Architektur und Programmierung von Grafik- und Koprozessoren

Performanz von Computerprogrammen

Stefan Zellmann

Lehrstuhl für Informatik, Universität zu Köln

SS2018

Multithreading

- ► Moderne Prozessoren haben mehrere *Prozessorkerne* (syn. Cores), die (theoretisch) unabhängig voneinander operieren.
- Manche Systeme (insb. HPC Server-Systeme) verfügen über mehr als einen Prozessor.
- Solche Systeme werden explizit mit Multi-Threading programmiert.

Multithreading

- ► Threads sind Programmsequenzen, die nebenläufig unabhängige Instruktionen ausführen können.
- Threads verfügen i. d. R. über geteilten sowie über thread-lokalen Speicher. Zugriffe auf geteilten Speicher können, je nach Implementierung, implizite Synchronisationspunkte darstellen.
- Multithreading APIs unterscheiden sich paradigmatisch bzgl. der Art, wie einzelne Threads in Erscheinung treten, und wie Synchronisationspunkte modelliert werden.

Thread Callbacks

```
void saxpy(void* shared) {
   float* y = shared + offset0;
   float* a = shared + offset1;
   float* x = shared + offset2;
    int N = *(shared + offset3);
   for (int i = 0; i < N; ++i)
        y[i] = a[i] * x[i] + y[i];
}
void run() {
    create_thread(saxpy, pack(y,a,x,N/2));
    create_thread(saxpy, pack(y+N/2, a+N/2, x+N/2, N/2));
    join_threads();
```

Threading mit parallelen Primitiven

```
void saxpy_reduce(float* y, float* a, float* x, int N) {
   parallel_for (range<int>(N) r, N/2) {
      int i = r.index();
      y[i] = a[i] * x[i] + y[i];
   }

   float y[0] = parallel_reduce(y, y + N);
}
```

Threading durch Annotation

```
void saxpy(float* y, float* a, float* x, int N) {
    #pragma omp parallel for
    for (int i = 0; i < N; ++i)
        y[i] = a[i] * x[i] + y[i];
}</pre>
```

- ▶ Paradigmen unterscheiden sich bzgl. des Abstraktionsniveaus.
- Multi-Threading lässt sich häufig auf eine Untermenge an Primitivoperationen zurückführen.
- Parallelisierung durch Annotation ist erstrebenswert, das bedeutet im Wesentlichen, dass man parallele Code Bestandteile in sequentiellen Programmen bloß markiert.
- ► Explizite Modelle (Threading mit Callback Funktionen u. ä. erlauben kleinteiligere Manipulation des Kontrollflusses.

Beispiel: Increment einer von mehreren Threads genutzten Zählervariable:

```
void parallel_func() {
    counter++;
}
```

Unsynchronisierter Zugriff zwischen LD und ST Operationen.

Beispiel: Increment einer von mehreren Threads genutzten Zählervariable:

```
void parallel_func() {
    counter++;
}
```

Cycle	Core0	Core1
0		LD counter
1	LD counter	INC counter
2	INC counter	ST counter
3	ST counter	

Inkrement *nicht atomar* (selbst nicht bei x86 und read-modify-write Operation (z. B. addss xmm0, dword ptr [rdx])).

Beispiel: *nicht thread-sichere* vector Datenstruktur, die von mehreren Threads genutzt wird.

```
void parallel_func() {
    if (!vector.empty()) {
        vector.pop();
    }
}
```

Potentiell verändert sich der Inhalt des vectors, nachdem die Bedingung empty() abgefragt wird, und bevor tatsächlich auf den vector zugegriffen wird (pop()).

Beispiel: *nicht thread-sichere* vector Datenstruktur, die von mehreren Threads genutzt wird.

```
void parallel_func() {
   obtain_lock();
   if (!vector.empty()) {
       vector.pop();
   }
   release_lock();
}
```

Solche Code Abschnitte müssen mit geeigneten Mitteln synchronisiert werden.

