



せまりくるGPU ～GPU対応の背景と動向～



吉田 龍二

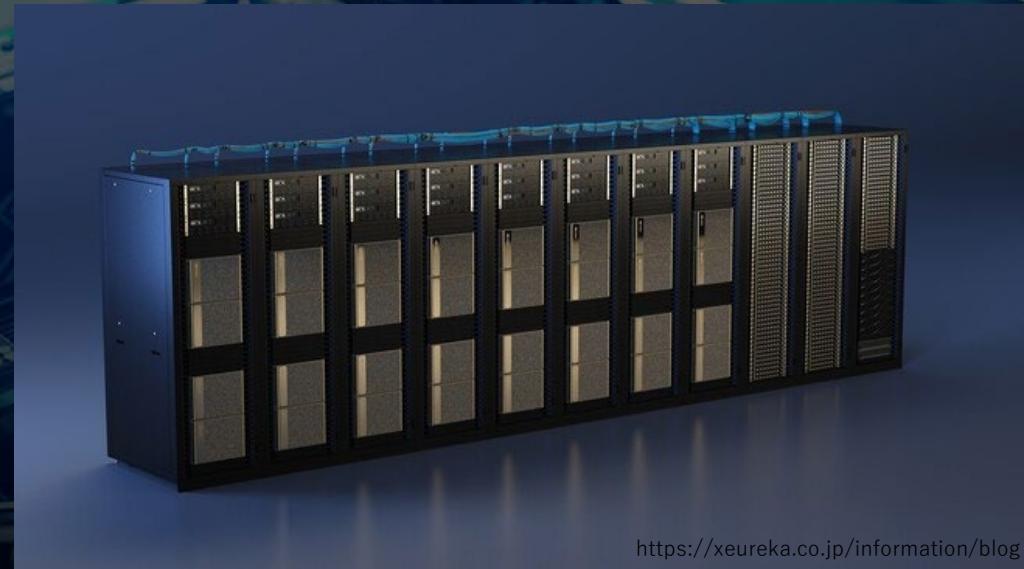
横浜国立大学 環境情報研究院 / 都市科学部

第3回 気象・気候 計算科学研究連絡会
～気象・気候モデルのGPU対応～

せまりくるGPU

計算科学分野における話題だけではなく、産業界のニュースになるほど浸透しつつある。

日本の創薬を変革するためのスーパーコンピューター
Tokyo-1を発表 (MAR 22 2023)



NVIDIAと三井物産株式会社は協業し、高解像度分子動力学シミュレーションやジェネレーティブAIモデルなど、創薬を加速するテクノロジで日本の製薬業界をさらに発展させるためにTokyo-1を推進することを発表した。日本の製薬会社等が利用できるようにし、世界第3位である日本の製薬産業を加速させる。

<https://www.sankei.com/pressrelease/prtimes/U3PEHTWNUNP4FAGKVOTJIN5FWQ/>

Google reveals its newest A.I. supercomputer, says it beats NVIDIA (APR 5 2023)



Google headquarters is seen in Mountain View, California, United States on September 26, 2022. Tayfun Coskun | Anadolu Agency | Getty Images

Google published about one of its artificial intelligence supercomputers, (中略), as power-hungry machine learning models continue to be the hottest part of the tech industry. Google has been designing and deploying AI chips called Tensor Processing Units, or TPUs, since 2016.

<https://www.cnbc.com/2023/04/05/google-reveals-its-newest-ai-supercomputer-claims-it-beats-nvidia-.html>

せまりくるGPU

東京大学情報基盤センターの次期スパコン、
Oakforest-PACS-II (Peak 200 PFLOPS目標) はGPU搭載ノードを中心としたシステムとなる予定
普段、研究に大学のスパコンを利用する方も多いと思いますが、今後GPUマシンに置き換わる可能性があります。



