БИБЛИОТЕКИ С ПОДДЕРЖКОЙ CUDA

АФАНАСЬЕВ ИЛЬЯ
AFANASIEV_ILYA@ICLOUD.COM

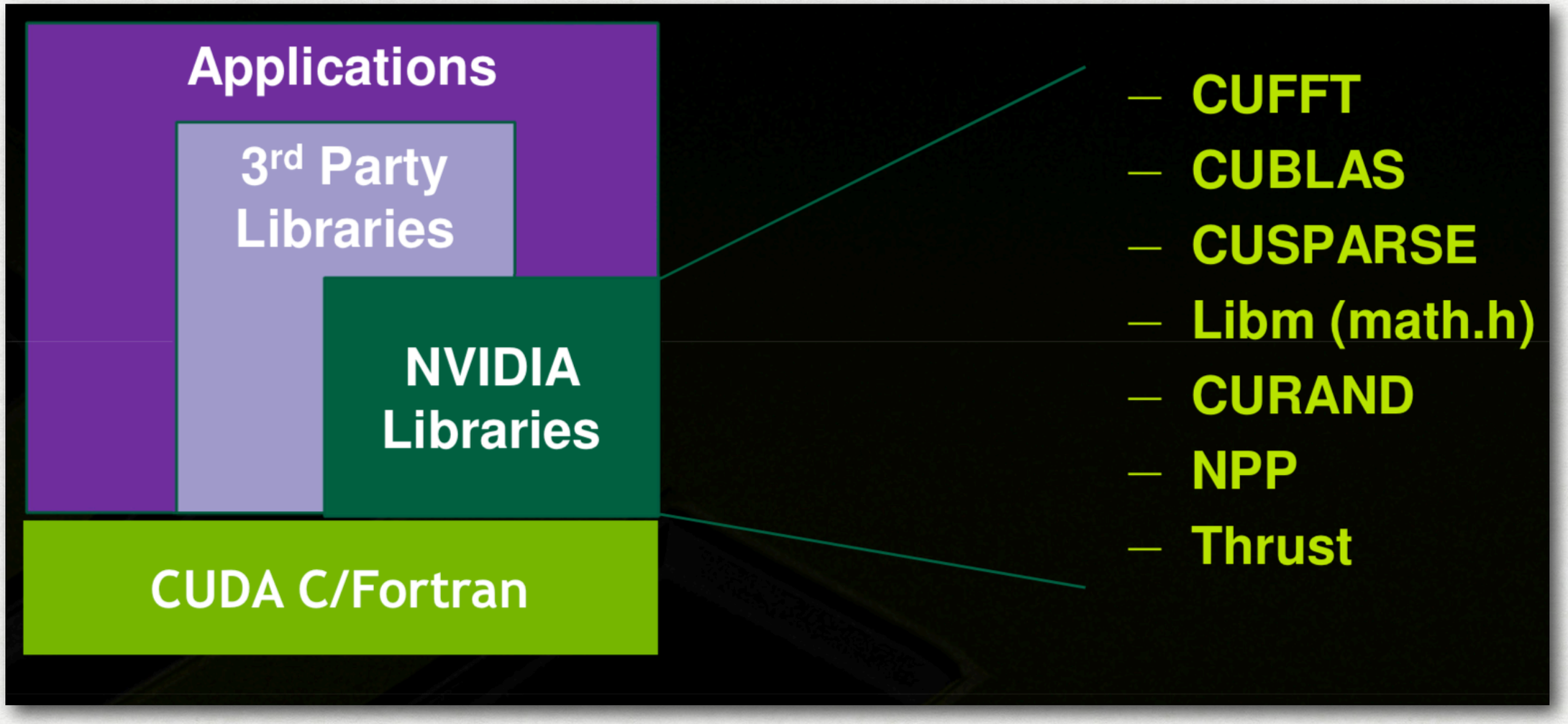
CUDA LIBRARIES

- Представляют собой готовые к использованию базовые блоки для построения программ
- Просты в использовании
- Оптимизированы для максимальной производительности
- Идеальны для приложений, которые уже используют аналогичные CPU библиотеки