Critical Sections

Code-Blöcke in parallelen Funktionen, die von allen Threads seriell ausgeführt werden.

```
void parallel_func() {
    // parallel code block

    lock(mutex); // critical section begin
    // serial code block

    unlock(mutex); // critical section end

    // parallel code block
}
```

Spielen häufig dann eine Rolle, wenn zwei Threads schreibend und lesend auf den gleichen Speicherbereich zugreifen. Vorherige Folie: ebenfalls Beispiel für Critical Section.

Barriers, Fences, etc.

Synchronisationspunkte, an denen gewartet wird, bis alle Threads sie erreicht haben.

```
#define NUM_THREADS 4
barrier_t barrier;
void parallel_func() {
    // parallel execution
    wait(barrier);
    // we get here when wait() was
    // called NUM_THREADS times
}
void run() {
    barrier = init_barrier(NUM_THREADS);
    for (int i = 0; i < NUM_THREADS; ++i)</pre>
        create_thread(parallel_func);
    join_threads();
}
```

Spin-Locks vs. Semaphore

```
// Waiting with spin locks
void spin_lock_wait() {
    while (!condition()) { /* wait */ }
    do_work();
}
// Semaphores
semaphore_t sem;
void semaphore_wait() {
    sem.wait();
    do_work();
}
void run_semaphore_wait() {
    semaphore_wait();
    //...
    if (ready)
        sem.notify();
}
```

Spin-Locks vs. Semaphore

- Spin-Locks: "verbrennen CPU Cycles" die CPU wartet aktiv, bis die Bedingung wahr ist.
- Semaphore: (betriebssystemabhängig!) Thread wartet in idle Zustand (verbraucht keine Energie!). Anderer Thread weckt den wartenden Thread auf.
- Abwägung: Semaphore Notification geht mit Context Switch einher (Latenz), während Spin-Locks Strom verbrauchen. Ggf. ist es sinnvoll, ein paar Taktzyklen lang aktiv zu warten, um die Latenz durch den Context Switch zu vermeiden (applikationsspezifisches Wissen!).

Atomics

```
atomic < int > counter(0); // shared variable
void parallel_func() {
    counter++;
}
```

- ► Hardware stellt atomare Instruktionen zur Verfügung. Können u. U. schneller sein als Critical Sections.
 - ► ATOMIC_ADD, ATOMIC_INC, ATOMIC_COMPARE_AND_SWAP etc.
 - ▶ i. d. R. **kein** ATOMIC_MUL!
- ▶ Behandlung von *Atomics* unter Cache Gesichtspunkten im Abschnitt zu Non-Uniform Memory Access Architekturen.

Thread Pools

- Multi-Threading Modelle, die implizit oder per Annotation funktionieren, erzeugen häufig zu Programmstart eine Anzahl Threads, die dann bei Bedarf verwendet werden. Dadurch entfällt Verwaltungs-Overhead, der ggf. durch zu häufige Thread Erzeugung entsteht.
- Mit expliziten, Callback basierten Modellen muss man dies explizit programmieren. Wartezeiten zwischen parallelen Code-Blöcken werden dann mit den oben genannten Synchronisationsmechanismen implementiert.

Multithreading vs. SIMD

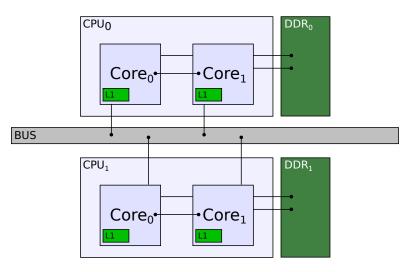
- SIMD Befehle werden in "lock-step" ausgeführt, wartende SIMD Lanes werden ausmaskiert. Threads führen hingegen ihren Kontrollfluss aus und warten an vordefinierten Synchronisationspunkten auf andere Threads.
- Kontrollfluss und Datenpfad zweier Threads darf völlig verschieden sein (etwa Multiprozess und Multi-User OS). (Das ist aber im Sinne der Performanz eines einzelnen Computerprogramms nicht unbedingt sinnvoll.)
- Multithreading und SIMD sind orthogonale Paradigmen.
 Moderne Prozessoren unterstützen meist beides.
- Entwicklung geht sowohl hin zu mehr Cores, als auch zu breiteren SIMD Lanes.

