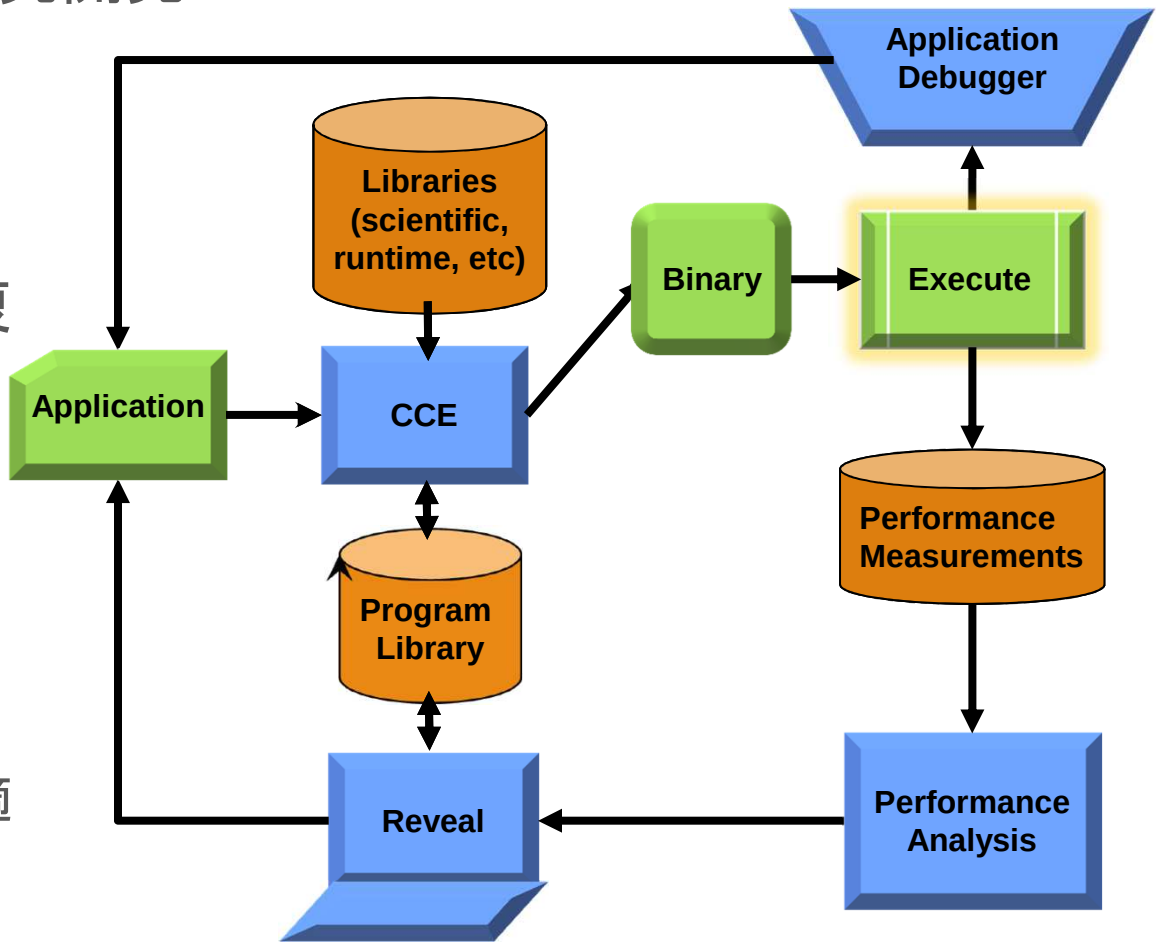
Crayプログラミング環境の開発と現状

寺西慶太
Cray Inc.

Crayのプログラミング環境へのビジョン

- Crayは**アプリケーション性能を最大限に向上**させることを目標にプログラミング環境を研究開発
- コンパイラ、ライブラリ、ツールの統合されたプログラミング環境で、HPCプログラミングの複雑さを克服
  - スケーラービリティ
  - 機能の拡張と自動化による使いやすさの向上
  - インタラクティブなツールでソースコードの変更を実行性能にフィードバックし最適化を支援



Cray のプログラミング環境

Programming Languages

- Fortran
- C
- C++
- Python

Programming models

- Distributed Memory (Cray MPT)
  - MPI
  - SHMEM
- Shared Memory
  - OpenMP 3.0
  - OpenACC
- PGAS & Global View
  - UPC (CCE)
  - CAF (CCE)
  - Chapel

Compilers

- Cray Compiling Environment (CCE)

Tools

Environment setup
- Modules

Debuggers
- TotalView
- DDT
- lgdb

Debugging Support Tools
- Fast Track Debugger (CCE w/ DDT)
- Abnormal Termination Processing
- STAT
- Cray Comparative Debugger#

Performance Analysis
- CrayPat
- Cray Apprentice²

Optimized Scientific Libraries

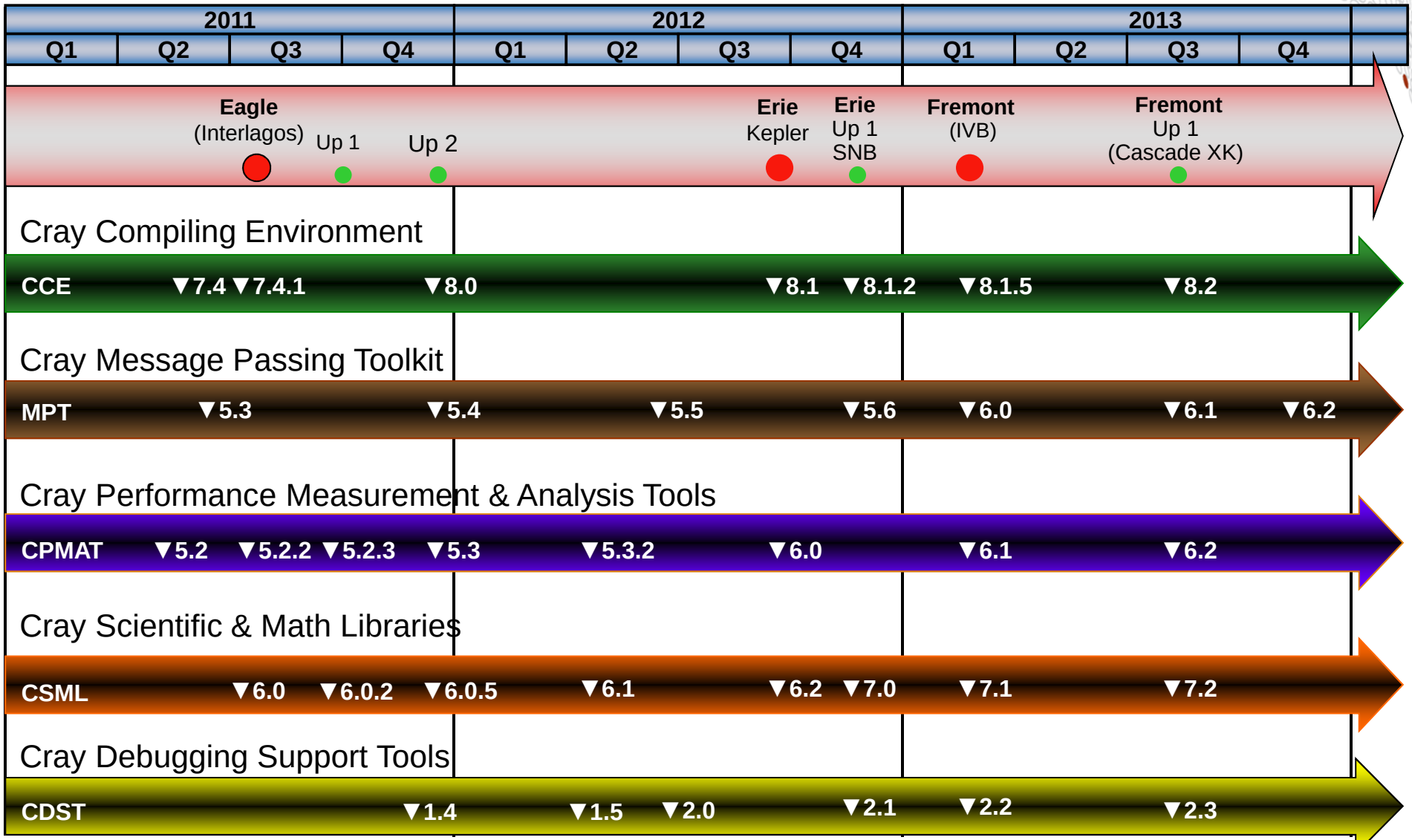
- LAPACK
- ScaLAPCK
- BLAS (libgoto)
- Iterative Refinement Toolkit
- Cray Adaptive FFTs (CRAFFT)
- FFTW
- Cray PETSc (with CASK)
- Cray Trilinos (with CASK)

I/O Libraries

- NetCDF
- HDF5

Cray 純正
#: 開発中
他社製ソフトウェア
サードパーティ ソフトウェア
サードパーティ ソフトウェア（Crayによる改良済み）

Cray Programming Environment Roadmap



CCE: Cray Compiling Environment

- **科学計算アプリケーションのコード最適化に特化**
  - 自動ベクトル化
  - 自動共有メモリ並列化
- **標準化規格の準拠**
  - **Fortran 2008 規格**
    - CCE 8.1から準拠の予定 (3Q12)
  - C++98/2003 規格準拠
  - **OpenMP 3.0 準拠**
    - OpenMP 3.1 and OpenMP 4.0規格にむけて積極的な活動
- **OpenMP と自動共有メモリ並列化の統合**
  - 同じランタイムライブラリに基づき実装され、スレッドプールを共有
  - OpenMP領域内外で更にループの再構築、スカラ命令の最適化
  - 自動スレッド並列化とOpenMPは共通の内部APIにアクセス
- **PGAS 言語(UPC & Fortran Coarrays) の完全なサポートと実装の最適化**
  - UPC 1.2 and Fortran 2008 coarray のサポート
  - 使用の際、プリプロセッサをコードに書き込む必要なし
  - Crayのネットワークハードウェアに合わせて実装
  - Allinea's DDTの完全サポートで、デバッグも容易に

Cray MPI と Cray SHMEM

- **MPI**
  - アルゴンヌ研究所のMPICH2がベース
  - 片方向通信、RMAの完全なサポート
    - 計算と通信のオーバラップ
  - MPI-2 機能の完全サポート
    - MPI_Comm_spawnは除く
  - MPI3 Forumで積極的な活動

- **Cray SHMEM**
  - 最適化されたCray SHMEM ライブラリ
    - CrayT3Eの実装、デザインに基づく
    - Cray XE ではDistributed Memory Applications API (DMAPP) の上に実装
  - 最近の新機能、性能強化:
    - ノード内ではプロセス間メモリコピーで通信
      - Cross Process Memory Mapping (XPMEM)
      - XPMEMで他のプロセスと自プロセス間のアドレス空間をマッピング
    - 分散メモリ版ロック
    - コレクティブ通信

Cray Performance Tools

- アプリケーションの性能データを性能解析、最適化へ導くツール群
  - CCEが出力する中間表現、最適化の情報を活用
- 使いやすさ、自動化の向上
  - GUI
  - 性能解析結果をプログラム実行へのフィードバック
- 複数のプログラミングモデルに対応
  - MPI, PGAS, OpenMP, OpenACC, SHMEM
- スケーラビリティーの強化
  - 多ノードへの対応
  - レスポンスの向上
- 新機種への対応
  - Intel CPU
  - Aries Interconnect

Cray Performance Toolsのフィードバックによる性能チューニング例

MPI ランクの並びかえ:

- MPI通信はノード内では共有メモリコピーで実装
  - ノード間通信より大幅に高速
- 並列プログラム全体の通信の仕方、ロードバランスによってはノード内通信をより効果的に利用することができる
- MPIランクの並び替えをすることでMPIの実行時間を大幅に下げる事が可能
  - 最高で52%の事例も
- Cray Performance Toolでは性能結果を元にMPICH_RANK_ORDER.Gridというファイルが生成され、それをバッチファイルとして使う

