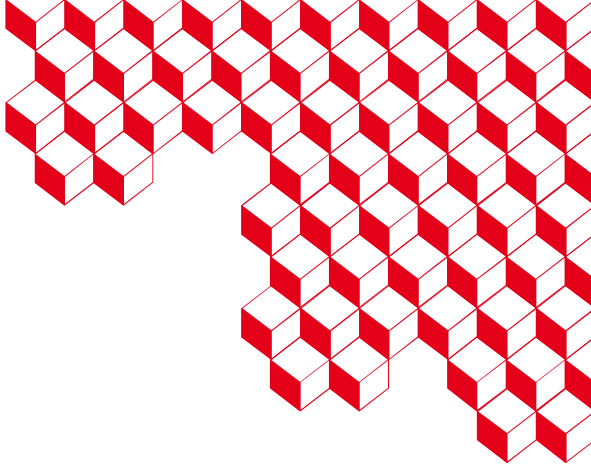


Arcane: API Accélérateur

12 juin 2024

Gilles Grospellier, CEA, DAM, DIF, F-91297 Arpajon Cedex

Plan

Contexte

Choix de conception

Description des fonctionnalités

Performances

Conclusion

Contexte

- Arcane est l'architecture de plusieurs codes de calcul du CEA/DAM
  - Environ 3 millions de lignes de C++ pour ces codes
  - Plusieurs physiques, multi-matériaux, différents types de maillages (cartésien, AMR, non structuré)
  - Plus de 10000 boucles de calcul par code : pas de point chaud au niveau du profilage
- Arcane développé en collaboration avec l'IFPEN (www.ifpenergiesnouvelles.com)
  - Utilisation dans des codes commerciaux et de recherche
  - Simulation de bassin, Enfouissement du CO2, Géothermie
- OpenSource depuis 2021 (https://github.com/arcaneframework)

- Besoin de porter nos codes sur accélérateurs
  - Évolution incrémentale indispensable
  - Perturber le moins possible le code source
    - Même code source pour le CPU et GPU si possible
    - L'aspect validation est primordial

Conception de l'API Accélérateur

- Un seul code et **un seul exécutable** pour le CPU et le GPU
  - Pouvoir choisir dynamiquement (sans recompilation) de tourner sur CPU ou GPU (ou un mélange des deux)
  - Possibilité d'avoir des sous-domaines sur GPU et d'autres sur CPU
  - Possibilité d'utiliser du dataflow pour gérer les copies entre CPU et GPU
- API spécialisée pour les concepts Arcane
  - Variables
  - Boucles sur les entités du maillage
  - Connectivités du maillage
  - Constituants du maillage (Milieux, Matériaux)
- Abstraction des fonctionnalités pour cacher l'implémentation sous-jacente au code utilisateur
- Pas d'utilisation de mécanisme dépendant du compilateur (OpenMP target, OpenACC, ...) pour améliorer la portabilité

Implémentation

- Début des développements fin 2020
- API similaire à SYCL car c'est l'API la plus portable
- Utilisation via les fonctions lambda du C++11
- Utilisation par défaut de la mémoire managée pour simplifier les transferts mémoire entre CPU et GPU
  - Il est possible de gérer soit même la mémoire (Device) si on le souhaite
- Accès possible aux structures spécifiques à la plateforme (par exemple `cudaStream_t`) en sacrifiant la portabilité : Couplage possible avec d'autres API (CUDA, ROCM, RAJA, Kokkos, YAKL, ...)
- Limite au maximum l'utilisation de `template` du C++
  - Code plus simple pour les non spécialistes du C++
  - Facilite le développement
    - Compilation beaucoup plus rapide
    - Évite de recompiler une grosse partie du code à chaque changement
    - Permet de changer dynamiquement le comportement (par exemple quelle mémoire utiliser)
  - Code plus facilement inter-opérable avec d'autres bibliothèques (MPI, IO, ...)

