OpenACCの紹介・Reedbush-Hお試し

東京大学情報基盤センター　准教授　塙　敏博

2019年7月17日（水）10:25 – 12:10

講義日程(工学部共通科目)

レポートおよびコンテスト課題
(締切:
2019年8月5日(月)24時 厳守

1. ~~4月9日: ガイダンス~~
2. ~~4月16日~~
   - ~~並列数値処理の基本演算(座学)~~
3. ~~4月23日:スパコン利用開始~~
   - ~~ログイン作業、テストプログラム実行~~
4. ~~5月7日~~
   - ~~高性能プログラミング技法の基礎1(階層メモリ、ループアンローリング)~~
5. ~~5月21日~~
   - ~~高性能プログラミング技法の基礎2(キャッシュブロック化)~~
6. ~~5月28日~~
   - ~~行列-ベクトル積の並列化~~
7. ~~6月4日~~
   - ~~べき乗法の並列化~~
8. ~~6月11日~~
   - ~~行列-行列積の並列化(1)~~
9. ~~6月25日~~
   - ~~行列ー行列積の並列化(2)~~
10. ~~7月2日~~
    - ~~LU分解法(1)~~
    - ~~コンテスト課題発表~~
11. ~~7月9日~~
    - ~~LU分解法(2)~~
12. ~~7月16日~~
    - ~~LU分解法(3)、非同期通信~~
13. 7月17日
    - RB-Hお試し、研究紹介他

GPUプログラミングの紹介

一部は本センターのGPU講習会資料から、です。

GPUを使った汎用計算: GPGPU

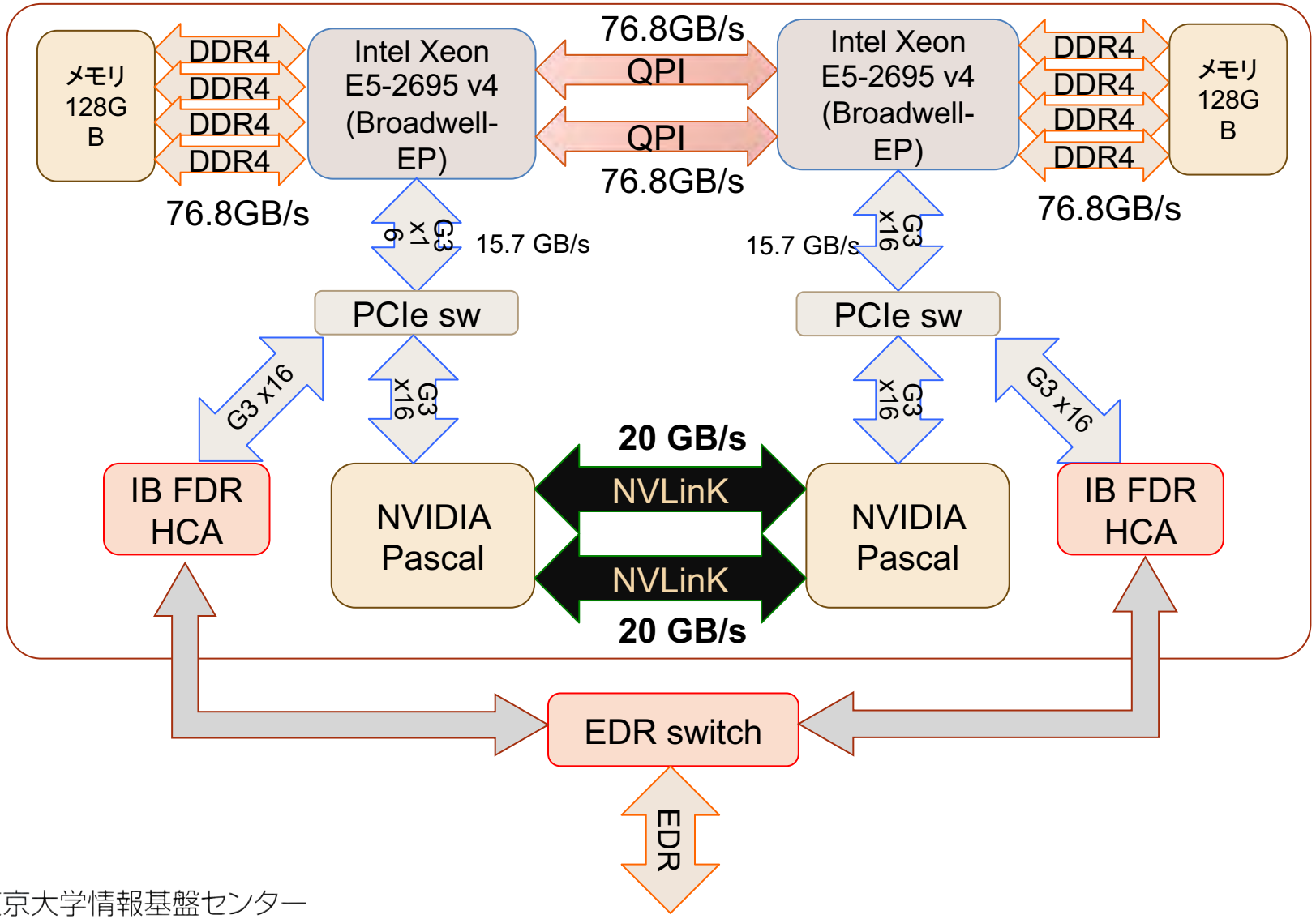
- GPU: Graphic Processing Unit, 画像処理用のハードウェア
  - 高速な描画、3次元画像処理など
- 3次元画像処理などに用いる演算を汎用計算に応用
  - 多数のピクセル（画素）に対して高速に計算するために、多数の演算器で並列処理 ➡ 数値計算に
- 10年程度で歴史は浅いが、HPCでは広く使われている
  - 最近では機械学習(Deep Learning)の主役に

Green 500 Ranking (November, 2018)

http://www.top500.org/

	TOP 500 Rank	System	Cores	HPL Rmax (Pflop/s)	Power (MW)	GFLOPS/W
1	374	Shoubu system B, Japan	953,280	1,063	60	17.604
2	373	DGX SaturnV Volta, USA	22,440	1,070	97	15.113
3	1	Summit, USA	2,397,824	143,500	9,783	14.668
4	7	ABCI, Japan	391,680	19,880	1,649	14.423
5	22	TSUBAME 3.0, Japan	135,828	8,125	792	13.704
6	2	Sierra, USA	1,572,480	94,640	7,438	12.723
7	444	AIST AI Cloud, Japan	23,400	961	76	12.681
8	409	MareNostrum P9 CTE, Spain	19,440	1,018	86	11.865
9	38	Advanced Computing System (PreE), China	163,840	4,325	380	11.382
10	20	Taiwania 2, Taiwan	170,352	900	798	11.285
-	-	Reedbush-L, U.Tokyo, Japan	16,640	806	79	10.167
-	-	Reedbush-H, U.Tokyo, Japan	17,760	802	94	8.576

Reedbush-Hノードのブロック図



なぜGPUコンピューティング？

- 性能が高いから！

	P100	BDW	KNL
動作周波数（GHz）	1.480	2.10	1.40
コア数（有効スレッド数）	3,584	18 (18)	68 (272)
理論演算性能（GFLOPS）	**5,304**	604.8	3,046.4
主記憶容量（GB）	16	128	16
メモリバンド幅（GB/sec., Stream Triad）	534	65.5	490
備考	Reedbush-HのGPU	Reedbush-U/HのCPU	Oakforest-PACSのCPU (Intel Xeon Phi)

GPUプログラミングは何が難しい？

- CPU：大きなコアをいくつか搭載
  - Reedbush-H の CPU : 2.10 GHz 18コア
  - 大きなコア… 分岐予測、パイプライン処理、Out-of-Order
    - 要はなんでもできる
  - 逐次の処理が得意
- GPU：小さなコアをたくさん搭載
  - Reedbush-H の GPU：1.48 GHz 3,584 コア
  - 小さなコア… 上記機能が**弱い, またはない！**
  - **並列処理が必須**

GPUの難しさ
1. 並列プログラミング自体の難しさ
2. 多数のコアを効率良く扱う難しさ

参考：NVIDIA Tesla P100

- 56 SMs
- 3584 CUDA Cores
- 16 GB HBM2

P100 whitepaperより

参考：NVIDIA Tesla P100 の SM

GPU TECHNOLOGY CONFERENCE

GP100 SM

	GP100
CUDA Cores	64
Register File	256 KB
Shared Memory	64 KB
Active Threads	2048
Active Blocks	32

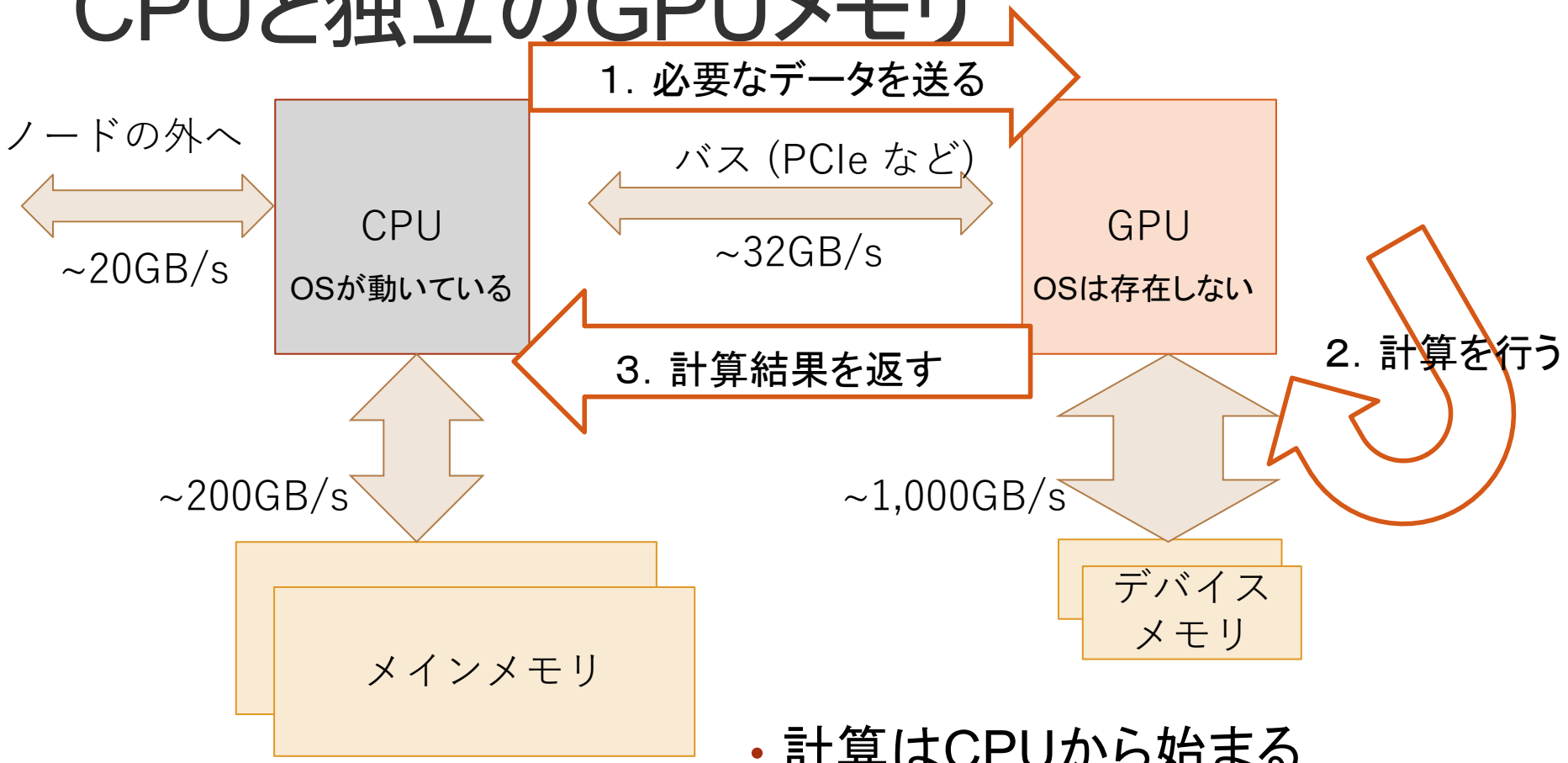
参考：NVIDIA社のGPU

- 製品シリーズ
  - GeForce
    - コンシューマ向け。安価。
  - Tesla
    - HPC向け。倍精度演算器、大容量メモリ、ECCを備えるため高価。
- アーキテクチャ（世代）
  1. Tesla：最初のHPC向けGPU、TSUBAME1.2など
  2. Fermi：2世代目、TSUBAME2.0など
     - ECCメモリ、FMA演算、L1 L2 キャッシュ
  3. Kepler：現在HPCにて多く利用、TSUBAME2.5など
     - シャッフル命令、Dynamic Parallelism、Hyper-Q
  4. Maxwell：コンシューマ向けのみ
  5. Pascal：最新GPU、Reedbush-Hに搭載
     - HBM2、半精度演算、NVLink、倍精度atomicAdd など
  6. Volta：次世代GPU
     - Tensor Coreなど

