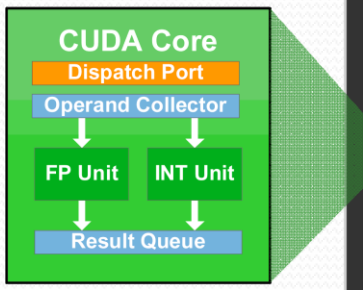
Технология CUDA для высокопроизводительных вычислений на кластерах с GPU

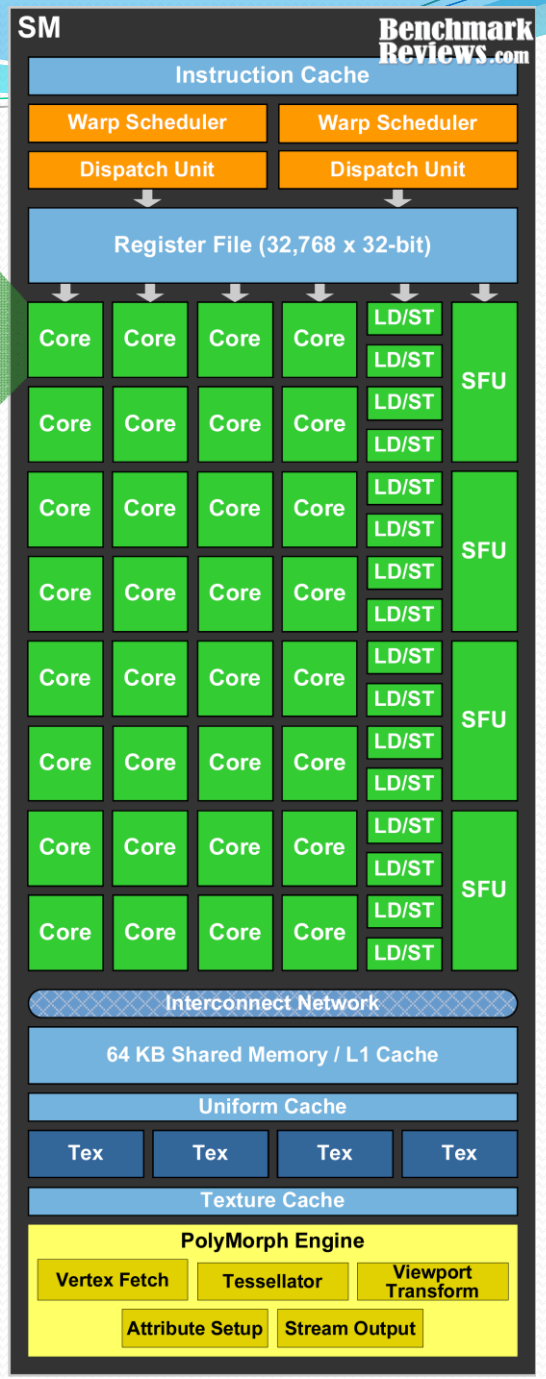
Лихогруд Николай
n.lihogrud@gmail.com

Часть вторая

Что было в прошлый раз?

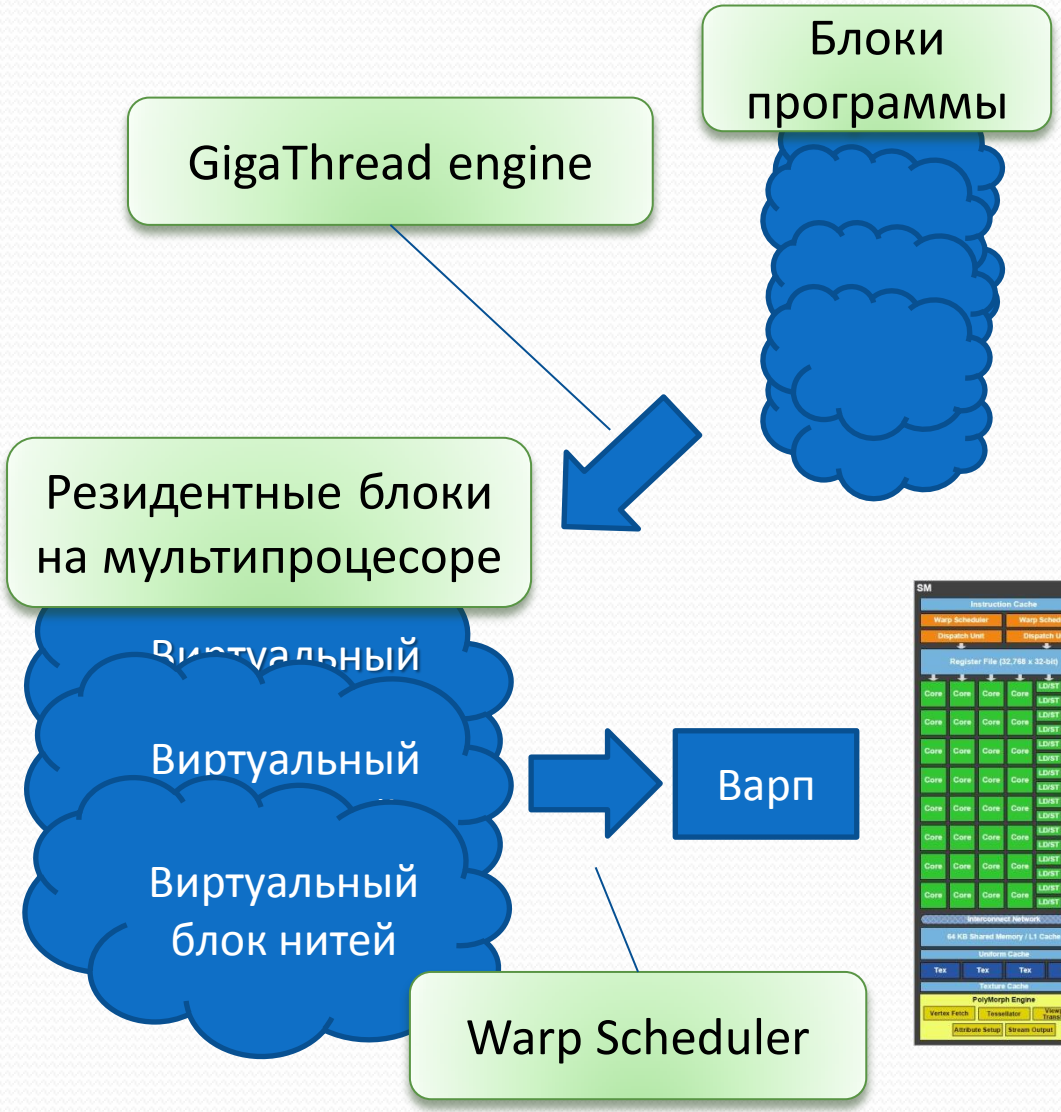
Fermi Streaming Multiprocessor (SM)





- Потоковый мультипроцессор
- «Единица» построения устройства (как ядро в CPU):
  - 32 скалярных ядра CUDA Core, ~1.5ГГц
  - 2 Warp Scheduler-а
  - Файл регистров, 128KB
  - 3 Кэша – текстурный, глобальный (L1), константный(uniform)
  - PolyMorphEngine – графический конвейер
  - Текстурные юниты
  - 16 x Special Function Unit (SFU) – интерполяция и трансцендентная математика одинарной точности
  - 16 x Load/Store

