

全球大氣模式TCo383物理參數化之 OpenACC GPU平行化加速成果

李尚恩 陳鎰龍 劉邦彥 吳佳瑩 吳蔚琳 陳建河 李明營

中央氣象署海象氣候組

NVIDIA Corporation



114年第三十九屆天氣分析與預報研討會
A2-28



CWAGFS-TCo

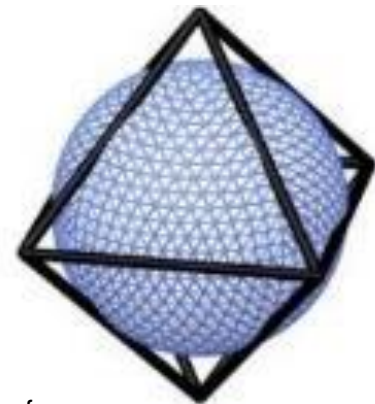
動力核心: Semi-Lagrangian + Semi-implicit (2 time level)

網格系統: Octahedral reduced Gaussian grid

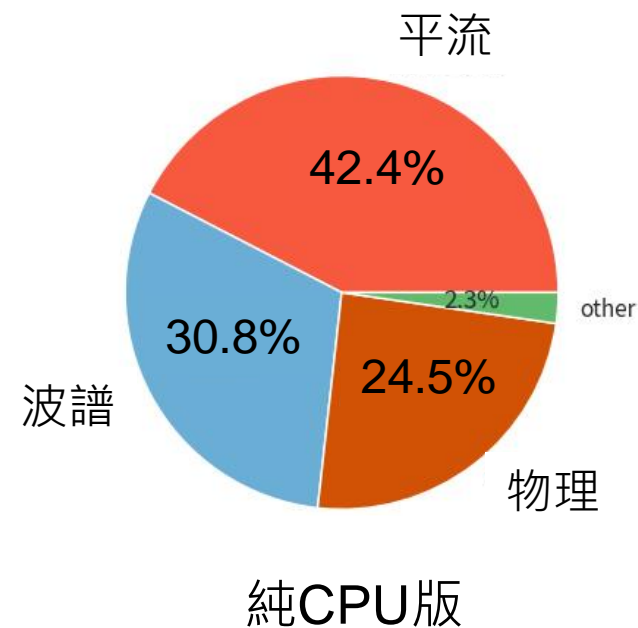
測試解析度: ~28 公里, 垂直72層 (TCo383L72)

- 動力核心於第六代高速運算電腦GPU節點測試:
(A100 GPU*8 vs Xeon Gold 6326 CPU Core*32)
 - 加速比 **44** 倍
 - 平均每時步花費 **0.39** 秒
- 使用144個高速運算電腦CPU節點(6912核心):
 - 平均每時步花費 **0.4** 秒

(陳廷安、陳律閔、鄧君豪，國立中興大學應用數學系)

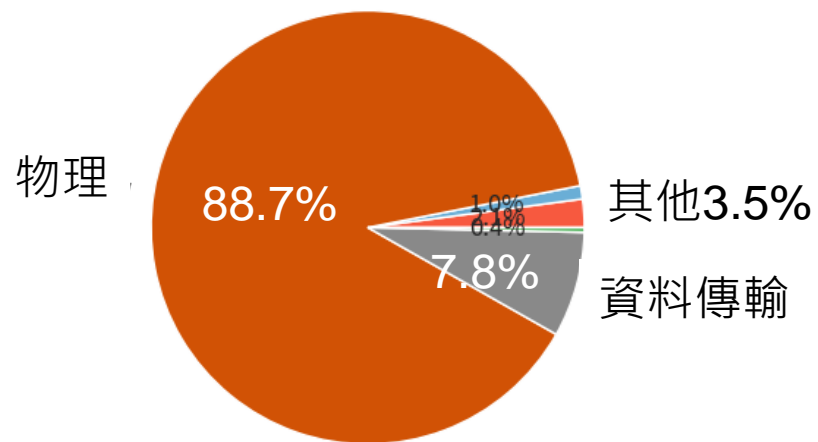


(figure from <https://confluence.ecmwf.int/display/FCST/introducing+the+octahedral+reduced+Gaussian+grid>)