押さえておくべきGPUの特徴

- CPUと独立のGPUメモリ
- 性能を出すためにはスレッド数>>コア数
- 階層的スレッド管理と同期
- Warp 単位の実行
- やってはいけないWarp内分岐
- コアレスドアクセス

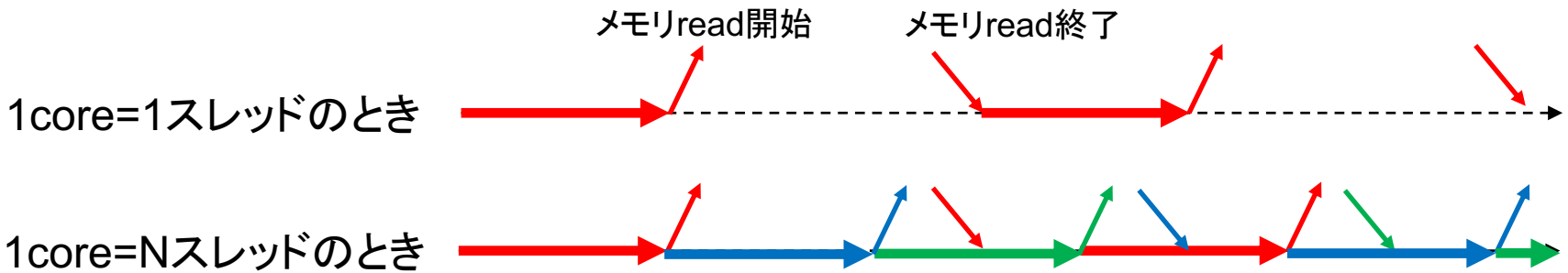
CPUと独立のGPUメモリ



- 計算はCPUから始まる
- 物理的に独立のデバイスメモリとデータのやり取り必須

性能を出すためにはスレッド数>>コア数

- 推奨スレッド数
  - CPU: スレッド数=コア数 (高々数十スレッド)
  - GPU: スレッド数>=コア数*4~ (数万~数百万スレッド)
    - 最適値は他のリソースとの兼ね合いによる
- 理由:高速コンテキストスイッチによるメモリレイテンシ隠蔽
  - CPU:レジスタ・スタックの退避はOSがソフトウェアで行う(遅い)
  - GPU:ハードウェアサポートでコストほぼゼロ
    - メモリアクセスによる暇な時間(ストール)に他のスレッドを実行



階層的スレッド管理と同期

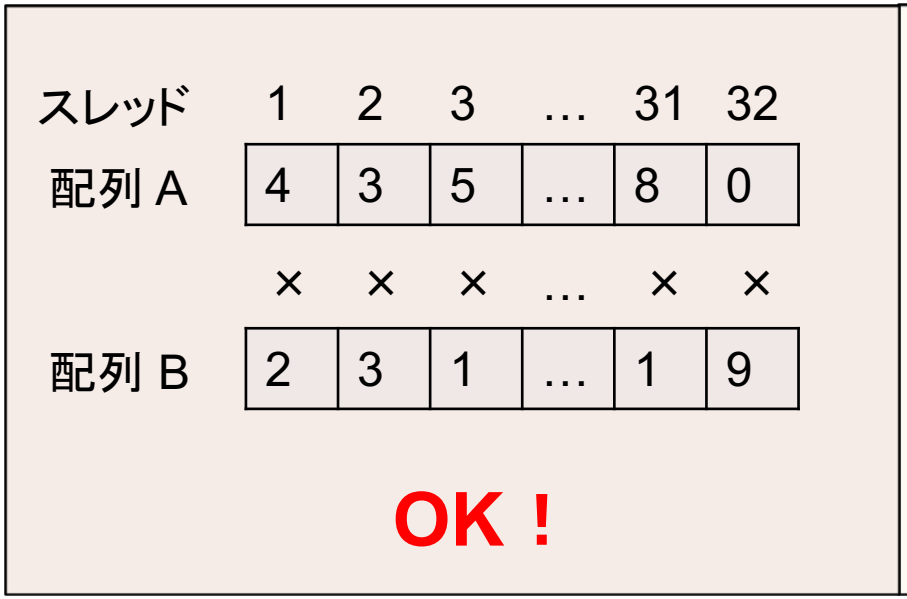
値はP100の場合

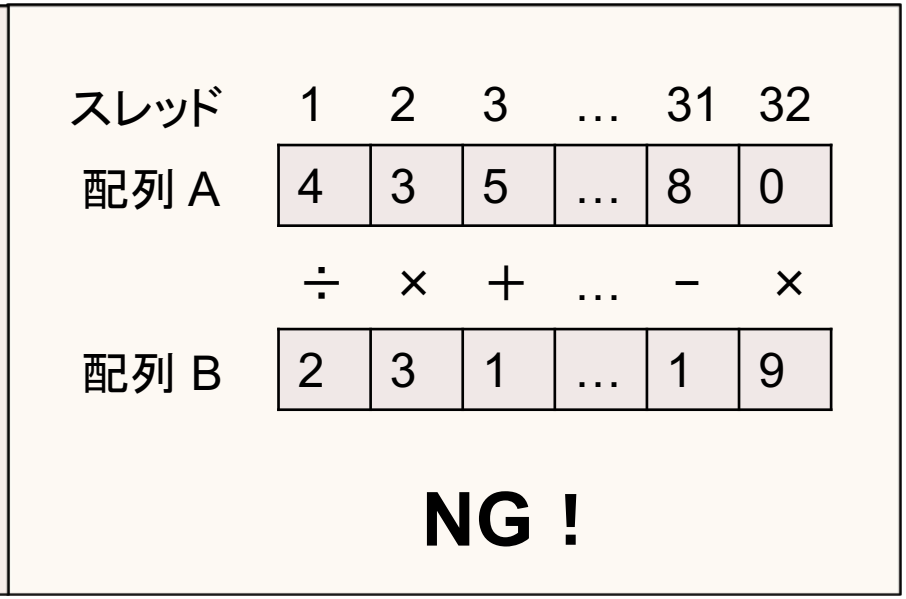
- コアの管理に対応
  - 1 SM の中に 64 CUDA core、56 SM で 3584 CUDA core
  - 1 CUDA core が複数スレッドを担当
- スレッド間の同期
  - 同一SM内のスレッド間は同期できる
    - 正確には同一スレッドブロック内
  - 異なるSMのスレッド間は同期できない
    - 同期するためにはGPUの処理を終了する必要あり
    - atomic 演算は可能
- メモリ資源の共有
  - L1 cache, shared memory, Instruction cache などはSM内で共有
  - L2 cache, Device memory などは全スレッドで共有

Warp 単位の実行

- 連続した32スレッドを1単位 = Warp と呼ぶ
- このWarpは足並み揃えて動く
  - 実行する命令は32スレッド全て同じ
  - データは違っていい

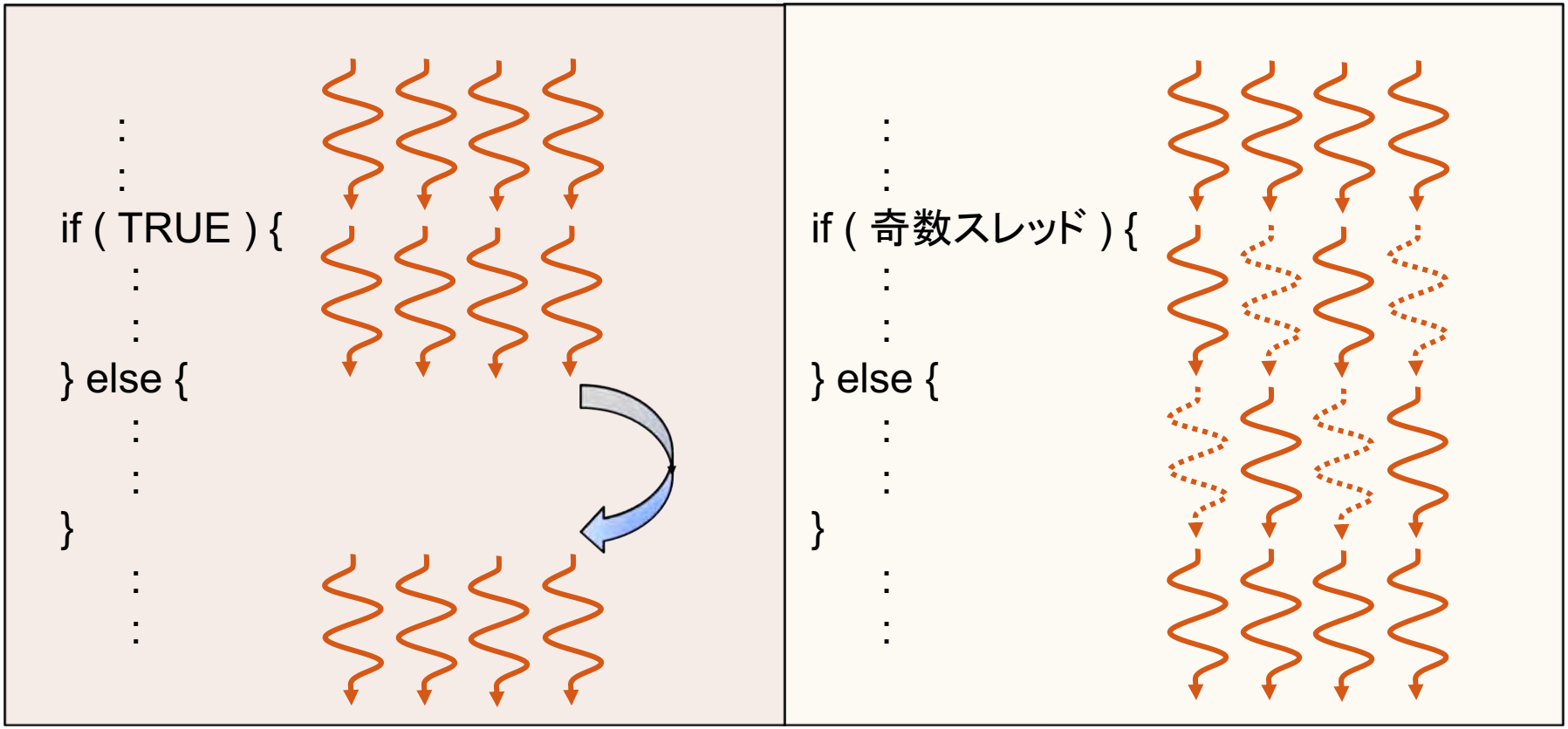
Volta世代からは実装が変わったので注意：
各スレッドが独立して動作可能
但し資源が競合すれば待つことには変わらない