NUMA

- ► Symmetric Multiprocessors (SMP) (auch: UMA Maschinen):
 - ► Alle Prozessoren und Kerne teilen Speicher, es dauert von überall her gleich lang, auf Speicher zuzugreifen.
 - ► Alle Speicherzugriffe gehen durch den geteilten Bus ⇒ Skalierungsprobleme.
- Non-Uniform Memory Access (NUMA):
 - Speicher ist physisch verteilt und einzelne Prozessoren oder Kerne haben lokalen Speicher.
 - Konzeptbedingt: entfernte Speicherzugriffe haben h\u00f6here Latenz.
 - Architektur speziell dafür, Skalierungsprobleme zu umgehen (Interconnect wird nur für Kommunikation genutzt).

NUMA und Topologien

Einfache BUS Topologie



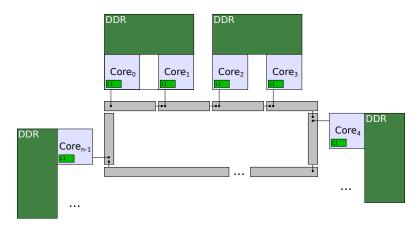
NUMA und Topologien

Einfache BUS Topologie

- ► Kommt bei vielen Multi-Core Architekturen vor (vereinfachte Darstellung, es gibt nur L1 Caches).
- Speicherzugriffe in den eigenen RAM müssen zwischen Core₀ und Core₁ synchronisiert werden. Ggf. verändert Core₀ ein Datum, dass Core₁ im lokalen L1 Cache auch bereits geändert hat.
- ▶ Synchronisation zwischen Cores von CPU_0 und CPU_1 erfordert Kommunikation über den $BUS \Rightarrow$ hörere Latenz. Dadurch ergeben sich i. Allg. nichtuniforme Speicherzugriffe.

NUMA und Topologien

Kompliziertere Topologien (z. B. Ring-BUS)



Legacy Chipsets

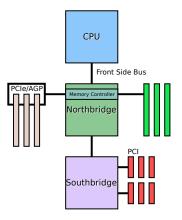


Abbildung: Memory Controller war Teil der *Northbridge* (separater Chip auf Mainboard). Später: Northbridge (und MC!) Teil der CPU.

Moderne Chipsets

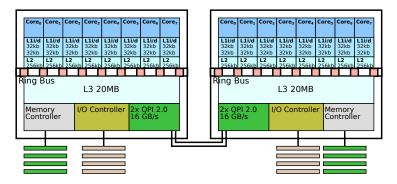


Abbildung: 2 \times Intel "Sandy Bridge" Xeon E5-2670 Konfiguration, zwei QPI Links zwischen Prozessoren (8 GT/s bei 2 byte pro Transfer, bidirektional, jeder Link in jede Richtung 16 GB/s \Rightarrow total 32 GB/s.). Vgl.: Performance Evaluation of the Intel Sandy Bridge Based NASA Pleiades Using Scientific and Engineering Applications, Saini et al. 2013.

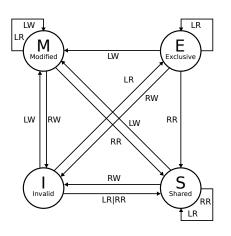
Cache-kohärentes NUMA

- Problem bei Architekturen mit Caches: was passiert, wenn beide Prozessoren das gleiche geteilte Datum im Cache speichern, und ein Prozessor ändert das Datum lokal?
- ▶ Die meisten Infrastrukturen (Hardware + OS) implementieren cache-kohäherentes NUMA (ccNUMA).
- Cache-Kohärenz Protokolle lassen es für Entwickler so aussehen, als gäbe es keine lokalen Caches, sondern als wären alle Caches geteilt.

