

KOBE HPCサマースクール (初級)2025

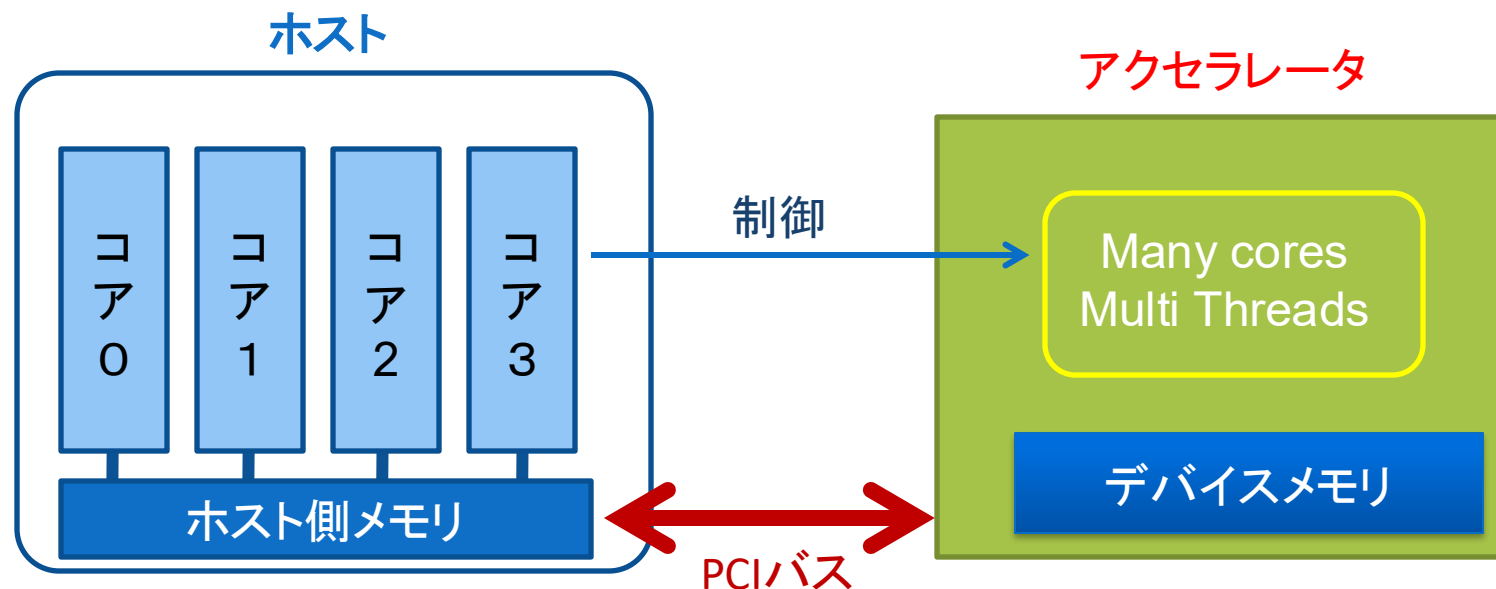
講義資料 2025/08/29

兵庫県立大学 情報科学研究科
安田 修悟

OpenACCによるアクセラレータ計算

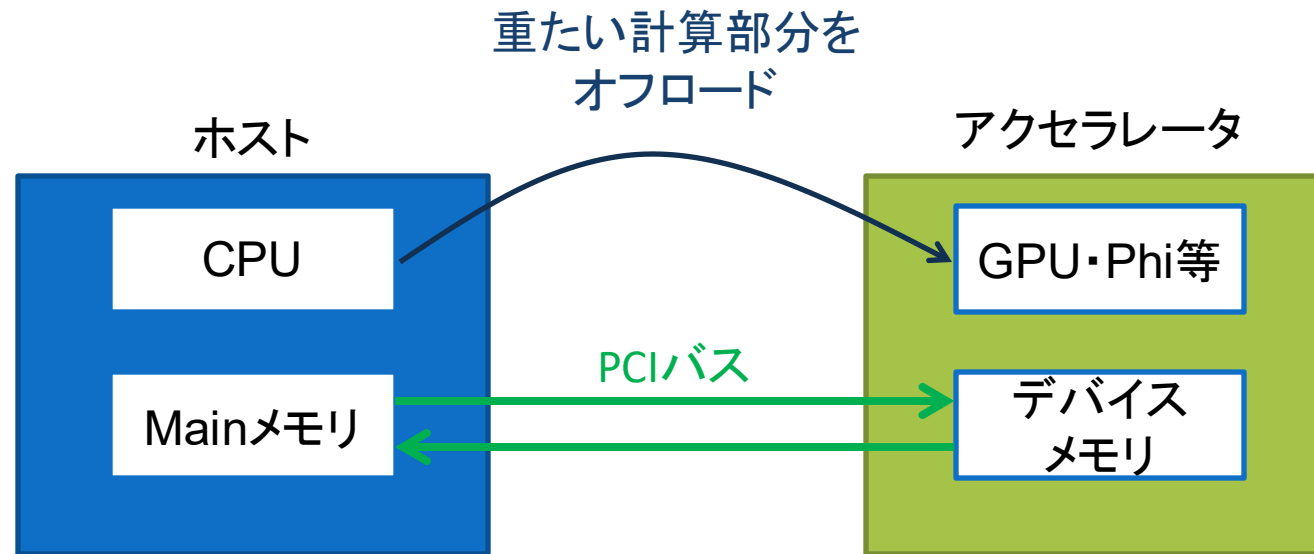
アクセラレータ

- 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
