

# GPU Computing

Massimo Perego

## Contents

<b>1</b>	<b>Introduzione all’High Performance Computing HPC</b>	<b>2</b>
1.1	Architettura Nvidia . . . . .	4
<b>2</b>	<b>Modelli per sistemi paralleli</b>	<b>6</b>
2.1	Modello PRAM . . . . .	6
2.2	Processi UNIX . . . . .	7
2.3	Thread in CUDA . . . . .	9
2.3.1	Organizzazione dei thread . . . . .	10
2.4	Warp . . . . .	14

# 1 Introduzione all'High Performance Computing HPC

L'uso delle GPU permette di incrementare significativamente le performance, per avere speed-up anche nell'ordine delle migliaia (possono esserci fino a decine di migliaia di core), per problemi altamente parallelizzabili. Si parlerà di paradigma GP-GPU (General Purpose - GPU).

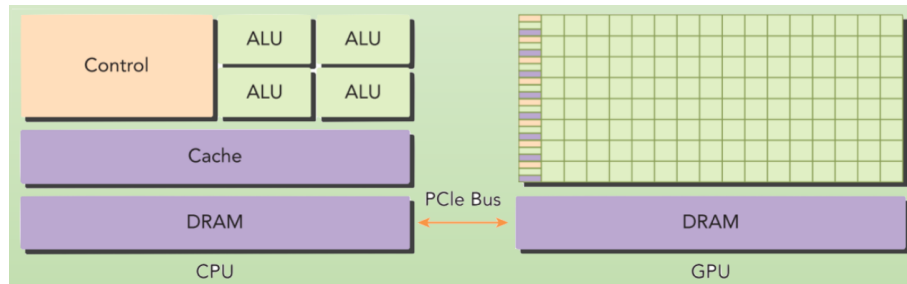
Esistono molti sistemi che si basano su operazioni semplici ma ripetute numerose volte. Esempio: il prodotto matriciale è il prodotto vettore-vettore ripetuto. Questi sistemi sono facilmente parallelizzabili (se non ci sono interdipendenze tra i risultati).

**Parallelismo:** Vogliamo accelerare il tempo, il parallelismo è la capacità di eseguire parti di un calcolo in modo concorrente. Esistono problemi che sarebbero impensabili senza l'accelerazione permessa dal parallelismo. Permette di risolvere problemi più grandi nello stesso tempo, o problemi di dimensione fissa in tempo più breve.

Il parallelismo sarà gestito a livello di thread: unità di esecuzione costituita da una sequenza di istruzioni e gestita dal sistema operativo o da un sistema di runtime.

**Paradigma GP-GPU:** fa riferimento all'uso di GPU (Graphics Processing Unit) per eseguire computazioni di carattere generale, di qualsiasi tipo. Implica l'uso di CPU e GPU in maniera congiunta, tutto parte comunque dalla CPU (Host) la quale effettuerà richieste alla GPU (Device), diventa un coprocessore. Viene separata parte sequenziale dell'applicazione e di controllo che va sulla CPU mentre la parte a maggior intensità computazionale va sulla GPU.

La GPU non è una piattaforma standalone, ma è un coprocessore che opera congiuntamente alla CPU, comunicando tramite bus PCI-Express. Sono necessari trasferimenti e la CPU orchestra la "sincronizzazione".



L'uso, dal punto di vista dell'utente, di un sistema con GPU è **trasparente**, si ha un risultato più veloce ma dall'esterno non cambia l'esperienza.

Le funzioni vanno riscritte in modo da esporle al parallelismo sulla GPU. I “**kernel**” sono le funzioni demandate alla GPU. Le applicazioni ibride avranno parti di codice host, eseguito sulla CPU, e parti di codice device, eseguito sulla GPU. La CPU si occupa della gestione dell'ambiente, dei dati per il device stesso ed è ottimizzata per tutte le sequenze di operazioni con un flusso di controllo imprevedibile, mentre la GPU è ideale per flussi di controllo semplici.