ツールが推奨するMPIランク

```
# The 'USER_Time_hybrid' rank order in this file targets nodes with multi-core
# processors, based on Sent Msg Total Bytes collected for:
#
# Program:  /lus/nid00023/malice/craypat/WORKSHOP/bh2o-demo/Rank/sweep3d/src/sweep3d
# Ap2 File: sweep3d.gmpi-u.ap2
# Number PEs:   768
# Max PEs/Node: 16
#
# To use this file, make a copy named MPICH_RANK_ORDER, and set the
# environment variable MPICH_RANK_REORDER_METHOD to 3 prior to
# executing the program.
#
0,532,64,564,32,572,96,540,8,596,72,524,40,604,24,588
104,556,16,628,80,636,56,620,48,516,112,580,88,548,120,612
1,403,65,435,33,411,97,443,9,467,25,499,105,507,41,475
73,395,81,427,57,459,17,419,113,491,49,387,89,451,121,483
6,436,102,468,70,404,38,412,14,444,46,476,110,508,78,500
86,396,30,428,62,460,54,492,118,420,22,452,94,388,126,484
129,563,193,531,161,571,225,539,241,595,233,523,249,603,185,555
153,587,169,627,137,635,201,619,177,515,145,579,209,547,217,611
7,405,71,469,39,437,103,413,47,445,15,509,79,477,31,501
111,397,63,461,55,429,87,421,23,493,119,389,95,453,127,485
134,402,198,434,166,410,230,442,238,466,174,506,158,394,246,474
190,498,254,426,142,458,150,386,182,418,206,490,214,450,222,482
128,533,192,541,160,565,232,525,224,573,240,597,184,557,248,605
168,589,200,517,152,629,136,549,176,637,144,621,208,581,216,613
5,439,37,407,69,447,101,415,13,471,45,503,29,479,77,511
53,399,85,431,21,463,61,391,109,423,93,455,117,495,125,487
2,530,34,562,66,538,98,522,10,570,42,554,26,594,50,602
18,514,74,586,58,626,82,546,106,634,90,578,114,618,122,610
135,315,167,339,199,347,259,307,231,371,239,379,191,331,247,299
175,363,159,323,143,355,255,291,207,275,183,283,151,267,215,223
133,406,197,438,165,470,229,414,245,446,141,478,237,502,253,398
157,510,189,462,173,430,205,390,149,422,213,454,181,494,221,486
130,316,260,340,194,372,162,348,226,308,234,380,242,332,250,300
202,364,186,324,154,356,138,292,170,276,178,284,210,218,268,146
4,535,36,543,68,567,100,527,12,599,44,575,28,559,76,607
52,591,20,631,60,639,84,519,108,623,92,551,116,583,124,615
3,440,35,432,67,400,99,408,11,464,43,496,27,472,51,504
19,392,75,424,59,456,83,384,107,416,91,488,115,448,123,480
132,401,196,441,164,409,228,433,236,465,204,473,244,393,188,497
252,505,140,425,212,457,156,385,172,417,180,449,148,489,220,481
131,534,195,542,163,566,227,526,235,574,203,598,243,558,187,606
251,590,211,630,179,638,139,622,155,550,171,518,219,582,147,614
761,660,737,652,705,668,745,692,673,700,641,684,713,644,753,724
729,732,681,756,721,716,764,676,697,748,689,657,740,665,649,708
760,528,736,536,704,560,744,520,672,568,712,592,752,552,640,600
728,584,680,624,720,512,696,632,688,616,664,544,608,656,648,576
762,659,738,651,706,667,746,643,714,691,674,699,754,683,730,723
722,731,763,658,642,755,739,675,707,650,682,715,698,666,690,747
257,345,265,313,281,305,273,337,609,369,577,377,617,329,513,529
545,297,633,361,625,321,585,537,601,289,553,353,593,521,569,561
256,373,261,341,264,349,280,317,272,381,269,309,285,333,277,365
352,301,320,325,288,357,328,304,360,312,376,293,296,368,336,344
258,338,266,346,282,314,274,370,766,306,710,378,742,330,678,362
646,298,750,322,718,354,758,290,734,662,686,670,726,702,694,654
262,375,263,343,270,311,271,351,286,319,278,342,287,350,279,374
294,318,358,383,359,310,295,382,326,303,327,367,366,335,302,334
765,661,709,663,741,653,711,669,767,655,743,671,749,695,679,703
677,727,751,693,647,701,717,687,757,685,733,725,719,735,645,759
```

次世代デバッガ

- 多数のプロセス、スレッドに対応できるデバッガ
  - 最新の技術でスケーラビリティー、生産性の向上
    - Wisconsin大で開発されたMRNetをインフラとして活用

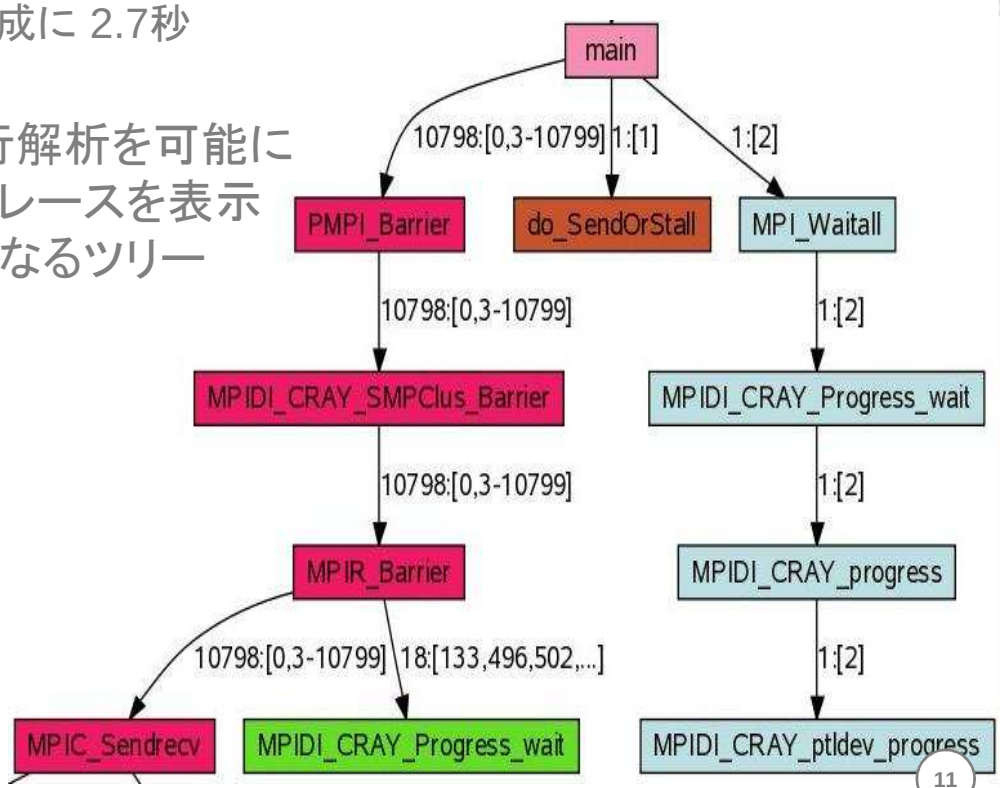
      STAT - Stack Trace Analysis Tool
      - 統合された、バックトレースツリーの生成
        - 216,000MPIプロセスまで対応

      ATP - Abnormal Termination Processing
        - バグのあるプログラムの実行経路をツリー表示
        - Coreファイルの統合、縮小でスケーラブルに実行.
    - Fast Track Debugging
      - 最適化されたコードのデバック
      - デバッグしたい箇所だけ、シンボル付きオブジェクトで実行
      - それ以外は最適化されたままで実行
      - アプリケーション実行そのままの環境でデバッグが可能に
      - Allinea's DDT 2.6 以降（2010年6月）

  - 従来のデバッガへの対応
    - TotalView, DDT, and gdb

Stack Trace Analysis Tool (STAT)

- 大規模アプリケーション向けスタックトレース
  - スタックトレース
  - スタックのバックトレースを1つのツリーを高速に生成
    - アプリケーション実行の全体像を可視化
    - 同じような実行経路をもつプロセスのスタックトレースの統合
      - SIMDプログラムの特徴
      - デバッグするべきプロセスを最小限に
    - 128,000MPIプロセスの トレース生成に 2.7秒
- トレースの集約、解析
  - スケーラブルなアプリケーション実行解析を可能に
  - プログラムの経緯に従って複数のトレースを表示
  - 関数、サブルーチンの呼び出しからなるツリー



Automatic Termination Processing （ATP)

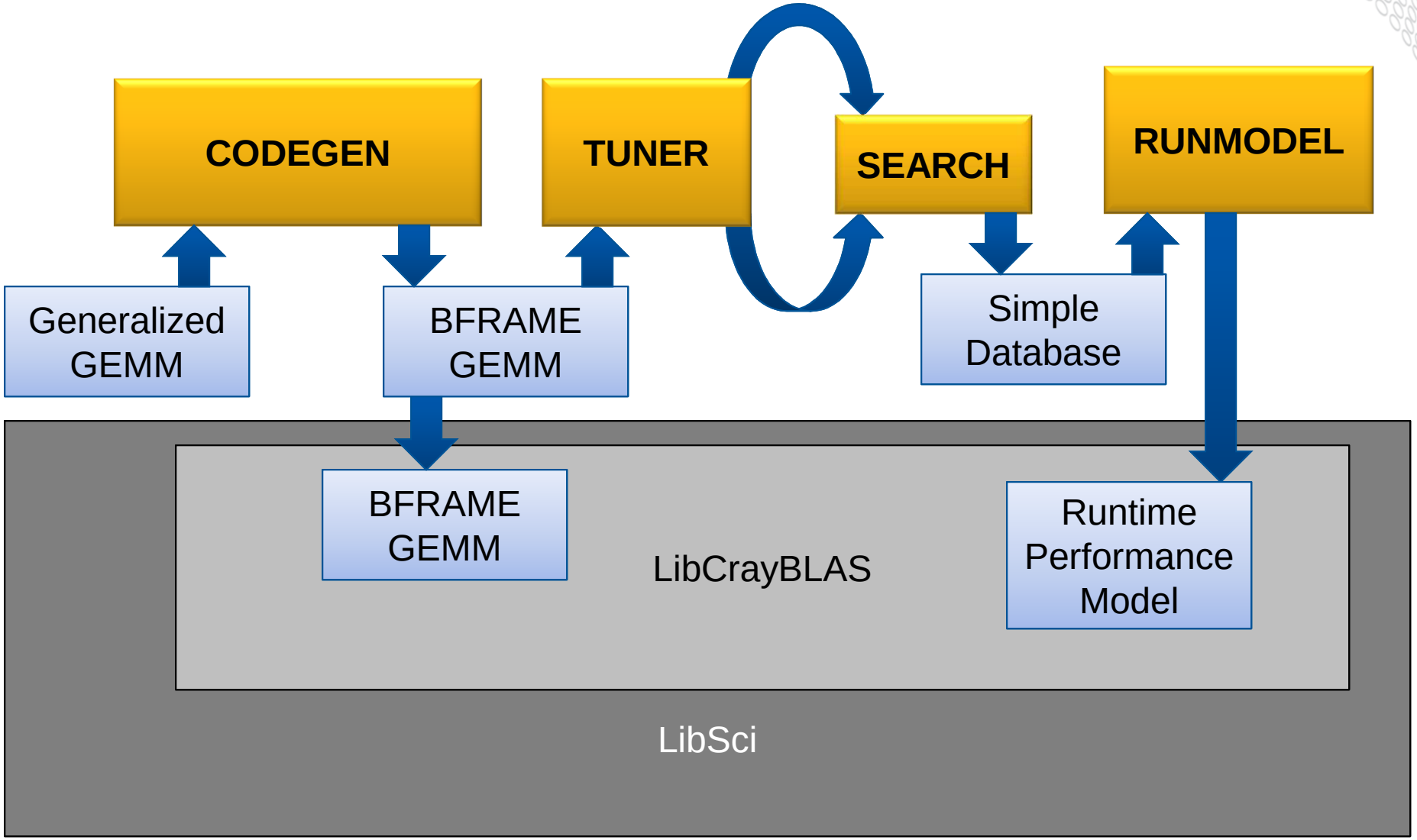
- 計算ノードに常駐してプロセスの異常終了を監視
  - **MRNet**上で実装
  - aprunでプログラム実行時に自動的に動作
    - 環境変数ATP_ENABLEDで、オンオフの切り替え
- アプリケーションの 異常動作に即座に反応
  - 最初に異常動作をしたプロセスのバックトレースをstderrに出力
    - そのプロセスのcoredumpの生成 (シェル環境でcoreサイズの制限がない場合)
  - **StackwalkerAPI** を用いて各プロセスのスタックバックトレースを収集
    - 最適化されたコード、オブジェクトに対しても実行される
- STAT（Stack Trace Analysis)同様な ツリー形式でバックトレースを表示
  - STATほど正確ではないが、異常終了する関数、サブルーチンをできるだけ早く発見できる
  - ツリーの末端に相当するノードのcoreファイルを操作
    - もしくは、これらのノードをデバッガ実行

Adaptive Scientific Libraries

- Crayの科学計算ライブラリ
  - **標準API**
  - **自動チューニング**
  - **自動適応ライブラリ**

- Cray **adaptive** model
  - ランタイム時に**ベスト** のカーネル、ライブラリを自動選択して実行
  - 開発過程で、膨大な量の性能解析を行い、その結果をコンパクトな形でライブラリに組み込むことで、自動選択のオーバーヘッドを最小限に抑えることが可能に
  - ライブラリ関数実行時に、入力パラメータを元にパフォーマンステーブルをルックアップ
    - 各々の問題サイズに最適化されたカーネルを選択

