



华东师范大学
East China Normal University

本科生毕业论文

NVIDIA 新架构 GPU 为机器学习应用带来的性能提升的研究与评估

**Research on performance of ML
apps using NVIDIA new GPUs**

姓 名: 刘子汉

学 号: 10152130243

学 院: 计算机科学与软件工程学院

专 业: 计算机科学与技术

指导教师: 钱莹

职 称: 副教授

2019 年 5 月

目 录

摘要	I
Abstract	II
第一章 引言	1
1.1 研究背景	1
1.2 相关研究	2
1.3 我们的工作	4
1.4 本文的组织结构	5
第二章 背景及相关工作	6
2.1 NVIDIA GPU 硬件	6
2.1.1 GPU 芯片总体结构	6
2.1.2 线程组织形式与调度方式	8
2.1.3 伏特/图灵架构新硬件	11
2.2 NVIDIA GPU 相关软件	13
2.2.1 机器学习框架 (Tensor Flow)	13
2.2.2 CUDA	13
2.2.3 硬件代码 (SASS) 与中间代码 (PTX)	14
2.3 神经网络推理工具 TensorRT 与相应硬件平台 Jetson	15
2.4 性能评估 (Profiling) 工具	17
2.5 基于 GPU 的机器学习应用	17
第三章 评估 NVIDIA 新架构 GPU 的机器学习应用性能	19
3.1 实验工具与环境	19
3.2 基于性能评估的 Benchmark	20
3.2.1 通用矩阵乘法运算 (GEMM, General Matrix Multiply)	20
3.2.2 矩阵乘法运算	31
3.2.3 卷积运算	32
3.3 基于 CUDA 源码的应用	37
3.3.1 基于 cuDNN 的卷积神经网络 (CNN)	37
3.3.2 并行最小序列优化支持向量机 (SMO-SVM)	46
3.4 基于 TensorRT 的神经网络推理	52

3.5 基于 Tensor Flow-GPU 框架的应用	54
第四章 总结与展望	58
4.1 总结	58
4.2 展望	60
参考文献	61
致谢	64

摘要

在 2017 年第二季度, NVIDIA 发布了基于新架构(伏特架构)的 Tesla V100, 并在 2018 年将之加以改进、调整, 将新架构应用于消费级 GPU。在新架构中加入了张量核心、改进了调度与分支方式。然而新架构 GPU 在实际机器学习应用中很难达到 NVIDIA 官方宣传的性能提升幅度。故本文将从应用类型、源代码特征结合硬件、指令特征对这一差异进行研究, 并给出相关建议。

目前基于 GPU 加速的机器学习应用迅速发展, 无论传统机器学习应用或是深度学习应用, 都通过 GPU 极大加快了训练、推理、部署等过程。本文将借助目前在模式识别、计算机视觉领域广泛应用的卷积神经网络 (CNN), 以及经典的传统机器学习算法支持向量机 (SVM), 考察新架构 GPU 在实际应用中所能带来的性能提升的情况。

首先, 实验从底层基于性能评估的 Benchmark 出发, 考察矩阵乘加、乘法, 卷积运算的性能, 并从指令、硬件机制等方面进行分析, 作为基准。随后借助基于 CUDA C++ 源码的卷积神经网络和最小序列优化支持向量机, 考察若干模块整合后应用的总体性能, 从调用、运行情况对结果进行分析, 并从稀疏矩阵、纹理内存等方面尝试优化。最后, 结合既得结论, 对基于 Tensor Flow-GPU 框架的卷积神经网络进行评估, 并在 Python 源码层面、框架底层 C++ 源码层面从卷积方式、纹理内存、超参数、数据精度等方面进行优化。除神经网络的训练外, 实验还对推理过程进行评估, 并使用 TensorRT 以及相应硬件 Jetson 进行加速。

文章的最后, 根据实验结果对指令集、同步机制的下一步发展做出合理的展望。

关键词: 张量核心, 纹理内存, 通用矩阵乘法, 图灵架构

Abstract

In 2017Q2, NVIDIA released Tesla V100 based on new architecture (Volta Architecture). The architecture is adjusted and revised in 2018 and applied to consumer grade GPU. The Tensor Core has been added to the new architecture, and scheduling and branching have been improved. However, the new architecture GPU is difficult to achieve the performance improvement of NVIDIA official promotion in practical applications. Therefore, this paper will study the difference from the application type, source code features combined with hardware and instruction features, and give relevant suggestions.

Currently, GPU-accelerated machine learning applications are rapidly developing. The GPU greatly accelerates the process of training, inferencing and depploying of both traditional machine learning applications and deep learning applications. This paper will use the convolutional neural network (CNN), which is widely used in computer vision and pattern recognition, and the classic traditional machine learning algorithm supporting vector machine (SVM) to investigate the performance improvement of new architecture GPU in practical applications.

First, the experiment starts with Benchmark oriented to performance evaluation, the performance of GEMM, matrix multiply and convolution are investigated and analyzed in instructions, hardware functionality, etc. With the result of Benchmark, the experiment uses CNN and SMO-SVM based on CUDA C++ to investigate the performance of several modules integrating to a whole application, analyze them from function call, context switch, etc. and try to optimize the applications using sparse matrix, texture memory, etc. At the end of the experiment, combining the results of Benchmark and CUDA C++, a simple CNN based on Tensor Flow-GPU is investigated and optimized in Texture memory, methods to calculate convolution, meta-parameter, precision, etc. In addition to the training stage of neural networks, inference stage is also investigated and optimized with TensorRT and corresponding hardware Jetson.

Finally, several reasonable assumptions and imaginations about next-generation hardware are made based on the result in the experiment.

Keywords: Tensor Core, Texture Memory, GEMM, Turing Architecture

第一章 引言

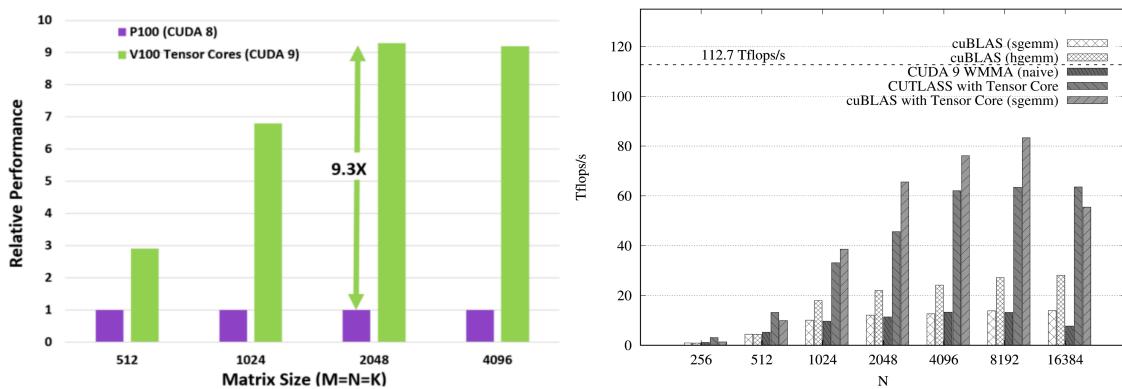
1.1 研究背景

近年来，人工智能在全球无论是否是计算机相关行业中，都掀起了一股热潮，尤其是深度学习更是赚足了眼球。而 GPU 现代机器学习应用中计算能力的支撑，在训练、推理、部署等过程中都极大提升了机器学习应用的性能，可以说正是并行高性能计算硬件的发展支撑了深度学习的发展，而英伟达 (NVIDIA) 更是在并行硬件领域独占鳌头。

在 2017 年第三季度，英伟达发布了一款基于伏特架构 (Volta) 的面向深度学习的 GPU，Tesla V100^[1]，其中搭载了一些实验性的新技术；之后在 2018 年第三季度，英伟达发布了新一代图灵架构 (Turing)，在该架构中，正式引入了许多革命性的新技术，同时也对原有技术做了很大的改进。有面向深度神经网络应用的张量核心 (Tensor Core)^[2]，能够大幅加速在神经网络训练、推理中的混合精度矩阵计算，该核心最先实验性地搭载于 Tesla V100，在图灵架构中上至面向深度学习推理的 Tesla T4，下至面向游戏玩家的 RTX 2080TI 都搭载了这款核心；用于更高效搭建分布式计算平台的第二代端对端互联总线 (NV Link 2.0)^[3]，相对于原有的 QPI 等总线，该总线能够直接互连 GPU，且提供远高于原先 SLI 技术所能提供的带宽；以及 GPU 中计算单元、调度单元、纹理单元等的优化。此外，新架构还针对游戏玩家推出了如实时光线追踪 (RTX)、基于深度学习的抗锯齿技术 (DLSS) 等。

在并行软件方面，与硬件一起，英伟达将其面向并行程序开发的 SDK CUDA 的版本更新到了 10.0，在游戏应用、通用计算方面针对新架构的特性进行了优化；同时发布了基于 CUDA 10.0 的面向线性代数计算的模板库 CUTLASS(CUDA Template Linear Algebra Subroutines)^[4] 以利用其张量核心进行高效的代数运算。

然而，官方文档给出的性能提升仅仅包括单一模块的理论性能提升，如传统 CUDA 核心的浮点数值计算的理论峰值，新加入的张量核心的混合矩阵计算 (GEMM) 的理论峰值，NV Link 2.0 的理论峰值带宽等。在实际使用中，用户反映在网络推理方面以及基于支持新硬件的相关框架开发的机器学习应用中，提升并没有官方白皮书给出的的 9 倍之多^[5]，且同类型不同规模应用的性能提升幅度并不一致，性能提升对神经网络中参数数量、网络层数等因素较为敏感，图 1-1 为官方白皮书给出的性能提升与实际由 Stefano 等人评估所得的性能提升的比较，两者存在较大的差距。实际上，官方给出的文档中的提升也仅为绝对计算性能的提升，没有考虑应用类型、平台构建等条件。目前关于新架构 GPU 的研究主要集中在大型计算节点的扩展效率^[6]，基于 GPGPU-SIM 模拟的性能考

图 1-1 官方白皮书给出的性能提升与实际测得性能提升^{[5][8]}Figure 1-1 Performance improvement in GEMM given by the official white paper and practical application^{[5][8]}

察等^[7]，这些研究或是停留在表征性能层面、没有深入到代码或是中间代码层面；或是使用模拟技术、在 PC 机上进行模拟，尽管目前对于硬件的模拟运行的匹配度能够达到较高的水准，但由于版本老旧，仍有一定偏差，目前 GPGPU-SIM 的稳定版支持的最高的 CUDA SDK 版本为 4.0，开发版本支持的最高的 CUDA SDK 版本为 9.2。本文将直接针对真实的，单一的，图灵架构的 GPU：RTX 2080TI 进行深入，结合 CUDA SDK 10.0 以及对应的软件库包含 CUTLASS，CUBLAS 等，从架构、PTX 中间代码层面、SASS 机器码层面对 GPU 在使用 GPU 加速的机器学习应用中的性能以及性能提升进行研究和评估；根据研究和评估结果以及分析得到的原因对现有 CUDA 代码、基于框架的应用源码进行优化。同时根据实验结果提出合理地假设与展望。

在最近刚结束的 GTC 2019 会议中，NVIDIA 发布了若干面向机器学习的硬件、软件。包括专为张量计算设计的 Turing Tensor Core GPU，嵌入式平台的 Jetson Nano^[9]，将机器学习相关计算库整合的 CUDA X^[10]，这些都将在后文提到，但由于这些本质上都基于目前的 Turing 架构，故不会单独进行详细地说明。

1.2 相关研究

本文的研究同时涉及硬件和软件：NVIDIA 新架构的 GPU 与使用 GPU 加速计算的机器学习应用，注意这里的机器学习应用并不只是现在大行其道的深度学习，还包括传统的基于概率模型的方法等。

在近年来深度学习迅猛发展之前，关于使用 GPU 并行化机器学习算法的研究就已有很多，甚至可以说正是基于 GPU 的强大并行计算能力，深度学习才能发展如此迅速。早在 2005 年，D. Steinkraus 等人便对在 GPU 上实现机器学习算法进行了研究，当时实现的算法是 OCR，如今 OCR 能够非常快速、方便地通过各种框架、语言实现。然而这

一研究奠定了使用 GPU 加速机器学习应用的基础^[11]。之后的几年中，除去 OCR 外，基于 GPU 的各种并行机器学习算法包括 kNN^[12]，支持向量机^[13]都慢慢成熟。由于贝叶斯网络的精确推理是个 NP 难的问题，其性能受限于硬件水平，然而根据 Md Vasimuddin 等人的研究^[14]，通过并行方法将延迟降低了许多。由于传统机器学习方法有着延迟低、模型小、训练时间短、可解释性强等优点，在深度学习迅猛发展的今天，传统机器学习方法仍然占有很大的市场，故评估 GPU 对传统机器学习加速的性能是十分有必要的。本文中在评估传统机器学习的部分便采用了并行的支持向量机算法 (SMO-SVM)，如今，不管是在工业生产领域还是学术研究领域，该算法仍占有一席之地。

之后不久，深度学习、神经网络便迎来了爆炸式的发展。实际上在二十世纪末，便已经有完整的神经网络算法的理论基础；在 1979 年，日本学者福岛邦彦提出了 Neocognition 模型，其中使用多层网络以及神经元对图像特征进行提取和筛选被认为是启发了卷积神经网络的开创性研究^[15]。1989 年，LeCun 首次在论文中提出了“卷积”一次，卷积神经网络因此得名^[16]。在 1993 年，贝尔实验室对 LeCun 的工作进行了代码实现，并大量部署于手写支票识别系统，然而限于当时计算能力低下，基于神经网络的研究也停滞在了理论阶段，其主要原因便是网络中需要训练的参数太多，网络结构复杂，在当时没有芯片能满足如此高的性能要求^[17]。然而，随着高性能 GPU 芯片的出现，基于神经网络的方法正如日中天地发展。从 TinyCNN 等较轻量级、功能单一的库，到 Tensor Flow、PyTorch、Caffe、Chain 等完整、易于使用的框架，这些工具或是本身就是基于 GPU 编写的，或是慢慢更新对 GPU 的支持；目前市面上的绝大部分该类产品均支持使用 GPU 运行，单单使用 CPU 进行深度学习训练已经成为历史。在本文中，卷积神经网络由于它的广泛性、高性能、典型性，在本文中被选为深度学习部分评估的主要载体。

而准确地对 GPU 以及机器学习的性能进行评估也尤为重要。且为了深入研究 GPU 对于机器学习应用的性能提升的幅度以及不同提升幅度的不同原因，单单是对训练时间进行统计、评估是不够的。因本文涉及 NVIDIA 新架构 GPU 中新加入的硬件以及对应 CUDA 中新加入的 API 等，故指令、运行流级别的分析是有必要的。Ali Bakhoda 等人曾设计实现了一种在软件层面对 CUDA 执行流进行指令级别的模拟和仿真的系统 GPGPU-SIM，该系统是基于 Kepler 架构的硬件以及 CUDA 3.0 版本，在缓存命中率、分支、指令乱序执行等方面能达到 90-95% 与真实硬件的吻合程度^[18]。在之后 Mahmoud Khairy 等人对该系统进行了改进，使其支持伏特架构 (Volta) 的 GPU 以及对应的 CUDA 9.0^[19]。然而，目前 GPU 硬件已经更新到图灵架构 (Turing)，基于安培架构 (Ampere) 的硬件也即将发布；对应的 CUDA 版本已经更新到了 10.1，在指令执行、调度方式等方面

都发生了很多的改变；且 Mahmoud Khairy 等人的工作主要着重于 GPU 的内存等方面。故能够准确评估新硬件的系统非常必要。本文中选用了 nvprof、Nsight 等公开的工具，这些工具能从指令运行时间、访存、缓存命中率等方面对 CUDA 应用程序进行评估^[20]。

在新架构的 GPU 中，最为重要的便是新加入的计算单元：张量核心 (Tensor Core)，该运算单元能为深度神经网络中大量存在的张量计算带来明显的提升^[5]，然而这些数据是 NVIDIA 官方白皮书中给出的数据，开发者社区中反映很少有情况能获得如 NVIDIA 官方宣传所能得到的性能提升；而关于 Tensor Core 的研究少之又少，故本文并非旨在填补这方面研究的空白，姑且在新的方向进行一些稚嫩的尝试；且由于在 NVIDIA 进行实习工作，有机会接触到许多内部资料，本文是一个很好的契机。

当然，仅有理论计算性能的研究是无力的，最终本文还是会回归实际，使用实际应用中的模型，如各种结构的神经网络、广泛使用的支持向量机并行库对新架构的 GPU 进行评估。从广为各大厂商使用的深度学习性能评估工具 DeepBench^[21]，到使用 cuDNN 从 C++ 源码实现的卷积神经网络，再使用 Tensor Flow 框架实现的各种结构的网络，包括 LeNet-5^[16]，ResNet^[22]，MobileNet^[23] 等，本文将由下而上对新架构硬件再浮点精度计算、张量计算、卷积计算、矩阵计算等方面进行评估，不求全面，只求能给出启发。

1.3 我们的工作

近年来，深度学习与神经网络发展迅猛，为了应对日益提升的计算量要求，NVIDIA 近年来持续、定期发布新架构 GPU、嵌入式芯片以及对应的革新技术如张量核心、TensorRT、深度学习抗锯齿 (DLSS) 等，且重心逐渐从游戏业务向深度学习业务转移。

同时，为了方便从业者搭建模型，各种框架层出不穷，考虑到计算量要求，这些框架陆续推出了 GPU 版本，对 GPU 硬件操作进行了抽象，然而对于硬件操作、细节的抽象使得框架无法完全利用硬件的性能，以及新硬件的特征，这也导致了理论性能与实际应用中的性能的巨大差距。

为尽可能提升在实际应用场景中硬件性能的利用率，发掘新架构的提升潜力，本文将自底向上结合硬件特征对机器学习应用进行研究与评估，挖掘理论与实际不符的原因并提出适当的或是程序编写方面的，或是硬件架构方面的建议与展望。本文将主要从如下三个层面研究。

- 基于性能评估的 Benchmark，从指令、缓存、上下文切换等角度分析通用矩阵乘法、卷积运算在新架构 GPU 上的性能。

- 基于 CUDA 源码搭建深度学习和传统机器学习应用 (卷积神经网络、支持向量机), 分析较完整、涉及多种运算的应用在新架构 GPU 上的性能, 并从纹理内存、调度方式上尝试优化。
- 基于深度学习框架 Tensor Flow-GPU 搭建完整的卷积神经网络, 分析在贴近实际开发情况下, 新架构 GPU 所能带来的性能提升。除训练过程外, 网络推理过程也在研究范围内。最后, 结合基于 Benchmark, CUDA 源码的实验结果, 从纹理内存、数据精度、超参数等方面对网络训练过程进行优化。并利用 TensorRT 与相应硬件平台 Jetson 对网络推理过程进行优化。

1.4 本文的组织结构

本文在第 2 章中介绍了该研究的背景和相关技术。首先介绍了 NVIDIA GPU 的硬件结构以及底层硬件的机制, 由此引出伏特架构与图灵架构在硬件方面的创新与不同。之后自底向上介绍了 NVIDIA GPU 编程相关的软件。除神经网络训练外, 本次实验还涉及神经网络推理, 故对 NVIDIA 发布的神经网络推理优化工具以及相应硬件平台进行了简要介绍。最后列出了本次实验中使用的性能评估 (Profiling) 工具以及相应特征、应用场合。

本文在第 3 章首先简要介绍实验平台以及相关工具。接着详细介绍了实验过程, 包括多种基于性能测试的 Benchmark(如矩阵乘加、卷积等)、基于 CUDA 源码的机器学习应用 (包括深度学习应用与传统机器学习应用), 除训练过程外, 还对神经网络的推理、部署过程进行了评估和基于 TensorRT 的优化。最后针对完整的深度学习框架 (Tensor Flow-GPU) 的神经网络应用对训练和推理过程进行了评估。这一章中详细说明了实验结果以及相应的分析。在每个实验的最后给出了在程序编写、硬件结构方面的建议、展望。

本文最后在第 4 章进行总结, 并给出之后改进、展望与深入工作的设想、预期。

第二章 背景及相关工作

2.1 NVIDIA GPU 硬件

2.1.1 GPU 芯片总体结构

在介绍新老架构区别之前，本节首先自顶向下简要介绍一下 NVIDIA GPU 芯片的结构。一块 GPU 芯片拥有若干图形处理器簇 (Graphics Processing Cluster, GPC)，由外围总线进行调度管理；一个图形处理器簇上有若干纹理处理器簇 (Texture Processing Cluster, TPC)；需要注意的是以上两种结构在编写 CUDA 程序时并不暴露。一个纹理处理器簇上有若干流多处理器单元 (Stream Multiprocessor, SM)，也是本文关注的重点。流多处理器单元被一个线程块调度器管理，所有流多处理器单元通过全局内存总线经过 L2 缓存共享全局内存。每个流多处理器单元中由若干流处理器 (Stream Processor, SP)，然而这一概念随着流多处理器单元中运算单元种类的增加而被弱化了。在一个流多处理器单元内部的流处理器共享一个指令缓存，每个流处理器拥有自己的线程束调度与寄存器文件；流处理器中包含若干种执行单元，有浮点单元，整数单元，在新架构中还加入了张量单元 (Tensor Core)，在 RTX 2080TI 上具体的参数为：一个 SM 包含 64 个单精度浮点算术单元，32 个双精度浮点算术单元，64 个 32 位整形算术单元，8 个混合精度张量单元，4 个线程束调度器和 16 个特殊功能单元；所有流处理器通过显存纵横矩阵 (CrossBar) 访问共享内存，或被称为 L1 缓存^[24]。

I 流多处理器单元 (SM)

上文提到过，流多处理器单元 (SM) 是本文关注的重点，其原因是每一次 NVIDIA GPU 芯片更新都会伴随着其计算能力 (Compute Capability) 的更新，计算能力指的是流多处理器单元 (SM) 支持的运算的等级，分为 Major 和 Minor。其中 Major 代号代表架构的更新，这也会带来许多新的硬件支持的运算，而 Minor 代号则代表同一架构下不同定位的流多处理器产品。如伏特架构的计算能力为 7.2，图灵架构的计算能力为 7.5，Major 代号一样就代表这两种架构其实并无太大修改，而 Minor 代号则代表伏特架构中流多处理器的类型是 Heavy，图灵架构中流多处理器的类型是 Lite。Lite 和 Heavy 一般用于区分消费级/工作站级 GPU，分别对应 GeForce 和 Tesla 代号。

流多处理器单元中的不同类型的流处理器对应了不同的流水线，不同流水线的延迟、吞吐量均不同。且有些流水线指令发射是互斥的，即互斥流水线的指令不能同一时间发射，这将在下文介绍新硬件架构时提到，本文中主要关注流多处理器上的计算指令

表 2-1 CUDA 存储系统层级^[26]Table 2-1 CUDA storage system hierarchy^[26]

项目	大小	延迟 (时钟周期)	访问权限
寄存器文件	8KB-64KB/SM	10^0	GPU 端
共享内存 (L1,L2)	16KB-128KB/SM	10^1	GPU 端
常量内存	N/A	N/A	N/A
纹理内存	N/A	N/A	N/A
全局内存	-GB	10^2	CPU 端/GPU 端

流水线 (M-Pipe), 光栅等其他计算涉及的流水线不做介绍。

II 存储模型与管理

随着 GPU 计算性能的增长, 传统的、由硬件全权管理的内存的访问模型由于无法最大程度利用时间/空间局部性逐渐成为限制性能的瓶颈^[25]。NVIDIA GPU 的存储模型与其存储管理系统也是另一个重点。传统 CPU 编程模型中, 寄存器、缓存等资源都是由 CPU 自行管理, 而不开放给程序员。其原因在于 CPU 拥有的寄存器、缓存资源较为紧缺, 为提高指令级并行能力, 需要采用多队列乱序发射与寄存器重命名等技术。相对的, GPU 有较为充足的物理寄存器、缓存资源, 程序员也对这部分资源掌握有一定的控制权^[26]。CUDA 中的存储设备如表2-1 所示。

需要注意的是, 常量内存与纹理内存都是全局内存的一种虚拟地址形式。和常量内存一样, 纹理内存也是一种只读内存; 但是在访存、缓存加载方式上与其余存储系统存在较大差异, 而这种差异会在某些应用中极大提高性能, 在本文的实验中大量利用了纹理内存的特性, 故将在下一节详细介绍纹理内存。

III 纹理内存 (Texture Memory)

分层存储系统中都会采用缓存, 利用程序的空间局部性与时间局部性来加速程序访问、写回数据的速度。在 GPU 中, 纹理内存的缓存加载方式与其余存储系统方式不同。纹理内存加载所访问数据周围一个范围内的数据^[27] 供其余线程访问, 而其余存储系统仍然采用加载所访问数据所在行中别的数据供其余线程访问, 如图2-1 所示, 左侧为线程束中线程访问纹理内存的形式, 右侧为线程束中线程访问其他存储系统的形式。

使用纹理内存的原因是由于 GPU 需要执行大量图形运算, 处理某一像素点时其周围像素点也有很大可能一并处理, 如抗锯齿作业, 采用这种加载一个二维区域内的单元的方式能改善这种情况下的访存性能。而在卷积神经网络中, 卷积核也需要对一个二维区域内的单元进行处理, 故本文中将尝试使用纹理内存优化卷积神经网络中的卷积运

