Experiencias con Python y CUDA en Computación de Altas Prestaciones

Sergio Armas, Lionel Mena, Alejandro Samarín, Vicente Blanco ¹, Alberto Morales y Francisco Almeida

Resumen—La computación paralela no ha cesado de explorar nuevos horizontes con el objetivo de obtener mejoras tangibles de rendimiento en la ejecución de algoritmos de toda clase. Si bien durante muchos años se ha seguido el camino tradicional de innovar en la arquitectura de las CPU y crear software que aproveche esos beneficios, la consolidación de la que están disfrutando en la última década los dispositivos gráficos como hardware de cómputo general es difícil de ignorar. Este cambio de paradigma trae consigo nuevas formas de programar, nuevas herramientas y por supuesto, nuevos desafíos. El hecho de que el lenguaje C y sus derivados sean la lingua franca de este tipo de programación no debería sorprender a propios ni a extraños, pero otros lenguajes se van haciendo hueco poco a poco: es el caso de Python, que gracias al wrapper PyCUDA [1] es capaz de ofrecer al programador el acceso a la computación de altas prestaciones sobre dispositivos gráficos sin renunciar a la comodidad y el dinamismo de este lenguaje. El propósito de este artículo es comprobar las facilidades que promete PyCUDA así como su rendimiento frente a problemas reales.

Palabras clave—Python, CUDA, PyCUDA

I. Introducción

La capacidad de cómputo de las unidades de procesamiento gráfico (GPU) ha alcanzado en los últimos años un desarrollo notable que ha crecido de manera paralela a un fuerte incremento en la producción y demanda de dispositivos que las integran, tales como smartphones, tablets, etc., además de seguir presentes en tarjetas gráficas o placas base con cada vez más relevancia. Precisamente, dicho aumento de potencia ha comenzado a hacer atractivo su empleo para la manipulación de cantidades masivas de datos en ámbitos ajenos al del video tales como criptología, biología computacional, cálculo científico etc., que, por su naturaleza paralela, son susceptibles de ejecutarse con más eficiencia, incluso, que en una CPU tradicional. Esta técnica de usar la GPU en aplicaciones que tradicionalmente se habían ejecutado en CPU recibe el nombre de GPGPU (General-purpose computing on graphics processing units).

A pesar de que existen diversos fabricantes especializados en dispositivos gráficos que ofrecen algún tipo de framework para desarrollo de aplicaciones paralelas sobre GPGPU, e incluso alternativas más generales como OpenCL [2], NVIDIA es probablemente el fabricante especializado que más ha apostado por este enfoque. Prácticamente desde los albores de la computación de este tipo, han ido desarrollando un modelo de programación denominado

 $^{1}\mathrm{Dpto}.$ Estadística, I.O. y Computación, Univ. La Laguna, e-mail: vblanco@ull.es



Fig. 1. Diagrama de bloques de una GPU Tesla M2070 (Fermi)

CUDA (Compute Unified Device Architecture) [3], que permite al programador ejecutar algoritmos casi arbitrarios en sus GPU. El lenguaje de programación diseñado para ello es una variación de C que contiene extensiones para trabajar con la GPU, amén de ciertas restricciones (no permite recursividad ni punteros a funciones, solo permite números en precisión simple en la mayoría de tarjetas lanzadas al mercado hasta ahora, etc.).

El término anglosajón wrapper se emplea en computación para designar, a grandes rasgos, un tipo de software que añade una capa de código para traducir de una interfaz existente a otra, generalmente con la finalidad de ganar portabilidad, sencillez o compatibilidad. PyCUDA, que ha sido desarrollado por Andreas Klöckner², es un ejemplo de esto: ejerce la función de interfaz en Python para las funciones nativas escritas en C que proporciona la SDK de NVIDIA. La principal ventaja que representa la utilización de PyCUDA en el desarrollo, en contraposición al uso de las funciones propias de NVIDIA, es sin duda la versatilidad. En este artículo se hará un estudio acerca de si las ventajas de utilizar un lenguaje interpretado de muy alto nivel para ejecutar algoritmos en una GPU compensa la menor velocidad inherente a los lenguajes interpretados. Para ello, se abordan dos problemas característicos: el producto matricial y la detección de movimiento.

