# Introduction à la programmation // sur GPUs en CUDA et Python

Denis Robilliard

**Équipe CAMOME: C. Fonlupt, V. Marion-Poty, A. Boumaza**

LISIC — ULCO
Univ Lille Nord de France
BP 719, F-62228 Calais Cedex, France
Email: robilliard@lisic.univ-littoral.fr

Séminaire LISIC 19/05/2011

# Introduction

## Cadre de l'exposé

- Historique : suite à l'exposé de François Rousselle du 17 février 2011
- Objectif : présenter quelques bases de la programmation // sur GPU
- Matériel : machine "baru" 8 cartes Tesla C2050, fabricant Nvidia
- Langages : CUDA (seulement sur matériel Nvidia), Python
- ~~Application : "les nombres de Schur", problème de combinatoire~~

## Note

On ne s'intéressera pas aux aspects calculs pour le graphisme

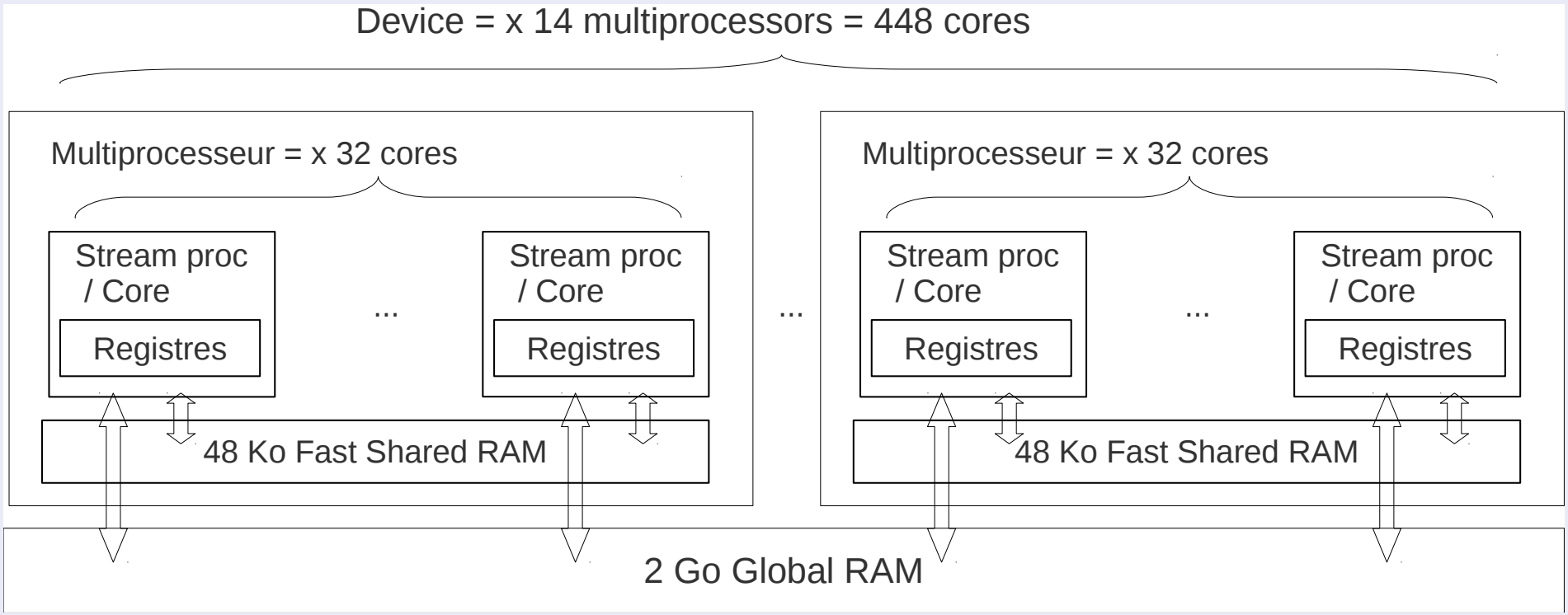
# Plan

# Architecture matérielle –1

## Rappel

- Valable uniquement pour GPUs Nvidia post-2006 (GPU G-80 et suivants)
- Modèle de programmation vu à travers le langage CUDA