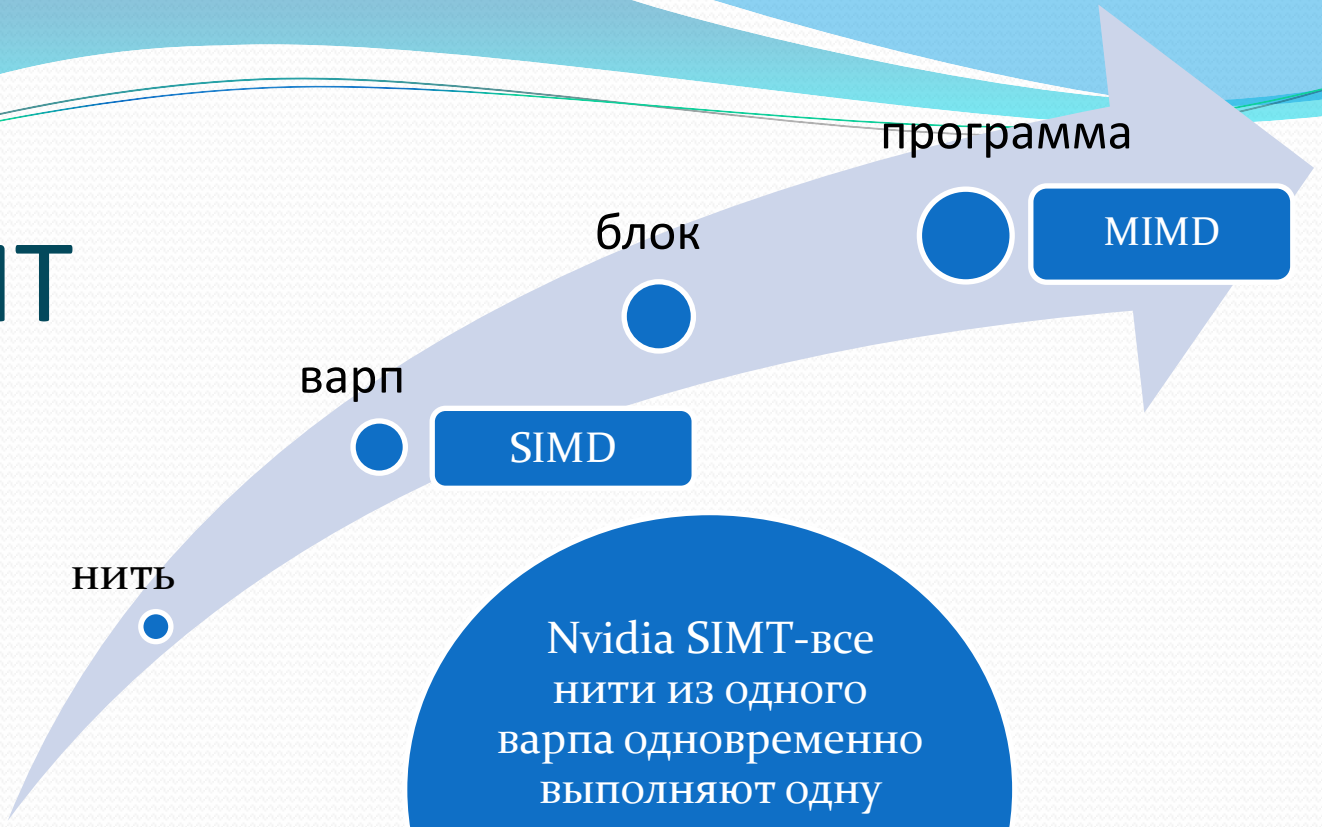
Модель выполнения



Максимальное число блоков на SM– 8

Максимальное число варпов на SM– 48 = 1536 нитей

SIMT

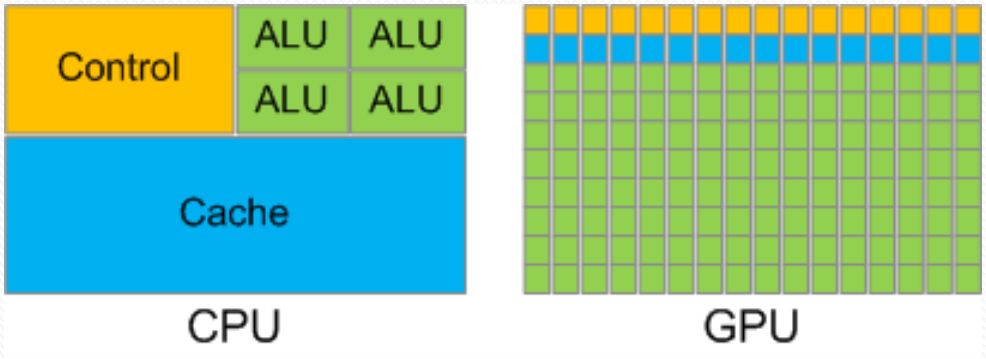


Nvidia SIMT-все нити из одного варпа одновременно выполняют одну инструкцию, варпы выполняются независимо

SIMD – все нити одновременно выполняют одну инструкцию

MIMD – каждая нить выполняется независимо от других, SMP – все нити имеют равные возможности для доступа к памяти

Утилизация латентности памяти



- GPU: Много нитей, покрывать обращения одних нитей в память вычислениями в других за счёт быстрого переключения контекста

- За счёт наличия сотен ядер и поддержки миллионов нитей (потребителей) на GPU легче утилизировать всю полосу пропускания

CUDA Kernel («Ядро»)

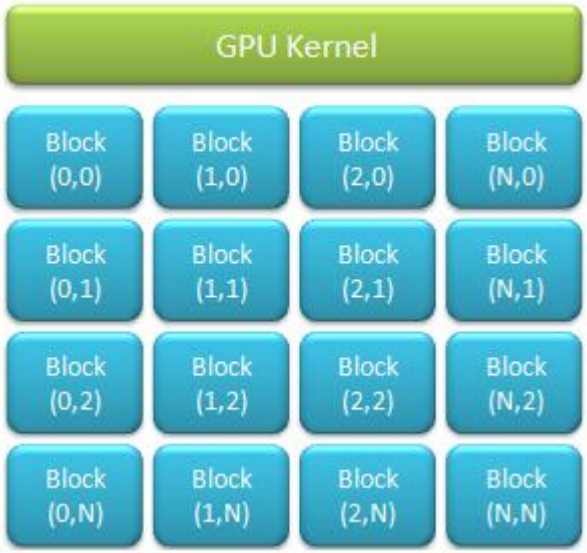
- Специальная функция, являющая входной точкой для кода на GPU
  - Нет возвращаемого значения (void)
  - Выделена атрибутом **__global__**
- Объявления параметров и их использование такое же, как и для обычных функций

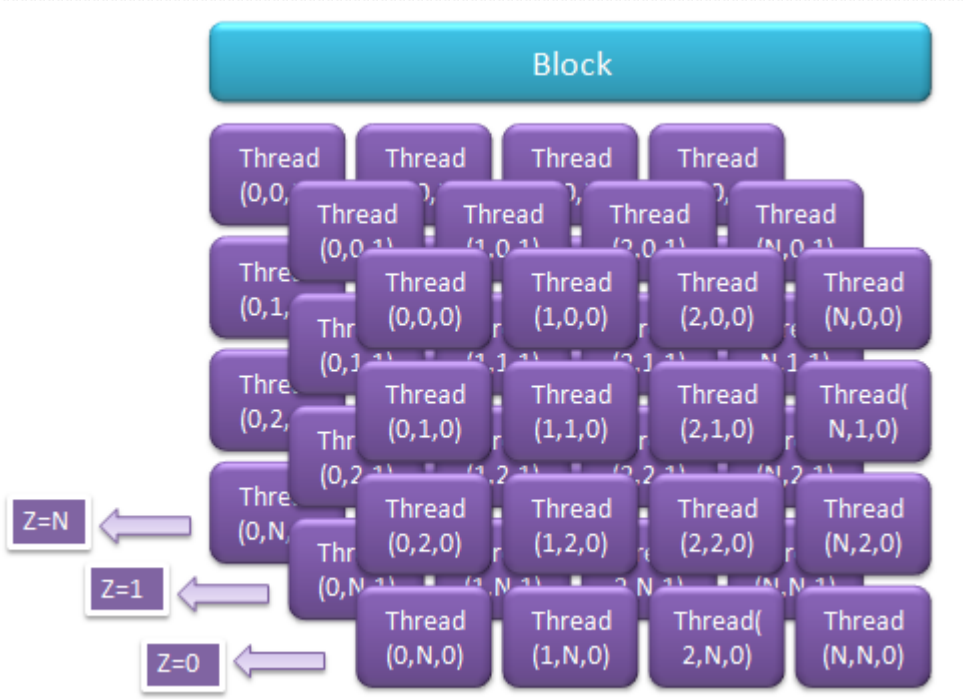
```
__global__ void kernel (int * ptr) {
    ptr = ptr + 1;
    ptr[0] = 100;
    ….; //other code for GPU
}
```