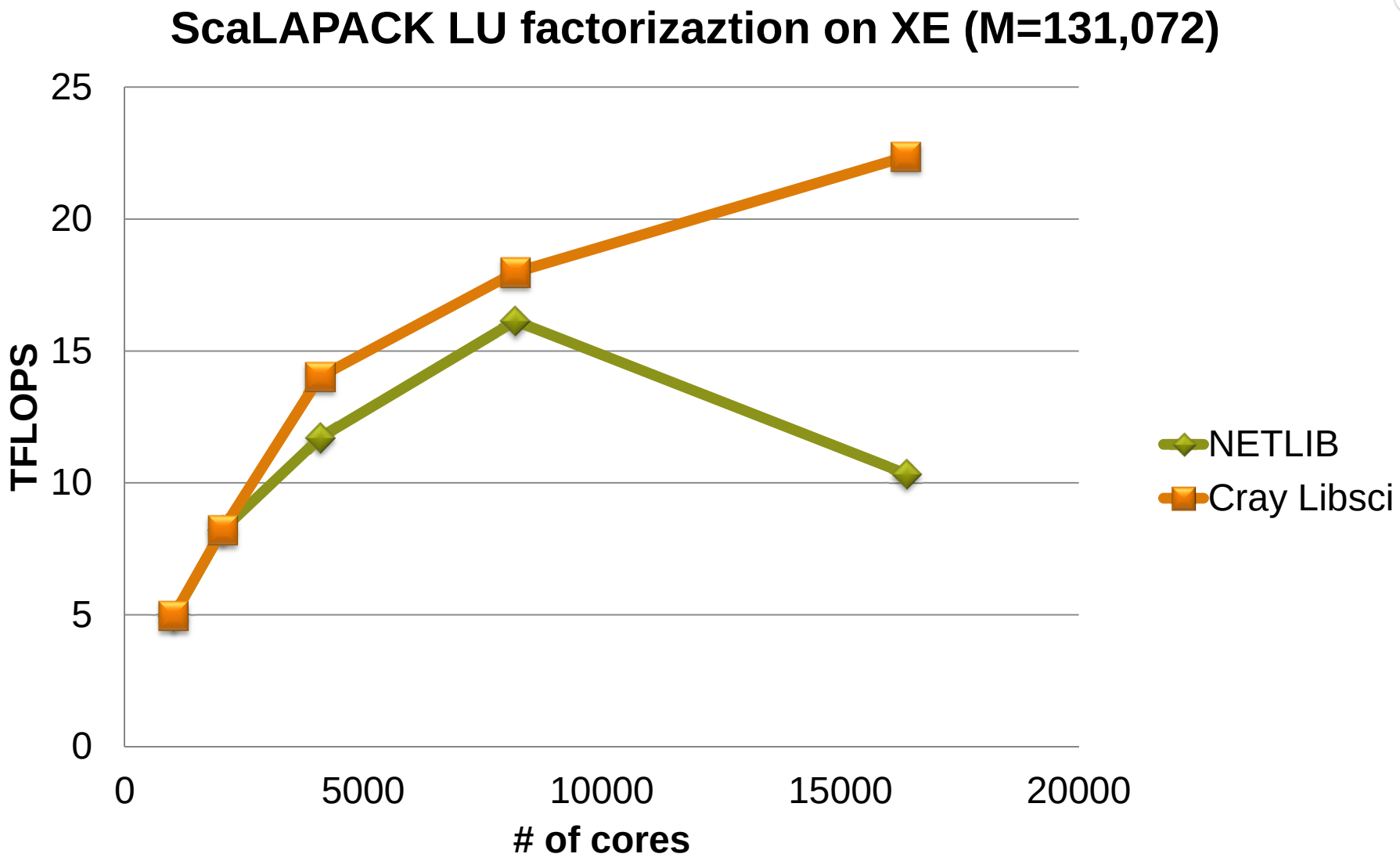
CrayのBLASチューニングの作業フロー



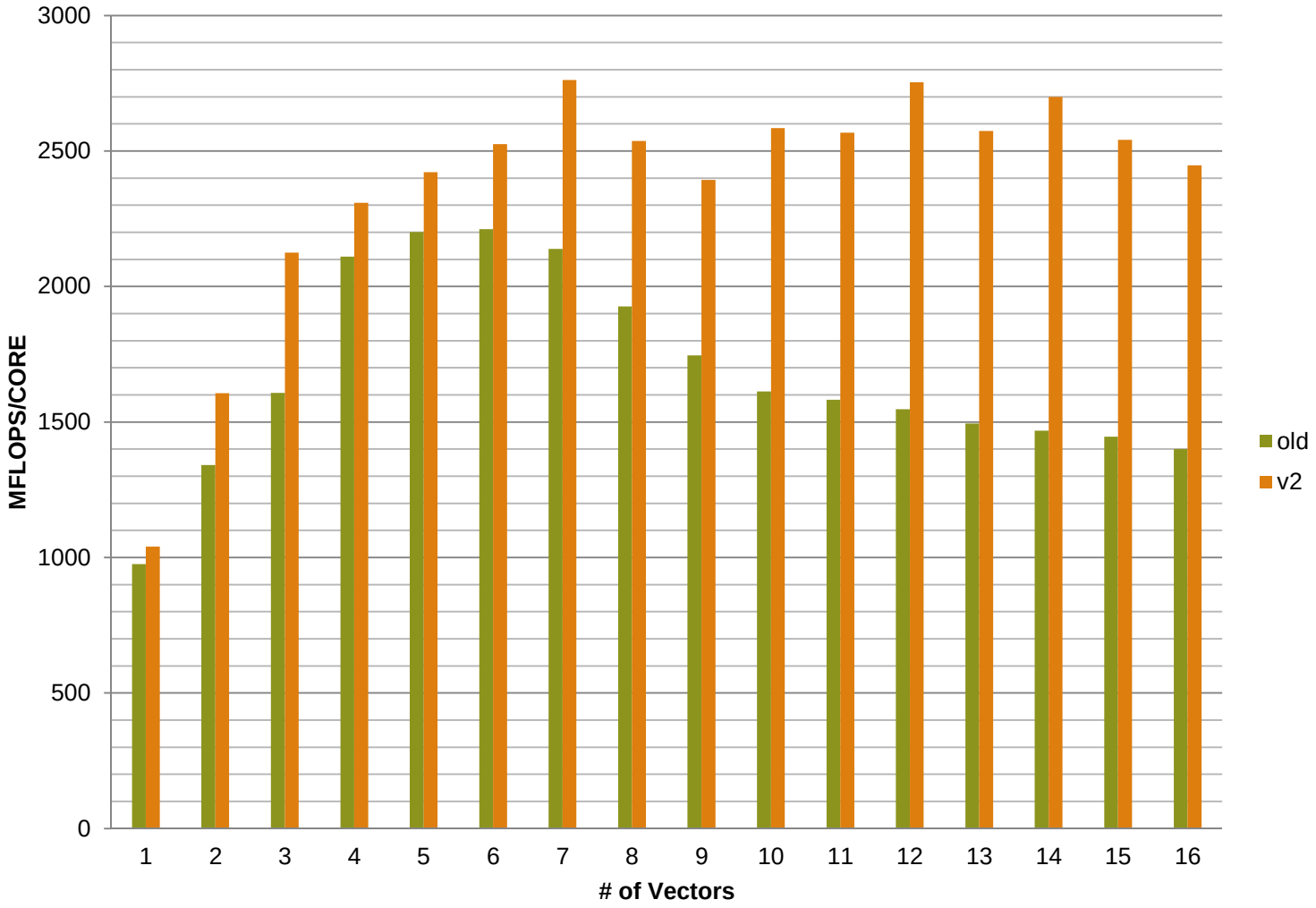
Crayの科学計算ライブラリの特長

- **CASK （Cray Adaptive Sparse Kernels）**
  - Crayの自動チューニング技術を使って開発された疎行列ベクトル積カーネル
  - PETSC,Trilinosの疎行列カーネルの性能の向上
  - ユーザ側でコードの書き換えは不要
  - 多種多様な非ゼロ分布で高性能を発揮
  - 不完全LU,不完全コレスキー前処理の性能の向上
  - ベクトルが複数のケースにも対応
    - 疎行列固有値ソルバ
    - Uncertainty Quantification
- **ScaLAPACK**
  - Geminiインターコネクト向けのチューニング
- **FFTW**
  - ILプロセッサ向けメモリコピー性能の強化
  - 544x544　2DFTT　ノードあたり性能　（16PE、2スレッド)
  - 最新版：1.537GFLOPS
  - 従来版：1.063GFLOPS

