# コースの概要

この動画で学ぶこと

- ✔ このコースはどんなコースかが分かる
- ✔ コースの進め方を理解できる

# 本コースの対象者/前提条件

# 対象者

Pythonを使ったCUDA\*での並列計算を身に付けたい方

\*NVIDIAが提供するGPU向けのプログラミング言語

# 前提条件

Pythonのプログラミングの知識(基本的な知識+Numpy) 数値計算の経験がある方が望ましい(\*必須の条件ではない)

# 本講座の内容

Pythonでの数値計算を逐次計算ではなく並列計算(GPU)で行う方法を学ぶ講座

Pythonを使った逐次計算 (普段のプログラミング) Python + CUDAを使った並列計算 (本講座で取り扱う内容)



計算負荷が大きな計算では 実行時間がかかる



GPUを使って 計算を高速化





主な応用先\*

- ・科学技術計算
  - ・画像処理
  - ・機械学習

\*(注意点) アルゴリズムを 自分で書く人向け

# 逐次計算とは

# 1の演算装置(コア\*)で順番に計算する事

\*四則演算など計算を行う部分の事

#### 逐次計算のイメージ

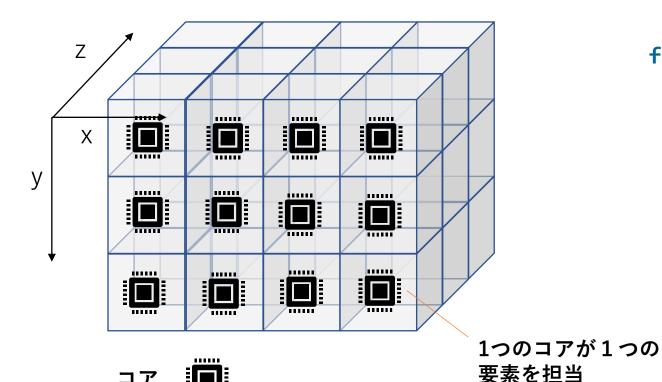
# y X

#### 逐次計算のプログラムの例

# 並列計算とは

複数のコアで仕事を分割すること。forループの部分が並列に実行され、高速化

並列計算のイメージ



#### 並列計算のプログラムの例

```
for i in range(num_iterations):
    #
    # 演算装置毎の計算内容
    #
    add_two_arr(res, arr1, arr2)
```

forループが 3つ無くなった **⇒計算の高速化** 

# GPU(Graphics Processing Unit)とは

CUDAコアを大量に積んだ高速な演算装置。コストパフォーマンスに優れる

#### 演算装置としてのCPUとGPUの比較

	CPU	GPU
コア数	数コア~28コア	2000 ~ 5000CUDAコア
演算性能[TFLOPS]	0.1~3	8 ~ 15
メモリ[GB]	4~128	5 ~ 48
コストパフォーマンス	$\triangle$	
その他	if文などの分岐にも強い 複雑な処理が得意	単純な演算しかできない 複雑な処理は苦手

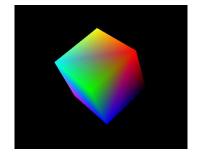
#### GeForce RTX 2080Ti



# GPGPU(General Purpose GPU)と並列計算

もともとはグラフィック用途だったのを汎用的な計算に拡大(GPGPU) GPGPUを扱うには3種類の言語(OpenCL / CUDA / OpenACC)がある

グラフィック用途



Shader言語

**GPGPU** (General Purpose GPU)

> 量子 化学

物理

ΑI

数值 流体力学

分子 動力学法

金融

プログラミング言語



マルチプラットフォーム



ポピュラー 計算が最も高速

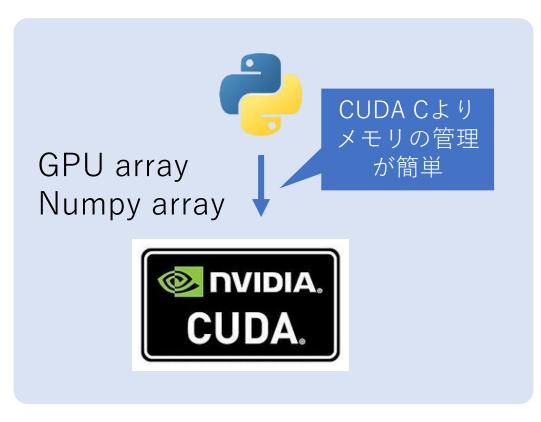


OpenACC 簡易にGPU計算可能

# CUDA(Compute Unified Device Architecture)/PyCUDAとは

CUDAとはGPU並列を扱う為のプログラミング言語。C言語を拡張したもの PyCUDAではCUDAをPythonから扱え、メモリ管理が楽

# **PyCUDA**



#### CUDA

- ・NVIDIA社が開発環境を提供している GPU用プログラミング言語
- ・GPU用言語として人気。最も高速化が可能
- ・C言語をGPU計算向けに拡張したもの(CUDA C)

## **PyCUDA**

- ・CUDA CをPythonから扱う為のラッパーライブラリ
  - ・低レベル ~ 高レベルまで広いインターフェース 柔軟にプログラミング可能

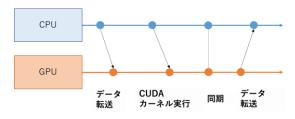
# このコースはどんなコースか

# GPU/CUDAの基礎知識から始めて、PyCUDAを使ったCUDAの入門講座

## GPU/CUDAの基礎







得られる知識

GPUの基礎的な知識 CUDAの前提知識

# PyCUDAプログラミング



得られる知識

PyCUDAの基礎的な計算 PyCUDAの便利なライブラリの使い方 オマケ:Google Colab以外の環境

# コース全体の流れ

#### ①GPUの基礎知識

ハードウェアの知識 (マザーボード/メモリ/GPUの 性能指標)

#### ③PyCUDAプログラミング

GPU上での多次元配列の四則演算 GPUの各種メモリの使い方 GPUでのライブラリの使い方 (cuBLAS/thrust/atomic演算など)

数値計算の 周辺知識 CUDAの 基礎知識 PyCUDA プログラミング

オマケ

②CUDAの基礎知識

<u>4オマケ</u>

CUDAでの計算の流れ CUDAの専門用語 GPUのメモリ構造 C言語のミニマム知識

デスクトップPCへのGPU環境構築

それではコースでお待ちしております

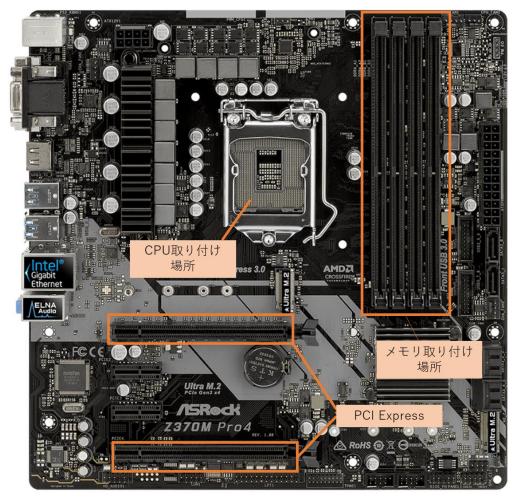
# ハードウェアの基礎(GPU以外)

この動画で学ぶこと

✓ 数値計算で必要な知識としてマザーボードや メモリ、PCI Expressとは何かを理解する

# マザーボード

# CPU/GPUやメモリ、ハードディスクなどが取り付けられ、制御する基盤



ASRock Z370M PRO4

#### マザーボードについて知っておくべきこと

- ・CPU/GPUなどあらゆる機器をコントロール
  - ・メモリを取り付ける場所がある
- ・PCI Expressにはグラフィックカードやサウンドカードなどを取り付け、機能を拡張できる

# ヴ ポイント

CPUとGPUはマザーボードのPCI Expressを介して、 メモリをやり取りしている

# メモリ

プログラムの変数を格納しておく場所。CPUとGPUでメモリが独立している メモリ以上に配列を確保できないので、メモリ容量は注意が必要

#### CPUメモリ(数~200[GB])



例: 16[GB] x 4基

= 64[GB]

100 x 100 x 100の要素を持つ 単精度(4byte)の3次元配列の場合

4 x 100 x 100 x 100[Byte] ⇒ 必要メモリ数: 約4[MB]

#### **GPUメモリ(数~48[GB])**



例: 11 [GB] x 1基

= 11[GB]

# ヴ ポイント

CPUとGPUはメモリが 別々に分かれている (GPU並列計算で重要なのはGPUメモリ)

# ハードウェアの基礎(GPU)

この動画で学ぶこと

✓ GPUの性能について、代表的な指標を理解する。

# GPUの性能指標

GPUには様々な指標がある。重要な指標としては、 CUDAコア数、FP32、メモリ構成、消費電力

製品仕様	NVIDIA® GeForce® RTX™2080 Ti
GPUアーキテクチャ	Turing
コードネーム	TU102
CUDAコア数	4352
Tensorコア数	544
単精度浮動小数点数演算性能 [FP32]	13.4[TFLOPS]
メモリ構成	11[GB]
放熱機構	Active
補助電源	8pin + 8pin
消費電力	250[W]
オプション対応	NVLink



# CUDAコア

# CUDAコアとはGPUで演算を行うコア。 CPUより演算能力が低いが、CPUと比べ、コア数が多い

製品仕様	NVIDIA® GeForce® RTX™2080 Ti
GPUアーキテクチャ	Turing
コードネーム	TU102
CUDAコア数	4352
Tensorコア数	544
単精度浮動小数点数演算性能 [FP32]	13.4[TFLOPS]
メモリ構成	11[GB]
放熱機構	Active
補助電源	8pin + 8pin
消費電力	250[W]
オプション対応	NVLink

#### CPUとGPUのコア数

CPU: 多くは10コア前後 (\*高額なCPUを除く)

GPU: **2000 ~ 4000コア** 

# ヴ ポイント

CUDAコア数が並列度の上限を決める ⇒計算能力に直結(次のFP32と関係)

# FP32

# 単精度浮動小数点数演算性能(FLOPS)とは"1秒間に行える単精度の計算回数"

製品仕様	NVIDIA® GeForce® RTX™2080 Ti
GPUアーキテクチャ	Turing
コードネーム	TU102
CUDAコア数	4352
Tensorコア数	544
単精度浮動小数点数演算性能 [FP32]	13.4[TFLOPS]
メモリ構成	11[GB]
放熱機構	Active
補助電源	8pin + 8pin
消費電力	250[W]
オプション対応	NVLink

#### FLOPS\*の計算方法

\*FLoating point number Operations Per Second

#### FLOPS= FLOPS/Clock数 x Clock数 x コア数

1[TFLOPS]:1秒間に1兆回計算可

ヴ ポイント

T[テラ]: 10<sup>12</sup>

一般的なCPU(8コア):0.3[TFLOPS] GPU: 8 ~ 15[TFLOPS]なので GPUがCPUより数十倍高速

# メモリ

# GPUのメモリは5~11[GB]程度のものが多くCPUと比べ、あまり大きくないメモリが計算限界を決めるので搭載メモリには注意

製品仕様	NVIDIA® GeForce® RTX™2080 Ti
GPUアーキテクチャ	Turing
コードネーム	TU102
CUDAコア数	4352
Tensorコア数	544
単精度浮動小数点数演算性能 [FP32]	13.4[TFLOPS]
メモリ構成	11[GB]
放熱機構	Active
補助電源	8pin + 8pin
消費電力	250[W]
オプション対応	NVLink