CUDA LIBRARIES

- Доступны следующие библиотеки:
  - cuFFT – Fast Fourier Transforms Library
  - cuBLAS – Complete BLAS Library
  - cuSPARSE – Sparse Matrix Library
  - cuRAND – Random Number Generation (RNG) Library
  - NPP – Performance Primitives for Image & Video Processing
  - Thrust – Templated C++ Parallel Algorithms & Data
  - Structures math.h - C99 floating-point Library
  - NVGraph - graph processing library
- Включены в CUDA Toolkit

CUDA LIBRARIES



ЗАДАЧИ СЕГОДНЯШНЕГО ТРЕКА

- О чём сегодня пойдет речь:
  - Краткий обзор функциональности библиотек, примеры их использования
  - Для более подробных деталей использования каждой библиотеки следует обратиться к официальной документации
- Я не эксперт по всем перечисленным библиотекам, использовал далеко не все их возможности (!)

CUBLAS

CUBLAS

- Реализация BLAS (Basic Linear Algebra Subprograms) для GPU
- Поддерживает все функции из BLAS
  - Level1 (вектор-вектор): O(N)

    AXPY : y=alpha.x+y
    DOT : dot=x.y

  - Level 2(матрица-вектор): O(N2)

    Vector multiplication by a General Matrix : GEMV

    Triangular solver : TRSV

  - Level3(матрица-матрица): O(N3)

    General Matrix Multiplication : GEMM

    Triangular Solver : TRSM

- Как и BLAS, CUBLAS хранит матрицы по столбцам, а не строкам (как в Fortran)

CUBLAS

- Поддерживает 4 типа – Float, Double, Complex, Double Complex – соотвествующие префиксы: S, D, C, Z
- Содержит 152 процедуры : S(37), D(37), C(41), Z(41)
  Принцип построения названия функций: cublas + BLAS name
- Пример: cublasSGEMM
  - S: single precision (float)
  - GE: general
  - M: multiplication
  - M: matrix

CUBLAS

- Интерфейс CUBLAS библиотеки расположен в файле cublas.h
- Функции имеют имена в соответствии со следующей конвенцией: cublas + BLAS name (напр, cublasSGEMM)
- Обработка ошибок
- Вычислительные функции CUBLAS не возвращают ошибки
- CUBLAS позволяет получить последнюю произошедшую ошибку при помощи случайных функций
- Вспомошательные функции CUBLAS:
  Memory allocation, data transfer
- Пример использования библиотеки будет рассмотрен далее после CURAND

CURAND

CURAND

- Генерировать качественные последовательности случайных чисел параллельно не так просто
- Не делайте это сами, используйте библиотеку!
- Большой набор генераторов случанйных чисел для различных распределений: XORWOW, MRG323ka, MTGP32, (scrambled) Sobol, uniform, normal, log-normal
- Двойная и одинарная точность:
- У CURAND есть 2 API:
  API для CPU:подходит для генерации больших порций случайнх чисел на
- API для GPU: в случае, когда случайные числа должны быть генерированы внутри ядра

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ CURAND

1. Инициализировать генератор:

curandCreateGenerator()

2. Устанавливаем seed:

curandSetPseudoRandomGeneratorSeed()

3. Генерируем данные задав распределение:

curandGenerateUniform()/(curandGenerateUniformDouble(): Uniform
curandGenerateNormal()/cuRandGenerateNormalDouble(): Gaussian
curandGenerateLogNormal/curandGenerateLogNormalDouble(): Log-Normal

4. Уничтожаем генератор:

curandDestroyGenerator()