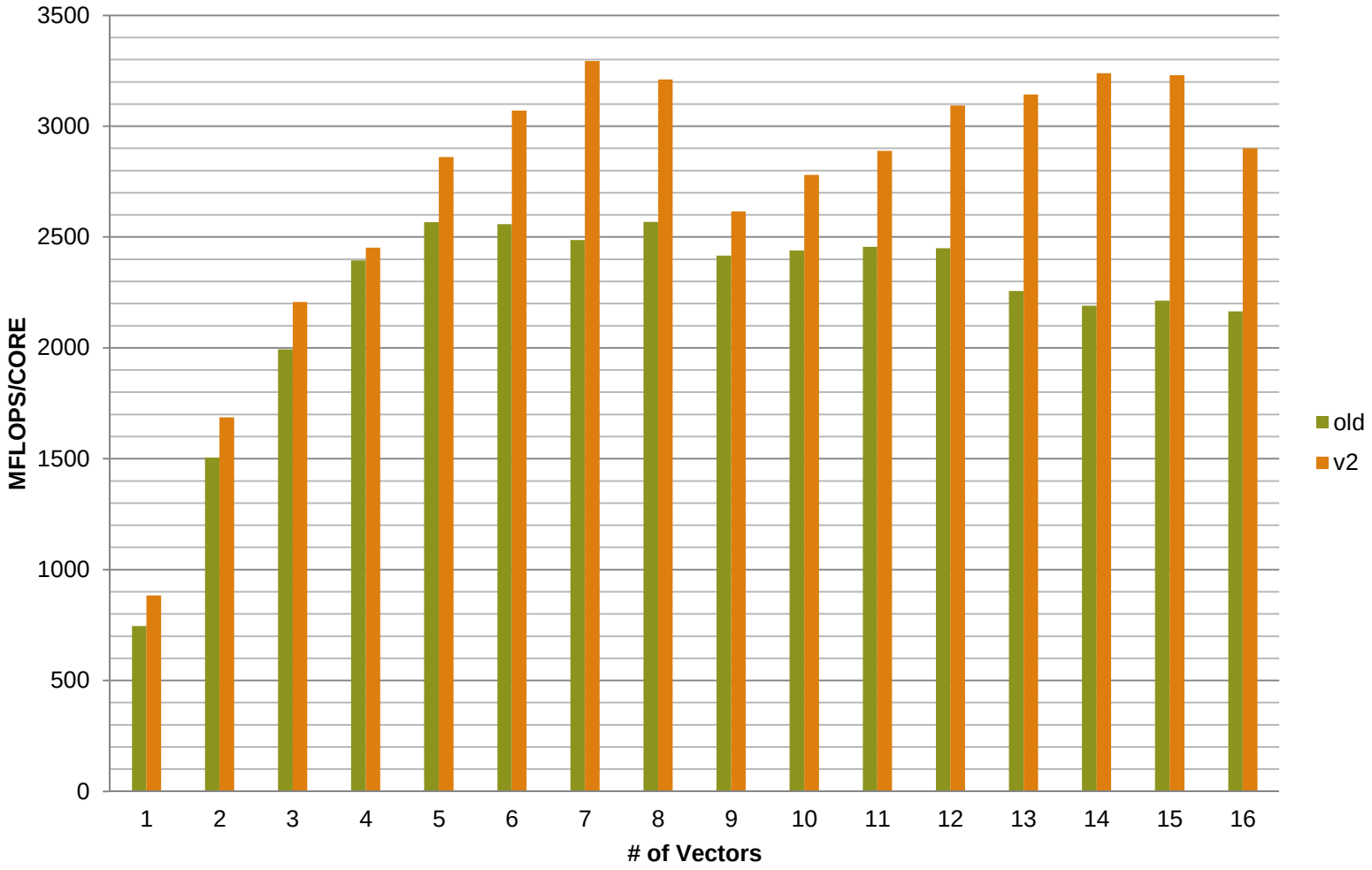
ScaLAPACKの性能



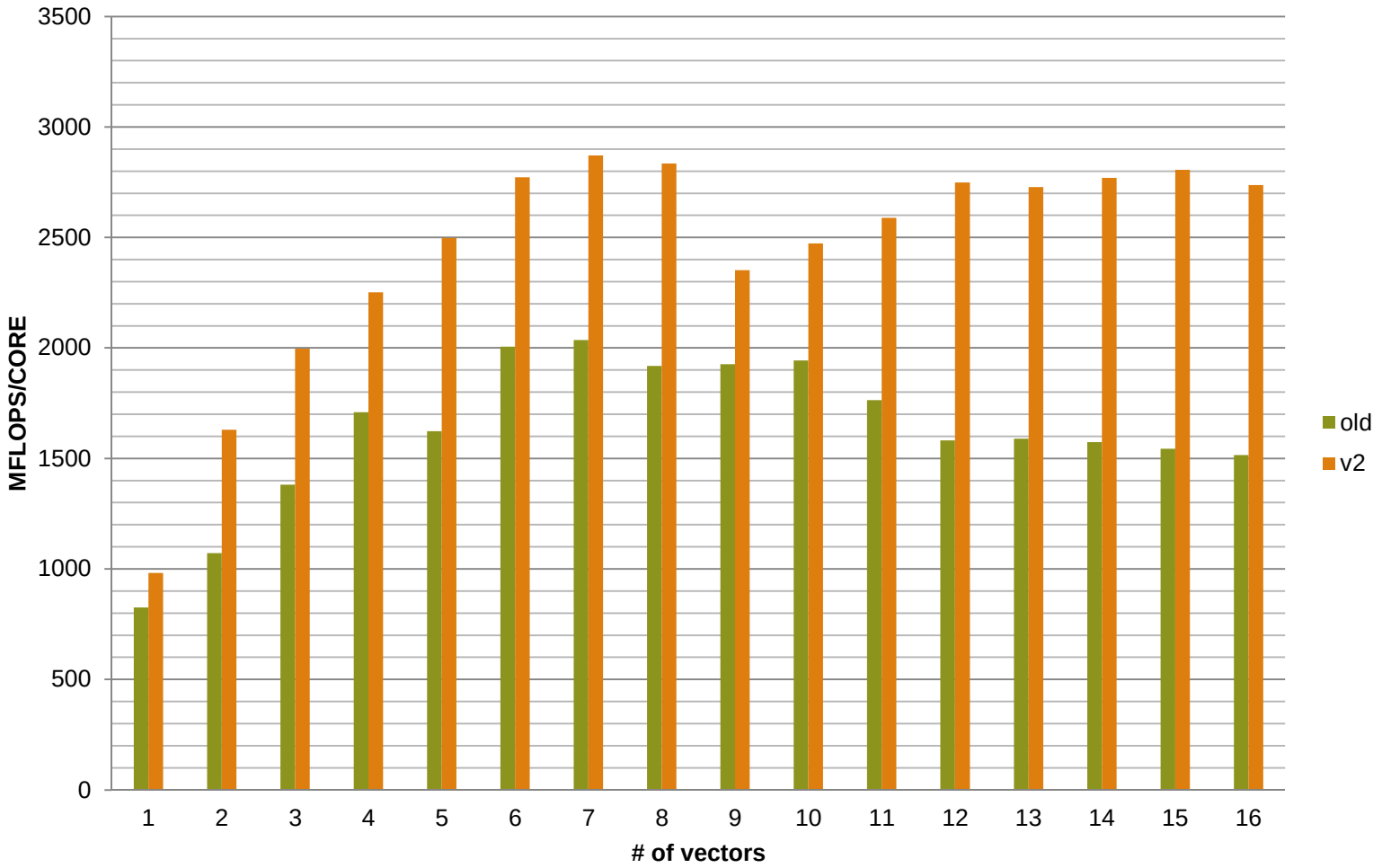
CASKの性能: CRYSTM01 matrix



CASKの性能: BCSSTK35



CASKの性能: AF23560



Cray Revealの機能

Reveal

最適化のためのコードの書き換え、性能解析支援

クレイの既存の性能ツールとCCEのライブラリ関数を用いて、コンパイル時、ランタイム時の性能解析とデータを可視化

ソースコードと性能解析のデータを直接対応 を可能に。ユーザはコードのどこを最適化、書き換えすべきかを容易に知ることができる

主な機能

ソースコードにコンパイラの最適化情報を注釈

各ループの最適化の情報

依存性などの情報を表示し、最適化が困難なケースをユーザに伝える

スコーピング解析

- 配列が共有、プライベート、曖昧であるかどうかを判別
  - ユーザはその情報を元に、曖昧な配列のプライベート化を行う
  - ユーザが直接コードを書き換えて、コンパイラの依存性解析の結果を無視して最適化

ソースコードの閲覧

CrayPatの結果を元にソースコードの各部分の性能情報を一緒に表示

ツールを使ってのノード内並列化の作業フロー

更に並列化が可能なソースの部分を探す

- X86システム上MPIプログラムが正しく動作することが前提
- CCEの自動スレッド化を試してみる
  - コンパイラがスレッド化可能なループを検知
- 計算量の多いループを探す
  - PerftoolsとCCEの両方を使うとループ毎の実行時間が分かる

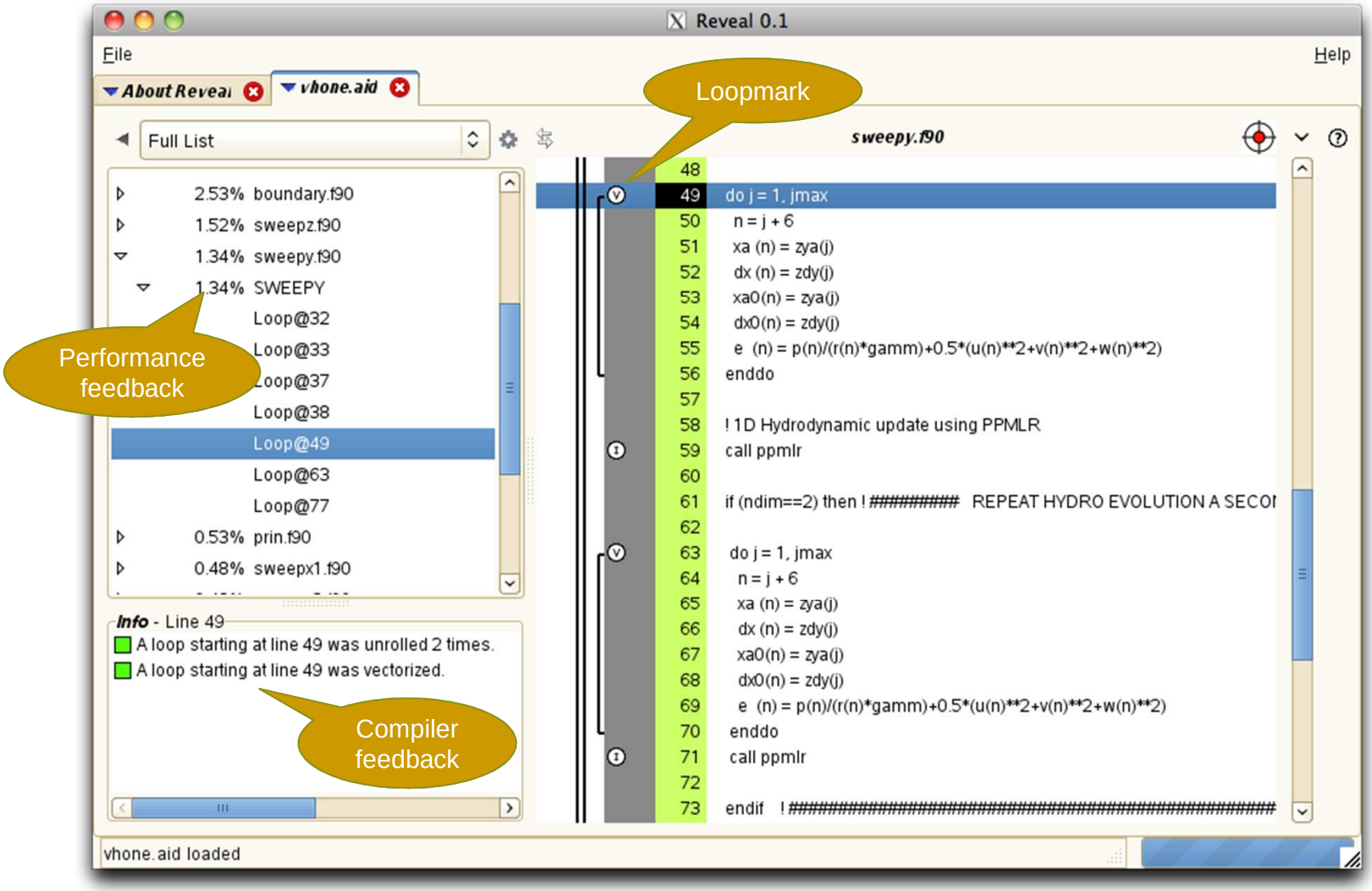
ループ内の計算を複数のスレッドに配分

- ループの並列化解析と再構築
  - RevealとCCEを使うことで、各ループの情報（性能、最適化手法）とそれに対応するソースコードをGUI環境で操作

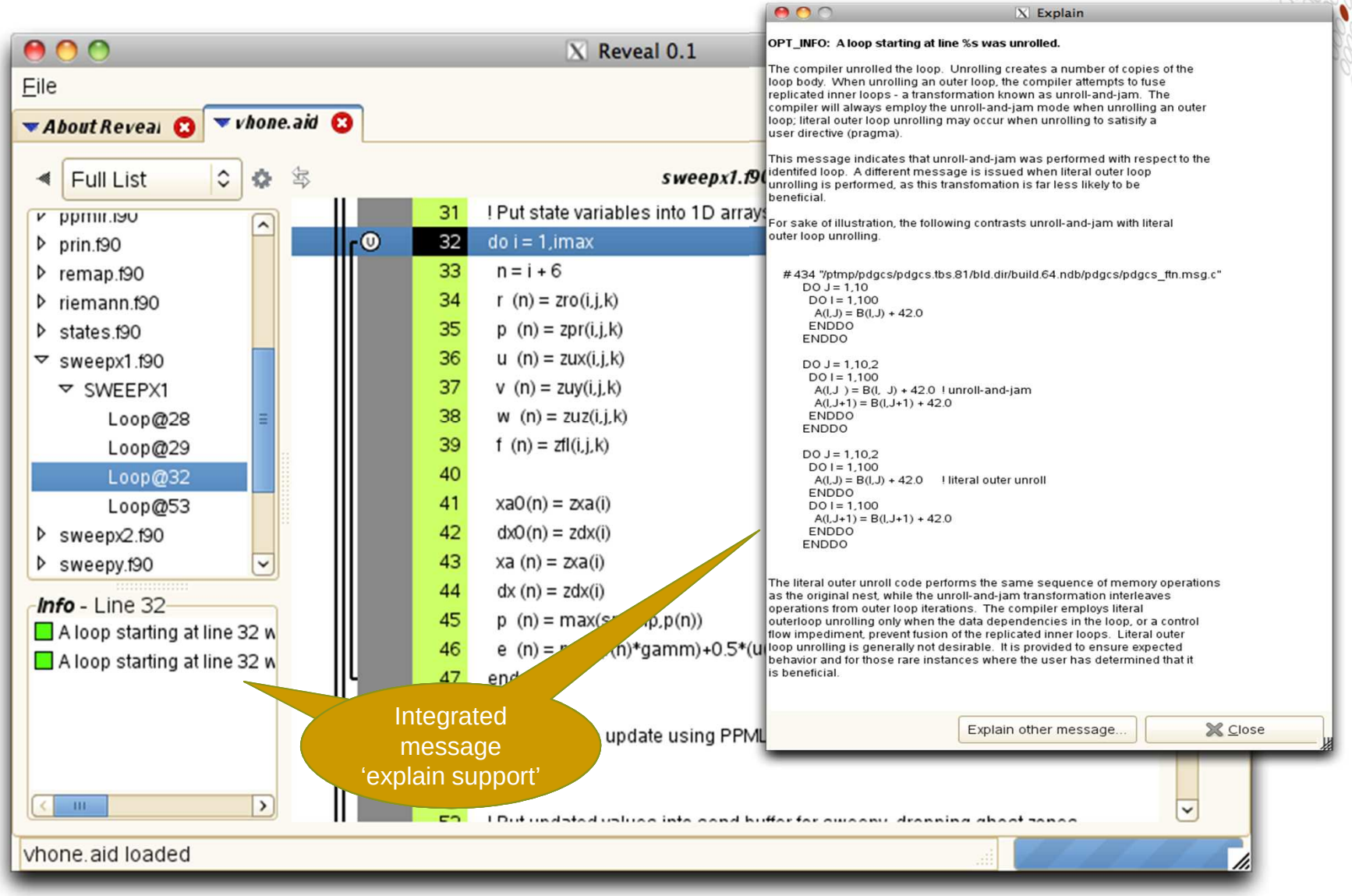
並列化ディレクティブの追加、アクセラレータ化

- OpenMPディレクティブを挿入
  - Revealのスコーピング機能
- X86システム上で動作の確認、性能のチェック
- OpenMPディレクティブをOpenACCディレクティブに書きかえ