Exemple : Boucle pour initialiser un gaz parfait

- Déclaration des variables

```
VariableCellReal m_density; //!< Density on cells
VariableCellReal m_pressure; //!< Pressure on cells
VariableCellReal m_sound_speed; //!< Sound speed on cells
VariableCellReal m_internal_energy;  //!< Internal energy on cells
VariableCellReal m_adiabatic_cst; //!< Adiabatic constant on cells
```

- Itération sur toutes les mailles
  - `vi` est l'itérateur, `ENUMERATE_CELL` la macro pour itérer, `allCells()` la liste des mailles

```
// Initialise l'énergie et la vitesse du son
ENUMERATE_CELL(vi,allCells())
{
  Real pressure = m_pressure[vi];
  Real adiabatic_cst = m_adiabatic_cst[vi];
  Real density = m_density[vi];
  m_internal_energy[vi] = pressure / ((adiabatic_cst - 1.) * density);
  m_sound_speed[vi] = sqrt(adiabatic_cst * pressure / density);
}
```

Exemple : Boucle pour initialiser un gaz parfait

Écriture classique

```
// Initialise l'énergie et la vitesse du son
ENUMERATE_CELL(vi,allCells())
{
  Real pressure = m_pressure[vi];
  Real adiabatic_cst = m_adiabatic_cst[vi];
  Real density = m_density[vi];
  m_internal_energy[vi] = pressure / ((adiabatic_cst - 1.) * density);
  m_sound_speed[vi] = sqrt(adiabatic_cst * pressure / density);
}
```

- Même structure de boucle avec des modifications mineures
  - Utilise RUNCOMMAND_ENUMERATE au lieu de ENUMERATE
  - Le code est une lambda du C++11 (voir le ';' à la fin de la boucle)

Code avec API accélérateur

```
info() << "Initialize SoundSpeed and InternalEnergy";
auto queue = makeQueue(m_runner);
auto command = makeCommand(queue);
// Initialise l'énergie et la vitesse du son
auto in_pressure = ax::viewIn(command,m_pressure);
auto in_density = ax::viewIn(command,m_density);
auto in_adiabatic_cst = ax::viewIn(command,m_adiabatic_cst);

auto out_internal_energy = ax::viewOut(command,m_internal_energy);
auto out_sound_speed = ax::viewOut(command,m_sound_speed);
```

```
command << RUNCOMMAND_ENUMERATE(Cell,vi,allCells())
{
  Real pressure = in_pressure[vi];
  Real adiabatic_cst = in_adiabatic_cst[vi];
  Real density = in_density[vi];
  out_internal_energy[vi] = pressure / ((adiabatic_cst-1.0) * density);
  out_sound_speed[vi] = math::sqrt(adiabatic_cst*pressure/density);
};
```

Exemple : Boucle pour initialiser un gaz parfait

Écriture classique

```
// Initialise l'énergie et la vitesse du son
ENUMERATE_CELL(vi,allCells())
{
  Real pressure = m_pressure[vi];
  Real adiabatic_cst = m_adiabatic_cst[vi];
  Real density = m_density[vi];
  m_internal_energy[vi] = pressure / ((adiabatic_cst - 1.) * density);
  m_sound_speed[vi] = sqrt(adiabatic_cst * pressure / density);
}
```

- Il faut indiquer l'intention
  - `viewIn()` si lecture seule
  - `viewOut()` si écriture seule
  - `viewInOut()` si lecture/écriture
- Copie automatiquement des données entre le GPU et le CPU
  - Pas forcément nécessaire si on utilise la mémoire unifiée

Code avec API accélérateur

```
info() << "Initialize SoundSpeed and InternalEnergy";
auto queue = makeQueue(m_runner);
auto command = makeCommand(queue);
// Initialise l'énergie et la vitesse du son
auto in_pressure = ax::viewIn(command,m_pressure);
auto in_density = ax::viewIn(command,m_density);
auto in_adiabatic_cst = ax::viewIn(command,m_adiabatic_cst);

auto out_internal_energy = ax::viewOut(command,m_internal_energy);
auto out_sound_speed = ax::viewOut(command,m_sound_speed);

command << RUNCOMMAND_ENUMERATE(Cell,vi,allCells())
{
  Real pressure = in_pressure[vi];
  Real adiabatic_cst = in_adiabatic_cst[vi];
  Real density = in_density[vi];
  out_internal_energy[vi] = pressure / ((adiabatic_cst-1.0) * density);
  out_sound_speed[vi] = math::sqrt(adiabatic_cst*pressure/density);
};
```