Un problema da considerare è l'uso di energia: si vuole massimizzare la potenza di calcolo minimizzando l'energia consumata.

La differenza di esecuzione è

- CPU: pochi core ottimizzati per l'elaborazione sequenziale
- GPU: architettura massicciamente parallela che consiste di migliaia di core che cooperano in modo efficiente per trattare molteplici task in maniera concorrente

Il calcolo parallelo può essere realizzato in vari modi, tra cui:

- parallelismo nei **dati**: suddivisione dei dati in parti uguali per essere elaborati simultaneamente su più processori
- parallelismo sui **task**: il lavoro viene suddiviso in attività indipendenti ed ogni task viene eseguito dal suo processore. Nel processo di parallelizzazione bisogna tenere in considerazione le dipendenze tra i task

- **parallelismo di istruzioni:** un programma viene diviso in istruzioni ed ognuna di queste parti indipendenti viene eseguita simultaneamente su più processori

L'ambito di utilizzo del parallelismo dato dalle GPU è con **dimensioni dei dati abbastanza ampie** che allo stesso tempo permettono buon parallelismo.

**Tassonomia di Flynn:** I modelli di computazione fondamentali sono:

- **SISD Single Instruction Single Data:** una unità che esegue una operazione (sequenziale); questo è il modello di Von Neumann
- **SIMD Single Instruction Multiple Data:** una singola istruzione per molteplici unità di calcolo, applicata su molti dati
- **MISD Multiple Instruction Single Data:** il parallelismo è solo a livello di istruzioni, molte unità sugli stessi dati; non ha implementazioni realistiche
- **MIMD Multiple Instruction Multiple Data:** molteplici unità che possono accedere a molteplici dati, ognuna con istruzioni proprie

**SIMT Model:** Modello Single Instruction Multiple Thread, introdotto da CUDA. Ogni thread ha la possibilità di “scegliere una strada” in base al dato. Il flusso di controllo parallelo parte assieme ma può portare a branch differenti, in base ai dati. Estende il concetto di SIMD permettendo flussi individuali per ogni thread, con il costo relativo a gestire la decisione locale sui thread (program counter e registri).

## 1.1 Architettura Nvidia

**Streaming Multiprocessor SM:** Le GPU sono costituite di array di SM, composto da gruppi di 32 CUDA core, chiamati **warp**. Ogni SM in una GPU è progettato per supportare l'esecuzione concorrente di centinaia di thread. In un warp tutti i thread dovrebbero essere SIMD, eseguire la stessa istruzione allo stesso tempo.

Questo è il modello iniziale, nel tempo si è evoluto con cose come una maggiore gerarchia di cache e altri core dedicati ad applicazioni specifiche, come i tensor core per il calcolo matriciale. Ogni CUDA core ha i suoi registri e

unità di calcolo (FP e INT).

**Compute Capability CC:** Rappresenta la versione dell'architettura CUDA supportata da una GPU Nvidia. Definisce le funzionalità hardware disponibili, come il numero di core CUDA, il supporto per le istruzioni avanzate, uso della memoria, risorse, ecc. Viene usato in fase di compilazione per determinare l'architettura per cui compilare.

**CUDA Toolkit:** Fornisce tutti gli strumenti per la programmazione in CUDA C/C++ (e oltre). Permette compilazione, profilazione e debugging, assieme a librerie ecc.; tutto ciò che serve per sviluppare.

**CUDA APIs:** Sono presenti due livelli di API per la gestione della GPU e l'organizzazione dei thread:

- **CUDA Runtime API**
- **CUDA Driver API**

Le driver API sono API a basso livello e piuttosto difficili da programmare ma danno un maggior controllo della GPU.

Runtime porta una astrazione maggiore, per un utilizzo più user-friendly ma richiede di compilare con `nvcc` e dipendono dalla versione del driver. Le funzioni cominciano con `cuda`.

## 2 Modelli per sistemi paralleli

Un **modello di programmazione parallela** rappresenta un'**astrazione** per un sistema di calcolo parallelo in cui è conveniente esprimere algoritmi concorrenti/paralleli.

