Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского

Факультет Вычислительной математики и кибернетики

Высокопроизводительные вычисления на GPU

Бастраков С.И.

ВМК ННГУ

sergey.bastrakov@gmail.com

Молодежная школа «Высокопроизводительные вычисления для гибридных вычислительных систем», ННГУ, 2011

Мотивация

"GPU уже достигли той точки развития, когда многие приложения реального мира могут с легкостью выполняться на них, причем быстрее, чем на многоядерных системах. Будущие вычислительные архитектуры станут гибридными системами с графическими процессорами, состоящими из параллельных ядер и работающими в связке с многоядерными CPU".

Профессор Джэк Донгарра (Jack Dongarra)
Директор Innovative Computing Laboratory
Университет штата Теннесси

Источник: http://www.nvidia.ru/page/gpu_computing.html

Содержание

- Почему GPU?
- Архитектура GPU
- Средства программирования для GPU
- Одновременное использование CPU и GPU для вычислений

Почему GPU?

Гетерогенные вычисления

- **Гетерогенные (гибридные) вычисления** (*heterogeneous computing*) – вычисления с использованием **разнородных вычислительных устройств**.
- В качестве таких устройств могут выступать:
  – центральные процессоры (CPU);
  – графические процессоры (GPU);

  APU

  – специализированные процессоры (например, DSP);
  – ускорители;
  – ПЛИС.
- Наиболее популярной на текущий момент гетерогенной связкой является **CPU + GPU**.

GPGPU

- **GPGPU** (*general-purpose computing on GPU*) – вычисления **общего** назначения на **графических процессорах**.
- В качестве вычислений общего назначения могут выступать и задачи, связанные с компьютерной графикой, если они не ограничиваются использованием стандартного графического конвейера (например, метод трассировки лучей).
- Потоковая обработка, используемая в графическом конвейере, может эффективно использоваться во многих вычислительных задачах общего характера.

Типичные области применения GPGPU

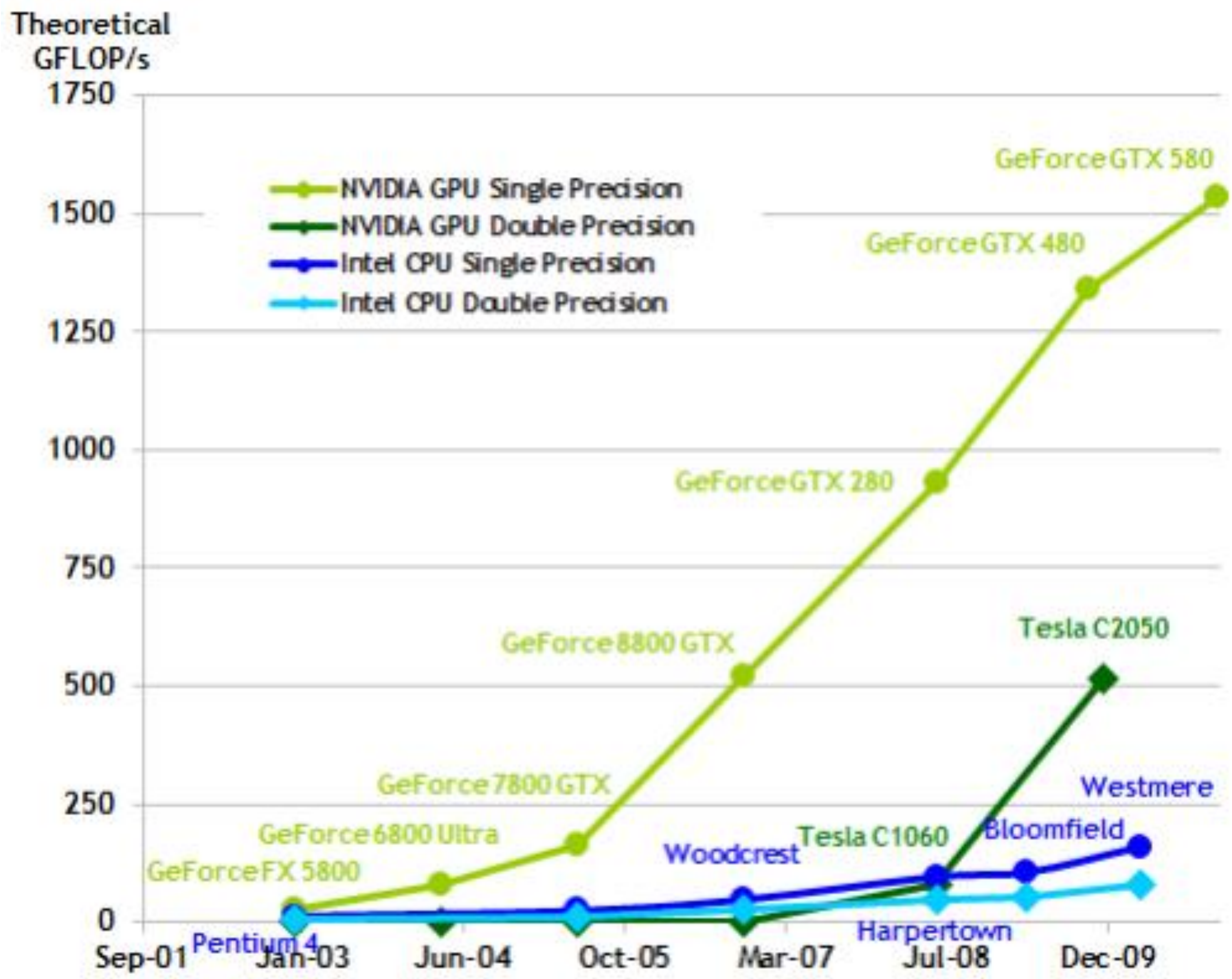
- Физическое моделирование.
- Визуальные эффекты.
- Финансовая математика.
- Вычислительная биология, химия.
- …

- Примеры практического применения:

