Super aceleração de algoritmos usando GPUs de última geração

Dr. Mário Gazziro¹

mario.gazziro@ufabc.edu.br

Monitores: Daniel M. Lima² e Eduardo M. Real¹

 Universidade Federal do ABC - UFABC/Santo André-SP
 Universidade de São Paulo - ICMC-USP/São Carlos-SP https://github.com/mariogazziro/AutoML_GPU

15/05/2018

Resumo

Curso prático de elaboração de algoritmos acelerados para GPUs com arquitetura Pascal – será utilizada Titan XP com 3500 núcleos, porém a maioria das técnicas abordadas se aplicam a todas as classes de GPU da fabricante NVIDIA. Após introdução sobre análise do paralelismo de algoritmos, serão apresentados estudos de caso aplicados em ressonância magnética, além do processamento de grafos em escalas de bilhões. Em alguns dos casos apresentados a aceleração ultrapassa 30 vezes, e as técnicas apresentadas, como definição e ajuste fino da grade (GRID) de recursos, escolha dos tipos adequados de memória e técnicas para o escalonador de processos (WARP), podem ser facilmente adaptadas a outros problemas, logo os alunos inscritos são encorajados a trazer seus próprios problemas de pesquisa para paralelização em nossa oficina.

CV resumido

Mário Gazziro possui graduação e doutorado pela USP, com especializaçã na Toshiba Semiconductor, Kawasaki, Japão. Atualmente é Professor da Universidade Federal do ABC.

Glossário

- GPU ou GPGPU: Graphics Processing Unit
- Speed-Up
- Speed-Down
- CUDA
- Pascal arquitetura da placa de video Titan XP
- Tesla arquitetura da placa de processamento K20M (sem video)
- TFlops Teraflops: "Teraflop é uma unidade de poder de processamento, equivalente ao cálculo de um TRILHÃO de operações de ponto flutuante (IEEE 754) por segundo."

Introdução

- GPU (Graphics Processing Unit) [1, 2] é uma arquitetura a priori derivada do paradigma DATAFLOW [3], pesquisado na década de 80.
 - Ultrapassou o mercado de jogos, indo muito além da computação gráfica, sendo amplamente utilizada em computação científica e number-crunching.
 - Possui características diferentes de CPU.
- Em comparação com CPU, o crescimento do número de núcleos é geométrico, embora sejam núcleos relativamente mais simples.
 - ► Causalidade e Paralelismo (nem tudo pode ser paralelizado)
 - ▶ Lei de *Amdhal* [4] (determinação do máximo *speed-up* teórico com múltiplos processadores).
- Supercomputação para as massas (série de artigos da revista Dr. Dobbs).
 - ▶ Se bem explorado, o poder computacional pode chegar a TFlops.
 - ▶ Porém, um ajuste adequado do problema e da sua paralelização são vitais para bons *speed-ups*.

CPU x GPU

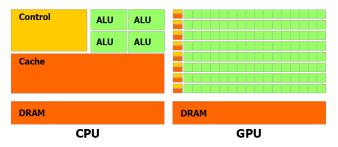


Figure: The GPU Devotes More Transistors to Data Processing [5]

- uma unidade de computação de GPU é muito mais simples que um moderno núcleo de CPU superescalar.
- uma unidade de computação de GPU não faz previsão de desvio.
- todos os núcleos da GPU executam as mesmas instruções, ao mesmo tempo, mas operam em dados diferentes (SIMD).
- um núcleo da CPU tem um cache grande, previsão de desvio e maior velocidade de clock.

CUDA

- Uma arquitetura de computação paralela de propósito geral.
 - um modelo de programação paralela e arquitetura de conjunto de instruções que aproveita o mecanismo de computação paralela nas GPUs NVIDIA para resolver muitos problemas computacionais complexos de uma maneira mais eficiente do que em uma CPU.
- O CUDA vem com um ambiente de software que permite aos desenvolvedores usar o C como uma linguagem de programação de alto nível.
 - ▶ Ideia de manter uma curva de aprendizado baixa para programadores familiarizados com linguagens de programação padrão, como C.

CUDA

Núcleo com 3 abstrações principais (como um conjunto mínimo de extensões de linguagem)

- Uma hierarquia de grupos de threads.
- Memórias compartilhadas.
- Sincronização de barreiras.

- Particionar o problema em subproblemas que podem ser resolvidos independentemente em paralelo por blocos de *threads*.
- Cada sub-problema são pequenas partes que podem ser resolvidas co-operativamente em paralelo por todos os *threads* dentro do bloco.