#### 実際にありうるケース

3次元配列で要素数が 3x3のテンソル量qの配列 (x, y, z) = 300 x 300 x 300の場合、 q[9][300][300][300] ⇒必要なメモリは約0.9[GB]

# ヴ ポイント

3次元以上の多次元配列では、 メモリ消費量大 どれだけ使っているか概算する

# 消費電力・補助電源

# GPUは200[W]前後のものが多く、比較的電力が大きい GPUは必要な電力を供給するために補助電源が必要なものが多い

製品仕様	NVIDIA® GeForce® RTX™2080 Ti
GPUアーキテクチャ	Turing
コードネーム	TU102
CUDAコア数	4352
Tensorコア数	544
単精度浮動小数点数演算性能 [FP32]	13.4[TFLOPS]
メモリ構成	11[GB]
放熱機構	Active
補助電源	8pin + 8pin
消費電力	250[W]
オプション対応	NVLink

#### 補助電源の挿込み箇所



#### 6-pin



# ヴ ポイント

GPUを複数取り付ける場合は 消費電力の合計と ピンの数が足りるかチェックが必要

# Tesla / GeForce / Quadro

Teslaシリーズが最も科学技術計算向けだが、かなり高価 GeForceシリーズは計算速度と価格のバランスがよい Quadroシリーズは過去のGPUと現在のGPUで性能が大きく異なる

\*()は最近のモデル

	Tesla	GeForce	Qudro*
計算速度	0	0	$\times (\bigcirc)$
メモリ		$\triangle$	$\triangle(\bigcirc)$
コスト パフォーマンス	×	0	$\times$ ( $\times$ )
特徴	科学技術計算用 倍精度などの計算向き	ゲーミング用 汎用用途 基本的に単精度で計算	グラフィック向け

# Tesla K80について

AWSやGoogle Colabなど多くのクラウドサーバー上で利用されている世代としては古いが、メモリが多い(24GB)。放熱機構がpassiveで放熱に難

製品仕様	NVIDIA® Tesla K80
GPUアーキテクチャ	Kepler
コードネーム	-
CUDAコア数	4992
Tensorコア数	-
単精度浮動小数点数演算性能 [FP32]	5.6[TFLOPS]
メモリ構成	24[GB]
放熱機構	Passive
補助電源	8pin
消費電力	300[W]
オプション対応	-



# CUDAの基礎知識(1)

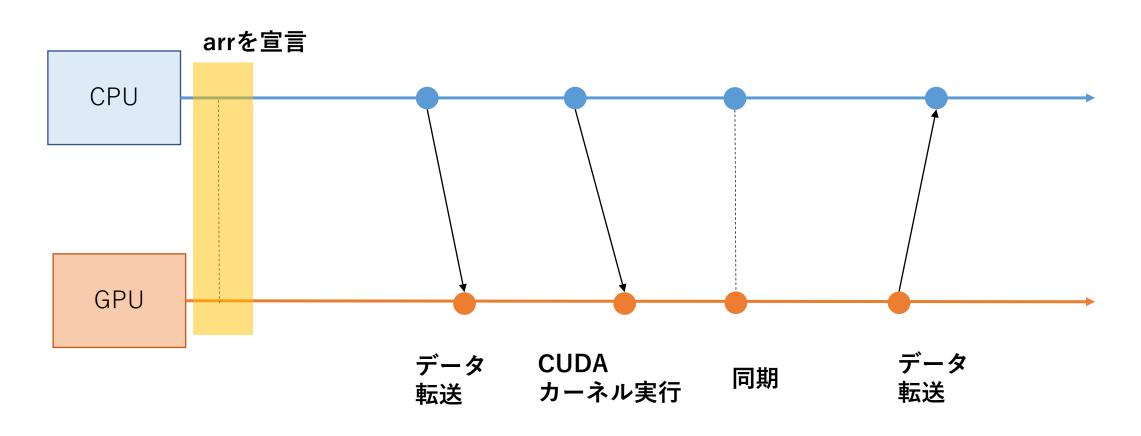
この動画で学ぶこと

- ✓ CUDAでの計算の流れを理解する
- ✔ grid / block / threadなど基礎用語について学ぶ

\*たくさんの用語が出てきますが、1度に全てを理解する必要はありません

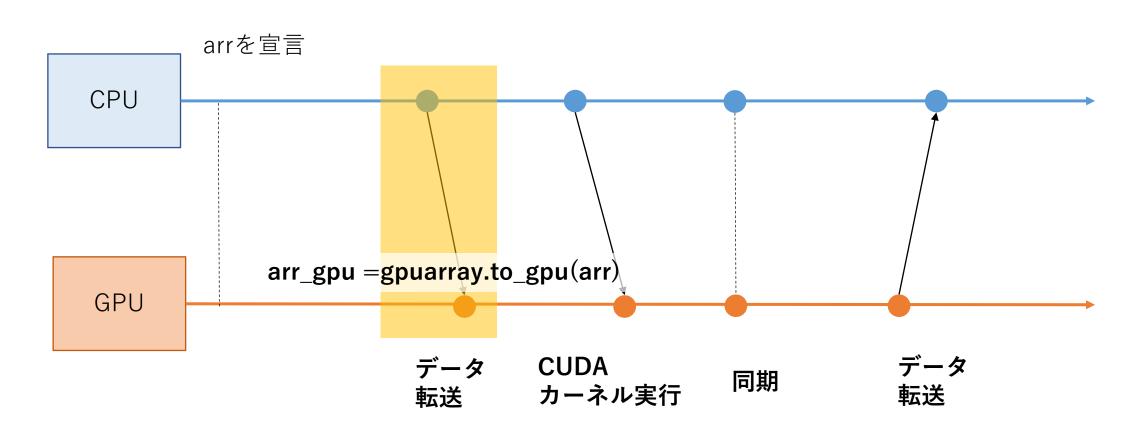
CPUからGPUへメモリを送信し、CUDAカーネル\*を実行するのが基本の流れ

\*実際の計算する関数部分



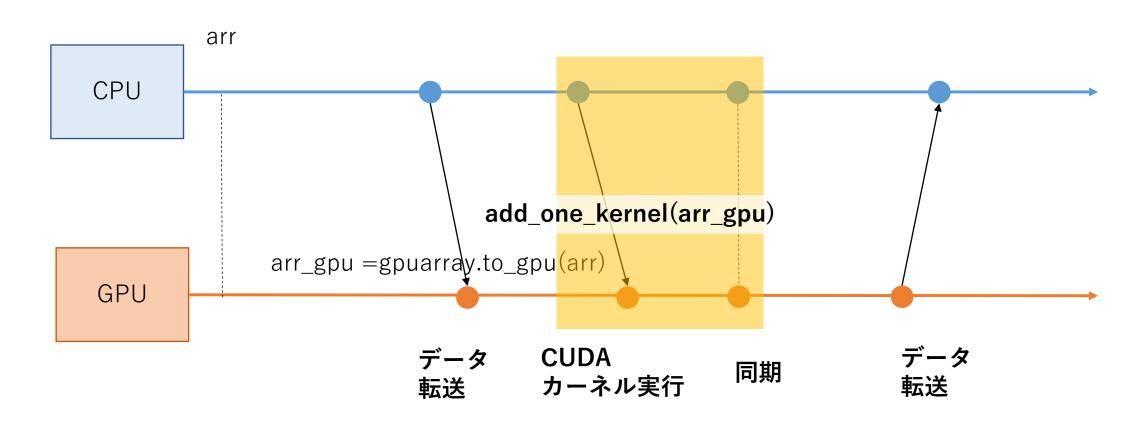
CPUからGPUへメモリを送信し、CUDAカーネル\*を実行するのが基本の流れ

\*実際の計算する関数部分



CPUからGPUへメモリを送信し、CUDAカーネル\*を実行するのが基本の流れ

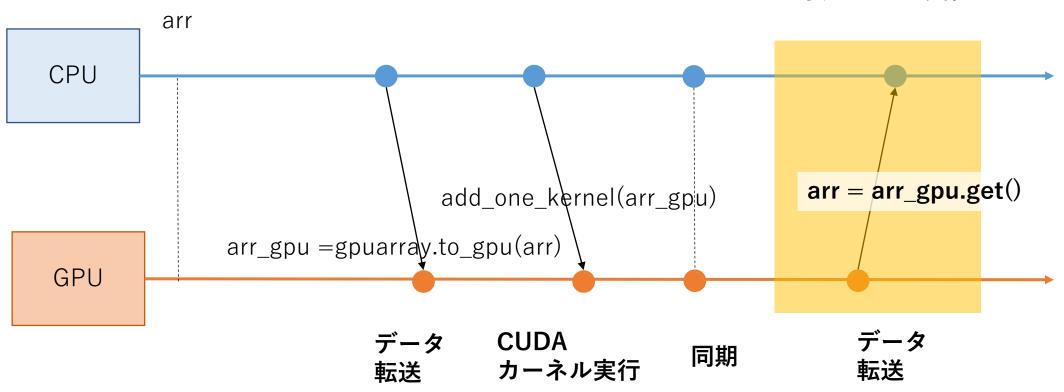
\*実際の計算する関数部分



CPUからGPUへメモリを送信し、CUDAカーネル\*を実行するのが基本の流れ

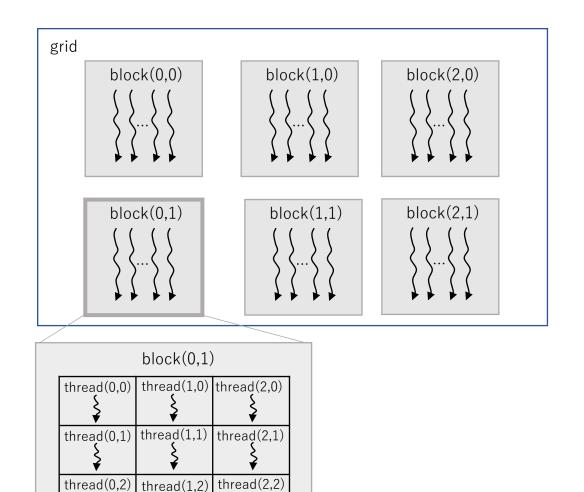
\*実際の計算する関数部分

必要に応じて実行



# grid / block / thread

CUDAではthreadと呼ばれる単位で並列化される。この他にも階層構造がある



#### grid

全てのブロックの集まり。GPUそのものイメージ的には"都道府県"

#### block

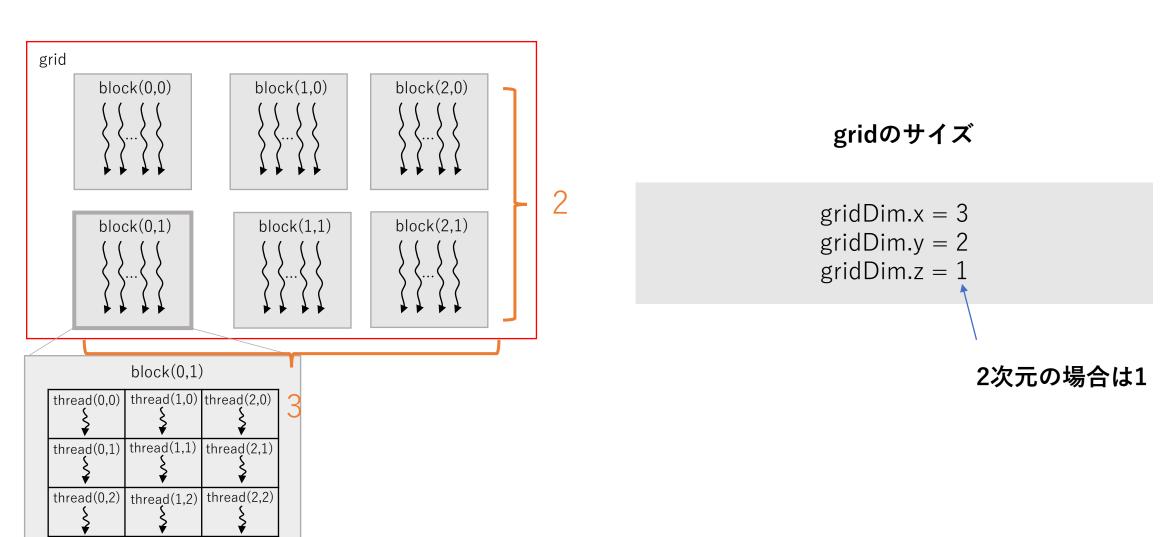
threadがいくつか集まった単位 gridの中にx, y, z座標を持っている イメージ的には"市町村"