- Хост запускает именно «**ядра**», устройство их выполняет

CUDA Grid

- Двумерный грид из трёхмерных блоков
  - Логический индекс по переменной z у всех блоков равен нулю
  - Каждый блок состоит из трёх «слоёв» нитей, соответствующих z=0,1,2





Пример ядра

```
__global__ void sum_kernel( int *A, int *B, int *C )
{
   int threadLinearIdx =
        blockIdx.x * blockDim.x + threadIdx.x;  //определить свой индекс
   int elemA = A[threadLinearIdx]; //считать нужный элемент A
   int elemB = B[threadLinearIdx]; // считать нужный элемент B
   C[threadLinearIdx] = elemA + elemB; //записать результат суммирования
}
```

На хосте

```
cudaMalloc( (void**)& resultOnDevice, nb) ;  // выделить память
cudaMemcpy(inputDataOnDevice, inputDataOnHost , …); // переслать на
                                                    устройство входные данные

dim3 blockDim = dim3(512);
dim3 gridDim = dim3((n – 1) / 512 + 1 ); // рассчитать грид
kernel <<< gridDim, blockDim  >>> (inputDataOnDevice,…);  // запустить ядро
```

CUDA: Гибридное программирование CPU+GPU

Выбор устройства, обработка ошибок, вычисление времени выполнения

Выбор устройства

- `struct cudaDeviceProp`
  - структура с параметрами устройства. Полный список параметром см. в документации

- `cudaError_t cudaGetDeviceCount ( int* count )`
  - записывает в *count число доступных устройств в системе

- `cudaError_t cudaGetDeviceProperties ( cudaDeviceProp * prop, int device )`
  - записывает параметры устройства с индексом device в *prop

- `cudaError_t cudaSetDevice ( int device )`
  - выбрать устройство с индексом device для проведения вычислений

Выбор устройства

```
int deviceCount=0, suitableDevice=-1;
cudaDeviceProp devProp; // структура с параметрами устройства

cudaGetDeviceCount( &deviceCount ); // число доступных устройств
printf ( "Found %d devices\n", deviceCount );
for ( int device = 0; device < deviceCount; device++ ) {
    cudaGetDeviceProperties ( &devProp, device ); // получить параметры устройства с
                                                  заданным  номером
     printf( "Device %d\n", device );
     printf( "Compute capability     : %d.%d\n", devProp.major, devProp.minor);
     pintf( "Name                    : %s\n", devProp.name );
     printf("Total Global Memory     : %d\n", devProp.totalGlobalMem );
     if (ourRequirementsPassed(devProp)) // ищем устройство с нужными параметрами
          suitableDevice = device ;

 }
assert(suitableDevice != -1);
cudaSetDevice(suitableDevice); // Выбрать для работы заданное устройство
```

Асинхронность в CUDA

- Чтобы GPU больше времени работало в фоновом режиме, параллельно с CPU, некоторые вызовы являются асинхронными
  - Отправляют команду на устройство и сразу возвращают управление хосту

- К таким вызовам относятся:
  - Запуски ядер (если CUDA_LAUNCH_BLOCKING не установлена на 1)
  - Копирование между двумя областями памяти на устройстве
  - Копирование с хоста на устройство менее 64KB
  - Копирования, выполняемые функциями с окончанием *Async
  - cudaMemSet – присваивает всем байтам области памяти на устройстве одинаковое значение (чаще всего используется для обнуления)

Асинхронность в CUDA

- Почему тогда верно работает код?

```
//запуск ядра (асинхронно)
sum_kernel<<< blocks,  threads >>>(aDev, bDev, cDev);
//переслать результаты обратно на хост
cudaMemcpy(cHost, cDev, nb, cudaMemcpyDeviceToHost);
```

- Ведь хост вызывает cudaMemcpy до завершения выполнения ядра!

cudaStream

- Последовательность команд для GPU (запуски ядер, копирования памяти и т.д.), исполняемая строго последовательно, следующая выполняется после завершения предыдущей
- Команды из разных потоков могут выполняться параллельно, независимо от исполнения команд в других потоках
- Пользователь сам объединяет команды в потоки.
- Результаты взаимодействия команд из разных потоков непредсказуемы
- По умолчанию, все команды помещаются в «Default Stream», равный нулю

Асинхронность в CUDA

- Почему тогда верно работает код?

```
// запуск ядра (асинхронно)
sum_kernel<<< blocks,  threads >>>(aDev, bDev, cDev);
//переслать результаты обратно на хост
cudaMemcpy(cHost, cDev, nb, cudaMemcpyDeviceToHost);
```

- Вызов ядра и cudaMemcpy попадают в один поток (поток по умолчанию)
  - Устройство гарантирует их последовательное выполнение

Обработка ошибок

- Коды всех возникающих ошибок автоматически записываются в единственную специальную хостовую переменную типа enum cudaError_t
  - Эта переменная в каждый момент времени равна коду последней ошибки, произошедшей в системе
  - `cudaError_t cudaPeekAtLastError()` – возвращает текущее значение этой переменной
  - `cudaError_t cudaGetLastError()` - возвращает текущее значение этой переменной и присваивает ей cudaSuccess
  - `const char* cudaGetErrorString (cudaError_t error )` –по коду ошибки возвращает её текстовое описание

Обработка ошибок

- Простейший способ быть уверенным, что в программе не произошло CUDA-ошибки:
  - В конце main вставить

```
std::cout << cudaGetErrorString(cudaGetLastError());
```

События

- Маркеры, приписываемые точкам программы
  - ✓ Можно проверить произошло событие или нет
  - ✓ Можно замерить время между двумя произошедшими событиями

- Событие происходит когда завершаются все команды, помещённые в поток, к которому приписано событие, до последнего вызова **cudaEventRecord** для него

- Если событие приписано потоку по умолчанию (stream = 0), то оно происходит в момент завершения всех команд, помещённых во все потоки до последнего вызова **cudaEventRecord** для него

Измерение времени выполнения

- Расчёт времени выполнения ядра
  - Записать одно событие до вызова ядра, другое – сразу после:

```
cudaEvent_t start, stop;
float time;
cudaEventCreate(&start);
cudaEventCreate(&stop);

cudaEventRecord( start, 0 ); // В потоке могут быть некоторые команды
                             // приписываем этой точке событие start
kernel<<<grid,threads>>> ( params);
cudaEventRecord( stop, 0 );   // К данному моменту в поток отправлена команда
                              вызова ядра, приписываем этой точке событие stop
cudaEventSynchronize( stop ); // Дождаться событие stop, т.е. завершения
                              выполнения всех команд, в т.ч. запуска ядра
cudaEventElapsedTime( &time, start, stop );   // Время между двумя событиями

cudaEventDestroy( start );
cudaEventDestroy( stop );
```

Компиляция и запуск

Как скомпилировать и запустить программу с использованием CUDA

Особое отношение к .cu

При работе с CUDA используются расширения Си++:

- Конструкция запуска ядра <<< …. >>>
- Встроенные переменные threadIdx, blockIdx
- Квалификаторы __global__ __device__ и т.д.
- ….