- host (CPU): executa a aplicação.
- device (GPU): executa kernels.
- host e device tem DRAMs próprias.
- host:
 - Aloca memória no device.
 - Transfere dados de entrada para o device.
 - Dispara a execução de kernels.
 - Transfere dados resultantes do device para o host.
 - Libera memória no device.
- Kernel: executa no device N vezes em N threads em paralelo.

- Threads são organizadas em blocos.
- Um bloco é um arranjo 1D, 2D ou 3D (índices) de threads.
- Blocos são organizados em grids.
- Um grid é um arranjo 1D ou 2D (índices) de blocos.
 - Os blocos de um grid têm o mesmo número de threads.
- Hierarquia de threads:
 - Threads.
 - Bloco de threads (blocks).
 - ► Grade de blocos (grid).







Modelo de Memória

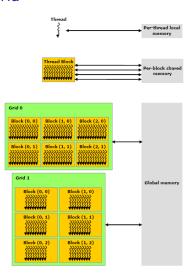


Figure: Memory Hierarchy [5]

Grid de 2 dimensões com bolcos de threads com 2 dimensões:

- Grid 2D com:
 - ▶ $3 \times 2 \times 1 = 6$ blocos
- Blocos 2D com:
 - ▶ $4 \times 3 \times 1 = 12$ threads cada um.

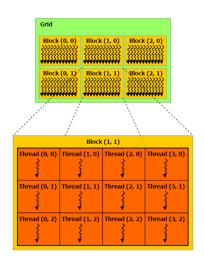
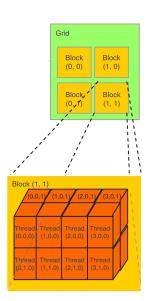


Figure: Grid of Thread Blocks [5]

Grid de 2 dimensões com blocos de threads com 3 dimensões:

- Grid 2D com:
 - \triangleright 2×2×1 = 4 blocos
- Blocos 3D com:
 - ► 4×2×2 = 16 threads cada um.



Identificação das threads

- Block
 - ► Thread (tx,ty,tz)
 - threadIdx.dim, i.e., (threadIdx.x, threadIdx.y, threadIdx.z)
- Grid
 - Block (bx,by,bz)
 - blockldx.dim, i.e., (blockldx.x, blockldx.y, blockldx.z)
- Gerações CUDA com diferentes números máximos de threads por bloco e de bloco por Grid.

Identificação das threads

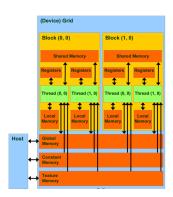
Especificação		Compute Capability					
Especificação	1.0	1.1	1.2	1.3	2.0	2.1	
Número de dimensões da grade de blocos	2			3			
Tam. máx. de cada dimensão na grade	65535						
Número de dimensões do bloco de threads	3						
Tam. máx. das dimensões x e y no bloco					1024		
Tam. máx. da dimensão z no bloco	64						
Núm. máx. threads no bloco		512				1024	

e.g.

- ▶ Block, (threadIdx.x, threadIdx.y, threadIdx.z):
 - Tam. máx. cada dim: (512, 512, 64); máx. threads = 512.
 - Tam. máx. cada dim: (1024, 1024, 64); máx. threads = 1024.
- Grid, (blockldx.x, blockldx.y):
 - Tam. máx. cada dim: (65535, 65535);
- Grid, (blockldx.x, blockldx.y, blockldx.z):
 - Tam. máx. cada dim: (65535, 65535, 65535);

Acesso da thread:

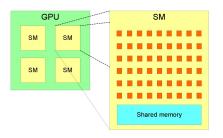
- compartilhada do bloco
 - Visível para todas e tempo de vida do bloco.
- local e registradores da thread.
- global, constante e leitura do Grid.



Tipo	Escopo	Acesso	Velocidade	Tempo de Vida
Registrador	Thread	R/W	Rápido	Kernel
Local	Thread	R/W	Lento	Kernel
Compartilhada	Bloco	R/W	Rápido	Kernel
Global	Grade	R/W	Lento	Aplicação
Constante	Grade	R/O	Rápido	Aplicação
Textura	Grade	R/O	Rápido	Aplicação

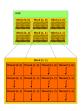
SM:

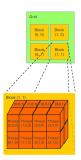
- 128 cores CUDA formam 1 Streaming Processor (Titan XP).
- 30 Streaming Multiprocessor por GPU (Titan XP).
- Número máximo de WARPs deve ser menor ou igual ao número de SMs.
- As threads são atribuídas aos SMs em blocos.