ENTRÉES

SORTIES

Exemple : Boucle pour initialiser un gaz parfait

Écriture classique

```
// Initialise l'énergie et la vitesse du son
ENUMERATE_CELL(vi,allCells())
{
  Real pressure = m_pressure[vi];
  Real adiabatic_cst = m_adiabatic_cst[vi];
  Real density = m_density[vi];
  m_internal_energy[vi] = pressure / ((adiabatic_cst - 1.) * density);
  m_sound_speed[vi] = sqrt(adiabatic_cst * pressure / density);
}
```

- Utilise les abstractions suivantes
  - `m_runner` est la ressource d'exécution (CPU, GPU, multi-thread, ...)
  - `queue` est le flot d'exécution
  - `command` représente un noyau de calcul

Code avec API accélérateur

```
info() << "Initialize SoundSpeed and InternalEnergy";
auto queue = makeQueue(m_runner);
auto command = makeCommand(queue);
// Initialise l'énergie et la vitesse du son
auto in_pressure = ax::viewIn(command,m_pressure);
auto in_density = ax::viewIn(command,m_density);
auto in_adiabatic_cst = ax::viewIn(command,m_adiabatic_cst);

auto out_internal_energy = ax::viewOut(command,m_internal_energy);
auto out_sound_speed = ax::viewOut(command,m_sound_speed);

command << RUNCOMMAND_ENUMERATE(Cell,vi,allCells())
{
  Real pressure = in_pressure[vi];
  Real adiabatic_cst = in_adiabatic_cst[vi];
  Real density = in_density[vi];
  out_internal_energy[vi] = pressure / ((adiabatic_cst-1.0) * density);
  out_sound_speed[vi] = math::sqrt(adiabatic_cst*pressure/density);
};
```

État des développements

- Implémentation disponible pour fonctionnalités suivantes
  - Gestion de la connectivité non structurée et cartésienne
  - Gestion multi-matériau
  - Gestion de l'asynchronisme

- Algorithmes haut niveau : Réductions, PrefixSum, Filtrage, Partitionnement de liste
- Classe `NumArray`, pour gérer les tableaux jusqu'à 4 dimensions
- Support des implémentations 'MPI Accelerator Aware'
  - Échange de message
  - Synchronisations
- Mécanismes d'aide au développement

Aide au développement

- Profilage automatique des boucles
  - Il suffit de positionner la variable d'environnement ARCANE_LOOP_PROFILING_LEVEL
  - Fonctionne pour toutes les boucles Arcane (`RUNCOMMAND_..., ENUMERATE_...`)
  - Fonctionne pour tous les modes: séquentiel, multi-thread, accélérateur.

- Intégration avec CUPTI (Cuda Profiling Tools interface)
  - Bibliothèque NVIDIA permettant de récupérer les évènements sur les GPU NVIDIA
  - Dans Arcane, permet de récupérer les évènements suivants
    - Copies mémoire managée entre le GPU et le CPU
    - Lancement des noyaux de calcul
  - Permet de tracer les noyaux qui effectuent des transferts mémoire
  - Activation automatique par variable d'environnement

Démonstrateurs

- Dans Arcane
  - MicroHydro (1000 lignes de code)
  - MiniWeather (https://github.com/mrnorman/miniWeather.git) (800 lignes de code)
- MaHyCo (https://github.com/cea-hpc/MaHyCo) (10000 lignes de code)
  - Hydrodynamique multi-fluide
- Athena (20k lignes de code)
  - Code interne CEA/DAM pour évaluer les schémas de transport et de diffusion
  - Équation de transport prototype de neutronique, résolue par une méthode déterministe et développement en cours sur des méthodes Monte-Carlo
  - Utilisé activement par les stagiaires pour mener des études (3 stagiaires en 2023)
- Support expérimental des accélérateurs de l'API éléments finis d'Arcane
  - https://github.com/arcaneframework/arcanefem