CURAND API

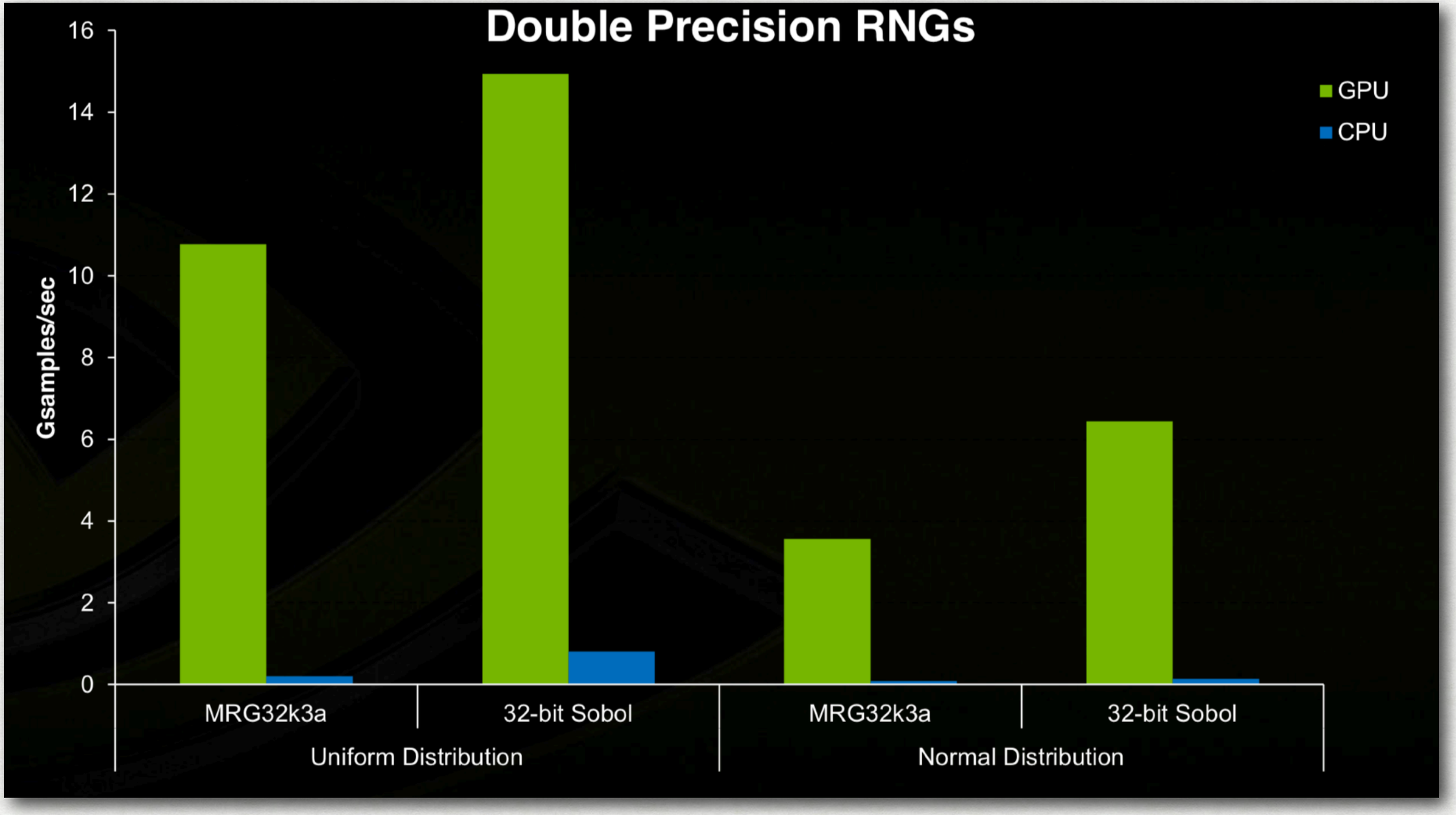
- Генерируем множество случайных чисел разом на центральном процессоре, CPU API:

```
#include <curand.h>

curandCreateGenerator(&gen, CURAND_RNG_PSEUDO_DEFAULT); curandGenerateUniform(gen, d_data, n);
```

- Генерируем по одному случайному числу на каждой из GPU нитей, GPU API:

```
#include <curand_kernel.h>
__global__ void generate_kernel(curandState *state)

{

        int id = threadIdx.x + blockIdx.x * 64;

        x = curand(&state[id]);

}
```