Mapeando o índice do thread no bloco:

- Threads podem ser identificados com índices de 1, 2 ou 3 dimensões (formando thread blocks de uma, duas ou três dimensões).
- Índice de uma thread:
 - Se for um bloco 1D: é a mesma coisa.
 - Se for um bloco 2D (D_x, D_y): threadId de um thread de índice (x, y) é x + yD_x.
 - Se for um bloco 3D (D_x, D_y, D_z): threadId de uma thread de índice (x, y, z) é x + yD_x + zD_xD_y.

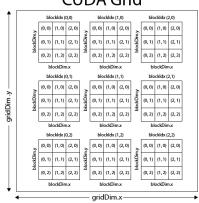




Mapeando o índice do thread:

- # elementos por dimensão: blockDim.x e blockDim.y
- id bloco: blockDim.x. blockDim.y
- Thread como uma matriz 2D: thread[idx][idy]

CUDA Grid



```
idx = (blockIdx.x * blockDim.x) + threadIdx.x;
idy = (blockldx.y * blockDim.y) + threadldx.y;
thread\_id = (gridDim.x * blockDim.x * idv) + idx;
```

CUDA Thread Indexing Cheatsheet

https://cs.calvin.edu/courses/cs/374/CUDA/CUDA-Thread-Indexing-Cheatsheet.pdf

 Para um código ser executado na GPU, é necessário fazer parte de uma função que é chamada de kernel, que será executada pela GPU de forma paralela.

```
Example (Kernel simples)
#include<stdio.h>
__global__ void mykernel (void){ //função kernel
printf("Oi GPU!\n");
}
int main(void){
  mykernel<<<1,1>>>(); //chamada para a função
  return 0;
}
```

```
Example (Soma de vetores)
#include <stdio.h>
__global__ void somavet(float *a, float *b, float *c){
   int id = (blockDim.x * blockIdx.x) + threadIdx.x;
   c[id] = a[id] + b[threadIdx.x];
int main(void){
  . . .
  somavet<<<nBlocos,nThreadsPorBloco>>>(gpu_a, gpu_b, gpu_c)
  . . .
}
```

 Supondo um vetor de N elementos, solicitando nBlocos na chamada do kernel, com nThreadsPorBloco cada um.

Example

```
int main(void){
  dim3 nThreadsPorBloco(3, 3);
  int nBlocos = 1;

  //invocando o kernel
  my_kernel<<<<nBlocos,nThreadsPorBloco>>>(a, b, c);
  ...
}
```

- Os parâmetros são utilizados em tempo de execução para organizar as suas threads. O "nBlocos" define a dimensão do grid e o "nthreadsPorBloco" define a dimensão do bloco.
 - Cada um pode ser declarado como int ou dim3.
 - ▶ No exemplo, a dimensão dos blocos ("nthreadsPorBloco") é definida como um arranjo de 3×3 threads. A dimensão do grid ("numBlocos") poderia ser definida de forma análoga, bem como utilizar uma terceira dimensão para qualquer um dos parâmetros.

Example (Soma de vetores, com N elementos cada um) __global__ void soma(float * a, float * b, float

```
__global__ void soma(float * a, float * b, float * c){
  int idx, idy, thread_idx;
  idx = blockIdx.x * blockDim.x + threadIdx.x;
  idy = blockIdx.y * blockDim.y + threadIdx.y;
  thread_idx = (gridDim.x * blockDim.x * idy) + idx;
  c[thread_idx] = a[thread_idx] + b[thread_idx];
}
int main(void){
  dim3 nThreadsPorBloco(threadx, thready);
  dim3 nBlocos(blocosx, blocosy);
  soma<<<nBlocos,nThreadsPorBloco>>>(gpu_a, gpu_b, gpu_c);
```

N = blocosx*blocosy*threadx*thready

Elementwise Matrix Addition

CPU Program

```
void add_matrix
  ( float* a, float* b, float* c, int N ) {
  int index;
  for ( int i = 0; i < N; ++i )
    for ( int j = 0; j < N; ++j ) {
      index = i + j + N;
      c[index] = a[index] + b[index];
    }
}
int main() {
  add_matrix( a, b, c, N );
}</pre>
```