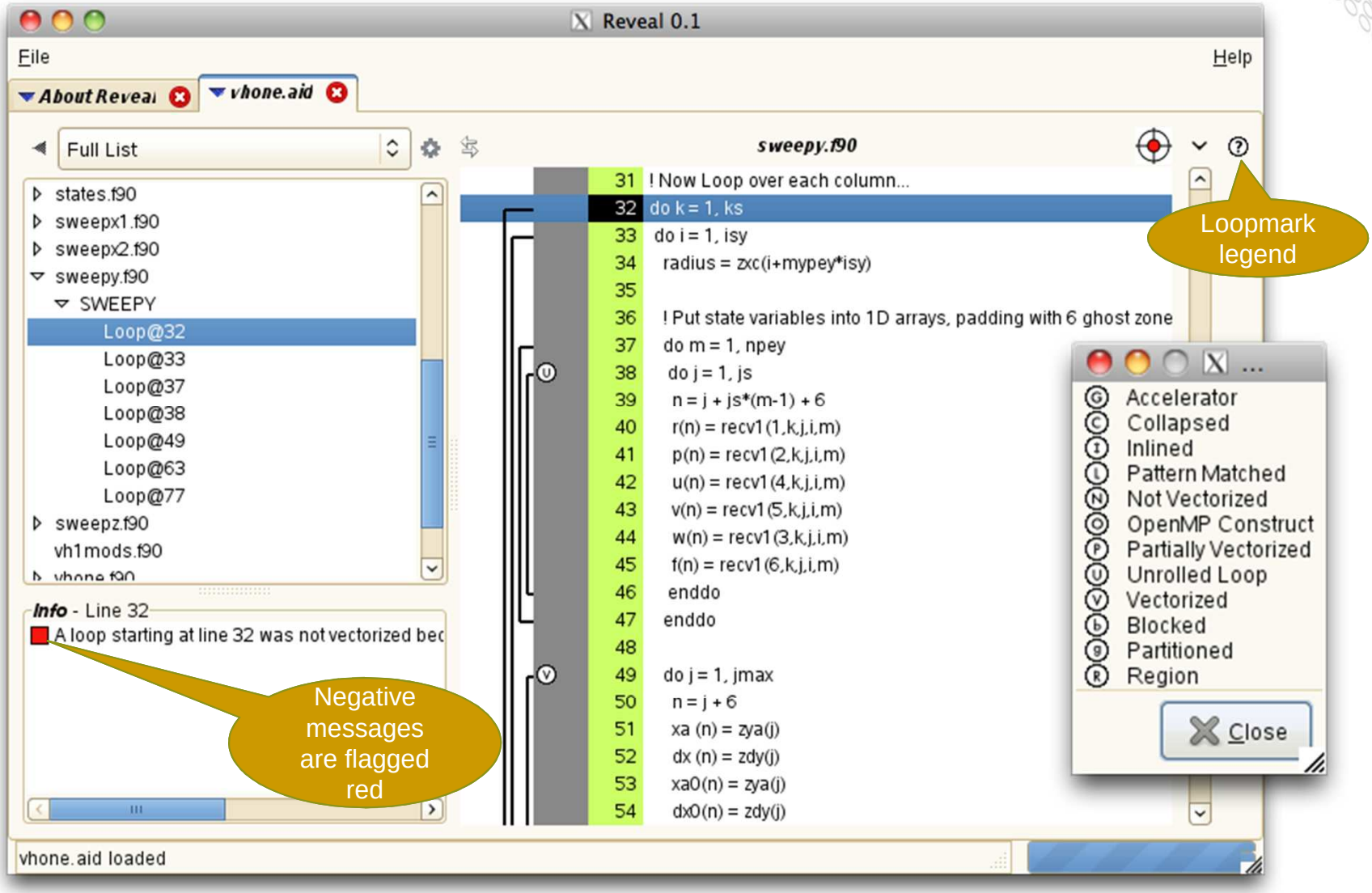
CCEによって生成されるループ情報の可視化



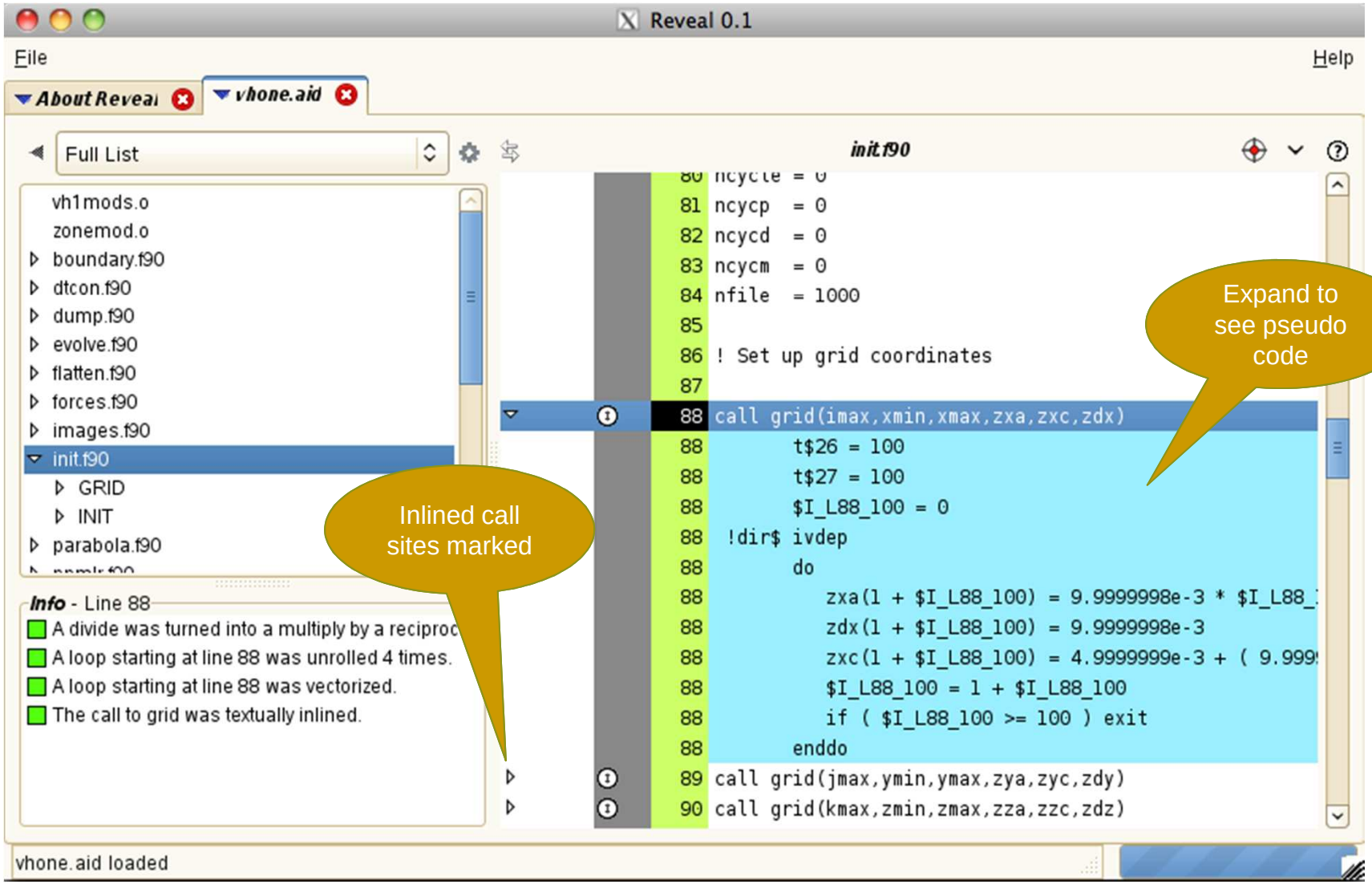
CCEによって生成されるループ情報の可視化



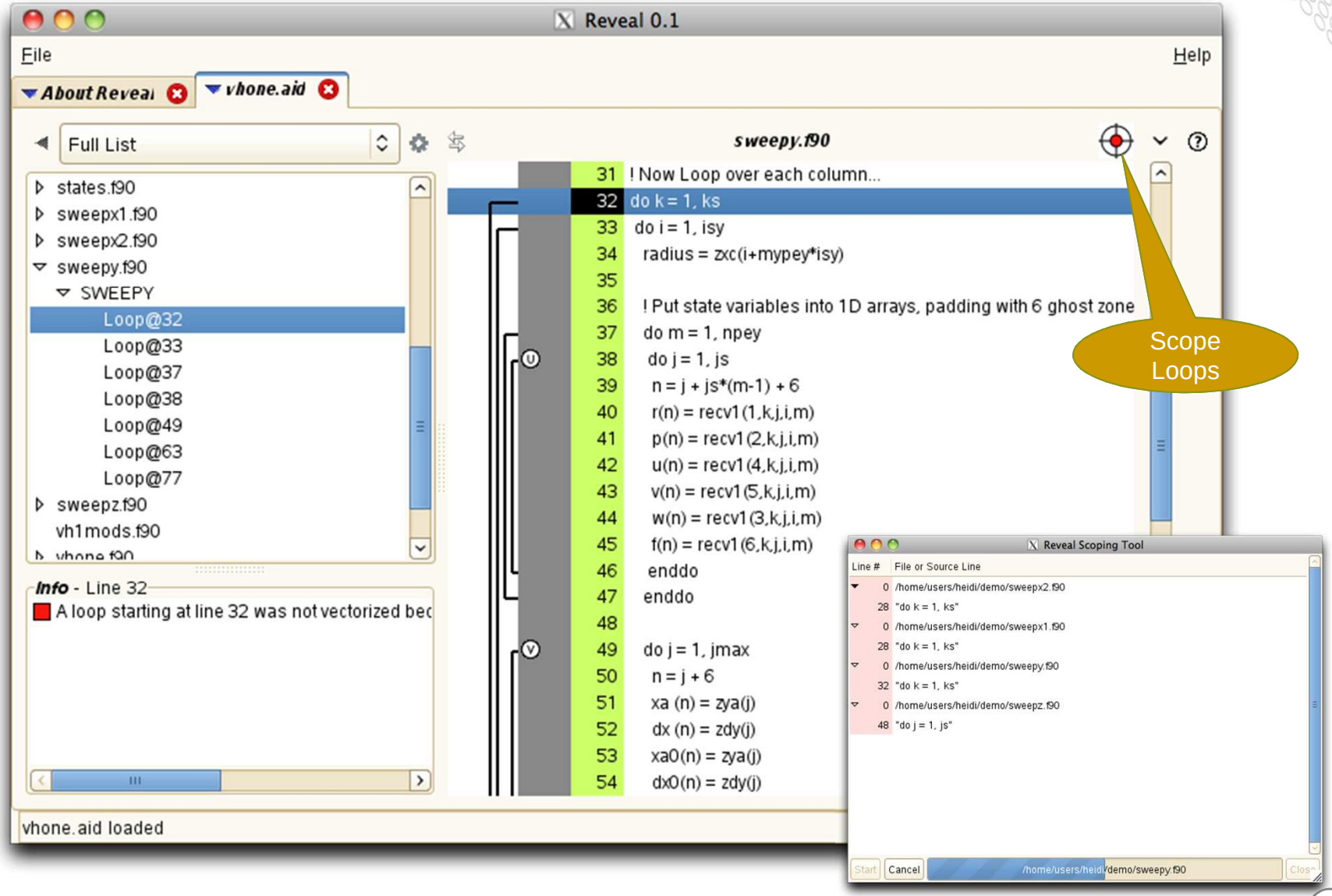
CCEによって生成されるループ情報の可視化



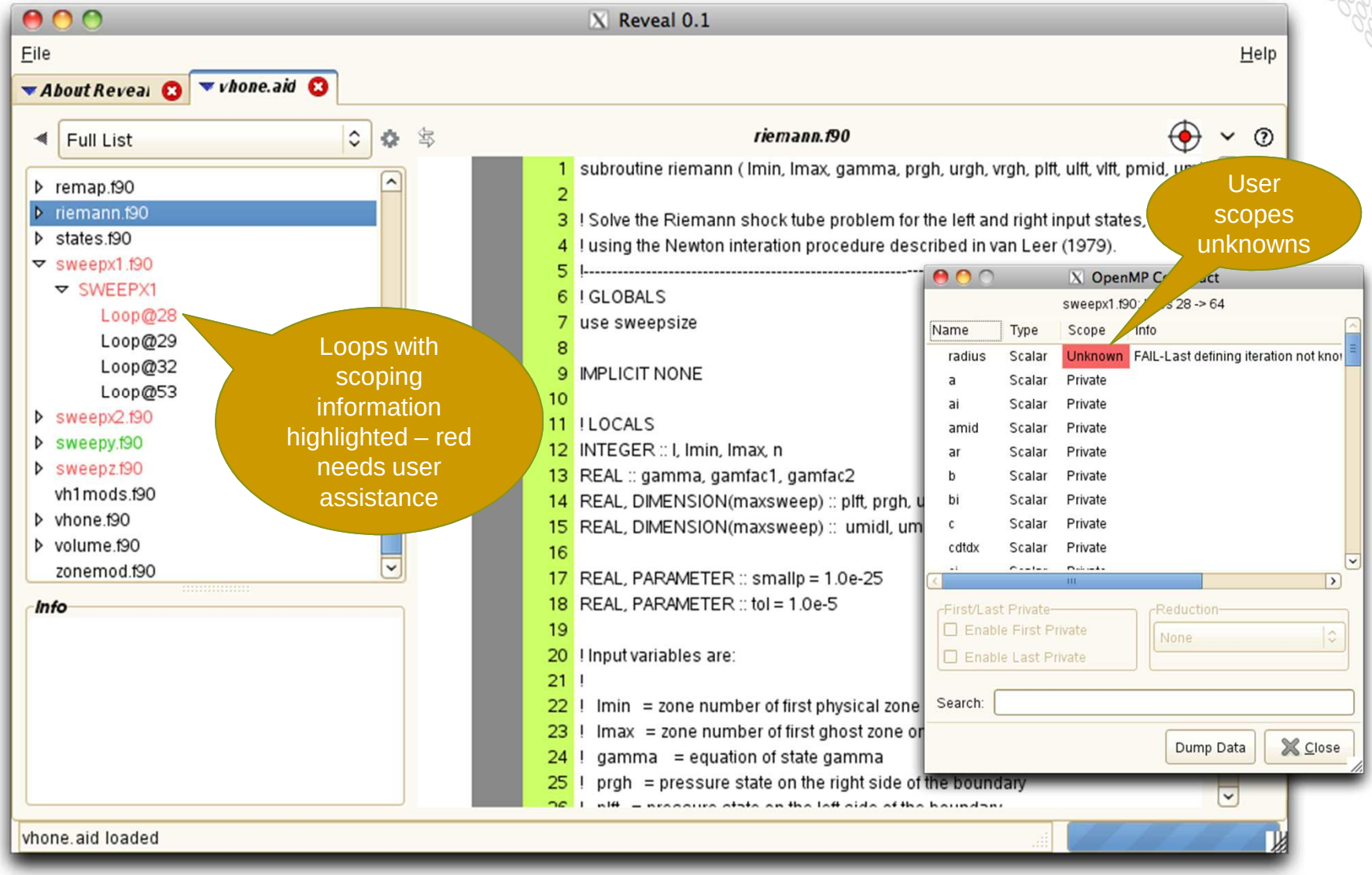
インライン化された関数の擬似コードの表示



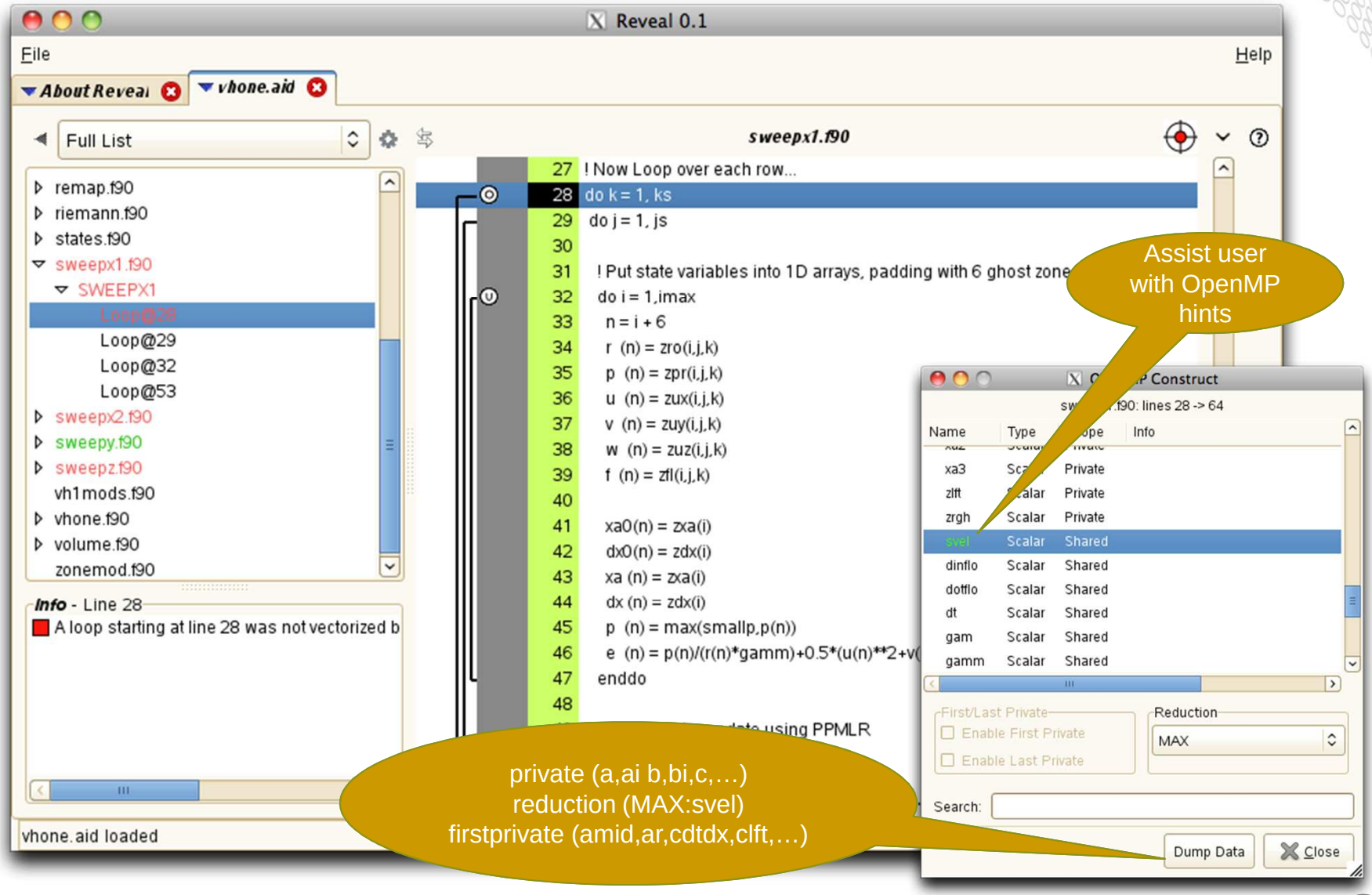
Revealによるスコーピング



Revealによるスコーピング



Revealによるスコーピング



Cray のアクセラレータコンピューティングへのビジョン

プログラミングの複雑さがアクセラレータコンピューティングへの障害である。

- **複数のプラットフォームで動く**単一のプログラミングモデルが必須
  - **ポータブルな** 表現で各レベルの並列化が実装でき
  - プログラミングモデル、最適化手法がマルチコアx86CPUとあまり変わらない
  - **ユーザは同じソースコードで各プラットフォームに合わせて実装ができる**

Crayは統合されたプログラミング環境を、コンパイラ、ライブラリ、ツールによって提供し、高性能なアプリケーション開発を容易にすることを目標に研究開発

Crayの提供するプログラミング環境

- OpenACCディレクティブが実装されたFortran, C, C++ コンパイラ
  - ディレクティブによるアクセラレータプログラミングと最適化
- Crayコンパイラと統合された性能ツールとデバッガ
  - CUDAレベルでデバグ、コード性能解析をする必要がない
- アクセラレータ向け科学計算ライブラリ

XKシステムノード上でのプログラミング

Fortran, C, and C++ コンパイラ

OpenACC ディレクティブでプログラムを記述

- データ転送、ポインタの受け渡し等の記述が容易
- コンパイラがアクセラレータ、x86向け両方の最適化
- CUDAで書かれたカーネル、関数の組み込みも可能
- **ノード並列デバッガ** DDT、TotalViewの利用が可能

開発中のCray **Reveal**はコンパラが生成するソースコードの内部表記を元に性能解析、最適化の作業を支援

- GUIでソースコードを閲覧しながらループのGPU並列化、ベクトル化等を行える
  - **スコーピングで** コードの移植、最適化を支援
  - **Crayの性能解析ツールの情報と組み合わせて、コードの最適化も可能**

科学計算ライブラリ

- OpenACC、CUDAと互換
- 従来のAPIをそのまま継承
- Crayの自動チューニング技術

基本例題: リダクション

配列の総和を求める
Fortranだと4行

```
a=0.0

do i = 1,n
 a = a + b(i)
end do
```

CUDAで書いたリダクションコード

```
__global__ void reduce0(int *g_idata, int
*g_odata)
{
extern __shared__ int sdata[];

unsigned int tid = threadIdx.x;
unsigned int i = blockIdx.x*blockDim.x +
threadIdx.x;
sdata[tid] = g_idata[i];
__syncthreads();

for(unsigned int s=1; s < blockDim.x; s *= 2) {
if ((tid % (2*s)) == 0) {
sdata[tid] += sdata[tid + s];
}
__syncthreads();
}

if (tid == 0) g_odata[blockIdx.x] = sdata[0];
}


extern "C" void reduce0_cuda_(int *n, int *a,
int *b)
{
int *b_d,red;
const int b_size = *n;


cudaMalloc((void **) &b_d , sizeof(int)*b_size);
cudaMemcpy(b_d, b, sizeof(int)*b_size,
cudaMemcpyHostToDevice);
```

```
dim3 dimBlock(128, 1, 1);
dim3 dimGrid(2048, 1, 1);
dim3 small_dimGrid(16, 1, 1);

int smemSize = 128 * sizeof(int);
int *buffer_d, *red_d;
int *small_buffer_d;

cudaMalloc((void **) &buffer_d ,
sizeof(int)*2048);
cudaMalloc((void **) &small_buffer_d ,
sizeof(int)*16);
cudaMalloc((void **) &red_d , sizeof(int));


reduce0<<< dimGrid, dimBlock, smemSize >>>(b_d,
buffer_d);

reduce0<<< small_dimGrid, dimBlock, smemSize
>>>(buffer_d, small_buffer_d);

reduce0<<< 1, 16, smemSize >>>(small_buffer_d,
red_d);

cudaMemcpy(&red, red_d, sizeof(int),
cudaMemcpyDeviceToHost);

*a = red;

cudaFree(buffer_d);
cudaFree(small_buffer_d);
cudaFree(b_d);
}