CURAND PERFORMANCE



CUBLAS + CURAND MATRIX MULTIPLICATION EXAMPLE

```
1  #include <cstdlib>
2
3  int main() {
4      // Allocate 3 arrays on CPU
5      int nr_rows_A, nr_cols_A, nr_rows_B, nr_cols_B, nr_rows_C, nr_cols_C;
6
7      // for simplicity we are going to use square arrays
8      nr_rows_A = nr_cols_A = nr_rows_B = nr_cols_B = nr_rows_C = nr_cols_C = 3;
9
10     float *h_A = (float *)malloc(nr_rows_A * nr_cols_A * sizeof(float));
11     float *h_B = (float *)malloc(nr_rows_B * nr_cols_B * sizeof(float));
12     float *h_C = (float *)malloc(nr_rows_C * nr_cols_C * sizeof(float));
13
14     // Allocate 3 arrays on GPU
15     float *d_A, *d_B, *d_C;
16     cudaMalloc(&d_A,nr_rows_A * nr_cols_A * sizeof(float));
17     cudaMalloc(&d_B,nr_rows_B * nr_cols_B * sizeof(float));
18     cudaMalloc(&d_C,nr_rows_C * nr_cols_C * sizeof(float));
19
20     // ....
21
22     //Free GPU memory
23     cudaFree(d_A);
24     cudaFree(d_B);
25     cudaFree(d_C);
26
27     // Free CPU memory
28     free(h_A);
29     free(h_B);
30     free(h_C);
31
32     return 0;
33 }
```

GENERATING RANDOM MATRICES

```
1  ...
2  #include <curand.h>
3  ...
4
5  // Fill the array A(nr_rows_A, nr_cols_A) with random numbers on GPU
6  void GPU_fill_rand(float *A, int nr_rows_A, int nr_cols_A) {
7      // Create a pseudo-random number generator
8      curandGenerator_t prng;
9      curandCreateGenerator(&prng, CURAND_RNG_PSEUDO_DEFAULT);
10
11     // Set the seed for the random number generator using the system
clock
12     curandSetPseudoRandomGeneratorSeed(prng, (unsigned long long)
clock());
13
14     // Fill the array with random numbers on the device
15     curandGenerateUniform(prng, A, nr_rows_A * nr_cols_A);
16 }
17
18 ...
```

PERFORMING MULTIPLICATION

```
 1 ...
 2 #include <cublas_v2.h>
 3 ...
 4
 5 // Multiply the arrays A and B on GPU and save the result in C
 6 // C(m,n) = A(m,k) * B(k,n)
 7 void gpu_blas_mmul(const float *A, const float *B, float *C, const int m, const int k,
const int n) {
 8     int lda=m,ldb=k,ldc=m;
 9     const float alf = 1;
10     const float bet = 0;
11     const float *alpha = &alf;
12     const float *beta = &bet;
13
14     // Create a handle for CUBLAS
15     cublasHandle_t handle;
16     cublasCreate(&handle);
17
18     // Do the actual multiplication
19     cublasSgemm(handle, CUBLAS_OP_N, CUBLAS_OP_N, m, n, k, alpha, A, lda, B, ldb, beta,
C, ldc);
20
21     // Destroy the handle
22     cublasDestroy(handle);
23 }
```

ИСПОЛЬЗУЕМ THRUST ДЛЯ УПРОЩЕНИЯ ПРИМЕРА С УМНОЖЕНИЕМ МАТРИЦ

```
int main() {
    // Allocate 3 arrays on CPU
    int nr_rows_A, nr_cols_A, nr_rows_B, nr_cols_B, nr_rows_C, nr_cols_C;

    // for simplicity we are going to use square arrays
    nr_rows_A = nr_cols_A = nr_rows_B = nr_cols_B = nr_rows_C = nr_cols_C = 3;

    thrust::device_vector<float> d_A(nr_rows_A * nr_cols_A), d_B(nr_rows_B * nr_cols_B), d_C(nr_rows_C *
nr_cols_C);

    // Fill the arrays A and B on GPU with random numbers
    GPU_fill_rand(thrust::raw_pointer_cast(&d_A[0]), nr_rows_A, nr_cols_A);
    GPU_fill_rand(thrust::raw_pointer_cast(&d_B[0]), nr_rows_B, nr_cols_B);

    // Optionally we can print the data
    std::cout << "A =" << std::endl;
    print_matrix(d_A, nr_rows_A, nr_cols_A);
    std::cout << "B =" << std::endl;
    print_matrix(d_B, nr_rows_B, nr_cols_B);

    // Multiply A and B on GPU
    gpu_blas_mmul(thrust::raw_pointer_cast(&d_A[0]), thrust::raw_pointer_cast(&d_B[0]),
thrust::raw_pointer_cast(&d_C[0]), nr_rows_A, nr_cols_A, nr_cols_B);

    //Print the result
    std::cout << "C =" << std::endl;
    print_matrix(d_C, nr_rows_C, nr_cols_C);

    return 0;
}
```