http://www.nvidia.com/object/cuda_showcase_html.html

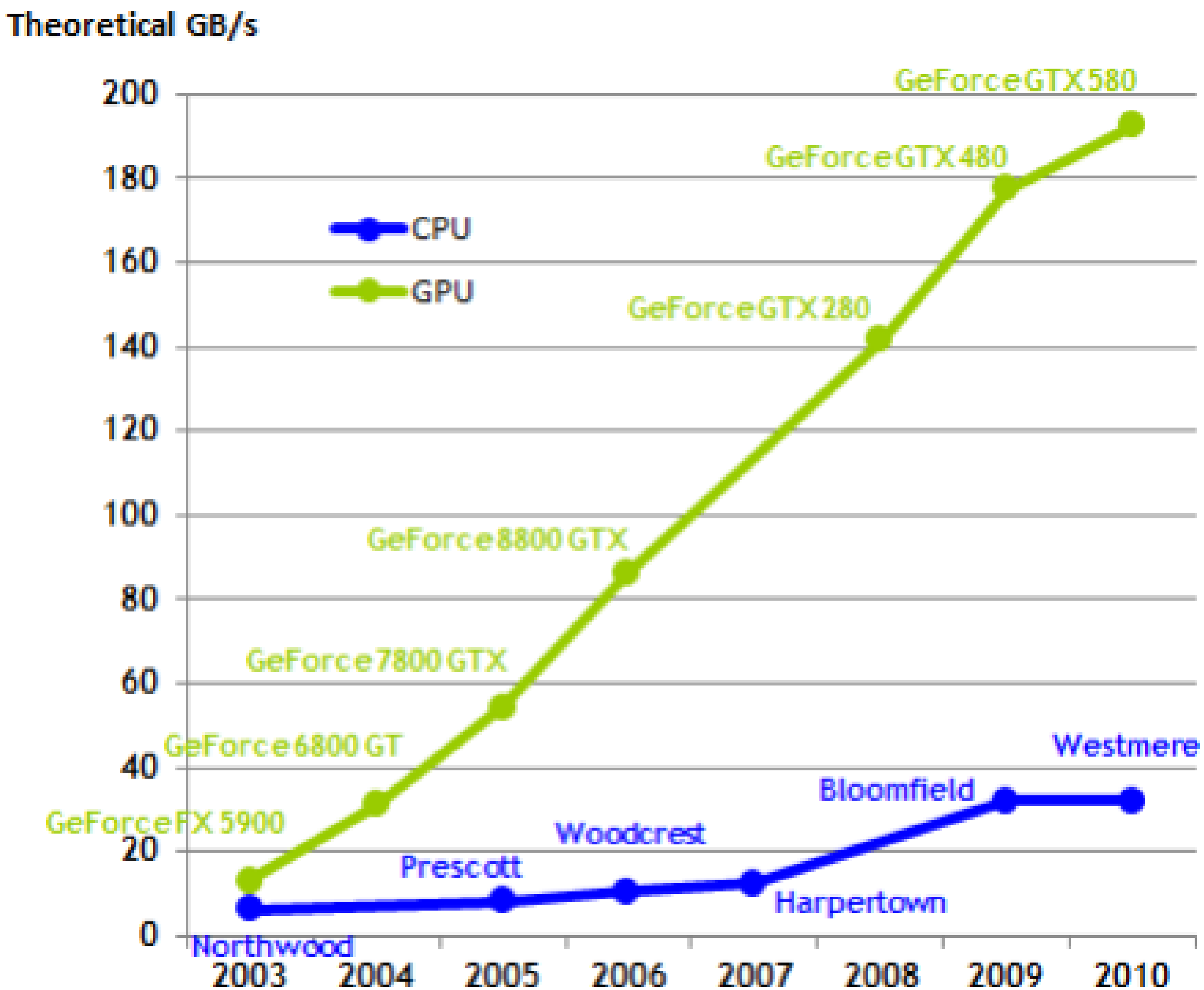
http://developer.amd.com/zones/openclzone/pages/openclappexamples.aspx

Пиковая производительность CPU и GPU



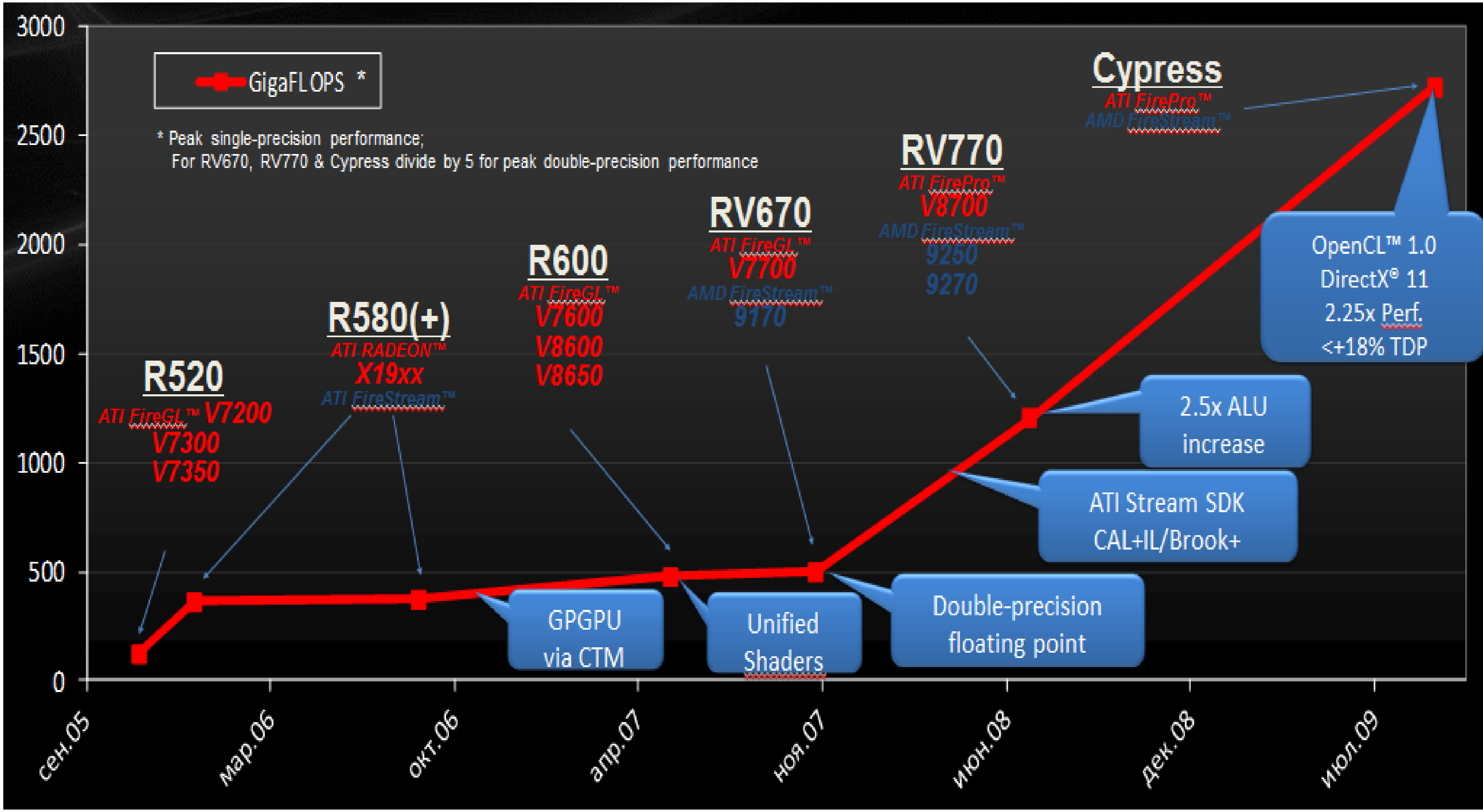
Источник: NVIDIA CUDA C Programming Guide v. 4.0

Пропускная способность памяти CPU и GPU



Источник: NVIDIA CUDA C Programming Guide v. 4.0

Пиковая производительность CPU и GPU



Источник: AMD OpenCL Tutorial (SAAHPC 2010)

Использование GPU в суперкомпьютерах

- 3 из 5 наиболее производительных суперкомпьютеров списка Top500 по состоянию на июнь 2011 содержат GPU:

	Rank	Site	Computer
	1	RIKEN Advanced Institute for Computational Science (AICS) Japan	K computer, SPARC64 VIIIfx 2.0GHz, Tofu interconnect Fujitsu
✓	2	National Supercomputing Center in Tianjin China	Tianhe-1A - NUDT TH MPP, X5670 2.93Ghz 6C, NVIDIA GPU, FT-1000 8C NUDT
	3	DOE/SC/Oak Ridge National Laboratory United States	Jaguar - Cray XT5-HE Opteron 6-core 2.6 GHz Cray Inc.
✓	4	National Supercomputing Centre in Shenzhen (NSCS) China	Nebulae - Dawning TC3600 Blade, Intel X5650, NVidia Tesla C2050 GPU Dawning
✓	5	GSIC Center, Tokyo Institute of Technology Japan	TSUBAME 2.0 - HP ProLiant SL390s G7 Xeon 6C X5670, Nvidia GPU, Linux/Windows NEC/HP