```

更に最適化されたリダクション

```
template<class T>
struct SharedMemory
{
    __device__ inline operator       T*()
    {
        extern __shared__ int __smem[];
        return (T*)__smem;
    }

    __device__ inline operator const T*() const
    {
        extern __shared__ int __smem[];
        return (T*)__smem;
    }
};

template <class T, unsigned int blockSize, bool nIsPow2>
__global__ void
reduce6(T *g_idata, T *g_odata, unsigned int n)
{
    T *sdata = SharedMemory<T>();

    unsigned int tid = threadIdx.x;
    unsigned int i = blockIdx.x*blockSize*2 + threadIdx.x;
    unsigned int gridSize = blockSize*2*gridDim.x;

    T mySum = 0;
    while (i < n)
    {
        mySum += g_idata[i];
        if (nIsPow2 || i + blockSize < n)
            mySum += g_idata[i+blockSize];
        i += gridSize;
    }
sdata[tid] = mySum;
    __syncthreads();

    if (blockSize >= 512) { if (tid < 256) { sdata[tid] = mySum = mySum
+ sdata[tid + 256]; } __syncthreads(); }
    if (blockSize >= 256) { if (tid < 128) { sdata[tid] = mySum = mySum
+ sdata[tid + 128]; } __syncthreads(); }
    if (blockSize >= 128) { if (tid <  64) { sdata[tid] = mySum = mySum
+ sdata[tid +  64]; } __syncthreads(); }
```

```
  if (tid < 32)
   {
      volatile T* smem = sdata;
      if (blockSize >=  64) { smem[tid] = mySum = mySum + smem[tid + 32];  }
      if (blockSize >=  32) { smem[tid] = mySum = mySum + smem[tid + 16];  }
      if (blockSize >=  16) { smem[tid] = mySum = mySum + smem[tid + 8];  }
      if (blockSize >=   8) { smem[tid] = mySum = mySum + smem[tid + 4];  }
      if (blockSize >=   4) { smem[tid] = mySum = mySum + smem[tid + 2];  }
      if (blockSize >=   2) { smem[tid] = mySum = mySum + smem[tid + 1];  }
   }

   if (tid == 0)
      g_odata[blockIdx.x] = sdata[0];
}
extern "C" void reduce6_cuda_(int *n, int *a, int *b)
{
  int *b_d;
  const int b_size = *n;

  cudaMalloc((void **) &b_d , sizeof(int)*b_size);
  cudaMemcpy(b_d, b, sizeof(int)*b_size, cudaMemcpyHostToDevice);

  dim3 dimBlock(128, 1, 1);
  dim3 dimGrid(128, 1, 1);
  dim3 small_dimGrid(1, 1, 1);
  int smemSize = 128 * sizeof(int);
  int *buffer_d;
  int small_buffer[4],*small_buffer_d;

  cudaMalloc((void **) &buffer_d , sizeof(int)*128);
  cudaMalloc((void **) &small_buffer_d , sizeof(int));
  reduce6<int,128,false><<< dimGrid, dimBlock, smemSize >>>(b_d,buffer_d,
b_size);
  reduce6<int,128,false><<< small_dimGrid, dimBlock, smemSize
>>>(buffer_d, small_buffer_d,128);
  cudaMemcpy(small_buffer, small_buffer_d, sizeof(int),
cudaMemcpyDeviceToHost);

  *a = *small_buffer;

  cudaFree(buffer_d);
  cudaFree(small_buffer_d);
  cudaFree(b_d);
}
```