#### thread

GPU並列する際に計算を担う単位 blockの中にx, y, z座標を持っている イメージ的には"番地"

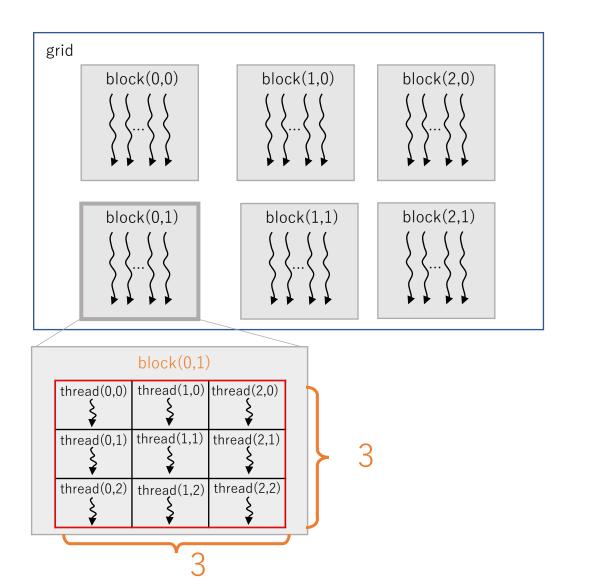
# grid

# gridはブロックから構成され、gridのサイズgridDimがある



# block

# blockにはブロックの座標idxとblockのサイズblockDimがある



#### blockの座標

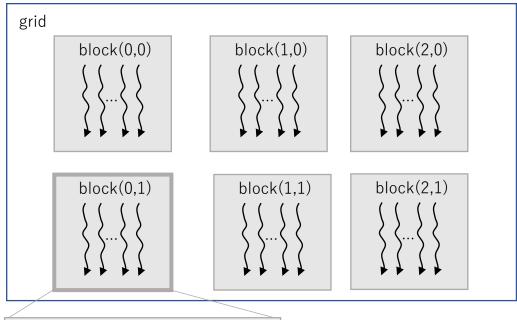
blockldx.x = 0 blockldx.y = 1 blockldx.z = 0

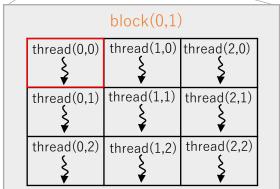
#### blockのサイズ

blockDim.x = 3 blockDim.y = 3 blockDim.z = 1

# thread

# threadにはブロックごとにthreadの座標を表すidxがある





#### threadの座標

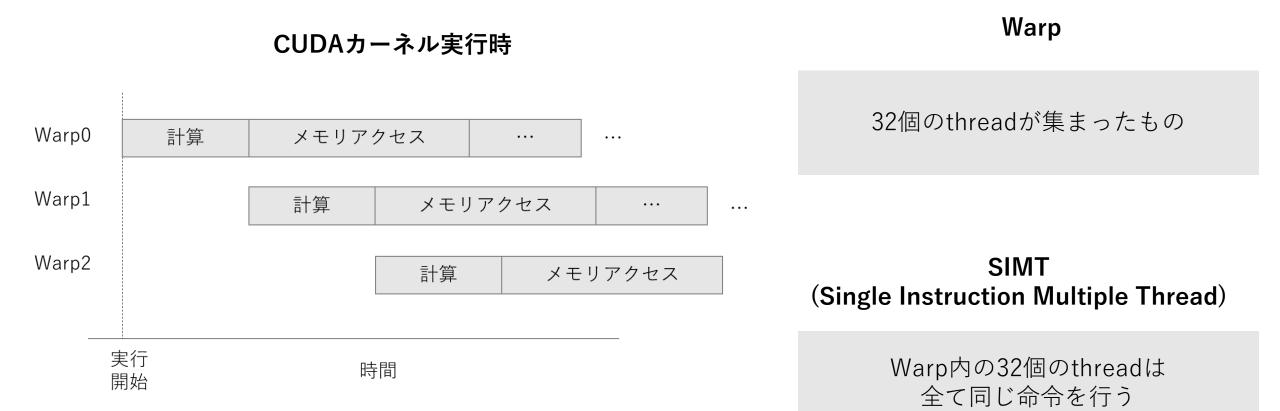
threadIdx.x = 0

threadIdx.y = 0

threadIdx.z = 0

# Warp

threadは全てが同時に計算を始めるのではなく、Warp単位で同時に動く



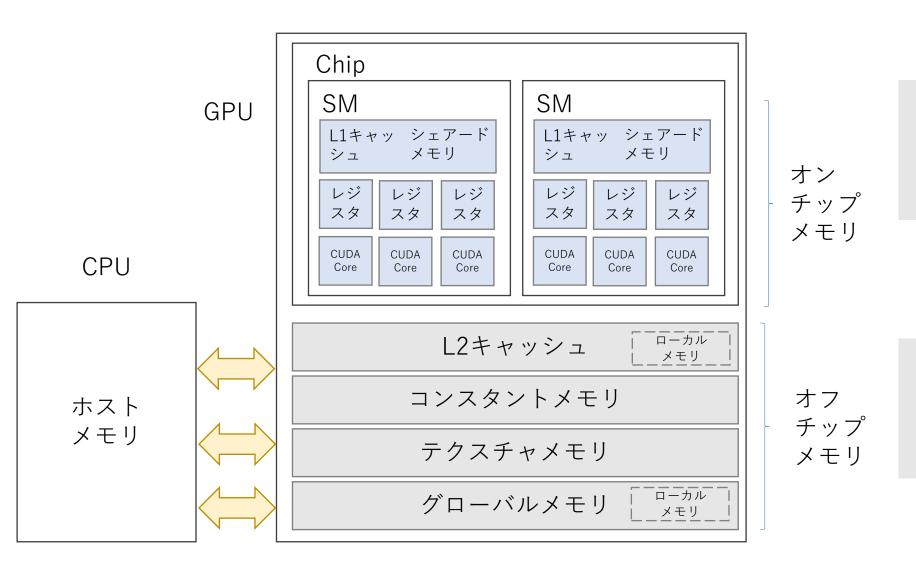
# CUDAの基礎知識(2)