 - GPGPU (NVIDIA), Xeon Phi (Intel), APU (AMD)など



アクセラレータの実行イメージ

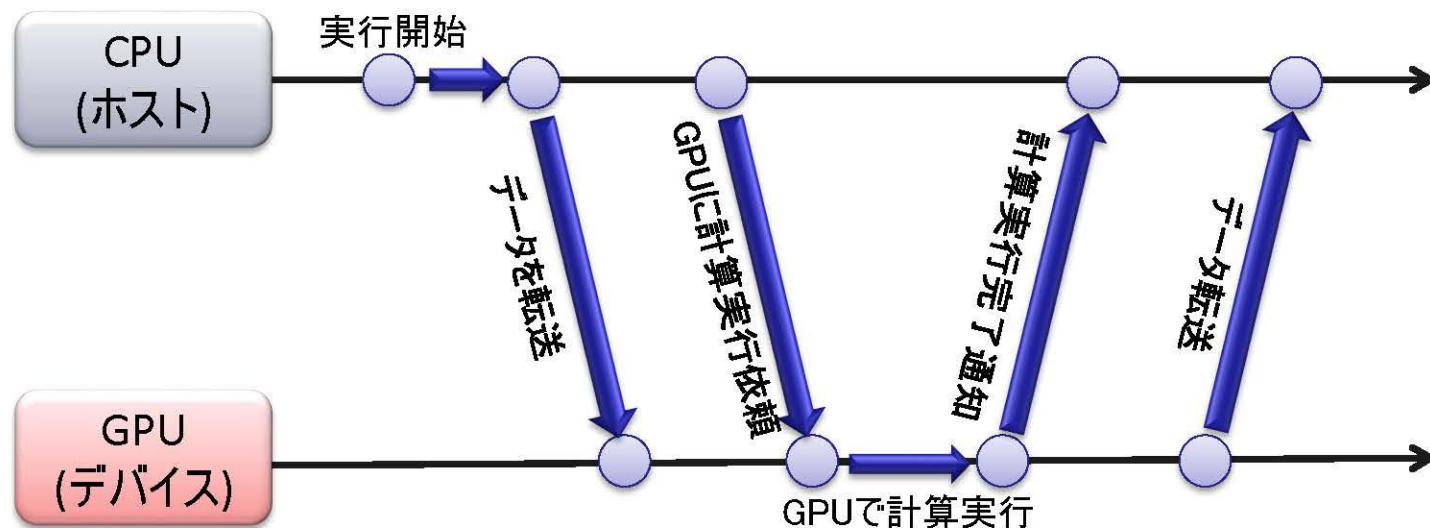
ハイブリット構成（CPU＋アクセラレータ）



※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)の計算に必要なデータは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