Источник: top500.org

Использование GPU в суперкомпьютерах

- 3 из 5 наиболее энергоэффективных суперкомпьютеров списка Green500 по состоянию на июнь 2011 содержат GPU:

	Green500 Rank	MFLOPS/W	Site*	Computer*	Total Power (kW)
	1	2097.19	IBM Thomas J. Watson Research Center	NNSA/SC Blue Gene/Q Prototype 2	40.95
	2	1684.20	IBM Thomas J. Watson Research Center	NNSA/SC Blue Gene/Q Prototype 1	38.80
✓	3	1375.88	Nagasaki University	DEGIMA Cluster, Intel i5, ATI Radeon GPU, Infiniband QDR	34.24
✓	4	958.35	GSIC Center, Tokyo Institute of Technology	HP ProLiant SL390s G7 Xeon 6C X5670, Nvidia GPU, Linux/Windows	1243.80
✓	5	891.88	CINECA / SCS - SuperComputing Solution	iDataPlex DX360M3, Xeon 2.4, nVidia GPU, Infiniband	160.00

Источник: green500.org

Современные GPU

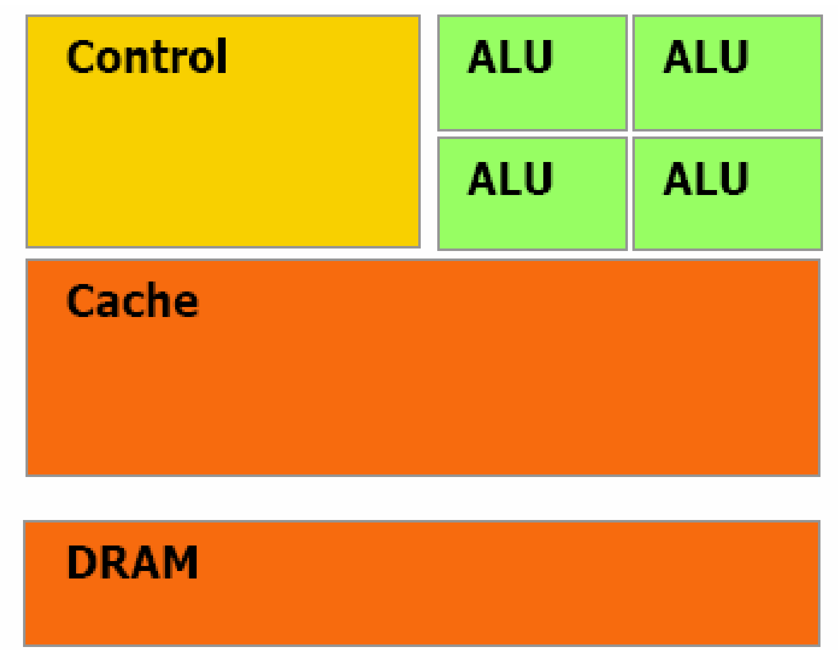
- Современный GPU – **массивно-параллельный многоядерный процессор**.
- Высокая производительность и пропускная способность памяти.
- Хорошо подходит для решения многих классов вычислительно трудоемких задач.
- Выгодное отношение производительности к цене и потребляемой мощности.
- Развитые средства программирования.

Почему не GPU?

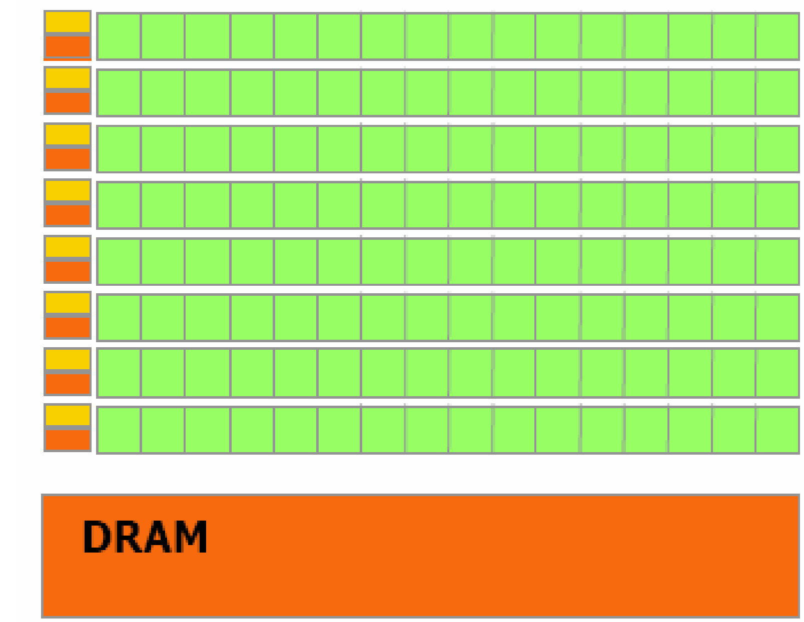
- Не все задачи хорошо распараллеливаются.
- Не все задачи хорошо подходят для архитектуры GPU.
- Сложность разработки и оптимизации приложений по сравнению с CPU.
- Эффективный перенос всех вычислений на GPU невозможен, однако многие важные задачи могут эффективно задействовать GPU. Большой интерес представляют гибридные системы.

Архитектура GPU

Архитектура CPU и GPU



CPU
“cache-oriented”



GPU
“cache-miss oriented”