Si possono avere diversi livelli di astrazione:

- **Modello macchina:** livello più basso che descrive l'hardware e il sistema operativo (registri, memoria, I/O); il linguaggio assembly è basato su questo livello di astrazione
- **Modello architetturale:** rete di interconnessione di piattaforme parallele, organizzazione della memoria e livelli di sincronizzazione tra processi, modalità di esecuzione delle istruzioni di tipo SIMD o MIMD
- **Modello computazionale:** modello formale di macchina che fornisce metodi analitici per fare predizioni teoriche sulle prestazioni (in base a tempo, uso delle risorse, ...). Per esempio il modello RAM descrive il comportamento del modello architetturale di Von Neumann (processore, memoria, operazioni, ...) Il modello PRAM estende RAM per architetture parallele

### 2.1 Modello PRAM

Si tratta del più semplice modello di calcolo parallelo: **memoria condivisa**,  $n$  processori, la memoria permette scambiare facilmente valori tra i processori.

Il calcolo procede per passi: ad ogni passo ogni processore può fare una operazione sui dati con possesso esclusivo; può leggere o scrivere nella memoria condivisa. Si può selezionare un insieme di processori che eseguono tutti la stessa istruzione (su dati generalmente diversi - **SIMD**). Gli altri processori restano inattivi; i processori attivi sono sincronizzati (eseguono la stessa istruzione simultaneamente).

**SIMD:** I modelli SIMD sono basati su unità funzionali contenute in processori general purpose. Le ALU SIMD possono effettuare operazioni multiple simultaneamente in un ciclo di clock. Usano registri che effettuano **load**

e **store** di molteplici elementi di dati in una sola transizione. La popolarità SIMD deriva dall'uso esplicito di linguaggi di programmazione parallela sfruttando il parallelismo dei dati.

Permette di semplificare il controllo in quanto univoco.

**Modello di programmazione parallela:** Specifica la “vista” del programmatore del computer parallelo, definendo come si possa codificare un algoritmo

- Comprende la **semantica** del linguaggio di programmazione, librerie, compilatore, tool di profiling
- Dice di che **tipo** sono le **computazioni parallele** (instruction level, procedural level o parallel loops)
- Permette di dare **specifiche implicite** o **esplicite** (da parte utente) per il parallelismo
- Modalità di **comunicazione tra unità di computazione** per lo scambio di informazioni (shared variable)
- Meccanismi di **sincronizzazione** per gestire computazioni e comunicazioni tra diverse unità che operano in parallelo
- Molti forniscono il concetto di **parallel loop** (iterazioni indipendenti), altri di **parallel task** (moduli assegnati a processori distinti eseguiti in parallelo)
- Un **programma parallelo** è eseguito da processori in un ambiente parallelo tale che in ogni processore si ha uno o più flussi di esecuzione, quest'ultimi sono detti processi o thread
- Ha una **organizzazione dello spazio di indirizzamento**: per esempio, distribuito (no variabili shared quindi uso del message passing) o condiviso (uso di variabili shared per lo scambio di informazioni)

## 2.2 Processi UNIX

Con “processo” si definisce un programma in esecuzione con diverse risorse allocate (stack, heap, registri, ...). Un processo con un solo thread può eseguire una sola attività alla volta, se ci sono più processi in esecuzione è necessario alternarli e di conseguenza avere un context switch (costoso,

gestito dal sistema operativo). I processi possono essere creati a runtime.

**Thread Unix:** Un thread (su CPU) è una estensione del modello di processo (lightweight process perché possiedono un contesto più snello rispetto ai processi). Si tratta di un flusso di istruzioni di un programma e viene schedato come unità indipendente nelle code di esecuzione dei processi della CPU (scheduler).

Condivide lo spazio di indirizzamento con gli altri thread del processo: rappresentato da un thread control block (TCB) che punta al PCB del processo contenitore. Dal punto di vista del programmatore, l'esecuzione del thread è sequenziale, quindi un'istruzione eseguita alla volta, con un puntatore alla prossima istruzione da eseguire e verificando costantemente l'accesso ai dati. Vi sono meccanismi di sincronizzazione tra thread per evitare race condition (accesso a variabili condivise o in generale comportamenti non deterministici).