Performances MiniWeather

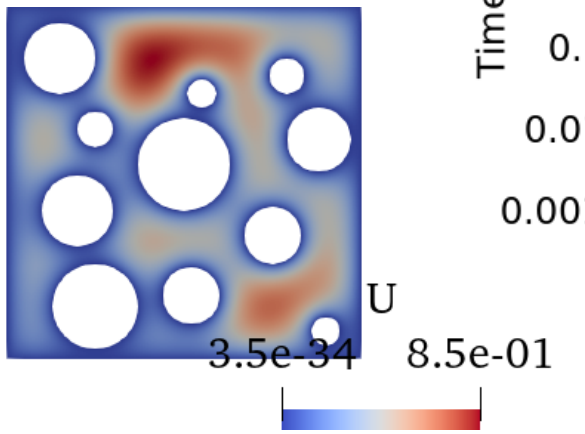
- Code cartésien 2D. Implémentation Arcane uniquement séquentielle
- MiniWeather est une application « idéale » pour les GPU
  - Accès directs (pas de matériaux), uniquement du calcul flottant, pas de branchement
- CUDA 12, GCC 12, 120 itérations, Temps en millisecondes.
- CPU: 1 cœur AMD Rome EPYC 7H12
- GPU: 1 GPU A100 (partition A100)

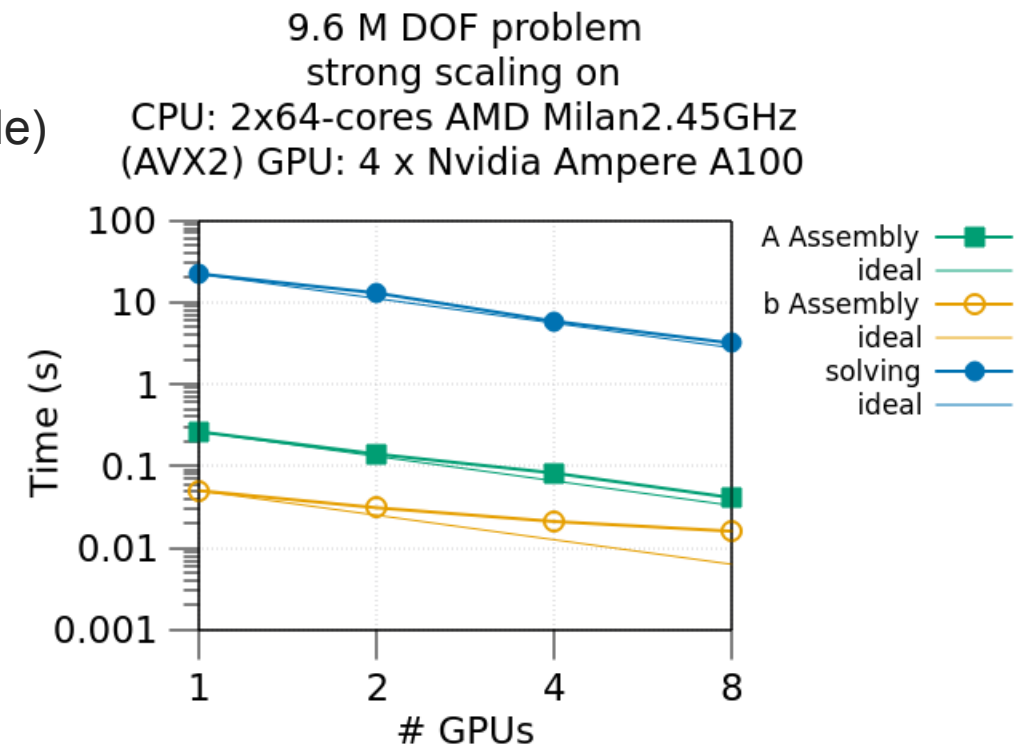
Mailles	1 cœur CPU	A100	Ratio CPU/A100
80 000	1 116	90	**12.4**
800 000	11 061	91	**121.6**
8 000 000	111 993	253	**442.7**

Performances ArcaneFEM

- Résultats préliminaires, Équation de poisson en 2D
- Extensibilité forte sur 9.6 millions de degrés de liberté
- Solveur linéaire Hypre 2.29
- Construction et résolution de la matrice sur GPU (en seconde)

	A	B	Résolution
1 GPU	0.263	0.050	22.162
2 GPU	0.140	0.031	12.931
4 GPU	0.082	0.021	5.840
8 GPU	0.041	0.016	3.156





