ai}, k_\theta, m_r, \ell j_\ell \left(\frac{q(i_e, j_{Ai}, k_\theta) r(m_r)}{\hbar c} \right)$
- ...
- $\forall I_{Af}, m_r \mathcal{M}(I_{Af}, m_r) = \psi_1(I_{Af}, m_r) \bar{\psi}_2(I_{Af}, m_r) f(m_r)$
-
- $\forall i_e, j_{Ai}, k_\theta, I_{Af}, \ell \sum_{m_r} j_\ell(i_e, j_{Ai}, k_\theta, m_r) \mathcal{M}(I_{Af}, m_r)$
- (contractions \Rightarrow réductions)...

un cas d'école

Expression //me

```
subroutine radpoint_array (j0)
  implicit none
  integer, intent (in) :: j0
  integer :: k_simps, pairc, idxenergy, energyc, maj ! dummy indices
  integer :: Jmin, Jmax
  Jmin = max (j0 - 1, 0)
  Jmax = j0 + 1

  allocate (Rad_point1_array (1:nconf, 0:n_simps, 1:nconf, 0:nbenergystep - 1, Jmin:Jmax))

  build10: do maj = Jmin, Jmax
    build11: do idxEnergy = 0, nbenergystep - 1
      build12: do energyc = 1, nconf
        if (mask_kinematics (energyc, idxEnergy)) then
          build13: do k_simps = 0, n_simps
            build14: do pairc = 1, nconf
              Rad_point1_array (pairc, k_simps, energyc, idxEnergy, maj) = &
                sum (wf1dwf2_array (1:maxr, pairc) * Bess_f_array (1:maxr, k_simps, energyc,
                  end do build14
            end do build13
          end if
        end do build12
      end do build11
    end do build10

    Rad_point1_array (:, :, :, :, :, :) = Rad_point1_array (:, :, :, :, :, :) - Rad_point2A_array
  end subroutine radpoint_array
```

Expression //me matmul

```

subroutine radpoint_array (j0)
  implicit none
  integer, intent (in) :: j0
  integer :: k_simps, pairc, idxenergy, energyc, maj ! dummy indices
  integer :: Jmin, Jmax
  Jmin = max (j0 - 1, 0)
  Jmax = j0 + 1

  allocate (Rad_point1_array (1:nconf, 0:n_simps, 1:nconf, 0:nbenergystep - 1, Jmin:Jmax))

  build10: do maj = Jmin, Jmax
    build11: do idxEnergy = 0, nbenergystep - 1
      build12: do energyc = 1, nconf
        build13: do k_simps = 0, n_simps
          build14: do pairc = 1, nconf
            Rad_point1_array = reshape (matmul (transpose (wf1dwf2_array (1:maxr, 1:nconf),
              reshape (bess_f_array, (/maxr, (n_simps + 1) * nconf * nbenergystep * (maxj +
                (/nconf, (n_simps + 1), nconf, nbenergystep, (maxj + 2) /)))
            end do build14
          end do build13
        end do build12
      end do build11
    end do build10

    Rad_point1_array (:, :, :, :, :, :) = Rad_point1_array (:, :, :, :, :, :) - Rad_point2A_array
  end subroutine radpoint_array

```

Expression //me matmul

```

subroutine radpoint_array (j0)
    implicit none
    integer, intent (in) :: j0
    integer :: k_simps, pairc, idxenergy, energyc, maj ! dummy indices
    integer :: Jmin, Jmax
    Jmin = max (j0 -1, 0)
    Jmax = j0 +1

    allocate (Rad_point1_array (1:nconf, 0:n_simps, 1:nconf, 0:nbenergystep -1, Jmin:Jmax))

    build10: do maj = Jmin, Jmax
        build11: do idxEnergy = 0, nbenergystep -1
            build12: do energyc = 1, nconf
                if (mask_kinematics (energyc, idxEnergy)) then
                    build13: do k_simps = 0, n_simps
                        build14: do pairc = 1, nconf
                            Rad_point1_array (1:nconf, 0:n_simps, energyc, idxEnergy, maj) = &
                                matmul (transpose (wf1dwf2_array (1:maxr, 1:nconf)), &
                                Bess_f_array (1:maxr, 0:n_simps, energyc, idxEnergy, maj))
                        end do build14
                    end do build13
                end if
            end do build12
        end do build11
    end do build10

    Rad_point1_array (:, :, :, :, :, :) = Rad_point1_array (:, :, :, :, :, :) - Rad_point2A_array
end subroutine radpoint_array

```

```

subroutine radpoint_array ( j0 )
    implicit none
    integer, intent ( in ) :: j0
    integer :: k_simps , pairc , idxenergy , energyc , maj ! dummy indices
    integer :: Jmin , Jmax
    Jmin = max ( j0 -1 , 0 )
    Jmax = j0 +1

    allocate ( Rad_point1_array ( 1:nconf , 0:n_simps , 1:nconf , 0:nbenergystep -1 , Jmin:Jmax ) )

    !$acc data present_or_create ( mask_kinematics , Rad_point2B_array , Rad_point2A_array ,
    !$acc                         wf12_array , Bess_f_array , wf12inv_array , wf1dwf2_array )

    !$acc parallel loop collapse ( 3 )
    build10: do maj = Jmin , Jmax
        build11: do idxEnergy = 0 , nbenergystep -1
            build12: do energyc = 1 , nconf
                if ( mask_kinematics ( energyc , idxEnergy ) ) then
                    !$acc loop vector independent collapse ( 2 )
                    build13: do k_simps = 0 , n_simps
                        build14: do pairc = 1 , nconf
                            Rad_point1_array ( pairc , k_simps , energyc , idxEnergy , maj ) = &
                                sum ( wf1dwf2_array ( 1:maxr , pairc ) * Bess_f_array ( 1:maxr , k_simps , energyc ,
                            end do build14
                        end do build13
                    end if
                end do build12
            end do build11
        end do build10
    !$acc end parallel loop