Источник: NVIDIA CUDA C Programming Guide v. 3.2

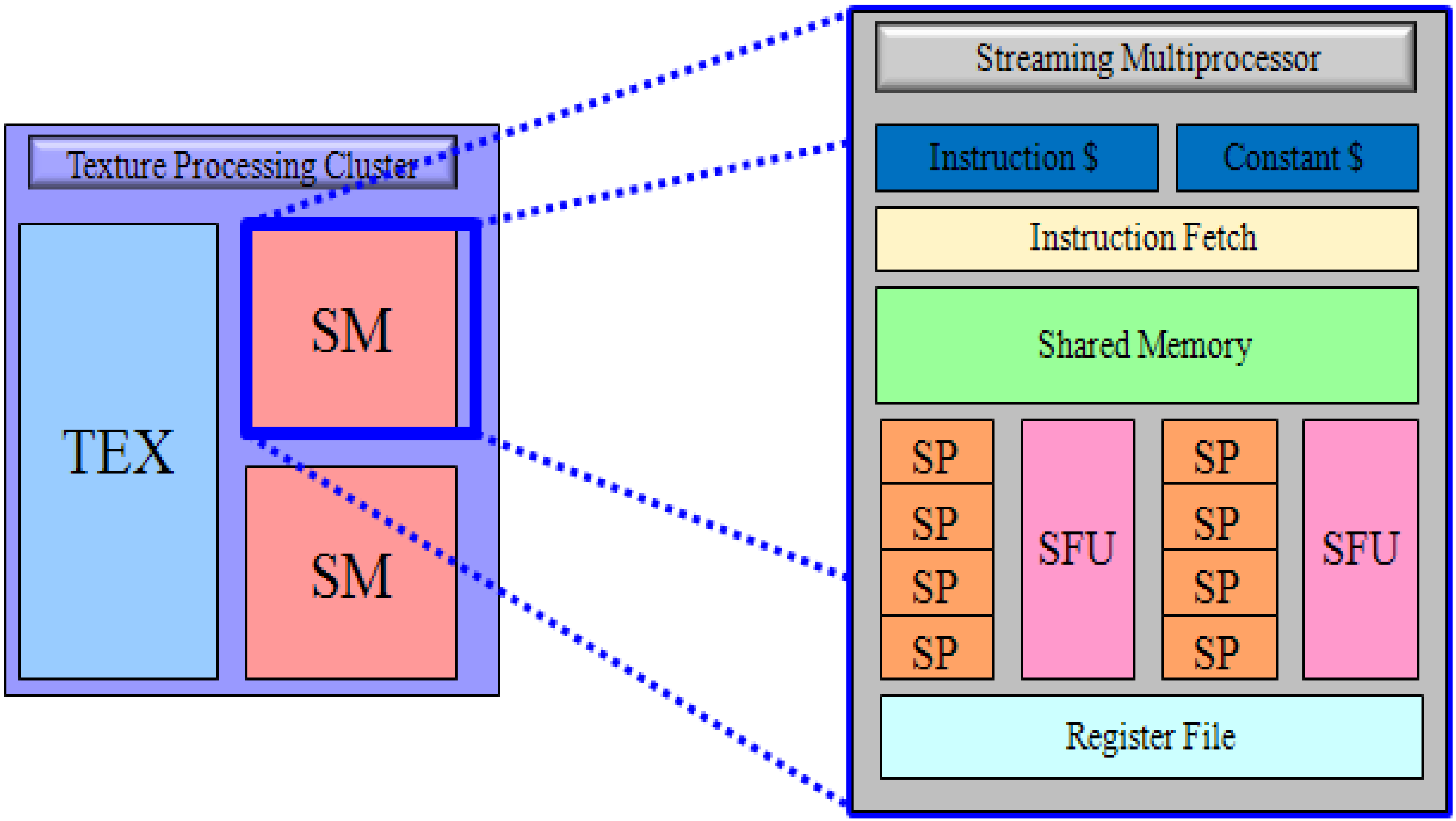
Архитектура CPU и GPU

- GPU предназначен для вычислений,
  - **параллельных по данным**: одна и та же операция выполняется над многими данными параллельно,
  - в которых отношение вычислительных операций к числу операций по доступу к памяти велико.
- Вместо кэша и сложных элементов управления на кристалле размещено большее число вычислительных элементов.
- Латентность памяти покрывается за счет большого количества легковесных потоков.
- Постепенно степень параллелизма CPU и сложность архитектуры GPU повышаются.

Архитектура GPU NVIDIA

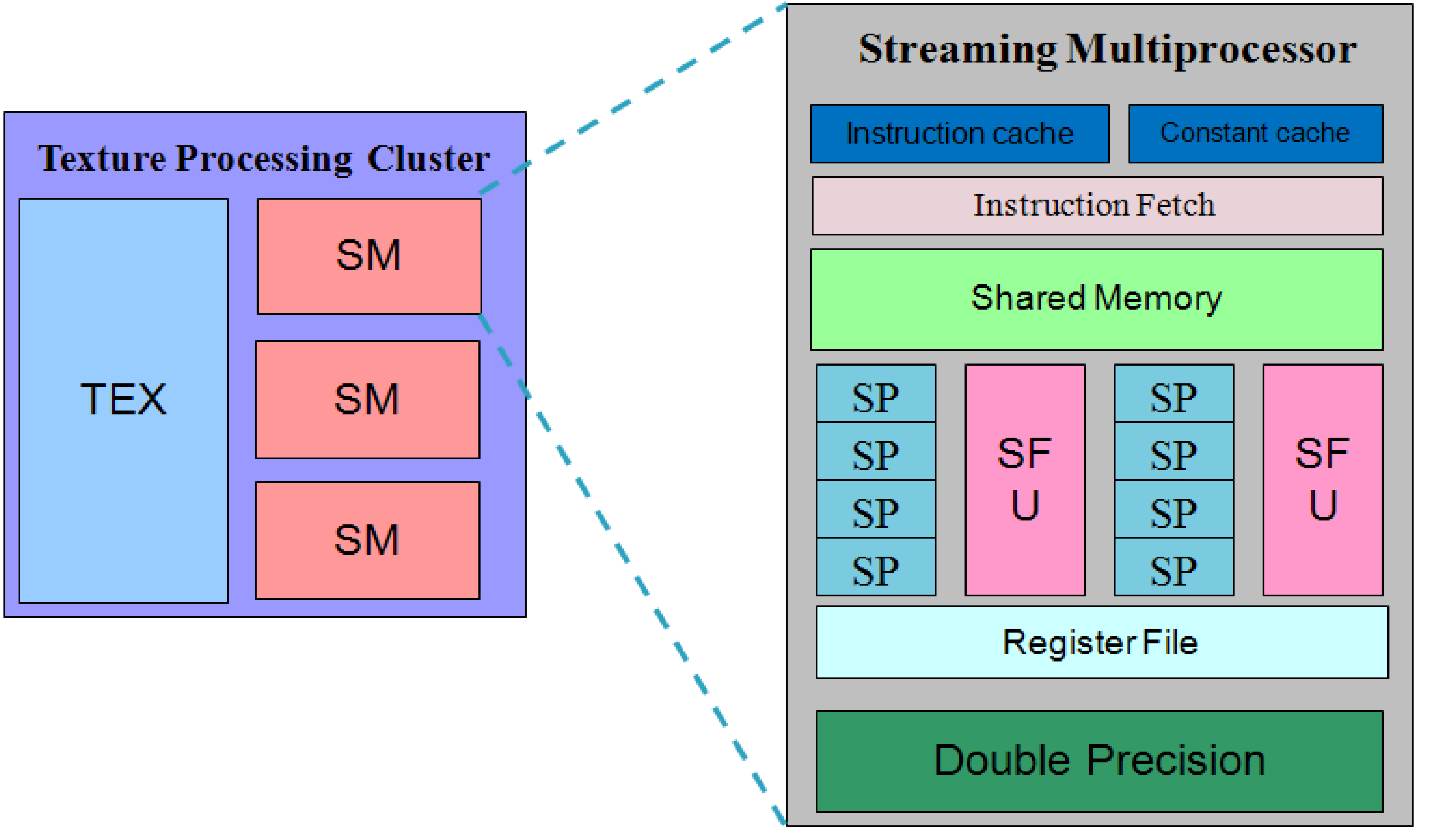
- Состоит из **мультипроцессоров** (*streaming multiprocessor*, *MP*), каждый из которых содержит несколько **CUDA-ядер** (*CUDA core*) и общую для них память.
  – В архитектурах до Fermi аналоги CUDA-ядер назывались **скалярными процессорами** (*scalar processor*, *SP*).
- CUDA-ядра внутри одного мультипроцессора работают как SIMD.
- Чрезвычайно легковесные потоки, встроенный планировщик.

