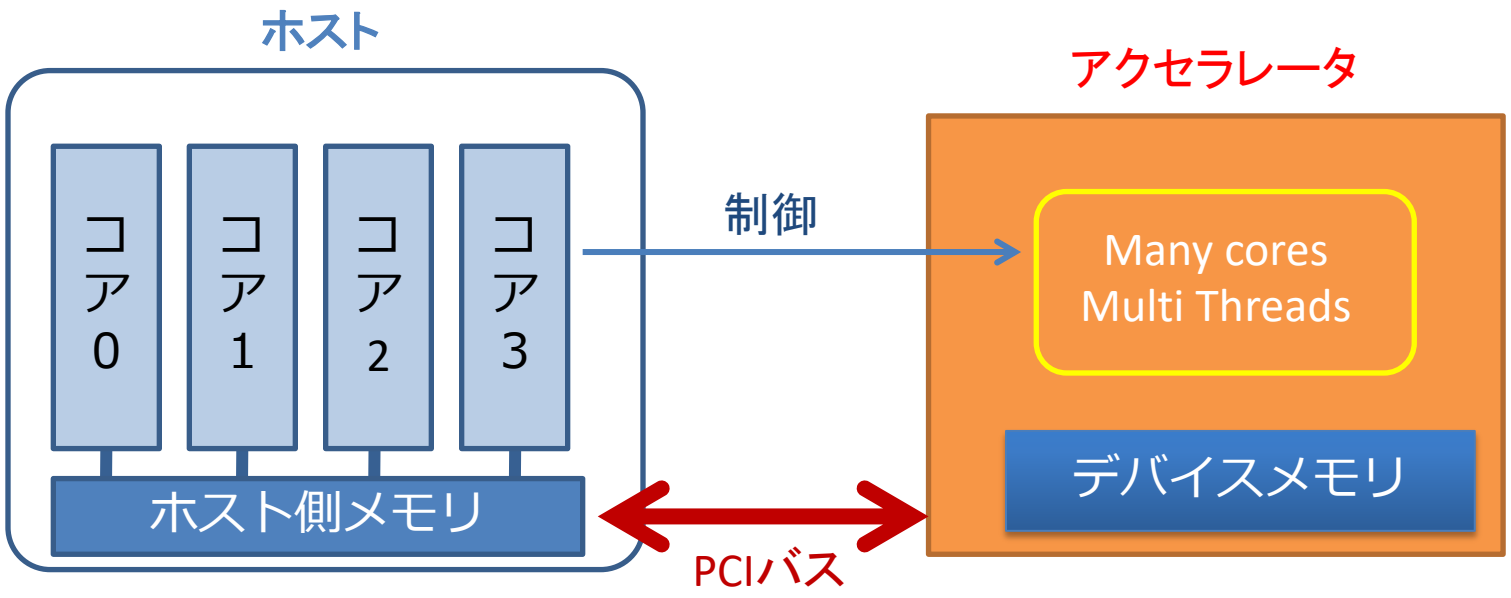
KOBE HPC サマースクール（初級）　2022 講義資料
2022/09/02