## Schéma de l'architecture d'une carte (device) C2050



# Architecture matérielle –2

## Constitution d'un multi-processeur : les cœurs

- Un cœur (*core* / *stream processor*) a son propre jeu de registres
- Un multiprocesseur = 32 cœurs + 48 Ko de mémoire partagée rapide (aussi rapide que les registres — accès en 4 cycles)
- Ils accèdent tous à la mémoire globale de la carte (2 Go — accès en 400 cycles)
- Les 32 cœurs d'un multiprocesseur sont en SIMD (*Single Instruction, Multiple Data*) : même instruction "en même temps", potentiellement sur des données différentes
- Cas des structures conditionnelles : tous les cœurs ne doivent pas forcément faire la même chose $\Rightarrow$ certains cœurs seront oisifs (*idle*) et on parle de *divergence* (= perte d'efficacité)

# Architecture matérielle –3

## Multiprocesseurs d'une carte

- Les 14 multiprocesseurs (*multiprocessors*) ont leur propre pointeur d'instruction
- Fonctionnement en mode SPMD (*Single Program, Multiple Data*) : le même programme, pas forcément la même instruction
- $\Rightarrow$ c'est donc en fait du MIMD (*Multiple Instruction, Multiple Data*)
- Pas de divergence entre cœurs de différents multiprocesseurs
- Ils peuvent être oisifs s'il n'y a pas assez de fils de calculs à traiter...

## Cartes de l'hôte *baru*

- Le serveur *baru* comprend 8 cartes (*devices*) C2050, asynchrones.
- Chaque carte possède sa propre mémoire globale privée
- Un programme se décompose toujours en deux parties : une sur l'hôte (C, Python) qui va allouer et charger la mémoire d'une/plusieurs cartes pour y exécuter le/les (*kernels*) et récupérer le résultat sur l'hôte

# Modèle de programmation –1

## Blocs et fils de calcul

- Un *fil de calcul (thread)* est une instance du kernel exécutée sur un cœur
- Un *bloc* est un ensemble de fils exécutés :
  - **en //, donc a priori "en même temps"**
  - **sur un même multiprocesseur**
- Attention, on peut exécuter jusqu'à 1024 fils dans un bloc (seulement 32 cœurs !) — donc pas vraiment "en même temps" (voir suite)
- Les blocs sont ordonnancés en // sur les multiprocesseurs

## Utilité de la synchronisation

- Le problème de la programmation en // : les conflits d'accès en lecture/écriture (*race conditions*)
- Pour eviter un résultat indéterminé lorsque des fils doivent coopérer, il faut pouvoir les synchroniser. Exemple :

  si (fil-1) alors  A = 0 ;  A = A + 1 ;  sortir A ; fsi  $\Rightarrow$ 1

  si (fil-2) alors  B = A ;  B = B + 1 ;  sortir B ; fsi  $\Rightarrow$ 1 ou 2 ou ? ? ?

# Modèle de programmation –2

## Blocs et fils de calcul

- Un *fil de calcul (thread)* est une instance du kernel exécutée sur un cœur
- Un *bloc* est un ensemble de fils exécutés :
  - **en //, donc a priori "en même temps"**
  - **sur un même multiprocesseur**
- Attention, on peut exécuter jusqu'à 1024 fils dans un bloc (seulement 32 cœurs !) — donc pas vraiment "en même temps" (voir suite)
- Les blocs sont ordonnancés en // sur les multiprocesseurs

## Utilité de la synchronisation

- Le problème de la programmation en // : les conflits d'accès en lecture/écriture (*race conditions*)
- Pour eviter un résultat indéterminé lorsque des fils doivent coopérer, il faut pouvoir les synchroniser. Exemple :

| | | | | |
|---|---|---|---|---|
| si (fil-1) alors | A = 0 ; | | A = A + 1 ; | sortir A ; fsi ⇒ 1 |
| si (fil-2) alors | | B = A ; | B = B + 1 ; | sortir B ; fsi ⇒ 1 |