この動画で学ぶこと

✓ GPUがもつ様々なメモリ(グローバルメモリ、シェアードメモリなど)を理解する

# GPUのメモリ構造

GPUは独自のメモリ構造を持つ。大まかにはオンチップとオフチップに分かれる



オンチップメモリ

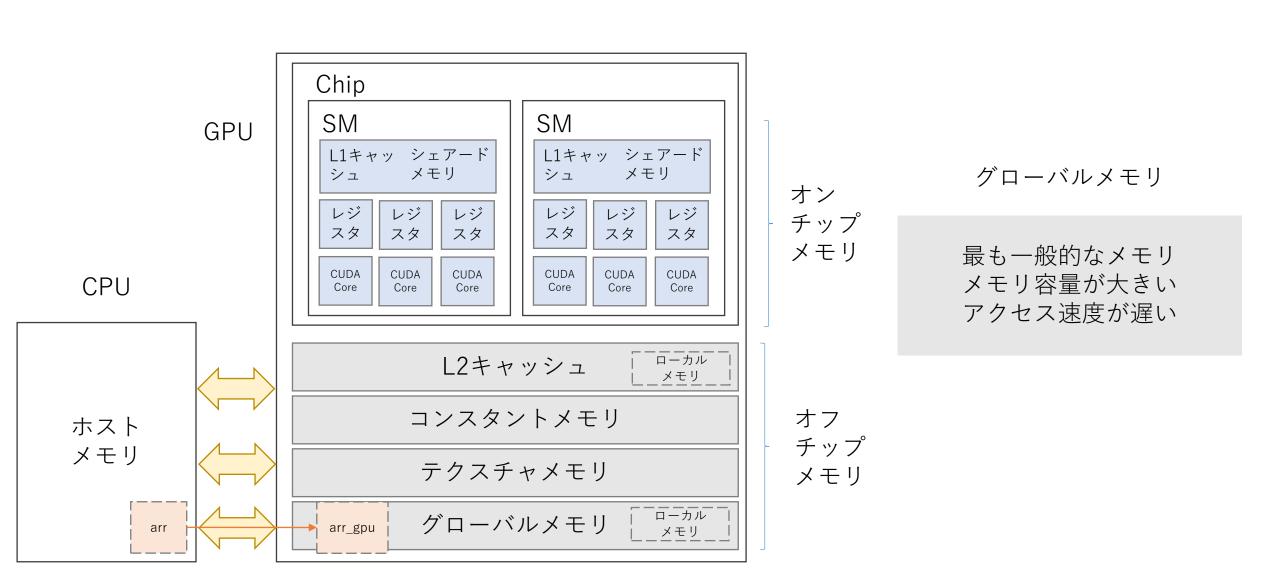
CUDA Coreに近い場所に メモリがある メモリ容量:小 アクセス速度:大

オフチップメモリ

CUDA Coreから遠い場所に メモリがある メモリ容量:大 アクセス速度:小

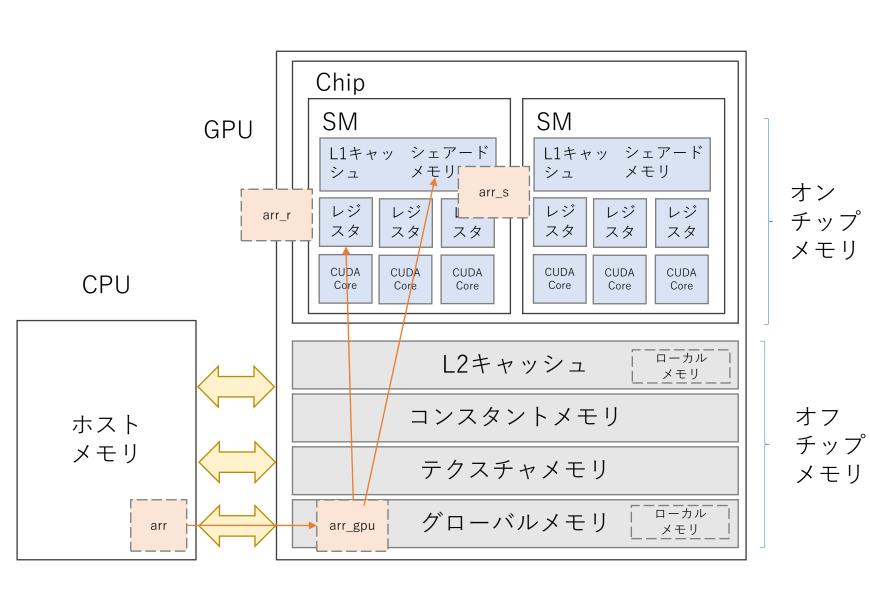
# メモリ受け渡しの流れ-1

CPUからGPUへメモリを受け渡すと通常グローバルメモリに保存される



# メモリ受け渡しの流れ-1

グローバルメモリはアクセスが遅い。レジスタやシェアードメモリに移して使う



グローバルメモリ

最も一般的なメモリメモリ容量が大きい アクセス速度が遅い

レジスタ

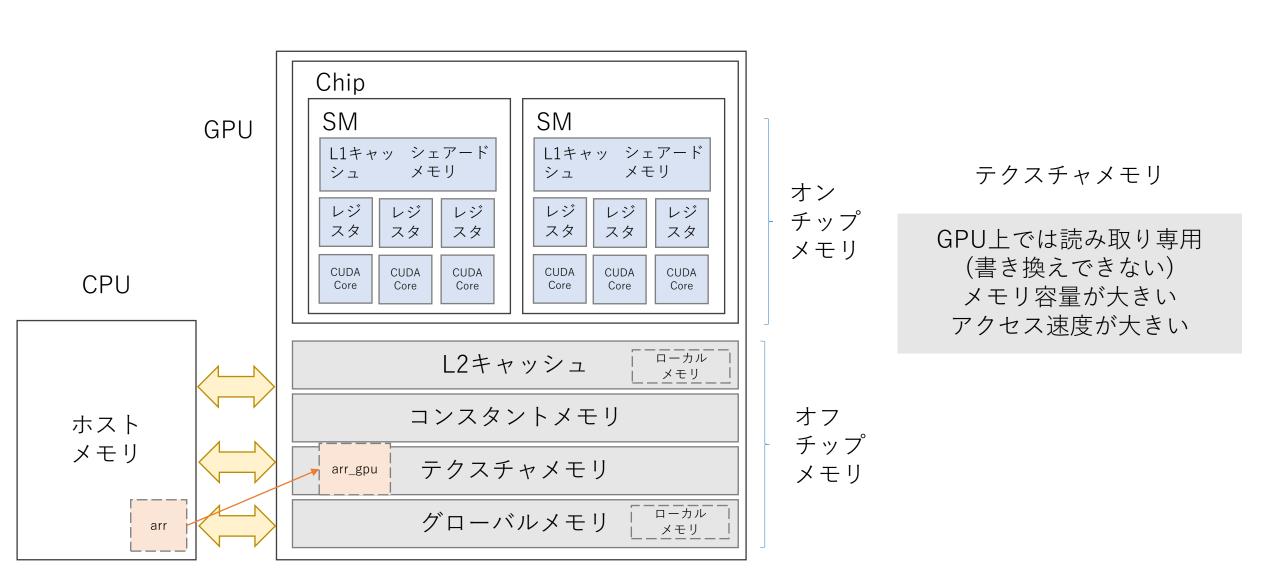
スレッド毎に異なる値を保存 メモリ容量が小さい アクセス速度が速い

シェアードメモリ

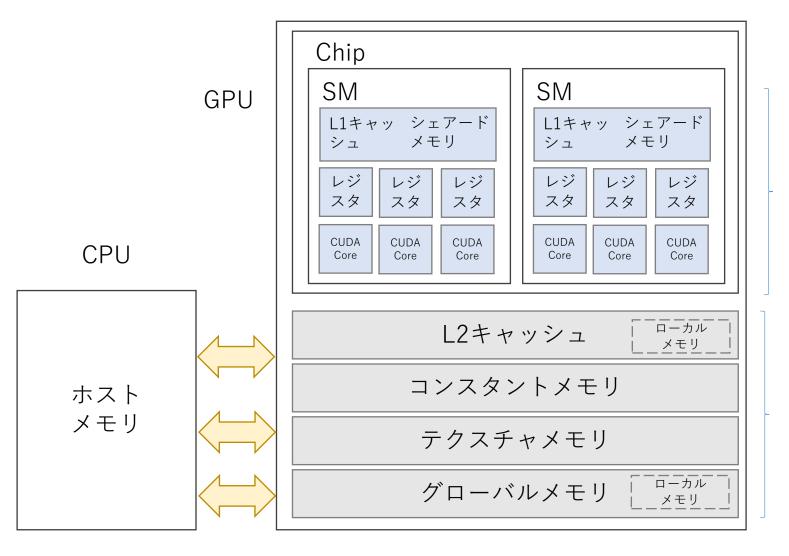
ブロックで共有されるメモリ メモリ容量が小さい アクセス速度が速い

### メモリ受け渡しの流れ-2

CPUからメモリをバインドすると高速・大容量なテクスチャメモリを利用できる



### GPUのメモリ構造



# ヴ ポイント

オン チップ メモリ

オフ

チップ

メモリ

メモリの種類によって

- ✓ 容量
- ✓ アクセス速度
- ✓ 制限(読取専用など) 特徴が異なるので 用途に応じて使い分ける

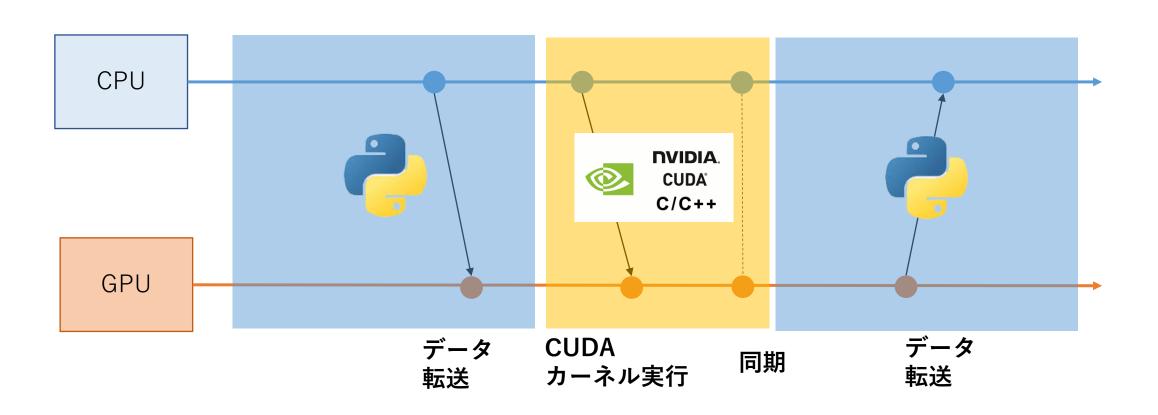
# C言語ミニマム

この動画で学ぶこと

✓ PythonユーザーがCUDAを使う上で最低限 知っておくべきC言語の文法を理解する

## なぜC言語を学んでおく必要があるか?

PyCUDAではデータのインターフェースはPythonで扱い、CUDAカーネルはCUDA Cで書く為、C言語の知識が必要



# C言語とPythonの変数の型対応

### CUDA CとPythonで変数の型を対応させる必要 複素数はPyCUDAのユーティリティを利用

### 主なCの変数の型と対応するnumpyのdtype

	CUDA C	Python
単精度整数	int	numpy.int32
倍精度整数	long long	numpy.int64
単精度小数	float	numpy.float32
倍精度小数	double	numpy.float64
単精度複素数	pycuda::complex64	numpy.complex64

実数と虚数の2つの単精度を 保存するため,64Bit

### Pythonのコード

```
arr = np.array(xxx, dtype=np.float32)
arr_gpu = gpuarray.to_gpu(arr)
add_one_kernel(arr_gpu, xxx)

__global__ add_one_kernel(float *arr, xxx)
{
// 処理内容
}
```

CUDA Cのコード

## 関数の書き方

関数には戻り値、引数に型の指定が必要

```
戻り値の型

int add_two_number(int num1, int num2){
    int res;
    res = num1 + num2;
    return res;
}

行の終わりに
;(セミコロン)
戻り値
```

### 四則演算

四則演算はPythonと同様。ただし、べき乗演算子が無い為、関数の利用が必要ライブラリのimportには# includeを用いる

```
ライブラリ
         #include <stdio.h>
戻り値を
                         のimport
         #include <math.h>
返さない
場合はvoid
         void basic calculation(float num1, float num2) {
            // 四則演算 + - x /
            printf("a + b = %fYn", num1 + num2);
            printf("a - b = %fYn", num1 - num2);
            printf("a x b = %fYn", num1 * num2);
            printf("a / b = %fYn", num1 / num2);
            // べき乗・平方根の計算
```

## forループ / if文

 $for \mu - J$ ,  $if 文は条件/実行内容を()や{}で囲う。それ以外は概ねPythonと同じ$ 

```
インクリメ
#include <stdio.h>
                                    ント演算子
void print_odd_even(int num){
    for (int i = 0; i < num; i++){</pre>
        if (i % 2 == 0){
             printf("%d is an even number.\u00ean", i);
        } else if (!(i % 2 == 0)){
             printf("%d is an odd number.\u00ean", i);
        } else {
             printf("Something wrong...\u20a4n");
```

### マクロ

マクロを使用する事でコンパイル時に文字列に置換。簡易関数の作成も可能

```
#include <stdio.h>
使う(慣例) #include <math.h>
          void circle_area(float radius){
             printf("area : %f¥n", PI * radius * radius );
          void trim_negative(float val){
             float res = MAX(val, 0.0);
          return res;
```

### ポインタ

C言語で関数に配列を受け渡す時はポインタを使う。配列名に\*を付けるだけ

```
ポインタ変数
の宣言

void init_array(int num_comp, float *arr){
    for (int i = 0; i < num_comp; i++){
        arr[i] = 0.0;
    }
}

通常の配列の
ように使う
```

# Google Colabについて

この動画で学ぶこと

✓ 本講座で使用するプログラミング環境の Google Colabとは何かを理解する。

# Google Colabとは

Googleの提供するPythonのインタラクティブ実行環境。 GPUとしてTesla K80が無料で使用できる。利用するにはGoogleアカウントが必要

### Google Colabの画面

```
[ ] import pycuda .driver as drv
      import pycuda autoinit
     from pycuda.compiler import SourceModule
[] import math
      import os
      import numpy as np
      import pycuda.gpuarray as gpuarray
     from pycuda.compiler import SourceModule
     import pycuda autoinit
     # コンパイル時に余計なメッセージを表示させないようにするos.environ["CL"] = r'-Xcompiler "/wd 4819"
        CUDAカーネルの定義
     module = SourceModule("""
         __global__ void plus_one_kernel(int num_comp, int *y, int *x){
             int i = threadIdx.x + blockDim.x * blockIdx.x;
            if (i < num_comp){
               y[i] = x[i] + 1;
     # コンパイルしたコードからカーネルを得る
     plus_one_kernel = module.get_function("plus_one_kernel")
     # 計算対象のnumpyアレーの作成
     num components = np.int32(10)
     x = np.arange(num_components, dtype=np.int32)
     # cpu to gpuヘデータを送作
     x_gpu = gpuarray.to_gpu(x)
     y_gpu = gpuarray.zeros(num_components, dtype=np.int32)
      # ブロック、グリッドの決定
     threads_per_block = (256, 1, 1)
     blocks_per_grid = (math.ceil(num_components / threads_per_block[0]), 1, 1)
     plus_one_kernel(num_components, y_gpu, x_gpu, block=threads_per_block, grid=blocks per grid)
     # gpu to cpuヘデータを送付
     y = y_gpu.get()
     print("x :", x)
print("y :", y)
```

# colab 特徴

Jupyter notebookの拡張版のようなもの (使い勝手はほぼ同じ)