東京大学情報基盤センター
スーパー・コンピューティング部門

Supercomputing Division,
Information Technology Center,
The University of Tokyo

ENGLISH サイト内検索

お問い合わせ ● アクセス ● リンク ● サイトマップ

ホーム システム 利用案内 サポート FAQ 研究会・イベント 広報・刊行物 研究成果 研究部門について 研究活動設備紹介 Wisteria/BDEC-01

ホーム > システム > GPU移行ポータルサイト

GPU移行ポータルサイト

背景

東京大学情報基盤センターと筑波大学計算科学研究センターが共同で運営する最先端共同HPC基盤施設(JCAHPC)のOakforest-PACSシステム(OFP)は2022年3月末で無事運用を終了いたしました。現在、JCAHPCでは2024年4月運用開始を目指して、OFPの後継機種(OFP-II、ピーク性能200 PFLOPS以上を目標)の導入を進めています。スパコンへの性能要求とともに省電力、脱炭素化という昨今の状況を考慮すると、GPU等の演算加速装置の導入は不可避と考え、OFP-IIはGPU搭載ノードを中心としたシステムとする予定です(一部CPUのみのノードもあります)。また、OFP-IIのプロトタイプとしてWisteria-Mercuryという小型のシステムを導入する予定です。

東大情報基盤センターのシステムはこれまで汎用CPUを中心としたシステムが中心でしたので、アプリケーションの移植が大きな課題となります。3,000人近い利用者の皆様に2024年4月にOFP-IIの利用を開始していただくためには、コードの移植を遅くとも2022年末までに開始する必要があります。そこで、2022年春に各社GPUを対象として7種類のブリーベンチマークを実施し、その結果を踏まえ、6月にはMercury及びOFP-IIにはGPUとして「NVIDIA H100及びその後継機種」を採用することを既に決定しております。

2024年4月のOFP-IIの利用開始に向け、皆様の既存コードをご自身でGPUへ移植するために、役立つ情報を集約したサイトを公開しておりますので詳細は以下サイトをご参照ください。

[GPU移行ポータルサイト](#)

https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/supercomputer/gpu_porting.php



GPU移行

GPU移行に関するポータルサイト

ミニキャンプ

東京大学情報基盤センターでは、既存のCPUシミュレーションコードをCUDA、OpenACC、ライブラリでGPU化したり、既存の単体GPUコードを複数GPUコードにすることなどに取り組む「GPUミニキャンプ」を定期的に開催しております。皆様のCPUコードのGPU移植をサポートするため、2022年12月以降は頻度を増やして開催いたします。本ミニキャンプはZoomによるオンライン開催を予定しており、受講料は無料です。

詳細は下記をご参照ください。

- GPUミニキャンプ (2022年12月12日、19日)
- GPUミニキャンプ (2023年3月6日、13日)
- お試しアカウント付き並列プログラミング講習会

GPU移行相談会

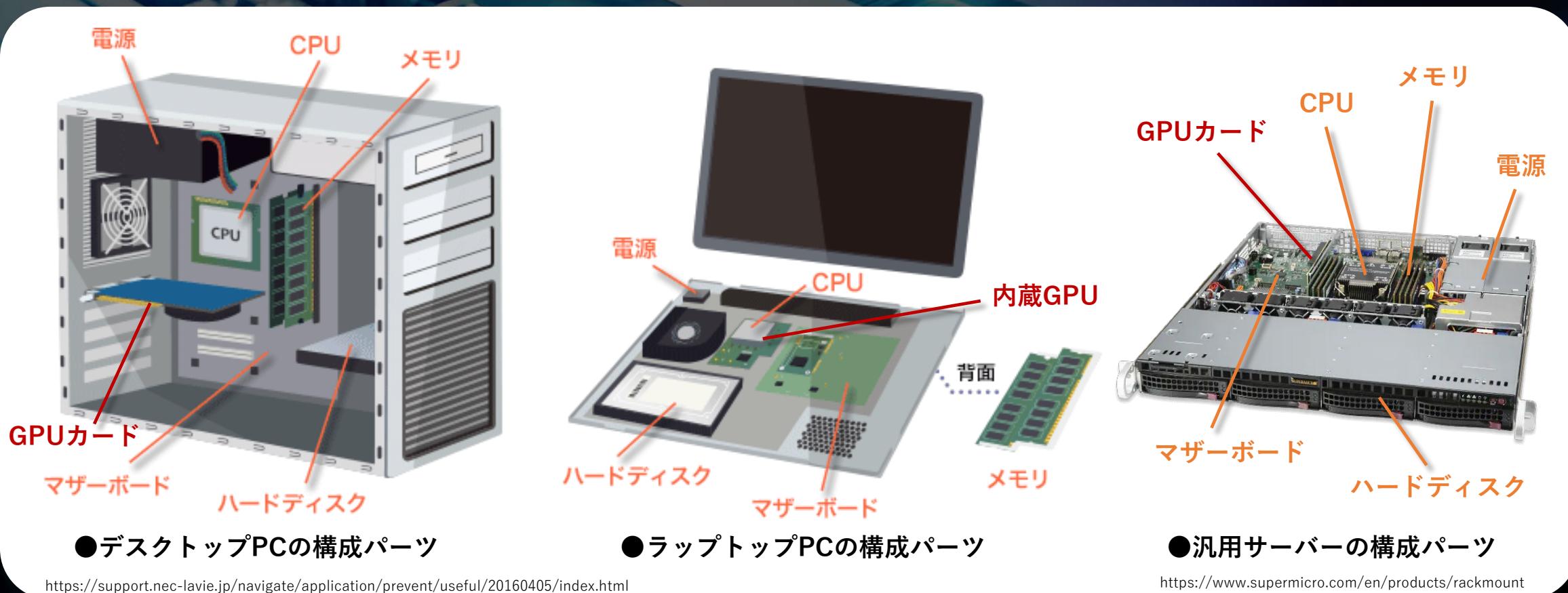
東京大学情報基盤センターでは、OFP-IIの利用開始に向け、GPU移行に関する様々な疑問をGPU計算に実際に取り組んでいる研究者や技術者(チーフター)と直接相談できる相談会を定期的に開催します。