兵庫県立大学情報科学研究科
安田　修悟

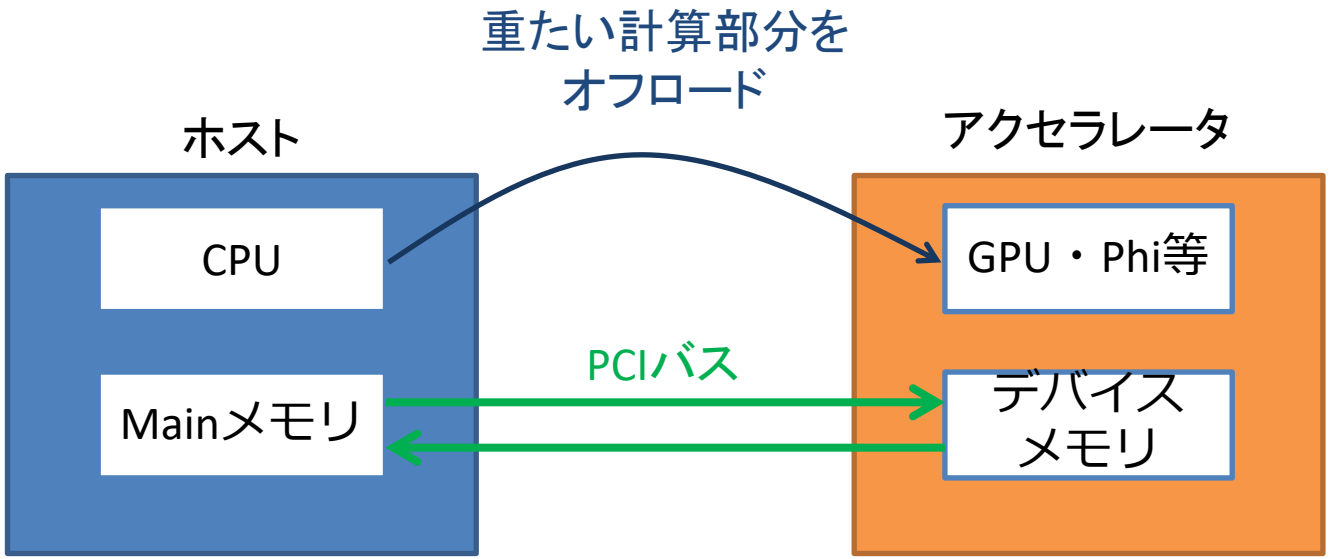
アクセラレータとは？

- CPUの処理を一部代替して全体の処理の効率を向上させる装置（ディバイス）。
  - GPGPU (NVIDIA), Xeon Phi (Intel), APU (AMD)など



アクセラレータの実行イメージ

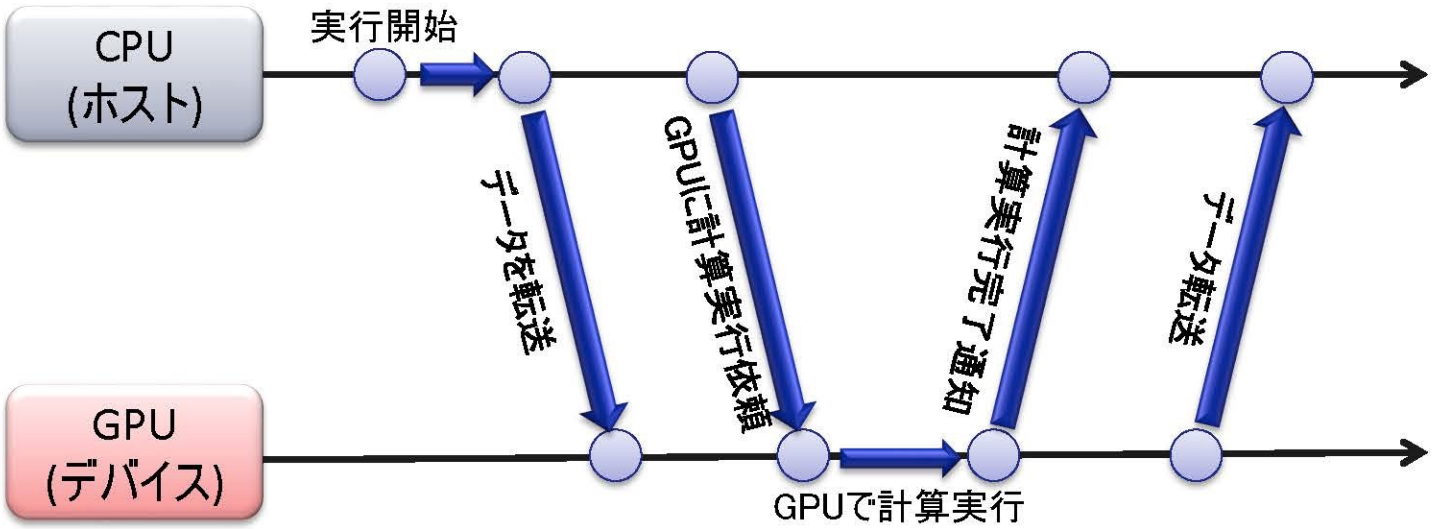
ハイブリット構成　（CPU＋アクセラレータ）



※データのオフロード通信がボトルネックとなる

- CPUのメモリ空間とディバイスのメモリ空間が異なる
- 一般的なメモリ帯域幅に比べてPCIバスでの低速な転送

GPUでのプログラム実行イメージ



- GPU(デバイス)ではCPU(ホスト)から制御をします。
- GPU(デバイス)の計算で必要なデータはCPU(ホスト)から転送します。
- GPU(デバイス)で計算した結果はCPU(ホスト)に転送します。

OpenACC

- Accelerators用のAPIの一つ。
- CPUからディバイスに処理をオフロードする際に使用する。
- Fortran/C/C++言語でディレクティブを指定（OpenMPと同様）
- CUDA等の専用プログラムに比べて、導入が容易。

OpenACCプログラミング

- 基本フォーマット

```
#pragma␣acc␣ディレクティブ␣節１␣節2␣・・・
{
    構造化ブロック（途中で抜け出したり、終了しない）
}

例
#paragma ␣acc ␣kernels␣copy(a)
for(i=0;i<imax;i++){
        a[i]=a[i]*a[i];
         ・ ・ ・ ・
}
```