GPU(Tesla K80)が無料で使用できる

GoogleドライブやGithubとの連携など 使い勝手が工夫されている

### 制限

90分以上放置するとセッションが切れる

12時間まで連続で計算可能

# Googleアカウント作成

Google Colab利用にはGoogleアカウント作成の必要あり。手順は特に難しくない





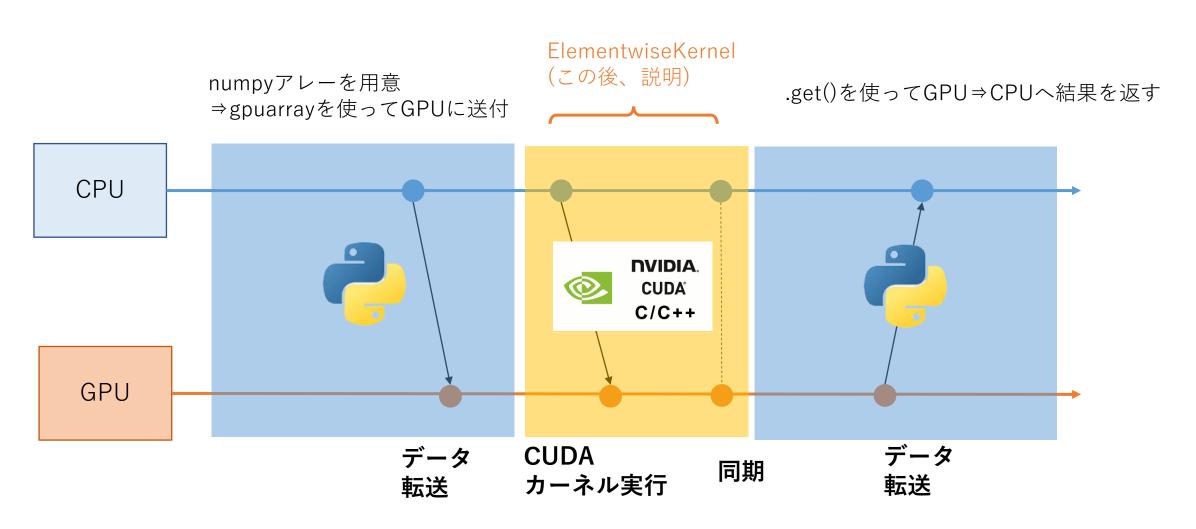
### CUDAでのHello World

この動画で学ぶこと

✓ 最も扱いの簡単なElementwiseKernelを通して、 CUDAプログラミングの流れに慣れる

# CUDAでの計算の流れの復習

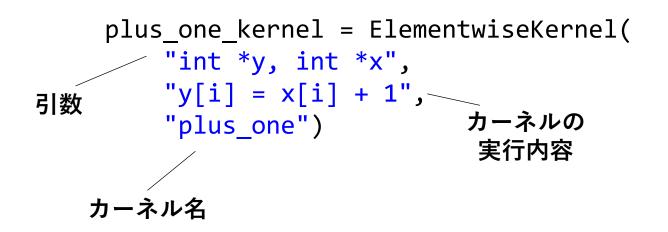
今回は、CUDAカーネルとしてElementwiseKernelを利用



### ElementwiseKernel

### CUDAカーネルを簡易に書くことが出来る。実行時にコンパイルされる

#### 特徴



実行時にblockやgridの設定をする必要が無い

C言語で必要な;(セミコロン)を付ける必要が無い

"i"というインデックス用の変数が予め宣言されている

# ヴ ポイント

各threadが実行する内容をカーネルに記述 (全てのカーネルに共通)

### SourceModule

この動画で学ぶこと

✓ 一般的なPyCUDAの実行方法として、 SourceModuleの使い方を理解する

### ElementwiseKernel

ElementwiseKernelにより、簡単にCUDAカーネルが利用できた

#### 特徴

```
plus_one_kernel = ElementwiseKernel(
    "int *y, int *x",
    "y[i] = x[i] + 1",
    "plus_one") カーネルの
    実行内容
```

実行時にblockやgridの設定をする必要が無い

C言語で必要な;(セミコロン)を付ける必要が無い

"i"というインデックス用の変数が予め宣言されている

もっと複雑なカーネルを書く場合は、ElementwiseKernelよりSourceModuleが適している

### SourceModule

### SourceModuleはCUDA Cカーネルをコンパイルする関数 SourceModuleにより一般的なCUDAカーネルを実行することが出来る

#### CUDA Cのカーネル

```
__global___ void plus_one_kernel(int num_comp,
  int *y, int *x){
   int i = threadIdx.x + blockDim.x * blockIdx.x;
   if (i < num_comp){
      y[i] = x[i] + 1;
   }
}</pre>
```

SourceModule("CUDA Cのコード")

nvccによりコンパイル

SourceModuleを利用する事で、 任意のCUDAカーネルをコンパイルして実行可能

### CUDA Cの書き方

\_\_global\_\_や\_\_device\_\_といった関数の属性を追加 各スレッドが配列の要素を担当するようにインデックスiを計算

# \_\_global\_\_/\_device\_\_

### CPUから呼び出されるのかGPUから呼び出されるのかによって属性がある

#### 関数の属性

```
__global___ void plus_one_kernel(int num_comp,
int *y, int *x){
  int i = threadIdx.x + blockDim.x * blockIdx.x;
  if (i < num_comp){
     y[i] = x[i] + 1;
  }
}</pre>
```

#### 関数の属性

\_\_global\_\_: CPU/GPUの両方から呼び出される 関数。戻り値はvoidとなる

\_\_device\_\_: \_\_global\_\_の関数など別のCUDA カーネル内から呼び出される関数。GPU上での み呼び出される関数

## インデックスの計算

各スレッドが配列の各要素を担当するようにインデックスを計算する 慣れないうちは下記計算式をおまじないとして覚えましょう

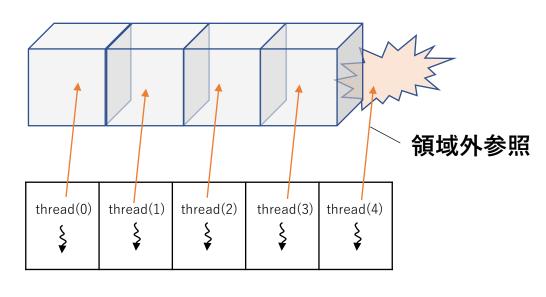
int i = threadIdx.x + blockDim.x \* blockIdx.x; grid block(1,0)block(2,0)block(0,0)配列 block(0,1)block(2,1)block(1,1)block(0,1)thread(0.0) thread(1.0) thread(2.0)thread(0,1) thread(1,1) thread(2,1)thread(0,2) thread(1,2) thread(2,2)

### if文による領域外参照のチェック

配列要素 < ブロック当たりのスレッド数の場合、余ったスレッドが領域外参照する これを防ぐためにif文で必ずチェックする(おまじない)

```
int i = threadIdx.x + blockDim.x * blockIdx.x;
```

#### 配列



スレッド

```
__global___ void plus_one_kernel(int num_comp,
int *y, int *x){
    int i = threadIdx.x + blockDim.x * blockIdx.x;
    if (i < num_comp){
        y[i] = x[i] + 1;
    }
        thread(4)の
}
```

# threads\_per\_block / blocks\_per\_grid

スレッド数やブロック数は自分で設定する必要がある 設定方法はスレッド数の設定⇒ブロック数の設定の順で行う

#### スレッド数/ブロック数の決め方

1000個の配列要素を持ったnumpy array

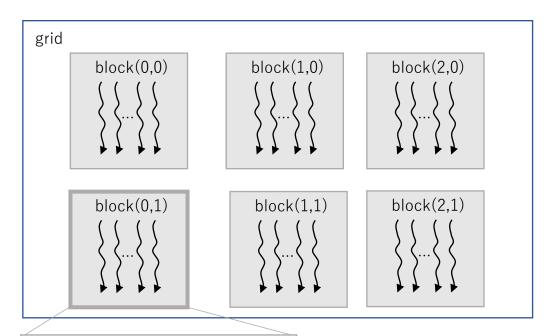
1ブロック当たりスレッド数: 100を指定 ⇒必要なブロックの数 1000 / 100 = 10

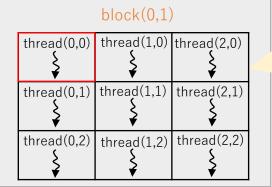
#### # ブロック、グリッドの決定

threads\_per\_block = (256, 1, 1)
blocks\_per\_grid = (math.ceil(num\_components / threa
ds\_per\_block[0]), 1, 1)

#### # CUDAカーネルの実行

plus\_one\_kernel(num\_components, y\_gpu, x\_gpu, block =threads\_per\_block, grid=blocks\_per\_grid)





1ブロックあたり のスレッドの数は 自分で決められる

# 外部ファイルの取込

この動画で学ぶこと

✓ CUDAカーネルを別ファイルからPyCUDAに 読み込む方法を理解する

### SourceModule

SourceModuleはCUDA Cカーネルをコンパイルする関数 SourceModuleにより一般的なCUDAカーネルを実行することが出来る

#### CUDA Cのカーネル

```
__global___ void plus_one_kernel(int num_comp,
int *y, int *x){
  int i = threadIdx.x + blockDim.x * blockIdx.x;
  if (i < num_comp){
    y[i] = x[i] + 1;
  }
}</pre>
```

SourceModule("CUDA Cのコード")

nvccによりコンパイル

SourceModuleを利用する事で、 任意のCUDAカーネルをコンパイルして実行可能

### 外部ファイルの取込

大規模なプログラム作成時はCUDA Cカーネルを外部ファイルに分離 メインプログラム + CUDAカーネルファイルとする事で、管理が容易に

#### sample.cu

```
__global__ void plus_one_kernel(int num_comp,
int *y, int *x){
  int i = threadIdx.x + blockDim.x * blockIdx.x;
  if (i < num_comp){
     y[i] = x[i] + 1;
  }
}</pre>
```

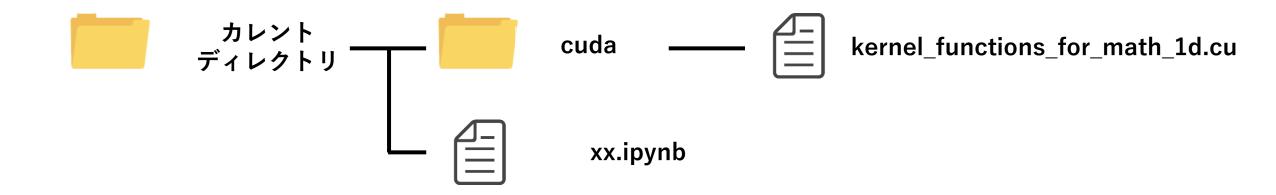
#### main.py

SourceModule(#include
"sample.cu")