CUDA Program

```
__global__ add_matrix
( float* a, float* b, float* c, int N ) {
   int i = blockIdx.x * blockDim.x + throadIdx.x;
   int j = blockIdx.y * blockDim.y + throadIdx.y;
   int index = i + j*N;
   if ( i < N && j < N )
        c[index] = a[index] + b[index];
}

int main() {
   dim3 dimBlock( blocksize, blocksize );
   dim3 dimGrid( M/dimBlock.x, M/dimBlock.y);
   add_matrix<<<dimGrid, dimBlock>>>( a, b, c, N );
```

Elementwise Matrix Addition

cpu Program void add_matrix (float* a, float* b, float* c, int N) { i* numex; for (int i = 0; i < N; ++i) for (int j = 0; j < N; ++j) { tadax = i + i*N; c[index] = a[index] + b[index]; } } int main() { add_matrix(a, b, c, N); }</pre>

Roteiro...

- Programa básico em C para CUDA:
 - Dispositivo a ser usado (cudaSetDevice());
 - Alocação de memória no host;
 - Dados de entrada na memória do host;
 - Alocação de memória no device (cudaMalloc());
 - Transferência de dados do host para device (cudaMemcpy());
 - Invocação do(s) kernel(s);
 - Transferência de dados do device para host;
 - Liberação de memória no host;
 - Liberação de memória no device (cudaFree()).

Exemplo:

```
#include <stdio.h>
#define threadx 8
#define thready 4
#define blocosx 2
#define blocosv 2
#define N
                 (blocosx*blocosv*threadx*threadv)
global void soma(float * a, float * b, float * c);
int main(void) {
 unsigned int tamanho bytes, i;
 float cpu a[N], cpu b[N], cpu c[N], *gpu a, *gpu b, *gpu c;
 dim3 nThreads(threadx, thready), nBlocos(blocosx, blocosy);
 //ler cpu a e cpu b
 /* alocando memoria na gpu */
 tamanho bytes = N * sizeof(float);
 cudaMalloc((void **) &gpu a, tamanho bytes);
 cudaMalloc((void **) &gpu_b, tamanho bytes);
 cudaMalloc((void **) &gpu c, tamanho bytes);
 /* Move os dados da CPU para GPU */
 cudaMemcpy(gpu a, cpu a, tamanho bytes, cudaMemcpyHostToDevice);
 cudaMemcpy(gpu b, cpu b, tamanho bytes, cudaMemcpyHostToDevice);
 soma<<<nBlocos,nThreads>>>(gpu a, gpu b, gpu c);
 /* Move os dados da CPU para GPU */
 cudaMemcpy(cpu c, qpu c, tamanho bytes, cudaMemcpyDeviceToHost);
//mostrar cpu c
 cudaFree(gpu a); cudaFree(gpu b); cudaFree(gpu c);
 return 0:
```

```
/* Kernel CUDA */
    _qlobal_ void soma(float * a, float * b, float * c){
    unsigned int idx, idy, thread_idx;

/* Coordenas de um thread dentro do grid */
    idx = blockIdx.x * blockDim.x + threadIdx.x;
    idy = blockIdx.y * blockDim.y + threadIdx.y;

/* identidicador de um thread com coordenasa idx e idy */
    thread_idx = (gridDim.x * blockDim.x * idy) + idx;
    c(thread_idx] = a[thread_idx] + b[thread_idx];
}
```

```
Device 0: "TITAN Xp"
  CUDA Driver Version / Runtime Version
                                                 9.1 / 9.1
  CUDA Capability Major/Minor version number:
                                                 6.1
  Total amount of global memory:
                                                 12196 MBytes (12788498432
bytes)
  (30) Multiprocessors, (128) CUDA Cores/MP:
                                                 3840 CUDA Cores
  GPU Max Clock rate:
                                                 1582 MHz (1.58 GHz)
  Memory Clock rate:
                                                 5705 Mhz
  Memory Bus Width:
                                                 384-bit
  L2 Cache Size:
                                                 3145728 bytes
  Maximum Texture Dimension Size (x,y,z)
                                                 1D=(131072), 2D=(131072,
65536), 3D=(16384, 16384, 16384)
  Maximum Layered 1D Texture Size, (num) layers 1D=(32768), 2048 layers
  Maximum Layered 2D Texture Size, (num) layers 2D=(32768, 32768), 2048 layers
  Total amount of constant memory:
                                                 65536 bytes
  Total amount of shared memory per block:
                                                 49152 bytes
  Total number of registers available per block: 65536
  Warp size:
                                                 32
  Maximum number of threads per multiprocessor:
                                                 2048
  Maximum number of threads per block:
                                                 1024
  Max dimension size of a thread block (x,y,z): (1024, 1024, 64)
  Max dimension size of a grid size (x,y,z): (2147483647, 65535, 65535)
  Maximum memory pitch:
                                                 2147483647 bytes
  Texture alignment:
                                                 512 bytes
  Concurrent copy and kernel execution:
                                                 Yes with 2 copy engine(s)
  Run time limit on kernels:
                                                 No
  Integrated GPU sharing Host Memory:
                                                 No
  Support host page-locked memory mapping:
                                                 Yes
  Alignment requirement for Surfaces:
                                                 Yes
  Device has ECC support:
                                                 Disabled
  Device supports Unified Addressing (UVA):
                                                 Yes
  Supports Cooperative Kernel Launch:
                                                 Yes
  Supports MultiDevice Co-op Kernel Launch:
                                                 Yes
  Device PCI Domain ID / Bus ID / location ID:
                                                 0 / 1 / 0
  Compute Mode:
     < Default (multiple host threads can use ::cudaSetDevice() with device
simultaneously) >
```

