2024

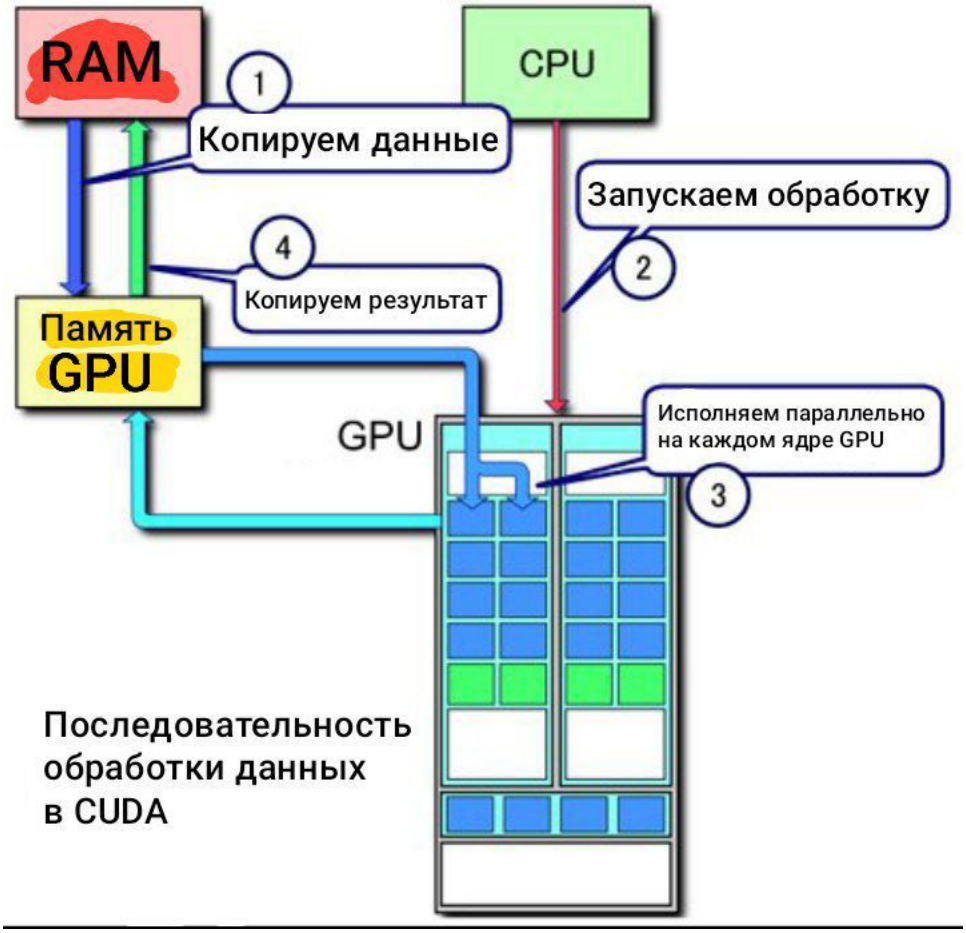
Death Sentence, 4th Term

10 сентября 2024 г.

Содержание

1 Основы ускорения вычислений на CUDA на Питоне.

CUDA - специальный фреймворк для ускорения вычислений посредством параллелизации на Nvidia GPU.