別々のファイルに分離する事で大規模なプログラム 作成時でも機能を分けて管理できる

### フォルダ構成の例

cudaディレクトリを作成し、その中にCUDA Cカーネルファイルを保存



### CPU vs GPU

#### この動画で学ぶこと

- ✔ CPUとGPUで実行速度の比較を行う方法を理解する
- ✓ CUDAで高速化するためのポイントを理解する

### CPUの実行速度測定

time関数で計算の前後を挟み、差を取ることで実行速度を測定できる

```
import time
import numpy as np
time_start_cpu = time.time()
# ここに計算内容を書き込む
time end cpu = time.time()
# 実行時間
print("CPU calculation {0} [msec]".format(1000 * (time_end_cpu -
time_start_cpu)))
```

time.time(): 呼ばれた瞬間の時刻を記録

### GPUの実行速度測定

CPUとGPUで動作が独立している為、time.time()関数は正確ではない PyCUDAが用意しているイベントを使って測定

```
import numpy as np
import pycuda.gpuarray as gpuarray
import pycuda.driver as drv
from pycuda.compiler import SourceModule
...(中略)
# 計測用イベント変数の用意
time_start_gpu = drv.Event()
time end gpu = drv.Event()
time_start_gpu.record()
# ここでCUDAカーネルを実行する
time end gpu.record()
# カーネルを同期する *必ず行う
time end gpu.synchronize()
print("kernel exec {0} [msec]".format(time_start_gpu.time_till(tim
e_end_gpu)))
```

drv.Event(): CUDAカーネルの開始や終了 を記録できるイベント

.record(): イベントのメソッドで time.time()のように働く

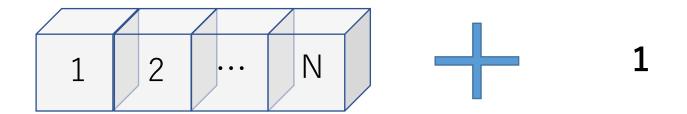
ヴ ポイント

CPUとGPUで実行速度の 計測方法が異なる

### サンプルプログラム

1次元Numpyアレーに1を足すというサンプルプログラムで計算速度の比較を行う

### 1d Numpy array

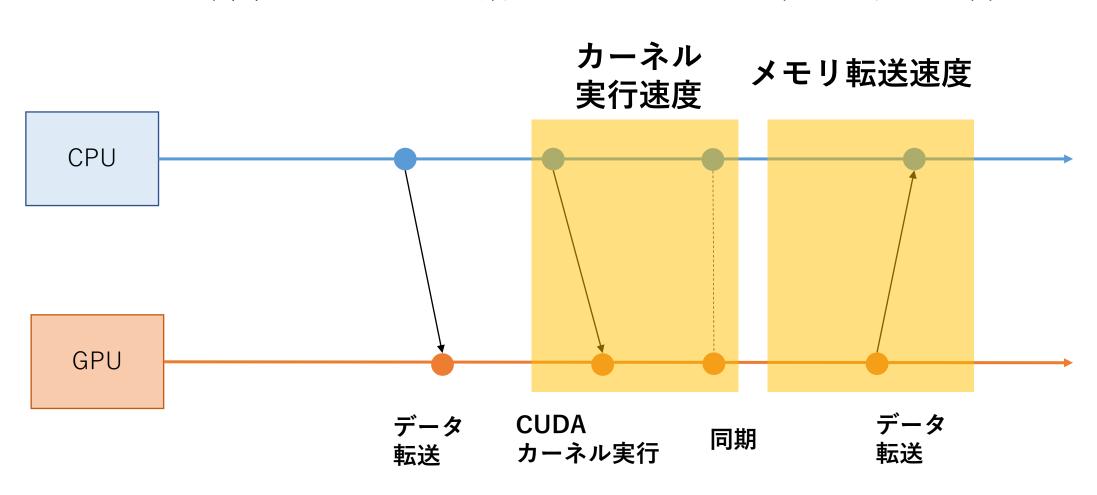


### 目的

配列の要素数が増加していった場合に CPUとGPUで実行速度の変化を比較

### GPUの実行速度について

今回はカーネルの実行とCPUへのメモリ転送を分けて計測



# 2次元配列の四則演算

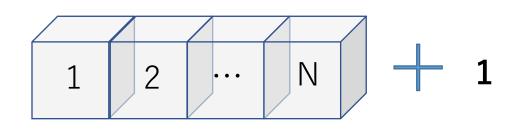
この動画で学ぶこと

✓ 2次元配列に対してPyCUDAで四則演算を行う際のインデックスの指定方法を理解する

# 1次元配列の四則演算

インデックスiを計算して実行

### 1次元の場合



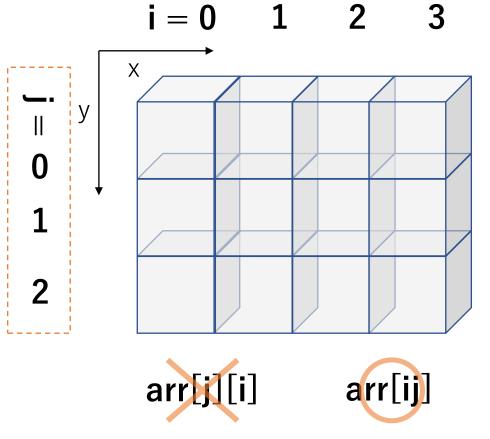
```
i = 0 	 1 	 2 	 3
```

```
__global___ void plus_one_kernel(int num_comp,
int *y, int *x){
  int i = threadIdx.x + blockDim.x * blockIdx.x;
  if (i < num_comp){
     y[i] = x[i] + 1;
  }
}</pre>
```

### 2次元配列の四則演算

y方向のインデックスjも計算する ただし、arr[j][i]のように2次元のインデックスは使えない

### 2次元の場合

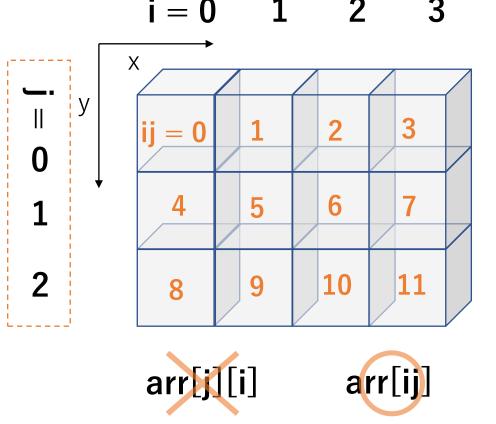


```
__global___ void add_plus_one_2d_kernel(int nx, int ny, flo
at *output, float *arr){
    const int i = threadIdx.x + blockDim.x * blockIdx.x;
    const int j = threadIdx.y + blockDim.y * blockIdx.y;
    int ij = nx * j + i;
    if (i < nx && j < ny){
        output[ij] = arr[ij] + 1;
    }
}</pre>
```

### 2次元配列の四則演算

CUDAでは2次元配列は1次元化してインデックスを計算する必要がある

#### 2次元の場合



```
__global___ void add_plus_one_2d_kernel(int nx, int ny, float *output, float *arr){
    const int i = threadIdx.x + blockDim.x * blockIdx.x;
    const int j = threadIdx.y + blockDim.y * blockIdx.y;
    int ij = nx * j + i;
    if (i < nx && j < ny){
        output[ij] = arr[ij] + 1;
    }
}
```

CUDAでは多次元配列が 全て1次元化される

# 多次元配列の四則演算

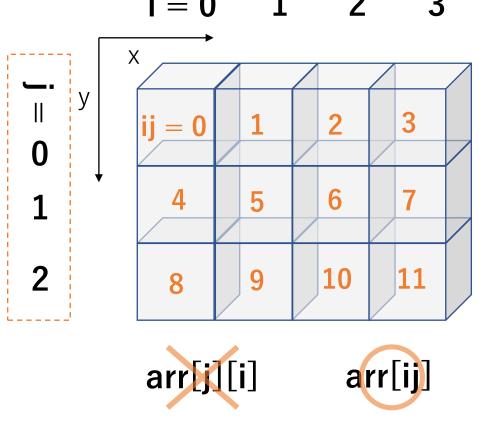
この動画で学ぶこと

✓ 3次元以上など多次元の配列の四則演算方法 について理解する

## 2次元配列の四則演算

CUDAでは2次元配列は1次元化してインデックスを計算する必要がある

#### 2次元の場合

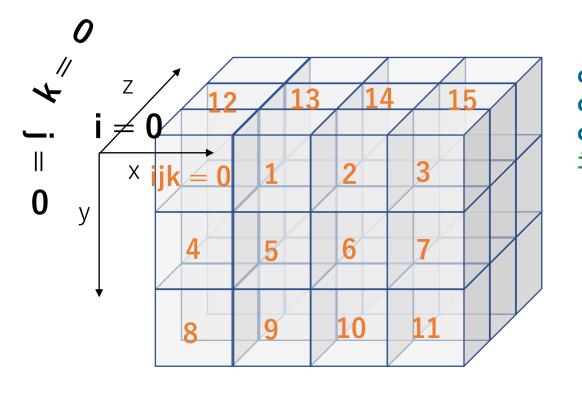


```
__global___ void add_plus_one_2d_kernel(int nx, int ny, float *output, float *arr){
    const int i = threadIdx.x + blockDim.x * blockIdx.x;
    const int j = threadIdx.y + blockDim.y * blockIdx.y;
    int ij = nx * j + i;
    if (i < nx && j < ny){
        output[ij] = arr[ij] + 1;
    }
}
```

CUDAでは多次元配列が 全て1次元化される

### 多次元配列の四則演算

### 3次元以上でも2次元と同じように1次元化して考える



```
const int i = threadIdx.x + blockDim.x * blockIdx.x;
const int j = threadIdx.y + blockDim.y * blockIdx.y;
const int k = threadIdx.z + blockDim.z * blockIdx.z;
int ijk = nx * ny * z + nx * y + x;
```

### ヴ ポイント

CUDAでは多次元配列が 全て1次元化される

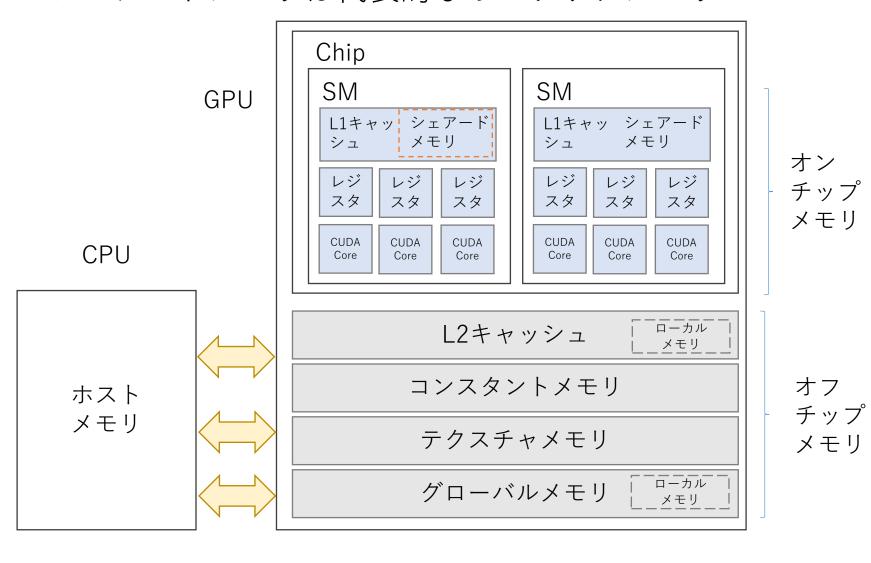
# シェアードメモリ

この動画で学ぶこと

✓ シェアードメモリの特徴と実際の使い方 について理解する

## シェアードメモリの特徴

GPUは独自のメモリ構造を持つ。大まかにはオンチップとオフチップに分かれるシェアードメモリは代表的なオンチップメモリ



オンチップメモリ

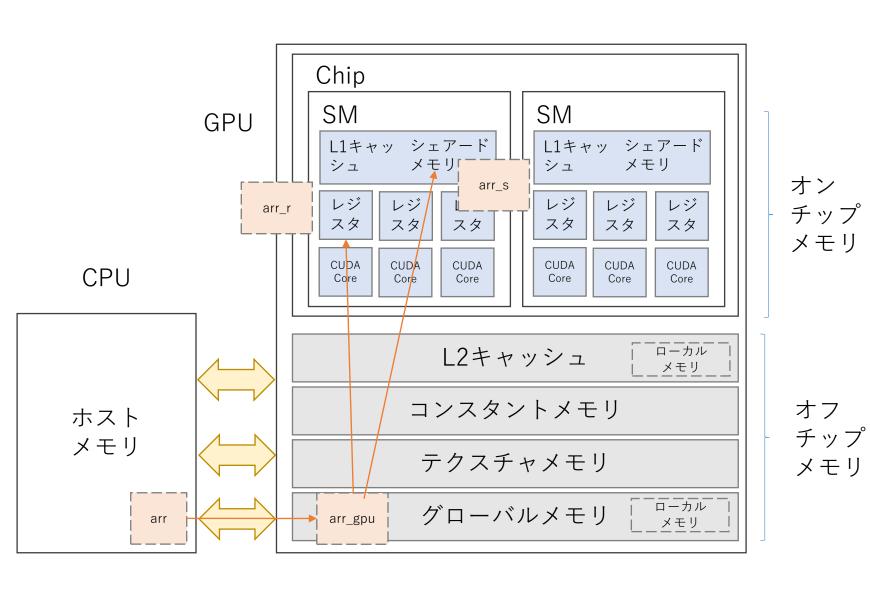
CUDA Coreに近い場所に メモリがある メモリ容量:小 アクセス速度:大

シェアードメモリ

同じブロック内で メモリを相互に参照できる (共有されている)