Exemplos

Apresentação dos estudos de caso. Códigos disponíveis em: https://github.com/mariogazziro/AutoML_GPU

Estudo de caso 1: Operações sobre matrizes esparsas

https:

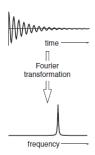
 $// \texttt{github.com/mariogazziro/AutoML_GPU/tree/master/sparse_mat}$

Estudo de caso 2: Ajuste de fase em Ressonância Magnética

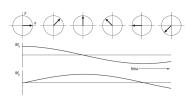
https:

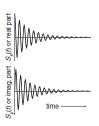
 $// \texttt{github.com/mariogazziro/AutoML_GPU/tree/master/phase_adj}$

- O free induction signal (em que a precessão acontece na frequência de Larmor) sofre uma ação de relaxamento, sendo chamado de free induction decay ou FID, um sinal de domínio de tempo.
- A ideia é transformar este sinal, que depende do tempo, no espectro, no qual o eixo horizontal é a frequência.
 - ► Esses FIDs podem ser somados e agregados, isso se converte em sinal de domínio de frequência por uma transformada de Fourier.
- A transformação de Fourier é o processo matemático que nos leva de uma função do tempo (o domínio do tempo)
 como um FID - a uma função no domínio da freqüência - o espectro.

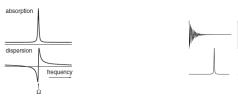


- O FID é um sinal complexo, com as partes real e imaginária correspondentes aos componentes x e y do sinal.
 - A magnetização transversal decai ao longo do tempo.





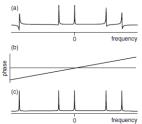
- Picos (Lorentzianos) formam a porção absortiva, real, sendo que a parte imaginaria é representada pela porção dispersiva do sinal. A área da parte absortiva deve tender ao máximo, já a área da parte absortiva deve tender a zero, com o cancelamento das partes positivas e negativas.
- Quanto mais rapidamente o FID decai, mais larga a linha no espectro correspondente.



 Ao integrar as linhas no espectro, podemos determinar o número relativo de prótons (tipicamente) que contribuem para cada um deles.

- No entanto, o sinal pode estar deslocado em fase, apresentando um erro de fase.
 - ▶ A aparência tradicional do espectro depende da posição do sinal no tempo zero, i.e., na fase do sinal no tempo zero.
 - ▶ Poder haver uma mudança de fase desconhecida, levando a uma situação na qual não é mostrada uma linha de absorção clara na parte real, o que dificulta ou mesmo impossibilita a análise espectral.
 - Uma "correção" de fase pode ser aplicada ao espectro, usando diferentes modos.

- Ajustes de fase podem ser realizados em 2 ordens:
 - Ordem 0, onde apenas componentes do sinal são "transferidos" da parte imaginária para a parte real, por rotação complexa;
 - ▶ Ordem 1, onde, somado a rotação complexa, é acrescentado um fator de peso com base em um pivô e um ângulo de rotação.
- Ilustração de ajuste de fase de ordem 1, com pivô no centro do espectro:



- O ajuste de fase demanda variações de fatores de ordem 0, 1 e pivô.
 - ► Ou seja, é possivel variar fatores de ordem 0 (entre 0 e 360 graus), fatores de ordem 1 (entre 0 e 360 graus), assim como a origem do pivô (que pode ser em qualquer ponto do espectro).