- 既存のCPUコードをGPU化する適切な方法がわからない。
- GPU向けライブラリを紹介してほしい。
- 性能を上げるためのプロファイルの利用方法を聞きたい。
- 複数のGPUを利用した計算方法について相談したい。
- そもそもGPU計算がよくわからない。

https://jcahpc.github.io/gpu_porting/

そもそもGPUってなんですか？

- GPU : **Graphics Processing Unit** (CPU : Central Processing Unit)
- パソコンを構成するパーツの1つで、一般的なPCならどれでも入っている。
- 名前のとおり主にディスプレイ上の画像処理を担当するパーツ。



特に3D描画処理の強化を目的に進化した



<https://3dunity.org/game-create-lesson/racing-game/>

3D画像処理の例：

- ・モデル化された木や草を画面上の3次元空間の位置に合わせて変形する。
- ・モデル化された物体の影を視点と光源の位置に合わせて作成する。

GPUは3D描画を計算するハードウェア：

90年代の終わりに3D描画の全工程を受け持つことができるNVIDIA GeForceやATI RADEON (現AMD)というグラフィックスハードウェアが登場した。

プログラマブルシェーダの登場：

多様な描画表現を“プログラムできる”仕様とし、そのプログラムを実行可能とする仕組みで、この進化によって開発者が作成した描画表現アプリをGPU上で自由に動かせるようになった。