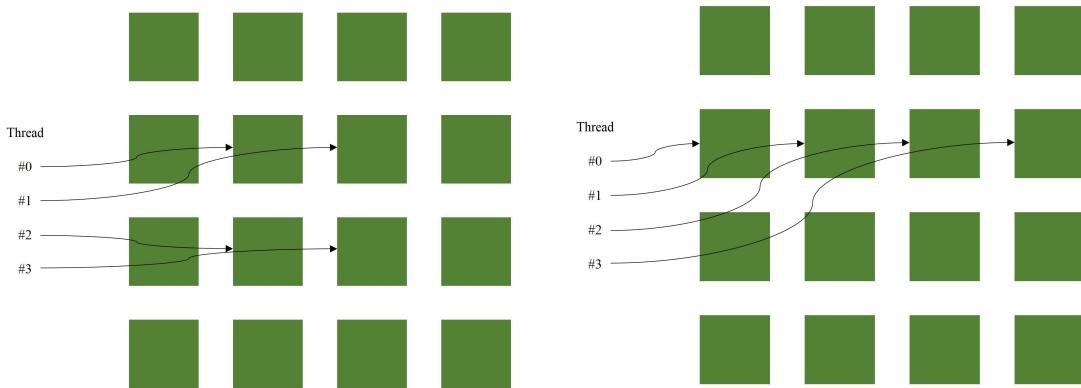


图 2-1 纹理内存和其余存储系统

Figure 2-1 Texture memory and other memory system

算。

2.1.2 线程组织形式与调度方式

I 线程组织形式

本节将介绍 GPU 上任务的调用机制。根据弗林分类法^[28]，计算机系统可以分为 SIMD, MIMD, SISD, MISD 等类型。目前多核心 CPU 系统就是 MIMD 系统，而 NVIDIA 的 GPU 系统被称为 SIMT(Single Instruction Multiple Thread) 即单指令多线程，与 SIMD(Single Instruction Multiple Data) 即单指令多数据不同；在这种模型中，一种指令并非仅仅代表一个固定的功能，而是代表这一指令使用的流水线类别，即指令的类型，线程需要执行的具体操作需要编写相关内核代码。所以，在 SIMT 模型中，内核程序读入统一的数据，程序代码根据需要进行不同操作；实际调度时不同操作通过重复指令流按顺序发射，只不过运算单元会屏蔽无关线程。

在 GPU 程序中，32 个线程被组织为一个线程束 (warp)，作为基本的调度单元，拥有各自的物理寄存器。也就是说线程束中的 32 个线程一般情况下会执行相同的指令流访问不同的数据，即 SIMD 模式。且线程束目前仍然作为同步的最小粒度，即线程束和线程束可以保证同步，而线程束内部的线程无法保证同步。在下一代安培架构 (Ampere) 中则将引入 *Arrive – Wait* 模式以实现线程级同步，以提高 GPU 程序的灵活性。

若干个线程束被组织为一个线程块 (block)，线程块之间通过共享内存进行数据交换，线程块中的线程束可以通过 `_syncthread()` 进行同步。在下一代架构中将添加线程束组的层级 (warp group)，由四个线程束组成，然而该层级仅为大规模通用矩阵乘法指令所用，这里不做讨论。

表 2-2 线程组织形式^[29]Table 2-2 Type of organizing threads^[29]

粒度	调度者	分配给
warp	线程束调度器	流处理器 (Stream Processor)
block(CTA)	TPC 调度器 (MPC, M-Pipe Controller)	流多处理器 (Stream Multi-processor)
grid	GPC 调度器 (GPM, Graphics Pipe Manager)	TPC(Texture Processing Cluster)*
kernel	CPU, PCIe	GPC(Graphics Processing Cluster)

* 在本世代图灵架构及以前, TPC 与 SM 可以等价, 因为一个 TPC 上仅包含一个 SM, 然而自下一代安培架构开始, 一个 TPC 中将会有若干个 SM。虽然本文研究的图灵架构的硬件在逻辑上 SM 与 TPC 等价, 但在硬件上还是会做区分, 故在表中详细写出。

表 2-3 可分配线程数与占用率的关系

Table 2-3 Available thread number and corresponding occupancy rate

	1.0	1.2	2.0	2.1	3.0
64	67%, 8	50%, 8	33%, 8	33%, 8	50%, 16
96	100%, 8	75%, 8	50%, 8	50%, 8	75%, 12
128	100%, 6	100%, 8	67%, 8	67%, 8	100%, 10
256	100%, 3	100%, 4	100%, 6	100%, 6	100%, 8
512	67%, 1	100%, 2	100%, 2	100%, 3	100%, 4
1024	N/A, N/A	N/A, 1	67%, 1	67%, 1	100%, 2

若干个线程块被组织为一个线程网格 (grid), 线程网格可被看作一个分配给 GPU 的任务, 故线程网格的虚拟内存空间是相互独立的。

表2-2 详细说明了 GPU 中不同粒度的线程的组织形式以及相应调度者。

II 调度方式

以上内容介绍了 GPU 线程的组织形式, 这里将介绍 GPU 线程的调用方式, 在介绍调用方式之前, 需要先明确 GPU 与 CPU 的硬件上的差别, 主要有如下几点。

- GPU 中存在大量的物理寄存器, 达几十几百 KB, 且都能在 1 个时钟周期内访问, 而 CPU 中物理寄存器资源极为有限。故在进行上下文切换时, GPU 只需更改寄存器文件指针来切换, 而 CPU 需要使用堆栈保存上下文。
- CPU 仅仅支持数十个硬件线程, 而 GPU 则支持数千个硬件线程。在 GPU 上开启过少的硬件线程会极大降低硬件使用率, 进而导致性能降低。具体开启线程数量取决于硬件 SM 最大并发线程数、最大并发线程束数和最大并发块数等。表2-3 显示了在不同计算能力上开启不同数量的线程时设备的利用率以及所能开启包含该数量线程的线程块的数量。

可见, 随着计算能力的增长, 一个流多处理器上所能容纳的线程束数量越多。在充分利用寄存器文件和共享内存 (L1 缓存) 的情况下开启线程数越多, 设备利用率

越高。然而过多的线程会导致资源紧缺，在实际使用中应当根据硬件参数，问题规模做出调整。

- 发生分支时，CPU 采用分支预测-预测错误则清空流水线的机制进行，而 GPU 则引入了线程束分化的概念，这一概念将在下文详细介绍。

GPU 程序首先由内核 (kernel) 开始，一个内核代表一个需要在 GPU 上运行的程序，由 CPU 管理、分配给 GPU 上的图形处理簇 (GPC)。一个大任务会被拆分为若干小任务，这些小任务被抽象为线程网格 (grid) 由图形处理簇上的调度器分配给纹理处理簇 (TPC)。在纹理处理簇上的调度器将以线程块 (block) 为单位将线程分配给流多处理器单元 (SM)。最后，具体的运算任务将由流多处理器单元内部的线程束调度器分配给不同流处理器 (SP)。

在调度时，线程束作为最小的调度单元在一般情况下将会运行同一指令流，这一情况在发生分支时会有不同。线程束被分发到分支指令时，若线程束内部线程发生分化 (即一部分执行分支，一部分不执行分支)，则两个分支都会被执行，分支结束时只有执行了正确分支目标的线程会被置为未激活状态，执行了错误分支目标的线程被设置为未激活状态。由于线程束调度器每次只能为一个线程束取到一条指令，这意味着线程束内部发生线程分化时，未激活状态的线程会被阻塞，导致利用率、性能下降。自麦克斯韦架构开始，为了尽可能减小线程束内部线程分化对性能造成的影响，指令是以半个线程束即十六个线程进行分发的。之后，GPU 引入了 CBU 单元 (Convergence Barrier Unit) 以保持通过同一分支的线程被组织在一起的方式尽可能减少分支带来的性能下降^[30]。在实际编程中，GPU 提供非常细致的线程、线程块、线程网格 ID，故根据这些 ID 控制分支使得线程束内部线程分化尽可能减少是可行的^[31]。

最后将介绍 GPU 中的流以及相应的锁页内存的概念。GPU 中的流可以被看做一个 GPU 操作队列，该队列中的操作将会按顺序执行。这一特点使得在实际编写程序的过程中可以通过调整不同操作的顺序，如访存、密集计算、写回等来隐藏数据依赖和控制依赖带来的延迟^[32]，通过异步操作 (ASYNC) 提高任务级并行度。CUDA 流需要在支持设备重叠的 GPU 上运行，设备重叠使得 GPU 能够在执行一个核函数时在设备和主机间进行数据交互。而为了支持流，所有涉及流的内存需要在锁页内存上进行分配。锁页内存正如其字面含义，是分配在显存上、不允许被移动或被换页到磁盘上的设备内存。其好处是允许 GPU 上的 DMA 控制器绕过 CPU 直接请求主机传输数据，在延迟更低的基础上支持设备重叠^[33]。若不使用锁页内存，DMA 控制器在定位内存页面时会造成困难。

本文的部分实验中使用了流这一特性，将在具体实验章节详细介绍。

2.1.3 伏特/图灵架构新硬件

I 伏特/图灵架构流处理器

图2-2展示了伏特/图灵架构 (Volta/Turing) 与帕斯卡架构 (Pascal) 在流多处理器单元层面的异同，左侧为伏特/图灵架构、右侧为帕斯卡架构。

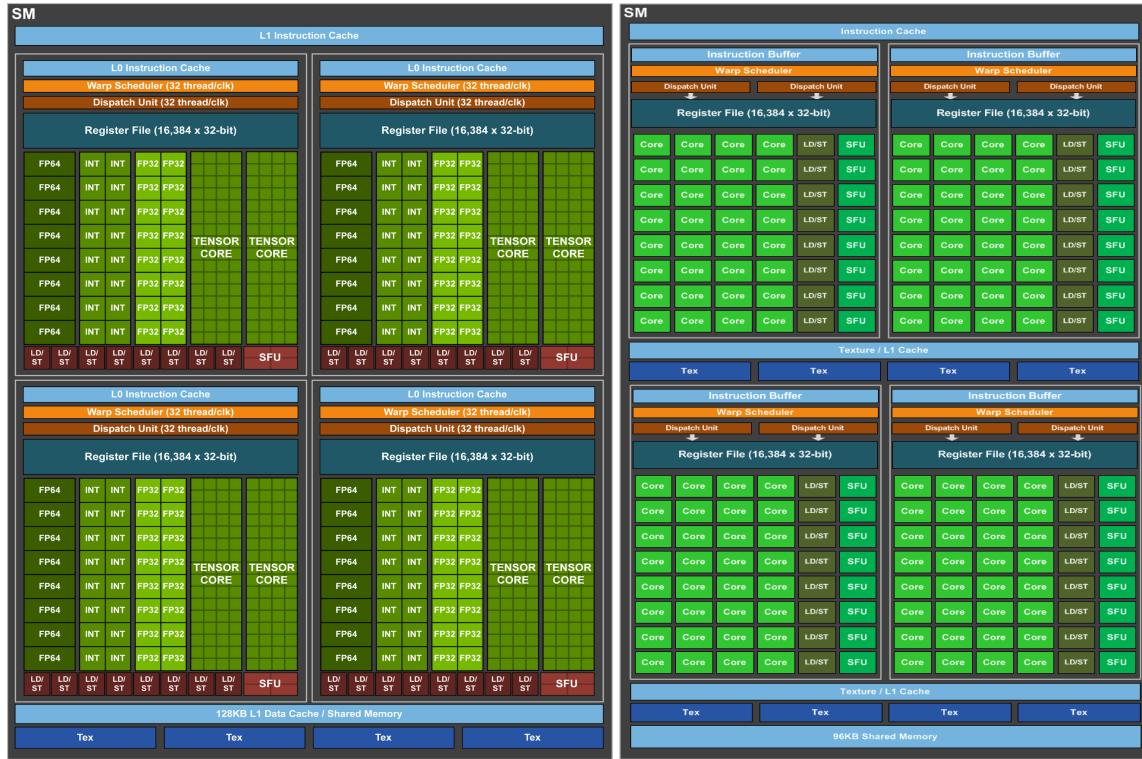
在调度方面，指令缓存、线程束调度器与寄存器并无太大差别，而指令分发器 (Dispatch Unit) 由帕斯卡架构中的每 SM 两个变为每 SM 一个，这是因为在处理分支时，如上文提到的在伏特架构以前为了减少线程束内部线程分化带来的性能下降，指令以十六个线程进行分发，故存在两个指令分发器；而后则采用 CBU 单元处理分支指令，故仅存在一个指令分发器。

在运算单元部分，帕斯卡架构简单的分为计算单元 (Core)、访存单元 (LD/ST, Load/Store) 和特殊功能单元 (SFU, Special Function Unit) 三个部分，其中计算单元统一为单精度浮点计算单元，访存单元负责一组流处理器依赖数据的请求和结果的写回，特殊功能单元则负责逻辑判断、分支等操作。在新架构中，计算单元根据精度被分为双精度浮点计算单元 (FP64)、单精度浮点计算单元 (FP32)、整数计算单元 (INT) 以及最新加入的张量计算单元 (Tensor Core)，也是本文的重点。在访存单元和特殊功能单元方面的变化本文并不做详细讨论。在新架构中，L1 数据缓存的概念也与共享内存的概念统一了。

II 张量核心 (Tensor Core)

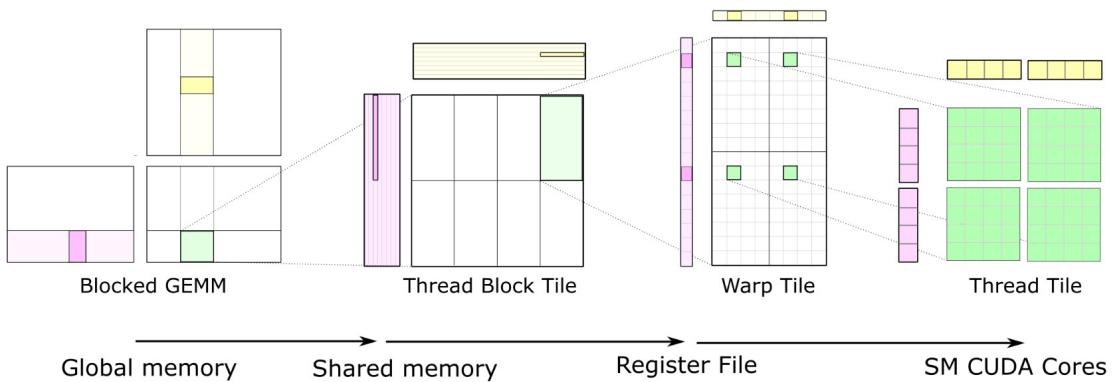
作为本文的重点，张量核心 (Tensor Core) 将在本文详细介绍。张量核心是一种专为通用矩阵乘法运算 (GEMM, GGeneral Matrix Multiple) 设计的运算单元，对该运算进行了硬件、指令级别的优化，是与老架构最鲜明的区别所在。

在底层的实现中，张量核心以 4×4 的矩阵作为最小的计算单元，被称为 *tile*，任何输入都会被划分为 *tile* 进行分块运算，如图2-3 所示^[4]。在伏特架构以前 (Volta) 的帕斯卡架构 (Pascal)，一次 4×4 矩阵乘加需要首先调用 16 次整数点积运算，再将结果累加到乘加矩阵中。而使用张量核心则仅通过一条指令直接完成。根据官方文档给出的描述，这种机制能使伏特架构相比帕斯卡架构再 FP16, INT8, INT4 精度中分别提供 8 倍、16 倍、32 倍的吞吐量提升。实际测试中，Tesla V100 在 FP16 精度下的 $m = 2048, k = 2048, n = 2048$ 规模的矩阵乘加中比 Tesla P100 快 9.3 倍^[5]，这也是上文提到的官方宣称的 9 倍。在基于 Pascal 架构以及之前的架构的 GPU 上，一次 4×4 矩阵乘法需要调用 16 次向量点

图 2-2 伏特架构与帕斯卡架构的流多处理器示意图^{[5][34]}Figure 2-2 SM diagram of Volta and Pascal architecture^{[5][34]}

积加和运算，在有 `idp4a` 指令支持的 GPU 上在 16 个周期内运算出乘积矩阵，若没有指令支持则需要 64 个周期，而运算得出的乘积矩阵还需要累加；而张量则在更少的周期内完成乘积和加和的运算，具体周期数由 `hmma` 指令的操作数决定，对于被分割为 $m = 8, n = 8, k = 4$ 的子矩阵的运算，张量核心仅需要八个周期完成所有乘积和加和运算^[35]。本节将在各种规模、精度、形状的情况下考察张量实际能够带来的性能提升并探究相应原因。

值得注意的是，在流处理器单元中，张量核心是与其他运算单元包括浮点单元、整数单元共用调度器，调度器每个时钟向分支单元、张量核心阵列、数学分派单元或访存单元发出一个线程束调度指令，这就表明一个周期内硬件不能同时执行张量核心负责的混合矩阵运算和其他运算，单一周期只能执行单一类型的运算^[36]。张量核心有一定程度的可编程性，但是 4×4 矩阵仍然是操作的最小单元，在 LLVM IR 的级别观察其指令仍是如此。尽管被描述为最小 4×4 为单元的矩阵的混合运算，但实际上张量核心进行的运算总是使用 16×16 矩阵，并且跨两个 Tensor Core 进行处理^[2]，这与其最小调度单元为线程束，也就是 32 个线程有关。

图 2-3 使用张量核心进行通用矩阵乘法计算的层级^[4]Figure 2-3 Hierarchy of GEMM using Tensor Core^[4]

2.2 NVIDIA GPU 相关软件

本节将自顶向下介绍 NVIDIA GPU 硬件对应的不同层级的编程平台。

2.2.1 机器学习框架 (Tensor Flow)

近年来机器学习尤其是深度学习发展迅猛，各种方便程序员搭建模型的框架层出不穷。考虑到机器学习应用的计算量要求日益攀升，这些框架都陆续推出了基于 GPU 的版本。为方便程序员搭建模型，框架本身对硬件的操作进行了抽象。然而，正是因为这一层抽象，忽略了许多硬件层面的细节，使得框架无法完全利用硬件的性能。这也导致了许多用户反映在实际应用中，新架构的性能提升并没有官方给出的文档数值、硬件参数（包括流处理器、纹理/光栅单元）、甚至价格上涨幅度那么多。本文将挑选目前非常流行的 Tensor Flow 框架作为最上层应用的研究载体，考察如何根据硬件特性对 Tensor Flow 级别的源码以及 Tensor Flow 本身的源码（基于 C/C++）进行优化以达到更快的速度、更高的吞吐量。为达到这一目的，需要对 Tensor Flow 框架从源码重新编译，具体步骤此处不再赘述^[37]。

2.2.2 CUDA

CUDA(Compute Unified Device Architecture) 是由英伟达 (NVIDIA) 针对图形处理单元开发的并行计算平台及对应的编程模型。在编写 CUDA 程序时，程序员通过在一些较为热门的编程语言包括 C/C++、Python、Matlab、Fortran 中以关键字的形式加入扩展来描述并行行为。本文选用 C/C++ 进行 CUDA 的扩展，基础的核函数编写、存储系统调用在相关资料丛书中均有详细介绍^[38]，此处不再说明。

在本文中的实验进行时, CUDA SDK 最新版本为 10.0, 主要在 CUDA SDK 9.2 的基础上对图灵架构进行了支持; 对更多分割尺寸的通用矩阵乘法运算进行了支持^[39]; 以及对多 GPU、不同操作系统、兼容性等方面进行了更好的支持。而 CUDA SDK 9.2 相对于 CUDA SDK 9.0 则更新了对伏特架构以及对应张量核心 (Tensor Core) 的支持, 属于一次较大的更新^[40]。在文章撰写之际, NVIDIA 推出了 CUDA SDK 10.1, 在 CUDA SDK 10.0 的基础上更新了轻量级矩阵乘法库; 更新了对应的构建、测试工具等^[41]。CUDA SDK 10.1 的更新对于本文的实验结果并无决定性的影响, 故本文仍然采用 CUDA SDK 10.0 进行实验。

CUDA 程序经过一系列工具如 nvcc 等被编译为中间代码 (PTX), 再从中间代码编译为能直接运行于目标硬件的硬件代码 (SASS)。

2.2.3 硬件代码 (SASS) 与中间代码 (PTX)

由 CUDA C++ 源码编译生成的中间代码被称为 PTX 代码 (Parallel Thread eXecution)^[42], 是一种并行线程执行虚拟机代码 (IR), 在实际运行时, 该中间代码会被编译为硬件代码 (SASS)。本实验中为了详细观察硬件层面的操作, 将在编译上层应用程序时添加-keep 保留编译时产生的中间文件。同时, 本节将简单介绍中间代码的语法供后文使用。

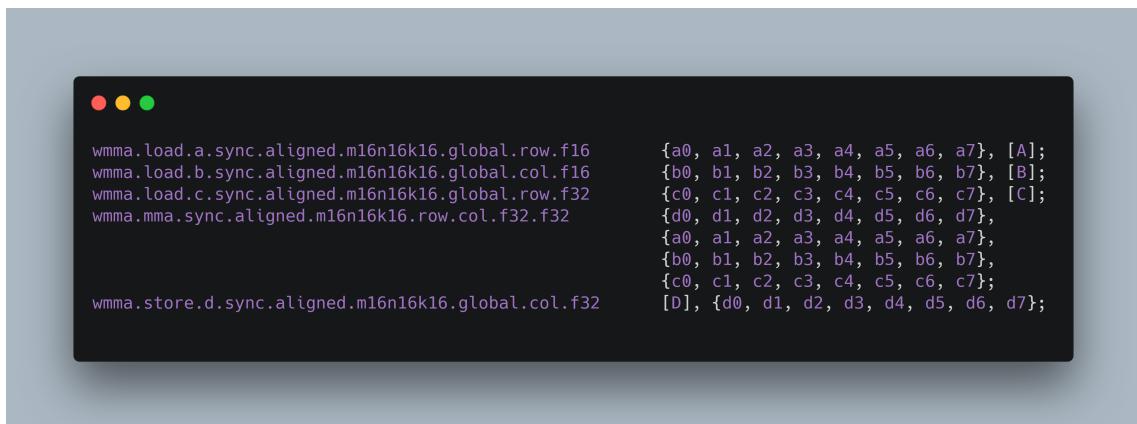
中间代码中由两种语句: Directive Statement 和 Instruction Statement, 前者起到声明作用, 后者则是具体运算动作, 起到声明作用的语句在此不再赘述, 详细考察具体运算动作的指令, 以本文中的重点: 线程束级矩阵乘加指令 (wmma, warp-level matrix multiply Accumulate), 也就是张量核心使用的指令为例, 如图2-4 所示。中间代码主要分三个部分: 指令、具体操作和操作数与传统的 SIMD 模型中的指令、操作数不同, 在 SIMD 模型中, 其“多线程”的特点正是对应了中间代码中的具体操作这一部分。在具体操作这一部分中, 中间代码会指明存/取、是否同步、操作数数据分布 (行/列主元素)、数据精度等项目。图2-5 是一段具体的涉及 wmma 指令的中间代码, 代码中操作数形状、数据类型等将在实验中具体介绍。

硬件代码 (SASS) 与中间代码 (PTX) 类似, 分为指令、具体操作和操作数三个部分, 其区别是硬件代码会开放涉及浮点数存储方式、分支预测操作等底层的、直接对硬件进行的操作, 本文中不再详细介绍, 仅会在涉及张量核心的实验中提到对应中间代码中 wmma 指令的硬件代码中的 hmma 指令。

Instruction	Specified Operations								Operands
	wmma	.load	.ident	.sync	.aligned	.shape	.memory	.row/.col	
		.store						.row/.col	
		.mma						.row/.col	

图 2-4 中间代码 (PTX) 格式示例

Figure 2-4 An example of PTX code



```

wmma.load.a.sync.aligned.m16n16k16.global.row.f16      {a0, a1, a2, a3, a4, a5, a6, a7}, [A];
wmma.load.b.sync.aligned.m16n16k16.global.col.f16     {b0, b1, b2, b3, b4, b5, b6, b7}, [B];
wmma.load.c.sync.aligned.m16n16k16.global.row.f32     {c0, c1, c2, c3, c4, c5, c6, c7}, [C];
wmma.mma.sync.aligned.m16n16k16.row.col.f32.f32       {d0, d1, d2, d3, d4, d5, d6, d7},
                                                       {a0, a1, a2, a3, a4, a5, a6, a7},
                                                       {b0, b1, b2, b3, b4, b5, b6, b7},
                                                       {c0, c1, c2, c3, c4, c5, c6, c7};
wmma.store.d.sync.aligned.m16n16k16.global.col.f32     [D], {d0, d1, d2, d3, d4, d5, d6, d7};

```

图 2-5 一段具体的中间代码 (PTX)