# Modèle de programmation –3

## Synchronisation entre fils et blocs

- Synchronisation fondamentale : la *barrière* $\Rightarrow$ tous les fils s'arrètent à la barrière, quand tous sont arrivés, on repart (ex : départ du tiercé)
- Les fils d'un même bloc sont ordonnancés par paquets (*warps*) de 32 fils :
  - **à l'intérieur d'un warp :** l'exécution est toujours complètement synchrone à l'instruction près
  - **entre fils dans des warps différents d'un bloc (cas général) :** on peut toujours forcer la synchronisation explicitement en plaçant une barrière
- **Entre fils de blocs différents :** pas de synchronisation, sauf à la terminaison du kernel $\Rightarrow$ chaîner plusieurs kernels permet de les synchroniser

# Modèle de programmation –4

## Note –1

- Pourquoi ordonnancer en warps séquentiels ? mauvais matériel ?
- $\Rightarrow$ l'ordonnancement en warps permet de masquer les délais d'accès mémoire : technique issue des recherches en //isme des années 1990

## Note –2

- Différentes architectures vont autoriser différentes possibilités de synchronisation. Actuellement (2011) Nvidia = beaucoup de blocs avec peu de fils, ATI = peu de blocs avec beaucoup de fils

# Programmation –1

## Hôte et carte

- Appli GPU :
  - code sur l'hôte (*host*) : C, C++, Python...
  - kernel sur une carte GPU : **CUDA**, OpenCL, OpenGL+GLSL

## Rôle de l'hôte

- Charger un kernel sur une carte
- Allouer les données sur la carte
- Charger les données sur la carte
- Lancer l'exécution du kernel
- Récupérer les données de la carte, les désallouer
- Gérer les E/S

# Programmation –2

## Présentation de CUDA

- CUDA est une variante de C, avec ajout de :
  - **Qualificatifs (*qualifiers*) de types de variables et fonctions**
  - **Pseudo-variables pour connaître "l'identité" d'un fil**
  - **Fonctions de synchronisation et fonctions d'accès atomique**
  - **Types vecteurs de 1 à 4 composantes (ex : float4)**
    $\Rightarrow$ essentiellement pour l'imagerie
  - Fonctions mathématiques, de gestion de texture spécifiques GPU
  - Sur les cartes récentes (compute capability >= 2.0) : allocation et E/S avec limitations

## Note :

- on ne traitera que des parties en gras

# Programmation –3

## Principe d'écriture d'un kernel en CUDA

- Les variables *threadIdx* et *blockIdx* contiennent le numéro du fil et de son bloc : elles sont automatiquement de valeur différentes dans chaque fil
- En accédant à un élément de tableau indexé par ces variables, on fait travailler chaque fil sur une donnée différente :
  $a[threadIdx] = b[threadIdx]$;
- Un test comme *if (threadIdx* $==$ *valeur)* permet aussi d'attribuer une tâche spécifique à un fil (ou groupe de fils : *if (threadIdx* $>=$ *valeur)*)

- Concrètement, les fils sont indicés/engendrés selon 3 axes/dimensions
- Les suffixes *.x*, *.y*, *.z* spécifient l'index de fil dans la dimension souhaitée : *threadIdx.x* renvoie l'indice dans la 1ère dimension du bloc de fils
- Similairement, les blocs sont indicés/engendrés selon 2 dimensions
- $\Rightarrow$ voir exemple page suivante

# Exemple produit terme à terme –1

## Exemple 1 : produit terme à terme de 2 vecteurs

```
import pycuda.autoinit
import pycuda.driver as drv
import numpy
from pycuda.compiler import SourceModule

# loading and compiling kernel code
# __global__ qualifies the kernel "main" function
mod = SourceModule("""
__global__ void multiply_them(float *dest, float *a, float *b)
{
  const int i = threadIdx.x;
  dest[i] = a[i] * b[i];
}
""")
multiply_them = mod.get_function("multiply_them")
```