```

Hardware

	2013 ipngrid01	2018 llracp01
coeurs	Intel 16×2	Intel 40×2
modèle	Xeon	Xeon
version	E5-2670	Gold 6138
fréquence	2.60GHz	2.00GHz
cache	20 MB	27.5 MB
name	NVidia Tesla×3	NVidia Tesla×2
architecture	Fermi	Volta
model	M2090	V100-PCIE
memory (MiB)	5 301 2012 November	16 160 2017 June
peak	665 GFlops	7 TFlops (dbl)
cc	2.0	7.0
OS	RHEL 6.9	CentOS 7.5.1804
Driver	390.30	396.26

Speedup

	2013	r88	r153	r242					
	Intel	Intel	F90	new	Intel	GNU	GNU	PGI	PGI
					×	×	×	×	OpenACC
ftchrpa	39,31	39,31	39,31	39,31	39,14	83,19	83,15	69,35	69,27
eccalc	502,05	10,21	19,17	4,66	5,54	10,90	6,02	5,28	5,95
total	541	49,52	58,47	44,01	44,73	94,14	89,21	83,22	83,88
×eccalc		49,2		107,8	90,7		83,4		107,8
×eccalcr.				2,2	1,8		1,7		2,2

Speedup (news)

	2013	r88	r153	r242							
	Intel	Intel	Intel	Intel	Intel	GNU	GNU	PGI	PGI	PGI	PGI
ftchrpa	39,31 42,77	39,31	39,31	39,31	39,14	83,19	83,15	69,35	69,27	69,41	
eccalc	502,05	10,21	19,17	4,66	5,54	10,90	6,02	5,28	5,95	4,66	5,04
total	541	49,52	58,47	44,01	44,73	94,14	89,21	83,22	83,88	82,67	53,83
xeccalc		49,2		107,8	90,7		83,4		84,4	107,8	
xeccalcr.				2,2	1,8		1,7		1,7	2,2	

Précision

- simple, double, étendue, quadruple
- généricité Fortran fondée sur REAL(KIND=*global_parameter*)
- différentes performances selon le compilo
reste à faire du coté GNU (pas de vectorisation)
- pas testé sous OpenACC

Tesla M2090 2011 ⇒ V100 ×10 ?

- passage de ipngrid01 à llracp01
- passage de SLC 6 à CentOS 7
 - ⇒ segmentation fault :(
- ⇒ recours à un container singularity
 - ⇒ Merci Andrea ! *bénéfice de la collab ASR / dev*
- overhead sur le premier appel au pilote NVidia : 4s !
- speed up sur la partie OpenACC
 - ⇒ $\times 1.7 \times 5 \Rightarrow \times 8.5 !!!$
- profiling (début) ⇒ expressions tableau ⇒ coût de l'initialisation
 - ⇒ limiteS du compilateur

Problèmes

- exceptions pas très parlantes : `segfault`
- difficultés d'interprétation du profiling
- difficultés à libérer la mémoire
- difficultés à monitorer la mémoire
(absence de fonctions intrinsèques)
- difficultés à utiliser l'abstraction : expressions tableaux *vs* OpenACC
impossible d'utiliser les produits de matrices directement

Roadmap

- optimisation mémoire : éliminer les masques en amont ($\times 6$) \Rightarrow conséquences sur le speedup **réécriture...**
- optimisation mémoire : libération d'espace au fil de l'évaluation (pour l'instant, ça segfault) **directives...**
- adaptation mémoire : découpage de la boucle externe en deux niveaux (limitation taille mémoire GPU) **réécriture...**
- écriture asynchrone (plusieurs cartes GPU) **réécriture...**
- passage de petits kernels, bloqués du côté CPU, \Rightarrow diminuer les transferts **réécriture...**
- produit de matrice sous cuBLAS : appel CUDA depuis OpenACC.

Conclusion

- différentes précision (simple, double, étendue, quadruple)
- différentes performances selon le compilo
- pénalité d'abstraction de Fortran+C vers Fortran90
- *Formula translator*
- + Tesla M2090 2011 ⇒ Tesla V100 ×8,5
- + cc20⇒cc70 profiling
- matmul !!!
- + cc> 35 : cuBLAS !!!
- + mémoire... (seulement 5 GB c'est limite ⇒ 16 GB)
gestion plus fine des régions mémoires
s'appuyer sur le masque cinématique pour diminuer
l'empreinte mémoires (mais perte de clarté)
- + nouvelle OpenMPification

- convaincre les utilisateurs qu'il y a un process d'industrialisation de leurs calculs
- ...que tous les codes ne s'y prêtent pas
- ...que les développeurs sont là pour fournir du conseil ?
- ...que les développeurs sont là pour fournir du conseil en amont ?
- ⇒ Restez au niveau d'abstraction appropriée
- ...que les développeurs sont là pour fournir de l'appui ?