Kurzfassung

Im Rahmen dieser Diplomarbeit wurde der Cling JIT-Compiler, welcher von einem Team des CERN entwickelt wurde, um die Möglichkeit erweitert, CUDA-C++-Code zu übersetzen. Der Cling-CUDA ermöglicht neue Konzepte der Entwicklung und Ausführung von GPU-Anwendungen im HPC-Bereich. Das wichtigste Ergebnis dieser Entwicklung ist das Entfallen bzw. Reduzieren der Zeiten für das Kompilieren, Linken, Job-Submitting und den Programmstart einer GPU-Anwendung, sobald der Programmfluss geändert wird. Zugleich bleibt die wichtigste Eigenschaft von C++ erhalten: Die Erzeugung performanten Codes. Da der existierende CUDA-C++-Code ohne Änderungen weiterverwendet werden kann, ist zudem eine verhältnismäßig einfache Migration in bestehende Projekte möglich. Die Kombination aus Cling und Jupyter Notebook erlaubt darüber hinaus den einfachen Zugang einer breiten Nutzerschicht zu dieser Entwicklung. Dieser Schritt erleichtert insbesondere die Nutzung von HPC-Ressourcen auf einem entfernten Gerät sowie wie das Veröffentlichen von reproduzierbaren wissenschaftlichen Ergebnissen in Form von Programmcode, Daten und Dokumentation. Das vertraute und verbreitete Konzept von Jupyter Notebook eignet sich außerdem besonders gut, um HPC-Ressourcen Nutzergruppen zugänglich zu machen, die bisher von der klassischen Nutzung von HPC-System abgeschreckt wurden sind.

Im Rahmen der vorliegenden Arbeit wurden zwei Anwendungsbeispiele entwickelt, die Nutzung und Vorteile des neu entwickelten Cling-CUDA demonstrieren. Das erste Beispiel beschreibt die Entwicklung und Ausführung einer Simulation und Analyse unter Verwendung des Cling-CUDA und Jupyter Notebooks. Für das zweite Beispiel wurde eine Übung aus der Vorlesung "Hochparallele Programmierung von GPUs" des Studiengangs "Informatik" der TU Dresden in einem Notebook umgesetzt. Dies geschah in Zusammenarbeit mit dem Dozenten der Vorlesung.

In Folge dieser Arbeit gibt es mit den beiden Community-Projekten ROOT (CERN) und PIConGPU (HZDR) bereits Interessenten, die prüfen, ob eine Integration des Cling-CUDA möglich und sinnvoll ist. Besonders durch die Integration in ROOT könnte eine große Community an HPC-Nutzer erschlossen werden, die als starker Treiber für die zukünftige Entwicklung von Cling-CUDA fungieren könnten.

Abstract

In the scope of this diploma thesis the Cling JIT compiler, which was developed by a team of the CERN, was extended by the function to compile CUDA C++ code. The Cling-CUDA allows for new concepts in developing and executing GPU applications within the area of HPC. The key finding of this progress is the elimination or reduction of the times for compiling, linking, job submitting and program start of a GPU application as soon as program flow changes. The important characteristic of C++ to generate high-performance code is retained. Furthermore, the possibility of reusing existing CUDA C++ code without changes allows a relatively simple migration into existing projects. The Cling was combined with Jupyter Notebook to provide a preferably wide range of users access to this new technology. This step has simplified the use of HPC resources on a remote system as well as the publication of reproducible scientific results in the form of program code, data and documentation. The widespread concept of Jupyter Notebook enables user groups who so far have been deterred by the traditional use of HPC systems to access HPC resources.

Two use cases were developed to demonstrate the use and advantages of the newly developed Cling-CUDA. The first example describes the development and execution of a simulation and analysis using the