## メモリ受け渡しの流れ-1

グローバルメモリはアクセスが遅い。レジスタやシェアードメモリに移して使う



グローバルメモリ

最も一般的なメモリメモリ容量が大きい アクセス速度が遅い

レジスタ

スレッド毎に異なる値を保存 メモリ容量が小さい アクセス速度が速い

シェアードメモリ

ブロックで共有されるメモリ メモリ容量が小さい アクセス速度が速い

## シェアードメモリの使い方

```
# define NUM THREADS 6
# define X DIRECTION 0
# define Y DIRECTION 1
# define Z DIRECTION 2
# define NUM HALO 2
global void sample_shared_3d(int nx, int ny, int nz, float dx
, float *arr grad, float *arr){
    shared float arr s[NUM THREADS+NUM HALO][NUM THREADS+NUM
HALO][NUM THREADS+NUM HALO];
   const int x = threadIdx.x + blockDim.x * blockIdx.x;
   const int y = threadIdx.y + blockDim.y * blockIdx.y;
   const int z = threadIdx.z + blockDim.z * blockIdx.z;
   const int tx = threadIdx.x + 1:
   const int ty = threadIdx.y + 1;
   const int tz = threadIdx.z + 1;
   const int nxyz = nx * ny * nz;
   if (x < nx \&\& y < ny \&\& z < nz){
       int ijk = nx * ny * z + nx * y + x;
       // グローバルメモリの中身をシェアードメモリにコピー
       arr s[tz][ty][tx] = arr[ijk];
       // ここで、Halo領域にも値をコピー
       // 必要に応じてブロック内で同期をとる
       __syncthreads();
       // ここにカーネルの実行内容を書く
```

#### シェアードメモリを 使った計算の流れ

CUDAカーネル内に シェアードメモリを宣言

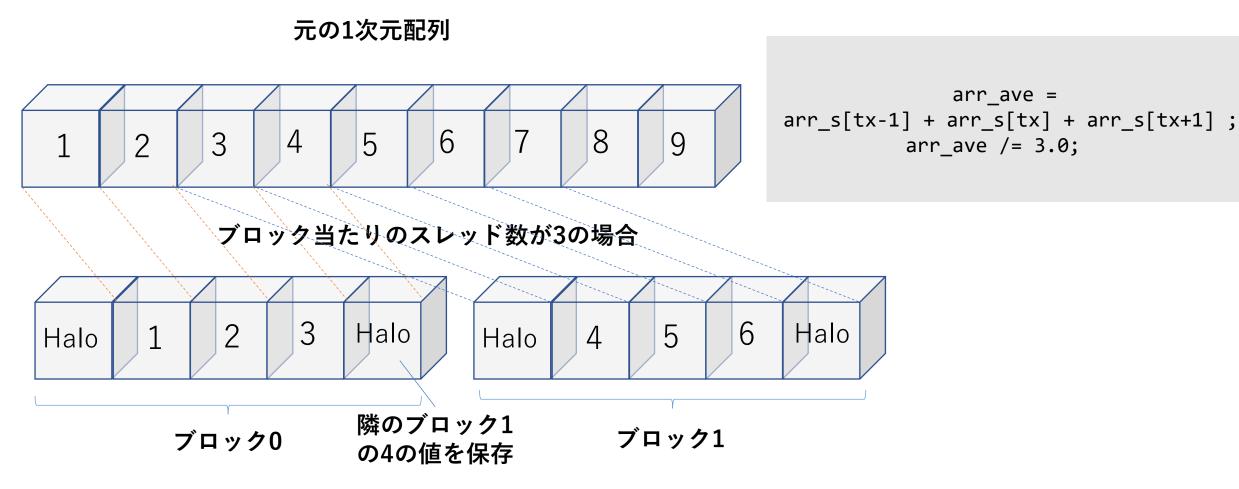
シェアードメモリに グローバルメモリの中身をコピー

シェアードメモリを使った 演算内容を書く

Haloについてこの後、説明

### Halo(袖領域)について

多くの演算では隣のメモリを参照する事が多い 各ブロックには袖領域(Halo)という1つ多くメモリを確保しておく必要がある



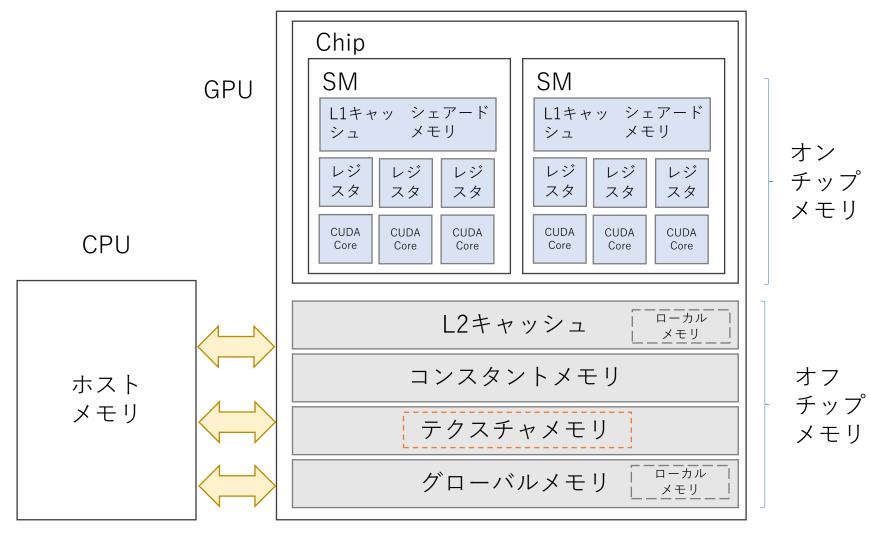
# テクスチャメモリ

この動画で学ぶこと

✓ テクスチャメモリの特徴と使い方を理解 する

## テクスチャメモリの特徴

テクスチャメモリは大容量かつアクセスが高速なオフチップメモリ ただし、GPU上からは読み取り専用のメモリ



オフチップメモリ

CUDA Coreから遠い場所に メモリがある メモリ容量:大 アクセス速度:遅\*

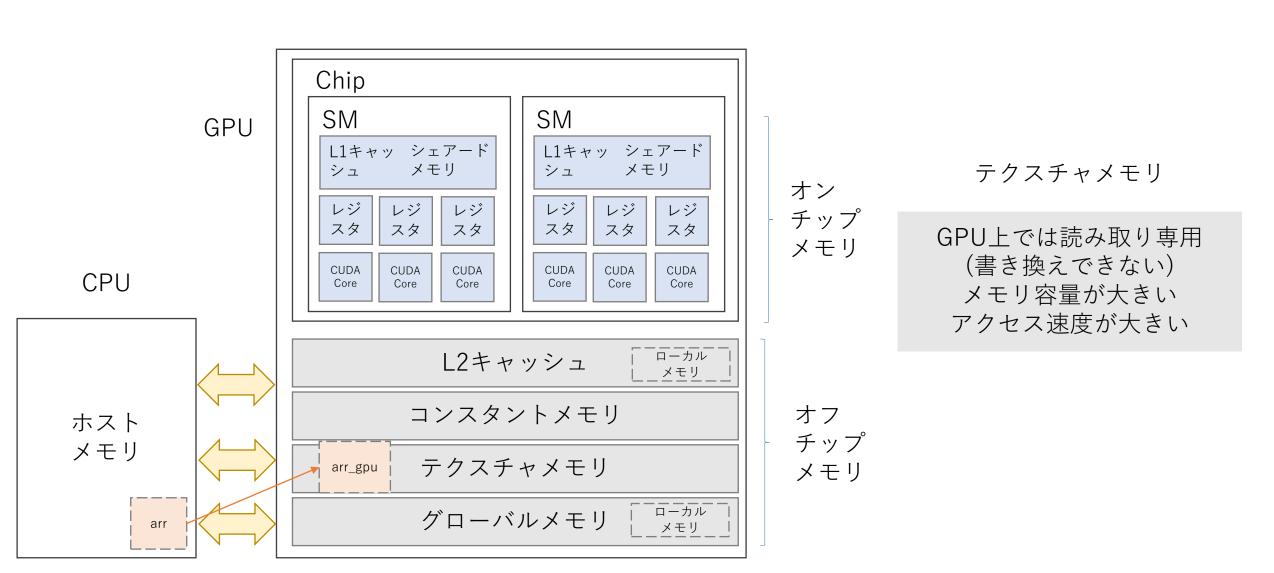
\*テクスチャメモリを除く

テクスチャメモリ

オフチップメモリだが高速に アクセスできる。 その代わり、GPU上で 書き換えができない

## メモリ受け渡しの流れ-2

CPUからメモリをバインドすると高速・大容量なテクスチャメモリを利用できる



### テクスチャメモリの使い方

CPUからメモリをバインドし、CUDAカーネル内で関数から参照。 次元によってバインドの仕方や参照する関数が異なる

#### テクスチャメモリを 使った計算の流れ

CUDAカーネル内に テクスチャメモリ変数を宣言

CPUからメモリをバインド

カーネル内でテクスチャメモリを参照

#### 次元ごとの違い

	バインド	参照関数
1次元	.bind_to_texref_ext	tex1Dfetch
2次元	drv.matrix_to_texref	tex2D
3次元	独自の関数を定義*	tex3D