Performances MicroHydro

MicroHydro, 100 itérations, CUDA 12, GCC 11, INTI, 1 nœud

- CPU: 128 cœurs, partition ROME, 80000 mailles par cœur CPU
- GPU: 4 GPU, partition A-100, 2560000 mailles par GPU
- Avec et Sans implémentation MPI ‘cuda-aware’

	Temps total (s)	Accélération	Nombre Transferts		Quantité transférées (Go)	
			Host->Device	Device->Host	Host->Device	Device->Host
CPU Scalaire	7.472	1x				
CPU Vectoriel	5.632	1.33x				
GPU sans MPI CUDA Aware	5.049	1.48x	201571	121025	5053	3836
GPU avec MPI CUDA-Aware	0.754	**9.91x/7.47x**	51328	3296	1476	256

Profilage

- Profiliage automatique en positionnant la variable d'environnement ARCANE_LOOP_PROFILING_LEVEL
  - MicroHydro avec MPI non cuda-aware

Synchronisation

Ncall	Nchunk	T (ms)	Tck (ns)	%	name
100	0	1069.990	0	55.9	virtual void SimpleHydro::SimpleHydroAcceleratorService::computeVelocity()
101	0	403.066	0	21.0	virtual void SimpleHydro::SimpleHydroAcceleratorService::computeGeometricValues()
200	0	272.795	0	14.2	void SimpleHydro::SimpleHydroAcceleratorService::_computePressureAndCellPseudoViscosityForces()
500	0	47.554	0	2.4	virtual void SimpleHydro::SimpleHydroAcceleratorService::applyBoundaryCondition()
100	0	38.912	0	2.0	virtual void SimpleHydro::SimpleHydroAcceleratorService::computeViscosityWork()
1	0	25.234	0	1.3	virtual void SimpleHydro::SimpleHydroAcceleratorService::hydroStartInit()
100	0	16.325	0	0.8	virtual void SimpleHydro::SimpleHydroAcceleratorService::updateDensity()
100	0	16.317	0	0.8	virtual void SimpleHydro::SimpleHydroAcceleratorService::applyEquationOfState()
100	0	14.876	0	0.7	virtual void SimpleHydro::SimpleHydroAcceleratorService::moveNodes()
100	0	6.196	0	0.3	virtual void SimpleHydro::SimpleHydroAcceleratorService::computeDeltaT()

  - MicroHydro avec MPI cuda-aware

Synchronisation (reception)

Synchronisation (envoi)

Ncall	Nchunk	T (ms)	Tck (ns)	%	name
101	0	370.668	0	44.7	virtual void SimpleHydro::SimpleHydroAcceleratorService::computeGeometricValues()
200	0	272.100	0	32.8	void SimpleHydro::SimpleHydroAcceleratorService::_computePressureAndCellPseudoViscosityForces()
100	0	37.859	0	4.5	virtual void SimpleHydro::SimpleHydroAcceleratorService::computeViscosityWork()
1	0	24.210	0	2.9	virtual void SimpleHydro::SimpleHydroAcceleratorService::hydroStartInit()
101	0	20.148	0	2.4	void Arcane::Accelerator::impl::AcceleratorSpecificMemoryCopy<DataType, Extent>::_copyFrom()
3	0	17.222	0	2.0	void Arcane::Accelerator::impl::AcceleratorSpecificMemoryCopy<DataType, Extent>::_copyFrom()
100	0	16.359	0	1.9	virtual void SimpleHydro::SimpleHydroAcceleratorService::computeVelocity()
100	0	16.212	0	1.9	virtual void SimpleHydro::SimpleHydroAcceleratorService::applyEquationOfState()
100	0	15.752	0	1.9	virtual void SimpleHydro::SimpleHydroAcceleratorService::updateDensity()
100	0	14.761	0	1.7	virtual void SimpleHydro::SimpleHydroAcceleratorService::moveNodes()
500	0	12.343	0	1.4	virtual void SimpleHydro::SimpleHydroAcceleratorService::applyBoundaryCondition()
100	0	6.333	0	0.7	virtual void SimpleHydro::SimpleHydroAcceleratorService::computeDeltaT()
3	0	1.993	0	0.2	void Arcane::Accelerator::impl::AcceleratorSpecificMemoryCopy<DataType, Extent>::_copyTo()
101	0	1.562	0	0.1	void Arcane::Accelerator::impl::AcceleratorSpecificMemoryCopy<DataType, Extent>::_copyTo()