高解像度ディスプレイに対する大量の計算：

モデルの変形等の計算をディスプレイの画素数(1024x720など)に合せて全点で瞬時に計算する能力を持つ。

なぜ計算にGPUを使う？

動作周波数による
計算性能向上



人数を増やせば計算は速くなる。
でも多量のエネルギーを要求！



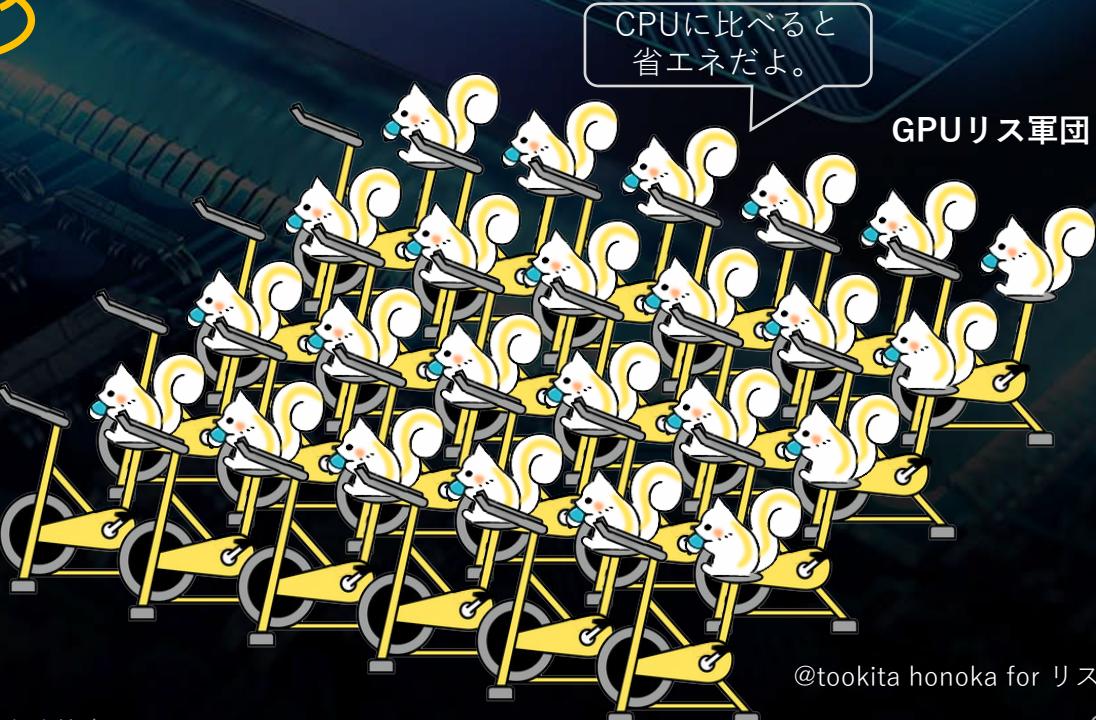
コア数増加による
計算性能向上

もう限界…

GPUって、できることちょっと限
られてはいるけど、なんか省エネ
で、超大人数で計算してる。
とりま、試してみない？



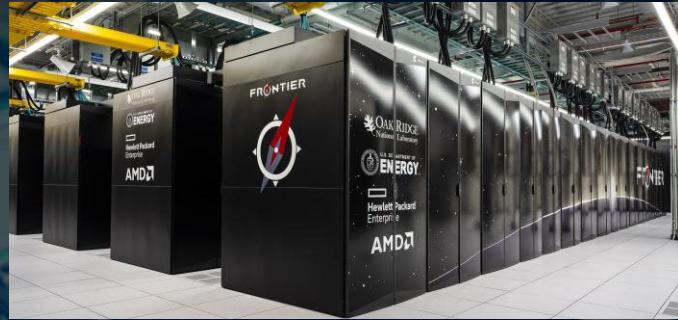
GPUリス軍団



なぜいま話題になっている？

1. 次世代スパコンが本当にGPUマシンに置き換えられるため。
2. GPUという計算機が行列計算に向いたアーキテクチャをしており、話題の機械学習における計算と親和性が高いため。
3. コーディングが比較的容易になったため。
 - 既存のコードにOpenACCやOpenMP4.0を使った指示行の追加でGPU化が可能。
 - 指示行の有効/無効はコンパイルオプションで切り替えるため、従来のコードを壊さずに移行できる。

米国の次世代GPUマシン



<https://www.ornl.gov/news/ornl-celebrates-launch-frontier-worlds-fastest-supercomputer>

1th in TOP500: Frontier - HPE Cray EX235a, AMD 3rd Gen EPYC 64C 2GHz, **AMD Instinct MI250X**, Slingshot-11, HPE
DOE/SC/Oak Ridge National Laboratory
Peak performance: 1,600 Petaflops

2022年登場！
フルAMD構成



<https://blogs.nvidia.com/blog/2021/05/27/nersc-perlmutter-ai-supercomputer/>

8th in TOP500: Perlmutter - HPE Cray EX235n, AMD EPYC 7763 64C 2.45GHz, **NVIDIA A100 SXM4 40 GB**, Slingshot-10, HPE
DOE/SC/LBNL/NERSC
Peak performance: 90 Petaflops

2022年登場！
NVIDIA A100を6000個



<https://www.alcf.anl.gov/news/argonne-lays-groundwork-its-aurora-exascale-supercomputer>

Coming soon: Aurora - HPE Cray EX, Intel Xeon Max Series, **Intel Xe GPU Max Series**, Slingshot-11, HPE
DOE/SC/Argonne National Laboratory
Peak performance: 2,000 Petaflops

2023年登場予定！

OpenACCを使ったコーディング：簡単な例 by ゴミプログラム

```
program dum_test
implicit none
integer, parameter :: n = 1000000000
real(4), parameter :: pi = 3.141592
integer :: i
real(4) :: v1(n), v2(n), v3(n), accum

do i=1, n
  v1(i) = real(i)
enddo
accum = 0.d0
```