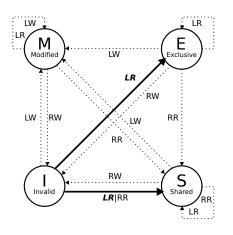
Cache-Kohärenz Protokolle

- Werden bspw. vom Cache Controller (CPU Funktionseinheit) umgesetzt – z. B. ("Snooping Protokolle):
 - write-invalidate: der schreibende Prozessor sendet ein Token über den Interconnect, das den gerade beschriebenen Cache Block identifiziert und invalidiert. Dann kann die lokale Kopie angepasst werden.
 - write-update: der schreibende Prozessor verteilt via Broadcast das neue Datum, und alle Prozessoren aktualisieren die Kopie im lokalen Cache.

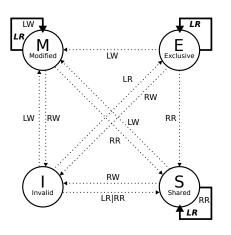
- Jeder Prozessor verwaltet seinen lokalen Cache.
- Protokoll modelliert Zustandsautomat. Cache Line in einem der Zustände
 - Modified kein anderer Cache speichert die Cache Line, sie wurde außerdem bereits modifiziert.
 - ► Exclusive kein anderer Cache speichert die Cache Line, sie kann modifiziert werden, wurde aber noch nicht modifiziert.
 - Shared andere lokale Caches haben eine Kopie der Cache Line mit identischem Inhalt.
 - Invalid Cache Line wird derzeit nicht benutzt.
- Die Prozessoren tauschen untereinander Nachrichten aus, um ihre lokalen Caches abzugleichen.
- Wichtig: modifizierte Cache Lines sind auch exklusive Cache Lines.



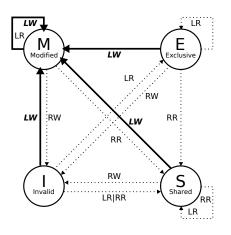
▶ Mögliche Zustandsübergänge aufgrund von local read (LR), local write (LW), snooped remote read (RR) oder snooped remote write (RW).



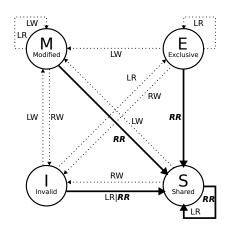
► LR Zustandsübergang von Invalid (Prozessor liest Cache Line): prüfe (über Bus), ob Cache Line geteilt. Falls ja: Shared, sonst: Exclusive.



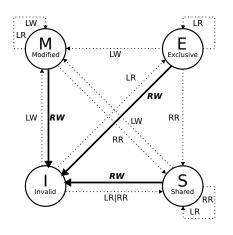
► **LR** Alle anderen Zustände: Keine Veränderung.



- LW Alle lokalen Schreiboperationen überführen Cache Line in Modified State.
- Falls vorher Invalid oder Shared, sende Broadcast Nachricht an alle anderen Prozessoren, diese invalidieren ihre lokale Kopie.



- ► RR Entdeckt Prozessor eine Leseanforderung über Bus, wird Cache Line Shared.
- ► Im Fall das vorher Invalid, lese Cache Line aus Speicher und verteile über Bus.



RW Schreiboperationen über Bus führen dazu, dass Cache Line invalidiert und in den Speicher zurückgeschrieben wird.

- Es kann nur in Cache Lines geschrieben werden, die im Modified oder Exclusive Zustand sind.
- ▶ Remote Writes werden mit sog. read for ownership implementiert: Core möchte in Cache Line schreiben, die im Shared Zustand ist. Dazu schickt er zuerst per Broadcast eine Nachricht über den Bus, dass alle anderen Cores ihre Kopie der Cache Line invalidieren. Dann liest der Core die Cache Line und versetzt sie lokal in den Exclusive Zustand. Danach kann geschrieben werden (modify).
- ▶ Hält ein Core eine Cache Line im *Modified* Zustand, muss er den Bus überwachen (*snooping*, ob andere Cores auf die Cache Line zugreifen wollen. Für den Fall (und insb.: *erst dann*) muss der Core das geänderte Datum erst in den Hauptspeicher zurückschreiben. Die entfernte Leseoperation kann bspw. direkt aus dem Cache bedient, oder zurückgehalten werden.