Мультипроцессор в NVIDIA Tesla 8



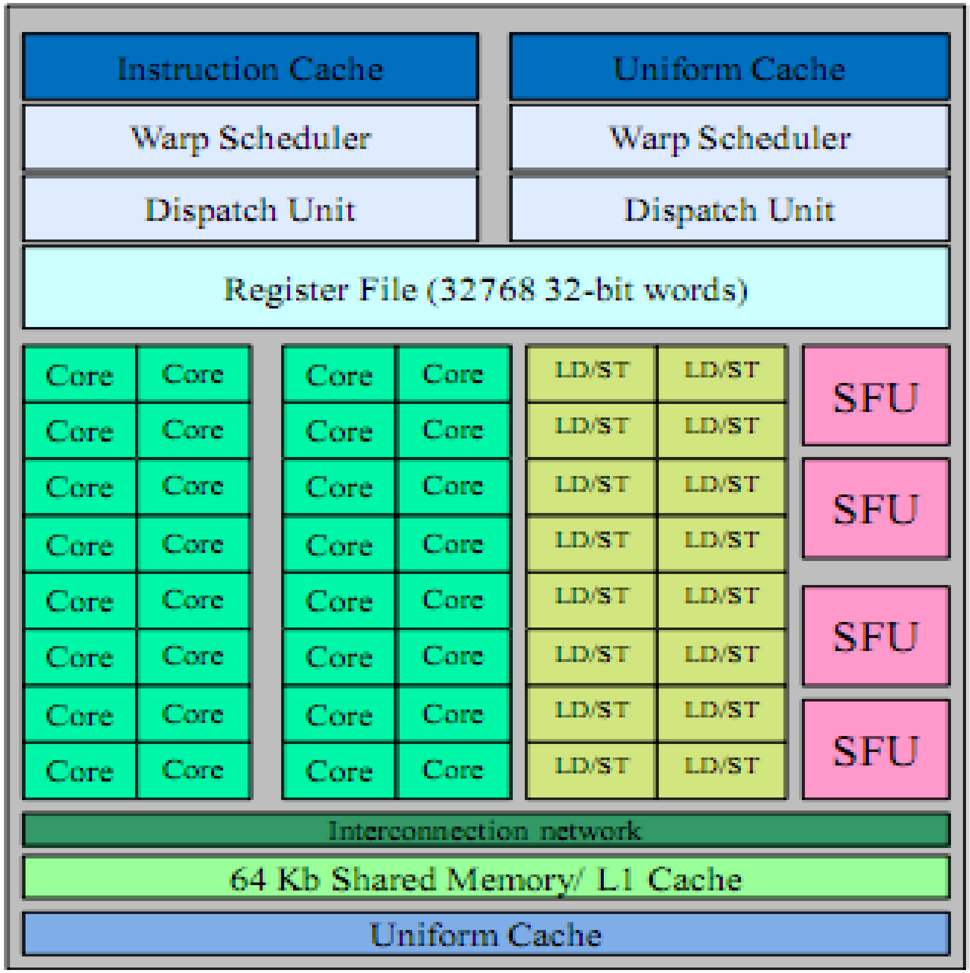
Источник: А.В. Боресков, А.А. Харламов «Архитектура и программирование массивно-параллельных вычислительных систем»

Мультипроцессор в NVIDIA Tesla 10



Источник: А.В. Боресков, А.А. Харламов «Архитектура и программирование массивно-параллельных вычислительных систем»

Мультипроцессор в NVIDIA Fermi



Источник: А.В. Боресков, А.А. Харламов «Архитектура и программирование массивно-параллельных вычислительных систем»

Архитектура NVIDIA Fermi

- Новейшая на текущий момент архитектура NVIDIA.
  - Выход следующей архитектуры Kepler планируется в начале 2012 года.
- Добавлен общий L2-кэш для глобальной памяти.
- На каждом мультипроцессоре добавлен L1-кэш для глобальной памяти.
- В каждом ядре отдельные блоки для вычислений с плавающей точкой и целочисленных вычислений.
- Значительно улучшена производительность арифметики с плавающей точкой двойной точности и SFU.
- Техническая возможность для полной поддержки C++.
- Поддержка ECC.

Иерархия памяти GPU NVIDIA

- **Глобальная** (*device/global*) – общая для устройства.
  - Ее подобласти: **текстурная** и **константная** с соответствующими кэшами.
- **Разделяемая** (*shared*) – общая для всех CUDA-ядер в одном MP.
- **Регистры** (*register*) – (логически) эксклюзивны для CUDA-ядра.
- **Локальная** (*local*) – (логически) эксклюзивна для CUDA-ядра.
- **Кэш для глобальной памяти** только в Fermi.

Архитектура GPU AMD

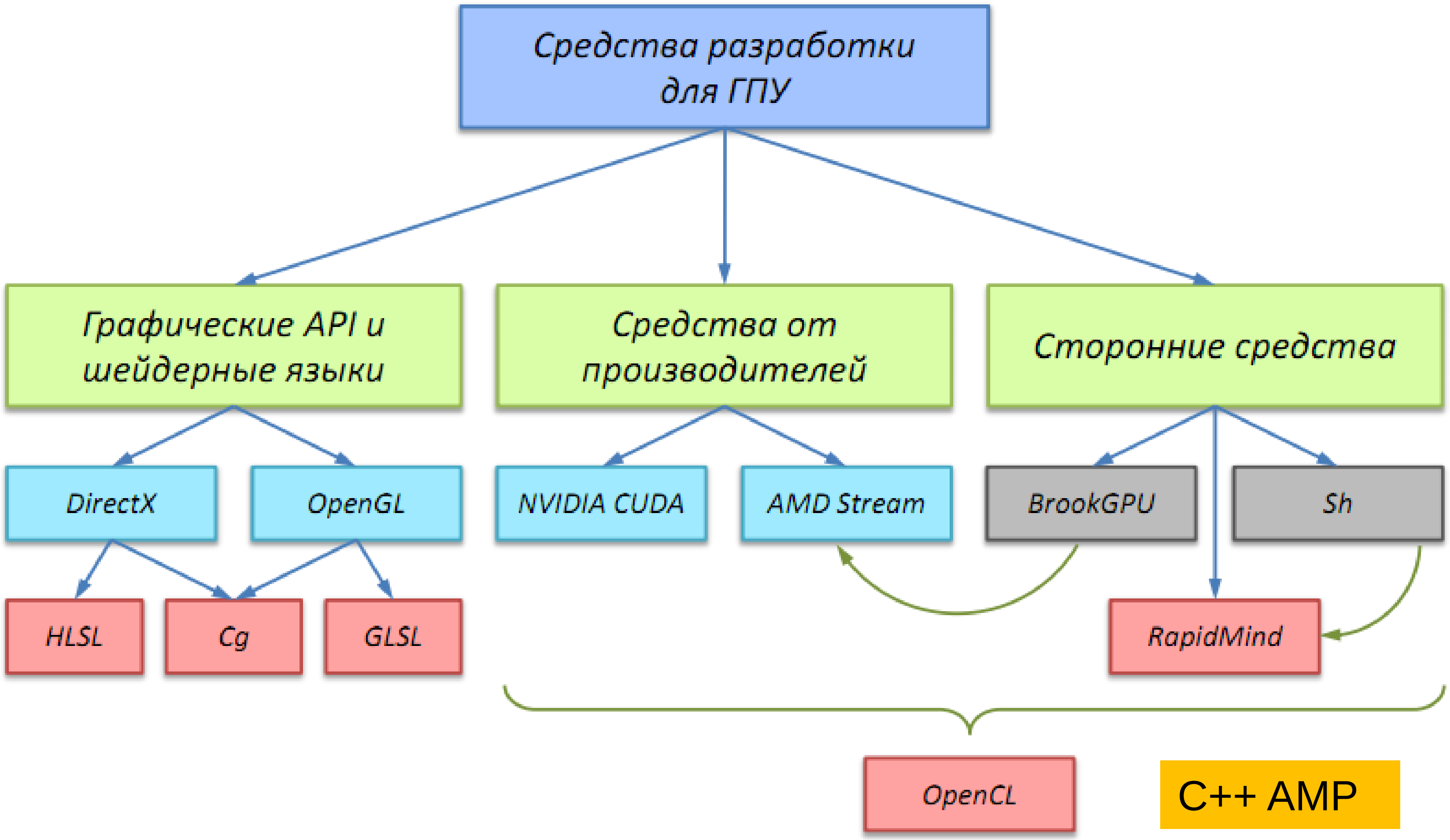
- Во многих чертах схожа с архитектурой NVIDIA с точностью до количественных характеристик и замены терминов.
- Устройство состоит из **SIMD-процессоров** (*SIMD engine*), каждый из которых состоит из нескольких **потоковых ядер** (*stream cores*).
- Потоковое ядро является **векторным** и состоит из 5 АЛУ, называемых **обрабатывающими элементами** (*processing elements*).
  - Это одно из отличий: у NVIDIA скалярные CUDA-ядра.