メインの計算部分

```
do i=1, n
  v2(i) = sin(pi/v1(i)) - cos(pi/v1(i)) * 3.d0
  v3(i) = sin(pi/v2(i)) + cos(pi/v2(i)) * 2.d0
  accum = accum + v3(i)
enddo
```

```
print *, "accum:", accum
end program dum_test
```

GPU化

```
program dum_test
implicit none
integer, parameter :: n = 1000000000
real(4), parameter :: pi = 3.141592
integer :: i
real(4) :: v1(n), v2(n), v3(n), accum

do i=1, n
  v1(i) = real(i)
enddo
accum = 0.d0

!$acc kernels
do i=1, n
  v2(i) = sin(pi/v1(i)) - cos(pi/v1(i)) * 3.d0
  v3(i) = sin(pi/v2(i)) + cos(pi/v2(i)) * 2.d0
  accum = accum + v3(i)
enddo
!$acc end kernels

print *, "accum:", accum
end program dum_test
```

OpenACCを使ったコーディング

```
[ryuji@HOGE test]$ nvfortran -acc=gpu -Minfo=accel sample1.f90
```

template:

23, Generating implicit copyout(v3(:),v2(:)) [if not already present]

Generating implicit copyin(v1(:)) [if not already present]

Generating implicit copy(accum) [if not already present]

24, Loop is parallelizable

Generating NVIDIA GPU code

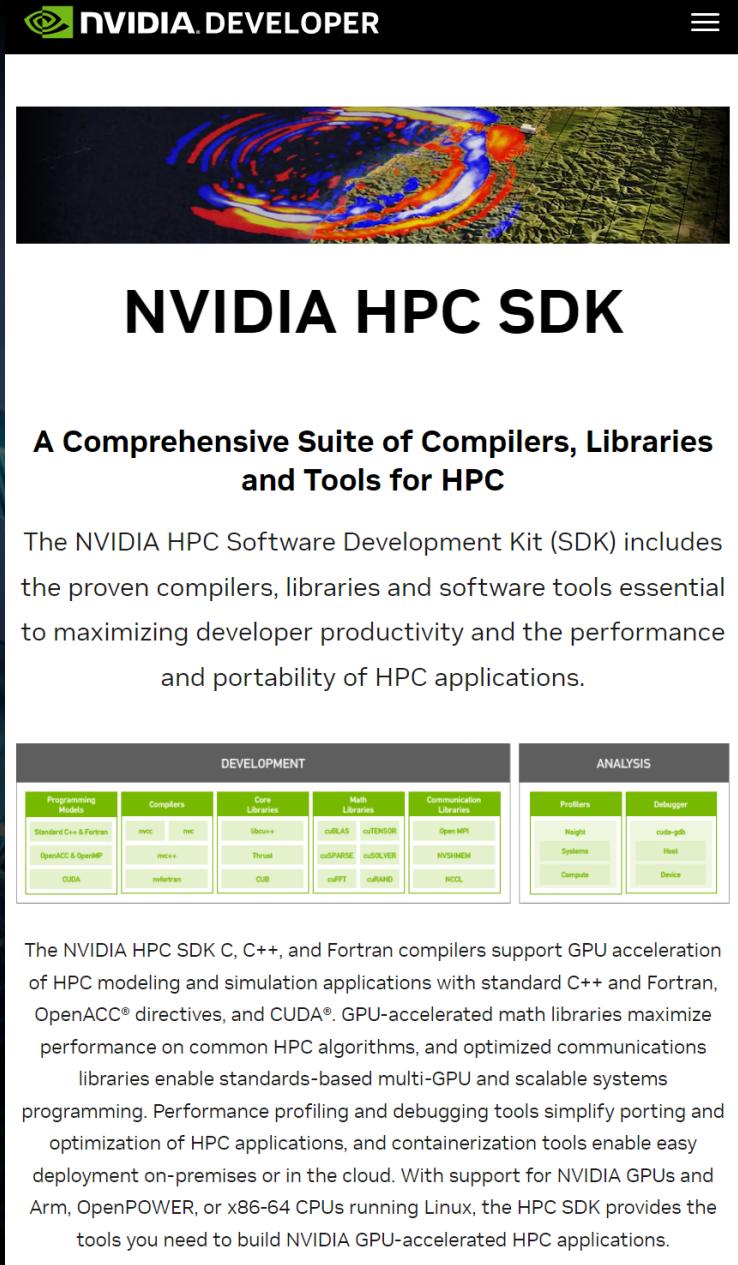
24, !\$acc loop gang, vector(128) ! blockidx% x threadidx% x