Ogni processo ha il proprio contesto ed è pensato per eseguire codice sequenzialmente; l'astrazione dei thread vuole consentire di eseguire procedure concorrentemente. Ciascuna procedura eseguita in parallelo sarà un thread. Un thread è quindi un singolo flusso di istruzioni, con le strutture dati necessarie per realizzare il proprio flusso di controllo. Una procedura che lavora in parallelo con le altre.

**Stati di un thread:** Gli stati di un thread possono essere:

- **Newly generated:** il thread è stato generato e non ha ancora eseguito operazioni
- **Executable:** il thread è pronto per l'esecuzione, ma al momento non è assegnato a nessuna unità di calcolo
- **Running:** il thread è in esecuzione
- **Waiting:** il thread è in attesa di un evento esterno (es. I/O) quindi non può andare in esecuzione fino a che l'evento non si verifica
- **Finished:** il thread ha terminato tutte le operazioni



## 2.3 Thread in CUDA

Pensare in parallelo significa avere chiaro quali feature la GPU espone al programmatore

- Conoscere l'architettura della GPU per scalare su migliaia di thread come fosse uno
- gestione basso livello cache permette di sfruttare principio di località
- Conoscere lo scheduling di blocchi di thread e la gerarchia di thread e di memoria (ridurre latenze)
- Fare impiego diretto della shared memory (riduce latenze come le cache)
- Gestire direttamente le sincronizzazioni (barriere tra thread)

Si scrive codice in CUDA C (estensione di C) per l'esecuzione sequenziale e lo si estende a migliaia di thread (permette di pensare “ancora” in sequenziale).

L'host ha una serie di processi in esecuzione e controlla tutto, lancio delle funzioni kernel sul device compreso. Con “kernel” si intende programma sequenziale eseguito dalla GPU.

Ogni kernel è asincrono, la CPU lancia il kernel e passa a dopo, almeno finché non è necessaria la sincronizzazione, come ad esempio per i trasferimenti tra memorie.

Il compilatore `nvcc` genera codice eseguibile per host e device (fat-binary).

Esempio di **processing flow**:

- Copiare dati da CPU a GPU, tutto parte dalla CPU
- Caricare il programma GPU, con tutto il setup necessario, svolto da parte della GPU
- Al termine della computazione i risultati vengono copiati da GPU a CPU

La “ricetta” base per cucinare in CUDA:

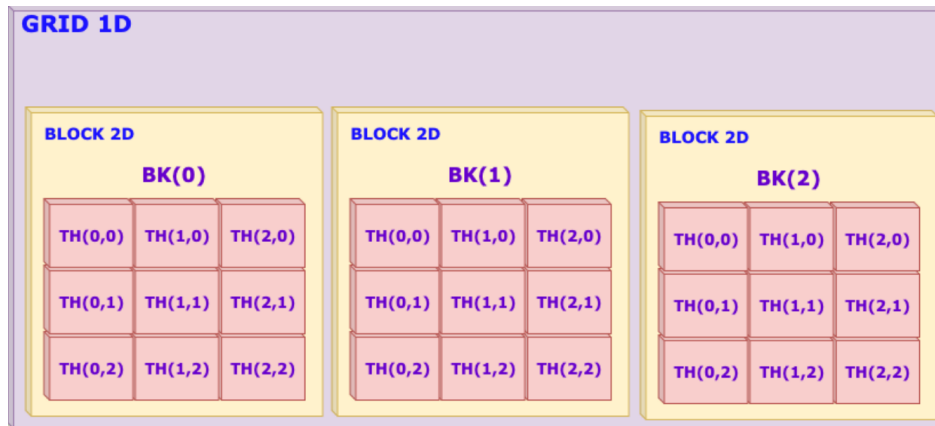
1. Setup dei dati su host (CPU-accessible memory)
2. Alloca memoria per i dati sulla GPU
3. Copia i dati da host a GPU
4. Alloca memoria per output su host
5. Alloca memoria per output su GPU
6. Lancia il kernel su GPU
7. Copia output da GPU a host
8. Libera le memorie