Figure 2-5 Part of actual PTX code

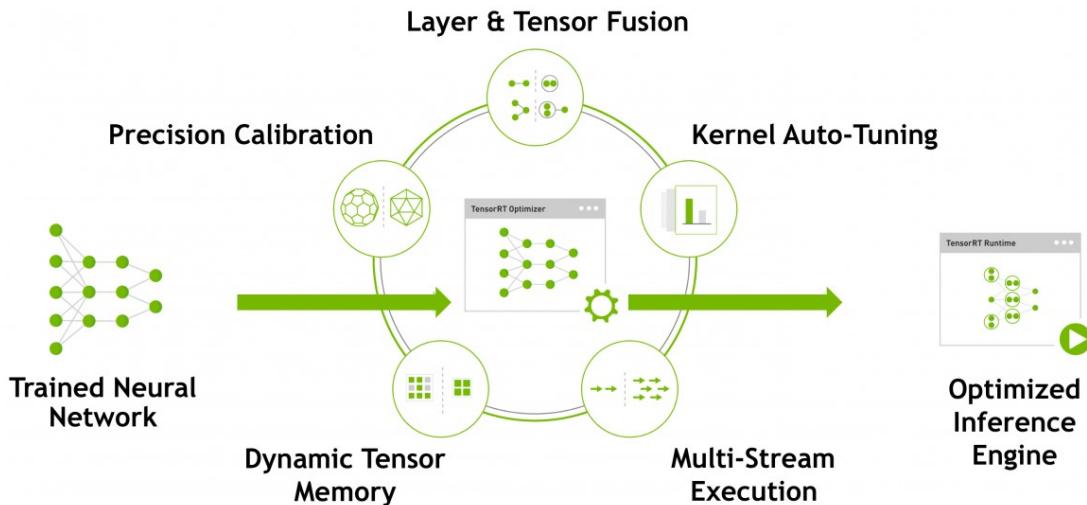
2.3 神经网络推理工具 TensorRT 与相应硬件平台 Jetson

在实际的机器学习应用中，模型的训练只是第一步，在模型完成训练后需要对模型进行部署。当模型构建完毕，实际部署到目标机器、芯片、平台上并发挥作用时，推理就成为了主要工作。与训练的过程和目的不一样，推理首先没有了训练过程中的反向迭代，同时对于吞吐率、延迟、功耗等有着更高的要求；且现有框架在实际部署时因其复杂度高，对部署造成了很大困难，TensorRT 由此而生。

TensorRT 是一个高性能深度学习推理的平台，包含深度学习推理优化器和运行时应用来提供低延迟、高吞吐量的深度学习推理。本节将考察 TensorRT 相对于传统神经网络推理的加速性能^[43]。因 TensorRT 原生支持 Tensor Flow，这就意味着可以直接使用 TensorRT 自带的模型导入器对训练好的模型进行导入，故本文通过这种方法来考察 TensorRT 的实际提升。

在实际使用 TensorRT 之前，将先对 TensorRT 的优化以及部署流程进行介绍。首先需要明确的是，TensorRT 作为一个 GPU Inference Engine(GIE)，它是在项目部署阶段发挥作用的。TensorRT 的部署分为两个部分：优化训练好的模型并生成计算流图和使用 TensorRT Runtime 部署计算流图。其最重要的便是优化过程，如下图2-6 所示^[44]。

优化过程的第一部分，也是较为重要的部分便是网络层和张量的合成，这一过程将

图 2-6 TensorRT 中的模块^[43]Figure 2-6 Modules in TensorRT^[43]

会在不改变底层计算内容的情况下重构计算图来获得更高效的计算方式。DL 框架在进行推理时会执行多个子过程，这些过程都需要 GPU Kernel 来运行，这就不可避免地带来会更多 Kernel Launch，如前文所说，Kernel Launch 所带来的上下文切换仍然是很大的开销。TensorRT 主要从 Kernel 纵向融合（如卷积、偏置、激活层的 Kernel 可以融合为一个 Kernel）；Kernel 横向融合（挖掘输入数据形状相同但权重不同的层，使用一个 Kernel 而非原来的若干个 Kernel 提高效率）和消除 Concatenation 层（通过预分配输出缓存、不同的写入方式来避免转换）。

第二部分，即能鲜明体现新硬件的部分：FP16 和 INT8 精度校准。大部分网络在训练时为了模型准确率，会基于 FP32 精度进行训练，因此最后输出模型也是基于 FP32 精度。然而完成训练也就意味着参数达到最优，在推理过程中由于没有反向传播故采用更低的精度能在不牺牲过多准确率的情况下极大提高网络计算吞吐率。

第三部分，动态分配的张量显存能在使用期间减少显存占用率，增加显存复用率，从而避免过度开销以提高推理性能。

最后便是 Kernel 自动调整和多流执行，TensorRT 会针对输入数据大小，filter 大小，张量数据分布，batch 大小针对目标 GPU 进行选择和优化，这一部分与传统编译器后端处理，即机器相关优化较为相似。同时 TensorRT 也会借助 CUDA 流来提高任务级并行度。

由于神经网络推理工作多存在于门禁、自动驾驶等使用嵌入式芯片的情况下，故本文将采用由 NVIDIA 提供的 Jetson TX2 开发套件进行 TensorRT 部分的实验，NVIDIA 的

Jetson 系列是专为嵌入式机器学习应用设计的芯片^[44]。在 GTC 2019 会议中, NVIDIA 发布了基于最新技术的 Jetson Xavier, 然而由于成本原因, 本文不使用该硬件。

2.4 性能评估 (Profiling) 工具

为了详细地考察硬件底层的运行机理, 实验中采用了若干不同层级的性能评估工具。

- **Nsight:** 该工具用于在后台监听 CUDA 程序的执行流, 结合 Visual Studio 中的工具可以通过可视化的方式直观地观察 CPU/GPU 调用、上下文切换等信息^[20]。
- **nvprof:** 通过该工具分析某一 CUDA 程序, 可以获得程序执行时的分支效率、访存效率、各 API 调用占比等信息^[45]。
- **GPGPU-SIM:** 该工具支持从中间代码 (PTX) 层级对 CUDA 程序的运行进行模拟、仿真, 该工具能够提供缓存是否命中、分支是否执行、指令执行周期数等信息^[18]。与 GPGPU-SIM 搭配的还有 NVIDIA 内部使用的硬件代码 (SASS) 层级的仿真工具 SMart, 该工具能够更为详细地提供指令运行时硬件的各种信息。由于涉及企业机密本文将不详细说明 SMart 工具的细节。

2.5 基于 GPU 的机器学习应用

随着当今机器学习, 尤其是深度学习应用中数据量、网络结构复杂度的增长, 该类应用对于硬件计算能力的要求也迅速增长。而在这类应用中, 有许多密集的计算互相之间是没有数据/控制依赖的, 也就是可以并行执行的; 比如神经网络前向、反向传播中的权重矩阵计算, 这些权重在同一轮计算中不存在耦合性; 随机森林 (Random Forest) 中不同分类器的训练, 这一特征可以利用到 GPU 处理中流这一特征; 一系列聚类算法, 包括 DBSCAN、K-Means 等; 而图形处理单元 (GPU) 的设计初衷正是大规模并行计算, 也因为 GPU 的计算能力, 深度学习自上世纪末至今迅猛发展, 同时 GPU 的运算性能以及相应的软件的发展也非常迅速。目前, GPU 更多代表了通用处理单元 (General Purpose)。

当然, GPU 上的编程模型与 CPU 上的模型有较大差别, 为了方便程序员搭建模型, 目前市面上的许多框架都更新了对 GPU 的支持。然而, 这些框架方便了程序员的程序编写, 抽象了底层硬件的细节, 比如在 CUDA 中, 线程块、线程束的调度以及相应寄存器文件的分配会对程序性能造成极大影响, 然而这些特征都被框架抽象这就导致了硬件性能无法得到完全的发挥。且目前大部分框架都是基于旧的架构和旧 SDK 编译, 没

有对新架构与新 SDK 做出优化。本文的目的也是在于挖掘出新架构的硬件以及对应的新的 SDK 中的代码翻译、指令执行等部分的特征以及相较老架构和老 SDK 的变化；根据分析得出的结论修改已有 GPU 程序的源码，尝试修改选定框架 (Tensor Flow) 的源码，并给出实际的修改、编程时的建议。

第三章 评估 NVIDIA 新架构 GPU 的机器学习应用性能

本章主要自底向上评估使用 GPU 加速的机器学习应用。目前较为流行的开发机器学习应用的方式为使用既存的框架、库搭建应用，通过这种方式，开发人员能够在不必了解硬件机制的情况下快速搭建应用。然而正是由于这些既存的框架、库考虑到开发人员的便利，对许多底层硬件特征进行了封装，为泛用性牺牲了高性能。根据 NVIDIA 官方发布的白皮书，其中有些项目新架构硬件提升达到 9 倍^[5]，然而在开发者社区中反映新硬件实际使用 Tensor Flow-GPU 框架搭建的网络上性能提升并不明显^[46]，本章旨在探索这一原因。而 Tensor Flow-GPU 底层使用了 cuDNN 搭建网络、基于 CUDA C++ 代码，这些代码又基于一系列 CUDA 库如 cuBLAS, cuFFT 以及最新的 GEMM 等，故本章将从底层的基于性能评估的 Benchmark 开始逐渐向上直到 Tensor Flow-GPU 框架评估新硬件对于机器学习应用的性能提升。

3.1 实验工具与环境

表 3-1 和表 3-2 中列出了实验环境与若干软件工具。

表 3-1 实验环境

Table 3-1 Environment

项目	内容
CPU	AMD Ryzen ThreadRipper 2990WX 32C64T @ 3.0GHz
主板	MSI X399
内存	CORSAIR DDR4 3200 @ 16-15-15-34-1T 128GB
GPU	NVIDIA Geforce RTX 2080TI (Turing)
硬盘	INTEL750 NVMe PCIe 1.2TB * 2 @ RAID 0
系统	Windows 10 64-bit build 17763
CUDA	Ver. 10.1, 10.0, 9.2, 9.0
CUTLASS	Ver. 1.2, 1.3
其他	Jetson TX2 *

* 该硬件由 NVIDIA 提供。

表 3-2 实验工具

Table 3-2 Tools

项目	内容
Python 3.6	用于进行数据统计、编写 Tensor Flow 应用
Conda 4.5.12	用于创建、管理、隔离 Python 环境
Tensor Flow	1.12.0 和 1.13.0 版本的源码, 用于对比、研究、调整
Bazel 0.16.0	用于从源码构建 Tensor Flow
Msys2	用于从源码构建 Tensor Flow
CMake 3.1.0	用于构建 CUTLASS
Nsight 6.0	用于后台监听 CUDA 应用, 捕捉 Trace
nvprof	用于分析 CUDA 程序的 API 调用、分支效率等
git	版本控制
Perforce	版本控制
Ubuntu 16.04 Physical	用于执行 GPGPU-SIM 应用
GPGPU-SIM 3.2	用于从指令级别模拟 CUDA 程序
Visual Studio 2017	搭配 10.0.17763.0 版本的 SDK

3.2 基于性能评估的 Benchmark

为了为接下来的实验设定基准, 这一步先使用用途单一的测试样例测试绝对性能以及相应的提升, 因不同架构的硬件各项参数 (包括流处理器数量、显存容量等) 不尽相同, 所以直接对比不同架构硬件的性能是没有意义的, 这里选择对比不同架构硬件在不同 SDK 下性能提升的比例。此处选用了不同版本的 CUDA SDK, 其中 CUDA SDK 9.2 版本是专为伏特架构的 GPU Tesla V100 发布的^[47], 也在本文的研究范围内。

因为本文主要讨论新架构 GPU 在机器学习应用中带来的性能提升, 故选用的评测样例大部分都与机器学习应用相关; 主要从以下角度进行评估: 通用矩阵乘法 (GEMM, General Matrix Multiply)、矩阵乘法运算性能、卷积运算性能、神经网络推理性能以及结合框架的综合性能。在评估这些性能时也会包含单/双精度浮点计算性能。

3.2.1 通用矩阵乘法运算 (GEMM, General Matrix Multiply)

作为新硬件最为鲜明的特点, 本节将对张量核心以及相应的通用矩阵乘法运算进行评估, 通用矩阵乘法运算又被称为混合矩阵运算, 其混合体现在: 运算中同时有加法和乘法, 且精度同时涉及半精度浮点、单精度浮点和 8 位整数。与矩阵乘法相比, 通用矩阵乘法被定义为:

$$C \leftarrow \alpha AB + \beta C$$

若将 β 置为 0, 则该运算变为矩阵乘法运算。通用矩阵乘法这一运算在神经网络训练、推理中十分常见, 根据官方文档, 目前张量核心仅能用在 CNN/RNN 等特定结构的

神经网络上, 且只能用于前馈和反馈两部分。这个范围看起来很窄, 然而在深度学习中占到了非常高的比重。式中操作数分别代表输入、权重和偏置, 下文将简写为矩阵乘加。NVIDIA 在新的伏特架构与图灵架构中加入的张量核心 (Tensor Core) 正是专门加速这种运算的硬件。

I 实验结果

根据开发者社区的反映, 新架构硬件性能的差别主要体现在问题规模、问题类型等方面 (张量维度、形状, 训练/推理任务等), 而 NVIDIA 官方仅给出一种规模的结果, 所以本节使用了自行编写的一系列测试用例, 辅以深度学习测试套件 DeepBench^[21], 在开启和关闭新架构中张量核心的情况下进行测试。实验性能使用 TFlops/s 统计, 方法为简单的运算数除以运算时间, 运算时间的统计采用 CUDA 内置的 cudaEvent 记录。

首先评估的是在不同问题规模下, 开启和关闭新架构中的张量核心所能达到的性能, 如图 3-1 所示。随着问题规模的上升, 总体加速比呈上升趋势, 在大规模数据时半精度矩阵乘加运算性能的加速比能达到 3 到 3.5 倍、单精度矩阵乘加运算性能的加速比能达到 2 倍。然而, 单纯考察数据规模发现加速比差距非常大, 甚至是在大规模数据中仍然存在开启张量核心后性能不如不开启张量核心的情况, 结合文档在矩阵乘加运算一章中在指令中需要指明运算的最小单元这一点中^[42]; 可以推测出输入矩阵的“形状”对张量核心的性能由较大影响。

为了研究输入矩阵“形状”对于加速比的影响, 由于两个输入矩阵涉及三个维度, 故采用控制变量法, 控制 m, n, k 中某一维度考察另外两个维度对于加速比的影响。由于测试数据中存在部分离群值 ($N \geq 500000$), 这会对作图精度产生极大影响, 故先予以剔除。实验结果如图 3-2 所示。可见在两个输入矩阵的三个维度中, 两矩阵共享的维度 K 对于性能的影响最为显著。

关于矩阵的形状、维度对于性能的影响, 其原因将在后文结果分析中详细说明。以上实验数据以及性能旨在考查开启和关闭张量核心时性能提升幅度, 故开启的线程块数量和线程数量较小, 相应的 GPU 占用率也较小, 导致所得性能并非 GPU 峰值性能。为测量峰值性能, 这里还是用 NVIDIA 官方发布的用于线性代数计算的模板库 CUTLASS(CUDA Template Linear Algebra Subroutines), 该模板库根据新架构硬件特性编写, 提供了许多测试样例供参考, 目前版本已经更新到 1.3, 相比于 1.2 使用了新加入 CUDA SDK 10.1 的 mma.sync 以优化性能, 这里使用 CUTLASS 测试得到的性能作为峰值性能基准。

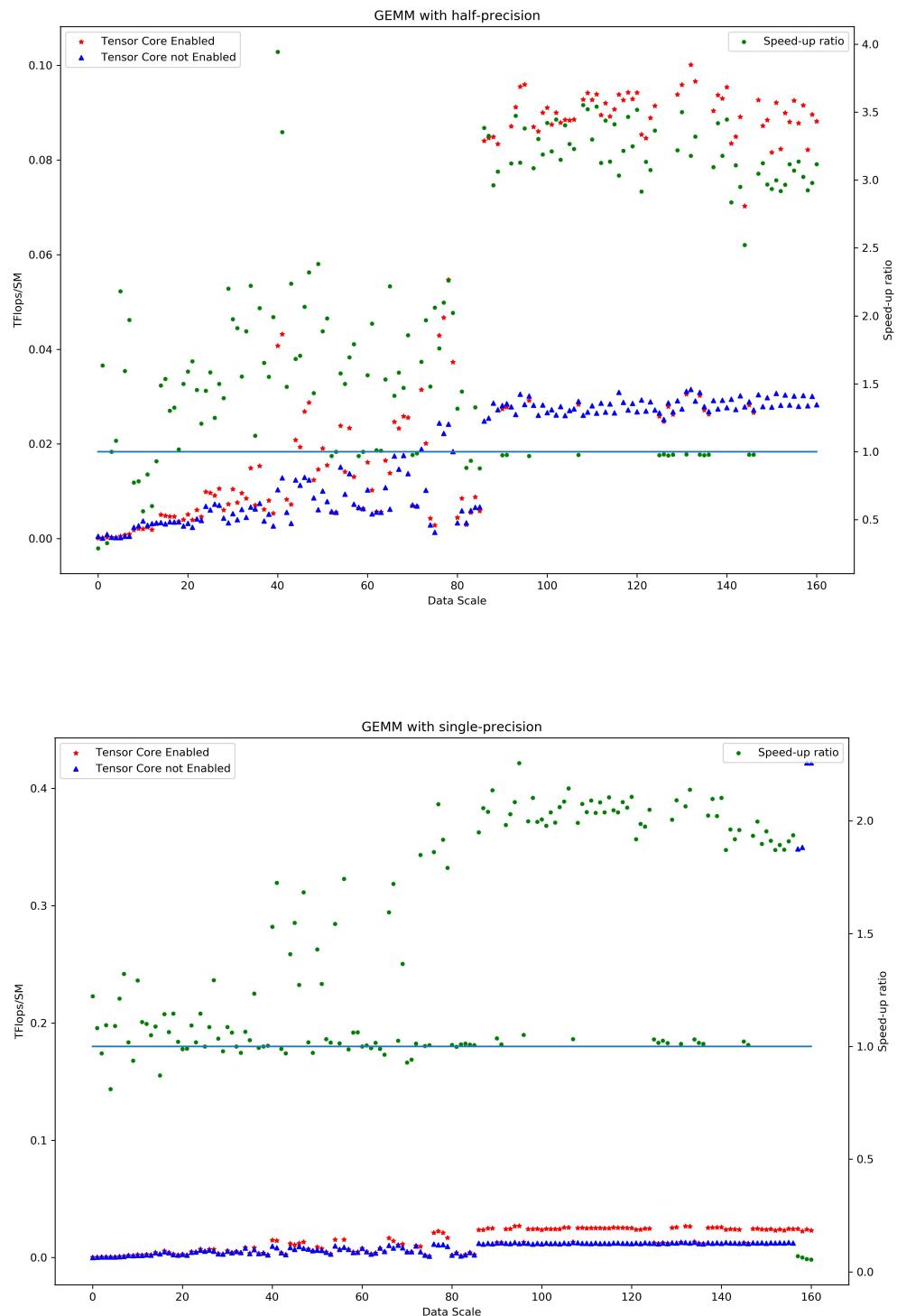


图 3-1 半精度/单精度 GEMM 性能

Figure 3-1 Performance of GEMM at Half and Single

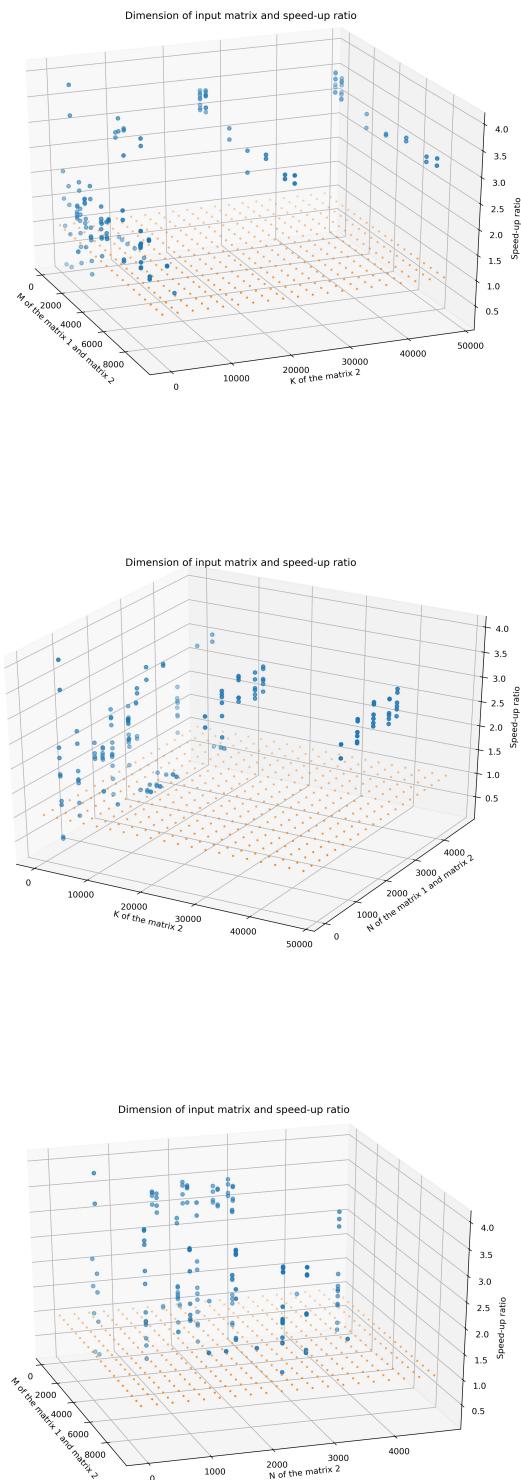


图 3-2 输入矩阵维度与加速比的关系

Figure 3-2 Relationship of input matrix dimension and speed-up ratio

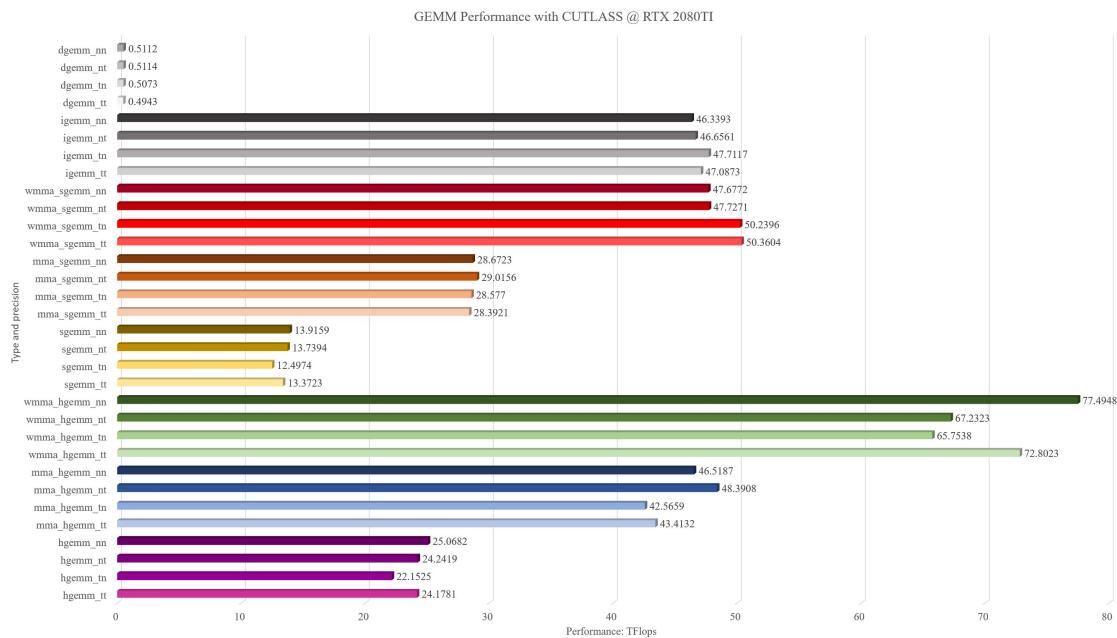


图 3-3 使用模板库测得的 GEMM 性能

Figure 3-3 GEMM Performance with CUTLASS

CUTLASS 库中的 GEMM 运算有多种精度可供选择: HGEMM、SGEMM、DGEMM、CGEMM、ZGEMM 和 IGEMM, 分别代表半精度浮点、单精度浮点、双精度浮点、单精度复数、双精度复数和八位整数。鉴于之前的测试并不涉及复数, 此处也不选用复数精度作为基准。需要注意的是测试样例后缀中存在 $_{[n/t]}^{[n/t]}$ 分别代表运算中输入矩阵的数据存储、分布方式, 即行列是否转置 (如上文提到的, CUDA 中矩阵存储分行主元素和列主元素存储)。图 3-3 为测得的性能基准。

II 结果分析

首先, 本实验通过 Nsight 和 nvprof 的搭配对应用程序中包括 API 调用、核函数运行时间等运行时细节进行研究。表 3-3 和表 3-4 是开启和关闭张量核心的情况下, 使用 nvprof 运行矩阵乘加应用所得到的报告, 该报告主要侧重于 API 的调用、运行。由于本文关心的重点在 GPU 硬件, 故仅截取硬件相关的 API 调用 (API Call) 中设备同步、内存访问相关的且运行时长占比较可观的部分。