Generating implicit reduction(:accum)

[ryuji@HOGE test]\$./a.out

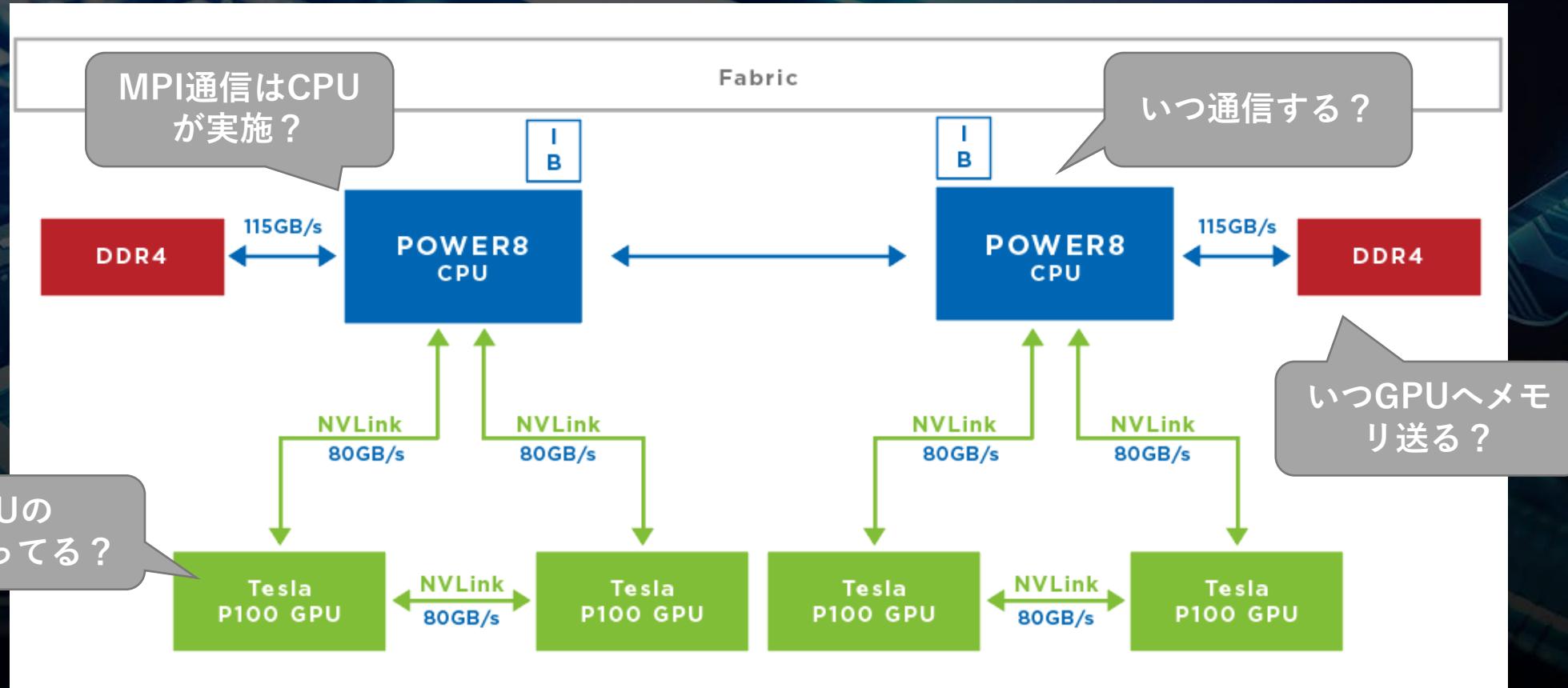
NVIDIA GPU向けの開発キットが配布されており、インストールすればGPUコンピューティングを始められる。

* 実はopenACCのターゲットを"-acc=multicore"としてマルチコアCPUを指定するとスレッド並列プログラムとしても機能する。



じゃあ何が難しいの？

CPU-GPU間通信：大まかには交通整理が難しい。



<https://www.exxactcorp.com/blog/HPC/exploring-gpu-cpu-connectivity-with-nvidia-nvlink-technology>

実アプリへの適用例 (asuca, WRFg)

物理パッケージのGPU化例



GPU対応している物理スキーム群：

- MP: Kessler, WSM6, Morrison, etc.
- Radiation: RRTMG(both SW & LW)
- Land: NOAH, etc.
- PBL: YSU, MYNN
- CP: KF, Grell, BMJ, etc.