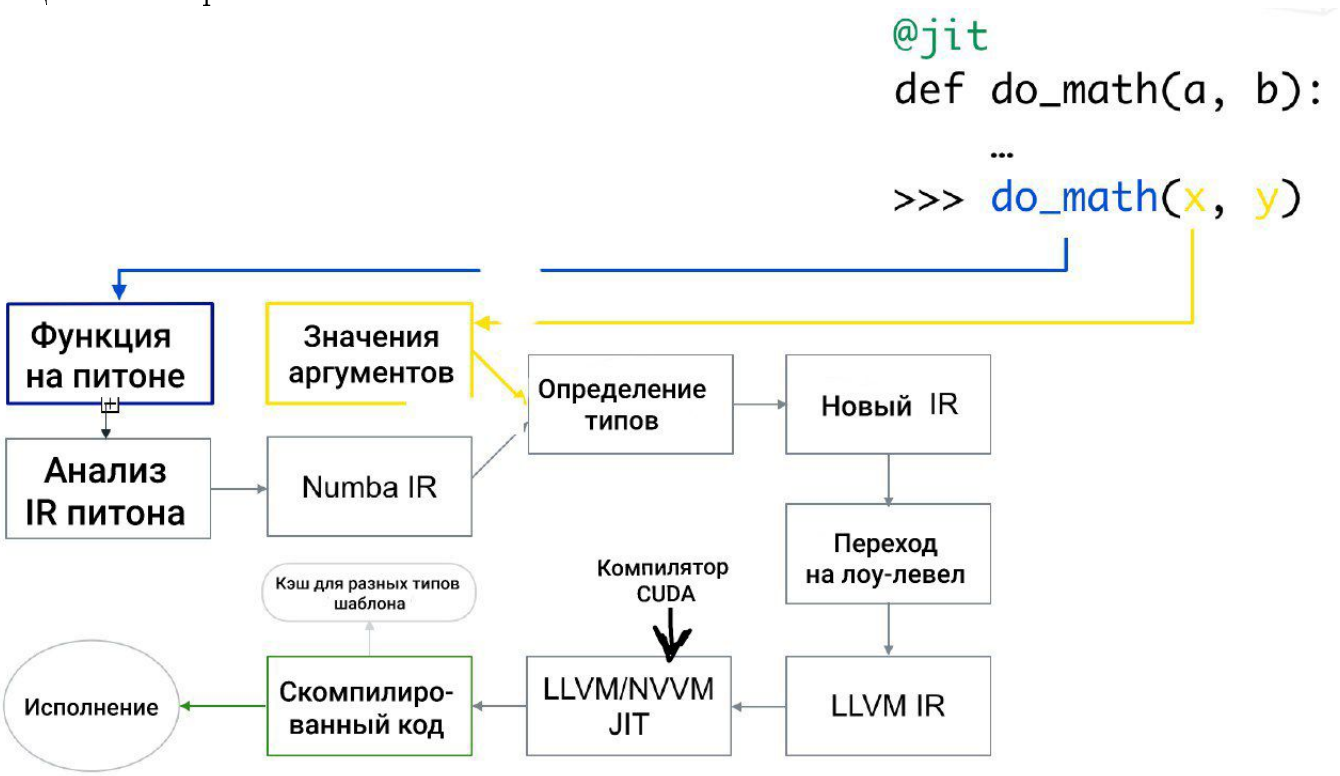


1.1 Введение в CUDA питон с Numba

Numba - JIT компилятор, преобразующий функции в более быстрые их варианты. Работает в основном с числовыми типами - int, float, complex. Может использовать как CPU, так и GPU. CPU-ускорение создаётся через декоратор @jit, который подключается как

```
from numba import jit
```

Общая схема работы Numba такая:



Здесь самое важное, что Numba может оптимизировать далеко не все типы, как уже было сказано. Для выброса исключения о том, что тип не поддерживается, есть опция декоратора

```
nopython=True
```

, она же по дефолту стоит в декораторе @njit. Если же компилировать без неё, то Numba ничо не соптимизирует и это будет обычный питоновский код. Этот режим называется object mode, в отличие от nopython mode.

Ура, GPU. Для CPU есть библиотека NumPy, предоставляющая интерфейс универсальных функций (ufunc), которые исполняют своё тело над каждым индексом в поданной на вход совокупности массивов. Естественно, предполагается, что диапазон для итерирования для всех массивов совпадает.

Ufunc есть и в Numba, там они реализуются с помощью декоратора @vectorize, который исполняет скомпилированные функции. Для GPU нужно указать в его аргументах желаемые сигнатуры функции и назначение (например, cuda). Нам интересна CUDA, и вот что умеет делать Numba:

1. Компилит так называемый CUDA kernel - функция для GPU, которая будет параллелиться
2. Выделяет память под входные и выходные данные
3. Копирует входные данные в GPU
4. Исполняет CUDA kernel с заданной конфигурацией ядра GPU, основанной на размерах типов
5. Копирует данные назад на CPU
6. Возвращает результат типа NumPy array

Выглядит это всё довольно плохо и на малых данных влечёт за собой кучу оверхедов - вы видите, сколько тут лишних шагов. Оказывается, Big Data не так уж и бесполезны, да? GPU нужны большие объёмы данных для организации работы на своих сотнях и тысячах ядер. А ещё надо по возможности использовать 32-битные типы вместо 64, потому что GPU чувствителен к вещам такого рода.
А ещё на GPU не работает половина NumPy, так что нужно использовать math.

В лабе посмотрите, что для поэлементных функций это в принципе нормально работает. Там как раз будет упражнение на это. Ещё раз, видим ПОЭЛЕМЕНТНО - используем vectorize. Поэлементно - значит, как минимум должен быть массив как аргумент.

Но не все функции в мире поэлементные, а оптимизировать надо всё. Для остальных функций есть @cuda.jit - ещё один декоратор, который имеет опцию device - она позволяет запретить исполнять функцию вне GPU. Ну и да, он компилит функции, тем самым ускоряя их работу.

Кстати на GPU и питона то толком нет, поэтому код писать мы будем тупой.

Если бы мы были нормальными людьми, мы бы писали медленный, но простой код.

Но нам придётся писать быстрый, а для этого кучу всего надо подкрутить вручную. Можно было заметить, что мы нигде явно не прописывали, когда и как мы передаём данные между CPU и GPU.

Для того чтобы данные передавались только явно, мы используем специальный тип данных - device array. То, что в нём лежит, всегда находится на GPU. Инициализируется он функцией cuda.to_device из CPU-шного массива либо создаётся пустым с помощью cuda.device_array(shape, dtype). В CPU он передается по требованию с помощью copy_to_host.
Оптимизированная передача данных это круто, но вообще было бы неплохо ещё и модифицировать данные внутри GPU, да? Для этого мы добавляем в наши ufunc при вызове параметр out - device array, в который она положит свой результат - используем её как процедуру. Также, ufunc неявно принимают device array на вход вместо обычных массивов - исполняясь на GPU, таким образом они работают уже с тем, что там лежит, исключая лишнее копирование в GPU.

Примечания для упражнений:
- Следите за типами!
- Проверяйте синтаксис
- По дефолту функции исполняются на CPU, если они не @vectorize и не @cuda.jit, поэтому стоит делать внутри функций всё через device array (который, кстати, можно переиспользовать)