- Prinzip: opportunistisch Kommunikation über Bus nur falls nötig, modifiziere Speicher nur falls nötig.
- Lesen aus lokalem Cache ist billig.
- Lokale Schreiboperationen führen nur zu Datenkommunikation, falls Cache Line geteilt.
- Schreiben über Bus ineffizient.
- "False Sharing": geteilte Cache Line enthält ggf. Daten, die tatsächlich thread-lokal sind.
- Andere Protokolle: MSI, MESIF, MOSI, etc.

Programmieren für NUMA Systeme

- Spezialisierte APIs, z. B. libnuma unter Linux, Funktionen wie numa_alloc_local(), numa_bind().
- ▶ Tools wie numact1: "pinne" Prozess an bestimmten Core, etc.
- ▶ APIs und Tools exponieren Funktionalität des Betriebssystems.

NUMA: Atomare Instruktionen

```
atomic<int> counter(0); // shared variable
void parallel_func() {
    counter++;
}
```

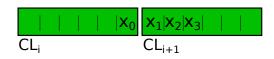
- ▶ Atomare Operationen gehen durch die Cache Hierachie.
- Was passiert, wenn Cores geteilte Variable atomar modifizieren?

NUMA: Atomare Instruktionen

- Einfache Implementierung (vergleichbar mit Critical Sections!):
 - 1. Sende LOCK auf Bus (broadcast).
 - 2. Cores empfangen LOCK und schließen alle Speicheroperationen ab. Core, der LOCK initiiert hat, wartet darauf.
 - When ACK von allen Cores empfangen, führe atomare Operation aus. Sende dann broadcast Nachricht an alle Cores, dass sie weiterarbeiten können.
 - 4. Dies ist ausgesprochen langsam.
- ▶ Besser: MESI Protokoll read for ownership ⇒ Cache Line, die Datum beinhaltet ist in Exclusive Zustand und kann atomar modifiziert werden.

NUMA: Atomare Instruktionen

- Problem: Alignment
 - MESI Protokoll implementiert diese Art von "Locking" auf Cache Line Level. Funktioniert nicht, wenn das geteilte, zu modifizierende Datum zwei Cache Lines "überlappt".
 - 2. x86 bspw. implementiert den langsameren LOCK basierten Modus für *unaligned atomic* Instruktionen.



Default Alignment von C Datentypen mit GCC

- char: 1-byte.
- ▶ short: 2-byte.
- ▶ int: 4-byte.
- ► Zum Vergleich: Cache Line Alignment (x86): 64-byte.
- Zusammengesetzte Typen (struct) "erben" das Alignment vom ersten Member. Typen wie std::atomic<> unterstützen atomare Operationen auf zusammengesetzten Typen.
- ▶ Daher: stelle sicher, dass atomar genutzte Typen aligniert (z. B. __attribute__((align(64))).

Packing Zusammengesetzter C-Typen

```
struct P1 {
    char c;
    int i[3];
    short s;
};
struct P2 {
    int i[3];
    short s;
    char c;
};
int main() {
    struct P1 p1;
    struct P2 p2;
    printf("%d,", (int)sizeof(p1));
    printf("%d\n", (int)sizeof(p2));
}
Output (Apple Clang ANSI-C Compiler, 7.0.2): 20,16 (!)
```

Alignment und Packing

Bemerkungen

- ▶ Auf Architekturen mit Caches sollten *inner loop* Typen cache-effizientes Alignment und Packing haben.
- ▶ Da atomare Operationen mit Cache Line Granularität durchgeführt werden, ist auf NUMA Systemen Alignment und Packing noch viel wichtiger!
- Mehrkernprozessoren wie Core i7 etc. sind heutzutage immer NUMA Systeme und implementieren MESI oder Varianten davon (⇒ Relevanz).