### 2.3.1 Organizzazione dei thread

CUDA presenta una **gerarchia astratta di thread** strutturata su **due livelli** che si decompone in

- grid: una griglia ordinata di blocchi
- block: una collezione ordinata di thread

Grid e block possono essere 1D, 2D o 3D. 9 combinazioni ma di solito si usa la stessa per grid e block. La scelta delle dimensioni è da definire a seconda della struttura dei dati in uso.



Tutti i blocchi devono essere uguali, in struttura e numero di thread. La griglia replica blocchi tutti uguali, ogni blocco ha thread uguali.

In qualsiasi caso, in **ogni blocco** ci possono essere **al più 1024 thread**; esempi di dimensioni:  $(1024, 1, 1)$  o  $(32, 16, 2)$ , il totale non può superare 1024.

**Thread block:** Un blocco di thread è un gruppo di thread che possono cooperare tra loro mediante:

- Block-local synchronization
- Block-local shared memory

La memoria più veloce è condivisa solo dallo stesso blocco, quindi da CUDA 9.0 e CC 3.0+ thread di differenti blocchi possono cooperare come Cooperative Groups.

Tutti i thread in una grid condividono lo stesso spazio di global memory. Una grid rappresenta un processo, ogni processo lanciato dall'host ha una sua grid associata.

I thread vengono identificati univocamente dalle coordinate:

- `blockId` (indice del blocco nella grid)
- `threadId` (indice di thread nel blocco)

Sono variabili built-in, ognuna delle quali con 3 campi: `x, y, z`.

Dimensioni di blocchi e thread: le dimensioni di grid e block sono specificate dalle variabili built-in:

- `blockDim` (dimensione di blocco, misurata in thread)
- `gridDim` (dimensione della griglia, misurata in blocchi)

Sono di tipo `dim3`, un vettore di interi basato su `uint3`. I campi sono sempre `x, y, z`. Ogni componente non specificata è inizializzata a 1.

**Linearizzare gli indici:** Ovviamente gli indici in blocchi a più dimensioni si possono linearizzare: con due indici  $x, y$  posso unificarli facendo  $x + y \cdot D_x$ , dove  $D_x$  è la dimensione della riga.

Possiamo tradurlo in un indice unico per i thread: per griglie e blocchi a 1D ciascuno:

$$\text{IDth} = \text{blockIdx.x} * \text{blockDim.x} + \text{threadIdx.x}$$

Si può scalare a più dimensioni.

**Lanciare un kernel:** Per lanciare un kernel CUDA si aggiungono tra triple parentesi angolari le dimensioni di grid e block.

```
kernel_name <<<grid, block>>>(argument list);
```

**Runtime API:** Alcune funzioni:

- `cudaDeviceReset()` distrugge tutte le risorse associate al device per il processo corrente, non molto usato ma si può fare
- `cudaDeviceSynchronize()` aspetta che la GPU termini l'esecuzione di tutti i task lanciati fino a quel punto, sincronizzazione host device

Per effettuare debugging, la **Synchronize** permette di “scaricare” tutti i `printf` quando servono. Altrimenti, dato che le chiamate sono asincrone, si rischia che l'applicazione lato CPU termini prima che i `printf` abbiano avuto modo di essere mostrati.

Un altro mezzo di debugging è `Kernel<<<1,1>>>`: forza l'esecuzione su un solo blocco e thread, emulando comportamento sequenziale sul singolo dato.