OpenACCプログラミング

- 基本フォーマット (Fortranの場合)

```
!$acc␣ディレクティブ␣節１␣節2␣・・・
        構造化ブロック
!$acc end ディレクティブ

!$acc ␣kernels␣copy(a)
do i=0, imax
        a[i]=a[i]*a[i];
         ・ ・ ・ ・
end do
!$acc end kernels
```

基本的なディレクティブ構文

① Accelerator compute構文
- オフロードするループ対象部分を指定する。
- kernels構文やparallel構文がある

② DATA構文
- ホストとアクセラレータのデータ転送を明示的に指示する。
- 高速化の鍵を握る

③ Loop構文
- ①のオフロード領域のループのベクトル長や並列分割の詳細を明示的に指示する。

NVIDIA HPC SDK コンパイラー

- Module環境の設定

  ```
  module load nvhpc
  ```

  – module␣listでintelが設定されている場合 module␣unload␣intel や module␣purge でIntel環境を先にunloadする。

- OpenACCのコンパイル

  ```
  nvc –acc prog.c –o acc.out
  ```

  – “-acc”はOpenACCディレクティブを有効にするためのオプション。

NVIDIA HPC SDK コンパイラー

- OpenMPのコンパイル

  `nvc –mp prog.c –o mp.out`

  “-mp”はOpenMPディレクティブを有効にするためのオプション。
- 最適化オプション
  - “-Mvect=simd” : SSEやAVXのSIMD命令を生成.
  - “-fast”:一般的な最適化オプション
  - “-03”, “-04”: より高度な最適化オプション
    （”-fast”より後に入れる
    例: `nvc -fast -03 program.c` ）

NVIDIA HPC SDK コンパイラー

- 環境変数（実行前に設定，run_acc.sh参照）
  - NVCOMPILER_ACC_TIME
    - 実行後に簡易プロファイル情報を標準出力に出力。
    - 0（ゼロ）を指定すると機能を抑制（デフォルト）、ゼロ以外の整数値で機能する。
  - NVCOMPILER_ACC_NOTIFY
    - ディバイスの実行イベントを表示する
    - 整数値１：Kernel launch のイベントを出力、整数値２：データ転送のイベントの出力、など
    - 0（ゼロ）を指定すると機能を抑制（デフォルト）

GPUキューの実行

- インタラクティブ実行
  `qsub -I -q G -l select=1:ncpus=N2:ngpus=N4`

  - N2: CPUコア数（1～40），N4:GPUディバイス数（1～8）
  - Ngpus=N4を指定しない場合，GPUディバイスは利用しない．
  - GPUを搭載したノードにてプログラムを実行。

GPUキューの実行

- ホストプログラムの並列化に応じてジョブスクリプトを作成.　(以下の例は，ホストが並列化無しの場合)

```
#!/bin/bash
#PBS␣-q␣G
#PBS␣-l␣select=1:ncpus=4:ngpus=1
#PBS␣-N␣job_acc
#PBS␣-j␣oe
source␣/etc/profile.d/modules.sh
module␣purge
module␣load␣nvhpc
cd␣${PBS_O_WORKDIR}
./a.out
```

・利用するGPUカード数を指定

・現在のモジュール環境を全て破棄

・NVIDIA HPCコンパイラの環境設定

OpenACCの演習 1

- OpenMPプログラム(pi_omp.c)をNVIDIA HPCコンパイラーでコンパイルし，スレッド並列を実行せよ.

- OpenACCプログラム(pi_acc.c)をコンパイルし，GPU計算を実行せよ．スレッド並列とGPU計算の計算時間を比較せよ.

  * 注）pi_acc.cのnmaxは40000程度以下に設定してください.

- 環境変数（NVCOMPILER_ACC_TIME or NVCOMPILER_ACC_NOTIFY）を設定してディバイスの実行プロファイルを確認しなさい.

OpenACCの演習 2

- pi2_omp.c と pi2_acc.c をそれぞれ実行し，先の演習の結果と比較しなさい.
  - pi2_acc.cのディバイス実行プロファイルを分析し，全体の計算時間が短縮されない原因について考えなさい.