Средства программирования для GPU

Потоковая модель вычислений

- Работа GPU хорошо укладывается в **потоковую модель вычислений** (*stream computing model*).
- **Поток** (в смысле данных) – последовательность однотипных элементов, обработка каждого элемента может осуществляться независимо от других.
- Обработка потока выполняется при помощи **ядер** (*kernel*).
- Упрощенно: тело ядра содержит вычисления над одним элементом, оно вызывается многократно (и, возможно, параллельно) для каждого элемента.
  – Пример: задача сложения векторов длины N, в теле ядра складывается пара значений, ядро вызывается N раз.
- Средства программирования для GPU используют потоковую модель.

Обзор средств



Источник: Д.К. Боголепов, В.Е. Турлапов «Вычисления общего назначения на графических процессорах»

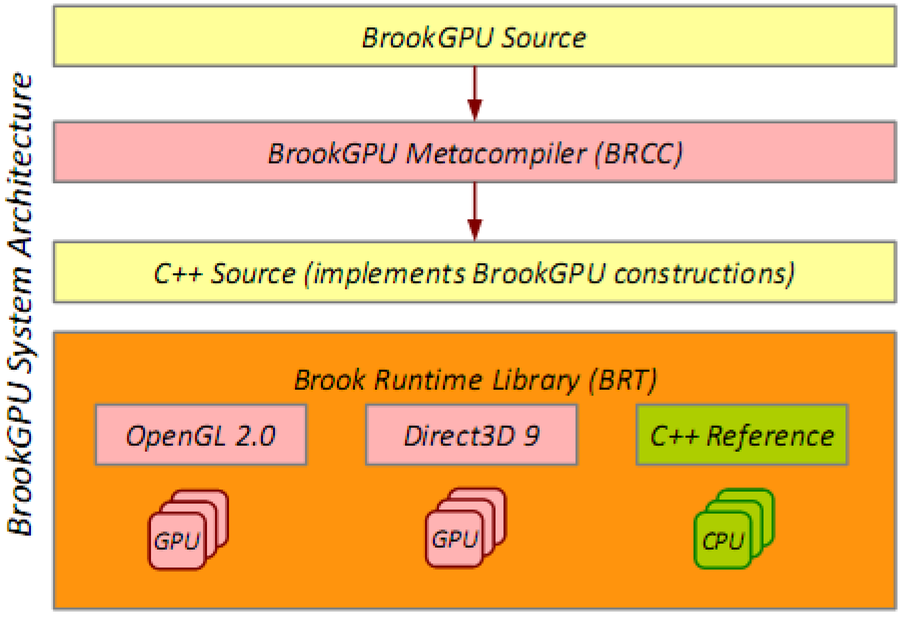
Шейдерные языки

- Изначально применялись для решения задач визуализации.
- Одним из наиболее популярных является GLSL (OpenGL Shading Language, разрабатывается Khronos Group), входящий в стандарт OpenGL с версии 2.0.
- Недостатки:
  - На шейдерных языках пишутся только шейдеры (единицы параллельного исполнения), а не целые программы.
  - Необходимо формулировать задачу в графических терминах («привязка к графике»).

Источник: Д.К. Боголепов, В.Е. Турлапов «Вычисления общего назначения на графических процессорах»

Сторонние специализированные средства

- Большинство основано на **метапрограммировании**: исходная программа разрабатывается на диалекте языка С с потоковыми расширениями, после чего транслируется в шейдеры для исполнения на GPU.
- Наиболее известными являются BrookGPU и Sh.



Источник: Д.К. Боголепов, В.Е. Турлапов «Вычисления общего назначения на графических процессорах»

Сторонние средства: BrookGPU и Sh

- Упростили разработку по сравнению с шейдерными языками.
- Проблемы с эффективностью, не выполняется оптимизация под конкретную архитектуру.
- В настоящее время устарели и не поддерживаются, однако послужили основной для дальнейших разработок:
  - Sh продолжила развитие в коммерческой платформе RapidMind, в 2009 поглощена Intel, технологии использованы в Intel Ct и Intel Array Building Blocks.
  - Переработанный вариант BrookGPU включался в AMD Stream до версии 1.4 под названием Brook+.

Источник: Д.К. Боголепов, В.Е. Турлапов «Вычисления общего назначения на графических процессорах»

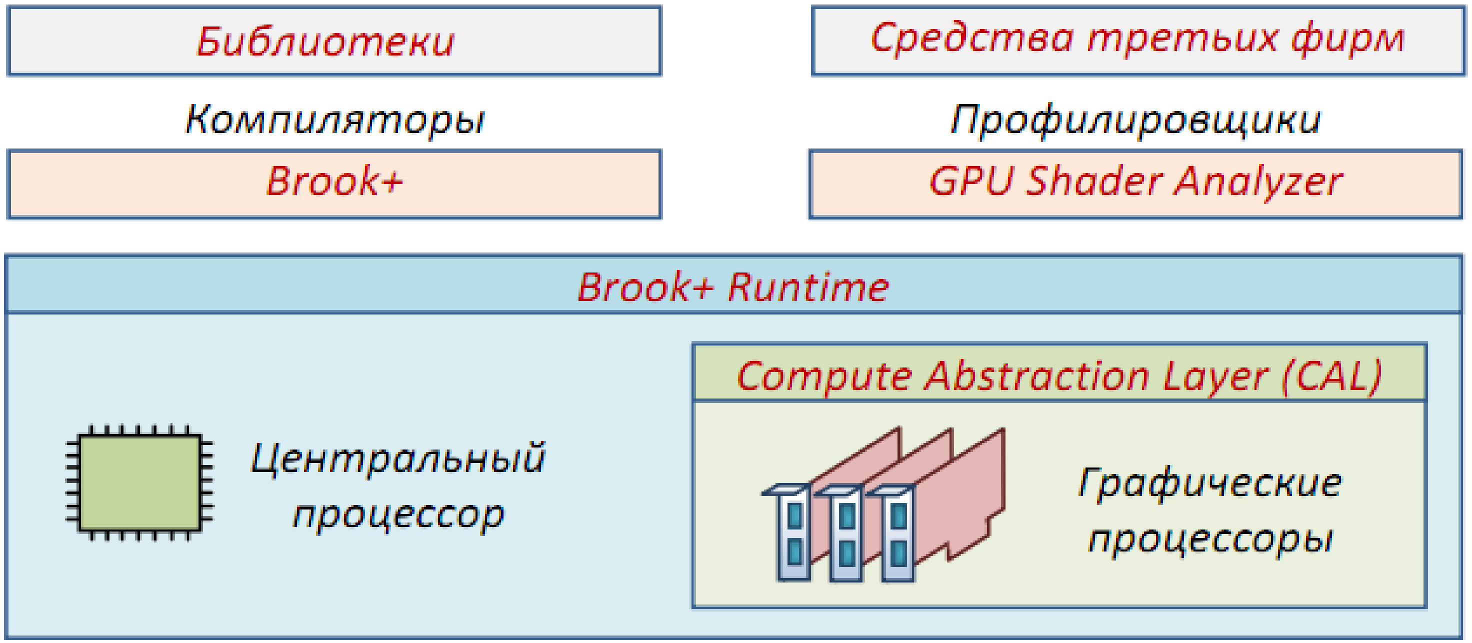
Средства от производителей

- CUDA от NVIDIA (февраль 2007 года).
- AMD Stream Computing от AMD/ATI (ноябрь 2007 года).
- Имеют схожую структуру:
  - Нижний уровень – ассемблер для графического процессора, менеджер памяти.
  - Верхний уровень – потоковые расширения языка C, средства оптимизации и отладки, высокопроизводительные библиотеки.

