

NVIDIA HPC SDK 利用の手引 き

Table of contents

1. はじめに	3
1.1. 利用できるバージョン	3
1.2. マニュアル	3
2. 利用方法	4
2.1. NVIDIA HPC SDKの実行	4
2.2. GPU情報の取得	5

1. はじめに

Info

本ページのコマンドライン例では、以下の表記を使用します。

[login]\$: ログインノード

[rNnN]\$: 計算ノード

[login/rNnN]\$: ログインノードまたは計算ノード

[yourPC]\$: ログインノードへの接続元環境

本書は、NVIDIA HPC SDK をTSUBAME4.0 で利用する方法について説明しています。また、TSUBAME4.0を利用するにあたっては、TSUBAME利用の手引きもご覧下さい。サーバの利用環境や注意事項などが詳細に記述されていますので、よく読んでください。

1.1. 利用できるバージョン

TSUBAME4で利用可能な最新バージョンについてはTSUBAME計算サービスWebサイトの サポートされているアプリケーション ページをご確認下さい。

研究に支障がない限り、バグ修正の入っている最新版をご利用下さい。

1.1.1. バージョンの切り替え

本システムでは、`module`コマンドを使用することでコンパイラやアプリケーション利用環境の切り替えを行うことができます。

例: NVIDIA HPC SDK Version 24.1

```
[rNnN]$ module purge
[rNnN]$ module load nvhpc/24.1
```

1.2. マニュアル

- NVIDIA HPC SDK Version 24.1 (www.nvidia.com)
- CUDA Toolkit Documentation (www.nvidia.com)

2. 利用方法

Info

本ページのコマンドライン例では、以下の表記を使用します。

[login]\$: ログインノード

[rNnN]\$: 計算ノード

[login/rNnN]\$: ログインノードまたは計算ノード

[yourPC]\$: ログインノードへの接続元環境

2.1. NVIDIA HPC SDKの実行

2.1.1. NVIDIA HPC SDK プログラム

GPU非使用時のNVIDIA HPC SDKの使用方法を以下に示します。

モジュールを利用して、コンパイラの環境、パスを設定します。

```
[rNnN]$ module purge
[rNnN]$ module load nvhpc
```

NVIDIA HPC SDKのコマンド名、コマンド形式を以下に示します。

コマンド	言語	コマンド形式
nvfortran	Fortran 77/90/95/2003/2008/2018	\$ nvfortran [オプション] source_file
nvc	C	\$ nvc [オプション] source_file
nvc++	C++	\$ nvc++ [オプション] source_file

2.1.2. CUDA・CUDA Fortran

NVIDIA HPC SDKを用いたCUDA・CUDA Fortranの使用方法を以下に示します。

モジュールを利用して、コンパイラの環境、パスを設定します。

```
[rNnN]$ module purge
[rNnN]$ module load nvhpc
```

CUDA C、CUDA Fortranのコマンド名、コマンド形式を以下に示します。

CUDA Cのコマンド名とコマンド形式

コマンド	言語	コマンド形式
nvcc	C/C++	\$ nvcc -gencode arch=compute_90,code=sm_90 [options] source_file

CUDA Fortranのコマンド名とコマンド形式

コマンド	言語	コマンド形式
nvfortran	Fortran 77/90/95/2003/2008/2018	\$ nvfortran -cuda -gpu=cc90 [オプション] source_file

2.1.3. OpenACC

NVIDIA HPC SDKを用いたOpenACCの使用方法を以下に示します。モジュールを利用して、コンパイラの環境、パスを設定します。

```
[rNnN]$ module purge
[rNnN]$ module load nvhpc
```

OpenACCのコマンド名、コマンド形式を以下に示します。

OpenACCのコマンド名とコマンド形式

コマンド	言語	コマンド形式
nvfortran	Fortran 77/90/95/2003/2008/2018	\$ nvfortran -acc -gpu=cc90 [オプション] source_file
nvc	C	\$ nvc -acc -gpu=cc90 [オプション] source_file
nvc++	C++	\$ nvc++ -acc -gpu=cc90 [オプション] source_file

OpenACC 利用時の主なオプションを以下に示します。

オプション	説明
-acc	OpenACC指示文に基づきGPUコードを生成します。
-gpu=cc90	ターゲットアーキテクチャを指定します。NVIDIA H100用の実行バイナリを作成します。
-Minfo=accel	OpenACCのコンパイラによる診断情報を出力します。 デフォルトではOpenACCの診断情報は出力されません。

2.2. GPU情報の取得

NVIDIA HPC SDKに含まれている `nvaccelinfo` コマンドを用いて、シェアドメモリのサイズ、ウォープサイズ等のGPUの詳細情報を得ることができます。