- Эти расширения могут быть обработаны только в *.cu файлах!
  - cudafe не запускается для файлов с другим расширением
  - В этих файлах можно не делать #include <cuda_runtime.h>

- Вызовы библиотечных функций вида cuda* можно располагать в *.cpp файлах
  - Они будут слинкованы обычным линковщиком из библиотеки libcudart.so

Компиляция хост-кода

В файле test.cpp :

- Основной хост-код. Т.к. конструкцию запуска ядра в *.cpp применять нельзя, вынесем её в отдельную функцию, определённую в каком-нибудь *.cu

```
#include <cuda_runtime.h> // здесь объявления функций тулкита
void launchKernel(params); // определить эту функцию в каком-нибудь *.cu
int main()  {
    … // обычный хост-код
    cudaSetDevice(0); // Можно! Обычная функция, потом слинкуется
    … // обычный хост-код,     kernel<<1,1>>>(params)  здесь нельзя, только в *.cu!
    launchKernel(params); // Внутри этой функции будет вызвано ядро
                          // Определена в некотором *.cu
    … // обычный хост-код
}
```

Компиляция хост-кода

В файле test.cpp :

- Основной хост-код. Т.к. конструкцию запуска ядра в *.cpp применять нельзя, вынесем её в отдельную функцию, определённую в каком-нибудь *.cu

- Компиляция:

```
$g++ -I /toolkit_install_dir/include test.cpp –c –o test.o
```

  - Указали путь, по которому следует искать инклюд-файлы для CUDA
  - Попросили сделать объектник

Или же через nvcc, без указания директории с инклюдами:

```
$nvcc test.cpp –c –o test.o
```

Компиляция device-кода

В файле kernel.cu

- Определяем ядро и функцию для его запуска. В функции запуска рассчитывается конфигурация и дополнительно выводится на экран время работы ядра

```
__global __ void kernel(params)  {
      ….; // код ядра
}
```

```
void launchKernel(params)  {

     …;// расчёт конфигурации запуска в зависимости от параметров,  создание событий

    float time;
    cudaEventRecord( start, 0 );
    kernel<<< конфигурация >>> (params); // запуск ядра
    cudaEventRecord( stop, 0 );
    cudaEventSynchronize( stop );
    cudaEventElapsedTime( &time, start, stop );// Время между двумя событиями
    printf(%4.4f, time);
}
```

Компиляция device-кода

В файле kernel.cu

- Определяем ядро и функцию для его запуска. В функции запуска рассчитывается конфигурация и дополнительно выводится на экран время работы ядра

- Компиляция:

```
$nvcc –arch=sm_20 –Xptxas –v kernel.cu  -c –o kernel.o
```

Линковка проекта

```
$g++ -L/toolkit_install_dir/lib64 –lcudart test.o kernel.o –o test
```

- Попросили слинковаться с libcudart.so, указали где она может лежать

```
$nvcc test.o kernel.o –o test
```

- nvcc –v test.o kernel.o –o test покажет какая конкретно команда вызвалась

Также можно расположить весь код в *.cu файле и не пользоваться *.cpp вообще

Запуск

- В результате компиляции и линковки получаем обычный исполняемый файл

- Запускаем из командной строки обычным способом

```
$./test 1024
```

Часть 2: Иерархия памяти в CUDA

Глобальная память

Глобальная память

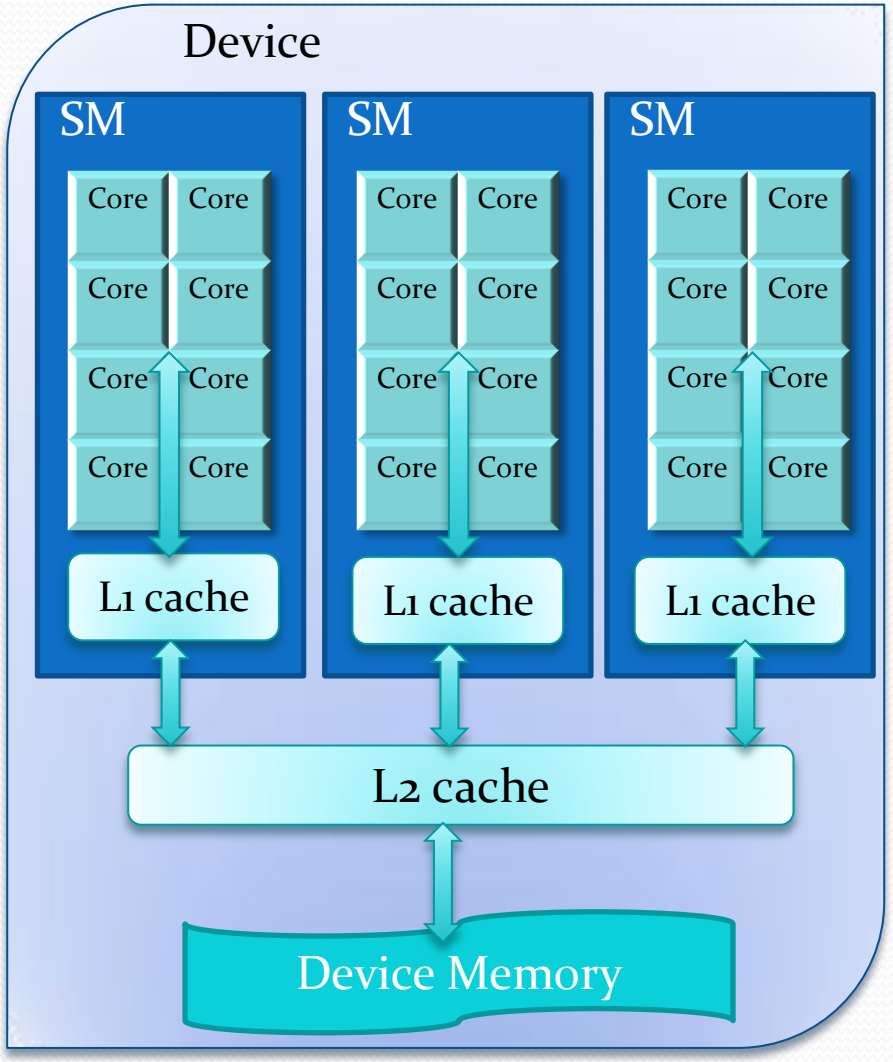
- Расположена в **DRAM GPU**
- Объём до 6Gb
  - Параметр устройства totalGlobalMem
- **Кешируется** в:
  - L2 – на устройстве

    максимальный размер 1536 KB

    Параметр устройства l2CacheSize
  - L1 (**только на Fermi**) – на каждом мультипроцессоре

    максимальный размер 48KB

    минимальный размер 16KB



Выделение

- Динамически с хоста через `cudaMalloc()`
- Динамически из ядер через `malloc()`
- Статически - глобальная переменная с атрибутом `__device__`

Динамически с хоста

```
__global__ void kernel(int *arrayOnDevice) {
     arrayOnDevice[threaIdx.x] = threaIdx.x;
}

int main() {
     size_t size = 0;
     void *devicePtr = NULL;
     int hostMem[512];
     cudaMalloc(&devicePtr, sizeof(hostMem));
     cudaMemcpy(devicePtr, hostMem, size, cudaMemcpyHostToDevice);
     kernel<<<1,512>>>(devicePtr);
}
```

Статически

```
__device__ int arrayOnDevice[512]
__global__ void kernel() {
     arrayOnDevice[threaIdx.x] = threaIdx.x;
}

int main() {
    size_t size = 0;
    void *devicePtr = NULL;
    int hostMem[512];
    cudaGetSymbolSize(&size, arrayOnDevice);
    cudaMemcpyToSymbol(arrayOnDevice, localMem, size);
    kernel<<<1,512>>>(devicePtr);
}
```

Статически

```
__device__ int arrayOnDevice[512]
__global__ void kernel() {
     arrayOnDevice[threaIdx.x] = threaIdx.x;
}

int main() {
     size_t size = 0;
     int hostMem[512];
     void *devicePtr = NULL;
     cudaGetSymbolSize(&size, arrayOnDevice);
     cudaGetSymbolAddress(&devicePtr, arrayOnDevice);
     cudaMemcpy(devicePtr, hostMem, size, cudaMemcpyHostToDevice);
     kernel<<<1,512>>>();
}
```

cuda*Symbol*

- Переменные с атрибутами `__device__` и `__constant__` находятся в глобальной области видимости и хранятся объектном модуле как отдельные символы
- Память под них выделяется статически при старте приложения, как и под обычные глобальные переменные
- Работать с ними на хосте можно через функции `cudaMemcpyToSymbol , cudaMemcpyToSymbolAsync, cudaGetSymbolAddress, cudaMemcpyFromSymbol, cudaMemcpyFromSymbolAsync, cudaGetSymbolSize`