pi_acc.cの実行プロファイル

```
Accelerator Kernel Timing data
main  NVIDIA  devicenum=0  time(us): 41

  16: compute region reached 1 time （compute構文が1回，kernel構文・reduction演算）
    18: kernel launched 1 time
      grid: [65535]  block: [128]
      elapsed time(us): total=12,175 max=12,175 min=12,175 avg=12,175
    18: reduction kernel launched 1 time
      grid: [1]  block: [256]
      elapsed time(us): total=70 max=70 min=70 avg=70

  16: data region reached 2 times （data構文が2回，copyin&copyout）
    16: data copyin transfers: 1
        device time(us): total=8 max=8 min=8 avg=8
    23: data copyout transfers: 1
        device time(us): total=33 max=33 min=33 avg=33
```

pi2_acc.cの実行プロファイル

２回のdata構文がボトルネック!!

```
main  NVIDIA  devicenum=0    time(us): 2,026,328
   17: compute region reached 1 time
      19: kernel launched 1 time
         grid: [65535]  block: [128]
         elapsed time(us): total=19,479 max=19,479 min=19,479 avg=19,479
   17: data region reached 2 times
      24: data copyout transfers: 763
          device time(us): total=987,059 max=1,393 min=1,235 avg=1,293
   29: compute region reached 1 time
      31: kernel launched 1 time
         grid: [65535]  block: [128]
         elapsed time(us): total=15,533 max=15,533 min=15,533 avg=15,533
      31: reduction kernel launched 1 time
         grid: [1]  block: [256]
         elapsed time(us): total=114 max=114 min=114 avg=114
   29: data region reached 2 times
      29: data copyin transfers: 764
          device time(us): total=1,039,257 max=1,372 min=19 avg=1,360
      34: data copyout transfers: 1
          device time(us): total=12 max=12 min=12 avg=12
```

DATA構文

- #pragma␣acc␣data␣節
- 節には以下のようなものがある．（Kernel構文の節にも使える．）
  - copyin(a,b): 配列a, bをホストからアクセラレータにコピーする．
  - copyout(c): 配列cをアクセラレータからホストにコピーする．
  - copy(A)：copyinとcpyoutの双方を行う．
  - create(B): アクセラレータでローカルに使用する配列Bの領域を作成．
  - present(C): 対象となる処理に入ったときにすでにデバイスメモリにある配列Cのデータを使用する．

DATA構文

- pi2_acc.cのプログラムに対して，

1. GPU内だけで必要な変数を予め作成する.

```
#pragma acc data create(f,x,y)
{
.....
}
```

2. Kernel構文でデータ属性を指示する.

- kernels present(f) copyin(dh)
- kernels present(f) copy(sum)

修正pi2_acc.cの実行プロファイル

data構文のボトルネックが解消
スカラ変数のデータコピーのみ

```
main  NVIDIA  devicenum=0   time(us): 41
  17: data region reached 2 times
  20: compute region reached 1 time
    22: kernel launched 1 time
      grid: [65535]  block: [128]
      elapsed time(us): total=162,324 max=162,324 min=162,324 avg=162,324
  20: data region reached 2 times
    20: data copyin transfers: 1
      device time(us): total=15 max=15 min=15 avg=15
  32: compute region reached 1 time
    34: kernel launched 1 time
      grid: [65535]  block: [128]
      elapsed time(us): total=15,465 max=15,465 min=15,465 avg=15,465
    34: reduction kernel launched 1 time
      grid: [1]  block: [256]
      elapsed time(us): total=107 max=107 min=107 avg=107
  32: data region reached 2 times
    32: data copyin transfers: 1
      device time(us): total=7 max=7 min=7 avg=7
    37: data copyout transfers: 1
      device time(us): total=19 max=19 min=19 avg=19
```

OpenACCの演習3

1. laplace_omp.c をもとに，ラプラス方程式のOpenACCのプログラムを作成せよ.
   - ✓ OpenMPのディレクティブを全てOpenACCのディレクティブに変更.

     #pragma omp parallel for => #pragma acc kernels
   - ✓ データ構文を使って，データコピーの回数が少なくなるように工夫する.

2. ベンチマークを実行してOpenMPとOpenACCで計算時間を比較せよ.

OpenACCの自習問題

- ラプラス方程式のガウスザイデル法，Even Odd法のプログラム(laplace_gs.c, laplace_gs_eo.c)についてOpenACCのプログラムを作成せよ.
  - ✓ガウスザイデル法の反復式では，両辺のデータに依存関係がある．一方，Even Odd法では，この依存関係を解消するアルゴリズムとなっている.
  - ✓GPUでも，OpenMPやベクトル演算と同様に依存関係のない式において高速化が達成される.

OpenACC Runtime関数

- `#include <openacc.h>`

- ディバイスタイプを取得
  `acc_device_t acc_get_device_type(void)`

- 利用するディバイスの総数を取得
  `int acc_get_num_devices(acc_device_t t)`

- 利用するディバイスの番号をセット
  `void acc_set_device_num(int n, acc_device_t t)`

- などなど

MPI / OpenACC

- Module環境
  module load mpt

- コンパイル
  ```
  nvc –acc –Mmpi=sgimpi prog.c –o prog.out
  ```

- 実行 (4プロセス = 4GPU)
  ```
  #PBS –l select=1:ncpus=4:mpiprocs=4:ngpus=4
  …
  mpiexec_mpt ./prog.out
  ```