Minimização de Entropia:

$$MinE = \sum_{i} h_{i} \ln h_{i} + P(R_{i})$$

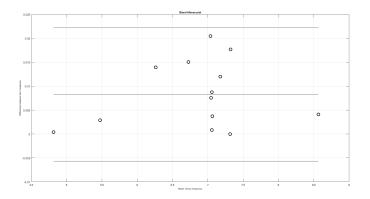
$$h_{i} = \frac{|R_{i}|}{\sum_{i} |R_{i}|}$$

$$R_i = R_i \cos(\Phi_i) - I_i \sin(\Phi_i)$$

$$\Phi_i = phc0 + phc1 x \frac{i}{n}$$

- $MinE \rightarrow função de minimização (mínimos quadrados).$
- $h_i \rightarrow$ derivadas normalizadas do do espectro (FFT) da RMN.
- ullet P o função de penalidade para evitar bandas negativas.

Bland-Altman plot



Estudo de caso 3: Processamento de grafos em escala de bilhões - Demonstração prática entre Gunrock (GPU) vs M-FLash (CPU)

```
https://github.com/gunrock/gunrock
http://images.nvidia.com/events/sc15/pdfs/
SC5139-gunrock-multi-gpu-processing-library.pdf
https://www.groundai.com/project/
m-flash-fast-billion-scale-graph-computation-using-a-bimodal-https://github.com/M-Flash
```

Referências

- NVIDIA Corporation. Graphics Processing Unit (GPU). Disponível em: http://www.nvidia.com/object/gpu.html. Acesso em: mai-2018.
- NVIDIA Corporation. CUDA GPUs. Disponível em: https://developer.nvidia.com/cuda-gpus. Acesso em: mai-2018.
- SOUSA, T. B. Dataflow Programming: Concept, Languages and Applications. In. Doctoral Symposium on Informatics Engineering. 2012.
- RODGERS, D. P. Improvements in multiprocessor system design. In. Proceedings of the 12th annual international symposium on Computer architecture. Vol.13, 1985, p.225-231.
- NVIDIA CUDA. NVIDIA CUDA C Programming Guide. Version 4.2, 2012.

Roteiro da oficina GPU

- após ligar seu computador, selecionar a opção GNU Linux;
- usar como login: usuarios $\1242854$

(ou usuarios\\###### seu numero usp)

- usar senha: swatch_X66642
- (ou no caso do seu número usp, usar sua senha do jupiter)
- acessar o aplicativo:

Acessorios -> LXterminal

- dentro do shell, digite o comando:
- ssh -Y uXX@10.11.16.171 -oProxyCommand=
- 'ssh gazziro@143.107.183.147 nc %h %p'
- onde XX é o número que voce recebeu XX de 1 a 40;
- talvez peça confirmação. digite 'y' seguido de enter.
- use a senha (servidor intermediário): swatch_X66642
- talvez peça nova confirmação: digite 'y' seguido de enter.
- aguardar...
- digite a segunda senha (servidor com a GPU): milhoverde
- testar o redirecionamento do servidor gráfico X: xeyes

Roteiro da oficina GPU - Exemplos apresentados na parte teórica

```
- descomprima e rode o exemplo de matrizes esparsas:
unzip sparse_mat.zip
cd sparse_mat
make
- notar que o comando 'make' já executa o script 'run',
apresentando o resultado de tempo e speed-up para
diversos tamanhos de matrizes em CPU e GPU:
cd ..
-descomprima e rode o exemplo de ajuste de fase:
unzip phase_adj.zip
cd phase_adj
python phase_adj.py garrido
./run
- roda todos os exemplos na base de dados e plota
o gráfico comparativo tipo bland-altman.
```

Roteiro da oficina GPU - Exercícios

Verifique se os 3 arquivos estão em sua pasta pessoal: exercise1.cu exercise2a.zip exercise2b.zip

- Edite o arquivo exercise1.cu e complete o código nas partes indicadas (1 minuto para cada parte, após isso a solução será apresentada no telão)

compile e teste com: nvcc -o exercise1 exercise1.cu

- Com relação ao exercicio 2, partes A e B, compile ambos os códigos e execute, analisando o tempo consumido por ambos. Verifique a relação entre o dimensionamento do grid e o tempo de execução dos exemplos, tendo em mente que ambos executam
- o mesmo processamento sobre o mesmo dado. Calcule o speed-up.
- Visualize o resultado gráfico, e varie o número de iterações
 >eog output.pgm