やってはいけないWarp内分岐

- Divergent Branch
  - Warp 内で分岐すること。Warp単位の分岐ならOK。

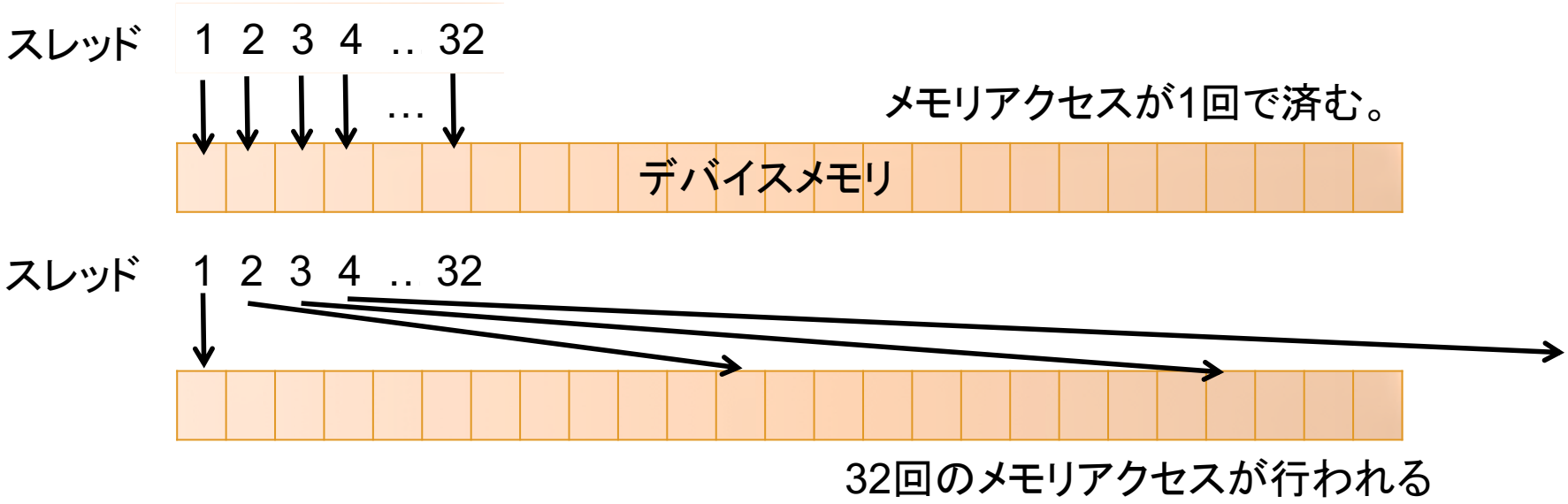


else 部分は実行せずジャンプ

一部スレッドを眠らせて全分岐を実行
最悪ケースでは32倍のコスト

コアレスドアクセス

- 同じWarp内のスレッドが近いアドレスに同時にアクセスするのがメモリの性質上効率的
  - これをコアレスドアクセス(coalesced access)と呼ぶ



128バイト単位でメモリアクセス。Warp内のアクセスが128バイトに収まってれば1回。外れればその分だけ繰り返す。最悪ケースでは32倍のコスト

GPU向けプログラミング環境

- CUDA (Compute Unified Device Architecture)
  - NVIDIAのGPU向け開発環境。C言語版はCUDA Cとして NVIDIAから、Fortran版はCUDA FortranとしてPGI(現在は NVIDIAの子会社)から提供されている。
- OpenACC：指示文を用いて並列化を行うプログラミング環境。C言語とFortranの両方の仕様が定められている。PGIコンパイラなど幾つかのコンパイラが対応。（GPUが主なターゲットだが）GPU専用言語ではない。
  - （特に単純なプログラムにおいては）OpenACCでもCUDAでも同様の性能が出ることもあるが、一般的にはCUDAの方が高速
  - レガシーコードがある場合はOpenACCで書く方がはるかに楽

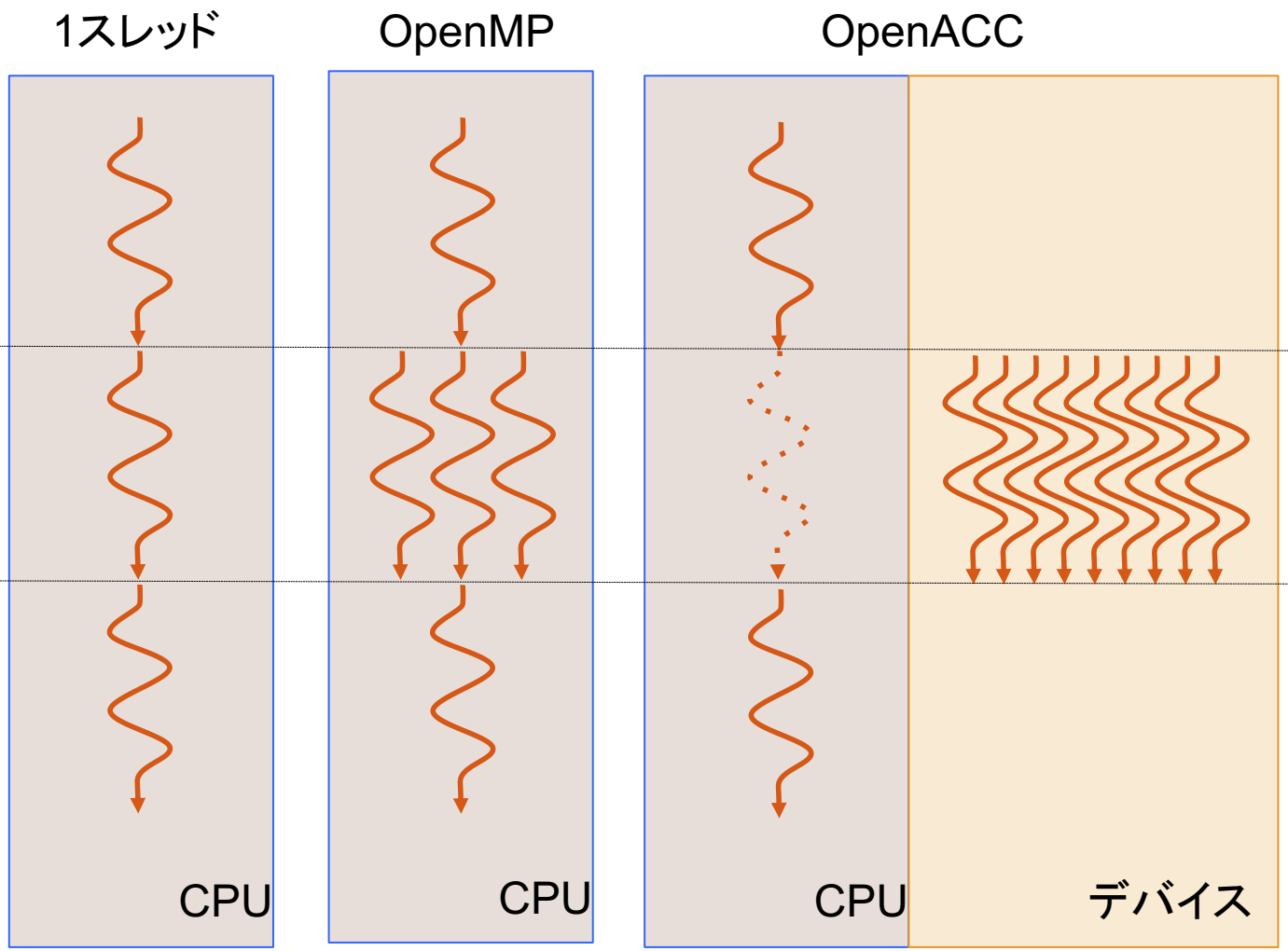
OpenACC

- 規格
  - 各コンパイラベンダ(PGI, Crayなど)が独自に実装していた拡張を統合し共通規格化 (http://www.openacc.org/)
  - 2011年秋にOpenACC 1.0 最新の仕様はOpenACC 2.5
- 対応コンパイラ
  - 商用：PGI, Cray, PathScale
    - PGI は無料版も出している
  - 研究用：Omni (AICS), OpenARC (ORNL), OpenUH (U.Houston)
  - フリー：GCC 6.x
    - 開発中 (開発状況： https://gcc.gnu.org/wiki/Offloading)
    - 実用にはまだ遠い

RB-HではPGIコンパイラを用いる

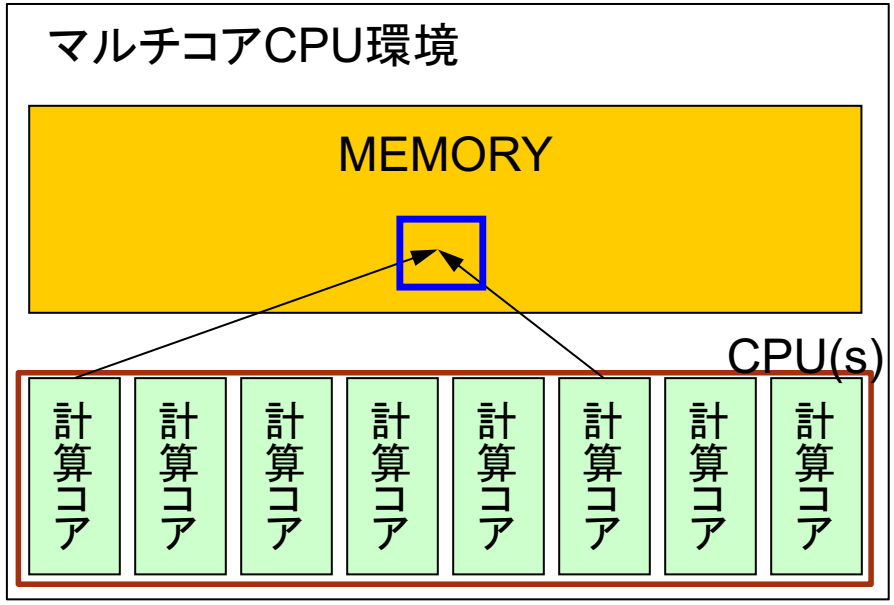
OpenACC と OpenMP の実行イメージ比較

```
int main() {


#pragma …
  for(i = 0;i < N;i++)
{

      …

  }


}
```



OpenACC と OpenMP の比較

OpenMPの想定アーキテクチャ

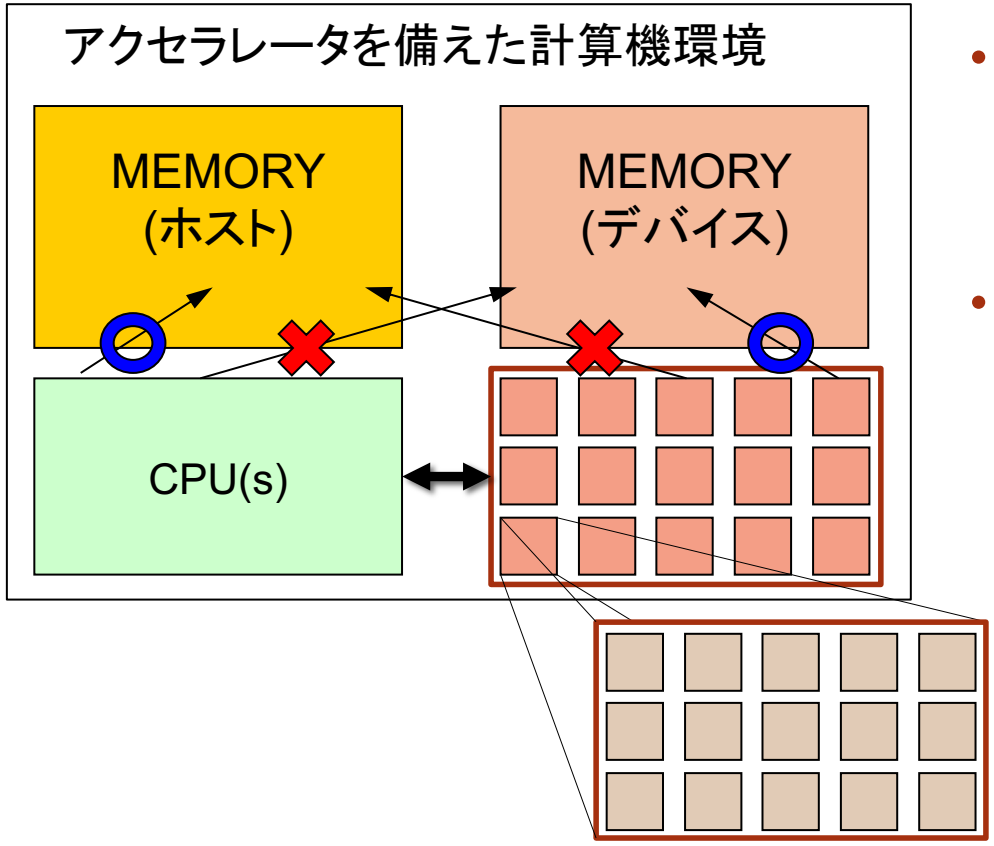


- 計算コアがN個
  - N < 100 程度 (Xeon Phi除く)
- 共有メモリ

一番の違いは対象アーキテクチャの複雑さ

OpenACC と OpenMP の比較

OpenACC の想定アーキテクチャ



- 計算コアN個をM階層で管理
  - N > 1000 を想定
  - 階層数Mはアクセラレータによる
- ホスト-デバイスで独立したメモリ
  - ホスト-デバイス間データ転送は低速