\*本講座ではユーティリティ関数を用意

# ライブラリの利用

この動画で学ぶこと

- ✔ 並列化しにくい処理について理解する
- ✔ PyCUDAのライブラリについて理解する

ブロックをまたいだ変数を参照、メモリの交換処理は手続きが面倒代表的な処理として縮約(総和・内積)/最大・最小/並び替えなど

総和 内積

最大・最小

並び替え

これらの処理は自作でプログラミングするのではなくライブラリを利用する

#### 利用するライブラリ・関数

総和 内積

最大・最小

並び替え

InclusiveScanKernel atomic演算 ReductionKernel

InclusiveScanKernel cuBLAS

thrust



テンプレートの利用 ダイナミックパラレル

### 総和

この動画で学ぶこと

✔ 複数の方法で総和計算が行える

これらの処理は自作でプログラミングするのではなくライブラリを利用する

総和 内積

最大・最小

並び替え

利用するライブラリ・関数

InclusiveScanKernel atomic演算 ReductionKernel

InclusiveScanKernel cuBLAS

thrust

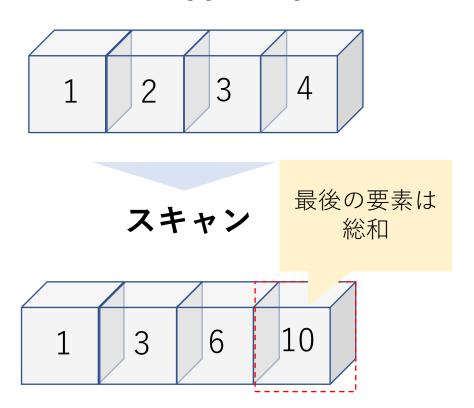
テンプレートの利用 ダイナミックパラレル



### スキャン/プレフィックスサムを用いた総和計算

PyCUDAには累積和(スキャン)を計算するための関数が用意されている スキャンを計算する事で、総和算出もできる

### 1d Numpy array



累積和(np.cumsum)の事を スキャンやプレフィックスサムと呼ぶ

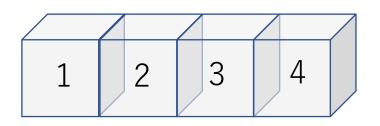
#### スキャンのための関数

```
from pycuda.scan import InclusiveScanKernel
scan_kernel =InclusiveScanKernel(np.int32, "a+b")
2項演算子
```

## アトミック演算を用いた総和計算

アトミックとは"不可分性"。メモリを書き込んでいる時に他からの書き込みを禁止 atomicAddでは配列の総和を安全に計算

### 1d Numpy array



### アトミック演算

```
int sum = 0;
for (int i = 0; i < num_comp; i++){
    sum += arr[i];
}</pre>
```

#### atomicAdd

GPU上でスレッドの1つが 合計値を計算し、メモリ(sum)に書き込み

他のスレッドはsumが書き込まれるまで 待っている

GPU上で逐次計算をしているようなもの大きな配列では遅くなるので多用は禁物

# 内積

この動画で学ぶこと

✔ ReductionKernelを使った配列の内積について理解する

これらの処理は自作でプログラミングするのではなくライブラリを利用する

総和 内積

最大・最小

並び替え

利用するライブラリ・関数

InclusiveScanKernel atomic演算 ReductionKernel

InclusiveScanKernel cuBLAS

thrust

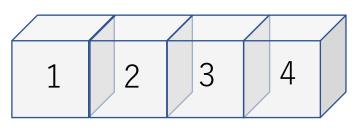
テンプレートの利用 ダイナミックパラレル



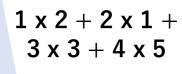
# 内積

### 2つのベクトルから1つの出力値を計算 縮約やリダクションと呼ばれる

### array 1

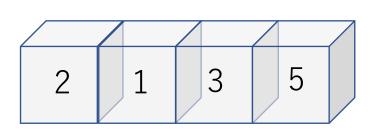


内積



33

1つの値に 縮約されている



array 2

### ReductionKernel

2項演算子と縮約操作の2つを定義する事で、内積を計算できる

# 最大值·最小值

#### この動画で学ぶこと

- ✓ InclusiveScanKernelを使って、最大値・ 最小値を求める
- ✔ cuBLASを使って、最大値のインデックス を求める

これらの処理は自作でプログラミングするのではなくライブラリを利用する

#### 利用するライブラリ・関数

総和 内積

最大・最小

並び替え

InclusiveScanKernel atomic演算 ReductionKernel

InclusiveScanKernel cuBLAS

thrust



テンプレートの利用 ダイナミックパラレル

## InclusivescanKernelでの最大・最小

2項演算子を変更する事で、最大・最小値も簡単に求まる

#### 最大値を計算すると2項演算子

```
from pycuda.scan import InclusiveScanKernel
# 配列の最大値を求める為の2項演算子
scan_kernel =InclusiveScanKernel(np.int32, "a > b ? a: b")
2項演算子
```

### cuBLASで最大・最小位置

BLASとはベクトル・行列用の演算が高速に行えるライブラリ cuBLASを使うと、値が最大・最小の位置を得る事が出来る

BLAS(Basic Linear Algebra Subprograms)

Level 1:  $ベクトル同士の演算 <math>\mathbf{y} \leftarrow \alpha \mathbf{x} + \mathbf{y}$ 

Level 2: ベクトルと行列の演算  $\mathbf{y} \leftarrow \alpha \mathbf{A} \mathbf{x} + \beta \mathbf{y}$ 

> Level 3: 行列同士の演算  $\mathbf{C} \leftarrow \alpha \mathbf{AB} + \beta \mathbf{C}$

それ以外: **ベクトルの最大/最小位置などを求める**  cuBLASの一般的な流れ

skcudaか らimport

```
パンドル
from skcuda import cublas 変数の設定

# cublasで最大値を求める
h = cublas.cublasCreate()
max_id = cublas.cublasIsamax(h, x_gpu.size, x_gpu.gpudata,
1)
cublas.cublasDestroy(h)

EUBLASの
関数を呼ぶ
```

使い終わったら セッションを消去

# ベクトル演算

この動画で学ぶこと

✔ cuBLASのLevel 1の演算を使ってベクト ル演算を行ってみる

これらの処理は自作でプログラミングするのではなくライブラリを利用する

#### 利用するライブラリ・関数

総和 内積

最大・最小

並び替え

InclusiveScanKernel atomic演算 ReductionKernel

InclusiveScanKernel cuBLAS

thrust



テンプレートの利用 ダイナミックパラレル

### cuBLAS

#### ベクトル演算はCUDA Cでも書けるがBLASを利用する事でより高速に動作

#### **BLAS**(**B**asic **L**inear **A**lgebra **S**ubprograms)

Level 1: ベクトル同士の演算  $\mathbf{y} \leftarrow \alpha \mathbf{x} + \mathbf{y}$ 

Level 2: ベクトルと行列の演算  $\mathbf{y} \leftarrow \alpha \mathbf{A} \mathbf{x} + \beta \mathbf{y}$ 

> Level 3: 行列同士の演算  $\mathbf{C} \leftarrow \alpha \mathbf{AB} + \beta \mathbf{C}$

それ以外: **ベクトルの最大/最小位置などを求める** 

#### Level 1の演算

```
h = cublas.cublasCreate()
# y <- a * x + yを行う
cublas.cublasSaxpy(h, x_gpu.size, a, x_gpu.gpudata, 1, y_g
pu.gpudata, 1)
cublas.cublasDestroy(h)

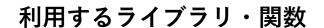
関数名で
計算内容が分かる
```

# 並び替え

この動画で学ぶこと

✓ Thrustを使った配列の並び替えについて 理解する

これらの処理は自作でプログラミングするのではなくライブラリを利用する



総和 内積

最小·最大值

並び替え

InclusiveScanKernel atomic演算 ReductionKernel

InclusiveScanKernel cuBLAS

thrust

テンプレートの利用 ダイナミックパラレル

### thrustとは



### C++で書かれたCUDA C用のライブラリ CUDA Cで面倒なメモリ管理や並列化の面倒な処理を簡単に扱える

#### CUDA Cでのメモリ管理

```
// 変数サイズの計算
int num comp = 3;
float x[num comp] = \{1, 2, 3\};
size t n bytes = num comp * sizeof((float));
// GPU用のポインタを宣言
float *x gpu;
// GPUにヒープメモリを確保
cudaMalloc((float**) &x gpu, n bytes);
// CPUからGPUにメモリをコピー
cudaMemcpy(x gpu, x, n bytes, cudaMemcpyHostToDevice);
// ここでCUDAカーネルを実行
// GPUからCPUへメモリをコピー
cudaMemcpy(x, x gpu, n bytes, cudaMemcpyDeviceToHost);
// GPU上のメモリを解放
cudaFree(x gpu);
```

#### thrustでのメモリ管理

```
#include<thrust/host vector.h>
#include<thrust/device vector.h>
int main(){
    // CPU側でメモリを確保
    thrust::host vector<int> arr(3);
    arr[0] = 1;
    arr[1] = 2;
    arr[2] = 3;
    // GPU側にメモリをコピー
    thrust::device_vector<int> arr_gpu = arr;
    return 0;
                         cudaMalloc
                         cdaMemcpy
                       cudaFreeなど不要
```

### thrustとは

メモリ管理が簡単なこと以外にもスキャン、縮約、並び替えなどを実装 PyCUDAでは主に並び替えの為に利用

```
#include <thrust/sort.h>
#include <thrust/execution_policy.h>

並び替えるには
関数を呼び出すだけ

extern "C" {

__global__ void sort_thrust(int num_component, int *arr){
    thrust::sort(thrust::device, arr, (arr + num_component));
    }

__global__ void sort_by_key_thrust( int num_component, int *key, int * value){
    thrust::sort_by_key(thrust::device, key, (key + num_component), value)
    ;
}
}
```

#### thrustの主な機能

スキャン 縮約 **並び替え** 

# テンプレート

この動画で学ぶこと

✓ 同じ関数を別の変数の型でも再利用できるテンプレートの使い方を理解する

これらの処理は自作でプログラミングするのではなくライブラリを利用する

#### 利用するライブラリ・関数

総和 内積

最小·最大值

並び替え

InclusiveScanKernel atomic演算 ReductionKernel

InclusiveScanKernel cuBLAS

thrust

番外編

テンプレートの利用 ダイナミックパラレル

### テンプレートとは

#### C++の機能でclass Tの部分を指定した型に読み替えることができる

#### templateの宣言

#### templateの利用例

```
template <class T>
    __device__ T add_two_vector(T x, T y){
        return (x + y);
        }
        反り値にTを指定

extern "C" {
        __global__ void add_two_vector_kernel(int nx, int *a, int *b, int *res){
        const int x = threadIdx.x + blockDim.x * blockIdx.x;
        if (x < nx){
            res[x] = add_two_vector<int>(a[x], b[x]);
        }
        Pび出し時に
        Tの型を指定
```

使いどころ

同じ処理内容で 変数の型が違うだけという CUDAカーネルを整理できる

# ダイナミックパラレル

この動画で学ぶこと

✓ CUDAカーネルから別のCUDAカーネルを 呼び出す方法について理解する

これらの処理は自作でプログラミングするのではなくライブラリを利用する

#### 利用するライブラリ・関数

総和 内積

最小·最大值

並び替え

InclusiveScanKernel atomic演算 ReductionKernel

InclusiveScanKernel cuBLAS

thrust

番外編

テンプレートの利用 ダイナミックパラレル

### ダイナミックパラレルとは

#### ダイナミックパラレルではCUDAカーネル中で別のカーネルを呼び出し可能

#### 呼ばれるCUDAカーネル

```
__global__ void add_two_vector(int nx, float *arr1, float *arr2, float *res){
   int x = threadIdx.x + blockDim.x * blockIdx.x;
   if (x < nx){
      res[x] = arr1[x] + arr2[x];
   }
}</pre>
```

使いどころ

#### ブロック, グリッドの設定

#### 呼び出す側のCUDAカーネル

```
__global___void add_two_vector_dynamic(int *grid, int *block, int nx, float *arr1, float *arr2, float *res){
dim3 grid_ = dim3(grid[0], grid[1], grid[2]);
dim3 block_ = dim3(block[0], block[1], block[2]);
// カーネルを呼び出す
add_two_vector<<<grid_, block_>>>(nx, arr1, arr2, res);
}
```

別のカーネルの呼び出し (CUDA Cのマナー) 複数のCUDAカーネルを 1つCUDAカーネルに 束ねることが出来る