- 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

```
#pragma _acc_ kernels _copy(a)  
for(i=0;i<imax;i++){  
    a[i]=a[i]*a[i];  
    ....  
}
```

OpenACC

- 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

- “-O3”, “-O4”: より高度な最適化オプション

(“-fast”より後に入れる

例: `nvc -fast -O3 program.c`)

NVIDIA HPC SDK コンパイラー

- 環境変数(実行前に設定)
 - 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 -l -q G -l select=1:ncpus=N2:ngpus=N4`

- N₂: CPUコア数(1~40), N₄:GPUデバイス数(1~8)
- Ngpus=N₄を指定しない場合, GPUデ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    ▪ 利用するGPUカード数を指定
#PBS_-N_job_acc
#PBS_-j_oe
source_/etc/profile.d/modules.sh
module_purge                      ▪ 現在のモジュール環境を全て破棄
module_load_nvhpc                ▪ NVIDIA HPCコンパイラの環境設定
cd_${PBS_O_WORKDIR}
./a.out
```

OpenACCの演習 1

演習ファイル: </home/y273s011/share/2025/20250829.tar>

- OpenMPプログラム([gi_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([gi_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)を設定してデバイスの実行プロファイルを確認しなさい.

OpenACCの演習 2

- `gi2_acc.c`は`gi2_omp.c` のOpenMPのディレクティブ “`#pragma omp`”をOpenACCのディレクティブ “`#pragma acc kernels`”に変更したものです.

この二つを実行し, OpenMPの結果とOpenACCの結果を比較しなさい.

- OpenACCのデ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.

gi_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©out)

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

gi2_acc.cの実行プロファイル

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

**2回のdata構文が
ボトルネック!!**

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copyout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

- `gi2_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)`
`{`
`.....`
`}`
 2. Kernel構文でデータ属性を指示する.
 - `kernels present(f)`
 - `kernels present(f) copy(sum)`

修正gi3_acc.cの実行プロファイル

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

**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**

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.
.

(補足1) MPI / OpenACC の演習

演習ファイル: </home/y273s011/share/2025/20250829suppl.tar>

- `laplace_acc_mpi.c`
ラプラス方程式の右辺の値が下記のようにrankごとに異なるケースをMPI並列で同時に計算するコードを完成させなさい。

$$-\left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2}\right) = 2.5 * (\text{myrank} + 1)$$

- 実行して結果を可視化で確認せよ。

(補足1) MPI / OpenACCの実行

- Module環境