一番の違いは対象アーキテクチャの複雑さ

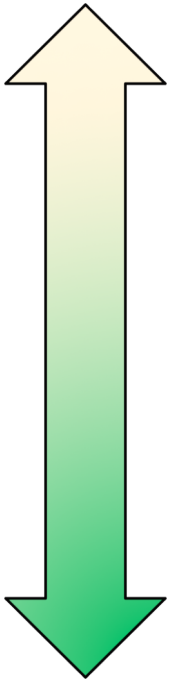
OpenACC と OpenMP の比較

- OpenMPと同じもの
  - Fork-Joinという概念に基づくループ並列化
- OpenMPになくてOpenACCにあるもの
  - ホストとデバイスという概念
    - ホスト-デバイス間のデータ転送
  - 多階層の並列処理
- OpenMPにあってOpenACCにないもの
  - スレッドIDを用いた処理など
    - OpenMPのomp_get_thread_num()に相当するものが無い
- その他、気をつけるべき違い
  - OpenMPと比べてOpenACCは勝手に行うことが多い
    - 転送データ、並列度などを未指定の場合は勝手に決定

OpenACC と OpenMP の比較 デフォルトでの変数の扱い

- OpenMP
  - 全部 shared
- OpenACC
  - スカラ変数：firstprivate or private
  - 配列：shared
    - プログラム上のparallel/kernels構文に差し掛かった時、OpenACCコンパイラは実行に必要なデータを自動で転送する
    - 正しく転送されないこともある。自分で書くべき
    - 構文に差し掛かるたびに転送が行われる(非効率)。後述のdata指示文を用いて自分で書くべき
    - 配列はデバイスに確保される (shared的振る舞い)
    - 配列変数をprivateに扱うためには private 指示節使う

GPUプログラミング難易度早見表



OpenACC	OpenMP
OpenACC with Unified Memory	omp parallel do 書くだけ
データマネージメントの壁	
OpenACC with データ指示文	
スレッド制御の壁	
OpenACC のカーネルチューニング	指示文を用いたSIMD化
カーネルのCUDA化	
	intrinsic を用いたSIMD化

Reedbush-Hの利用開始

OFPとの違いを中心に

鍵の登録(1/2)

1. ブラウザを立ち上げる
2. 以下のアドレスを入力する
   https://reedbush-www.cc.u-tokyo.ac.jp/
3. 「ユーザ名」にセンターから配布された、“利用者番号”をいれる。
4. 「パスワード」に、センターから配布された“パスワード”を入力する。
   なお、記載されているパスワードは
   パスワードではない。

Reedbushへログイン

- ターミナルから、以下を入力する
  $ ssh reedbush.cc.u-tokyo.ac.jp -l tYYxxx
  「-l」はハイフンと小文字のL、
  「tYYxxx」は利用者番号（数字）
  “tYYxxx”は、利用者番号を入れる
- 接続するかと聞かれるので、 yes を入れる
- 鍵の設定時に入れた
  自分が決めたパスワード（パスフレーズ）
  を入れる
- 成功すると、ログインができる

バッチキューの設定のしかた

- バッチ処理は、Altair社のバッチシステム PBS Professional で管理されています。
- 以下、主要コマンドを説明します。
  - ジョブの投入：
    qsub <ジョブスクリプトファイル名>
  - 自分が投入したジョブの状況確認： rbstat
  - 投入ジョブの削除： qdel <ジョブID>
  - バッチキューの状態を見る： rbstat --rsc
  - バッチキューの詳細構成を見る： rbstat –rsc -x
  - 投げられているジョブ数を見る： rbstat -b
  - 過去の投入履歴を見る： rbstat –H
  - 同時に投入できる数／実行できる数を見る： rbstat --limit

OFPとの対応：

pjsub => qsub
pjstat => rbstat

JOBスクリプトサンプルの説明（ピュアMPI）

（hello-pure.bash, C言語、Fortran言語共通）

```
#!/bin/bash
#PBS -q h-lecture
#PBS -Wgroup_list=gt16
#PBS -l select=8:mpiprocs=36
#PBS -l walltime=00:01:00
cd $PBS_O_WORKDIR
. /etc/profile.d/modules.sh

mpirun ./hello
```

リソースグループ名
：h-lecture

利用グループ名
：gt16

利用ノード数

ノード内利用コア数
（MPIプロセス数）

実行時間制限
：1分

MPIジョブを8＊36 = 288 プロセスで実行する。

カレントディレクトリ設定、環境変数設定（必ず入れておく）

本講義でのキュー名

- 本演習中のキュー名：
  - h-lecture6
  - 最大10分まで
  - 最大ノード数は2ノード(4GPU) まで
- 本演習時間以外（24時間）のキュー名：
  - h-lecture
- 利用条件は演習中のキュー名と同様

Reedbushにおける注意

- /home ファイルシステムは容量が小さく、ログインに必要なファイルだけを置くための場所です。
- /home に置いたファイルは計算ノードから参照できません。ジョブの実行もできません。

=> ログイン後は /lustre ファイルシステムを使ってください。

- ホームディレクトリ: /home/gt16/t16XXX
  - cd コマンドで移動できます。
- Lustreディレクトリ: /lustre/gt16/t16XXX
  - cdw コマンドで移動できます。

OpenACC の指示文

OpenACC の主要な指示文

- 並列領域指定指示文
  - kernels, parallel
- データ移動最適化指示文
  - data, enter data, exit data, update
- ループ最適化指示文
  - loop
- その他、比較的よく使う指示文
  - host_data, atomic, routine, declare

並列領域指定指示文：parallel, kernels

- アクセラレータ上で実行すべき部分を指定
  - OpenMPのparallel指示文に相当
- 2種類の指定方法：parallel, kernels
  - parallel：(どちらかというと) マニュアル
    - OpenMP に近い
    - 「ここからここまでは並列実行領域です。並列形状などはユーザー側で指定します」
  - kernels：(どちらかというと) 自動的
    - 「ここからここまではデバイス側実行領域です。あとはお任せします」
  - 細かい指示子・節を加えていくと最終的に同じような挙動になるので、どちらを使うかは好み
    - どちらかというとkernels推奨

kernels/parallel 指示文

kernels

```
program main

!$acc kernels
    do i = 1, N
        ! loop body
    end do
!$acc end kernels

end program
```

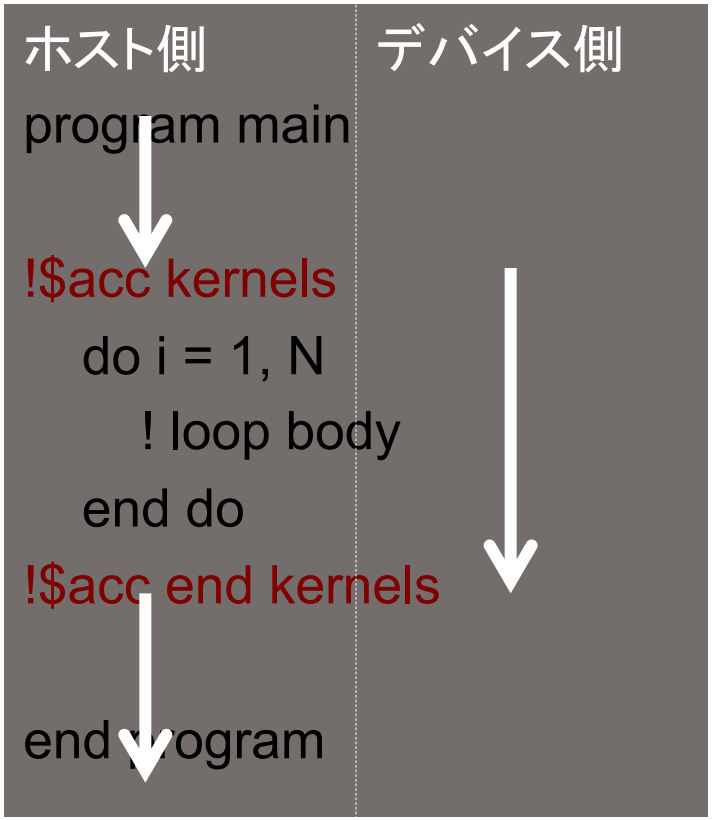
parallel

```
program main

!$acc parallel num_gangs(N)
!$acc loop gang
    do i = 1, N
        ! loop body
    end do
!$acc end parallel

end program
```

kernels/parallel 指示文

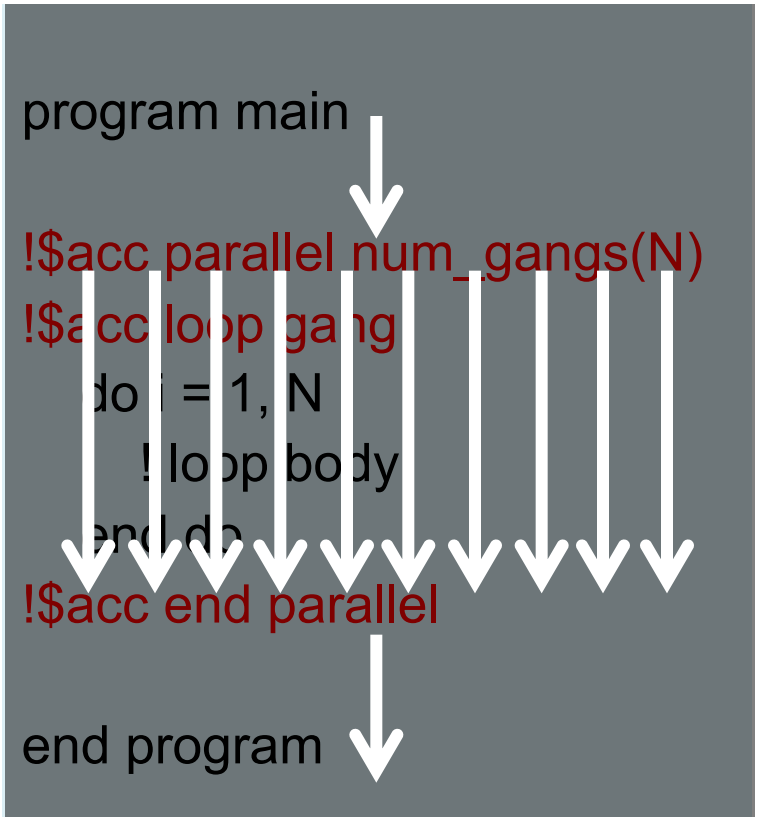
- ホスト-デバイスを意識するのがkernels
- 並列実行領域であることを意識するのがparallel

kernels



「並列数はデバイスに合わせてください」

parallel



「並列数Nでやってください」

kernels/parallel 指示文：指示節

kernels

- async
- wait
- device_type
- if
- default(none)
- copy…

parallel

- async
- wait
- device_type
- if
- default(none)
- copy…
- num_gangs
- num_workers
- vector_length
- reduction
- private
- firstprivate

kernels/parallel 指示文：指示節

kernels

非同期実行に用いる。

- async
- wait

実行デバイス毎にパラメータを調整

- device_type
- if

データ指示文の機能を使える

- default(none)
- copy…

parallelでは並列実行領域であることを意識するため、並列数や変数の扱いを決める指示節がある。

parallel

- num_gangs
- num_workers
- vector_length
- reduction
- private
- firstprivate

kernels/parallel 実行イメージ

Fortran

```
subroutine copy(dst, src)
  real(4), dimension(:) :: dst, src

!$acc kernels copy(src,dst)
   do i = 1, N
      dst(i) = src(i)
   end do
!$acc end kernels

end subroutine copy
```