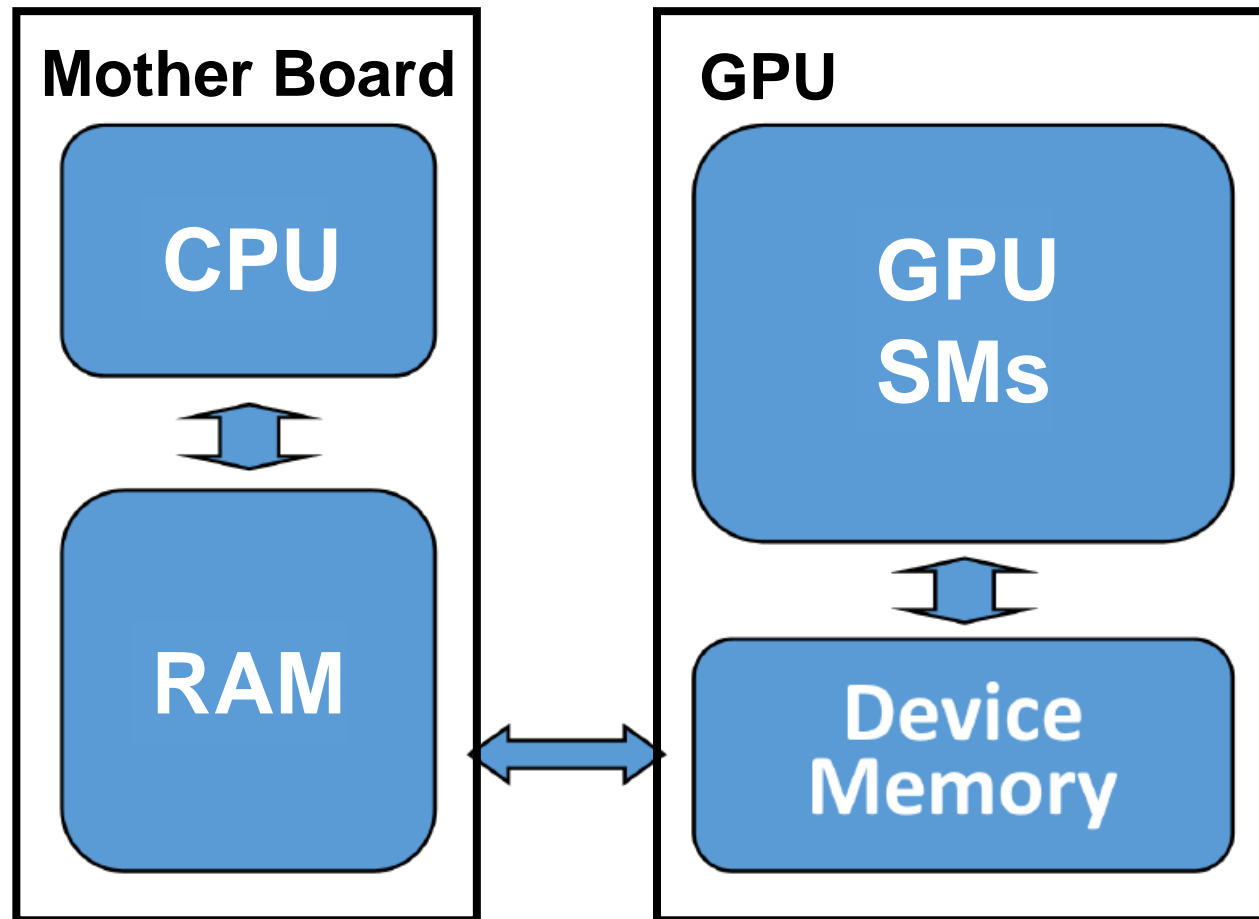


Introduction

- 剩下物理參數化待移植:
 - CPU計算花費大量時間
 - 資料傳輸花費額外時間



動力GPU、物理CPU



(modified from https://www.openacc.org/sites/default/files/inline-files/OpenACC_Programming_Guide_0_0.pdf)

如何加速 (硬體)