Proprietà dei kernel:

QUALIFICATORI	ESECUZIONE	CHIAMATA
<code>--global--</code>	Eseguito dal device	Dall'host e dalla compute cap. 3 anche dal device
<code>--device--</code>	Eseguito dal device	Solo dal device
<code>--host--</code>	Eseguito dall'host	Solo dall'host

**Restrizioni del kernel:**

- Accede alla sola memoria device
- Deve restituire un tipo `void`

- Non supporta il numero variabile di argomenti
- Non supporta variabili statiche
- Non supporta puntatori a funzioni
- Esibisce un comportamento asincrono rispetto all'host

**Gestione degli errori:** Si ha un `enum cudaError_t` come valore di ritorno di ogni chiamata `cuda`. Può essere `success` o `cudaErrorMemoryAllocation`. Si può usare `cudaError_t cudaGetLastError(void)` per ottenere il codice dell'ultimo errore.

## 2.4 Warp

Ogni thread vede:

- i suoi **registri privati**
- la **memoria condivisa** del blocco di thread

Single Instruction Multiple Thread; l'architettura è basata sul **warp**, (tradotto in “trama” nella tessitura), l'idea è che ci sono delle file di thread (warp), collegate assieme dall'ordito. Rappresenta i blocchi di thread, sono blocchi da 32. Ogni Streaming Multiprocessor SM esegue i thread in gruppi di 32, chiamati warp. Idealmente, tutti i thread in un warp eseguono la stessa cosa in parallelo allo stesso tempo (SIMD all'interno del warp).

Ogni thread ha il suo program counter e register state e può seguire cammini distinti di esecuzione delle istruzioni (parallelismo a livello thread, da Volta in poi, prima c'era un PC solo per ogni warp).

Il valore 32 è l'unità minima di esecuzione che permette grande efficienza nell'uso della GPU, concettualmente i blocchi di 32 dovrebbero avere modello SIMD, anche se nella pratica è SIMT (più flessibile ma potenzialmente meno efficiente). Dove si può si deve **evitare la divergenza di esecuzione** all'interno del warp. I **blocchi** vengono **divisi in warp**, quindi è meglio avere blocchi con thread multipli di 32, per evitare divergenza.

I blocchi di thread possono essere configurati logicamente in 1,2 o 3 dimensioni, ma a livello hardware sarà una sola dimensione con id progressivo, con un warp ogni 32 thread.

Sarà quindi necessario uno scheduling per i warp (il numero di blocchi richiesto è maggiore, chi va prima in esecuzione?) all'interno dei blocchi, vengono mandati in esecuzione quando sono liberi. Ad ogni colpo di clock lo scheduler dei warp decide quale mandare in esecuzione tra quelli che

- non sono in attesa di dati dalla device memory (alta latenza, memory latency)
- non stanno completando un'istruzione precedente (pipeline delay)

Questi dettagli sono trasparenti al programmatore, serve solo a garantire un

elevato numero di warp in esecuzione; vogliamo massimizzare l'occupancy (percentuale di risorse usate in ogni SM) .

Se all'interno di un warp dei thread devono eseguire istruzioni diverse (e.g., per un `if`), la GPU le eseguirà sequenzialmente al posto che in parallelo, disabilitando i thread inattivi. Questa è una **divergenza** e riduce l'efficienza, a volte anche significativamente.

Ogni warp ha un contesto di esecuzione (runtime), trasparente al programmatore, che consta di:

- Program counters
- Registri a 32-bit ripartiti tra thread
- Shared memory ripartita tra blocchi

Di conseguenza, la memoria locale ad ogni thread è limitata, bisogna prestare attenzione alle risorse richieste simultaneamente per ogni thread, altrimenti il numero di thread che possono essere attivi in maniera concorrente si riduce.

I registri sono usati per le variabili locali automatiche scalari (che non sono array quindi) e le coordinate dei thread. I dati nei registri sono privati ai thread (scope) e ogni multiprocessor ha un insieme di 32-bit register che sono partizionati tra i warp.