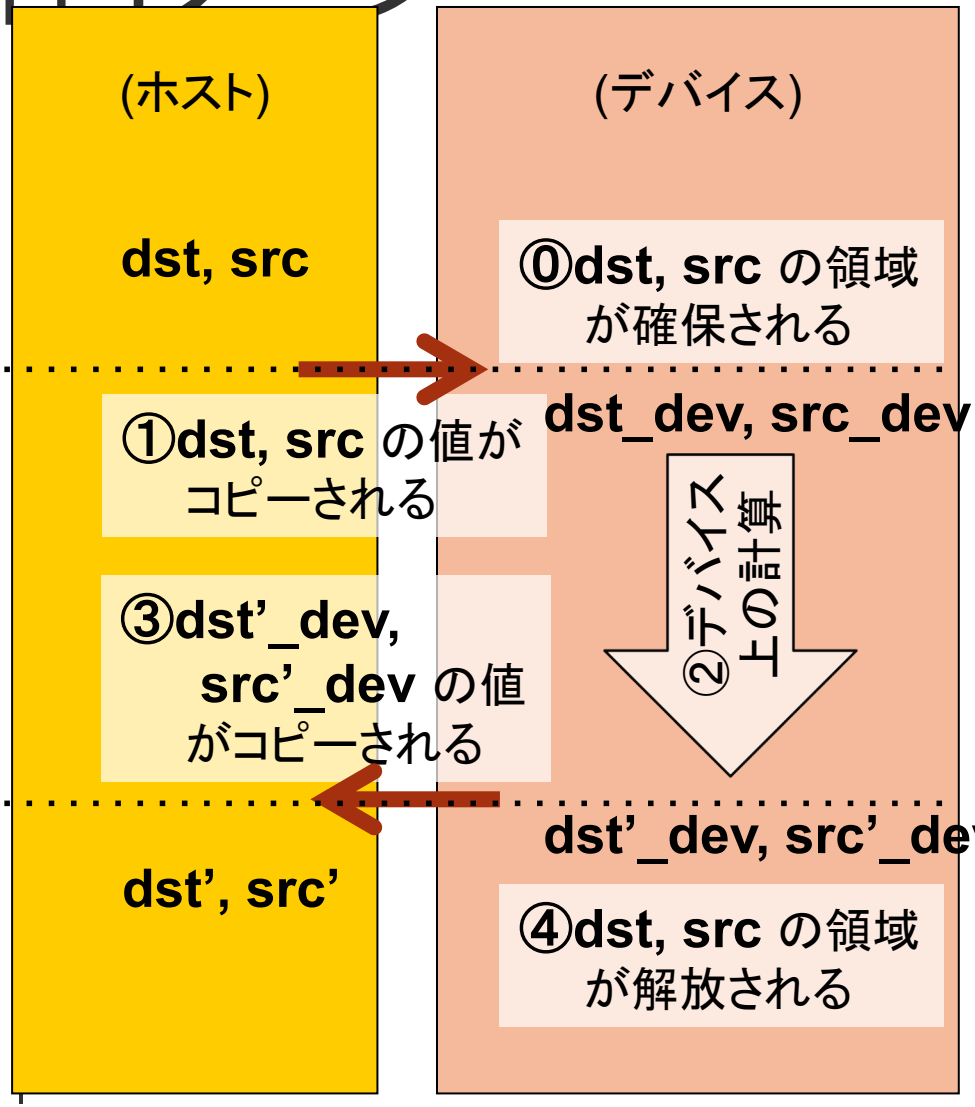
C言語

```
void copy(float *dst, float *src) {
  int i;

#pragma acc kernels copy(src[0:N] ¥
    dst[0:N])
      for(i = 0;i < N;i++){
        dst[i] = src[i];
      }

}
```

kernels/parallel 実行イメージ

Fortran

```
subroutine copy(dst, src)
  real(4), dimension(:) :: dst, src

!$acc kernels copy(src,dst)
  do i = 1, N
    dst(i) = src(i)
  end do
!$acc end kernels

end subroutine copy
```



デバイス上で扱うデータについて

- プログラム上のparallel/kernels構文に差し掛かった時、OpenACCコンパイラは実行に必要なデータを自動で転送する
  - 正しく転送されないこともある。自分で書くべき
  - 構文に差し掛かるたびに転送が行われる(非効率)。後述のdata指示文を用いて自分で書くべき
  - 自動転送はdefault(none)で抑制できる
- スカラ変数は firstprivate として扱われる
  - 指示節により変更可能
- 配列はデバイスに確保される (shared的振る舞い)
  - 配列変数をスレッドローカルに扱うためには private を指定する

データ移動最適化指示文が必要なとき

Fortran

```
subroutine copy(dst, src)
  real(4), dimension(:) :: dst, src
  do j = 1, M
!$acc kernels copy(src,dst)
      do i = 1, N
          dst(i) = dst(i) + src(i)
      end do
!$acc end kernels
  end do
end subroutine copy
```

C言語

```
void copy(float *dst, float *src) {
  int i, j;
  for(j = 0;j < M;j++){
#pragma acc kernels copy(src[0:N] ¥
    dst[0:N])
      for(i = 0;i < N;i++){
          dst[i] = dst[i] + src[i];
      }
  }
}
```

Kernels をループで囲むと，
HtoD転送=>計算=>DtoH転送
の繰り返し…

data指示文

Fortran

```
subroutine copy(dst, src)
  real(4), dimension(:) :: dst, src
!$acc data copy(src,dst)
  do j = 1, M
!$acc kernels present(src,dst)
      do i = 1, N
          dst(i) = dst(i) + src(i)
      end do
!$acc end kernels
  end do
!$acc end data
end subroutine copy
```

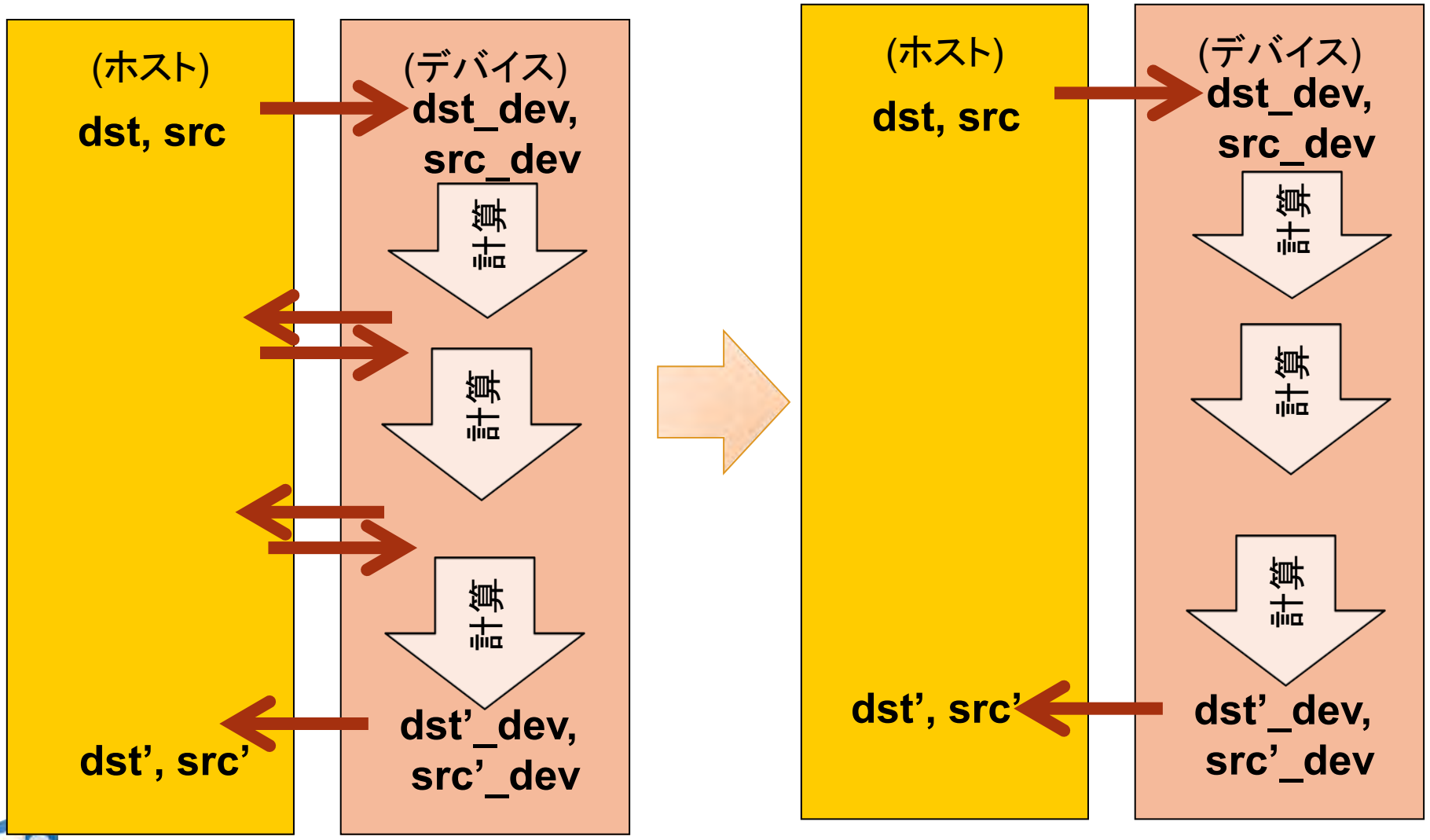
present: 既に転送済であることを示す

C言語

```
void copy(float *dst, float *src) {
  int i, j;
#pragma acc data copy(src[0:N] ¥
    dst[0:N])
  {
  for(j = 0;j < M;j++){
#pragam acc kernels
present(src,dst)
      for(i = 0;i < N;i++){
          dst[i] = dst[i] + src[i];
      }
  }
  }
}
```

Cの場合、data指示文の範囲は{}で指定
(この場合はforが構造ブロックになってるのでなくても大丈夫だが)

data指示文の効果


(ホスト)
dst, src
(デバイス)
dst_dev,
src_dev
計算
計算
計算
dst', src'
dst'_dev,
src'_dev
(ホスト)
dst, src
(デバイス)
dst_dev,
src_dev
計算
計算
計算
dst', src'
dst'_dev,
src'_dev

データ移動指示文:データ転送範囲指定

- 送受信するデータの範囲の指定
  - 部分配列の送受信が可能
  - 注意:FortranとCで指定方法が異なる
- 二次元配列Aを転送する例

Fortran版

```
!$acc data copy(A(lower1:upper1, lower2:upper2) )
  …
!$acc end data
```

fortranでは下限と上限を指定

C版

```
#pragma acc data copy(A[start1:length1][start2:length2])
 {
  …
}
```

Cでは先頭と長さを指定

階層的並列モデルとループ指示文

- OpenACC ではスレッドを階層的に管理
  - gang, worker, vector の3階層
  - gang：workerの塊 一番大きな単位
  - worker：vectorの塊
  - vector：スレッドに相当する一番小さい処理単位
- loop 指示文
  - parallel/kernels中のループの扱いについて指示
    - パラメータの設定はある程度勝手にやってくれる
  - 粒度(gang, worker, vector)の指定
  - ループ伝搬依存の有無の指定