Динамически из ядер

```
#include <stdlib.h>

__global__ void kernel() {
    size_t size = 1024 * sizeof(int);
    int *ptr = (int *)malloc(size);
    memset(ptr, 0, size)
    free(ptr)
}

int main() {
    cudaDeviceSetLimit(cudaLimitMallocHeapSize, 128*1024*1024);
    kernel<<<1, 128>>>();
}
```

Динамически из ядер

- `malloc()` из ядра выделяет память в куче
- Не освобождается между запусками ядер
- Освобождение по `free()` только с устройства
- Компилировать с `-arch=sm_20`
- Доступны `memcpy()`, `memset()`

Динамически из ядер

- Память под кучу выделяется на устройстве при инициализации CUDA runtime и освобождается при завершении программы
  - После создания размер кучи не может быть изменен
  - По-умолчанию 8мб
  - Можно задать до первого вызова ядра с `malloc` через `cudaDeviceSetLimit(cudaLimitMallocHeapSize, N)`

Режимы работы кеша L1

- Кеш может работать в двух режимах: 48KB и 16KB
- Переключение режимов:
  - `cudaDeviceSetCacheConfig(cudaFuncCache cacheConfig)`

    Устанавливает режим работы кеша cacheConfig для всего устройства
  - `cudaFuncSetCacheConfig ( const void* func, cudaFuncCache cacheConfig )`

    Устанавливает режим работы кеша cacheConfig для всего отдельного ядра

Режимы работы кеша L1

- `cudaDeviceSetCacheConfig(cudaFuncCache cacheConfig)`
  - Возможные режимы:
    - cudaFuncCachePreferNone – без предпочтений(по умолчанию). Выбирается последняя использованная конфигурация. Начальная конфигурация – 16KB L1
    - cudaFuncCachePreferShared: 16KB L1
    - cudaFuncCachePreferL1: 48KB L1

- `cudaFuncSetCacheConfig ( const void* func, cudaFuncCache cacheConfig )`
  - По умолчанию - cudaFuncCachePreferNone - запускать с режимом устройства

Транзакции

Транзакции

- Глобальная память оптимизирована с целью увеличения полосы пропускания
  - Отдать максимум данных за одно обращение

Транзакции

- Транзакция – выполнение загрузки из глобальной памяти сплошного отрезка в 128 байт, с началом кратным 128 (**naturally aligned**)

- Инструкция обращения в память выполняется одновременно для всех нитей варпа (**SIMT**)
  - Выполняется столько транзакций, сколько нужно для покрытия обращений всех нитей варпа
  - Если нужен один байт – все равно загрузится 128

Шаблоны доступа

Обращения нитей варпа

Все обращения умещаются в одну транзакцию

512 640 768

Обращения нитей варпа

Порядок не важен, главное, чтобы попадали в одну кеш-линию

512 640 768

Шаблоны доступа

Обращения нитей варпа

Запрашивается 128 байт, но с не выровненного адреса
2 транзакции - 256 байт

Обращения нитей варпа

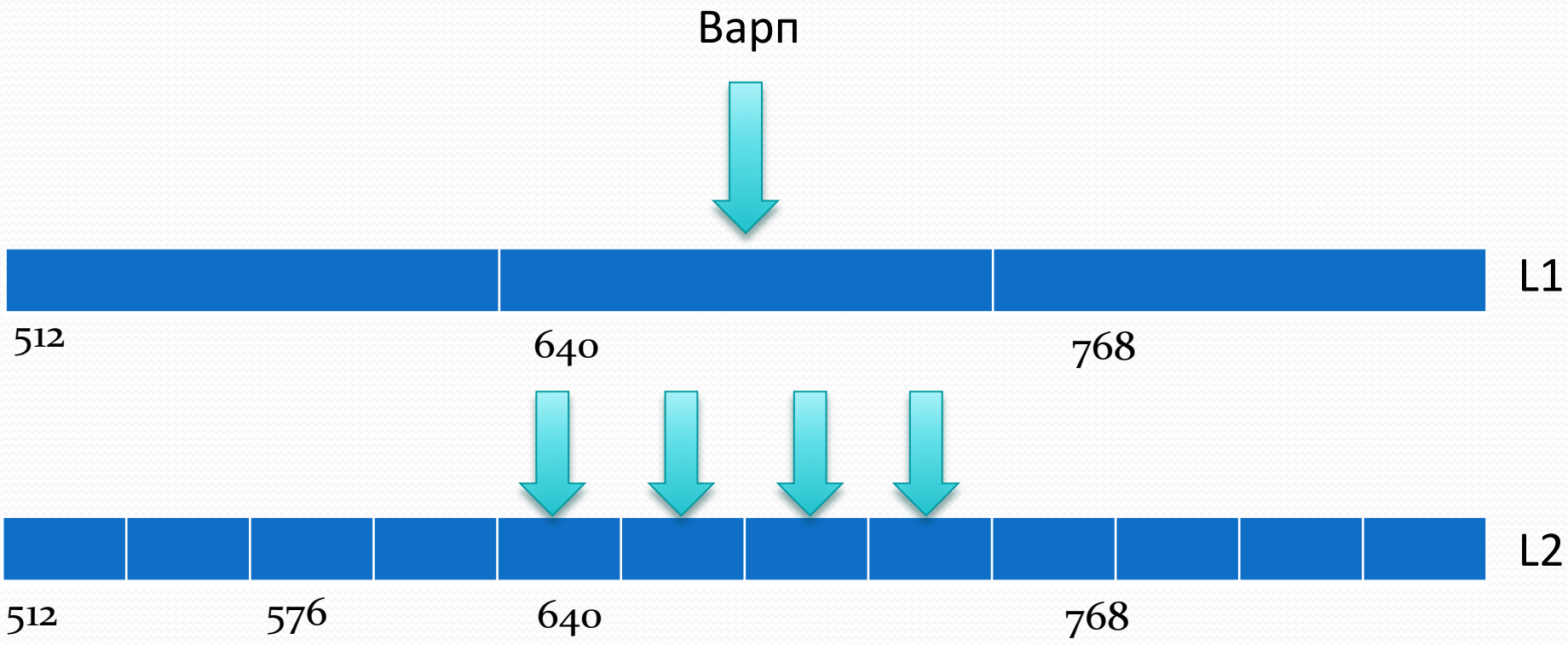
Запрашивается 128 байт, но обращения разбросаны в пределах трёх кеш-линий -
3 транзакции – 384 байта