Il numero di blocchi e warp che possono essere elaborati insieme su un SM per un dato kernel dipende

- dalla quantità di registri e di shared memory usata dal kernel
- dalla quantità di registri e shared memory resi disponibili dallo SM

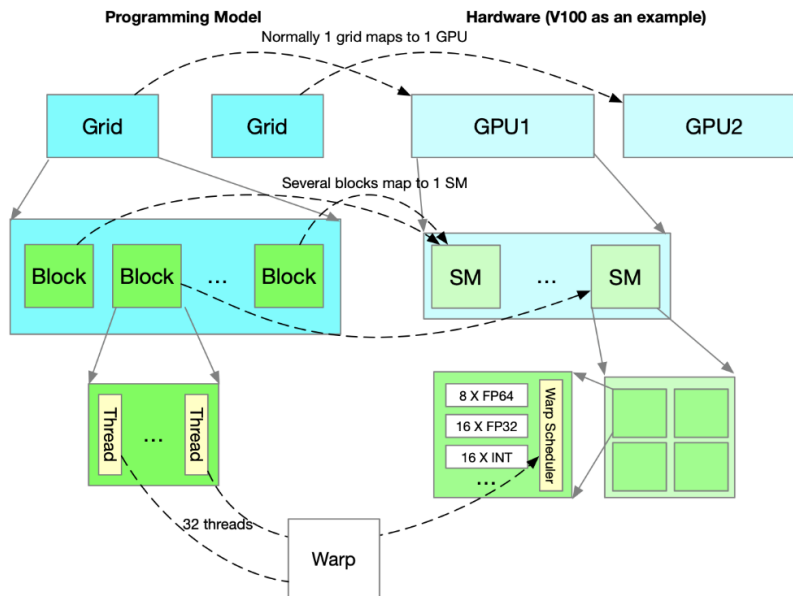
Ogni architettura ha i suoi vincoli e noi vogliamo avvicinarci il più possibile ai limiti massimi, in modo da rendere il più efficiente possibile il programma. C'è un numero massimo di thread/blocchi/warp per multiprocessor, vogliamo fare in modo di avere l'utilizzo maggiore possibile.

**Latency Hiding:** La “latenza” è il numero di cicli necessari al completamento di un’istruzione. Per massimizzare il throughput occorre che lo scheduler abbia sempre warp eleggibili ad ogni ciclo di clock. Si ha così latency hiding intercambiando la computazione tra warp.

Tipi di istruzioni che inducono latenza:

- Istruzioni aritmetiche: tempo necessario per la terminazione dell’operazione (add, mult, ...); 10-20 cicli di clock
- Istruzioni di memoria: tempo necessario al dato per giungere a destinazione (load, store); 400-800 cicli di clock

La griglia viene suddivisa in blocchi, il blocco in thread, i blocchi vanno all’SM.





**Sincronizzazione a più livelli:** Le prestazioni decrescono con l'aumentare della divergenza nei warp. Primitive di sincronizzazione sono necessarie per evitare race conditions in cui diversi thread accedono simultaneamente alla stessa locazione di memoria. Si possono avere più livelli di sincronizzazione:

- **System-level:** attesa che venga completato un dato task su entrambi host e device

```
cudaError_t cudaDeviceSynchronize(void);
```

Blocca l'applicazione host finché tutte le operazioni CUDA non sono completate;

- **Block-level:** attesa che tutti i thread in un blocco raggiungano lo stesso punto di esecuzione

```
__device__ void __syncthreads(void);
```

Sincronizza i thread all'interno di un blocco: attende fino a che tutti raggiungono il punto di sincronizzazione

- **Warp-level:** attesa che tutti i thread in un warp raggiungano lo stesso punto di esecuzione

```
__device__ void __syncwarp(mask);
```

Sincronizza i thread all'interno di un warp: attende fino a che tutti raggiungono il punto di sincronizzazione (riconverge)

La sincronizzazione a livello di blocco va usata con attenzione, può anche portare a deadlock, un esempio semplice può essere una sincronizzazione dentro un **if-else**, potrebbero esserci thread che non entreranno mai nel ramo con la sincronizzazione, deadlock.

Il compilatore ha tecniche di ottimizzazione per evitare divergenza all'interno del warp (es: per un if calcola entrambi i branch).