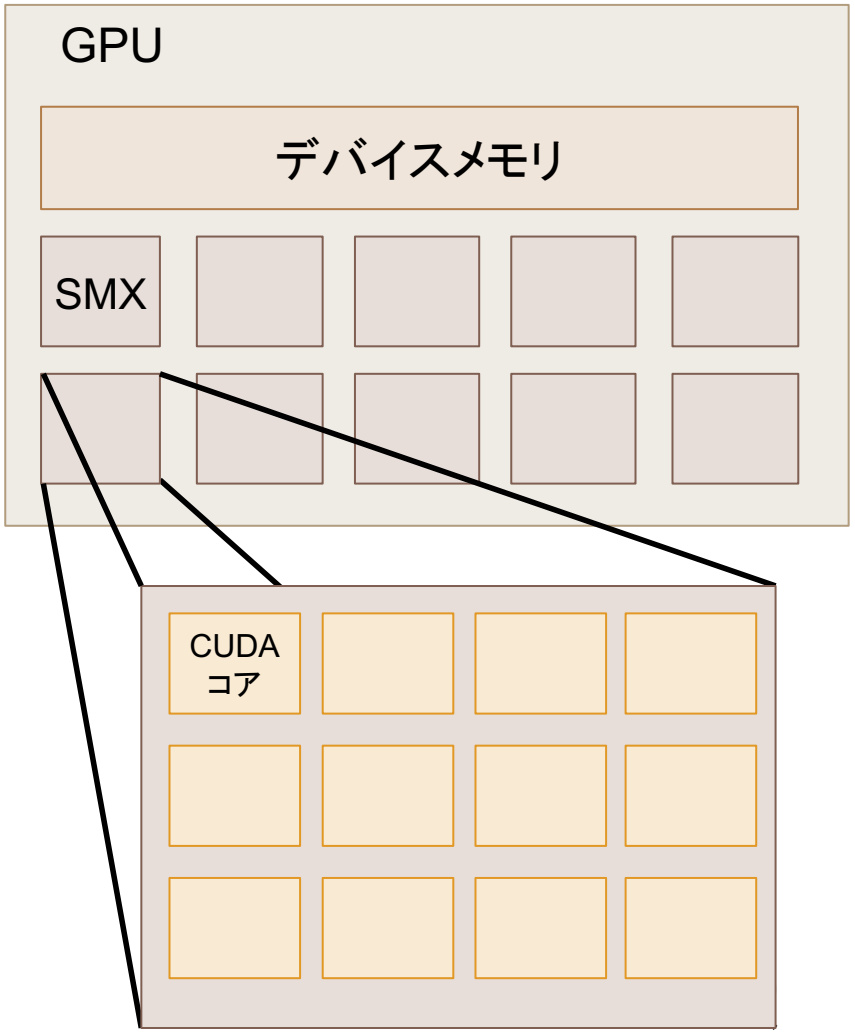
GPUでの行列積の例

```
!$acc kernels
!$acc loop gang
   do j = 1, n
!$acc loop vector
      do i = 1, n
         cc = 0
!$acc loop seq
         do k = 1, n
            cc = cc + a(i,k) * b(k,j)
         end do
         c(i,j) = cc
      end do
   end do
!$acc end kernels
```

階層的並列モデルとアーキテクチャ

- OpenMPは1階層
  - マルチコアCPUも1階層
  - 最近は2階層目(SIMD)がある
- CUDAは block と thread の2階層
  - NVIDA GPUも2階層
    - 1 SMX に複数CUDA coreを搭載
    - 各コアはSMXのリソースを共有
- OpenACCは3階層
  - 様々なアクセラレータに対応するため

- NVIDIA GPUの構成



OpenACC と Unified Memory

- Unified Memory とは…
  - 物理的に別物のCPUとGPUのメモリをあたかも一つのメモリのように扱う機能
  - Pascal GPUではハードウェアサポート
    - ページフォルトが起こると勝手にマイグレーションしてくれる
    - Kepler以前も使えるが，ソフトウェア処理なのでひどく遅い
- OpenACC と Unified Memory
  - OpenACCにUnified Memoryを直接使う機能はない
  - PGIコンパイラに managed オプションを与えることで使える
    - pgfortran –acc –ta=tesla,managed
  - 使うとデータ指示文が無視され、代わりにUnified Memoryを使う

Unified Memoryのメリット・デメリット

- メリット
  - データ移動の管理を任せられる
  - ポインタなどの複雑なデータ構造を簡単に扱える
    - 本来はメモリ空間が分かれているため、ディープコピー問題が発生する
- デメリット
  - ページ単位で転送するため、細かい転送が必要な場合には遅くなる
  - CPU側のメモリ管理を監視しているので、allocate, deallocateを繰り返すアプリではCPU側が極端に遅くなる

OpenACCへの アプリケーション移植方法

アプリケーションのOpenACC化手順

1. プロファイリングによるボトルネック部位の導出
2. ボトルネック部位のOpenACC化
   1. 並列化可能かどうかの検討
   2. (OpenACCの仕様に合わせたプログラムの書き換え)
   3. parallel/kernels指示文適用
3. data指示文によるデータ転送の最適化
4. OpenACCカーネルの最適化

   １～４を繰り返し適用。それでも遅ければ、

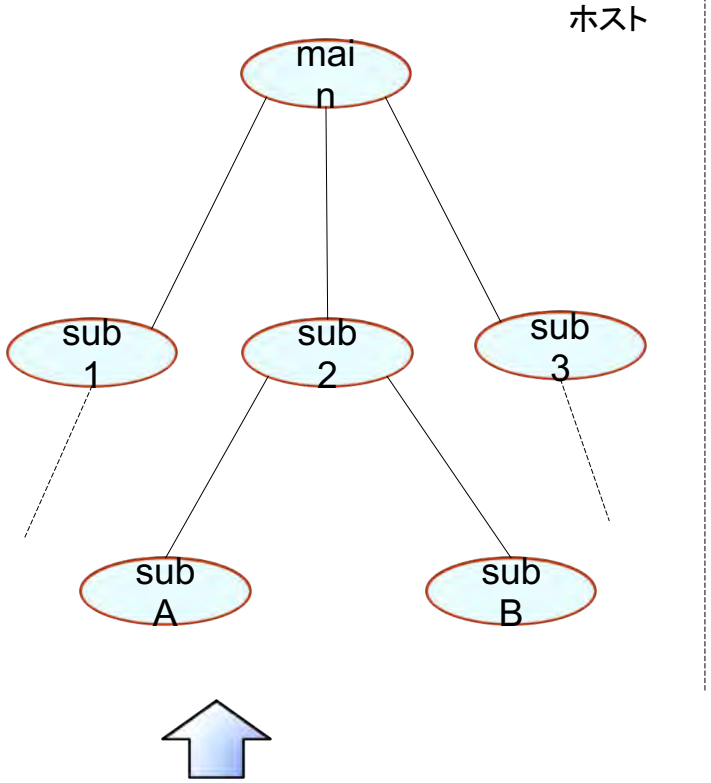
5. カーネルのCUDA化
   - スレッド間の相互作用が多いアプリケーションでは、shared memory や shuffle 命令を自由に使えるCUDAの方が圧倒的に有利

既にOpenMP化されているアプリケーションのOpenACC化手順

1. !$omp parallel を!$acc kernelsに機械的に置き換え
2. Unified Memory を使い、とりあえずGPU上で実行
3. コンパイラのメッセージを見ながら、OpenACCカーネルの最適化
4. データ指示文を用いて転送の最適
5. カーネルのCUDA化
   - スレッド間の相互作用が多いアプリケーションでは、shared memory や shuffle 命令を自由に使えるCUDAの方が圧倒的に有利

データ指示文による最適化手順

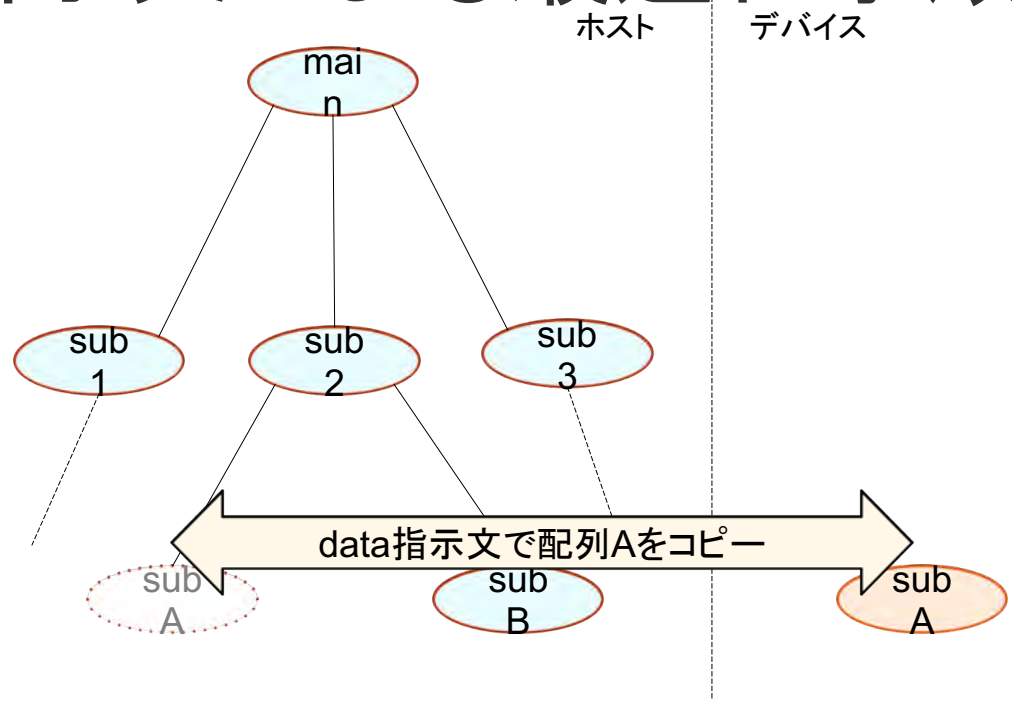
```
int main(){
   double A[N];
   sub1(A);
   sub2(A);
   sub3(A);
}

sub2(double A){
   subA(A);
   subB(A);
}

subA(double A){

   for( i = 0 ~ N ) {
      …
   }
}
```



葉っぱの部分から
OpenACC化を始める

データ指示文による最適化手順

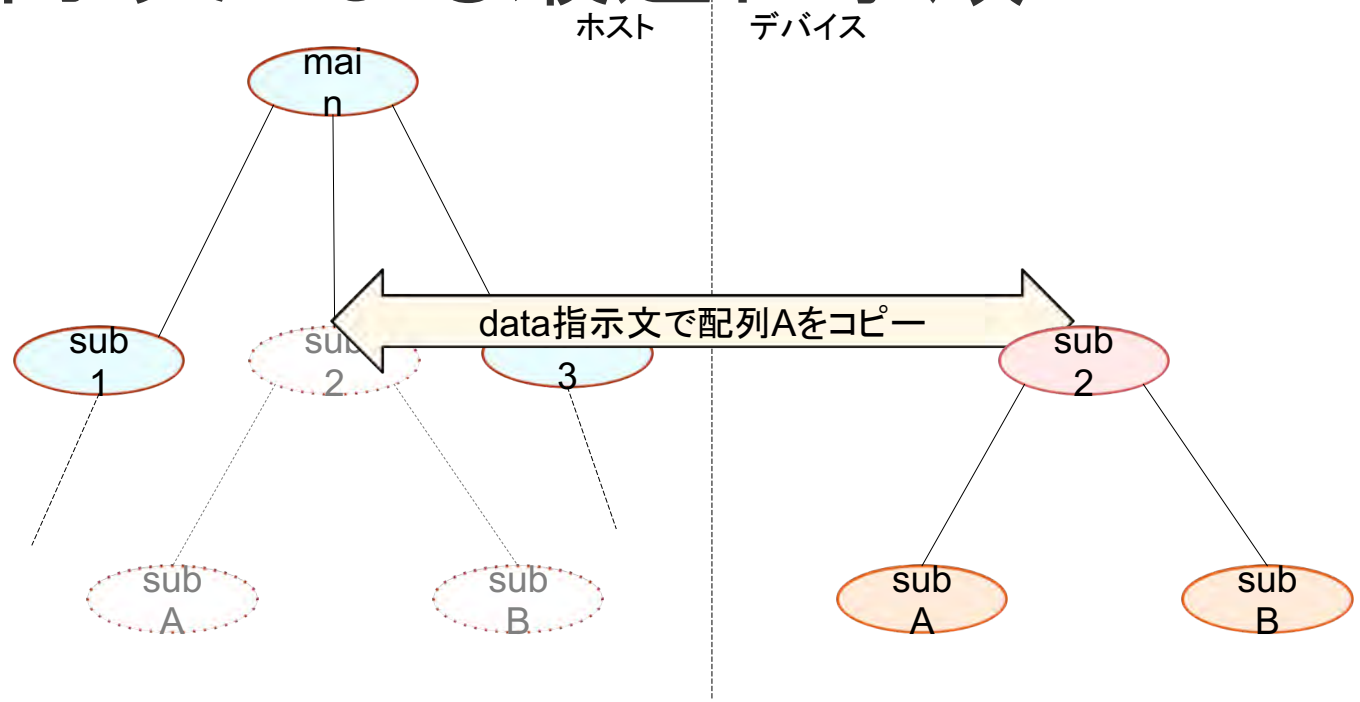
```
int main(){
   double A[N];
   sub1(A);
   sub2(A);
   sub3(A);
}

sub2(double A){
   subA(A);
   subB(A);
}

subA(double A){
#pragma acc …
   for( i = 0 ~ N ) {
      …
   }
}
```