- 1個CPU core控制1張GPU
- GPU有大量計算單元
- A100:
 - 108 SMs (64 CUDA cores per SM)
 - 80 GB device memory

CPU (8):

全球網格拆8等份

每核心負責每份小網格

網格內格點循序執行

GPU (8):

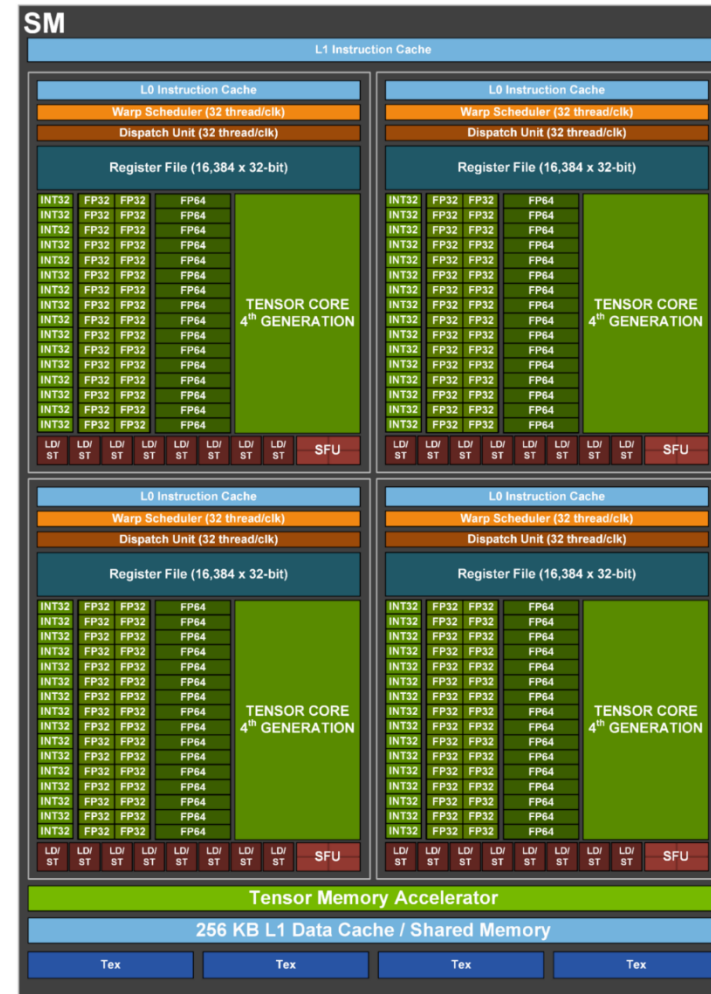
全球網格拆8等份

每核心負責每份小網格

CPU傳網格給GPU

網格內格點平行執行