<https://wrfg.net/wrfg-description/>

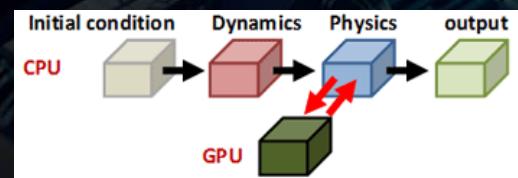
フルパッケージのGPU化例



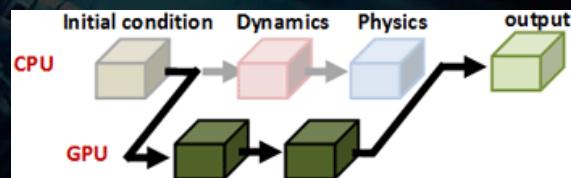
The image is a screenshot of a news article from ITmedia. The header reads "東工大、GPGPUで次世代気象モデルの高速化に成功". The text below the header discusses the success of using GPGPU to accelerate the next-generation meteorological model developed by the University of Tokyo. The author is listed as "西尾泰三, ITmedia". The date of publication is 2010年03月24日 19時11分 公開. The URL of the article is <https://www.itmedia.co.jp/enterprise/articles/1003/24/news078.html>.

<https://www.itmedia.co.jp/enterprise/articles/1003/24/news078.html>

物理スキームのGPU化



メインループ全体のGPU化



力学コアもGPUで計算し、CPU-GPU間のデータ通信を減らすことで高効率化！

<http://www.sim.gsic.titech.ac.jp/Japanese/Research/weather.html>

実アプリへの適用例 (DOE's E3SM : SCREAM)

さようなら Fortran、こんにちはC++

- 2021年11月にFortranコードを凍結したらしい
- C++ コーディング with the aid of Kokkos

様々なアーキテクチャのスパコン
に対応するため自動的に調整して
くれる機能 (Kokkos) を使った
コーディングを取り入れた。

<https://climatedevelopment.science.energy.gov/technical-highlights/simple-cloud-resolving-e3sm-atmosphere-model-scream>
AGU Fall Meeting 2021: Philosophy and Progress of the Simple Cloud-
Resolving E3Sm Atmosphere Model by Peter Caldwell

Original F90

```
kloop_sedi_c2: do k = k_qxtop,k_qxbot,-kdir
  qc_notsmall_c2: if (qc_incld(k)>qsmall) then
    !-- compute Vq, Vn
    call get_cloud_dsd2(qc_incld(k),nc_incld(k),mu_c(k),rho(k),nu,dnu, &
    lamc(k),tmp1,tmp2,lcldm(k))

    nc(k) = nc_incld(k)*lcldm(k)
    dum = 1._rtype / bfb_pow(lamc(k), bcn)
    V qc(k) = acn(k)*bfb_gamma(4._rtype+bcn+mu_c(k))*dum/(bfb_gamma(mu_c(k)+4._rtype))
    V nc(k) = acn(k)*bfb_gamma(1._rtype+bcn+mu_c(k))*dum/(bfb_gamma(mu_c(k)+1._rtype))

  endif qc_notsmall_c2
  Co_max = max(Co_max, V qc(k)*dt_left*inv_dzq(k))
enddo kloop_sedi_c2
```