NUMA "Takeaways"

- ► Multi-Core und Many-Core Architekturen ⇒ kompliziertere Speicherarchitekturen.
- NUMA hilft, Skalierungsprobleme zu vermeiden, da weniger Kommunikation auf dem Bus.
- Dadurch ist es schwieriger, Latenz von Speicherzugriffen einzuschätzen, viele entfernte Speicherzugriffe werden zu Bottlenecks.
- ► Caches nicht direkt addressierbar ⇒ zusätzliche Chipfläche und Software Cycles für Cache-Kohärenz Protokolle.
- NUMA Komplexität wird zwar von den meisten Architekturen durch Cache-Kohärenz versteckt, Entwickler von Multithreading Applikationen sollten jedoch über nichtuniforme Speicherzugriffe wissen.

Abgrenzung

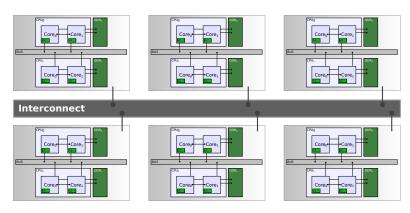
- Symmetric Multi-Processing ein Speicher, viele Prozessoren, die mit gleicher Latenz auf den Speicher zugreifen.
- Non-Uniform Memory Access Kerne greifen mit niedriger Latenz auf lokalen Speicher zu.
- Distributed Memory Prozessoren verfügen über lokalen Speicher und sind über Interconnect (Netzwerk) miteinander verbunden. Zugriff auf entfernten Speicher ist nicht direkt möglich. Vielmehr muss der dem entfernten Speicher zugeordnete Prozessor benachrichtigt werden, dass von entfernt auf Speicher zugegriffen werden soll.

Abgrenzung

- Abgrenzung zwischen Architekturen teils schwierig. NUMA Systeme haben bspw. Charakteristiken von Distributed Memory Systemen, jedoch werden diese durch die Implementierung (z. B. Cache-Kohärenz) versteckt.
- Distributed Memory Systeme zeichnen sich üblicherweise durch räumliche Trennung der Rechenknoten aus.

Hybride Systeme

Distributed Memory Systeme sind in Wirklichkeit oft hybride Systeme: Rechenknoten sind per Interconnect verbunden und sind selbst SMP oder NUMA Systeme.



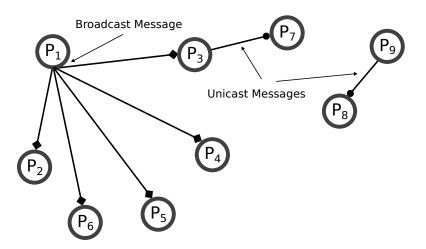
Programmiermodelle

- Es gibt verschiedenste Programmiermodelle für Distributed Memory Systeme, z. B. aus dem Umfeld Netzwerkprogrammierung mit Protokollen wie TCP/IP.
 - Programmierung mit Sockets.
 - Programmierung über Web Protokolle wie HTTP.
- Im High-Performance Computing (HPC) Umfeld spielt jedoch der Message Passing Interface (MPI) Standard eine wichtige Rolle.

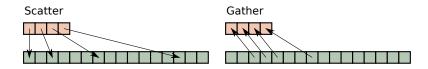
Message Passing Interface

- Sockets erlauben Zugriff auf Netzwerkschnittstelle auf sehr niedrigem Level und per direkter Kommunikation mit dem Betriebssystem.
- ► Im HPC Umfeld kommen jedoch häufig schnelle Interconnects (z. B. InfiniBand) zum Einsatz, die nicht IP basiert sind.
- Solche Netzwerke kann man teils plattformspezifisch programmieren, MPI ist jedoch ein standardisierter Ansatz um HPC Interconnect Architekturen plattformunabhängig zu nutzen.
 - InfiniBand bspw. kann man auch mit Sockets programmieren (sog. IP over IB), das vermeidet man aber, da IP Stack und OSI Schichtenmodell stark latenzbehaftet sind.