この状態でも必ず正しい結果を得られるように作る！
この時、速度は気にしない！

データ指示文による最適化手順

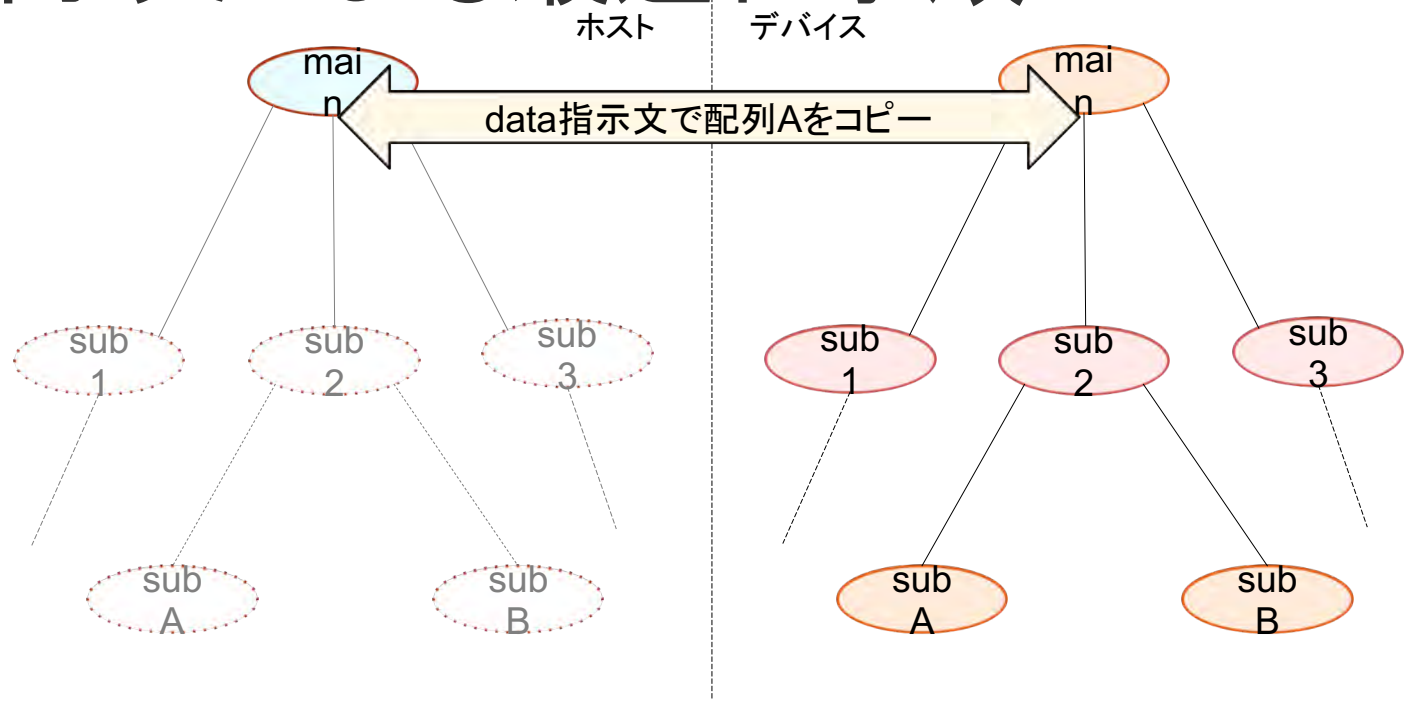
```
int main(){
   double A[N];
   sub1(A);
#pragma acc data
   {
      sub2(A);
   }
   sub3(A);
}

sub2(double A){
   subA(A);
   subB(A);
}

subA(double A){
#pragma acc …
   for( i = 0 ~ N ) {
      …
   }
}
```



徐々にデータ移動を上流に移動する

データ指示文による最適化手順

```
int main(){
   double A[N];
#pragma acc data
   {
      sub1(A);
      sub2(A);
      sub3(A);
   }
}

sub2(double A){
   subA(A);
   subB(A);
}

subA(double A){
#pragma acc …
   for( i = 0 ~ N ) {
      …
   }
}
```



ここまで来たら、ようやく個別のカーネルの最適化を始める。
※データの転送時間が相対的に十分小さくなればいいので、かならずしも最上流までやる必要はない

PGIコンパイラによるメッセージの確認方法

- コンパイラメッセージの確認はOpenACCでは極めて重要
  - OpenMP と違い、
    - 保守的に並列化するため、本来並列化できるプログラムも並列化されないことがある
    - 並列化すべきループが複数あるため、どのループにどの粒度(gang, worker, vector)が割り付けられたかしるため
    - ターゲットデバイスの性質上、立ち上げるべきスレッド数が自明に決まらず、スレッドがいくつ立ち上がったか知るため
  - 感覚としては、Intelコンパイラの最適化レポートを見ながらのSIMD化に近い
  - メッセージを見て、プログラムを適宜修正する
- コンパイラメッセージ出力方法
  - コンパイラオプションに -Minfo=accel をつける

よく使うツール群

- PGIコンパイラが出力するレポート
  - pgfortran -Minfo=accel
- 環境変数 PGI_ACC_TIME
  - export PGI_ACC_TIME=1 で、標準エラーに実行情報が出力される
- NVIDIA Visual Profiler
- cuda-gdb

PGIコンパイラによるメッセージの確認

- コンパイラオプションとして -Minfo=accel を付ける

```
8.    subroutine acc_kernels()
9.      double precision :: A(N,N), B(N,N)
10.     double precision :: alpha = 1.0
11.     integer :: i, j
12.     A(:,:) = 1.0
13.     B(:,:) = 0.0
14.     !$acc kernels
15.     do j = 1, N
16.       do i = 1, N
17.         B(i,j) = alpha * A(i,j)
18.       end do
19.     end do
20.     !$acc end kernels
21.   end subroutine acc_kernels
```

サブルーチン名

ソースコード

コンパイラメッセージ(fortran)

```
pgfortran -O3 -acc -Minfo=accel -ta=tesla,cc60 -Mpreprocess  acc_compute.f90
-o acc_compute
acc_kernels:
     14, Generating implicit copyin(a(:,:))
         Generating implicit copyout(b(:,:))
     15, Loop is parallelizable
     16, Loop is parallelizable
         Accelerator kernel generated
         Generating Tesla code
         15, !$acc loop gang, vector(4) ! blockidx%y threadidx%y
         16, !$acc loop gang, vector(32) ! blockidx%x threadidx%x
    ....
```

配列aはcopyin, bはcopyoutとして扱われます

15, 16行目の2重ループは(32x4)のスレッドでブロック分割して扱います。

PGI_ACC_TIME による OpenACC 実行の確認

- OpenACC_samples を利用
- $ qsub acc_compute.sh
  - 実行が終わると以下ができる
    - acc_compute.sh.eXXXXX (標準エラー出力)
    - acc_compute.sh.oXXXXX (標準出力)
- $ less acc_compute.sh.eXXXXX

```
40.  void acc_kernels(double *A, double *B){
41.    double alpha = 1.0;
42.    int i,j;
             / * A と B 初期化 */
50.  #pragma acc kernels
51.    for(j = 0;j < N;j++){
52.      for(i = 0;i < N;i++){
53.        B[i+j*N] = alpha * A[i+j*N];
54.      }
55.    }
56.  }
```

PGI_ACC_TIME による出力メッセージ

```
Accelerator Kernel Timing data
/lustre/pz0108/z30108/OpenACC_samples/C/acc_compute.c
  acc_kernels  NVIDIA  devicenum=0
    time(us): 149,101
    50: compute region reached 1 time
        51: kernel launched 1 time
            grid: [1]  block: [1]
             device time(us): total=140,552 max=140,552 min=140,552 avg=140,552
            elapsed time(us): total=140,611 max=140,611 min=140,611 avg=140,611
    50: data region reached 2 times
        50: data copyin transfers: 2
             device time(us): total=3,742 max=3,052 min=690 avg=1,871
        56: data copyout transfers: 1
             device time(us): total=4,807 max=4,807 min=4,807 avg=4,807
```

← 起動したスレッド数

↓カーネル実行時間

← データ移動の回数・時間

参考：moduleコマンドの使い方

- 様々なコンパイラ，MPI環境などを切り替えるためのコマンド
- パスや環境変数など必要な設定が自動的に変更される
- ジョブ実行時にもコンパイル時と同じmoduleをloadすること

- 使用可能なモジュールの一覧を表示：module avail
- 使用中のモジュールを確認：module list
- モジュールのload: module load モジュール名
- モジュールのunload: module unload モジュール
- モジュールの切り替え：module switch 旧モジュール 新モジュール
- モジュールを全てクリア: module purge

コンパイラ等の切替: moduleコマンド

- デフォルトでは，Intelコンパイラ+Intel MPI
  - cf. module list

```
Currently Loaded Modulefiles:
  1) intel/18.1.163       2) intel-mpi/2018.1.163   3) pbsutils
```

- PGIコンパイラを使う場合：（OpenACCやCUDA Fortran）
  - module switch intel pgi/17.5
- CUDA開発環境を使う場合
  - module load cuda
  - 別途Cコンパイラも必要
- MPIを使う場合（コンパイラに追加してload，コンパイラにあったものを選ぶ）
  - module load mvapich2/gdr/2.3a/{gnu,pgi}
  - module load openmpi/gdr/2.1.2/{gnu,intel,pgi}

- ジョブ実行時にも同じmoduleをload
- 複数組み合わせても良いが，順序に注意
  - 環境変数PATHや LD_LIBRARY_PATHなどを確認

サンプルプログラムの実行（行列-行列積OpenACC）

行列-行列積のサンプルプログラム(OpenACC版)の注意点

- C言語版およびFortran言語版のファイル名
  Mat-Mat-acc.tar.gz
- ジョブスクリプトファイルmat-mat-acc.bash 中の
  キュー名を　h-lecture から　h-lecture6
  グループ名を gt16
  に変更し、qsub　してください。
  - h-lecture : 実習時間外のキュー
  - h-lecture6: 実習時間内のキュー
  - Reedbush-Hでは，キュー名は “h-”で始まる

行列-行列積のサンプルプログラムの実行

- 以下のコマンドを実行する
  ```
  $ cdw
  $ cp /lustre/gt16/z30105/Mat-Mat-acc.tar.gz ./
  $ tar xvfz Mat-Mat-acc.tar.gz
  $ cd Mat-Mat-acc
  ```
- 以下のどちらかを実行
  ```
  $ cd C ：C言語を使う人
  $ cd F ：Fortran言語を使う人
  ```
- 以下は共通
  ```
  $ module switch intel pgi/18.7
  $ make
  $ qsub mat-mat-acc.bash
  ```
- 実行が終了したら、以下を実行する
  ```
  $ cat mat-mat-acc.bash.oXXXXX
  ```

行列-行列積のコードのOpenMP化の解答（C言語）

- 以下のようなコードになる

```
#pragma omp parallel for private (j, k)
    for(i=0; i<n; i++) {
      for(j=0; j<n; j++) {
        for(k=0; k<n; k++) {
          C[i][j] += A[i][k] * B[k][j];
        }
      }
    }
```