Ported to C++/Kokkos

```
Kokkos::parallel_reduce(
  Kokkos::TeamThreadRange(team, kmax-kmin+1), [&] (int pk_, Scalar& lmax) {
    const int pk = kmin + pk_;
    const auto range_pack = scream::pack::range<IntSmallPack>(pk*Spack::n);
    const auto range_mask = range_pack >= kmin_scalar && range_pack <= kmax_scalar;
    const auto qc_gt_small = range_mask && qc_incld(pk) > qsmall;
    if (qc_gt_small.any()) {
      // compute Vq, Vn
      Spack nu, cdist, cdist1, dum;
      get_cloud_dsd2<false>(qc_gt_small, qc_incld(pk), nc_incld(pk), mu_c(pk), rho(pk), nu, dnu, lamc(pk), cdist,
      nc(pk).set(qc_gt_small, nc_incld(pk)*lcldm(pk));
      dum = 1 / (pack::pow(lamc(pk), bcn));
      V qc(pk).set(qc_gt_small, acn(pk)*pack::tgamma(4 + bcn + mu_c(pk)) * dum / (pack::tgamma(mu_c(pk)+4)));
      if (log_predictNc) {
        V nc(pk).set(qc_gt_small, acn(pk)*pack::tgamma(1 + bcn + mu_c(pk)) * dum / (pack::tgamma(mu_c(pk)+1)));
      }
      const auto Co_max_local = max(qc_gt_small, -1,
                                     V qc(pk) * dt_left * inv_dzq(pk));
      if (Co_max_local > lmax)
        lmax = Co_max_local;
    }
  }, Kokkos::Max<Scalar>(Co_max));
  team.team_barrier();
}
```

実アプリへの適用例 (E3SM : SCREAM)

C++化とKokkosの効果はいかに？

SCREAMの力学コアは世界の気候モデルの中で最速かも？

Model	Computer (Linpack rating)	NGGPS 3km Benchmark
NOAA FV3 2015	Edison (2.6 PF)	0.16 SYPD
HOMME 2017	TaihuLight (125 PF)	0.34 SYPD
SCREAMv1 2021	Summit (200 PF)	1.38 SYPD

<https://climatedevelopmentscience.energy.gov/technical-highlights/simple-cloud-resolving-e3sm-atmosphere-model-scream>
AGU Fall Meeting 2021: Philosophy and Progress of the Simple Cloud-Resolving E3Sm Atmosphere Model by Peter Caldwell

L. Bertagna et. al., SC '20: Proceedings of the International Conference for High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis, 2020

OFFICE OF BIOLOGICAL AND ENVIRONMENTAL RESEARCH
Climate and Earth System Modeling

U.S. DEPARTMENT OF ENERGY | Office of Science

THE SIMPLE CLOUD-RESOLVING E3SM ATMOSPHERE MODEL (SCREAM)

The Energy Exascale Earth System Model (E3SM, e3sm.org) project is building a new atmosphere model - the Simple Cloud-Resolving E3SM Atmosphere Model (SCREAM) - capable of using Graphics Processing Unit (GPU) architectures to run efficiently at a global resolution of 3 km cell length. Conventional, low-resolution climate models use grid cells from 25 to 100 km to a side. One key advantage of higher resolution is the ability to capture fine-scale extreme weather events such as atmospheric rivers (Fig. 1), which bring heavy precipitation to the west coasts of North America and northern Europe. Higher resolution is also important for accurately resolving coastal areas and mountainous regions, and for capturing convective clouds, which are a leading source of climate change uncertainty (Sanderson et al., 2008 and Sherwood et al., 2014).

COMPUTATIONAL OPPORTUNITY

A major change in High-Performance Computing is currently underway. GPUs enable revolutionary simulations, but only for applications allowing simultaneous computation of huge numbers of calculations and only for codes designed to run on GPUs. Global atmospheric simulations with very fine grid spacing are a perfect application for these new computing architectures. Finer resolution provides an enormous number of columns to parallelize over and as mentioned above, higher resolution solves longstanding problems in climate science.

A NEW MODEL

In June 2018 the E3SM project embarked on the SCREAM effort, which is occurring in two overlapping stages. Stage 1 extends the existing E3SM model to include process representations appropriate for 3 km resolution. The resulting Fortran code is being used to understand the climate of the SCREAM model and to serve as a template for Stage 2, where the code is rewritten in C++ using the Kokkos library (Edwards et al., 2014) to enable efficient simulation on CPUs, GPUs, and future architectures.

Get SCREAM

- DOI – <https://doi.org/10.5281/zendone.4637766>
- Code – <https://github.com/E3SM-Project/scream>

e3sm.org

climatemodeling.science.energy.gov

前座はここまで…

過去に「マルチプロセッサ化」を迫られたように
過去に「ベクター機からスカラー機への調整」を迫られたように
GPU化の波が迫ってきている。

もはや最新型の計算機を利用するための必須技術となりつつあり、
国内の大気モデルにおいても、大きな動きが始まっている。

その「GPU化」の一部を、これからご紹介してまいります。