OpenACCでリダクションを実装する場合

コンパイラが以下の機能を実行:

- !$ACC内の並列化のできるループを確認
- カーネル化する必要があるか判断
- アクセラレータ向けコードCPU向けコードに分割
- ホスト側とアクセラレータ側で計算実行の分担
  - MIMD もしくはSIMDスタイルで実行
- データ転送
  - GPUメモリの割り当てと開放を!$ACC領域の最初と最後で実行
  - CPUとGPUでデータ転送

```
!$acc data present(a,b)
!$acc parallel

a = 0.0

!$acc loop reduction(+:a)

do i = 1,n
  a = a + b(i)
end do

!$acc end parallel
!$acc end data
```

コンパイラからの実行オブジェクト以外の出力

```
 90.        subroutine sum_of_int_4(n,a,b)
 91.        use global_data
 92.        integer*4 a,b(n)
 93.        integer*8 start_clock, elapsed_clocks, end_clock
 94.        !$acc data present(a,b)
 95.  G----< !$acc parallel
 96.  G      a = 0.0
 97.  G      !$acc loop reduction(+:a)
 98.  G g--< do i = 1,n
 99.  G g      a = a + b(i)
100.  G g--> end do
101.  G----> !$acc end parallel
102.        !$acc end data
103.        end subroutine sum_of_int_4
```

```
ftn-6413 ftn: ACCEL File = gpu_reduce_int_cce.F90, Line = 94
  A data region was created at line 94 and ending at line 107.

ftn-6405 ftn: ACCEL File = gpu_reduce_int_cce.F90, Line = 95
  A region starting at line 95 and ending at line 101 was placed on
the accelerator.

ftn-6430 ftn: ACCEL File = gpu_reduce_int_cce.F90, Line = 98
  A loop starting at line 98 was partitioned across the threadblocks
and the 128 threads within a threadblock.
```

リダクションの性能

プログラム言語	実行元	コードの長さ	Gflops性能	X86 1コアに対する性能
Fortran	x86CPU1コア	4	2.0 Gflops	1.0
CUDA	GPU	30	1.74 Gflops	0.87
最適化版 CUDA	GPU	69	10.5 Gflops	5.25
OpenACC	GPU	9	8.32 Gflops	4.16

Cray Performance Tools for Accelerators

- スケーラビリティー
  - 多数のノードでも短いレスポンス時間
  - 性能結果は1ファイル、ディレクトリに集約
- アプリケーション全体の性能情報をユーザに
  - 性能データをソースコードにマッピング
  - 性能データをディレクティブ毎にグループ化
  - CPU側、アクセラレータ側の両方の性能解析が可能
- CPUとGPUの性能情報を一括に管理が可能
  - 性能情報
    - アクセラレータの実行時間、CPUの実行時間、CPUとアクセラレータ間のデータ転送の評価、解析
  - カーネル単位の性能データ
  - アクセラレータのハードウェアカウンタを利用

Performance Tools Example

```
   t1 = gettime()
   stream_counter = 1
   DO j = 1,Nchunks
    my_stream = Streams(stream_counter)



!$acc parallel loop
    DO i = 1,Nvec
     b(i,j) = SQRT(EXP(a(i,j)*2d0))
     b(i,j) = LOG(b(i,j)**2d0)/2d0
    ENDDO
!$acc end parallel loop



     stream_counter = MOD(stream_counter,3) + 1
   ENDDO
!$acc wait
   t2 = gettime()
!$acc end data
```

ループのGPU化ディレクティブ

CPU,GPU間のデータ転送に関する記述が無いので、コンパイラが自動的に!$acc data copy を挿入。
その結果GPU実行毎にa(),b()全体をCPU-GPU間でコピー、コピーバック

Performance Tools Example

```
ftn -rad -hnocaf -c -o toaa2.o toaa2.F90
ftn -rad -hnocaf -o toaa2.x toaa2.o
pat_build -w toaa2.x
aprun toaa2.x+pat
 4999899.3359271679
 Time =  88.750109565826278
Experiment data file written:
/lus/scratch/beyerj/openacc/toaa/toaa2.x+pat+10112-43t.xf
Application 1880125 resources: utime ~83s, stime ~7s
pat_report –T toaa2.x+pat+10112-43t.xf
```

Performance Tools Example

```
Table 1:  Profile by Function Group and Function

 Time%  |     Time  | Imb.  |  Imb.  | Calls  |Group
        |           | Time  | Time%  |        | Function

 100.0% | 88.902394 |    -- |     -- | 5003.0 |Total
|-------------------------------------------------------------------
| 100.0% | 88.902394 |    -- |     -- | 5003.0 |USER
||------------------------------------------------------------------
||  75.4% | 67.041165 |    -- |     -- | 1000.0 |toaa_.ACC_COPY@li.59
||  24.3% | 21.629574 |    -- |     -- | 1000.0 |toaa_.ACC_COPY@li.65
||   0.2% |  0.155233 |    -- |     -- |    1.0 |toaa_
||   0.0% |  0.037016 |    -- |     -- | 1000.0 |toaa_.ACC_KERNEL@li.59
||   0.0% |  0.032549 |    -- |     -- | 1000.0 |toaa_.ACC_SYNC_WAIT@li.65
||   0.0% |  0.006752 |    -- |     -- | 1000.0 |toaa_.ACC_REGION@li.59
||   0.0% |  0.000074 |    -- |     -- |    1.0 |exit
||   0.0% |  0.000031 |    -- |     -- |    1.0 |toaa_.ACC_SYNC_WAIT@li.79
||==================================================================
|   0.0% |  0.000000 |    -- |     -- |    0.0 |ETC
|===================================================================
```

Performance Tools Example

```
Table 2:  Time and Bytes Transferred for Accelerator Regions

  Host  |    Host  |     Acc  |  Acc Copy  | Acc Copy  | Calls  |Calltree
 Time%  |    Time  |    Time  |        In  |      Out  |        |
        |          |          |  (MBytes)  | (MBytes)  |        |

 100.0% |   88.749 |   88.697 | 152587.891 | 76293.945 |   5001 |Total
|-------------------------------------------------------------------------------------------
| 100.0% |   88.749 |   88.697 | 152587.891 | 76293.945 |   5001 |toaa_
||------------------------------------------------------------------------------------------
|| 100.0% |   88.749 |   88.697 | 152587.891 | 76293.945 |   5000 |toaa_.ACC_REGION@li.59
|||-----------------------------------------------------------------------------------------
3||  75.5% |   67.042 |   67.042 | 152587.891 |        -- |   1000 |toaa_.ACC_COPY@li.59
3||  24.4% |   21.630 |   21.630 |         -- | 76293.945 |   1000 |toaa_.ACC_COPY@li.65
3||   0.0% |    0.037 |    0.026 |         -- |        -- |   1000 |toaa_.ACC_KERNEL@li.59
3||   0.0% |    0.033 |       -- |         -- |        -- |   1000 |toaa_.ACC_SYNC_WAIT@li.65
3||   0.0% |    0.007 |       -- |         -- |        -- |   1000 |toaa_.ACC_REGION@li.59(exclusive)
|||=========================================================================================
||   0.0% |    0.000 |       -- |         -- |        -- |      1 |toaa_.ACC_SYNC_WAIT@li.79
|=============================================================================================
Processing step 3 of 3
```

Performance Tools Example

```
ACC: Transfer 2 items (to acc 1600000000 bytes, to host 0 bytes) from toaa2.F90:55
ACC: Execute kernel toaa_$ck_L55_1 async(auto) from toaa2.F90:55
ACC: Wait async(auto) from toaa2.F90:61
ACC: Transfer 2 items (to acc 0 bytes, to host 800000000 bytes) from toaa2.F90:61
ACC: Transfer 2 items (to acc 1600000000 bytes, to host 0 bytes) from toaa2.F90:55
ACC: Execute kernel toaa_$ck_L55_1 async(auto) from toaa2.F90:55
ACC: Wait async(auto) from toaa2.F90:61
ACC: Transfer 2 items (to acc 0 bytes, to host 800000000 bytes) from toaa2.F90:61
ACC: Transfer 2 items (to acc 1600000000 bytes, to host 0 bytes) from toaa2.F90:55
ACC: Execute kernel toaa_$ck_L55_1 async(auto) from toaa2.F90:55
ACC: Wait async(auto) from toaa2.F90:61
ACC: Transfer 2 items (to acc 0 bytes, to host 800000000 bytes) from toaa2.F90:61
ACC: Transfer 2 items (to acc 1600000000 bytes, to host 0 bytes) from toaa2.F90:55
ACC: Execute kernel toaa_$ck_L55_1 async(auto) from toaa2.F90:55
ACC: Wait async(auto) from toaa2.F90:61
ACC: Transfer 2 items (to acc 0 bytes, to host 800000000 bytes) from toaa2.F90:61
ACC: Transfer 2 items (to acc 1600000000 bytes, to host 0 bytes) from toaa2.F90:55
ACC: Execute kernel toaa_$ck_L55_1 async(auto) from toaa2.F90:55
ACC: Wait async(auto) from toaa2.F90:61
```

Performance Tools Example

```
#ifdef USE_DATA
!$acc data create(a,b)
#endif
   t1 = gettime()
   stream_counter = 1
   DO j = 1,Nchunks
    my_stream = Streams(stream_counter)
#ifdef USE_DATA
!$acc update device(a(:,j))
#endif
!$acc parallel loop
    DO i = 1,Nvec
     b(i,j) = SQRT(EXP(a(i,j)*2d0))
     b(i,j) = LOG(b(i,j)**2d0)/2d0
    ENDDO
!$acc end parallel loop
#ifdef USE_DATA
!$acc update host(b(:,j))
#endif
     stream_counter = MOD(stream_counter,3) + 1
   ENDDO
!$acc wait
   t2 = gettime()
!$acc end data
```

GPUでのメモリ割り当て

```
ftn -rad -hnocaf -DUSE_DATA -c -o toaa2.o toaa2.F90
ftn -rad -hnocaf -DUSE_DATA -o toaa2.x toaa2.o
pat_build -w toaa2.x
aprun toaa2.x+pat
 50000944.502389029
 Time =  4.1188710090027598
Experiment data file written:
/lus/scratch/beyerj/openacc/toaa/toaa2.x+pat+10178-
.xf
App      on 1880347 resources: utime ~4s, stime ~2s
pat_rep      oaa2.x+pat+10112-43t.xf
```

CPUからGPUへデータ転送

GPUからCPUへデータ転送

Performance Tools Example

```
Table 2:  Time and Bytes Transferred for Accelerator Regions

  Host  |    Host  |     Acc  | Acc Copy  | Acc Copy  | Calls  |Calltree
 Time%  |    Time  |    Time  |       In  |      Out  |        |
        |          |          | (MBytes)  | (MBytes)  |        |

 100.0% |   4.148 |    3.714 |   762.939 |   762.939 |  70005 |Total
|-------------------------------------------------------------------------------------------
| 100.0% |    4.148 |    3.714 |   762.939 |   762.939 |  70005 |toaa_
|        |          |          |           |           |        | toaa_.ACC_DATA_REGION@li.27
|||-----------------------------------------------------------------------------------------
3||  67.3% |    2.792 |    2.487 |        -- |   762.939 |  30000 |toaa_.ACC_UPDATE@li.71
||||---------------------------------------------------------------------------------------
4|||  60.0% |    2.487 |    2.487 |        -- |   762.939 |  10000 |toaa_.ACC_COPY@li.71
4|||   6.9% |    0.286 |       -- |        -- |        -- |  10000 |toaa_.ACC_SYNC_WAIT@li.71
4|||   0.4% |    0.018 |       -- |        -- |        -- |  10000 |toaa_.ACC_UPDATE@li.71(exclusive)
||||=======================================================================================
3||  25.7% |    1.066 |    1.055 |   762.939 |        -- |  20000 |toaa_.ACC_UPDATE@li.52
||||---------------------------------------------------------------------------------------
4|||  25.4% |    1.055 |    1.055 |   762.939 |        -- |  10000 |toaa_.ACC_COPY@li.52
4|||   0.3% |    0.011 |       -- |        -- |        -- |  10000 |toaa_.ACC_UPDATE@li.52(exclusive)
||||=======================================================================================
[[[...]]]
Processing step 3 of 3
```