...utilizando PyCUDA [1] y una gráfica 1

²Courant Institute of Mathematical Sciences - New York University - http://mathema.tician.de/aboutme

II. EJECUCIÓN DE UN KERNEL CON PYCUDA

No existe una única manera de ejecutar un algoritmo en un dispositivo con PyCUDA y, por supuesto, no todas resultan igual de eficientes. A continuación, se mostrará una sencilla secuencia de instrucciones que ilustran de manera bastante exacta el nivel de abstracción que puede llegar a alcanzarse sin menoscabo de la eficiencia.

En primer lugar, se importan los mínimos paquetes necesarios para el funcionamiento de PyCUDA:

```
import pycuda.autoinit
import pycuda.driver as cuda
from pycuda.compiler import SourceModule
```

Conviene hacer notar pycuda.autoinit se encarga de inicializar el dispositivo (seleccionando el de mayor capacidad de cómputo si hay más de uno), así como de crear un contexto automáticamente, ambos aspectos pueden ser configurados manualmente.

El siguiente paso consiste en cargar en memoria los datos que se desean procesar. En este punto, resulta muy aconsejable el uso del paquete NumPy de la librería SciPy, pues está provisto del potente tipo de dato numpy.array, que facilita la preparación y manipulación de los datos. En este ejemplo, consideraremos dos arrays aleatorios a y b, cuyas componentes se restan dos a dos sobreescribiendo b con el resultado.

```
import numpy as np
a = np.random.randn(16)
b = np.random.randn(16)
```

Aunque las más recientes GPU soportan números en coma flotante de doble precisión, la mayoría de los dispositivos disponibles actualmente solo soportan precisión simple, por lo que se impone la siguiente conversión de tipos:

```
a.astype(np.float32)
b.astype(np.float32)
```

Una vez cargados los datos en memoria, los siguientes pasos son transferirlos al dispositivo y ejecutar el kernel. Con PyCUDA, ambos pasos pueden concentrar en uno solo, porque en la propia llamada al kernel puede estar implícita la transferencia de los datos a la memoria del dispositivo si se hace uso de la clase ArgumentHandler disponible en pycuda.driver, la cual está preparada para trabajar con arrays numpy como argumentos de entrada/salida.

```
kernel = SourceModule("""
  __global__ void name(float *a, float *b) {
    int idx = threadIdx.x;
    b[idx] = b[idx] - a[idx];
  }
  """)
f = kernel.get_function("name")
f(cuda.In(a), cuda.InOut(b), block=(16,16,1))
```

III. PRODUCTO MATRICIAL

manera tradicional de abordar multiplicación de matrices pasa por ejecutar un algoritmo secuencial de complejidad casi cúbica en las mejores implementaciones. Su versión paralela, en cambio, permite el cálculo simultáneo de las filas de la primera matriz multiplicando con la correspondiente columna de la segunda para formar resultado.

PyCUBLAS o nuestros matrixmult?

IV. PRODUCTO MATRICIAL

V. Detección de movimiento

El algoritmo de detección de movimiento consiste, en su versión más simple, en la aplicación de tres filtros (por este orden: Difference, Threshold y Erosion) a cada par de fotogramas de la secuencia que se analiza. Como resulta fácil constatar, a poco que tratemos la detección de movimiento en un video de pocos segundos de duración, la carga computacional será bastante elevada.

En el anexo de este artículo se proporciona el paquete Filters, que se estructura, en torno a dos clases: esencialmente, CUDAHandler, concebida para abstraer aún mas la comunicación con el dispositivo (informalmente, se podría considerarla como un wrapper del propio PyCUDA), y Filter, clase abstracta cuyas clases hijas se corresponden con cada uno de los filtros implementados.

Además, la clase MotionDetector se encarga de realizar la detección en sí haciendo uso del paquete antes mencionado, y la clase VideoHandler abstrae la manipulación de las operaciones de gestión de video.

Referencias

- [1] Andreas Klöckner, Nicolas Pinto, Yunsup Lee, Bryan C. Catanzaro, Paul Ivanov, and Ahmed Fasih, "Pycuda: Gpu run-time code generation for high-performance computing," CoRR, vol. abs/0911.3456, 2009.
- Khronos Group, "OpenCL The open standard for paral-
- lel programming of heterogeneous systems," 2011. NVIDIA Corp., "What is CUDA NVIDIA Developer Zone," 2011.