CUSPARSE

CUSPARSE

- Различные форматы хранения разреженных матриц
  - ✓ COO (наиболее общий)
  - ✓ CSR
  - ✓ CSC
  - ✓ DIAG
  - ✓ ELL
  - ✓ HYB (ELL + CSR)
- В основном матрично-векторно операции
- Наименования функций по следующей конвенции:

cusparse<Type>[<sparse data format>]<operation>[<sparse data format>]

- Например: single precision, sparse matrix (in csr storage) x dense vector => cusparseScsrmv

CUSPARSE ФОРМАТЫ

Coordinate (COO) Format

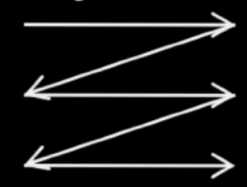
Row Index	1	2	2	3	4	4	4
Col Index	1	1	2	3	1	3	4
Values	1.0	2.0	3.0	4.0	5.0	6.0	7.0

	1	2	3	4
1	1.0			
2	2.0	3.0		
3			4.0	
4	5.0		6.0	7.0

Compressed Sparse Row (CSR)

Row Ptr	1	2	4	5	8		
Col Index	1	1	2	3	1	3	4
Values	1.0	2.0	3.0	4.0	5.0	6.0	7.0

row-major order



Compressed Sparse Column (CSC)

Row Index	1	2	4	2	3	4	4
Col Ptr	1	4	5	7	8		
Values	1.0	2.0	3.0	4.0	5.0	6.0	7.0

column-major order

CUSPARSE EXAMPLES

- Level 2 and 3
  - ✓ csrmv (matrix-vector multiplication)

$$\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{bmatrix} = \alpha \begin{bmatrix} 1.0 & & & \\ 2.0 & 3.0 & & \\ & & 4.0 & \\ 5.0 & & 6.0 & 7.0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1.0 \\ 2.0 \\ 3.0 \\ 4.0 \end{bmatrix} + \beta \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{bmatrix}$$

  - ✓ csrmm (matrix-tall-matrix multiplication)

$$\begin{bmatrix} x_{11} & x_{12} \\ x_{21} & x_{22} \\ x_{31} & x_{32} \\ x_{41} & x_{42} \end{bmatrix} = \alpha \begin{bmatrix} 1.0 & & & \\ 2.0 & 3.0 & & \\ & & 4.0 & \\ 5.0 & & 6.0 & 7.0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1.0 & 5.0 \\ 2.0 & 6.0 \\ 3.0 & 7.0 \\ 4.0 & 8.0 \end{bmatrix} + \beta \begin{bmatrix} x_{11} & x_{12} \\ x_{21} & x_{22} \\ x_{31} & x_{32} \\ x_{41} & x_{42} \end{bmatrix}$$

NPP

NPP

- C/c++ примтивы (primitives) – low level API:
- Простая интеграция в код
- Примерно 350 функций обработки изображений
- Примерно 100 функций обработки сигналов

THRUST

THRUST

- Библиотека шаблонов для CUDA – аналогична C++ STL
- Контейнеры – управление паматью на хосте и устрйостве: thrust::host_vector<T>, thrust:device_vector<T> – позволяет избегать множества типичных ошибок
- Итераторы
  – Автоматически перемещает данные между хостом и устройством
  – d_vec.begin()
- Алгоритмы
  – Сортировка, редукция, scan, и.т.д.: thrust::sort()

THRUST: АЛГОРИТМЫ

- Операции над элементами векторов:
  – for_each, transform, gather, scatter ...

- Редукции:
  – reduce, inner_product, reduce_by_key ...