Hackathon CINES

- L'IFPEN a participé à un Hackathon sur Adastra du 8 au 10 février 2024
  - Deux projets retenus
    - Un projet de démarrage du contrat progrès IFPEN-GENCI portage d'application géosciences
    - Un projet étudiant avec les Mines-ParisTech
- Travaux sur des démonstrateurs/mini-app Arcane (ArcaneFem et MicroHydro)
  - Valide le support ROCM dans Arcane
  - Analyse de comportement sur des GPU AMD à l'échelle
- Conclusion
  - Par défaut le driver AMD ne transfère pas automatiquement les données entre le CPU et le GPU lorsqu'on utilise la mémoire managée : la mémoire reste sur le CPU sauf si explicitement copiée sur le GPU
  - Il existe un mécanisme (XNACK) permettant de faire automatiquement cette copie mais il n'est pas opérationnel sur Adastra : les performances sont donc très dégradées

Performances MiniWeather MI250

- Le CEA dispose de nœuds de test (via une machine virtuelle) avec MI250 et XNACK opérationnel
- Grâce à l'API dataflow de Arcane, ajout automatique de la copie CPU->GPU pour les vues (viewIn, viewOut)

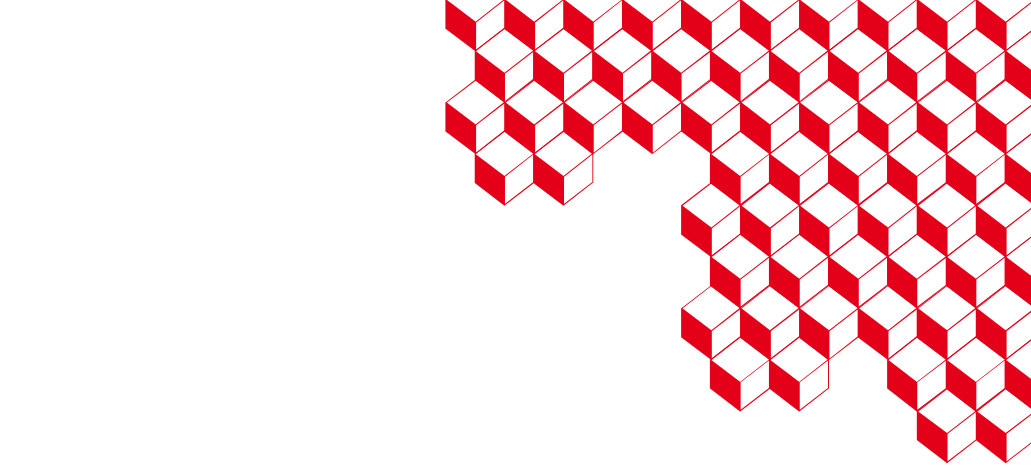
GPU	Mémoire utilisée	Temps (ms)
AMD MI 250	Device	374
NVIDIA A100	Device	480
AMD MI 250	Mémoire Unifiée	97532
NVIDIA A100	Mémoire Unifiée	500
AMD MI 250	Mémoire Unifiée + XNACK	447
AMD MI 250	Mémoire Unifiée + prefetching automatique Arcane	495

- NVIDIA : mémoire unifiée sans impact sur les performances (seule la première itération fait une copie)
- AMD : le transfert des pages mémoires entre le CPU et le GPU n'est pas automatique: il faut activer XNACK sinon les performances chutent considérablement
  - Le mécanisme de prefetching automatique d'Arcane permet de se passer en grande partie de XNACK s'il n'est pas disponible

Conclusion

- L'API accélérateur est opérationnelle pour plusieurs applications internes
  - Implémentation disponible pour CUDA et ROCM
  - Utilisation de oneTBB pour le multi-threading
  - 9000 lignes de code au total
  - https://github.com/arcaneframework

- Prochains développements
  - Portage SYCL/DPC++ (90% réalisé)
  - Support du parallélisme hiérarchique (`sycl::nd_item`)
  - Gestion des tableaux associatifs (`std::unordered_map`)



Merci de votre attention