Кеш-линии

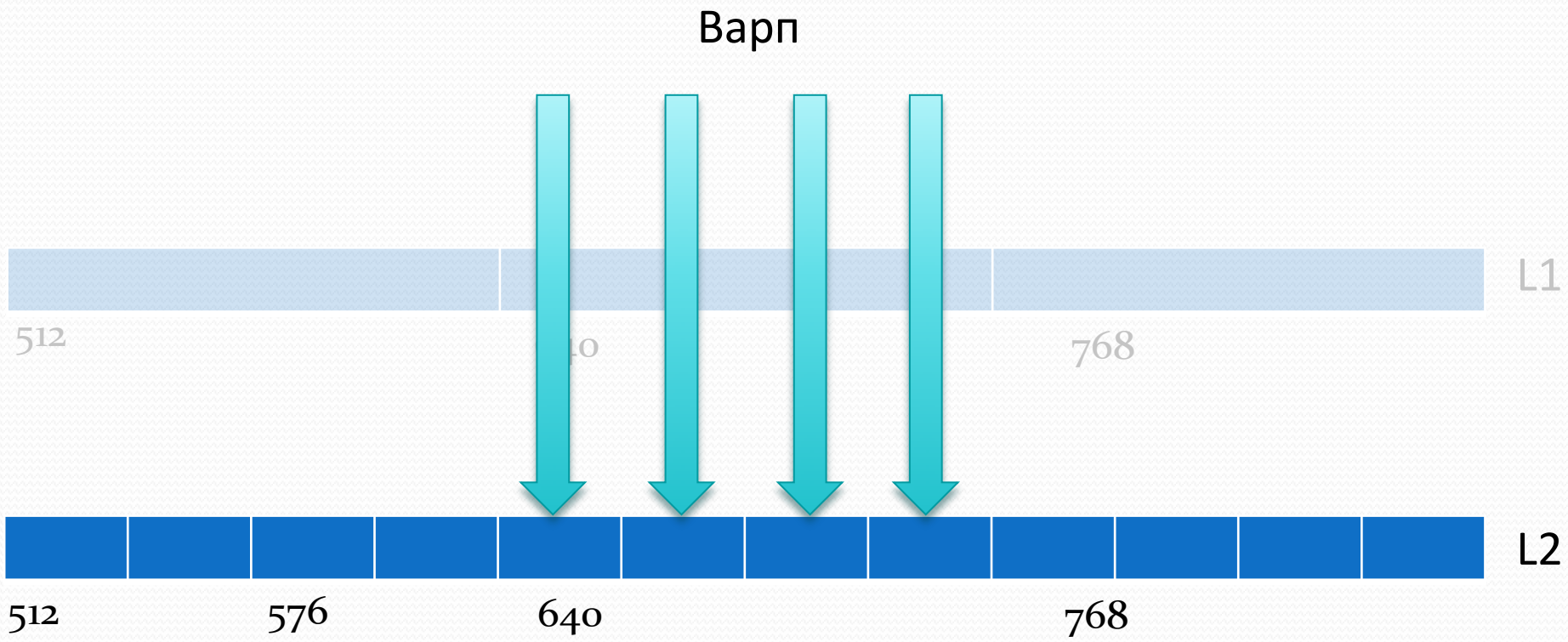
- Ядра взаимодействуют не с памятью напрямую, а с кешами
- Транзакция – выполнение загрузки кеш-линии
  - У кеша **L1** кеш-линии **128** байт, у **L2** - **32** байта, **naturally aligned**
  - Кеш грузит из памяти всю кеш-линию, даже если нужен один байт

- Можно обращаться в память минуя кеш L1
  - Транзакции будут по 32 байта

Транзакции: L1 включен



Транзакции: L1 выключен



Включение \ отключение L1

- Кеширование в L1 можно отключить **при компиляции**
  - nvcc -Xptxas -dlcm=ca

    с кешированием в L1 (по умолчанию)
  - nvcc -Xptxas -dlcm=cg

    В бинарном коде обращения в глобальную память будут транслированы в инструкции, не использующие кеш L1 при выполнении

- Различия именно на уровне бинарного кода – другие инструкции ассемблера

Шаблоны доступа: L1 выключен

Обращения нитей варпа

Запрашивается 128 байт, но с невыровненного адреса. Умещаются в четыре кеш-линии L2

4 транзакции по 32 байта – 128 байт

Обращения нитей варпа

Запрашивается 128 байт, но обращения разбросаны по пяти кеш-линиям L2

5 транзакций по 32 – 160 байт

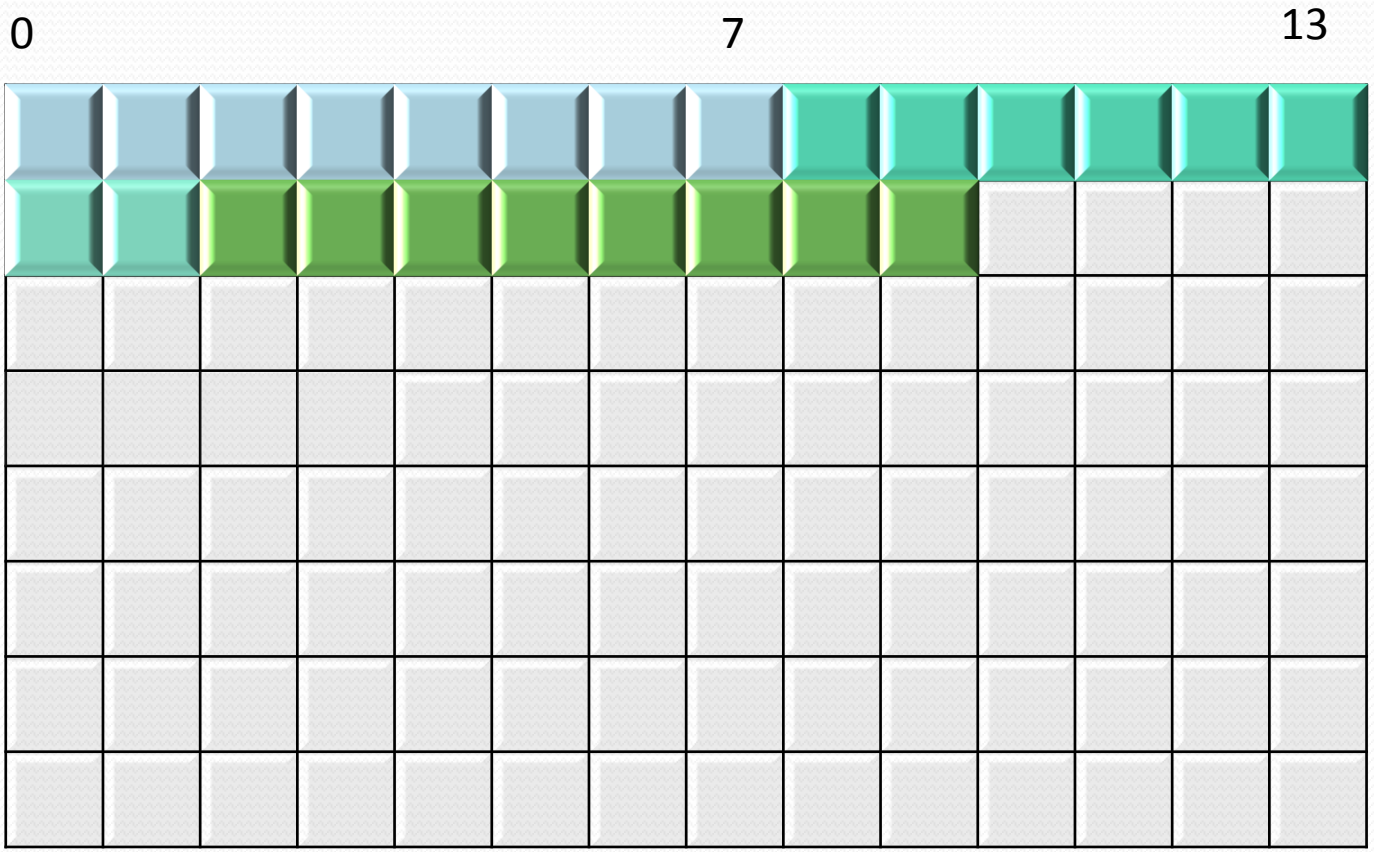
Вывод

- Если в ядре не используется общая память (см. далее), то заведомо стоит включить cudaFuncCachePreferL1
- Если разреженный доступ – кеширование в L1 отключаем
- В общем случае, стоит проверить производительность работы всех 4-х вариантов:
  - (**-**dlcm=**ca**, **-**clcm=**cg**)x(**16**KB, **48**KB) 

Прикладные проблемы

Матрицы и глобальная память

Пусть транзакция – 8*4=32 байта, адрес транзакции выровнен по 32 байта
Если ширина матрицы не кратна 32 байтам – большая часть строк не выровнена



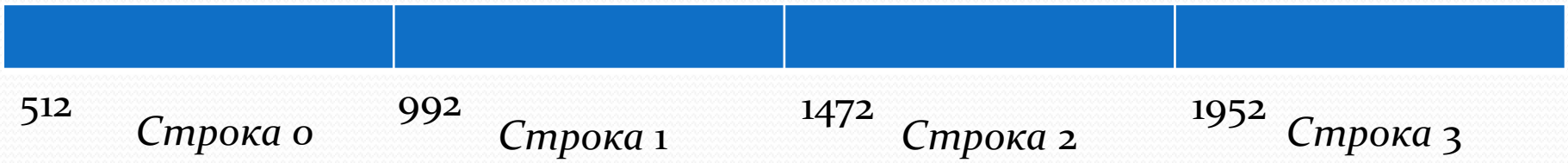
Матрицы и глобальная память

2 транзакции!