Libsci_acc

- XK向けBLAS とLAPACK
  - 100%互換のAPI
- CUDA、OpenACCの両方に対応
- FortranとCのAPIをサポート
- 2種類のインターフェース
  - Simpleインターフェース
    - ソースコードの変更なく、GPUの使用
  - Expertインターフェース
    - 僅かなコードの変更でGPUを有効に利用

Libsci_ACCルーチン

- BLAS
  - **[s,d,c,z]GEMM**
  - **[s,d,c,z]TRSM**
  - [z,c]HEMM
  - [s,d]SYMM
  - [s,d,c,z]SYRK
  - [z,d]HERK
  - [s,d,c,z]SYR2K
  - [s,d,c,z]TRMM
  - **All level 2 BLAS**
  - **All level 1 BLAS**
- LAPACK
  - **[d,z]GETRF**
  - **[d,z]GETRS**
  - **[d,z]POTRF**
  - **[d,z]POTRS**
  - **[d,z]GESDD**
  - **[d,z]GEBRD**
  - **[d,z]GEQRF**
  - **[d,z]GELQF**

Eigenvalue Solvers

- **DSYEV**
- **ZHEEV**
- **DSYEVR**
- **ZHEEVR**
- **DSYEVD**
- **ZHEEVD**
- **DSYGVD**
- **ZHEGVD**
- **DGEEV**
- **ZGEEV**

Full-HYBRID HYBRID is planned **No HYBRID**

Libsci_accのSimpleインターフェースでの使い方

メインプログラムの最初に`libsci_acc_init`で初期化

`libsci_host_alloc`を使ってPinnedメモリの割り当て

DGEMMの呼び出し方は従来のDGEMMと一緒

行列のサイズに合わせて、CPU,GPU,ハイブリッド実行を選択

行列データA,B,CはCPU側

```
call libsci_acc_init()
:
call libsci_host_alloc(a,8*m*lda)
:

call dgemm('n','n',m,n,k,alpha,&
           a,lda,b,ldb,beta,c,ldc)
```

Libsci_accの使い方:
OpenACCでGPUルーチンの実行

- CPU－GPU間の データ転送はOpenACCで処理
- DGEMMのGPU用インターフェース

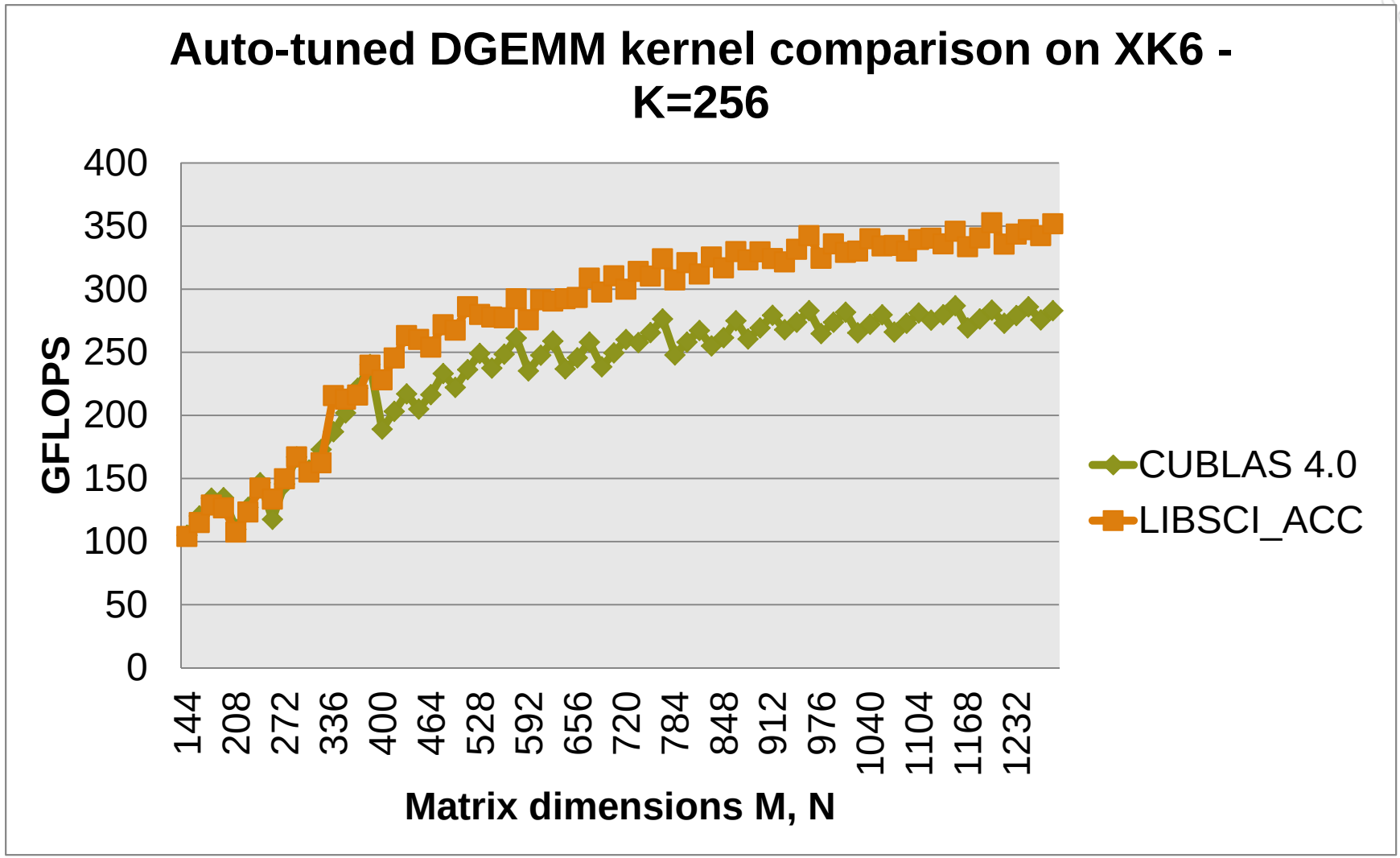
```
!$acc data copy(a,b,c)

!$acc parallel
!Do Something （GPU実行）
!$acc end parallel

!$acc host_data use_device(a,b,c)

call dgemm_acc('n','n',m,n,k,&
               alpha,a,lda,&
               b,ldb,beta,c,ldc)

!$acc end host_data
!$acc end data
```

Libsci_accの使い方:
OpenACCでGPUルーチンの実行

- CPU－GPU間の データ転送はOpenACCで処理
- Simpleインターフェースで使用

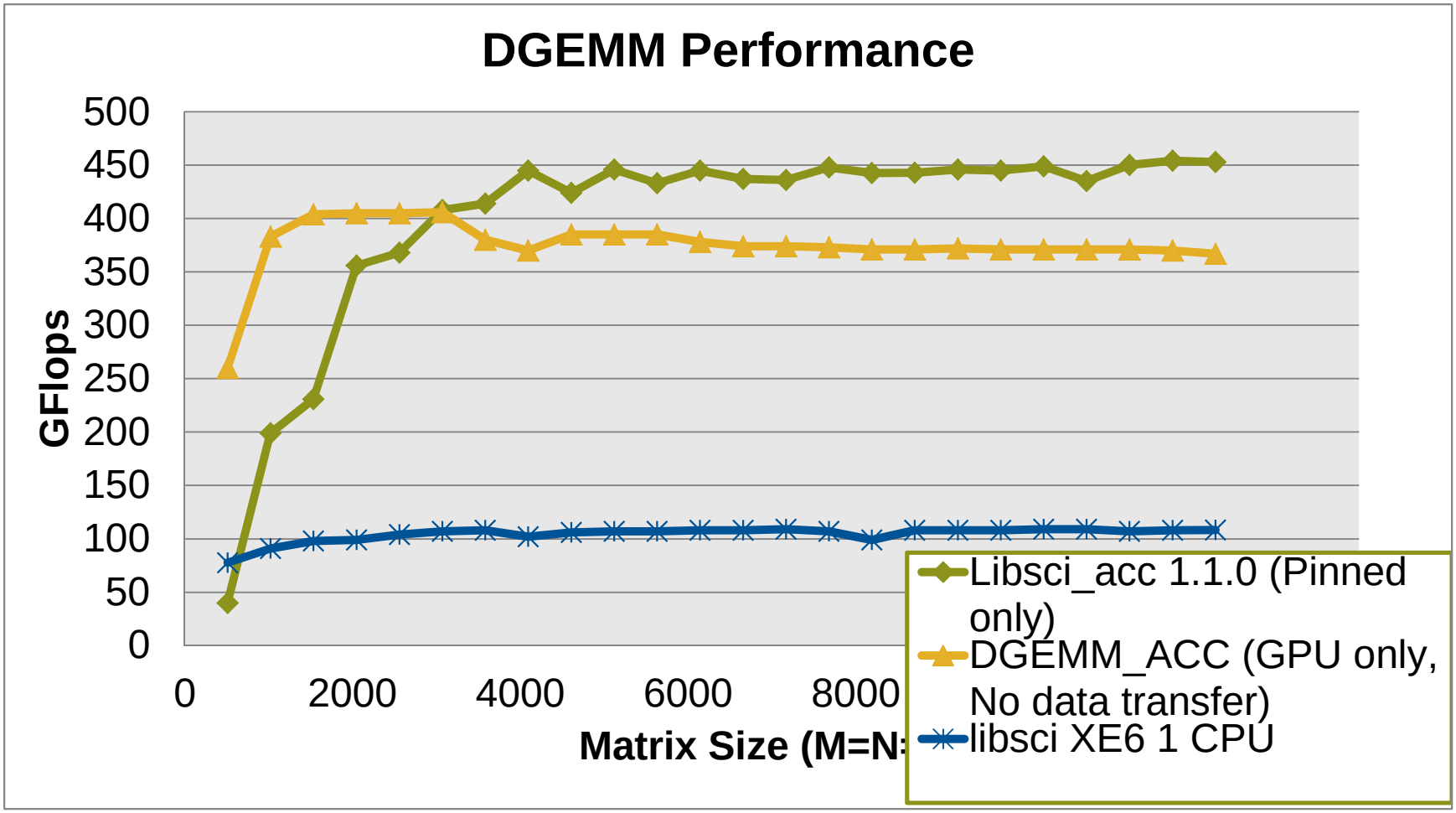
```
!$acc data copy(a,b,c)

!$acc parallel
!Do Something （GPU実行）
!$acc end parallel

!$acc host_data use_device(a,b,c)

call dgemm ('n','n',m,n,k,&
                alpha,a,lda,&
                b,ldb,beta,c,ldc)

!$acc end host_data
!$acc end data
```

Auto-Tuned DGEMM



CUBLAS4.1 improved performance. We are targeting to replace CUBLAS5.0 for Kepler.

DGEMMの性能


DGEMM Performance
GFlops
500
450
400
350
300
250
200
150
100
50
0
0
2000
4000
6000
8000
Matrix Size (M=N=
Libsci_acc 1.1.0 (Pinned only)
DGEMM_ACC (GPU only, No data transfer)
libsci XE6 1 CPU

まとめ

- ヘテロジニアスマルチコア のトレンドは今後も続く
  - Fat ノードはさらにFatに
  - GPUの登場で、プログラミングはより複雑に
- アクセラレータプログラミングを効率よく行う為のツール群、研究開発
  - 高レベルなプログラミング言語のままでのアクセラレータプログラミング、性能チューニング
    - Cray Compilation Environment (CCE)
      - OpenACC のサポート
      - コンパイラによる様々な出力データをツールに読み込ませる事で更なるプログラムの最適化を可能に、
    - Cray Reveal
      - ソースコードと実行性能の対応関係の理解を容易にし、更なる性能チューニング、並列化を可能に
    - Cray Performance Analysis Toolkit
      - GPU and CPUの性能解析を1つのツールで可能に
    - Cray Auto-Tuning Libraries
      - システム、問題サイズ、入力パラメータ毎に最適化された科学計算ライブラリ