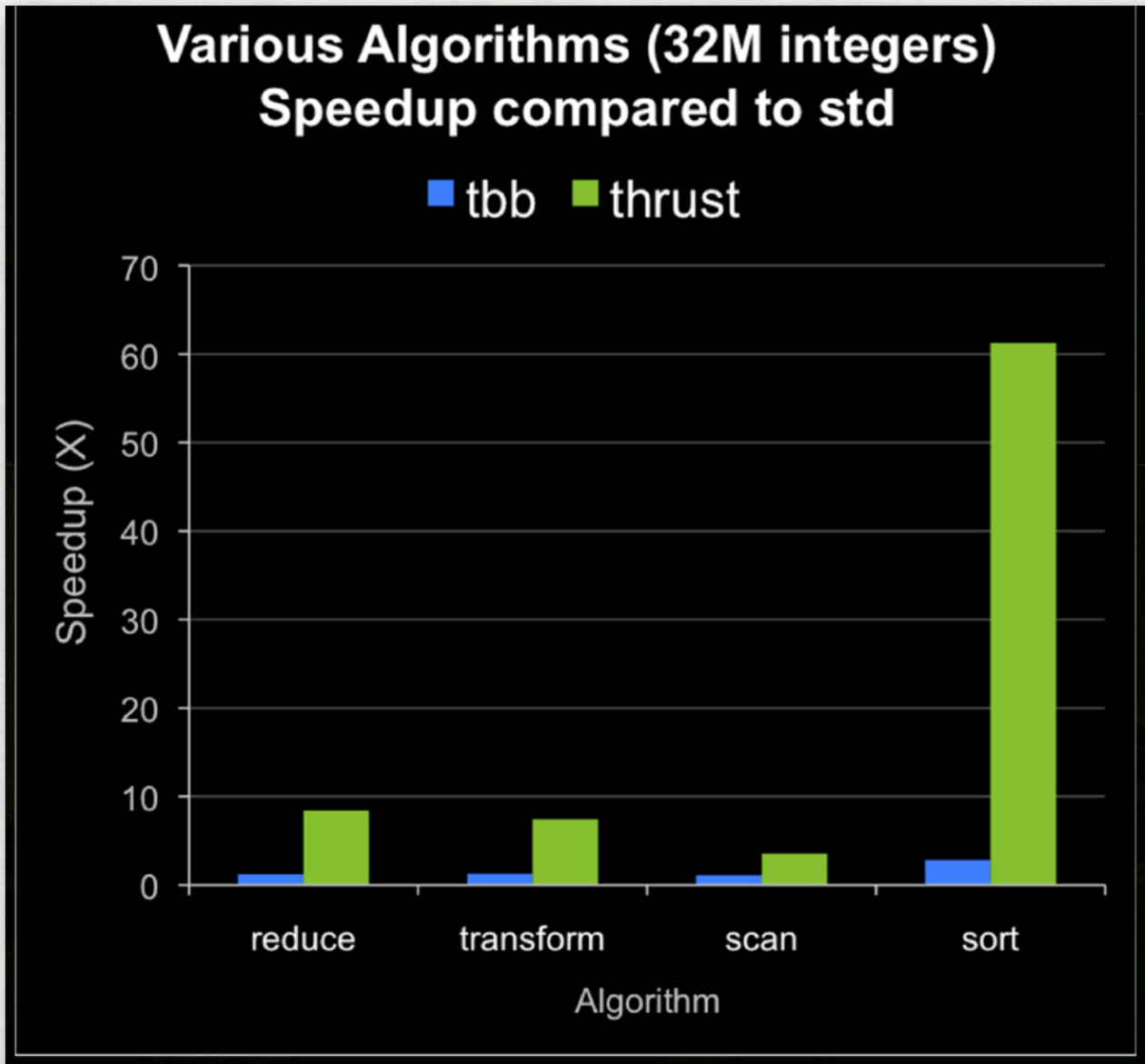
- Префикс-суммы:
  – inclusive_scan, inclusive_scan_by_key ...