Матрицы и глобальная память

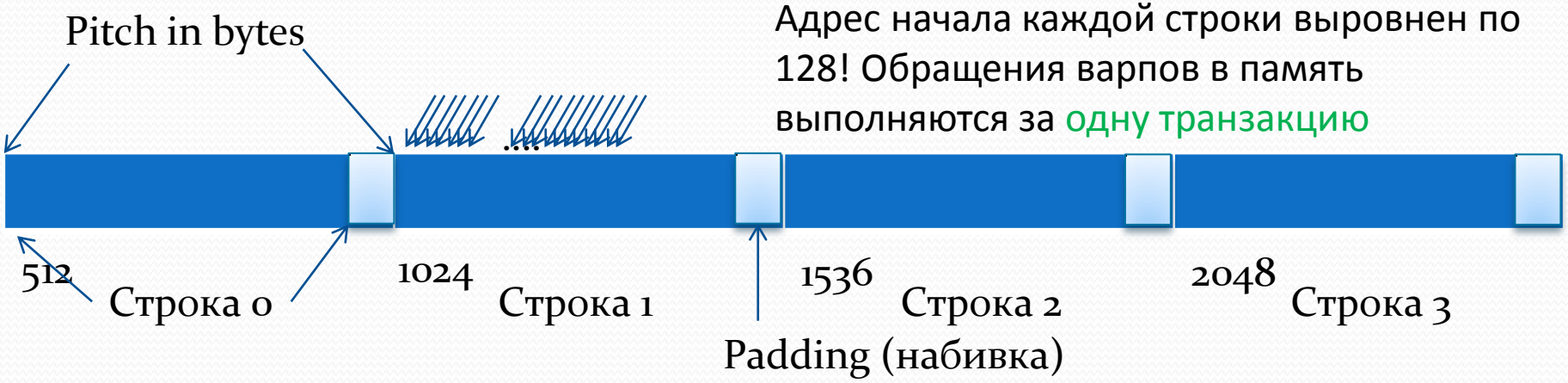
- Матрицы хранятся в линейном виде, по строкам
- Пусть длина строки матрицы – 480 байт (120 float)
  - обращение – matrix[idy*120 + idx]

Адрес начала каждой строки, кроме первой, не выровнен по 128 – обращения варпов в память будут выполняться за 2 транзакции

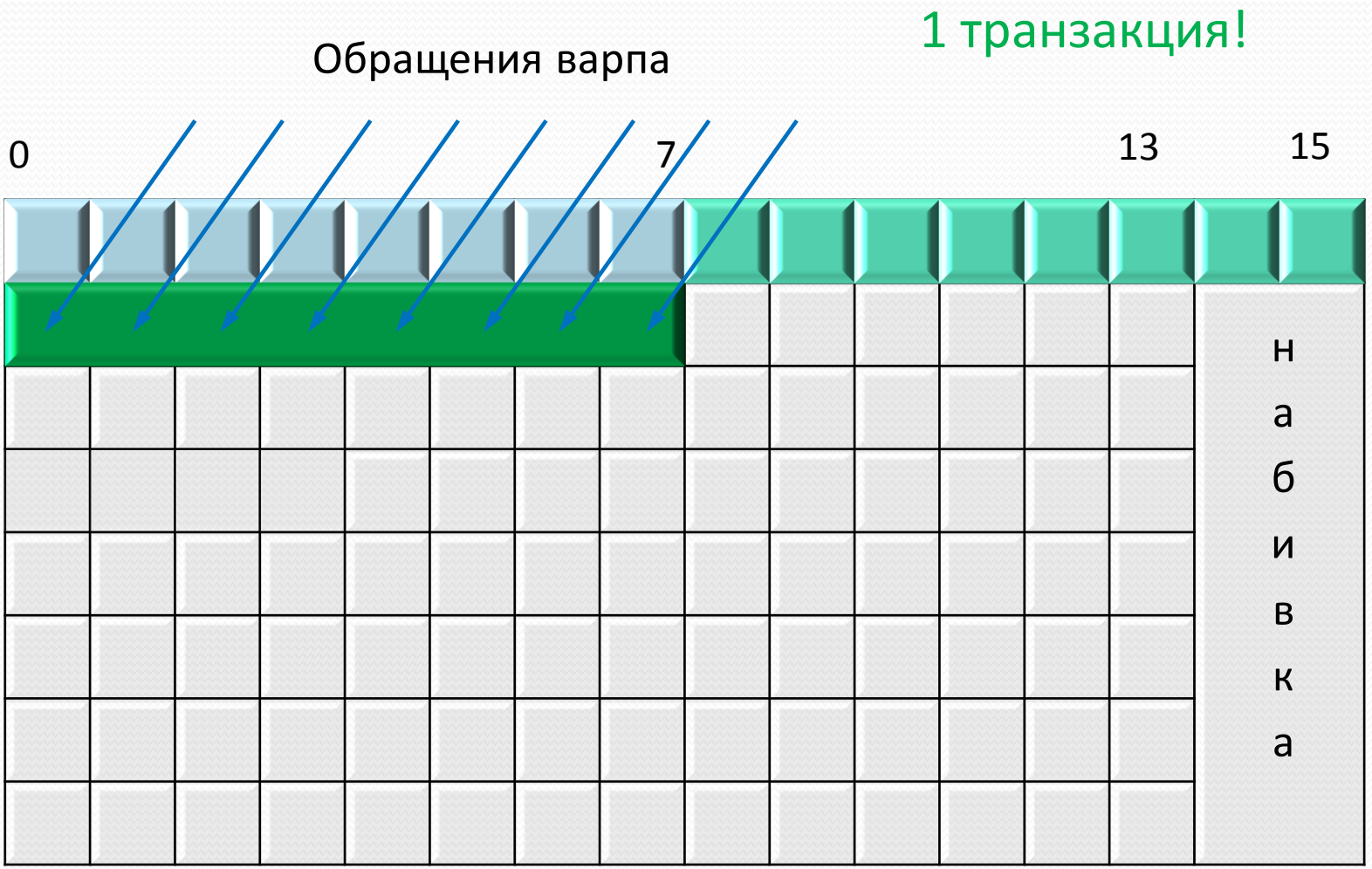


Матрицы и глобальная память

- Дополним каждую строку до размера, кратного 128 байтам – в нашем случае, 480 + 32 = 512, это наш pitch – фактическая ширина в байтах
- Эти байты никак не будут использоваться, т.е. 32/512=6% лишней памяти будет выделено (Но для больших матриц эта доля будет существенно меньше)
- Зато каждая строка будет выровнена по 128 байт
  - Обращение matrix[idy*128+ idx]



Матрицы и глобальная память



Выделение памяти с «паддингом»

- `cudaError_t cudaMallocPitch (void ** devPtr, size_t * pitch, size_t width, size_t height)`
  - width – логическая ширина матрицы в байтах
  - Выделяет не менее width * height байтов , может добавить в конец строк набивку, с целью соблюдения выравнивания начала строк
  - сохраняет указатель на память в (*devPtr)
  - сохраняет фактическую ширину строк в байтах в (*pitch)

Выделение памяти с «паддингом»

- `cudaError_t cudaMallocPitch (void ** devPtr, size_t * pitch, size_t width, size_t height)`

- Адрес элемента (Row, Column) матрицы, выделенной при помощи cudaMallocPitch:

```
T* pElement = (T*)((char*) devPtr + Row * pitch) + Column
```

Копирование в матрицу с padding-ом

- `cudaError_t cudaMemcpy2D ( void* dst, size_t dpitch, const void* src, size_t spitch, size_t width, size_t height, cudaMemcpyKind kind )`
  - dst - указатель на матрицу, *в которую* нужно копировать ,
    dpitch – ***фактическая*** ширина её строк в байтах
  - src - указатель на матрицу *из которой* нужно копировать,
    spitch – ***фактическая*** ширина её строк в байтах
  - width – сколько ***байтов*** каждой строки нужно копировать
  - height – число строк
  - kind – направление копирования (как в обычном cudaMemcpy)