Message Passing



Message Passing



Scatter verteilt Daten, Gather sammelt Daten. Bemerkungen bzgl. Kohärenz und Lokalität gelten auch hier.

Message Passing

Message Typen

- Unicast: MPI_send(), MPI_recv()
- Broadcast: MPI_Bcast()
- Scatter/Gather: MPI_Scatter(), MPI_Gather()
- Reduktion: MPI_Reduce()
- ...

Kollective Aufrufe wie Broadcasting müssen synchronisiert werden (MPI_Barrier()).

Struktur eines MPI Programms

```
#include <mpi.h>
#define MASTER O
#define SLAVE 1
int main(int argc, char** argv) {
    MPI_Init(&argc, &argv);
    int rank;
    MPI_Comm_rank(MPI_COMM_WORLD, &rank);
    if (rank == MASTER) {
        char const* msg = "MSG";
        MPI_Send(msg, 4, MPI_BYTE, SLAVE, 1,
                 MPI_COMM_WORLD);
    else {
        char str[32]:
        MPI Status s:
        MPI_Recv(str, 32, MPI_BYTE, MASTER, 1,
                 MPI_COMM_WORLD, &s);
    MPI_Finalize();
```

Struktur eines MPI Programms

Übersetzung mit speziellem MPI Compiler, z. B.

```
mpicc hello_mpi.c -o hello_mpi
```

Führe MPI Programm auf dafür konfiguriertem Cluster aus, z. B.

```
mpirun -n 256 hello_mpi oder
```

mpiexec -n 256 hello_mpi

MPI Implementierungen

- Verschiedene offene und nicht-offene Implementierungen.
 - ▶ insb. MPICH und OpenMPI
- Ursprünglich Fortran und C.
- ▶ Adaptionen für verschiedene Sprachen, z. B. C++ Interface.

MPI Saxpy

```
#include <mpi.h>
int main(int argc, char** argv) {
   MPI_Init(argc, argv);
    int comm_size, rank;
    MPI_Comm_size(MPI_COMM_WORLD, &comm_size);
    MPI_Comm_rank(MPI_COMM_WORLD, &rank);
    int N = atoi(argv[1]);
   float y[N], a[N], x[N];
   if (rank == 0)
        init(y, a, x);
    int N_local = N / comm_size;
   float yl[N_local], al[N_local], xl[N_local];
   // cont. on next slide
```

MPI Saxpy

```
// cont. from prev slide
MPI_Scatter(y, N_local, MPI_FLOAT,
            yl, N_local, MPI_FLOAT,
            O, MPI_COMM_WORLD);
MPI_Scatter(a, N_local, MPI_FLOAT,
            al, N_local, MPI_FLOAT,
            0, MPI_COMM_WORLD);
MPI_Scatter(x, N_local, MPI_FLOAT,
            xl, N_local, MPI_FLOAT,
            O. MPI COMM WORLD):
saxpy(vl, al, xl, N_local);
MPI_Gather(vl, N_local, MPI_FLOAT,
           y, N_local, MPI_FLOAT,
           O. MPI COMM WORLD):
```

Message Passing Bemerkungen

- NUMA Systeme (auch wenn sie in einer CPU verbaut sind) sind verteilte Systeme. Sie versenden untereinander Nachrichten.
- Cache-Kohärenz Protokolle (z. B. MESI) verstecken Message Passing. Cache-Kohärenz ist fehlertolerant, bringt jedoch Overhead mit. Alternative: nicht-cache-kohärente NUMA Systeme mit Message Passing.
- Mehrere MPI Prozesse können auf einer CPU ausgeführt werden!
 - ► Fabrique (z. B. *QuickPath Interconnect* (QPI)) ist dann das Netzwerk.