以下に例を示します。

```
[rNnN]$ module purge
[rNnN]$ module load nvhpc
[rNnN]$ nvaccelinfo

CUDA Driver Version: 12030
NVRM version: NVIDIA UNIX x86_64 Kernel Module 545.23.08 Mon Nov 6 23:49:37 UTC 2023

Device Number: 0
Device Name: NVIDIA H100
Device Revision Number: 9.0
Global Memory Size: 99871424512
Number of Multiprocessors: 132
Concurrent Copy and Execution: Yes
Total Constant Memory: 65536
Total Shared Memory per Block: 49152
Registers per Block: 65536
Warp Size: 32
Maximum Threads per Block: 1024
Maximum Block Dimensions: 1024, 1024, 64
Maximum Grid Dimensions: 2147483647 x 65535 x 65535
Maximum Memory Pitch: 2147483647B
Texture Alignment: 512B
Clock Rate: 1980 MHz
Execution Timeout: No
Integrated Device: No
Can Map Host Memory: Yes
Compute Mode: default
Concurrent Kernels: Yes
ECC Enabled: Yes
Memory Clock Rate: 1593 MHz
Memory Bus Width: 6144 bits
L2 Cache Size: 62914560 bytes
Max Threads Per SMP: 2048
Async Engines: 5
Unified Addressing: Yes
Managed Memory: Yes
Concurrent Managed Memory: Yes
Preemption Supported: Yes
Cooperative Launch: Yes
Cluster Launch: Yes
Unified Function Pointers: Yes
Default Target: cc90

Device Number: 1
```

```

Device Name: NVIDIA H100
Device Revision Number: 9.0
Global Memory Size: 99871424512
Number of Multiprocessors: 132
Concurrent Copy and Execution: Yes
Total Constant Memory: 65536
Total Shared Memory per Block: 49152
Registers per Block: 65536
Warp Size: 32
Maximum Threads per Block: 1024
Maximum Block Dimensions: 1024, 1024, 64
Maximum Grid Dimensions: 2147483647 x 65535 x 65535
Maximum Memory Pitch: 2147483647B
Texture Alignment: 512B
Clock Rate: 1980 MHz
Execution Timeout: No
Integrated Device: No
Can Map Host Memory: Yes
Compute Mode: default
Concurrent Kernels: Yes
ECC Enabled: Yes
Memory Clock Rate: 1593 MHz
Memory Bus Width: 6144 bits
L2 Cache Size: 62914560 bytes
Max Threads Per SMP: 2048
Async Engines: 5
Unified Addressing: Yes
Managed Memory: Yes
Concurrent Managed Memory: Yes
Preemption Supported: Yes
Cooperative Launch: Yes
Cluster Launch: Yes
Unified Function Pointers: Yes
Default Target: cc90

Device Number: 2
Device Name: NVIDIA H100
Device Revision Number: 9.0
Global Memory Size: 99871424512
Number of Multiprocessors: 132
Concurrent Copy and Execution: Yes
Total Constant Memory: 65536
Total Shared Memory per Block: 49152
Registers per Block: 65536
Warp Size: 32
Maximum Threads per Block: 1024
Maximum Block Dimensions: 1024, 1024, 64
Maximum Grid Dimensions: 2147483647 x 65535 x 65535
Maximum Memory Pitch: 2147483647B
Texture Alignment: 512B
Clock Rate: 1980 MHz
Execution Timeout: No
Integrated Device: No
Can Map Host Memory: Yes
Compute Mode: default
Concurrent Kernels: Yes
ECC Enabled: Yes
Memory Clock Rate: 1593 MHz
Memory Bus Width: 6144 bits
L2 Cache Size: 62914560 bytes
Max Threads Per SMP: 2048
Async Engines: 5
Unified Addressing: Yes
Managed Memory: Yes
Concurrent Managed Memory: Yes
Preemption Supported: Yes
Cooperative Launch: Yes
Cluster Launch: Yes
Unified Function Pointers: Yes
Default Target: cc90

Device Number: 3
Device Name: NVIDIA H100
Device Revision Number: 9.0
Global Memory Size: 99871424512
Number of Multiprocessors: 132
Concurrent Copy and Execution: Yes
Total Constant Memory: 65536
Total Shared Memory per Block: 49152
Registers per Block: 65536
Warp Size: 32
Maximum Threads per Block: 1024
Maximum Block Dimensions: 1024, 1024, 64
Maximum Grid Dimensions: 2147483647 x 65535 x 65535
Maximum Memory Pitch: 2147483647B
Texture Alignment: 512B
Clock Rate: 1980 MHz
Execution Timeout: No
Integrated Device: No
Can Map Host Memory: Yes
Compute Mode: default
Concurrent Kernels: Yes
ECC Enabled: Yes
Memory Clock Rate: 1593 MHz

```

```
Memory Bus Width: 6144 bits
L2 Cache Size: 62914560 bytes
Max Threads Per SMP: 2048
Async Engines: 5
Unified Addressing: Yes
Managed Memory: Yes
Concurrent Managed Memory: Yes
Preemption Supported: Yes
Cooperative Launch: Yes
Cluster Launch: Yes
Unified Function Pointers: Yes
Default Target: cc90
...
```

ログインノードでnvaccelinfoを実行しても、ログインノードにはGPUが搭載されておりませんので何も表示されません。

qrshやqsubを用いて計算ノードで実行して下さい。

qrsh/qsubに関しては、[TSUBAME4.0利用の手引き](#)をご参照下さい。