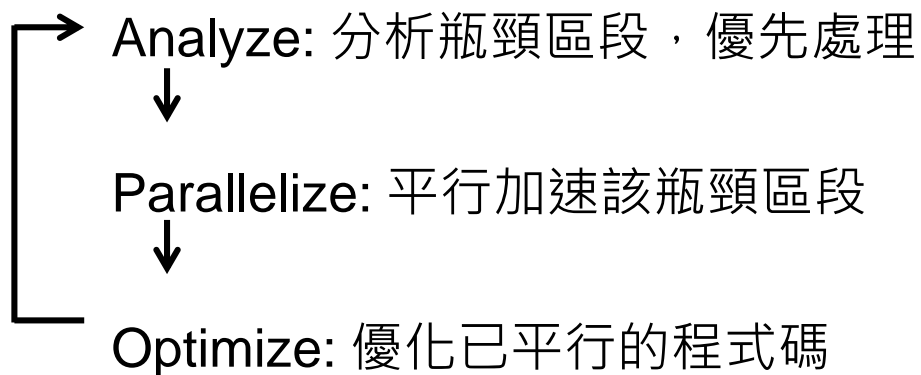
GPU傳網格給CPU



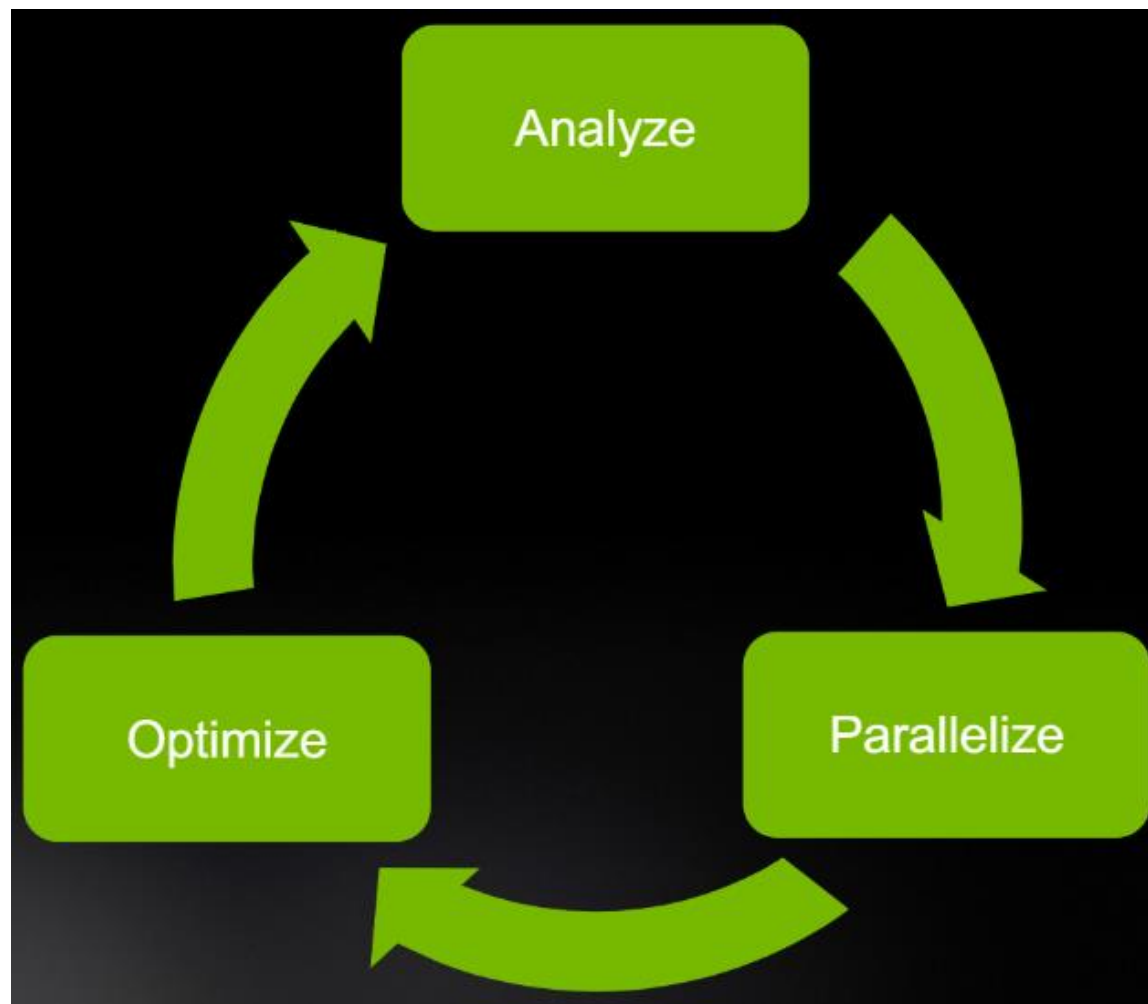
<https://developer-blogs.nvidia.com/wp-content/uploads/2022/03/H100-Streaming-Multiprocessor-SM-1024x1424.png>

如何加速 (程式)

GPU程式開發流程:



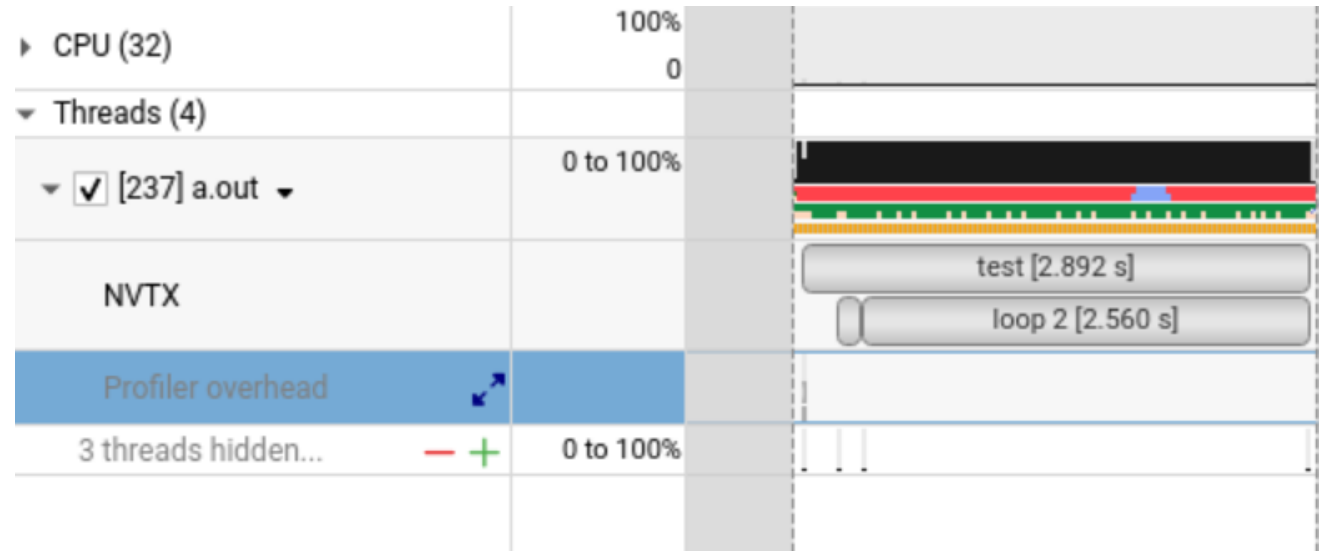
- 持續分析、聚焦在新的瓶頸、優化、持續提升效能。



Analyze

NVTX標註與Nsight分析:

```
call nvtxStartRange("test")
s = 2.
a = 1.
call nvtxStartRange("loop 1")
do i = 1, cnt
  a(i) = a(i) + i*s
end do
call nvtxEndRange
call nvtxStartRange("loop 2")
do i = 1, cnt
  v = i**0.25
  a(i) = a(i) + exp(1. + v)
end do
call nvtxEndRange
write(*,*) a(1), a(cnt)
call nvtxEndRange
```