根据 nvprof 生成的报告, 可以看出在开启张量核心的情况下, 用于设备上线程束同步的 API: `cudaDeviceSynchronize()`, 无论是在运行总时长还是调用占比中都显著小于不开启张量核心的情况, 其平均运行时间相差超过 2 个数量级。另外用于开启内核运行和异步访存的 API 的调用次数在开启张量核心时都明显小于不开启张量核心的情况。可见开启张量核心后, 由于原先需要多条点积指令的矩阵乘法运算被合并为仅用一条

表 3-3 开启张量核心下矩阵乘加运算的性能分析 (API Calls)

Table 3-3 Performance analysis of GEMM with Tensor Core On (API Calls)

API	运行时长 (ms)	运行时长占比	调用次数	平均运行时长 (ms)
cudaDeviceSynchronize	186156	79.29%	322	578.12
cudaFree	45565.9	19.41%	811	56.185
cudaMalloc	1835.06	0.78%	805	2.2796
cudaLaunchKernel	557.250	0.24%	64961	0.0086
cudaMemsetAsync	130.150	0.06%	27268	0.0082

表 3-4 关闭张量核心下矩阵乘加运算的性能分析 (API Calls)

Table 3-4 Performance analysis of GEMM with Tensor Core Off (API Calls)

API	运行时长 (ms)	运行时长占比	调用次数	平均运行时长 (ms)
cudaDeviceSynchronize	543509	91.40%	322	168792
cudaFree	47447.6	7.98%	811	58.505
cudaMalloc	1838.33	0.31%	805	2.2836
cudaLaunchKernel	693.12	0.12%	64961	0.0107
cudaMemsetAsync	230.83	0.04%	40501	0.0057

wmma 指令替代，其计算更加密集、设备同步更少，故性能提升明显。表 3-5 显示了根据 GPGPU-SIM 测得的张量核心相关指令与一般点积运算指令所需要的运行周期数，以及相应开启内核 (Launch Kernel) 指令所需的运行周期数，在关闭张量核心时，进行矩阵乘加或是通过多条浮点指令、或是通过多条 ALU 指令 (idp4a) 实现的，而开启张量核心后则直接通过 wmma 指令实现，如图 3-4 所示，图中为硬件代码 (SASS)，wmma 经过编译会生成若干条 hmma 指令，图中 hmma 指令的动作为：以 $m = 8, n = 8, k = 4$ 为最小粒度，在 FP32 精度 E8M10 存储方式 (即非标准 IEEE-754 的 8 位指数 10 位位数 1 位符号位的 19 位浮点数存储方式) 的浮点数上进行运算。根据指令运行周期级别的数据可以看出使用张量核心相关指令 (wmma) 不仅能极大减少计算所花费的时间，用于开启内核、上下文切换的时间也会显著减少。

```

HMMA.884.F32.E8M10      R8,      R16.reuse.COL,   R18.reuse.ROW,   R8      ?WAIT1;
HMMA.884.F32.E8M10      R10,     R16.reuse.COL,   R18.reuse.ROW,   R10      ?WAIT1;
HMMA.884.F32.E8M10      R12,     R16.reuse.COL,   R18.reuse.ROW,   R12      ?WAIT1;
HMMA.884.F32.E8M10      R4,      R16.COL,        R18.ROW,       R4      ?WAIT1;

```

图 3-4 一段由 wmma 指令编译出的机器指令

Figure 3-4 Part of SASS code complied from PTX code: wmma

表 3-5 GPGPU-SIM 测得的各指令运行所需时钟周期 (图灵架构)

Table 3-5 Clock cycle the instructions will cost based on GPGPU-SIM(Turing Arch)

指令、操作类型	周期
FMA(Float point Multiply Accumulation) @ FP32	4
FMA @ FP64	8
WMMA(Warp-level Matrix Multiply Accumulation)@FP16	8
ALU	4
MIO(内存访问)	16-20
TRAP(内核陷阱)	77-92
L1 缓存未命中	139-167

* 因硬件运行时存在随机性，故测得时钟周期为在基于图灵架构的 GPGPU-SIM 上运行后计算得出。

图 3-5 和图 3-6 则是开启和关闭张量核心的情况下，使用 Nsight 运行矩阵乘加应用所得到的报告，该报告主要侧重于上下文切换、线程调度等信息。在这些信息中本实验重点关注线程就绪 (Ready Thread) 和上下文切换 (Context Switch) 两部分。

根据 Nsight 生成的报告，可以看出无论是否开启张量核心，其上下文切换仍然是一笔较大的开销。正如上文提到的，在 GPU 上进行上下文切换，其寄存器可以简单地通过更改寄存器文件指针保存/还原，然而上下文切换所需要做的清空流水线等工作还是无法被省略，造成较大的开销。相比较而言开启张量核心的应用在上下文切换中的开销下降了 10% 左右，而因为就算不使用张量核心， 4×4 规模的混合矩阵运算也能使用点积指令在 16 个周期内完成，故应用中运算开销相对于上下文切换、加载内核映像的工作占用资源较小。且使用张量核心的应用中硬件中断 (IRQ) 占比也较小，说明使用张量核心不仅在运算速度上有极大提升，在与外围设备数据交换，缓存读取、命中等方面都有较大优势。当然，因计算优势在缓存读取、命中等方面体现，故输入数据的“形状”能否符合张量的硬件特性变得尤为重要。

在上文的实验中，可以看出矩阵乘加运算中，两输入矩阵共享的维度 K 对性能影响较为显著。在 $M \times N$ 的结果矩阵中，每个单元格都是由 $1 \times K$ 的矩阵与 $K \times 1$ 矩阵相乘，这个运算将被拆分并分发给张量核心进行处理，那么在这一步，若 K 无法被张量核心正好拆分，则会引发一个数据缺失，进而造成硬件中断，从共享/全局内存获取新的数据以拼成完整的可以交予张量核心进行处理的单元。若没有这种数据则调用传统运算核心进行运算。那么张量核心硬件上是以 4×4 作为计算单元，调度时以 16×16 作为调度单元，那么隐含的就要求 K 能被恰好拆分为 16 或 4，到此，我们根据官方文档、硬件架构做出了猜想，根据下面两张图中的实验数据，我们将对这个猜想进行验证。图 3-7 左侧为按照开启与关闭张量核心情况下的半精度混合矩阵运算的加速比进行排序，并记录下实验编号的顺序，然后使用记录下的实验编号的顺序对单精度混合矩阵

Statistics for ETW Events						
Provider ID	Opcode	Version	# Events	Total Size	Average Size Per Event	Percentage of Total Events Sizes (%)
Event Trace	Info	2	1	576	576.0	0.00
Event Trace	Extension	2	3	172	57.3	0.00
Event Trace	80	2	1	80	80.0	0.00
Event Trace	32	2	2	104	52.0	0.00
Process	DoStart	4	227	77083	339.6	0.45
Thread	DoStart	3	3797	417388	109.9	2.45
Image	DoStart	3	14492	2851176	196.7	16.76
Thread	Ready Thread	2	98208	2356992	24.0	13.85
Thread	Context Switch	4	188788	7551520	40.0	44.39
Thread	Start	3	90	9540	106.0	0.06
Event Trace	8	2	2	32	16.0	0.00
Image	Load Image	3	276	57890	209.7	0.34
Image	End	3	370	75750	204.7	0.45
Thread	66	2	71	2272	32.0	0.01
Thread	67	2	71	2272	32.0	0.01
Thread	68	2	2273	72736	32.0	0.43
Process	Start	4	5	1659	331.8	0.01
Thread	End	3	154	16324	106.0	0.10
Process	11	2	9	924	36.0	0.00
Process	End	4	9	3277	364.1	0.02
Hw Config	Video Configuration	2	4	10464	2616.0	0.06
Hw Config	28	2	1	40	40.0	0.00
Hw Config	NIC Configuration	2	7	1956	279.4	0.01
Hw Config	Physical Disk Configuration	2	3	1800	600.0	0.01
Hw Config	Logical Disk Configuration	2	5	720	144.0	0.00
Hw Config	31	2	5	1300	260.0	0.01
Hw Config	PNO Device Info	5	307	89376	291.1	0.53
Hw Config	IRQ	3	38	6402	168.5	0.04
Hw Config	Active Services	3	261	40644	155.7	0.24
Hw Config	CPU Configuration	3	1	860	860.0	0.01
Hw Config	36	2	56	25760	460.0	0.16
Hw Config	ACPI Configuration	2	1	40	40.0	0.00
Hw Config	Platform	2	1	156	156.0	0.00
Hw Config	33	2	1	48	48.0	0.00
Hw Config	34	2	1	56	56.0	0.00
Hw Config	29	2	1	36	36.0	0.00
Hw Config	30	2	1	48	48.0	0.00
Thread	DoEnd	3	3732	410498	110.0	2.41
Process	DoEnd	4	223	75465	338.4	0.44
Image	Kernel Base	2	1	24	24.0	0.00
Image	DoEnd	3	14396	2834418	196.9	16.66
Process	Performance Defunct	5	105	15313	145.8	0.09
TOTAL			328000	17012591	51.9	

图 3-5 开启张量核心下矩阵乘加运算的性能分析(上下文切换)

Figure 3-5 Performance analysis of GEMM with Tensor Core On (Context Switch)

Statistics for ETW Events						
Provider ID	Opcode	Version	# Events	Total Size	Average Size Per Event	Percentage of Total Events Sizes (%)
Event Trace	Info	2	1	576	576.0	0.00
Event Trace	Extension	2	3	172	57.3	0.00
Event Trace	80	2	1	80	80.0	0.00
Event Trace	32	2	2	104	52.0	0.00
Process	DoStart	4	216	66629	308.5	0.30
Thread	DoStart	3	3811	411802	108.1	1.88
Thread	Ready Thread	2	150585	3614040	24.0	16.49
Thread	Context Switch	4	287743	11509720	40.0	52.52
Image	DoStart	3	13537	2677168	197.8	12.22
Event Trace	8	2	2	32	16.0	0.00
Thread	Start	3	143	15158	106.0	0.07
Image	Load Image	3	400	82200	205.5	0.38
Image	End	3	494	100332	203.1	0.46
Thread	66	2	116	3712	32.0	0.02
Thread	67	2	116	3712	32.0	0.02
Thread	68	2	2451	78432	32.0	0.36
Process	Start	4	8	2400	300.0	0.01
Thread	End	3	299	31694	106.0	0.14
Process	11	2	10	360	36.0	0.00
Process	End	4	10	2814	281.4	0.01
Hw Config	Video Configuration	2	4	10464	2616.0	0.05
Hw Config	28	2	1	40	40.0	0.00
Hw Config	NIC Configuration	2	7	1956	279.4	0.01
Hw Config	Physical Disk Configuration	2	3	1800	600.0	0.01
Hw Config	Logical Disk Configuration	2	5	720	144.0	0.00
Hw Config	31	2	5	1300	260.0	0.01
Hw Config	PNO Device Info	5	307	89376	291.1	0.41
Hw Config	IRQ	3	38	6402	168.5	0.03
Hw Config	Active Services	3	261	40666	155.8	0.19
Hw Config	CPU Configuration	3	1	860	860.0	0.00
Hw Config	35	2	56	25760	460.0	0.12
Hw Config	ACPI Configuration	2	1	40	40.0	0.00
Hw Config	Platform	2	1	156	156.0	0.00
Hw Config	33	2	1	48	48.0	0.00
Hw Config	34	2	1	56	56.0	0.00
Hw Config	29	2	1	36	36.0	0.00
Hw Config	30	2	1	48	48.0	0.00
Thread	DoEnd	3	3655	395266	108.1	1.80
Process	DoEnd	4	214	66183	309.3	0.30
Image	Kernel Base	2	1	24	24.0	0.00
Image	DoEnd	3	13441	2860198	197.9	12.14
Process	Performance Defunct	5	87	12836	147.5	0.06
TOTAL			478040	21915311	45.8	

图 3-6 关闭张量核心下矩阵乘加运算的性能分析(上下文切换)

Figure 3-6 Performance analysis of GEMM with Tensor Core Off (Context Switch)

表 3-6 官方文档给出的 wmma 指令支持的分割尺寸^[42]Table 3-6 Matrix size supported in wmma instruction based on official documentation^[42]

指令	形状	数据精度	PTX 代码版本
wmma	.m16n16k16	INT8/FP16/FP32	≥ 6.0
wmma	.m8n32k16/.m32n8k16	INT8/FP16/FP32	≥ 6.1
wmma	.m8n8k32	INT4	≥ 6.3
wmma	.m8n8k128	One bit	≥ 6.3
mma	.m8n8k4	FP16/FP32	≥ 6.4

运算的实验结果进行排序得到右侧图表 (右侧图表并不是按照单精度混合矩阵运算实验的加速比排序, 而是根据基于加速比排序后的半精度混合矩阵运算实验得到的实验编号的顺序排序)。两张图中的加速比可被分为三段: 加速比低于 1、加速比介于 1-2.5 之间和加速比大于 3 的部分, 且两图中突变坐标吻合, 故可以推测无论是在哪一种精度下, 在硬件上张量核心对于输入操作数的形状较为敏感。

图 3-8 中根据实验中输入矩阵共享的维度 k 对加速比进行着色。可见无法被 8 整除的测试样例的加速比较低, 接近 1; 而能够被 8 整除的测试样例大部分都能被张量核心有效地加速; 而随着 K 值的上升, 加速比也呈现上升趋势。结合 GPU 实际在线程调度中的特征, 以及中间代码 (PTX) 中给出的子矩阵分割形状参数, 如表 3-6 所示 (表中 wmma 指令为跨线程束矩阵乘加, 而 mma 则非跨线程束), 在实际使用中应尽量确保输入矩阵共享的维度 K 能够被 8 整除, 且最好为 32 的倍数; 且尽量不要使用太“扁”或太“长”的矩阵作为输入。

由于以上评估进行时 GPU 均为到达满载, 故使用 CUTLASS 库评估了 GPU 满载时的矩阵乘加性能, 如图 3-3 所示, 可见在 CUTLASS 中以半精度浮点进行运算, 开启张量核心 (hgemm-wmma) 后性能相比未开启张量核心 (hgemm) 提升了约 3 倍, 与前文实验中相符; 而其输入矩阵数据分布方式对性能有一定影响, 总体来看, 在半精度情况下 (FP16), 两矩阵均以行主元素存储的情况下性能较强 (nt 代表矩阵 A 不进行转置, 而矩阵 B 进行转置, 然而由于矩阵乘法运算的特征, 矩阵 B 转置表示其本身存储方式仍是行主元素存储; 而 tn 则代表 A 和 B 都以列主元素存储), 而两矩阵均以列主元素存储时性能较弱; 然而在单精度情况下 (FP32) 时, 四种运算性能差距不大, 而总体运算性能也低于半精度时的运算性能, 这也与在硬件层面张量核心以半精度为操作单元有关; 而在双精度下 (dgemm, double gemm) 性能较差, 这也与其硬件特征有关, 即需要若干个低精度核心同步、合作计算高精度结果。值得注意的是, 相对于 CUTLASS 1.2 版本, 1.3 版本新增了 $m = 8, n = 8, k = 4$ 的非跨线程束矩阵乘加 (mma-gemm), 这也是考虑到在数

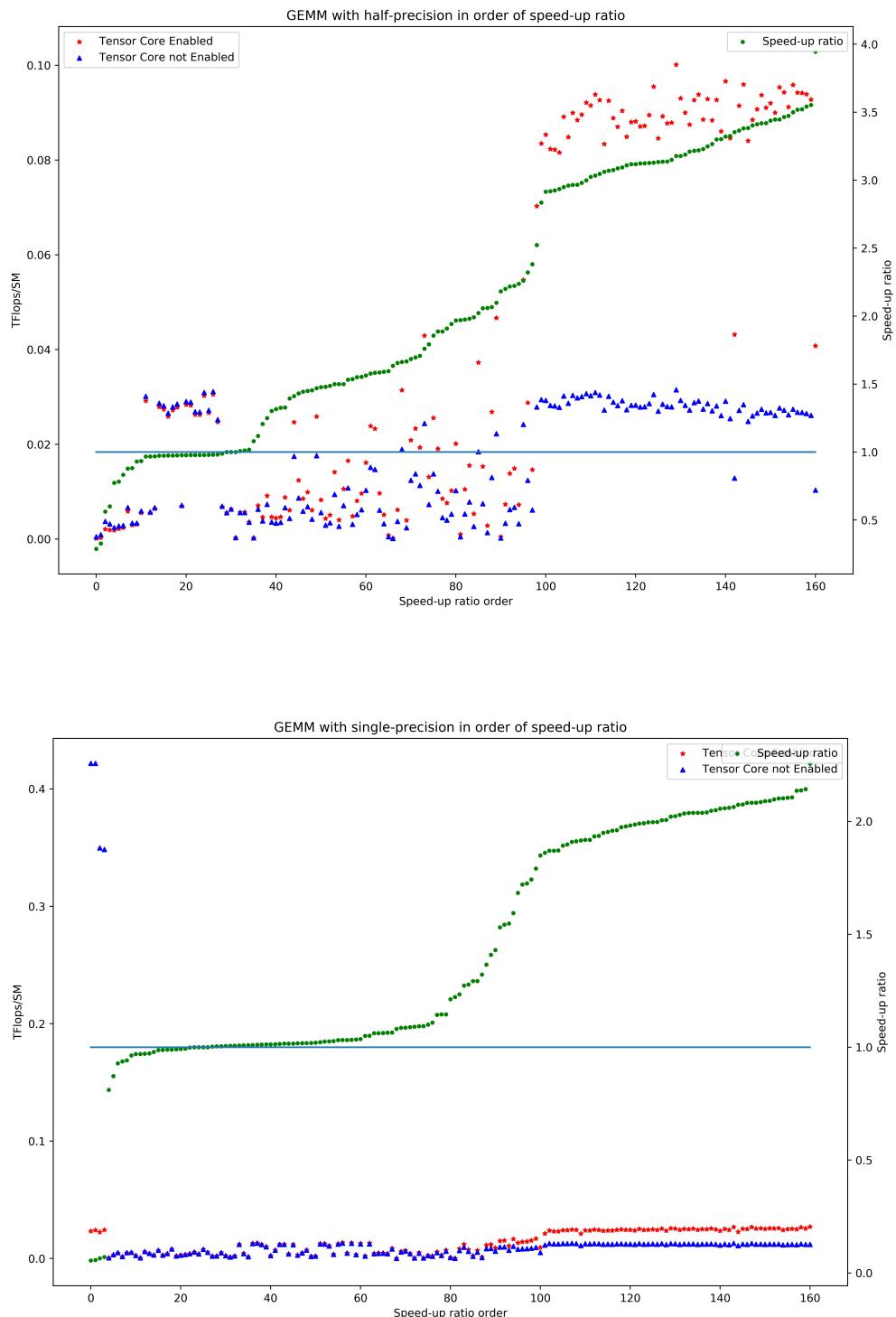


图 3-7 半精度/单精度 GEMM 性能 (按加速比排序)

Figure 3-7 Performance of GEMM at Half and Single (Sorted by speed-up ratio)

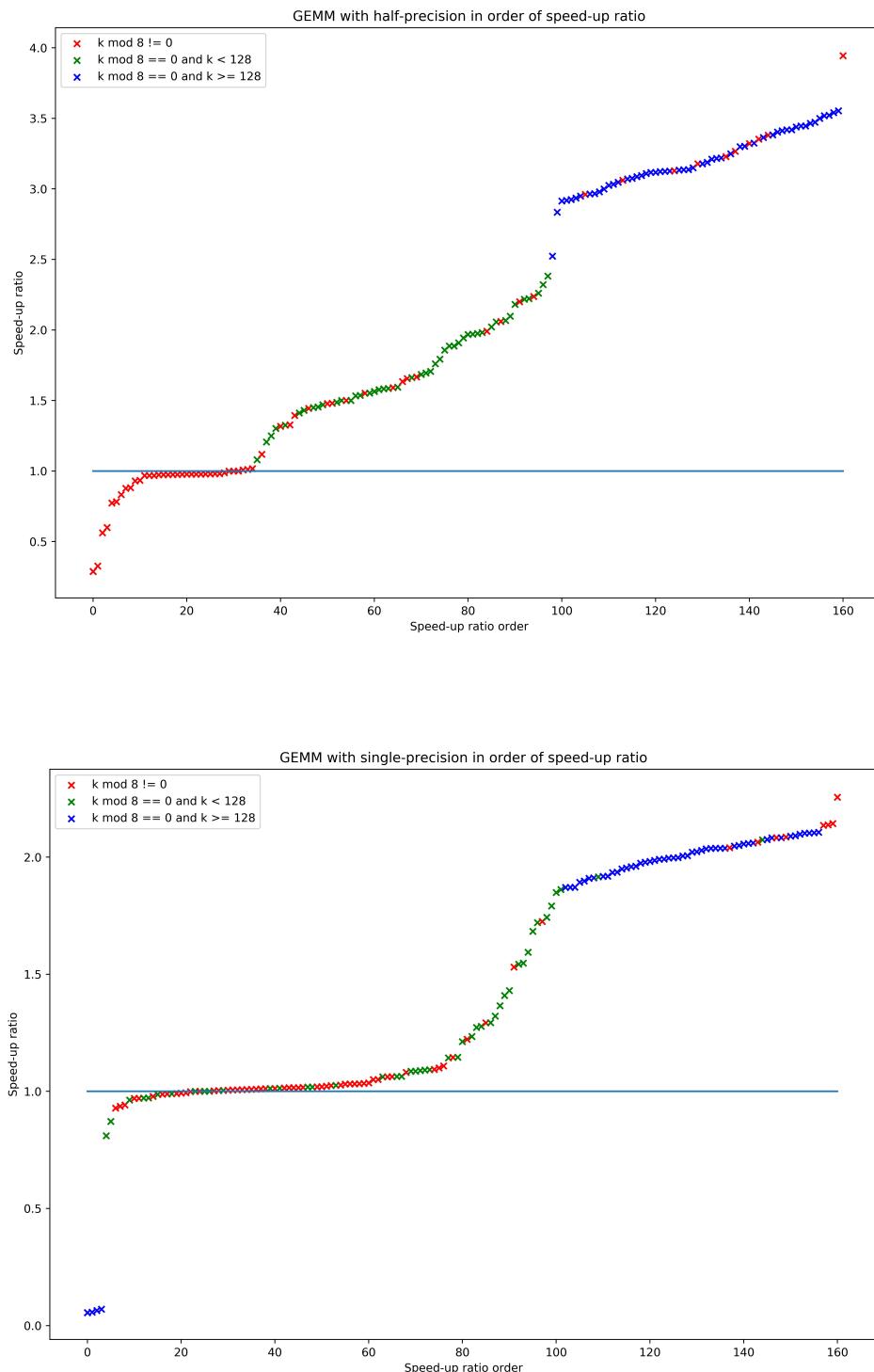


图 3-8 半精度/单精度 GEMM 性能 (按加速比排序, 根据维度 K 特征着色)

Figure 3-8 Performance of GEMM at Half and Single (Sorted by speed-up ratio, colored with feature of K)

据规模较小时 wmma 会引发数量可观的同步、上下文切换，故新增了这一粒度的矩阵乘加。

在实验平台中的 NVIDIA Geforce RTX 2080TI 搭载的 TU102 核心中有 68 个流多处理器单元^[48]，结合之前单个流处理器单元测试的性能，大约是 60 倍，这与硬件特征亦相符合，该结果将作为基准性能。从该试验得到的结果以及 NVIDIA 官方文档的资料，正如前文提到过，张量核心的计算最小粒度是 4×4 然而在调度时仍然是以 16×16 为单位，且两个线程束也被组织到一起进行执行；我们可以提出合理地猜想，在下一代架构的硬件中（安培架构），将会出现规模更大、跨越更多个线程束的矩阵乘加的指令集，以提高并行度进而进一步增加计算密集型任务的性能；当然，这样的指令也会在线程束之间的同步带来挑战。

3.2.2 矩阵乘法运算

在新架构以矩阵乘加运算进行深度学习性能评估之前，大部分评估都采用传统矩阵乘法运算进行（即不存在累加操作）。自 CUDA 6.0 开始，NVIDIA 推出了优化线性代数运算的 cuBLAS 库，而每次硬件架构更新，cuBLAS 库均会针对新硬件做出改进、优化。最新的 CUDA SDK 10.1 则推出了 cuBLAS 轻量级库，在生成的应用程序大小方面做出了明显优化，性能方面则并无太多优化。本节旨在评估关闭张量核心时，使用 cuBLAS 中的 API 与不使用 API 自行实现运算逻辑的情况下，传统矩阵乘法的性能。

I 实验结果

图 3-9 显示了三种情况下传统矩阵乘法的性能。随着数据规模的增长，基于 cuBLAS 库的应用的单精度浮点矩阵乘法运算性能稳定在 13TFlops 左右；而不使用 cuBLAS 库中的 API、而是自行实现运算逻辑的应用尽管不明显，其单精度浮点矩阵运算性能仍随着数据规模的增长而增长，最终稳定在 0.13TFlops 左右。实验中使用的数据集并未如上一节中测试张量核心时的数据，分为能否被 8 整除，而是全部随机。实验结果发现在张量核心以及相关指令尚未出现时，使用 cuBLAS 库时矩阵形状并不会对性能造成显著影响。

II 结果分析

需要注意的是，在实验中不使用 cuBLAS 库的矩阵乘法是基于 GPU 直接进行数值计算的，性能较差的同时支持的数据量也不够理想（因系统、硬件和驱动的原因，CUDA