# Exemple produit terme à terme –2

## Exemple 1 (suite) : produit terme à terme de 2 vecteurs

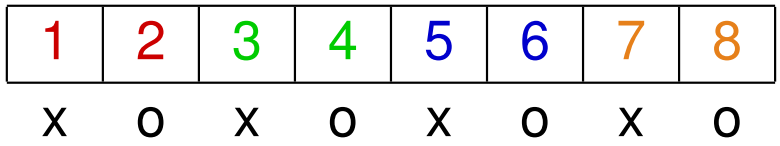
```
# prepare 2 random input vectors and an empty destination
a = numpy.random.randn(400).astype(numpy.float32)
b = numpy.random.randn(400).astype(numpy.float32)
dest = numpy.zeros_like(a)

# calling kernel (automatic allocation and copy of params)
multiply_them(drv.Out(dest), drv.In(a), drv.In(b),
              block=(400,1,1), grid=(1,1))

# verification (result should be a vector of zeroes)
print dest-a*b
```

- *block=(400,1,1)* spécifie le nombre/géométrie des fils par bloc (ici un vecteur linéaire de 400 fils)
- *grid=(1,1)* spécifie le nombre/géométrie des blocs pour l'exécution (ici un seul bloc)

# Exemple : réduction –1

## Réduction d'un tableau en mémoire partagée

- Idée : on veut sommer tous les termes d'un tableau
- Limitations : on suppose le tableau assez petit pour tenir dans la mémoire partagée d'un bloc, la taille du tableau est une puissance de 2
- Principe : approche "dichotomique" $\Rightarrow$ on somme en parallèle un ensemble de paires de termes, puis on itère sur les paires de résultats



# Exemple : réduction –2

## Réduction d'un tableau en mémoire partagée

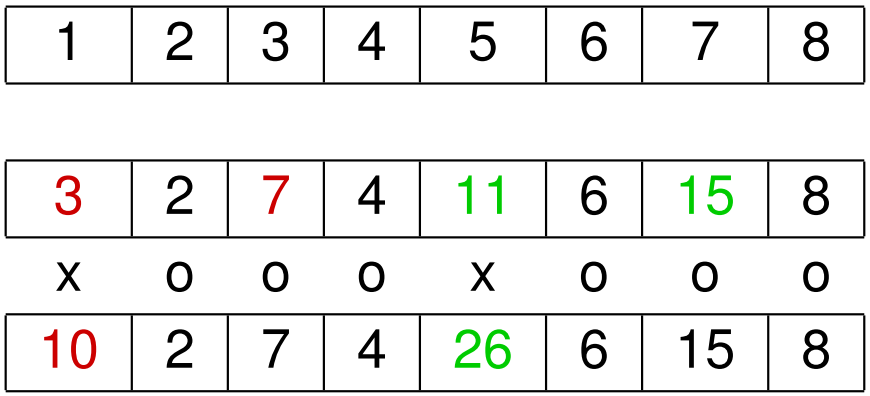
- Idée : on veut sommer tous les termes d'un tableau
- Limitations : on suppose le tableau assez petit pour tenir dans la mémoire partagée d'un bloc, la taille du tableau est une puissance de 2
- Principe : approche "dichotomique" $\Rightarrow$ on somme en parallèle un ensemble de paires de termes, puis on itère sur les paires de résultats

| 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | 7 | 8 |
|---|---|---|---|---|---|---|---|
| x | o | x | o | x | o | x | o |
| 3 | 2 | 7 | 4 | 11 | 6 | 15 | 8 |