Средства от производителей

- Преимущества:
  - Написание программ на потоковых расширениях традиционных языков программирования без специфической терминологии компьютерной графики.
  - Доступ к специфическим функциям оборудования, широкие возможности для оптимизации.
- Недостатки:
  - Неуниверсальность, программирование требует глубоких знаний архитектуры.
  - Эффективное портирование затруднено из-за привязки к конкретному оборудованию.

AMD Stream Computing



- Использует модифицированный Brook+ (потоковые расширения языка C на верхнем уровне).
- В настоящее время поддерживается интерфейс OpenCL.

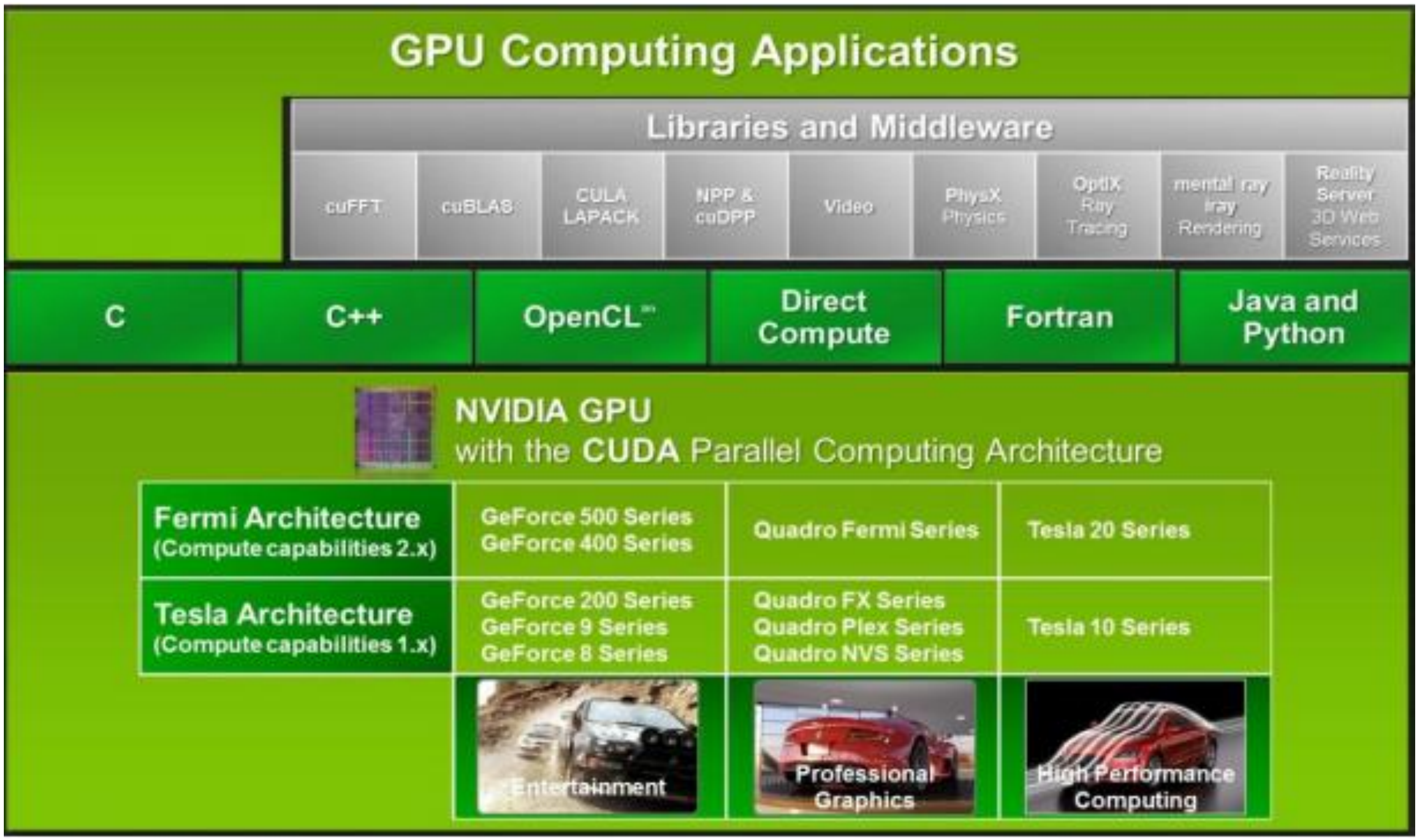
Источник: Д.К. Боголепов, В.Е. Турлапов «Вычисления общего назначения на графических процессорах»

NVIDIA CUDA

- **CUDA – Compute Unified Device Architecture**.
- Программно-аппаратная платформа для параллельных вычислений от NVIDIA.
- Раскрывает потенциал GPU для вычислений общего назначения.
- Не поддерживается другими производителями.
- Наиболее широко используемое на текущий момент средство для GPGPU (по данным NVIDIA).

NVIDIA CUDA

- Спроектирована для поддержки множества вычислительных интерфейсов и устройств NVIDIA:



Источник: NVIDIA CUDA C Programming Guide v. 4.0

Стандарт OpenCL

- **OpenCL – Open Computing Language**, открытый стандарт для гетерогенных вычислений, разрабатываемый Khronos Group совместно с представителями производителей устройств и ПО.
- Первая версия стандарта – ноябрь 2008 года.
- Поддерживается Apple, NVIDIA, AMD/ATI, Intel, …
- Поддержка широкого класса вычислительных устройств за счет введения обобщенных моделей (модели платформы, памяти, исполнения, …).

Основные особенности стандарта

- Исходный код приложения легко портируется на другие платформы.
- Поддержка широкого класса устройств достигается за счет введения **обобщенных моделей** данных систем:
  – **модель платформы** (*platform model*);
  – **модель памяти** (*memory model*);
  – **модель исполнения** (*execution model*);
  – **модель программирования** (*programming model*).
- Все модели являются абстрактными (не привязанными к конкретным устройствам), реализация предоставляется производителем.

C++ AMP

- C++ Advanced Massive Parallelism – язык для написания гетерогенных приложений от Microsoft.
- Официального релиза еще нет, доступен в Microsoft Visual Studio 11 Developer Preview.
- Будет встроен в Visual Studio 11.
- Построен на DirectCompute.

Пример

- Задача вычисления матричного произведения.
- Наивный подход – прямое вычисление результата по определению.
  - Далеко не самый эффективный способ.
- Вычисление каждого элемента результата независимо.
- Тело ядра вычисляет один элемент.
- Рассмотрим реализации с использованием CUDA C, OpenCL и C++ AMP.