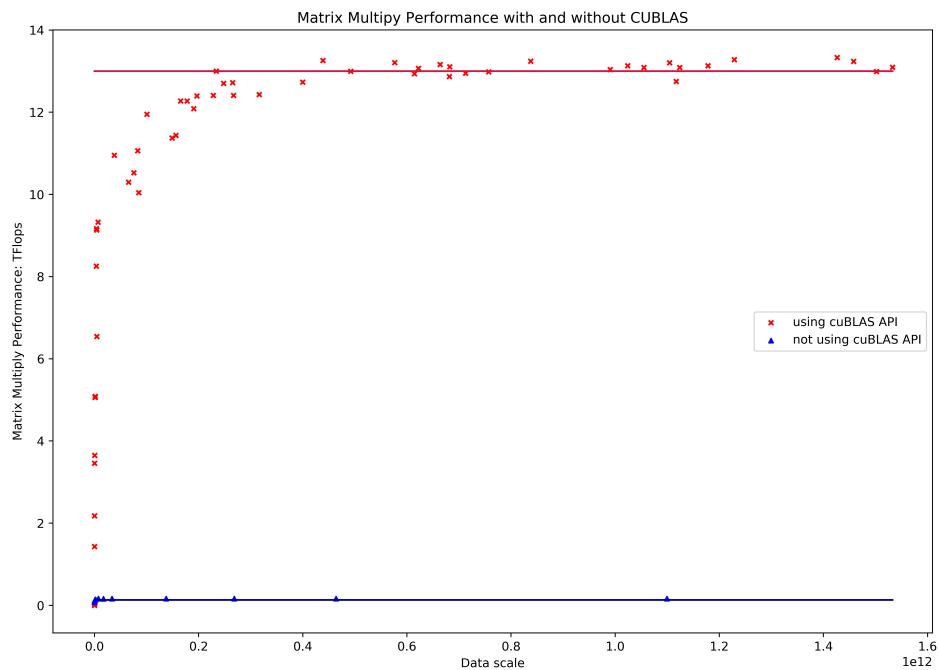


图 3-9 使用和不使用 cuBLAS 库时的矩阵乘法运算性能

Figure 3-9 Performance of Matrix Multiply with and without cuBLAS library

程序的一个内核在 Windows 10 操作系统下运行超过一定时间即会抛出超时异常，而不使用 cuBLAS、采用直接计算的方法计算矩阵乘积速度较慢，导致大数据量下程序超时）。且由于内存分配模式的原因，在直接计算中，无法被 32 整除的维数需要被填充为 32 的倍数，在某些情况下会造成大量的内存浪费。故考虑到性能、程序健壮性等因素，在进行传统矩阵乘法运算应尽可能使用 cuBLAS 库。

3.2.3 卷积运算

在深度学习中，卷积作为提取特征、过滤图像噪声的一种方式，无疑是从业者最为熟悉、存在于最多应用中的计算。且在图像处理中，卷积运算也是非常重要的一环。计算卷积有若干方法，本节将使用 NVIDIA 官方发布的 Benchmark 样例评估这些不同方法在不同情况下的性能。当然，由于还存在解卷积运算，故精度也在本实验考虑范围之内，以满足不同任对速度和精度的取舍。

I 实验结果

本节的实验涉及如下几种卷积计算方法：基于快速傅里叶变换的卷积；基于矩阵乘加的卷积和基于传统的直接计算的卷积（cuDNN 中将这一方法命名为 Conv_Direct），即

表 3-7 实验中的几种卷积计算方式

Table 3-7 Methods to calculate convolution

卷积计算方式	描述
基于快速傅里叶变换 (FFT) 的 CUDA 内建的卷积	使用 CUDA 提供的基于 FFT 的卷积库
基于快速傅里叶变换 (FFT) 的自定义卷积	使用 CUDA 提供的 FFT 库实现卷积
基于矩阵乘加 (GEMM) 的 CUDA 内建的卷积	使用 CUDA 提供的利用张量核心的 API
直接卷积 (全局内存, Global Memory)	直接计算每一个单元的值, 基于全局内存
直接卷积 (纹理内存, Texture Memory)	直接计算每一个单元的值, 基于纹理内存

卷积核滑动计算输出值。而这三种方法在 CUDA 的实现中也有差异, 如表 3-7 所示。

其中, 访问纹理内存时使用传统的 OpenCL/GL 中的实现方式。因纹理内存的访存、缓存方式与一般存储系统不同, 在测试时分为行卷积和列卷积。实验中卷积核步进、图像填充 (padding) 均不变, 性能采用兆像素每秒 (MPix/s) 计算。

根据图 3-10 中得到的关于卷积计算速度的实验结果可以得到如下结论, 由于在图像尺寸较小时所有方法性能都有明显下降, 为了清晰比较图片尺寸较小时个方法的性能, 图 3-11 为图像尺寸小于 128×128 时各方法的性能。首先, 在输入图像尺寸较大时, 基于矩阵乘加、使用张量核心的卷积计算方式和 CUDA 内建的基于快速傅里叶变换的卷积方式的性能优势相对于其他几种计算方式极为明显, 而基于矩阵乘加的方法相比内建的基于快速傅里叶变换的方法性能高 30%-50%、且随着图像尺寸的增加性能也增加, 而卷积核尺寸对性能影响不大。在输入图像尺寸较小时, 之前提到的两种方法性能急剧下降, 而直接方法计算卷积性能较稳定; 对于使用纹理内存的直接方法, 行、列卷积差别不大; 在图像尺寸下降到在 10^1 数量级时, 直接方法尤其是使用纹理内存优化后优势明显。

图 3-12 则是卷积计算精度的实验结果。首先, 使用 cuFFT 库自行编写的基于快速傅里叶变换的卷积误差较大, 达到 1×10^{-7} 级别, 在许多实际应用中已经无法满足要求。而 CUDA 内建的基于快速傅里叶变换的卷积计算方式和基于矩阵乘加使用张量核心的卷积计算方式误差相近, 都在 5×10^{-8} 级别; 最后, 直接方法计算卷积误差极低, 基本为 0, 可以看作浮点数存储方式引发的误差。

II 结果分析

在卷积计算速度方面, 在图像尺寸较大的情况下, 基于矩阵乘加的卷积计算方法和 CUDA 内建的基于快速傅里叶变换的卷积计算方法性能优势明显, 且随着尺寸增大优势也愈大; 在实际应用中可以根据 SDK 版本、硬件是否支持张量核心选择这两种计算方法。然而在图像尺寸较小时, 直接方法计算卷积的性能开始领先于其他方法; 当图像

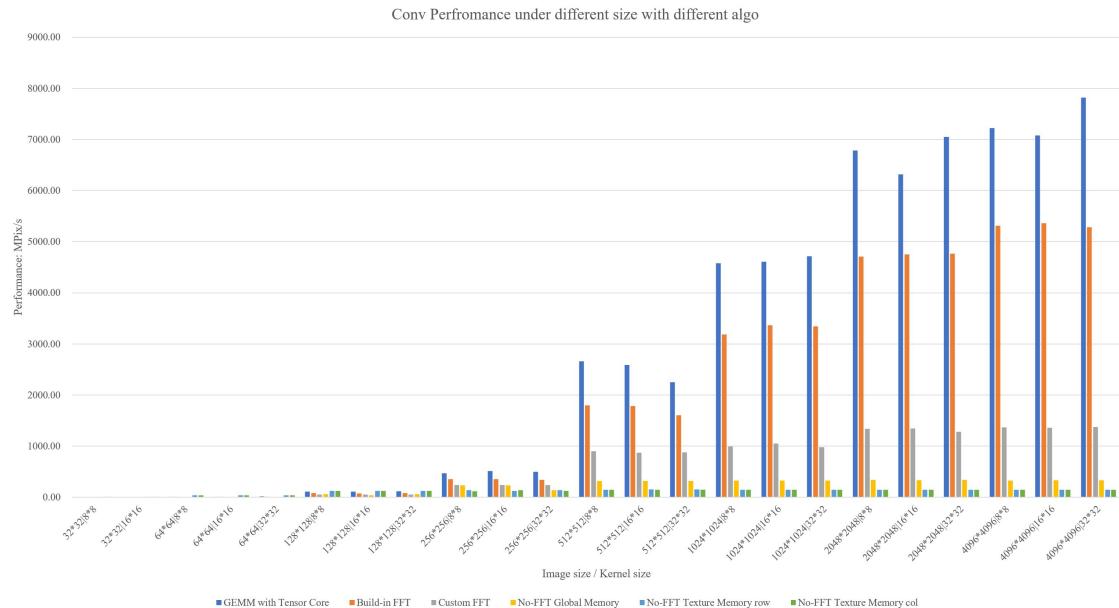


图 3-10 使用不同计算方法的卷积计算速度

Figure 3-10 Performance in speed of convolution based on different algorithm

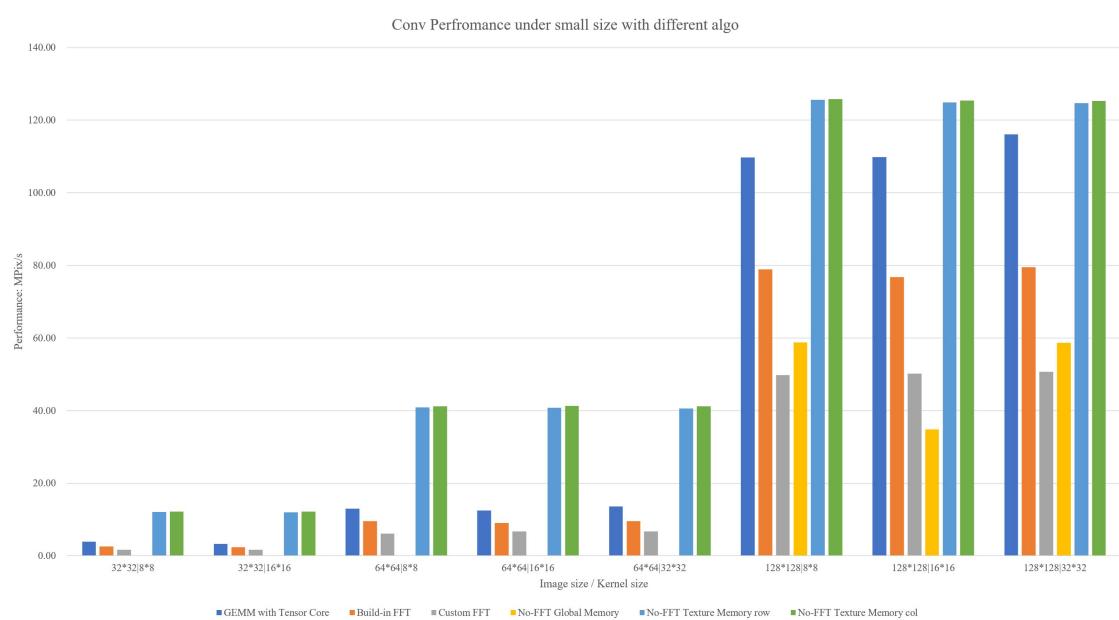


图 3-11 使用不同计算方法的卷积计算速度 (小图像)

Figure 3-11 Performance in speed of convolution based on different algorithm(Small images)

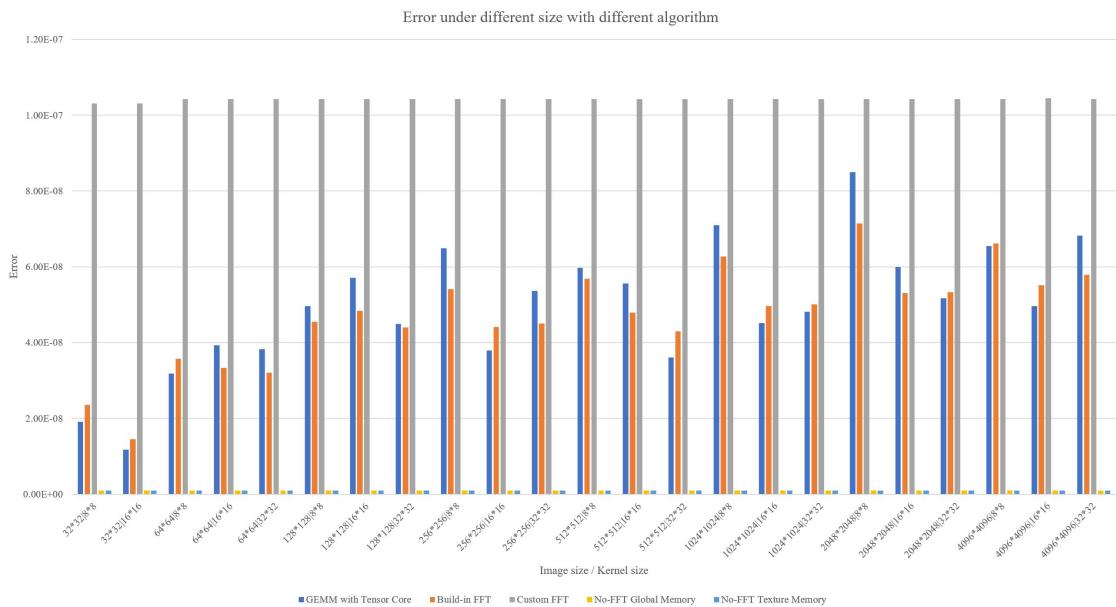


图 3-12 使用不同计算方法的卷积计算精度

Figure 3-12 Performance in accuracy of convolution based on different algorithm

尺寸下降至 10^1 数量级时，直接方法计算卷积性能极大领先于其他方法，尤其是使用纹理内存进行优化后，性能达到基于矩阵乘加和快速傅里叶变换的计算方法的 4-6 倍。值得注意的是，在许多神经网络中，包括之后进行实验的卷积神经网络，其输入图像尺寸都是 10^1 - 10^2 数量级，如 224×224 , 128×128 等，在该数量级上使用纹理内存优化的直接计算方法存在较大优势，本文也将基于这一结论对完整的卷积神经网络进行调整、优化。

表 3-8 列出了基于快速傅里叶变换和纹理内存的卷积计算方式在计算不同尺寸大小的图象时，部分 API 调用、GPU 活动等方面耗时占比的变化。其中用蓝色标注的为纹理内存独有的项目，分别为异步访存与上下文切换相关的项目。从该表可以得出以下结论：

- 在图像尺寸由小变大时，快速傅里叶变换中用于计算的 `regular_fft` 用时占比明显减小，而基于纹理内存的直接方法中用于计算的 `convRowKernel` 和 `convColKernel` 总占比基本不变，可见卷积计算本身是限制基于纹理内存的直接方法在大尺寸图像时性能的主要因素。而在使用快速傅里叶变换的方法中，随着图像尺寸的增加，主机与设备间的内存交互占比明显增加，可见访存是限制 FFT 性能的主要因素。
- 在基于纹理内存的直接方法中，随着图像尺寸的增加，设备同步用时增长明显，而在尺寸较小时设备同步用时极短。其原因为基于纹理内存的直接方法中使用了纹理内存、锁页内存以及相应异步访存 API 优化性能。由于纹理内存特殊的缓存模

表 3-8 不同方法不同尺寸下卷积运算的性能分析

Table 3-8 Performance analysis of Convolution with different methods and size

类型	计算方法	项目	小尺寸用时占比	大尺寸用时占比
GPU 活动	FFT	CUDA memcpy DtoH	4.93%	31.74%
		CUDA memcpy HtoD	3.85%	31.17%
		void regular_fft	16.88%	4.25%
		CUDA memcpy DtoH	0.19%	0.94%
		CUDA memcpy HtoA	0.18%	0.92%
		CUDA memcpy DtoA	0.09%	0.02%
		CUDA memcpy HtoD	0.06%	0.00%
		convRowKernel	35.56%	50.54%
API 调用	FFT	cudaFree	70.71%	59.42%
		cudaMalloc	28.38%	36.67%
		cudaDeviceSynchronize	0.12%	1.30%
		cudaFree	0.08%	0.05%
		cudaMalloc	0.10%	0.19%
		cudaMallocArray	77.47%	33.45%
		cuDevicePrimaryCtxRelease	19.51%	9.39%
		cudaDeviceSynchronize	1.00%	55.01%

式，在图像尺寸较小时能获得极高的缓存命中率，绝大部分资源能够被投入卷积计算本身，而异步访存则可以隐藏主机与设备内存交互的时间，提高并行度。

综合以上结论，可以得出：对于快速傅里叶变换的方法，主要的性能瓶颈在于主机与设备的内存交互。而对于基于纹理内存的直接方法，主要的性能瓶颈在于卷积计算本身。在图像尺寸较小时，得益于异步访存机制、纹理内存的缓存机制，加之此时卷积计算量较小，基于纹理内存的直接方法性能优势明显。而随着图像尺寸增加，快速傅里叶变换的方法的卷积计算本身优势明显，故其在大尺寸图像时设备同步耗时也较少，进而总体性能极大领先于基于纹理内存的直接方法。

在卷积计算精度方面，基于矩阵乘加使用张量核心的方法基于 FP16 的精度进行计算；而基于快速傅里叶变换的方法在计算过程中需要将实数转为复数，再从复数转为实数，从而引入较大误差。而直接方法计算卷积由于直接对输出图像的每个单元进行计算，故误差极小可以忽略不计。在对精度要求极高的情况下，应选用直接方法计算卷积；值得注意的是，基于矩阵乘加和快速傅里叶变换的方法的精度已经达到 1×10^{-8} 级别，能够满足大部分情况的需求，故选择计算方法时仍需考虑输入图像大小。最后，基于快速傅里叶变换，但不使用内建 API 的方法不推荐使用，因在计算速度、计算精度方面，每种数据规格下都有更优选择。

3.3 基于 CUDA 源码的应用

本节将基于 CUDA 代码编写一系列实际的机器学习应用，以全方位评估实际使用中新架构硬件的加速性能以及相对于老架构硬件的加速幅度。本节选用如下几种算法：简单的卷积神经网络 (CNN) 和并行支持向量机算法 (SVM)。在这些算法中包含了矩阵乘法、矩阵乘加、卷积以及浮点数值计算。评估中将采用 NSight 与 nvprof 分析运行情况。

3.3.1 基于 cuDNN 的卷积神经网络 (CNN)

由于本文的目的并不是提高特定一种机器学习应用或特定一种网络结构的性能，而是找到普适规律，故本节中的网络搭建参考了 LeNet-5，并省略了池化层，仅保留输入/输出层、卷积层、全连接层。其原因是池化层中没有太多与本节需要评估的性能相关的运算，而输入/输出层时基本结构，卷积层中存在大量矩阵相关运算，全连接层由于其神经元大规模链接，是评估矩阵乘加的较好媒介。在网络的超参数方面，图像、卷积核、输出尺寸等在表 3-9 中列出，所有图像尺寸均在 10^3 数量级以下，且存在部分尺寸极小 (10^1 数量级) 的图像，这些尺寸在上文的实验中使用纹理内存优化有极大优势。而选用的图像通道数、批大小、卷积核数量等在表 3-10 中列出，注意通道数、批大小、卷积核数量在表中并非一一对应，仅为从表项中选用。按照该网络结构，本节借助 cuDNN 搭建不同输入、连接、卷积尺寸的简化版卷积神经网络，并在每一层上都统计性能。实验数据集采用 DeepBench 中卷积神经网络对应的数据集。

然而，与前文中单独评估卷积性能不同，在卷积神经网络中除卷积外还有另外的运算，故本节中对卷积神经网络的运算分为表 3-11 中所示的 3 个部分，旨在更准确、完善地评估新架构硬件在一个完整的卷积神经网络运算中所能带来的提升。表 3-12 和表 3-13 列出了 cuDNNConvolution 中的前向传播和反向传播算法，根据表中描述的特征，在试验前猜测前向传播部分的性能能通过张量核心获得一定提升，而另外两个部分的性能提升幅度不会太明显，即基本持平。

I 实验结果

实验结果如图 3-13 和图 3-14 所示，其横坐标为计算量的对数，计算量的计算方式为输入图片尺寸、批大小、卷积核数量、卷积核尺寸以及计算卷积次数的乘积；而由于批大小、卷积核数量都是在表 3-10 中相应列选取的，即无论输入图片尺寸大或小，均会以这些批大小、卷积核数量进行测试，故计算量大小顺序可被近似看作输入图片尺寸的

表 3-9 实验中图像、卷积核参数

Table 3-9 Parameter of image, convolution kernel

图像大小	卷积核尺寸	卷积核步进	输出图像大小
700 × 161	20 × 5	2, 2	341 × 79
341 × 79	10 × 5	2, 2	166 × 38
480 × 48	3 × 3	1, 1	478 × 46
240 × 24	3 × 3	1, 1	238 × 22
120 × 12	3 × 3	1, 1	118 × 10
60 × 6	3 × 3	1, 1	58 × 4
108 × 108	3 × 3	2, 2	53 × 53
54 × 54	3 × 3	1, 1	52 × 52
27 × 27	3 × 3	1, 1	25 × 25
14 × 14	3 × 3	1, 1	12 × 12
7 × 7	3 × 3	1, 1	5 × 5
224 × 224	3 × 3	1, 1	222 × 222
112 × 112	3 × 3	1, 1	110 × 110
56 × 56	3 × 3	1, 1	54 × 54
28 × 28	3 × 3	1, 1	26 × 26
224 × 224	7 × 7	2, 2	109 × 109
28 × 28	5 × 5	1, 1	24 × 24
28 × 28	1 × 1	1, 1	28 × 28
14 × 14	5 × 5	1, 1	10 × 10
14 × 14	1 × 1	1, 1	14 × 14
7 × 7	1 × 1	1, 1	7 × 7
7 × 7	5 × 5	1, 1	3 × 3
56 × 56	1 × 1	2, 2	28 × 28
28 × 28	1 × 1	2, 2	14 × 14
14 × 14	1 × 1	2, 2	7 × 7
7 × 7	1 × 1	2, 2	4 × 4
700 × 161	5 × 5	2, 2	348 × 79
350 × 80	3 × 3	1, 1	348 × 78
350 × 80	5 × 5	2, 2	173 × 38
175 × 40	3 × 3	1, 1	173 × 38
175 × 40	5 × 5	2, 2	86 × 18
84 × 20	3 × 3	1, 1	82 × 18
84 × 20	5 × 5	2, 2	40 × 8
42 × 10	3 × 3	1, 1	40 × 8
112 × 112	1 × 1	1, 1	112 × 112
56 × 56	1 × 1	1, 1	56 × 56

表 3-10 实验中网络超参数 (通道、批大小、卷积核个数)

Table 3-10 Meta parameter (including channel, batch size and kernel amount)

通道	批大小	卷积核个数
1		
3		16
16		32
32		48
64	4	64
128	8	128
192	16	192
256	32	256
512		512
832		1024
1024		2048
2048		

表 3-11 卷积神经网络中的 3 个计算部分

Table 3-11 3 parts in Convolutional Neural Network

过程	cuDNN::cuDNNConvolution-	描述
前向传播	Forward()	包含大量卷积、混合矩阵运算
反向传播更新卷积核权重	BackwardFilter()	包含大量梯度、浮点数值计算, 涉及卷积运算
反向传播更新连接权重	BackwardData()	包含大量梯度、浮点数值计算

表 3-12 cuDNNConvolution 中前向传播算法

Table 3-12 Forward algorithm in cuDNN

算法	描述
IMPLICIT_GEMM	隐式 GEMM, 即不显式构造容纳张量数据的矩阵
IMPLICIT_PRECOMP_GEMM	预处理的隐式 GEMM
GEMM	显式 GEMM, 即显式构造容纳张量数据的矩阵
DIRECT	直接滑块计算方法
FFT	快速傅里叶变换
FFT_TILING	分割输入的快速傅里叶变换
WINOGRAD	通过矩阵变换将部分乘法操作替换为加法操作

表 3-13 cudnnConvolution 中反向传播算法

Table 3-13 Backward algorithm in cudnn

算法	描述
FFT	快速傅里叶变换
FFT_TILING	分割输入的快速傅里叶变换
WINOGRAD	通过矩阵变换将部分乘法操作替换为加法操作

大小顺序，即小输入图像计算量较小。该实验结果在一定程度上应证了猜想：张量核心能够为网络的前向传播部分带来大约 20%-40% 的提升，稍低于前文中评估的基于矩阵乘加使用张量核心进行的卷积计算相对于内建快速傅里叶变换的卷积计算的性能提升幅度，因前向传播并非纯粹的卷积计算，该差距在合理范围内；然而其余部分的性能开启张量核心后均有一定程度的落后。

将卷积神经网络中三个部分的计算整合便得到图 3-15。可以发现开启张量核心时前向传播部分的性能相比反向传播中两个部分的性能高 50%-100%，而关闭张量核心时三个部分性能相近。

II 结果分析

根据实验结果可以发现，在卷积神经网络中张量核心所能加速的部分较为有限。且尽管根据 Benchmark 实验中的结果表明计算卷积时，卷积核的尺寸并不会对加速性能造成显著影响，然而神经网络涉及多层卷积，卷积层间需要相连接，从而存在大量参数传播。若开启张量核心对参数传播过程进行加速，由于在卷积神经网络的前向传播中，每一层图像尺寸、神经元连接规模都会被输入图像尺寸、卷积核尺寸、边缘填充尺寸、卷积核步进等因素影响，即使原始输入尺寸满足张量核心的理想需求，在卷积之后也很难保证，故开启张量核心后前向传播部分提升也有限。而如图 3-15 中所示，开启张量核心后三部分性能差距较大，这也是导致图 3-14 中总体性能较差的原因。