```
module load nvhpc/21.1    ※バージョンまで指定  
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
```

(補足1) OpenACC Runtime関数

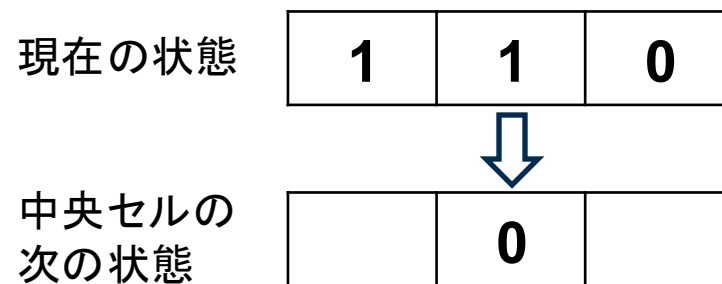
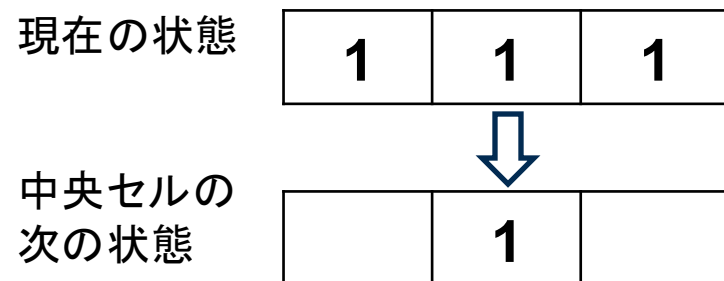
- `#include <openacc.h>`
- デバイスタイプを取得
`acc_device_t acc_get_device_type(void)`
- 利用するデバイスの総数を取得
`int acc_get_num_devices(acc_device_t t)`
- 利用するデバイスの番号をセット
`void acc_set_device_num(int n, acc_device_t t)`
- などなど

(補足2)セルオートマトン ルール184

- セルオートマトンとは、
格子状のセルと単純な規則による、離散的計算モデル。
現在の格子セルの状態から次の時刻の格子セルの状態が決まる。
- ルール184
 - 1つのセルに入ることの出来る車両は1台だけ。
 - 車両は1タイムステップで右に1セル分だけ進める。
 - 1つ先のセルに車両が存在すれば、次のタイムステップでは先のセルに進めず、そのセルに留まる。
 - 1つ先のセルに車両が存在しなければ、次のタイムステップに先のセルに進む。

(補足2)なぜルール184？

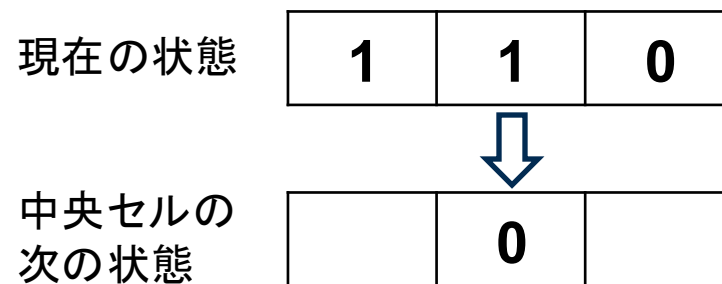
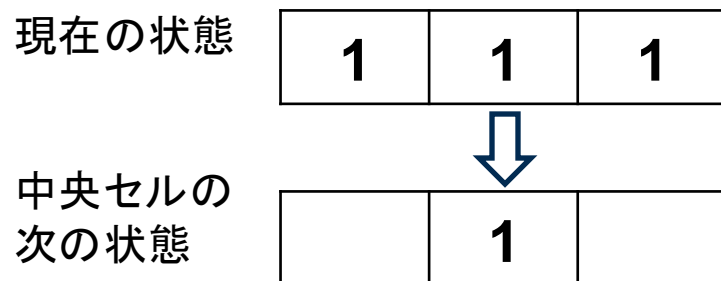
あるセルの次の状態はそのセルと前後のセルの現在の状態で決まる。



現在の状態	111	110	101	100	011	010	001	000
中央セルの次の状態	1	0						

(補足2)なぜルール184？

あるセルの次の状態はそのセルと前後のセルの現在の状態で決まる。



現在の状態	111	110	101	100	011	010	001	000
中央セルの次の状態	1	0	1	1	1	0	0	0

2進数の10111000を10進数に直すと184

(補足2) ルール184の演習

- ルール184のOpenACCコード `r184_acc.c`とMPIコード `r184_mpi.c`を完成させなさい.
- `r184_acc.c` : データ構文を完成させなさい.
- `r184_mpi.c` : `MPI_Allreduce( )`を完成させなさい.