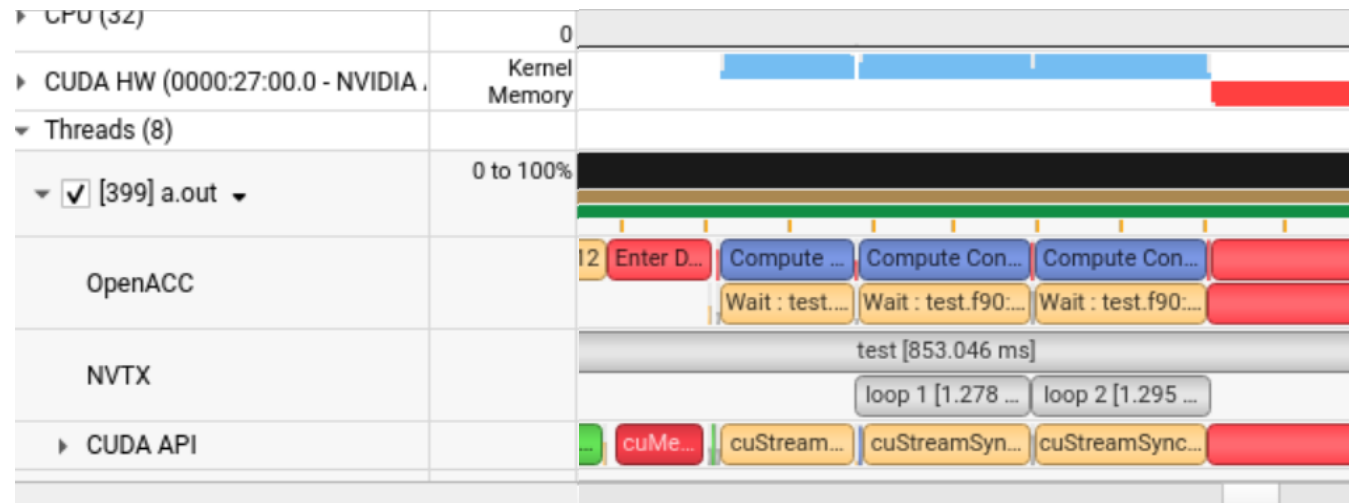


- NVIDIA Nsight Systems (效能分析工具)
- NVTX (CPU程式碼區段標示)
- CPU 計算時間: 2892 (ms)

Parallelize

平行網格內的所有格點:

```
s = 2.  
!$acc enter data create(a)  
!$acc parallel loop  
do i = 1, cnt  
  a(i) = 1.  
end do  
!$acc parallel loop  
do i = 1, cnt  
  a(i) = a(i) + i*s  
end do  
!$acc parallel loop  
do i = 1, cnt  
  v = i**0.25  
  a(i) = a(i) + exp(1. + v)  
end do  
!$acc exit data copyout(a)  
write(*,*) a(1), a(cnt)
```

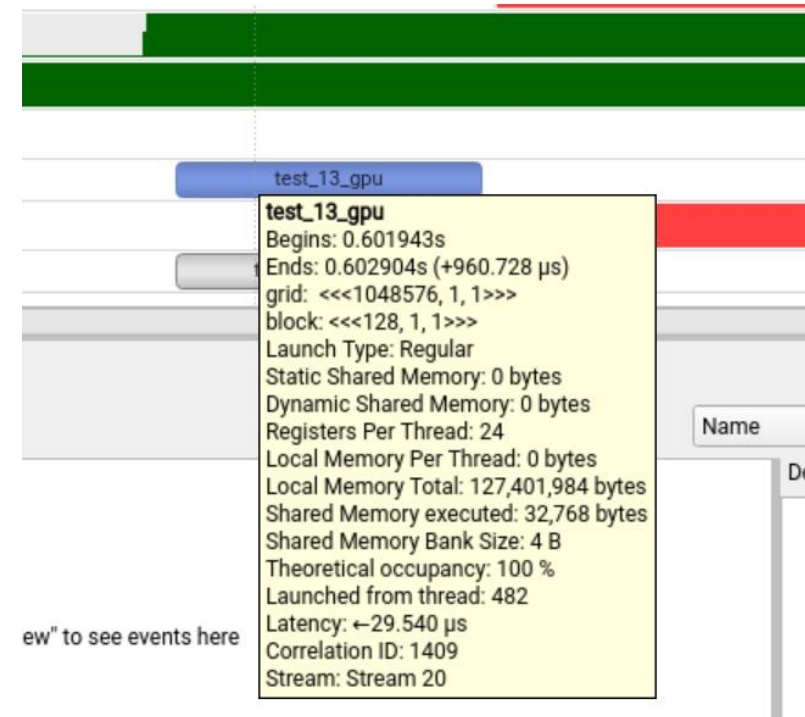


- OpenACC
- GPU 計算時間: 3.487 (ms)

Optimize

持續縮短GPU計算時間:

```
s = 2.  
!$acc enter data create(a)  
!$acc parallel loop private(v)  
do i = 1, cnt  
  a(i) = 1.  
  a(i) = a(i) + i*s  
  v = i**0.25  
  a(i) = a(i) + exp(1. + v)  
end do  
!$acc exit data copyout(a)  
write(*,*) a(1), a(cnt)
```



- 改為GPU友善的寫法
- GPU 計算時間: 0.96 (ms)

單元測試

- 讀取必要設定與前置作業，僅執行特定物理參數化單元
- 正確性
 - 逐網格比對CPU、GPU兩者結果相對誤差，最大者應小於 $1 \times 10^{-8} \sim -12$
 - 比對所有input/output 變數、output變數
- 效能
 - NVIDIA Nsight Systems、NVTX
 - 測試連續執行15次單元的執行時間
 - CPU: 計入進入單元的總時間，使用Intel Xeon Gold 6236 (共32核心)
 - GPU: 僅計入計算時間 (不含資料傳輸)，使用NVIDIA A100 (8張)
 - 使用Ofast編譯 (nvfortran編譯器)