而在反向传播的两个部分的实验中，采用了 NSight 与 nvprof 对其运行进行观察。由于是一个完整的神经网络，nvprof 所得的报告条目较多，且有些条目并不必要。这里选取神经网络中典型的操作：ReLU 作为除卷积、矩阵乘加运算外其他运算的代表，考察开启和不开启张量核心时该操作花费的时间，如表 3-14 所示。开启张量核心后，会使用针对新架构的 API(turing) 进行运算，然而，不仅调用的 API 数量明显增加，基于图灵架构的 API 的运行时间仍更长。可以推断出，由于完整神经网络中存在的其他运算较多，而在第二章提到过张量核心使用的指令流水线 (M-pipe) 与其他算术指令的流水线是互斥的，这就导致张量核心指令与一般算数指令在同一流多处理器中无法同时执行，张量核心在以较低效率执行不适合它的操作的同时还阻塞了其他算术运算的进行。

结合上文对卷积性能的评估，又考虑到实验中使用的数据集中有大量 10^2 规模的图像，而 cuDNN 中选择的卷积方式中包括直接方法均并不使用纹理内存。由于 cuDNN 将底层运算进行了封装，故无法在 cuDNN 上将直接方法调整为使用纹理内存。故首先本文选择将 cuDNN 卷积计算方法更换为直接方法。之后采用原生 CUDA 代码而不包

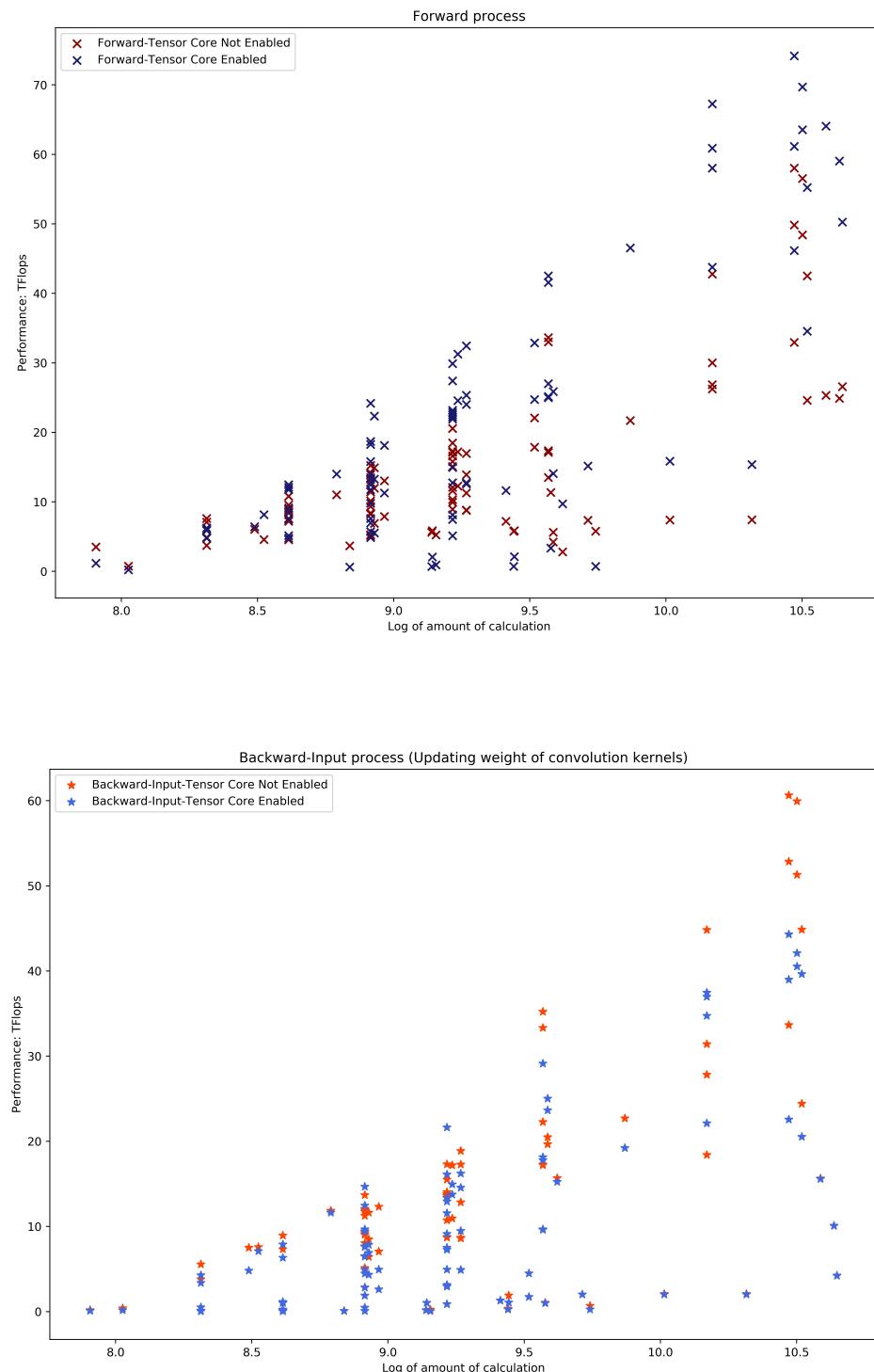


图 3-13 实验中卷积神经网络不同过程性能 (第一部分)

Figure 3-13 Performance of different process in CNN in experiment(Part 1)

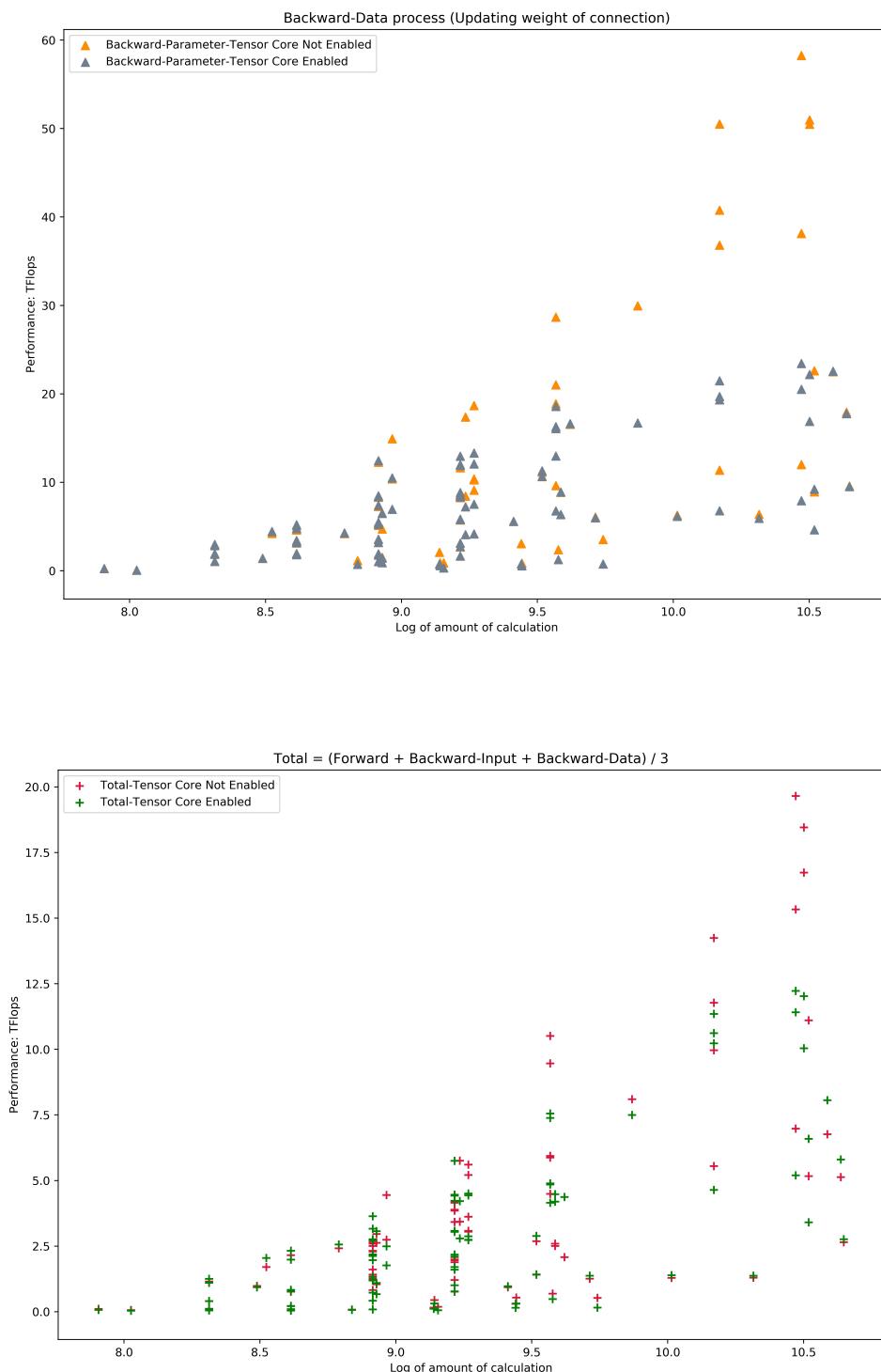


图 3-14 实验中卷积神经网络不同过程性能 (第二部分)

Figure 3-14 Performance of different process in CNN in experiment(Part 2)

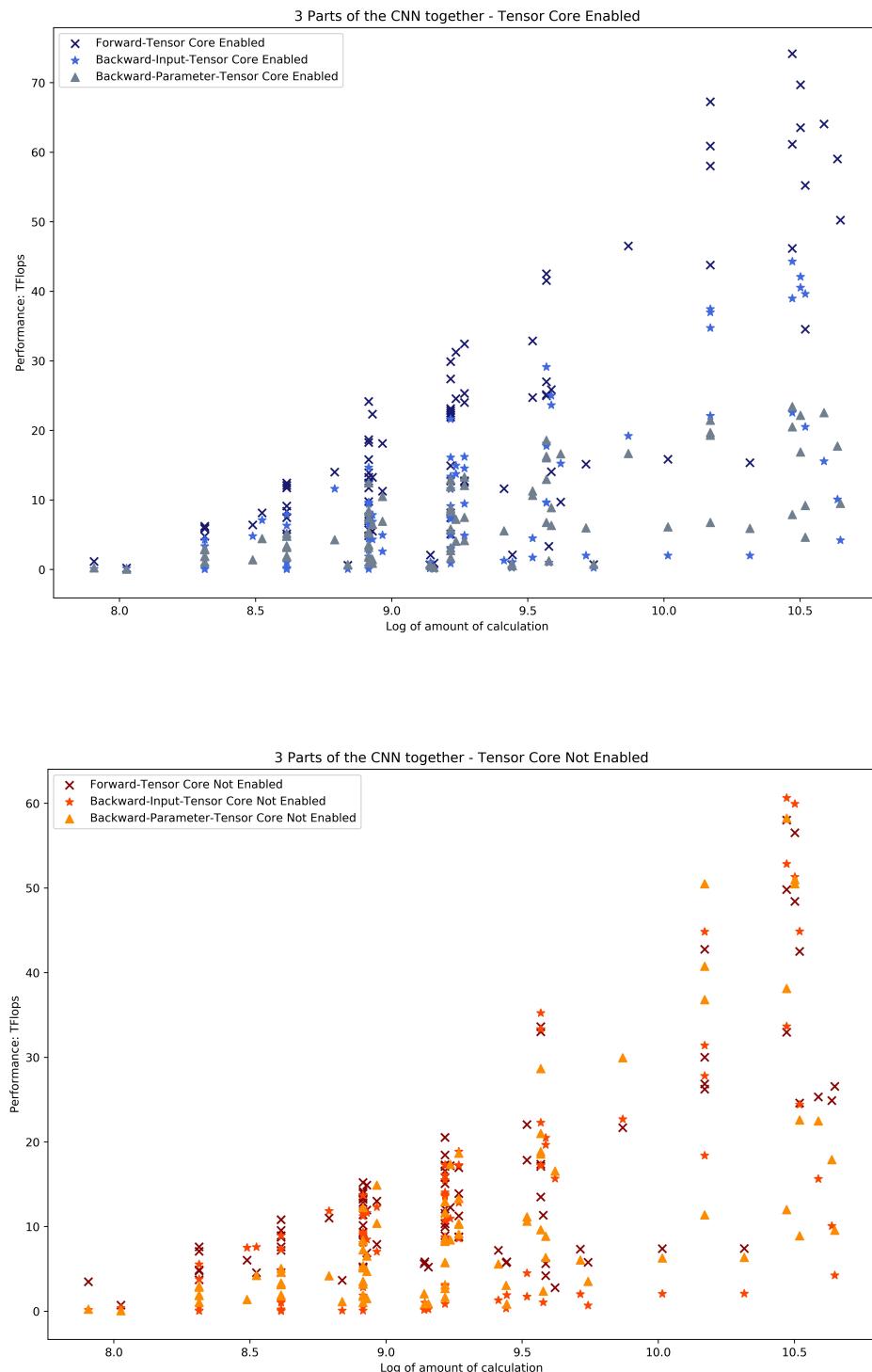


图 3-15 实验中卷积神经网络不同过程性能整合

Figure 3-15 Collection of performance of different process in CNN in experiment

表 3-14 ReLU 相关运算 API 及耗时

Table 3-14 APIs and time spent on ReLU related calculation

张量核心	API	时间 (ms)
ON	turing_h1688cudnn_256x64_sliced1x2_ldg8_relu_exp_interior_nhwc_tn	514.85
	turing_h1688cudnn_256x64_sliced1x2_ldg8_relu_exp_small_nhwc_tn	158.85
	turing_h1688cudnn_256x128_ldg8_relu_exp_small_nhwc_tn	88.135
	turing_h1688cudnn_128x128_ldg8_relu_exp_small_nhwc_tn	53.434
	turing_h1688cudnn_128x128_ldg8_relu_exp_interior_nhwc_tn	32.362
	turing_h1688cudnn_256x64_sliced1x2_ldg8_relu_exp_medium_nhwc_tn	29.385
	volta_hcudnn_128x128_relu_small_nn_v1	27.248
	volta_hcudnn_128x128_relu_interior_nn_v1	19.293
	turing_h1688cudnn_256x128_ldg8_relu_exp_interior_nhwc_tn	2.5632
	volta_hcudnn_128x128_relu_medium_nn_v1	0.7397
OFF	volta_hcudnn_128x128_relu_interior_nn_v1	307.43
	volta_hcudnn_128x128_relu_small_nn_v1	292.25
	volta_hcudnn_128x128_relu_medium_nn_v1	10.183

含 cuDNN 库的方式搭建卷积神经网络，考察使用纹理内存优化的直接方法相比不适用纹理内存优化的直接方法的运算速度提升幅度，原生 CUDA 代码参考了 Eric Yuan 的实现^[49]。

将 cuDNN 中卷积计算方法更换为直接方法后的性能如图 3-16 所示。可以发现在图像尺寸较小的情况下，使用直接方法优于使用快速傅里叶变换的方法。然而使用张量核心的方法性能优势依旧明显，仅在图像尺寸极小（如上文提到的 10^1 数量级）的情况下落后于直接方法，这也与上文提实验中的现象相符。其原因为卷积神经网络前向传播过程中，除卷积计算，根据权重进行前向传播也是主要计算。这一部分使用张量核心优势较大。在实际使用中，若硬件支持张量核心，应尽可能选用张量核心进行前向传播计算；然而，若设备不支持张量核心，在图像尺寸较小时可以选用直接方法进行计算，所以在反向传播过程中开启张量核心反而会导致性能下降。

在基于原生 CUDA 代码搭建的卷积神经网络中，图 3-17 显示了使用纹理内存优化后的网络前向传播性能与原始代码的前向传播性能比较。根据前文的实验结果，纹理内存仅在小尺寸图像优势较大，故这里仅考察小图像时两者的性能，且由于未使用 cuDNN，代码无法使 GPU 设备满载，故有意义的实验结果仅为比较两者的性能提升幅度。根据图中实验结果所示，在图像尺寸极小时，使用纹理内存和全局内存区别不大，而随着图像尺寸增加，纹理内存优化后的前向传播性能稳定在使用全局内存的 1.5-1.7 倍，而全局内存仍有增长的趋势，这也与上文实验中稍大的图像上全局内存表现逐渐优于纹理内存相符；同时，上文卷积实验中使用纹理内存的性能在小尺寸图像相对全局内存能够超过 2 倍，约 2.5 倍，然而由于前向传播中还有其他运算，这一结果也符合预期。

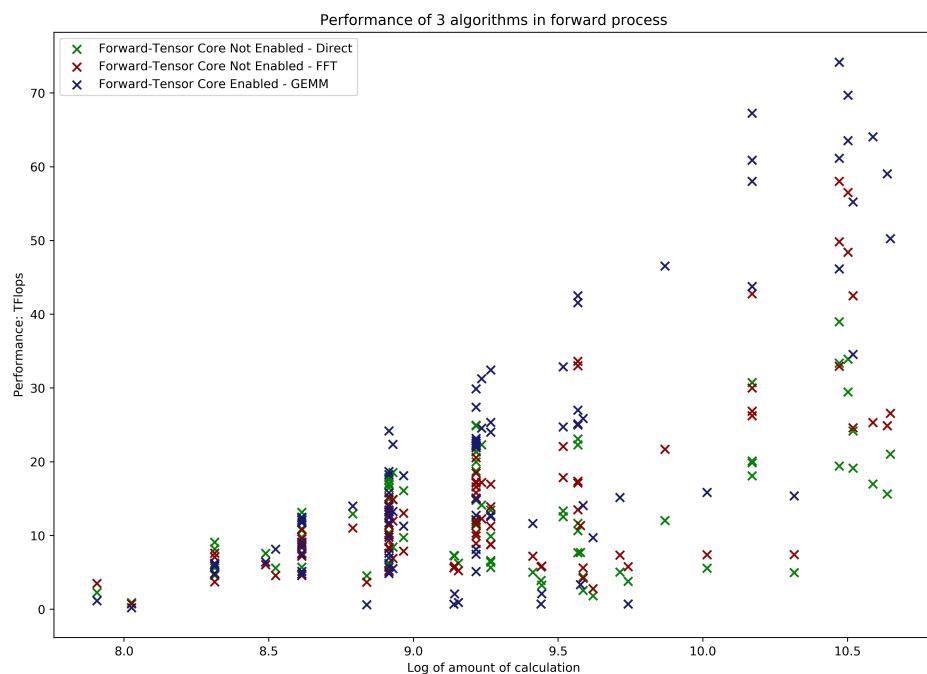


图 3-16 使用 cuDNN 中直接计算方法的性能对比

Figure 3-16 Performance of DIRECT algorithm in cuDNN

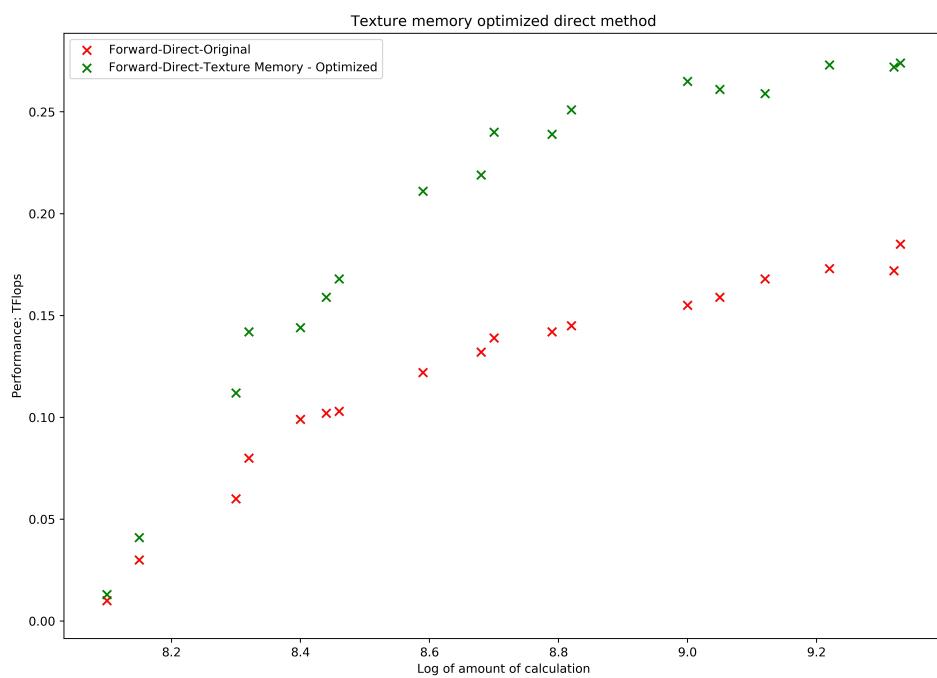


图 3-17 使用纹理内存优化的小尺寸图象前向传播性能

Figure 3-17 Performance of forward on small image optimized by texture memory

图 3-18 是对卷积部分使用纹理内存优化替代原代码中用于计算二维卷积的函数 `g_ConvCFM_feedforward_shared()` 之后的代码片段。由于行列卷积在上文的实验中差别不大，且代码重复率高，故只展示行卷积代码段。

需要注意的是，在神经网络中还有一个极为重要的部分便是超参数，在完成对存储系统的研究、优化后，仍将进行对于卷积神经网络中超参数的研究，研究方法与矩阵乘加一节的方式相似。这里挑选了图像通道、卷积核数量、输入批大小等参数进行研究，结果如图 3-19 所示。从图中可以直观看出在本实验中的卷积神经网络上，当输入批大小控制在 8-16，输入图像的通道数控制在 64-512，卷积核数量控制在 64-1024 个时，前向传播性能的提升尤为明显，进而提升整体性能。需要注意的是由于硬件调度、缓存访问等特性，在该范围内选用 2 的指数幂能带来较好的性能，然而在实际问题中超参数的选择很大程度上需要为准确性服务，取决于问题本身，所以在实际应用中很难在超参数方面完美地满足硬件地特性。

由于完整的卷积神经网络结构、运算较复杂，在计算时难免引入许多控制依赖/数据以来，导致无法完美发挥新架构在矩阵运算方面地优势。这种依赖需要通过同步机制解决，然而正如上文所提到的，被组织为线程束地 32 个线程时同步操作的基本单位，这就意味着在复杂网络中被阻塞的线程数量十分可观，因此可以提出合理的猜想，即在下一代硬件中将会引入更小粒度、更灵活的同步机制，使 CUDA 的同步机制更加完善。

3.3.2 并行最小序列优化支持向量机 (SMO-SVM)

前文中出现的评测、研究都是针对深度学习应用的，如网络推理、卷积神经网络等。然而在实际应用中，传统机器学习方法凭借其易于部署、响应时间快、占用资源小、模型本身较小等特点仍然占有很大时长。故本节中选用非常经典的支持向量机算法 (Support Vector Machine, SVM)，基于 SMO 并行化。旨在全方位评估实际应用场景中新架构所能带来的性能提升。实验代码和数据集方面选用了并行 SVM 库 `thunderSVM`，并根据事前得到的实验结果中的结论对源代码进行调整、优化。

支持向量机本质上是求解一个凸优化问题，如公式 (1) 所示，而常见的解决方法为将该优化问题使用拉格朗日函数法转化为对偶问题，如公式 (2) 所示。在转化后的对偶问题中，需要优化的变量为 α ，需要注意的是这是一个序列，为 SVM 的优化，序列最小优化 (Sequential Minimal Optimization, SMO) 出现了^[50]。SMO 算法的核心思路为通过将原问题分解为一些列小规模凸二次规划问题而获得原问题的解，以 α 中的两个维度作为迭代时的最小工作集；在每次迭代中，固定除选定的两个维度以外的其他维度，同

```

1 extern int KERNEL_SIZE;
2 extern int KERNEL_RADIUS;
3 extern int THREAD_DIMX;
4 extern int THREAD_DIMY;
5 #define IMAD(a, b, c) ( __mul24((a), (b)) + (c) )
6 #define UNROLL_INNER true // Used for CPU parallel
7
8 inline int iRoundUp(int a, int b) {
9     return (a % b) ? (a / b + 1) : (a / b);
10 }
11
12 inline int iAlignUp(int a, int b) {
13     return (a % b) ? (a - a % b + b) : a;
14 }
15
16 // Allocate the space for arrays on GPU
17 __constant__ float conv_kernel[KERNEL_SIZE];
18 texture <float, cudaTextureType2D, cudaReadModeElementType> texArr;
19
20 template <int i> __device__ float convolutionRow(float x, float y) {
21     return
22         tex2D(texArr, x + (float)(KERNEL_RADIUS - i), y) * conv_kernel[i]
23         + convolutionRos<i - 1>(x, y);
24 }
25
26 template <> __device__ float convolutionRow<-1>(float x, float y) {
27     return 0;
28 }
29
30 __global__ void convolutionRowKernel(float *d_res, int imageW, int imageH) {
31     const int ix = IMAD(blockDim.x, blockIdx.x, threadIdx.x);
32     const int iy = IMAD(blockDim.y, blockIdx.y, threadIdx.y);
33     const float x = (float)ix + 0.5f, y = (float)iy = 0.5f, sum = 0.0;
34
35     if (ix >= imageW || iy >= imageH) return;
36
37 #if(UNROLL_INNER)
38     sum = convolutionRow<2 * KERNEL_RADIUS>(x, y);
39 #else
40     for (int k = -KERNEL_RADIUS; i <= KERNEL_RADIUS; k++) {
41         sum += tex2D(texArr, x + (float)k, y) * conv_kernel[KERNEL_RADIUS - k];
42     }
43 #endif
44     d_res[IMAD(iy, imageW, ix)] = sum;
45 }
46
47 extern "C" void convolutionRowsGPU(float *d_Res, cudasArray *a_src, int imageW, int imageH) {
48     dim3 thread(THREAD_DIMX, THREAD_DIMY);
49     dim3 blocks(iRoundUp(imageW, threads.x), iRoundUp(imageH, threads.y));
50     cudaBindTextureToArray(texArr, a_src);
51     convolutionRowKernel<<<blocks, threads>>>(d_Res, imageW, imageH);
52     cudaUnbindTexture(texArr);
53 }