Выводы

- CUDA, OpenCL и C++ AMP опираются, в основных чертах, на одну и ту же модель вычислений. Ядра удивительно похожи.
- Существенная разница лишь во вспомогательном коде: инициализация данных устройства, копирование данных, запуск ядер, синхронизация и т.д.
- Простейший пример переноса приложения на GPU: преобразование тела цикла с независимыми итерациями в ядро.
  - В реальной жизни редко бывает так просто.

Рекомендации по оптимизации

- Выбор подходящих для параллельных вычислений алгоритмов. Типичные схемы декомпозиции задачи:
  - разбиение на большое число (тысячи и более) независимых подзадач;
  - разбиение на относительно небольшое число независимых подзадач, каждая из которых делится на относительно большое число подзадач.
- Предпочтительны алгоритмы с большой долей вычислений по отношению к количеству обращений к памяти.
- Использование CPU для последовательных вычислений и GPU для параллельных. Минимизация обмена между хостом и устройством и/или выполнение его асинхронно.

Рекомендации по оптимизации

- Глобальная память имеет латентность сотни тактов. Основной вид оптимизации приложений на GPU – оптимизация работы с памятью.
  - Использование эффективных паттернов доступа к глобальной и разделяемой памяти.
  - Хранение многократно используемых данных в кэше/разделяемой памяти.
- Оптимизация загрузки устройства:
  - Большое число активных потоков обеспечивает скрытие латентности доступа к памяти, особенно глобальной.
  - Ограничивающим для числа потоков фактором является количество разделяемой памяти и регистров.

Одновременное использование CPU и GPU для вычислений

Мотивация

- Гетерогенные системы получают все более широкое распространение:
  – В редакции списка Top500 за июнь 2011 года 3 из 5 наиболее производительных суперкомпьютеров являются гетерогенными и содержат CPU и GPU.
  – Появление **APU** (*accelerated processing unit*), сочетающих ядра центральных и графических процессоров.
  – Анонс ускорителей архитектуры **Intel MIC** (*many integrated cores*), содержащих десятки x86-ядер.
- В настоящее время наиболее популярной гетерогенной связкой является **CPU + GPU**. Изложение будет производиться для нее.

Мотивация

- Пиковая производительность современных GPU существенно превосходит пиковую производительность CPU.
- Однако, на реальных задачах разрыв может быть не столь существенным.
- Во всяком случае, не столь существенным, чтобы полностью отказаться от использования ядер CPU для вычислений.
  - Особенно в свете динамично растущего количества ядер CPU и увеличивающегося разнообразия гетерогенных систем.

Мотивация

- При создании приложений с использованием CUDA и OpenCL (если GPU является устройством) обычно часть программы, исполняющаяся на хосте, выполняет лишь *служебные* функции:
  – Инициализация.
  – Запуск ядер.
  – Обмен данными.
- Выполнение этих операций обычно не несет большой вычислительной нагрузки не требует задействования всех ядер CPU.
- Следовательно, некоторые (возможно, почти все) из ядер CPU могут быть *эффективно использованы для вычислений*.

Вариант организации работы

- Создание отдельного потока для выполнения служебных операций для каждого устройства.
  - Или одного «служебного» потока для всех устройств.
- Для вычислений на CPU можно использовать количество потоков, равное разности количества ядер CPU и количества «служебных» потоков.
  - Технологии параллельного программирования для многоядерных CPU (OpenMP, TBB, Cilk Plus и др.) позволяют устанавливать число используемых потоков.
- В этом случае «служебные» потоки не будут конкурировать с «вычислительными» за процессорное время.

Балансировка нагрузки

- Естественная проблема, вызванная разнородностью используемых устройств.
- Во-первых, *существенное различие в производительности*.
- Во-вторых, *разный способ обмена данными*:
  - Ядра CPU используются общую память.
  - Необходимо явное копирование данных между CPU и GPU.
  - Обмен между двумя GPU осуществляется через CPU.
- Накладные расходы, вызванные неэффективной балансировкой и/или организацией обменов могут существенно снизить выгоду от использования CPU или вообще привести к снижению производительности по сравнению с использованием только GPU.

Возможные варианты реализации

- **Вариант 1.** Создание *отдельных версий вычислительной части кода для CPU и GPU* с использованием специализированных средств (например, OpenMP/TBB + CUDA).
- Дублирование вычислительной части кода, сложность модификации и поддержки.
- Возможно, высокая эффективность (при подходящей задаче, должной оптимизации и балансировке нагрузки).
- Возможно, проблемы с переносимостью (например, CUDA работает только на GPU NVIDIA).

Возможные варианты реализации

- **Вариант 2.** Создание *унифицированной версии вычислительного кода для CPU и GPU* с использованием OpenCL.
- Техники оптимизации приложений для CPU и GPU существенно различны.
- Вероятно, такой подход не обеспечит максимальной эффективности по сравнению с первым.
- В ряде задач за счет параметризации можно достичь *достаточно высокой эффективности для обеих платформ*.
  - Пример: параметризация размера обрабатываемой подматрицы в операциях линейной алгебры: большие подматрицы для полной загрузки GPU, маленькие кэш-дружественные подматрицы для ядер CPU.

Возможные варианты реализации

- Вопрос об эффективности приложений с использованием OpenCL относительно приложений с использованием специализированных технологий в настоящее время не имеет однозначного ответа.
- По меньшей мере в ряде задач производительность OpenCL сравнима со специализированными средствами.
- Широкие возможности для переносимости.
- Относительно легкий способ утилизации всех доступных вычислительных ресурсов.
  - А также модификации существующих приложений на OpenCL, использующих один тип вычислительных устройств.

Выводы

- Проблема эффективного использования всех вычислительных ресурсов в гетерогенных системах является актуальной и сложной.
- Возможны разные технические решения, в любом случае требуется эффективная балансировка нагрузки и организация обменов данными.
- Использование OpenCL открывает относительно легкий путь к утилизации всех вычислительных ресурсов. Вопрос в эффективности такого решения.
- Примеров успешного решения данной задачи в настоящее время очень мало (например, MAGMA http://icl.cs.utk.edu/magma/).

Материалы

- Линев А.В., Боголепов Д.К., Бастраков С.И. «Технологии параллельного программирования для процессоров новых архитектур» / Учебник.
- NVIDIA CUDA C Programming Guide v. 4.0:
  http://developer.download.nvidia.com/compute/cuda/4_0/toolkit/docs/CUDA_C_Programming_Guide.pdf
- Материалы курса по CUDA в МГУ:
  https://sites.google.com/site/cudacsmsusu/file-cabinet
- А.В. Боресков, А.А. Харламов «Основы работы с технологией CUDA»:
  https://sites.google.com/site/cudacsmsusu/file-cabinet

Материалы

- Д. Сандерс, Э. Кэндрот «Технология CUDA в примерах: введение в программирование графических процессоров»
- OpenCL – официальный сайт: http://www.khronos.org/opencl/
- Intel OpenCL: http://software.intel.com/en-us/articles/intel-opencl-sdk/
- NVIDIA OpenCL: http://www.nvidia.ru/object/cuda_opencl_new_ru.html
- AMD OpenCL: http://www.amd.com/us/products/technologies/stream-technology/opencl/Pages/opencl.aspx
- Блог одного из разработчиков C++ AMP: http://www.danielmoth.com/Blog/C-Accelerated-Massive-Parallelism.aspx

Вопросы / критика / пожелания

sergey.bastrakov@gmail.com