結果

連續執行15次，32 CPU cores vs 8 GPUs

$$\text{加速比} = \frac{\text{CPU時間}}{\text{GPU時間}}$$

參數法	單元	CPU時間 (ms)	GPU時間 (ms)	加速比
臭氧	rozphys	5173	8.18	632
臭氧	ozphys_2015	5471	17.85	306.5
雲微物理	GCE 3ICE	41553	420	98.9
積雲	samfdeepcnv_kh	6265	78.87	79.4
地形重力波拖曳	gwdps	2502	40.3	62.1
邊界層	moninedmf	5250	100.2	52.4
對流重力波拖曳	gwdc	134	2.71	49.3
淺對流	samfshalcnv_kh	3075	73.41	41.9
陸表模式	Noah land model	183	13.4	13.6
加總	後8單元	64433	754.92	85.3

討論 (迴圈大小)

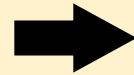
三維 i-j-k: 5,400,000
二維 i-k: 111,000
水平 i-j: 75,000

修改前

加速3~10倍
迴圈大小
111,000

```
subroutine physics()  
  do j = 1, jn  
  call ozone()  
  call pbl()  
  call gwd()  
  enddo  
end subroutine
```

```
subroutine pbl()  
  do k = 1, kn  
  do i = 1, in  
  ...  
  enddo  
  enddo  
end subroutine
```



```
subroutine physics()  
  call ozone()  
  call pbl()  
  call gwd()  
end subroutine
```

```
subroutine pbl()  
  do j = 1, jn  
  do k = 1, kn  
  do i = 1, in  
  ...  
  enddo  
  enddo  
  enddo  
end subroutine
```

修改後

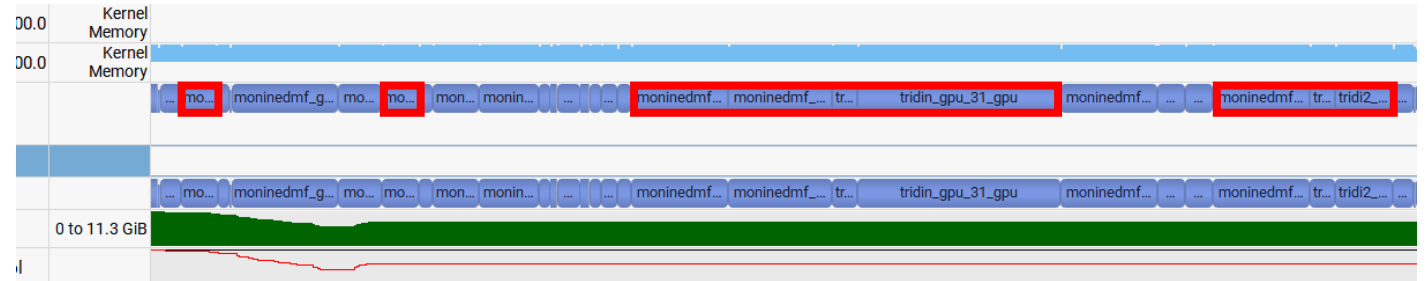
加速40~100倍
迴圈大小
5,400,000

三維 i-j-k: 5,400,000
二維 i-k: 111,000
水平 i-j: 75,000

討論 (平行度)

- 三維平行: GCE 3ICE (90% 三維可平行; 98.9倍)

- 部分三維平行: 邊界層 (52.4倍)