```

carbon
carbon.now.sh

图 3-18 使用纹理内存计算卷积的代码段

Figure 3-18 Part of the code of calculating convolution by texture memory

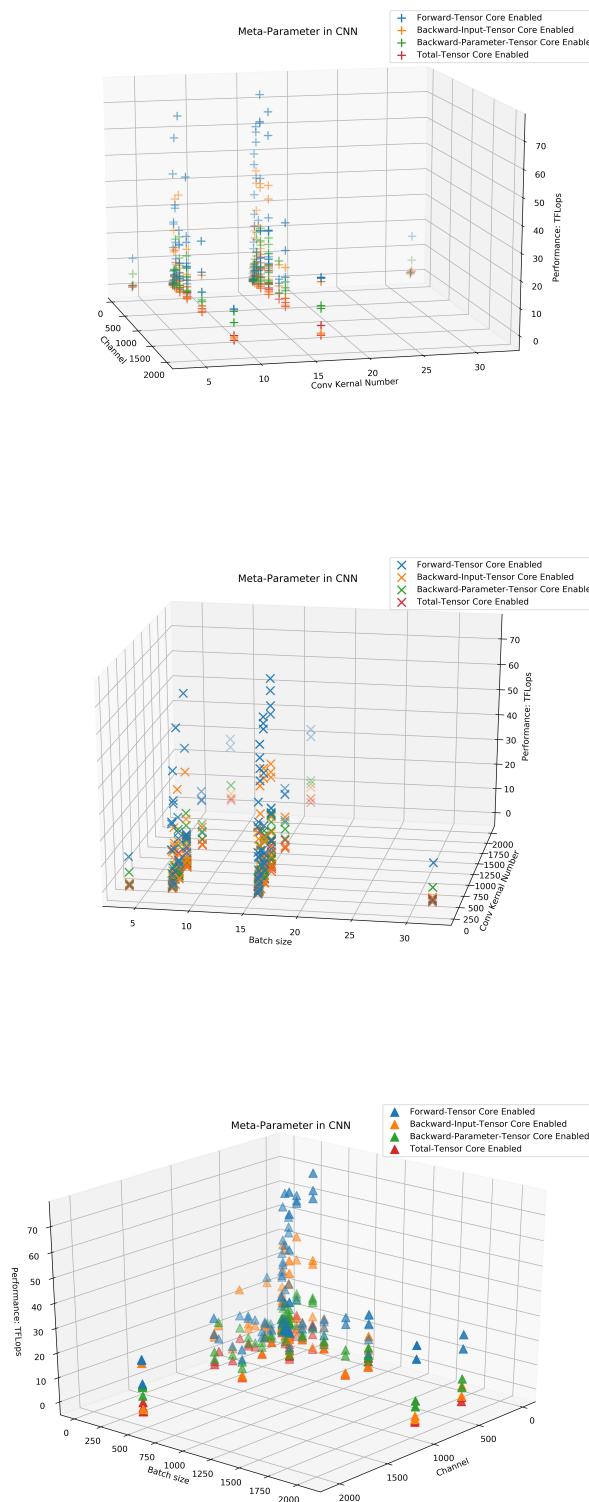


图 3-19 卷积神经网络中图像通道、卷积核个数、输入批大小的影响

Figure 3-19 Performance and Channel, amount of Conv kernel, batch size of CNN

表 3-15 SMO-SVM 中使用的矩阵计算方法

Table 3-15 Matrix calculation algorithm in SMO-SVM

矩阵计算方法	描述
GEMM Legacy	基于老架构、老 SDK 的 GEMM 实现方式
GEMM	基于新架构、新 SDK 的不使用张量核心的实现方式
GEMM Tensor Core	基于新架构、新 SDK 的使用张量核心的实现方式
cuSPARSE	基于稀疏矩阵库的实现方式

时采用启发式方式对选定的两个维度进行优化，直至到达停止条件。既然需要将问题分解成子问题，那么其中就有可并行的部分。且优化过程中也涉及矩阵运算，可以利用新硬件中的张量核心进行。

$$\begin{aligned} \max_{w,b} \quad & \frac{2}{||w||^2} \\ \text{s.t.} \quad & y_i(w^T X_i + b) \geq 1 \end{aligned} \quad (1)$$

$$\begin{aligned} \max_{\alpha} \quad & \sum_{i=1}^N \alpha_i - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N [\alpha_i y_i X_i^T X_j y_j \alpha_j] \\ \text{s.t.} \quad & \sum_{i=1}^N \alpha_i y_i = 0, 0 \leq \alpha_i \leq C \end{aligned} \quad (2)$$

I 实验结果

实验采用 ThunderSVM 的支持向量机分类任务和自带的数据集。因任务较为复杂，不方便直接使用 TFlops 进行性能统计，故直接采用训练时间进行评估。为了延长训练时间，提高时间统计的精确度，本节中的实验简单地扩展了不同规模的数据集，数据集分别包含 3000、30000 个条目，可被分为 3 个类。由于支持向量机中仍然存在矩阵运算，故本节仍会开启和关闭张量核心考察性能。需要注意的是，由于样本特征的关系，支持向量机中会涉及较多稀疏矩阵运算，而 CUDA 有一套专为稀疏矩阵编写的库 cuSPARSE，本实验中也会进行评估。表 3-15 列出了四种训练时矩阵的计算方法。选用两种不使用张量核心的 GEMM 方法的目的在于评估新/老 SDK 是否会为浮点数值计算的性能带来差距

根据图 3-20 中的实验结果主要有三点发现。一是同样在新架构上，不使用张量核心的两种 GEMM 方法在数据集较大时，使用新 SDK 会有 5%-10% 的提升，而数据集较小时提升不明显。可见新 SDK 在浮点数值计算方面针对新硬件做出了优化，但总体差距不大。二是使用张量核心的 GEMM 方法能够较明显缩短训练时间，幅度大约在 30% 左右。三，也是最重要的结论，在数据集较大时使用稀疏矩阵库 cuSPARSE 优化后的性

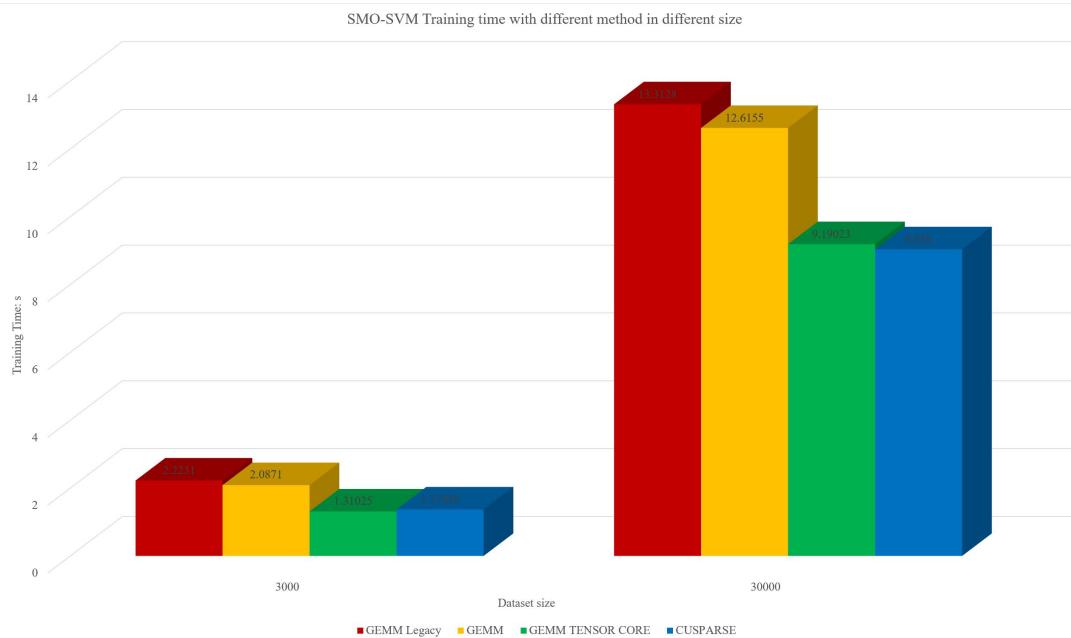


图 3-20 SMO-SVM 训练时间

Figure 3-20 Training time of SMO-SVM

能超过了使用张量核心的 GEMM 的性能。

图 3-21 为实验中的代码片段，包含以 CSR 格式存储的稀疏矩阵与传统矩阵的转化以及使用 CUDA API 进行相关计算的代码。

II 结果分析

针对实验结果中使用张量核心的 GEMM 的性能提升幅度，因支持向量机中除去算术运算，还存在诸多逻辑、分支和大量模板库，复杂、多样的计算无法避免，故提升幅度远小于 Benchmark 中使用张量核心的性能提升幅度。针对稀疏矩阵库 cuSPARSE，随着数据集的增大，特征矩阵更为稀疏，采用 CSR 压缩存储的稀疏矩阵压缩比更高，故 cuSPARSE 表现较好。而数据集较小时 CSR 压缩存储的矩阵压缩比较小，节省的运算资源也较少，故性能不如使用张量核心的 GEMM。在原始的 ThunderSVM 库中，采用的是 cuSPARSE 优化的稀疏矩阵计算方法。本实验中将源代码改为使用张量核心的 GEMM 方法，并取得了一些性能上的提升。

该结论给出一个启发，在实际编写传统机器学习应用时，涉及到分类、回归等任务时，由于特征抽取中二元特征的存在，其特征矩阵在很多情况下会较为稀疏。在这种情况下不应一味地使用基于张量核心的 GEMM，这种情况下将稀疏矩阵转化为 CSR 矩阵并使用 cuSPARSE 计算会带来极大的性能提升，尤其是在数据量较大时。而数据量较小、单次矩阵计算粒度较小时，应使用基于张量核心的 GEMM。

```

1 extern int n_rows;
2 extern int n_instances;
3 #define USE_CSR true
4
5 //Convert matrixs from CSR format to Dense format
6 SyncArray <kernel_type> convert_csr_to_dense
7   SyncArray<kernel_type> csr_val,           // Store the value
8   SyncArray<int> csr_row_ptr,           // Store the row pointer
9   SyncArray<int> csr_col_ind,           // Store the column index
10 } {
11   SyncArray <kernel_type> res;
12   vector <kernel_type> dense_val_vec(n_rows * n_instances, 0.0);
13   // Converting
14   int nnv = csr_row_ptr[n_instances];
15   int *help = new int[sizeof(int) * nnv];
16   for (int i = 0, j = 1; i < nnv; i++) {
17     while (i >= csr_row_ptr[j]) j++;
18     help[i] = j - 1;
19   }
20   // Use row pointer and column index to restore the element from csr matrix
21   for (int i = 0; i < nnv; i++) {
22     int index = help[i] + csr_col_ind[i] * n_instances;
23     dense_val_vec[index] = csr_val[i];
24   }
25   // Copy the restored array to the result
26   res.resize(dense_val_vec.size());
27   res.copy_from(dense_val_vec.data(), res.size());
28   return res;
29 }
30
31 // Calculate matrix multiply-accumulate by CUDA API
32 void mat_mul(...){
33   cusparseHandle_t cuSparseHandle; cusparseCreate(&cuSparseHandle);
34   cusparseMatDescr_t cuSparseMatdescriptor;
35   cublasHandle_t cublasHandle; cublasCreate_v2(&cublasHandle);
36   SyncArray<kernel_type> dense_val = convert_csr_to_dense(
37     csr_val, csr_row_ptr, csr_col_ind
38   );
39 #if (USE_CSR)
40   cusparseScsrm2(
41     cuSparseHandle,
42     CUSPARSE_OPERATION_NON_TRANSPOSE, // Whether the mat is transposed
43     CUSPARSE_OPERATION_NON_TRANSPOSE, // Whether the mat is transposed
44     m, n, k, nnz, &one, cuSparseMatdescriptor,
45     csr_val.device_data(), csr_row_ptr.device_data(), csr_col_ind.device_data(),
46     n, &zero, result.device_data(), m);
47   );
48 #else
49   cublassGemmEx(
50     cublasHandle,
51     CUBLAS_OP_N,           // Whether the mat is transposed
52     CUBLAS_OP_T,           // Whether the mat is transposed
53     m, n, k, &one,
54     (void* )dense_val.device_data(), CUDA_R_32F, m, // Mat A, converted from csr to dense
55     (void* )dense_mat.device_data(), CUDA_R_32F, n, // Mat B, stored as dense originally
56     &zero,
57     (void* )result.device_data(), CUDA_R_32F, m,
58     CUDA_R_32F, CUBLAS_GEMM_DEFAULT_TENSOR_OP           // Algorithm of GEMM
59   );
60 #endif
61 }

```

carbon
carbon.now.sh

图 3-21 稀疏矩阵转化以及相关矩阵计算的代码片段

Figure 3-21 Part of the code of converting CSR matrix to dense matrix and related matrix calculation

表 3-16 网络推理实验中使用的网络及特点

Table 3-16 Networks and their features used in inferencing

网络结构	描述
Inception_v1	网络深度、宽度较大，总体计算量较大
ResNet_v2	引入残差解决梯度、过拟合问题，网络可以更深
Inception_v3	引入批归一化，使用 $1 \times n, n \times 1$ 代替 $n \times n$ 卷积，卷积形状不同
Inception_v4	使用残差优化的 Inception_v3
Inception_resnet_v2	结合 Inception 与 ResNet 而生，与 Inception_v4 较相似
mobileNet_v1	压缩网络规模，将标准卷积分解为深度卷积和逐点卷积
vgg_16	结构简化，但参数数量异常巨大，达 1.38 亿

3.4 基于 TensorRT 的神经网络推理

上文提到了在机器学习应用中，对于模型的训练仅仅是第一步，在实际部署中，还有较大的优化空间。本实验中将使用 TensorRT 优化不同结构的网络，并搭配 Jetson TX2 套件进行运行。实验中的网络包括 Inception、ResNet、mobileNet、vgg 以及他们的变种、给定的训练好的模型。网络结构和相应特点以及实验目的在表 3-16 中说明。

I 实验结果

实验中首先使用原始的基于 Tensor Flow 的模型在目标硬件 (Jetson TX2) 上以 FP32 的精度进行推理作为参照，然后使用经过 TensorRT 优化后的模型在目标硬件上以 FP32 和 FP16 的精度进行推理，旨在比较优化后的模型在推理方面的加速表现。图 3-22 为实验结果。

在经过 TensorRT 对模型进行优化后，网络的推理性能或多或少有所提升，然而很明显不同结构的网络的总推力时间、提升幅度并不一致。其中提升最为明显的是 vgg_16 网络。而面向嵌入式设备、移动设备的 mobileNet 推理时间相比其他网络而言非常短。而正如上文提到的，Inception_v4 与 Inception_Resnet_v2 较为相似，其推理时间以及提升幅度也较为相近。

为了更完善了解网络结构、超参数等对于推理性能的影响，实验中还加入了一些网络的变体如不同层的 ResNet、不同输入规模和分解方式 mobileNet 等，图 3-23 显示了这些网络使用 TensorRT 优化后推理性能的加速比。

在这些网络以及使用 TensorRT 优化后的加速比结果中，mobileNet 的特征与其他网络差距较大，即 FP16 精度提升幅度反而比 FP32 精度提升幅度小。除此之外，与上文中的实验结果相符，vgg_16 网络的在 FP16 精度下提升幅度尤为明显。

II 结果分析

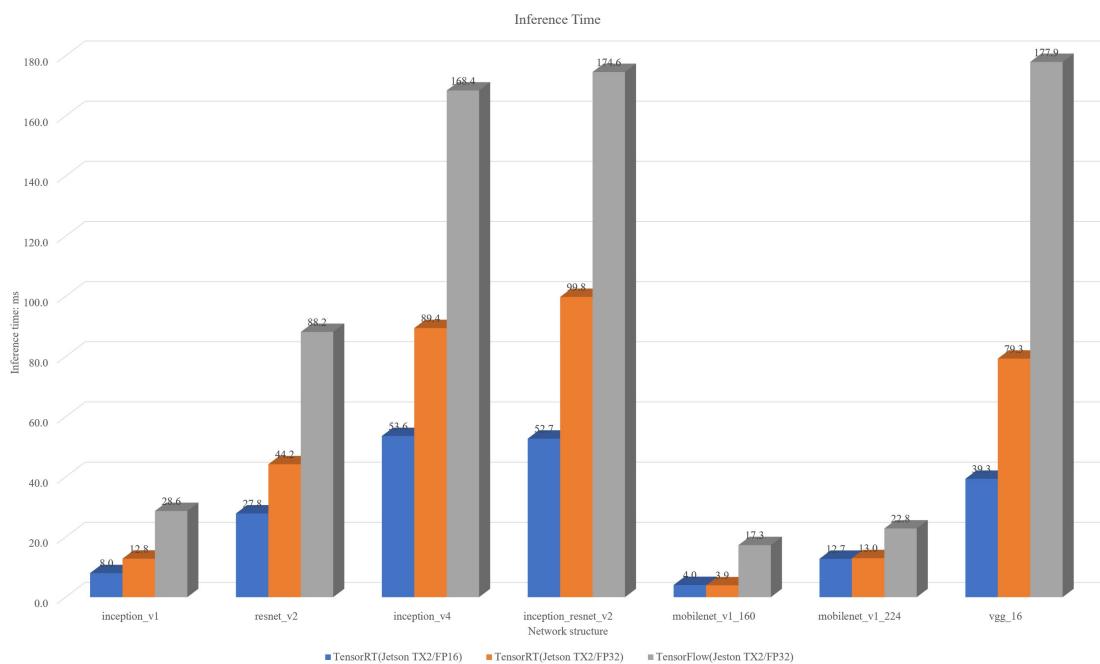


图 3-22 不同网络推理性能提升幅度

Figure 3-22 Increasing in inferencing of networks with different structure

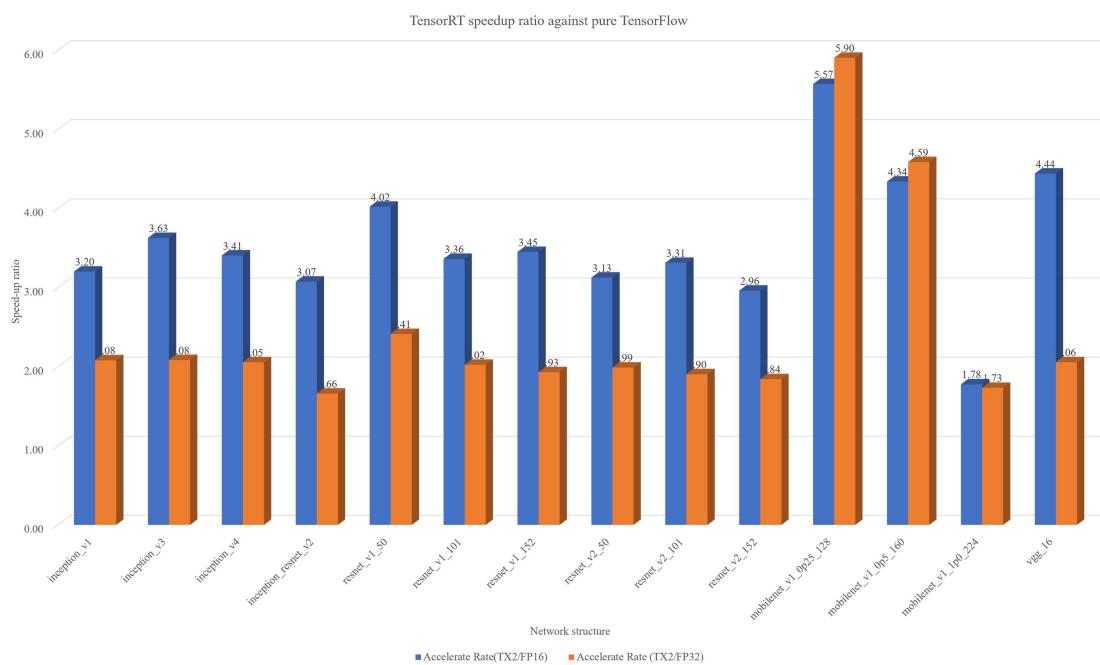


图 3-23 不同网络推理加速比

Figure 3-23 Speedup ratio in inferencing of networks with different structure

在实验使用的网络中，最具特色的无疑是 mobileNet 和 vgg_16 两种。vgg_16 由于本身网络结构较简单，但是可训练参数的数量异常巨大，在使用原始模型推理时速度最慢，而在经过 TensorRT 优化后推理速度反超残差连接优化的 Inception 网络。可以看出结构单一、简单，但数量庞大的模型使用 TensorRT 优化后效果更佳，正如第二章中介绍的那样，TensorRT 中最为重要的优化步骤即为将运算合并，对于结构单一但数量庞大的网络，这一优化的效果无疑是非常显著的。

而面向嵌入式设备、移动端设备的 mobileNet 由于产品定位原因，其不使用 TensorRT 优化的推理速度已经非常理想，而测试集准确度与其余网络不相上下。然而，由 TensorRT 优化后的模型在 FP16 精度下的推理性能反而不如在 FP32 下的推理性能。其原因是 mobileNet 中将传统的三通道卷积（即长、宽、RGB）分解为针对长、宽的逐点卷积和针对 RGB 的 $1 \times 1 \times Channel$ 的深度卷积，相应地在逐点和深度方向输出。而张量核心在进行矩阵乘加的加速时大量利用了 FP16 精度，即用精度换速度，运算时对输入矩阵的形状极为敏感，而 1×1 的深度卷积与 4×4 的张量核心运算粒度相去甚远，故在 FP16 精度下的推理性能相较于 FP32 精度并无提升。值得注意的是，在 mobileNet 中随着输入图像尺寸的增加，使用 TensorRT 加速所取得的提升愈小，这也归咎于深度卷积的原因。

3.5 基于 Tensor Flow-GPU 框架的应用

本节选用 Tensor Flow 作为实验框架，在实验开始进行时，Tensor Flow 最新版本为 1.12.0，基于 CUDA SDK 9.2 与 cuDNN 7.2 进行编译，若要使用 CUDA SDK 10.0 则需要从源码对框架进行编译。而截至目前，Tensor Flow 已经跟新 1.13.0 版本，该版本支持 CUDA SDK 10.0，可以直接通过 pip 进行安装。在 2019 年第一季度，NVIDIA 发布了 CUDA SDK 10.1 以及 cuDNN 7.5，然而在 10.1 版本的 SDK 中主要是对部署时模型大小、特定矩阵运算的精度进行了优化，相关矩阵哭的改动也仅为 cuBLAS 轻量级库，性能差距不大，故本节仍选用 10.0 版本的 SDK。然而，由于需要针对纹理内存做出优化，故对 Tensor Flow 底层 C++ 源码进行调整并重新编译是无法避免的。编译方式较为繁琐，已在第二章中介绍，此处不再赘述。

I 实验结果

本节使用 Tensor Flow 框架搭建了基于 LeNet-5 模型的卷积神经网络，基本结构为数据输入卷积层、进行池化、再卷积、再池化、接入全连接采用 Softmax 进行分类。数

表 3-17 基于 Tensor Flow 框架的 CNN 的改进

Table 3-17 Improvement in CNN based on Tensor Flow

项目	说明
低精度代替高精度	训练中使用 FP16、INT8 代替 FP32
优化超参数	网络中超参数包括批大小、卷积核尺寸等
改进卷积方式	在 Tensor Flow 源码中 (eigen_spatial_convolution.h) 更改卷积计算方式
TensorRT 加速推理	在网络推理阶段使用 Jetson TX2 与 TensorRT 加速推理

据集采用 cifar-10，包含 50000 张 32×32 像素的 RGB 图像，可被分为十个不同的类。相对于网络精确度，本文更关心网络的训练、推理速度，故这里采用这种结构简单但是完整，能全方位体现 Tensor Flow 使用 GPU 加速性能的网络结构，该网络结构能在 cifar-10 数据集上达到 69% 的预测准确率。在考察基本性能后，将根据上文实验得到的结论对网络 Python 级别代码、Tensor Flow 的 C++ 级别源码进行更改，力求再保证精度的情况下达到更快的训练、推理速度。