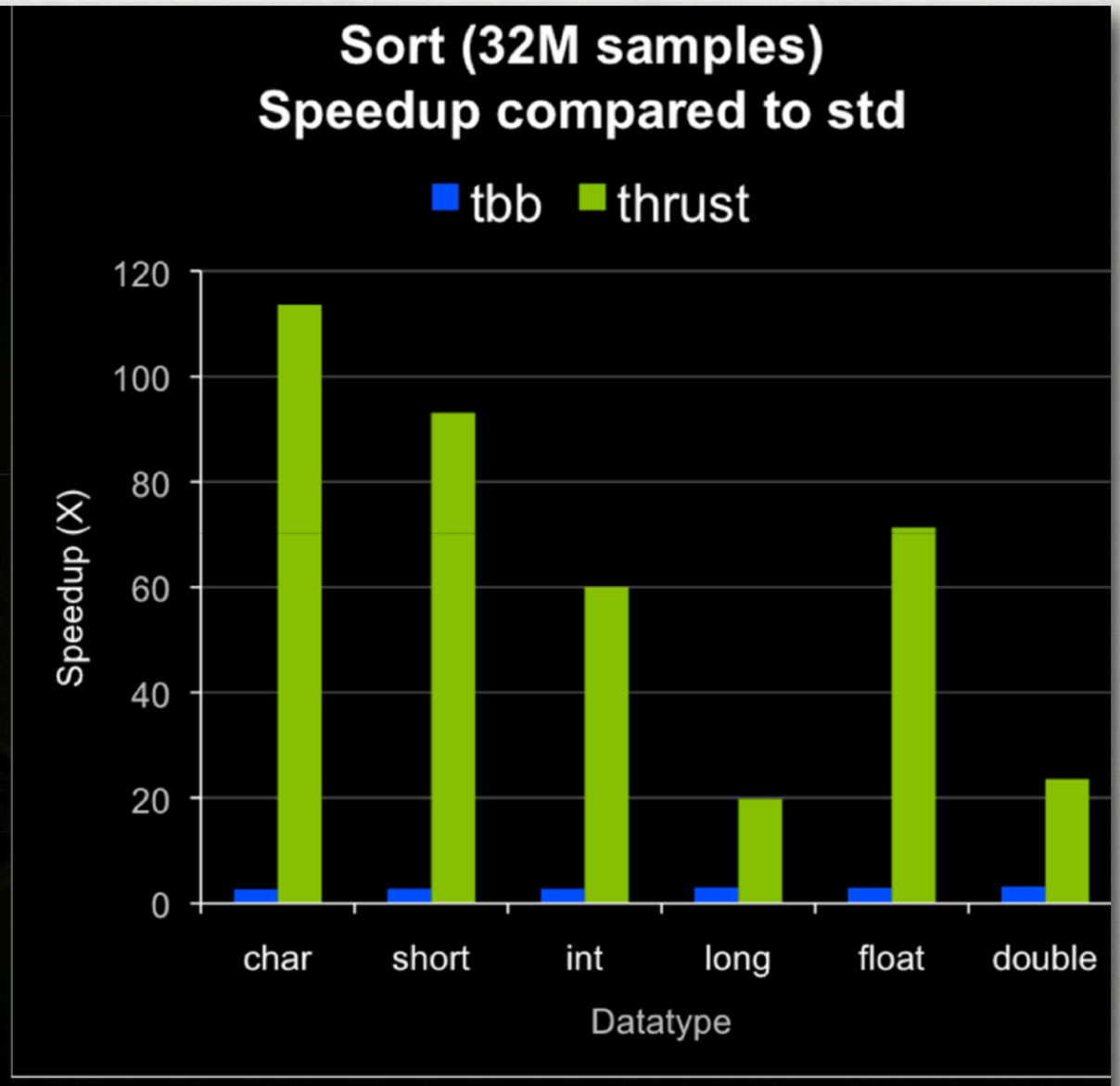
- Сортировки
  – sort, stable_sort, sort_by_key ...

THRUST: ПРИМЕР

```
#include <thrust/host_vector.h>

#include <thrust/device_vector.h>

#include <thrust/sort.h>

#include <cstdlib.h>


int main(void)

{

        // generate 32M random numbers on the host

        thrust::host_vector<int> h_vec(32 << 20);

        thrust::generate(h_vec.begin(), h_vec.end(), rand);

        // transfer data to the device

        thrust::device_vector<int> d_vec = h_vec;

        // sort data on the device (846M keys per sec on GeForce GTX 480)

        thrust::sort(d_vec.begin(), d_vec.end());

        // transfer data back to host

        thrust::copy(d_vec.begin(), d_vec.end(), h_vec.begin());

        return 0;

}
```

THRUST: PERFORMANCE





* Thrust 4.0, NVIDIA Tesla C2050 (Fermi)

* Core i7 950 @ 3.07GHz

NVGRAPH

NVGRAPH

- Библиотека аналитики больших графов
- Поддерживает 3 широко-используемых графовых алгоритмов
- **Page Rank**
- **Single Source**
- **Single Source Widest Path**

ГДЕ ИСКАТЬ ИНФОРМАЦИЮ ПО БИБЛИОТЕКАМ?

- В документации CUDA Toolkit - https://docs.nvidia.com/cuda/index.html