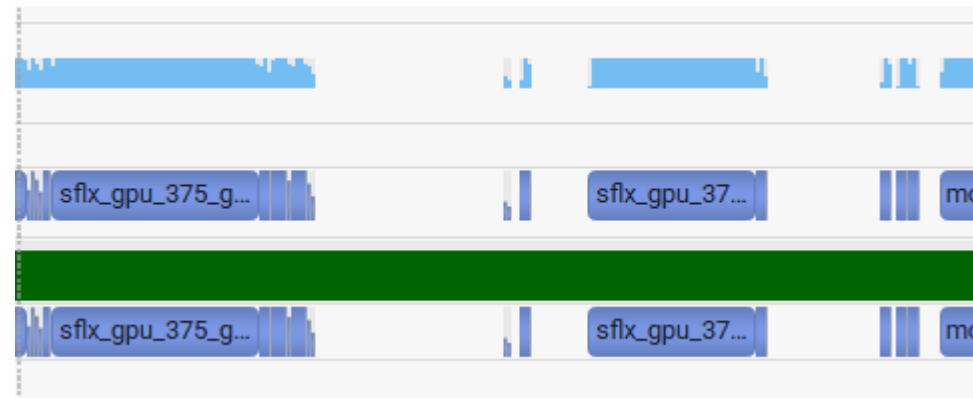


- 符合條件才計算:

- Noah land model (13.6倍) if (land_sea_mask == 1)
- 淺對流 (49.3倍) if (no_flag) return
- 對流/地形重力波拖曳 (62.1/49.3倍) 蒐集並只計算特定格點

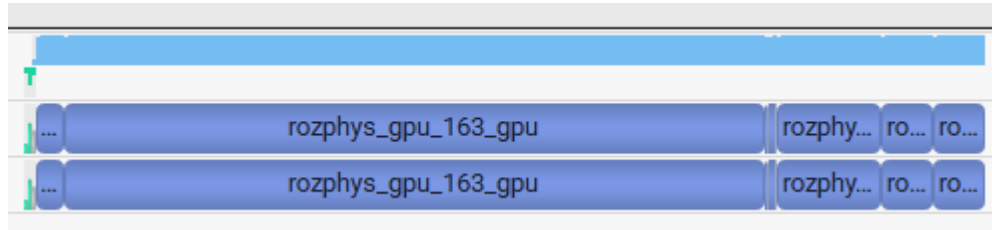
- 水平平行:

- Noah land model (13.6倍)
- GCE 3ICE (水物落速37.8倍)

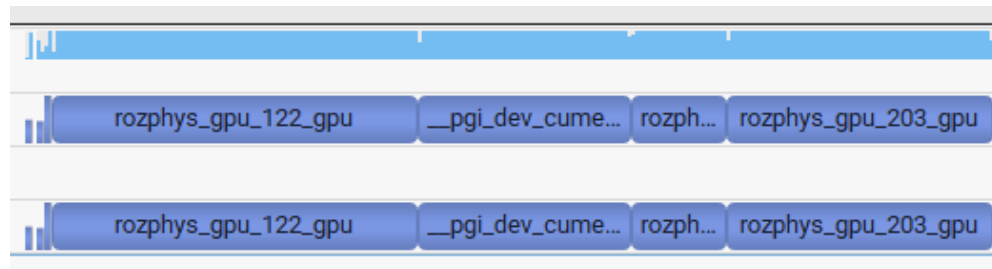


討論 (演算法)

- 臭氧: rozphys (632倍) 、 ozphys_2015 (306倍)



修改前: 5.3 (ms)



修改後: 0.88 (ms)

```
do i = 1, n
  do k = 1, t
    if (a(i) > b(k) .and.
        a(i) < b(k+1)) then
      c(i) = (b(k) + b(k+1))/2
    end if
  end do
end do
```

尋找次數($t = 80$):

線性搜尋 $O(t)$ 40 次

二元搜尋 $O(\log_2 t)$ 7 次

整理

- 對TCo383進行GPU移植，動力核心已有44倍加速(32 CPU核心對8張A100)，物理參數化計算已成為瓶頸。
- 使用OpenACC將計算平行化至GPU，並以NVIDIA Nsight Systems分析瓶頸，持續優化效能。
- 各物理參數法的加速表現 (倍率; 32 CPU核心對8張A100):
 - 臭氧: 632x、306x
 - 雲微物理: 98.9x
 - 積雲: 79.4x
 - 地形重力波拖曳: 62.1x
 - 邊界層: 52.4
 - 對流重力波拖曳: 49.3x
 - 淺對流: 41.9x
 - Noah land model: 13.6x
- 影響因素:
 - 平行度
 - 迴圈大小
 - 演算法