Копирование в матрицу с padding-ом

- `cudaError_t cudaMemcpy2D ( void* dst, size_t dpitch, const void* src, size_t spitch, size_t width, size_t height, cudaMemcpyKind kind )`

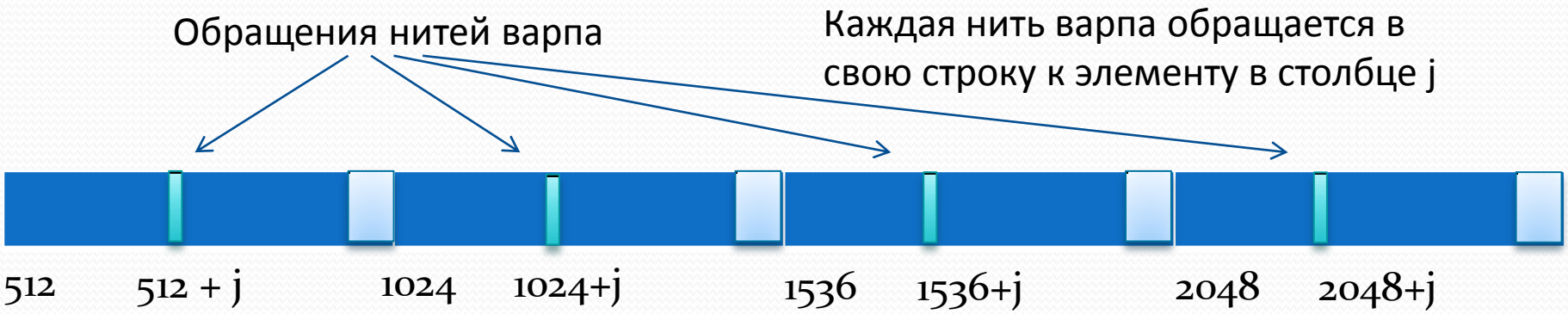
- Из начала каждой строки исходной матрицы копируется по width байтов. Всего копируется width*height байтов, при этом
  - Адрес строки с индексом **Row** определяется по фактической ширине:

    `(char*)src + Row* spitch` – *в матрице-источнике*

    `(char*)dst + Row* dpitch` – *в матрице-получателе*

Обращение к матрице по столбцам?

- Матрица расположена по строкам, а обращение идёт по столбцам



Если матрица имеет размер больше 128 байт, то эти обращения ни за что не «влезут» в одну транзакцию!

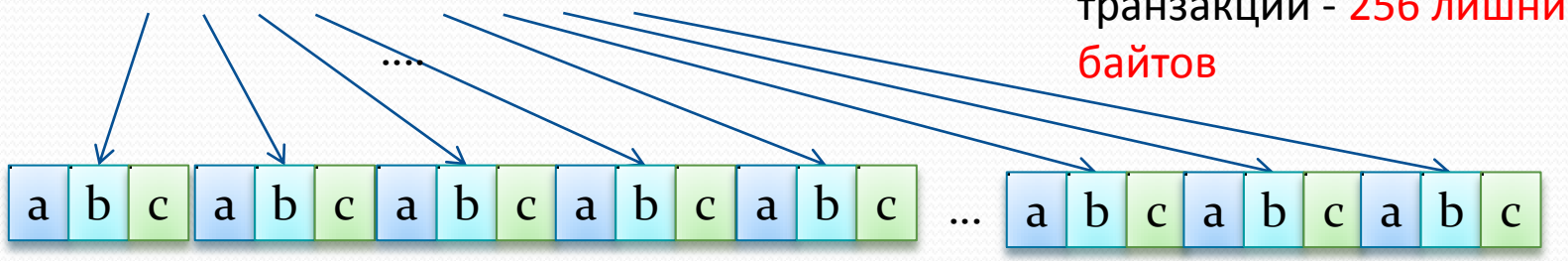
Транспонировать!

- Решение – хранить матрицу в транспонированном виде!
  - В этом случае обращения по столбцам превратятся в обращения к последовательным адресам
  - Выделять память под транспонированную матрицу также через `cudaMallocPitch`

Массивы структур?

```
struct example {
    int a;
    int b;
    int c;
}
__global__ void kernel(example * arrayOfExamples) {
     int idx = threadIdx.x + blockIdx.x * blockDim.x;
     arrayOfExamples[idx].c =
          arrayOfExamples[idx].b + arrayOfExamples[idx].a;
}
```

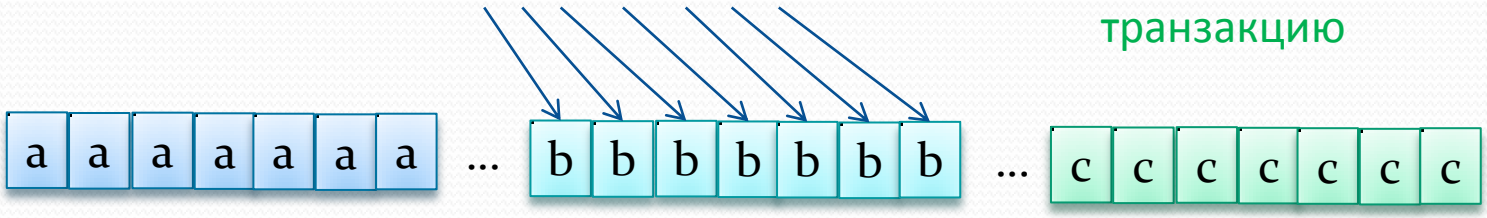
Обращение варпа в память будет выполняться в три транзакции - 256 лишних байтов



Структура с массивами!

```
struct example {
    int *a;
    int *b;
    int *c;
}
__global__ void kernel(example arrayOfExamples) {
     int idx = threadIdx.x + blockIdx.x * blockDim.x;
     arrayOfExamples.c[idx] =
          arrayOfExamples.b[idx] + arrayOfExamples.a[idx];
}
```

Обращения нитей варпа

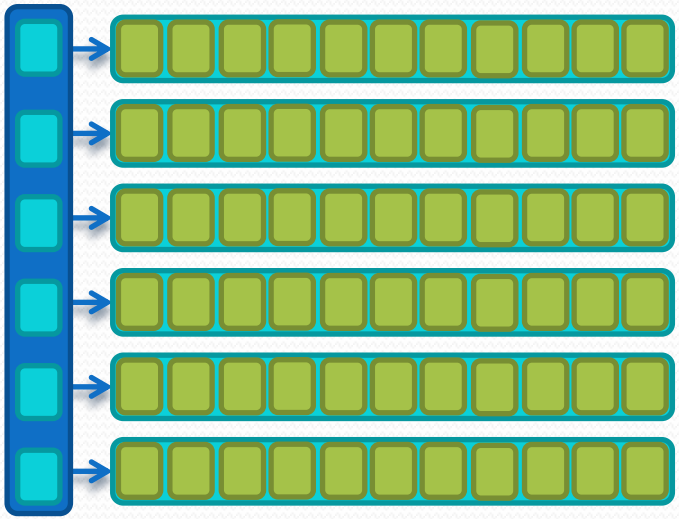


Обращение варпа в память будет выполняться за одну транзакцию

Косвенная адресация

- Требует двух чтений из памяти
  - сначала A[i], потом A[i][j]
- При первом чтении варпу нужно всего 4 байта, а скачается 128

```
float **A;
A[i][j] = 1;
```



Выводы

Выводы

- Обращения нитей варпа в память должны быть пространственно-локальными
- Начала строк матрицы должны быть выровнены
- Массивы структур -> структура с массивами
- 16KB vs 48KB L1

- Избегаем косвенной адресации
- Избегаем обращений нитей варпа к столбцу матрицы

- В случае сильно разреженного доступа проверяем работу с отключенным кешем

end