行列-行列積のコードのOpenACC化

- すべてGPU上で実行

```
#pragma acc kernels copyin(A[0:N][0:N], B[0:N][0:N]) copyout(C[0:N][0:N])
#pragma acc loop independent gang
    for(i=0; i<n; i++) {
#pragma acc loop independent vector
      for(j=0; j<n; j++) {
          double dtmp = 0.0;
#pragma acc loop seq
        for(k=0; k<n; k++) {
          dtmp += A[i][k] * B[k][j];
        }
        C[i][j] = dtmp;
      }
    }
```

行列-行列積のコードのOpenMP化の解答（Fortran言語）

- 以下のようなコードになる

```
!$omp  parallel  do  private (j, k)
do i=1, n
    do j=1, n
        do k=1, n
            C(i, j) = C(i, j) + A(i, k) * B(k, j)
        enddo
    enddo
enddo
```

行列-行列積のコードのOpenACC化（Fortran言語）

- すべてGPU上で実行

```
!$acc kernels copyin(A,B) copyout(C)
!$acc loop independent gang
do i=1, n
!$acc loop independent vector
    do j=1, n
        dtmp = 0.0d0
!$acc loop seq
        do k=1, n
            dtmp = dtmp + A(i, k) * B(k, j)
        enddo
        C(i,j) = dtmp
    enddo
enddo
!$acc end kernels
```

行列-行列積のサンプルプログラムの実行

- 以下のような結果が見えれば成功

```
N    =  8192
Mat-Mat  time    =  8.184022  [sec.]
134348.567798 [MFLOPS]
OK!
```

実際にはデータ転送の時間が含まれている.
正味の計算時間は mat-mat-acc.bash.e* にある

```
MyMatMat  NVIDIA  devicenum=0
   time(us): 6,864,586
```

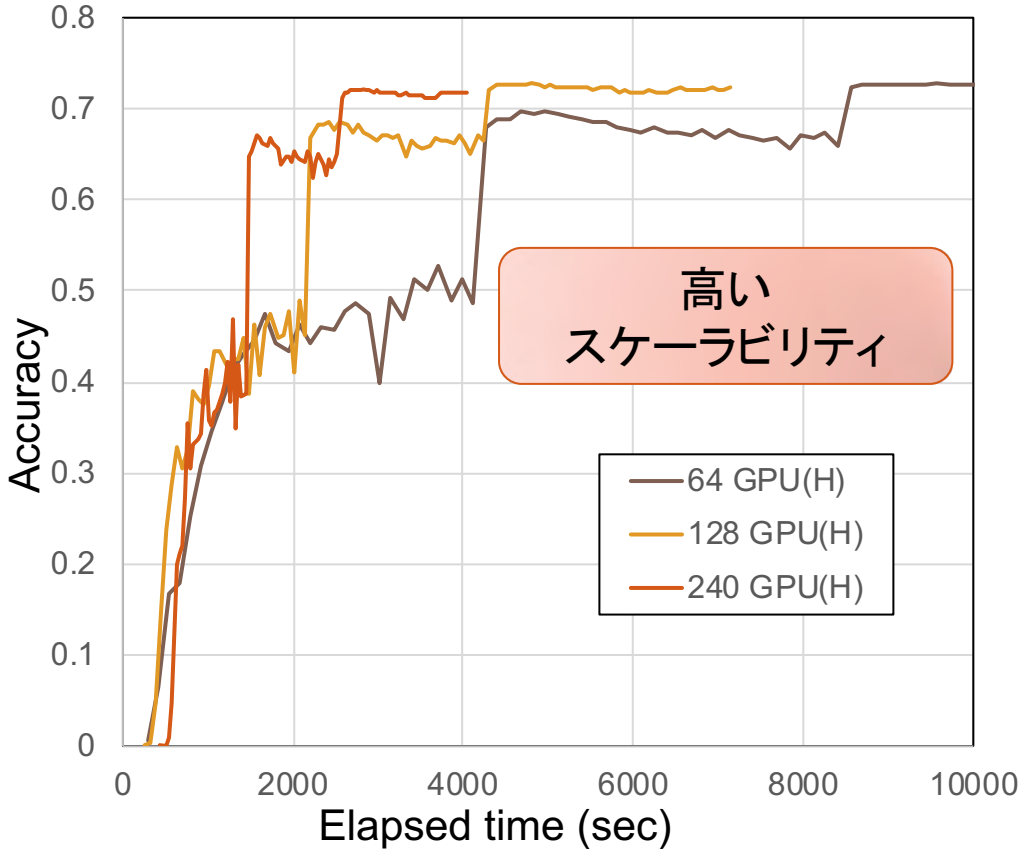
つまり160GFLOPS

Reedbushを用いた成果例

ChainerMN

- Chainer
  - Preferred Networksによって開発されているニューラルネットワークのためのフレームワーク
    - Open Source Software
  - Python
  - GPU向けに内部でCUDAやcuDNNを使用
- ChainerMN
  - Chainerのマルチノード拡張
  - MPI (Message Passing Interface)
  - NCCL (NVIDIA Collective Communications Library)の活用
    - クラスタ内のGPU間における集団通信を最適化
    - 必要な通信の大半は集団通信の Allreduce通信

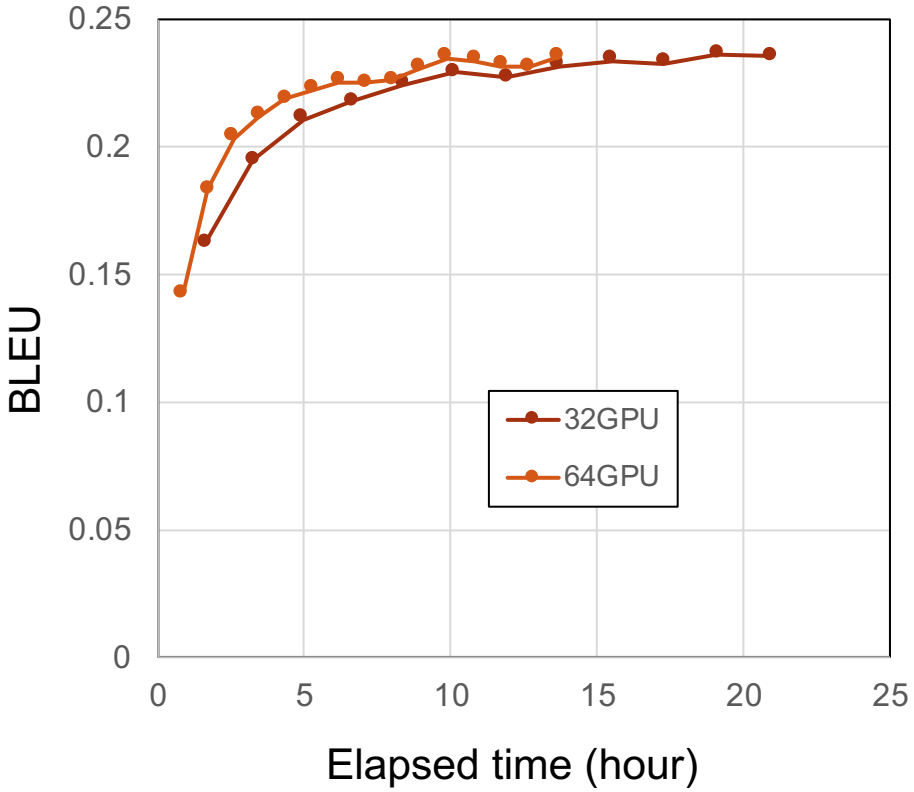
Reedbush-HでのImageNet学習



# GPUs	100 epoch実行時間	精度
32	6時間で終了せず	(72%)
64	3時間58分20秒	72.0%
128	1時間59分02秒	72.2%
240	1時間7分24秒	71.7%

- ResNet-50
- 100エポック実行
- 64, 128, 240 GPU (RB-H)
- ChainerMN 1.0.0
  - OpenMPI 2.1.1, NCCLv2
  - Chainer 3.1.0
  - python 3.6.1, CUDA 8, cuDNN7, cupy 2.1.0

Seq2seq学習結果



# GPUs	15 epoch実行時間	BLEU
32	24時間で終了せず (12 epoch)	(~23.6 %)
64	13.6時間	23.5 %

- 15エポック実行
- 32, 64 GPU (RB-H)
- ChainerMN 1.0.0
  - OpenMPI 2.1.1, NCCLv2
  - Chainer 3.1.0
  - python 3.6.1, CUDA 8, cuDNN7, cupy 2.1.0

ReedbushにおけるPython環境構築

1. Moduleコマンドでインストール済みのものをロード
   - module availでモジュール名を確認しロードする
     - module load chainer/2.0.0
     - module load chainermn/1.3.0 openmpi/gdr/2.1.2/intel
     - module load horovod/0.15.2　(keras 2.2.4, tensorflow 1.8.0込み)
   - 随時更新（リクエスト可），しかし残念ながら更新頻度には限界
2. 半分自力で構築
   - インストール済みのAnacondaを使う
   - ある物は極力使いつつ，最新を追いかける
3. 基本的に自力で構築
   - Anacondaも自分で入れたい場合
   - 等々

Anacondaを利用したChainerMN環境構築

1. CUDAモジュールをロード

```
$ module load cuda/8.0.44-cuDNN7
```

2. MPIモジュールをOpen MPIに切り替え
   - CUDA AwareなMPIが必要
   - GPU Directを使いたい
   - MVAPICH2ではエラーになる

```
$ module switch intel-mpi openmpi-gdr/2.1.1/intel
```

3. Anacondaモジュールをロード

```
$ module load anaconda3
```

4. HOMEを/lustreに差し替え
   - 計算ノードは /lustre以下を使用

```
$ export HOME=/lustre/gi99/i12345
```

5. Anacondaの環境をcreate, activate

```
$ conda create -n chainerMN python=3
$ source activate chainerMN
```

6. cupyをインストール

```
$ pip install -U cupy --no-cache-dir -vvv
```

7. cythonをインストール
8. chainerをインストール
9. chainermnをインストール

スパコンニュース7月号に新しい情報を執筆

ChainerMN実行

- 構築の際使ったのと同じモジュールをロード，環境変数を設定
- ジョブ登録
  $ qsub train_imagenet.sh
- ジョブ実行状況
  $ rbstat
- 実行中の出力確認
  $ tail -f log-ジョブ番号.reedbush-pbsadmin0
  (Ctrl+C入力)

リソースグループ名
：h-regular

利用ノード数
RB-H 32ノード=64GPU

実行時間制限
：4時間

利用グループ名
：gi99

- ジョブスクリプト例: train_imagenet.sh

```
#!/bin/sh
#PBS -q h-regular
#PBS -l select=32:mpiprocs=2
#PBS -l walltime=04:00:00
#PBS -W group_list=gi99

cd $PBS_O_WORKDIR
module load cuda/8.0.44-cuDNN7 anaconda3
module switch intel-mpi openmpi-gdr/2.1.1/intel
export HOME=/lustre/gi99/i12345
source activate chainerMN

mpirun --mca mtl ^mxm --mca coll_hcoll_enable 0 ¥
--mca btl_openib_want_cuda_gdr 1 ¥
--mca mpi_warn_on_fork 0 ./get_local_rank_ompi ¥
python train_imagenet.py …  >& log-${PBS_JOBID}
```

スパコンニュース7月号
に新しい情報を執筆

レポート課題

1. [L10] GPU搭載スパコンについて、なるべく最新の3機種について詳細を調査せよ。Top500, HPCG, Green500などを参考にすること。
2. [L30~40] これまで実施した演習問題についてOpenACCを用いた記述に変更し、GPU上で実行し性能を評価せよ。(ベースの問題に応じて変動)

問題のレベルに関する記述:
- L00: きわめて簡単な問題。
- L10: ちょっと考えればわかる問題。
- L20: 標準的な問題。
- L30: 数時間程度必要とする問題。
- L40: 数週間程度必要とする問題。複雑な実装を必要とする。
- L50: 数か月程度必要とする問題。未解決問題を含む。

※L40以上は、論文を出版するに値する問題。

半年間お疲れ様でした。

コンテスト・レポートを頑張ってください。