# Exemple : réduction –3

## Réduction d'un tableau en mémoire partagée

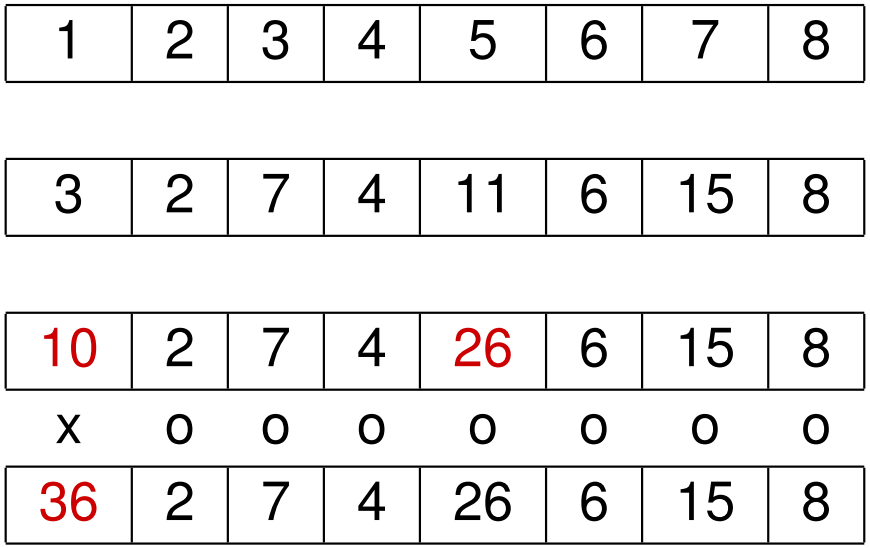
- Idée : on veut sommer tous les termes d'un tableau
- Limitations : on suppose le tableau assez petit pour tenir dans la mémoire partagée d'un bloc, la taille du tableau est une puissance de 2
- Principe : approche "dichotomique" $\Rightarrow$ on somme en parallèle un ensemble de paires de termes, puis on itère sur les paires de résultats



# Exemple : réduction –4

## Réduction d'un tableau en mémoire partagée

- Idée : on veut sommer tous les termes d'un tableau
- Limitations : on suppose le tableau assez petit pour tenir dans la mémoire partagée d'un bloc, la taille du tableau est une puissance de 2
- Principe : approche "dichotomique" $\Rightarrow$ on somme en parallèle un ensemble de paires de termes, puis on itère sur les paires de résultats



# Exemple : réduction –5

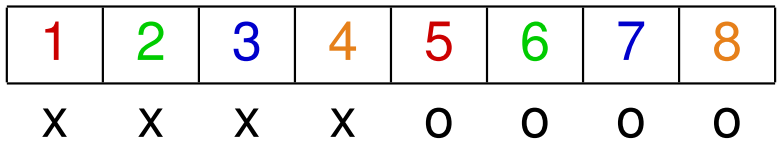
## Exemple 2–a : kernel naïf de réduction d'un vecteur

```
// a non-main function, callable only from the device
__device__ void sumAllTerms(int *vect) {
  int tid = threadIdx.x;
  for (int offset=1; offset < MAX; offset*=2) {
    if (tid % (offset*2) == 0 && tid+offset < MAX) {
      vect[tid] += vect[tid+offset];
    }
    __syncthreads();
  }
}
__global__ main(...) {
  __shared__ int vect[MAX]; // vect in shared memory

  ... // fill vector
  sumAllTerms(vect); // reduce it
  ...
}
```

# Exemple : réduction –6

## Critique de la réduction naïve

- La divergence est importante : un fil sur deux d'un warp ne fait rien
- L'opérateur modulo est coûteux sur GPU
- Idée : "regrouper" tous les premiers termes des paires pour faire travailler tous les fils d'un warp



# Exemple : réduction –7

## Critique de la réduction naïve

- La divergence est importante : un fil sur deux d'un warp ne fait rien
- L'opérateur modulo est coûteux sur GPU
- Idée : "regrouper" tous les premiers termes des paires pour faire travailler tous les fils d'un warp

| 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | 7 | 8 |
|---|---|---|---|---|---|---|---|
| x | x | x | x | o | o | o | o |
| 6 | 8 | 10 | 12 | 5 | 6 | 7 | 8 |

# Exemple : réduction –8

## Critique de la réduction naïve

- La divergence est importante : un fil sur deux d'un warp ne fait rien
- L'opérateur modulo est coûteux sur GPU
- Idée : "regrouper" tous les premiers termes des paires pour faire travailler tous les fils d'un warp

| 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | 7 | 8 |
|---|---|---|---|---|---|---|---|

| 6 | 8 | 10 | 12 | 5 | 6 | 7 | 8 |
|---|---|---|---|---|---|---|---|
| x | x | o | o | o | o | o | o |
| 16 | 20 | 10 | 12 | 5 | 6 | 7 | 8 |