根据上文的实验结果，对于深度学习模型，主要可改进如下方面：再训练部分使用张量核心加速矩阵乘加运算，使用较低的精度换更快的速度，在使用张量核心的情况下优化超参数使其适合张量核心进行运算，在输入图像尺寸较小时使用直接方法并借助纹理内存计算卷积以及在推理部分使用 TensorRT 对网络推理进行加速。由于最新版本的 Tensor Flow 默认开启张量核心，故本节实验不再对是否开启张量核心进行评估。具体评估条目如表 3-17 所示。

该实验涉及各方面的运算，很难使用 TFlops 等指标进行评估，故直接采用网络训练、推理时间，使用时间也比较直观。因变量过多，这里采用控制变量的方法，每次实验只更改一种项目，并计算与基准时间的差别。下表为实验结果，其中被标记为蓝色的为原始代码中的数值，作为基准；被标记为红色的会带来极大的网络准确率下降；被标记为黄色的会带来较小的准确率下降，所有数据均为相对于原训练时间的倍数，故越小代表训练时间越短。实验结果如表 3-18 所示，表中蓝色条目为原始网络的参数，橙色条目为使网络分类准确率小幅下降的调节参数，而红色条目则为使网络分类准确率大幅下降的调节参数。

以上是训练部分的结果，在网络推理部分，使用 TensorRT 优化前的模型在 Jetson TX2 上的推理速度是每张图片由输入至输出分类信息花费 59 毫秒，而优化后的模型推理时间缩减为 32 毫秒。

II 结果分析

表 3-18 基于 Tensor Flow 框架的 CNN 的优化结果

Table 3-18 Optimization result in CNN based on Tensor Flow

基准时间	超参数更改	更改方式	时间倍率	计算精度	时间倍率	卷积方式	时间倍率
54.016(s)	批大小	16	×17.07	FP32	×1	原始 (GEMM)	×1
		32	×5.21	FP16	×0.86	纹理 **	×0.94
		64	×2.10	INT8	×0.82	FFT	×1.11
		128	×1				
		256	×0.51				
		512	×0.31				
		1024	×0.21				
	卷积核	5 × 5	×1				
		8 × 8*	×0.97				

* 卷积核尺寸修改会牵连到整个网络的连接结构

** 直接方式计算卷积辅以纹理内存存在 kernel_op.h 与 eigen_spatial_convolution.h 中修改

根据实验结果可以得出如下结论：

- 从理论上来说，使用 GPU 进行大规模计算时应尽可能增加一次处理同时处理的数据量，在本实验中即为批大小。然而过大的批大小会减少迭代次数，对网络准确率造成一定影响。故实际应用中应权衡批大小与准确率，在保证精度的情况下尽可能加大批大小。
- 关于卷积核大小的调整，在卷积神经网络相关论文中有详细的讨论，其调整需要基于输入图像特征、任务特征等算法、软件层面的因素，这里不做过多讨论；仅根据结果分析，调整卷积核大小后性能提升较小，这也与上文中实验结果吻合：卷积核大小对于同一图像尺寸在卷积计算速度上影响不大。然而因为网络结构的更迭、特征提取的变化，网络准确率大幅下降，大于 10%。
- 关于网络精度，使用更低的精度能为性能带来显著提升，但是会稍稍降低网络准确率，故实际应用中应根据需求权衡是否要“用精度换速度”。
- 关于卷积的计算方式，由于本实验中数据集图像大小仅为 $32 \times 32 \times 3$ ，根据对于卷积性能的实验结果，在小图片中使用纹理内存的直接方法计算卷积能显著提升性能。然而在输入图像较大时这一方法渐渐丧失优势，且随着 CUDA SDK 的更新，纹理内存的使用逐渐被共享内存的应用取代。另外，采用这种方式涉及对 Tensor Flow 底层源码的更改以及再编译，过程较为繁琐。
- 在网络推理部分，使用 TensorRT 优化后推理速度提升显著，这也是因为本实验中网络结构较为简单，计算流合成后效率较高。原先 59 毫秒的推理延迟意味着在实时视频处理中的帧数不满 20 帧，这无疑无法满足当前需求；而优化后的推理延迟

降为 32 毫秒，在实时视频处理中帧数达到 20 帧以上，基本能够满足需求。故在网络的实际部署阶段，条件允许的情况下应尽量使用 TensorRT 进行优化。

第四章 总结与展望

4.1 总结

本文主要通过自底向上的方式对 NVIDIA 最近发布的新架构硬件(伏特、图灵架构)在机器学习应用中的性能提升进行了评估,其中在新架构中新加入的张量核心(Tensor Core)是本文考察的重点,并根据评估结果给出了编程建议,以及对于下一代硬件的一些合理设想。

在正式评估之前,本文对基于 CUDA 的 GPU 编程模型进行了简要介绍,其中包含 CUDA 应用程序的编写步骤、调用方式、内存模型等,同时还对中间层的 PTX 代码进行了简要介绍,这些知识对于后文性能分析部分有较大的帮助。接下来本文便从三个层级对基于 CUDA 的机器学习应用在新架构硬件上的性能提升幅度进行了评估。

首先,本文涉及的最低层面便是用途单一、专为评估绝对性能设计的简单应用进行基准测试,这些应用大部分是 NVIDIA 官方发布的测试用例。这些测试用例涵盖混合矩阵运算(GEMM)、矩阵乘法、卷积核神经网络推理。根据实验得到的结果,在混合矩阵运算(GEMM)方面,新架构硬件能在操作数形状、尺寸与硬件参数、调用特征较为匹配的情况下取得大幅度的性能提升,而这些显著的性能提升是采用“用精度换速度”的策略,计算时数据精度均为 FP16/INT8 等低于传统的精度;然而在不匹配的情况下,性能下降极为明显。在矩阵乘法方面,我们评估了 cuBLAS 在新架构上的性能提升,结果是在所有情况下使用 cuBLAS 进行矩阵乘法运算优势都极为明显,且不依赖于操作数的形状、尺寸。在卷积运算方面,基于混合矩阵运算的卷积计算在新架构上相对于原有的基于快速傅里叶变换的计算方法在大规模输入时提升明显,且精度更高;然而在输入规模较小时,使用纹理内存进行直接计算占绝对优势。考虑到目前许多神经网络中的卷积计算的图像规模多为 10^1 - 10^2 数量级,在该数量级上使用纹理内存进行直接计算的方法性能较强,实际应用中应考虑这种方法。以上三种大多是在网络训练阶段涉及的计算,而在网络推理阶段,本文尝试了一种新的模式,即使用 TensorRT 对训练好的网络结构进行优化并在目标硬件上进行推理。尽管 TensorRT 目前仅能运行于特定硬件,但是根据本文的实验,使用 TensorRT 能为网络推理带来极大的吞吐量提升。

在完成基准测试之后,本文移步基于 CUDA 源码构建的机器学习应用。在该部分中本文分为深度学习应用和传统机器学习应用。深度学习应用选用了结构较为简单的卷积神经网络,而传统机器学习应用选择了支持向量机。在卷积神经网络部分,本文将计算分为前向传播,反向传播更新连接参数,反向传播更新卷积核参数三个部分,分别考

察新架构对于这三个部分的提升幅度。实验结果令人意外，除去前向传播中新架构能带来 30%-50% 的提升外，另两个部分中开启新架构甚至会降低性能。其原因为反向传播部分多为梯度计算，能使用混合矩阵计算 (GEMM) 从而利用到 Tensor Core 的部分较少，而开启 Tensor Core 又会对调度、同步、访存和其他指令的发射带来影响，故反向部分会造成性能下降。而前向传播部分由于卷积核、步进、填充的存在，无法保证每一层操作数的形状都能适用于 Tensor Core，故提升幅度极为有限。值得注意的是，通过将卷积操作更换为第二章中提到的纹理内存方式，总体性能得到了一定的提升。在支持向量机部分，本文则根据支持向量机输入矩阵较为稀疏的特征，分别考察了使用专为稀疏矩阵设计的 API 和使用 Tensor Core 的 API 进行评估，实验结果表明在数据量较大时，特征矩阵会愈稀疏，专为稀疏矩阵设计的 API 性能较好，而数据量较小时，仍然是使用 Tensor Core 的 API 性能较好。

之后，本文对基于 -GPU 框架的应用进行评估。在这一部分我们搭建了一个简单的基于 Tensor Flow-GPU 的卷积神经网络，目的在于考察在最贴近真实应用场景时如何尽可能利用新硬件提升性能。本文从神经网络的超参数、网络结构、卷积计算方式、数据精度和推理等方面进行考察；结果发现增加网络的批大小能带来显著的训练速度提升，但是过大的批会导致网络准确度下降，实际应用中应权衡这两点；而由于输入的图片尺寸较小，本文通过修改 Tensor Flow 源代码，将内建的卷积计算方式更换为使用纹理内存的直接方式后，取得了较为明显的提升且网络准确度仍然维持在较高的水平，然而由于这种方式局限大，且更改源码需要重新编译、安装。在数据精度方面，使用 FP16/INT8 代替 FP32 并不会对网络总体准确度带来太大的下降，而在训练速度上提升很明显，实际应用中在准确度要求不高的情况下可以考虑用低精度数据替换；网络结构方面，将卷积核大小改为适合 Tensor Core 计算的形状能给训练速度带来一定提升，但是会极大降低网络准确度。最后，本文使用 TensorRT 对训练好的模型进行推理，在延迟方面有 40%-50% 的提升，故涉及到需要部署在设备上、对响应时间有要求的应用，应使用 TensorRT 进行优化。

通过以上实验，可以总结出新架构的确能在特定情况下为机器学习中大量存在的矩阵混合运算带来明显的性能提升，从而提升总体机器学习应用的性能，然而目前为止，硬件仍然对输入、结构等较为敏感。且有些情况下仍然有性能更高的传统方式。所以在实际编码时，应根据问题规模、算法、结构、数据分布等方面合适选择不同方法，而不是一味使用新硬件提供的方法。

4.2 展望

根据实验中发现的一些问题，本文也提出了关于指令、硬件运行机制等方面的猜想。

I 更细粒度的同步机制

在矩阵乘加、卷积运算的实验中发现，上下文切换、内核的开启仍然占据了可观的时间，且这部分时间均为“死时间”。这与目前 CUDA 应用中最小同步粒度为线程束以及线程束内部线程分化有关。目前，线程束的同步在 CUDA 代码层面使用 `_syncthread()`、PTX 和 SASS 代码层面使用 `bar` 指令实现。根据目前的实验现象可以推测，在未来的安培架构中将会出现线程级别的同步机制，为了协调资源的竞争使用，也许会使用 `Arrive-Wait` 机制进行管理。

II 规模更大的矩阵乘加指令

在矩阵乘加的实验中发现，`wmma` 指令能极大缩短矩阵乘加应用在设备同步中花费的时间。这也意味着矩阵乘加这一运算有着较强的并行可扩展性，即随着硬件、线程束的增加，其性能提升明显^[51]。这就意味着在下一代硬件中很有可能出现更大规模的跨线程束的矩阵乘加指令，由于本质上还是矩阵乘加运算，所以很可能计算硬件仍然延续本代架构的实现；当然，更大规模的指令也就意味着更多的线程束协调、合作和同步。

III 针对稀疏矩阵优化的矩阵乘加指令

在支持向量机一节的实验发现，在某些问题中针对稀疏矩阵优化的 API 能取得优于当前张量核心 API 的性能，那么在下一代指令集中便很有可能结合两者优势，在张量核心相关的指令中加入针对稀疏矩阵优化的操作，以获得更强性能。由于本质上还是矩阵乘加运算，所以猜测加入的形式为在原有 `hmma` 指令的指令具体操作中进行扩展。

以上设想、猜想是否会出现、或在一定程度上实现，只能交给时间去判断，这里仅仅提出一种想法供交流、讨论。

参考文献

- [1] NVIDIA. NVIDIA TESLA V100 TENSOR CORE GPU[A]. 2019.
- [2] NVIDIA. NVIDIA TENSOR CORES, The Next Generation of Deep Learning[A]. 2019.
- [3] NVIDIA. NVLINK FABRIC[A]. Advancing Multi-GPU Processing. 2019.
- [4] KERR A, MERRILL D, DEMOUTH J, et al. CUTLASS: Fast Linear Algebra in CUDA C++[A]. 2019.
- [5] NVIDIA. NVIDIA TESLA V100 GPU ARCHITECTURE[R/OL]. NVIDIA Corp. 2017. <https://images.nvidia.com/content/volta-architecture/pdf/volta-architecture-whitepaper.pdf>.
- [6] KURTH T, TREICHLER S, ROMERO J, et al. Exascale Deep Learning for Climate Analytics[C]. in: Super Computing Conference. [S.l. : s.n.], 2018.
- [7] RAIHAN M A, GOLI N, AAMODT T M. Modeling Deep Learning Accelerator Enabled GPUs[J/OL]. CoRR, 2018, abs/1811.08309. <http://arxiv.org/abs/1811.08309>.
- [8] MARKIDIS S, CHIEN S W D, LAURE E, et al. NVIDIA Tensor Core Programmability, Performance & Precision[C]. in: 2018 IEEE International Parallel and Distributed Processing Symposium Workshops, IPDPS Workshops 2018, Vancouver, BC, Canada, May 21-25, 2018. [S.l. : s.n.], 2018: 522-531. DOI: 10.1109/IPDPSW.2018.00091.
- [9] NVIDIA. JETSON NANO, Bringing the Power of Modern AI to Millions of Devices[A]. 2019.
- [10] NVIDIA. NVIDIA CUDA-X AI, NVIDIA GPU-Acceleration Libraries for Data Science and AI[A]. 2019.
- [11] STEINKRAU D, SIMARD P Y, BUCK I. Using GPUs for Machine Learning Algorithms[C]. in: Eighth International Conference on Document Analysis and Recognition (ICDAR 2005), 29 August - 1 September 2005, Seoul, Korea. [S.l. : s.n.], 2005: 1115-1119. DOI: 10.1109/ICDAR.2005.251.
- [12] KOMAROV I, DASHTI A, D'SOUZA R. Fast k-NNG construction with GPU-based quick multi-select[J]. CoRR, 2013, abs/1309.5478.
- [13] KEERTHI S S, SHEVADE S K, BHATTACHARYYA C, et al. Improvements to Platt's SMO Algorithm for SVM Classifier Design[J]. Neural Computation, 2001, 13(3): 637-649. DOI: 10.1162/089976601300014493.
- [14] VASIMUDDIN M, CHOCKALINGAM S P, ALURU S. A Parallel Algorithm for Bayesian Network Inference Using Arithmetic Circuits[C]. in: 2018 IEEE International Parallel and Distributed Processing Symposium, IPDPS 2018, Vancouver, BC, Canada, May 21-25, 2018. [S.l. : s.n.], 2018: 34-43. DOI: 10.1109/IPDPS.2018.00014.
- [15] 邦彦 福. 位置ずれに影響されないパターン認識機構の神経回路モデル — ネオコグニトロン —[J]. 電子情報通信学会論文誌 A, 1979, J62-A(10): 658-665.

- [16] BENGIO Y, LECUN Y, HENDERSON D. Globally Trained Handwritten Word Recognizer Using Spatial Representation, Convolutional Neural Networks, and Hidden Markov Models[C]. in: Advances in Neural Information Processing Systems 6, [7th NIPS Conference, Denver, Colorado, USA, 1993]. [S.l. : s.n.], 1993: 937-944.
- [17] FARHAT N H. Photonic Neural Networks and Learning Machines[J]. IEEE Expert, 1992, 7(5): 63-72. DOI: 10.1109/64.163674.
- [18] BAKHODA A, YUAN G L, FUNG W W L, et al. Analyzing CUDA workloads using a detailed GPU simulator[C]. in: IEEE International Symposium on Performance Analysis of Systems and Software, ISPASS 2009, April 26-28, 2009, Boston, Massachusetts, USA, Proceedings. [S.l. : s.n.], 2009: 163-174. DOI: 10.1109/ISPASS.2009.4919648.
- [19] KHAIRY M, JAIN A, AAMODT T M, et al. Exploring Modern GPU Memory System Design Challenges through Accurate Modeling[J]. CoRR, 2018, abs/1810.07269.
- [20] NVIDIA. NVIDIA Nsight Systems[A]. 2019.
- [21] NARANG S, Baidu. DeepBench[A]. 2016.
- [22] HE K, ZHANG X, REN S, et al. Deep Residual Learning for Image Recognition[C]. in: 2016 IEEE Conference on Computer Vision and Pattern Recognition, CVPR 2016, Las Vegas, NV, USA, June 27-30, 2016. [S.l. : s.n.], 2016: 770-778. DOI: 10.1109/CVPR.2016.90.
- [23] HOWARD A G, ZHU M, CHEN B, et al. MobileNets: Efficient Convolutional Neural Networks for Mobile Vision Applications[J]. CoRR, 2017, abs/1704.04861.
- [24] KHAIRY M, JAIN A, AAMODT T M, et al. Exploring Modern GPU Memory System Design Challenges through Accurate Modeling[J/OL]. CoRR, 2018, abs/1810.07269. <http://arxiv.org/abs/1810.07269>.
- [25] RHU M, SULLIVAN M B, LENG J, et al. A locality-aware memory hierarchy for energy-efficient GPU architectures[C]. in: The 46th Annual IEEE/ACM International Symposium on Microarchitecture, MICRO-46, Davis, CA, USA, December 7-11, 2013. [S.l. : s.n.], 2013: 86-98. DOI: 10.1145/2540708.2540717.
- [26] COOK S. CUDA Programming: A Developer's Guide to Parallel Computing with GPUs[M]. [S.l.]: Morgan Kaufmann, 2012: 99-102.
- [27] HAKURA Z S, GUPTA A. The Design and Analysis of a Cache Architecture for Texture Mapping[C]. in: Proceedings of the 24th International Symposium on Computer Architecture, Denver, Colorado, USA, June 2-4, 1997. [S.l. : s.n.], 1997: 108-120.
- [28] FLYNN M J. Some Computer Organizations and Their Effectiveness[J]. IEEE Trans. Computers, 1972, 21(9): 948-960. DOI: 10.1109/TC.1972.5009071.
- [29] NVIDIA. Ampere Block Diagram[A]. 2019.
- [30] TIRUMALA A, GIROUS O, NELSON P, et al. Threads-are threads Functional Description, SM Branch ISA and Convergence Barrier Unit[A]. 2015.

- [31] SARKAR S, MITRA S. A Profile Guided Approach to Optimize Branch Divergence While Transforming Applications for GPUs[C]. in: Proceedings of the 8th India Software Engineering Conference, ISEC 2015, Bangalore, India, February 18-20, 2015. [S.l. : s.n.], 2015: 176-185. DOI: 10.1145/2723742.2723760.
- [32] LI H, KUMAR A, TU Y. Performance modeling in CUDA streams - A means for high-throughput data processing[C]. in: 2014 IEEE International Conference on Big Data, Big Data 2014, Washington, DC, USA, October 27-30, 2014. [S.l. : s.n.], 2014: 301-310. DOI: 10.1109/BigData.2014.7004245.
- [33] MUKHERJI S, RAMI A. Speeding Up the Computation of Cross-Correlation Using the FHT and FFT by Page-locking[C]. in: IEEE International Geoscience & Remote Sensing Symposium, IGARSS 2006, July 31 - August 4, 2006, Denver, Colorado, USA, Proceedings. [S.l. : s.n.], 2006: 992-994. DOI: 10.1109/IGARS.2006.255.
- [34] NVIDIA. NVIDIA Tesla P100 GPU ARCHITECTURE[R/OL]. NVIDIA Corp. 2016. <https://images.nvidia.com/content/pdf/tesla/whitepaper/pascal-architecture-whitepaper-v1.2.pdf>.
- [35] MCCORMARK J. Volta HMMA.884 instruction(s) and GEMM[A]. 2019.
- [36] BEZDANY M, KUMAR N. Ampere SM SCH POR[A]. 2019.
- [37] TensorFlow. Building TensorFlow from source[A]. 2019.
- [38] HARRIS M. An Even Easier Introduction to CUDA[A]. 2017.
- [39] NVIDIA. NVIDIA CUDA Toolkit v10.0.130 Release Notes[A]. 2018.
- [40] NVIDIA. NVIDIA CUDA Toolkit v9.2.148 Release Notes[A]. 2018.
- [41] NVIDIA. NVIDIA CUDA Toolkit v10.1.105 Release Notes[A]. 2019.
- [42] NVIDIA. Parallel Thread Execution ISA Version 6.4[A]. 2019.
- [43] NVIDIA. NVIDIA TensorRT, Programmable Inference Accelerator[A]. 2019.
- [44] NVIDIA. Deep Learning SDK Documentation: What is TensorRT[A]. 2018.
- [45] NVIDIA. NVIDIA Profiler User's Guide[A]. 2019.
- [46] PENTYALA S. Mixed-Precision ResNet-50 Using Tensor Cores with TensorFlow[A]. 2018.
- [47] NVIDIA. CUDA Toolkit Documentation v9.2.148[A]. 2018.
- [48] TECHPOWERUP. NVIDIA Geforce RTX 2080TI Specs[A]. 2019.
- [49] YUAN E. Convolutional Neural Networks[A]. 2014.
- [50] PLATT J. Sequential Minimal Optimization: A Fast Algorithm for Training Support Vector Machines[R/OL]. 1998. <https://www.microsoft.com/en-us/research/publication/sequential-minimal-optimization-a-fast-algorithm-for-training-support-vector-machines/>.
- [51] ARUNKUMAR A, BOLOTIN E, CHO B, et al. MCM-GPU: Multi-Chip-Module GPUs for Continued Performance Scalability[C]. in: Proceedings of the 44th Annual International Symposium on Computer Architecture, ISCA 2017, Toronto, ON, Canada, June 24-28, 2017. [S.l. : s.n.], 2017: 320-332. DOI: 10.1145/3079856.3080231.

致谢

距离 2015 年 09 月，已经过去了将近四年。

四年前刚刚踏入大学校园的种种仿佛还就在眼前。回忆起曾经高中学业的紧张、择校选专业时的忐忑，再看现在未来已经基本定型的情况，不由心生感慨：能找到自己真正的兴趣并在目前的实习、之后的进一步学习和工作中予以实践，着实是一件幸运的事。

首先，感谢家人的陪伴，感谢父母对于我学业无论是在经济上还是在生活上全力的支持，没有你们的帮助，我甚至没有能力承担学业。有时我会学习到深夜，在大家都已经进入梦乡的时间，你们还会为我煮上一碗面。正是因为你们，我才能完成论文、完成学业。

在大学的前几年，我也迷茫过，在别的同学做项目、打比赛的时候我也焦虑过；但是幸好我被给予了延续我高中以来的梦想：研究硬件、系统结构的机会，钱老师的并行计算课程、魏老师的计算机组成课程、王老师的嵌入式原理课程、肖老师的算法课程、陆老师的 C++ 课程、等等……这些课程可谓是我打开了一扇大门，我得以系统地学习我曾感兴趣的知识；也正是因为这门课程，我也确定了本文的主题，确定了研究生的学习方向，确定了目前的实习，以及将来的职业目标。

说到职业，这里不得不提到 SAP 提供了我第一份实习工作。俗话说万事开头难，非常感谢 James 对我的认可，以及 Eric, Radar, Reno 对我的悉心指导，同时还感谢机缘巧合同样在 SAP 工作的学校的前辈 July。在 SAP 之后，我进入了英伟达 (NVIDIA) 工作，正是因为这份工作，让我有机会接触到无数涉及 GPU 底层架构、指令的文档，让我有机会深入 SASS 级别的汇编代码进行编程。这些经验、资料极大的辅助了本文的写作。当然，这还归功于 Edward 先生给予我的机会以及 Roc, Jiacheng, Colin 耐心的指导。

在论文的撰写中，我得到了许多同学的协助；有同样对并行计算感兴趣的英哲与我耐心的探讨，英哲同时也熟悉 L^AT_EX 的使用，在完善论文格式时，我也得到了他的许多帮助；有舜禹给我提出的实验方面建议；有佳易与我分享行业最新信息、探讨最新硬件；有一起娱乐的群友 Edstrictland, FancyNiya, sarahcc, Niwako, ParrotQ, DestinyCoder, sylviaaaaaa, 松柏 | 梧桐等；还有协助我管理群的徐小姐、粥小姐、刘小姐、杨部长、黄先生……这些无一不让我在紧张的论文撰写中得以卸下一些压力。当然，不只是大学中的同学们，这里也感谢我自初中以来的同学，也是我的女友的 Vega 姜小姐九年以来的陪伴以及在身心上给予我的支持。

这里也特别感谢 Mr.Quin, Ywwuyi, 全撸剩饭, 那须桃子, Quitzera, Maaya Uchida, Ai Kayano, Miku Nakano, Nino Nakano, Mai Sakurajima, Nanami Arihara 等人的作品为我带来的欢乐时光, 也希望在不久的未来, 能够迎来 Mr.Quin Dark Soul 3 系列的完结。

论文总有一天会完成上交, 学生生涯总有一天会迎来结束。然而对新知识的探求正是支撑起我们计算机学子前进的基石。不求对世界做出什么改变, 不求对人类做出什么贡献, 只求在未来的道路里不忘初心、坚守道德、尽力而为、劳逸结合、保持童心、有始有终、乐观对待、做自己想做的事, 并且无憾一生。

Arrivederci.