# Exemple : réduction –9

## Critique de la réduction naïve

- La divergence est importante : un fil sur deux d'un warp ne fait rien
- L'opérateur modulo est coûteux sur GPU
- Idée : "regrouper" tous les premiers termes des paires pour faire travailler tous les fils d'un warp

| | | | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|
| 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | 7 | 8 |

| | | | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|
| 6 | 8 | 10 | 12 | 5 | 6 | 7 | 8 |

| | | | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|
| 16 | 20 | 10 | 12 | 5 | 6 | 7 | 8 |
| x | o | o | o | o | o | o | o |
| 36 | 20 | 10 | 12 | 5 | 6 | 7 | 8 |

# Exemple : réduction –10

## Exemple 2–b : kernel de réduction d'un vecteur

```
__device__ void sumAllTerms(int *vect) {
  int tid = threadIdx.x;

  for (int offset=MAX/2; offset>0; offset>>=1) {
    if (tid < offset) {
      vect[tid] += vect[tid+offset];
    }
    __syncthreads();
  }

}
```

# Exemple : réduction –11

- Il y a toujours des fils sans travail, mais il sont regroupés $\rightarrow$ moins de divergence !
- Encore optimisable (voir documents Nvidia) :
- $\Rightarrow$ pas besoin de synchroniser si seulement un warp
- $\Rightarrow$ dérouler/séquentialiser la boucle si peu d'itérations

# Exemple : réduction –12

## Exemple 2–c : réduction vecteur de taille quelconque

```
__device__ void sumAllTerms(int *vect) {
  int tid = threadIdx.x;

  for (int s=((MAX-1)/2)+1, b=MAX/2; b>0; b=s/2,s=((s-1)/2)+1)
  {
    if (tid < b) {
      vect[tid] += vect[tid+s];
    }
    __syncthreads();
  }
}
```

# Exemple : réduction –13

## Exemple 3 : reduction Max avec instructions atomiques

```
__device__ void max(int *vect) {
  int tid = threadIdx.x;

  // vect[0] is the supposed maximum
  if (tid > 0 && tid < MAX)
    atomicMax(&vect[0], vect[tid]);

  __syncthreads();
}
```

- Plus besoin de boucle !
- Pour les opérations faiblement conflictuelles en écriture ! (ex : petits tableaux, ...)
- Seulement sur les cartes récentes pour la "shared memory" (*compute capability >= 2.0*) , en mémoire globale depuis *compute capability >= 1.2*

# Quelques règles empiriques

- Faire simple en premier lieu, optimiser ensuite
- Eviter au maximum la divergence au sein d'un même warp
- Charger les données en registre ou mémoire partagée quand c'est possible
- Synchroniser les boucles : notamment si une partie des instructions de la boucle peut être esquivée par un *break* ou *continue*, alors faire précéder par un *threadsync()*
- Ne pas essayer de synchroniser les blocs autrement que par sortie du kernel
- Réduire un vecteur de petite taille peut se traiter par des opérations atomiques (code beaucoup plus simple)

# Installation

## Installer CUDA en local

- attention, il faut les sources du noyau (sous linux)
- adresse du site CUDA :
  http ://developer.nvidia.com/cuda-toolkit-32-downloads
- instructions dans : Linux_Getting_Started_Guide
- installer dans l'ordre :
  - driver
  - toolkit
  - gpucomputingSDK
- il est prudent de compiler les exemples du SDK (il faudra probablement installer des librairies C supplémentaires)

# Conclusions

## En résumé

- Une simple introduction : il reste des choses à dire... (accès coalescents à la mémoire, ...)
- Python + PyCUDA : alternative intéressante à C, au moins pour le prototypage rapide

## Références


- http://gpgpu.org/
- http://developer.nvidia.com/
- http://developer.download.nvidia.com/compute/cuda/1_1/Website/projects/reduction/doc/reduction.pdf
- http://documen.tician.de/pycuda/
- http://mathema.tician.de/software/pycuda