Оптимизированные библиотеки CUDA

Романенко А.А.
arom@ccfit.nsu.ru
Новосибирский государственный университет

3 способа написать программу для GPU

Приложение

Оптимизированные библиотеки

Директивы компилятора

Языки программирования (C/C++/Фортран)

Ускорение до нескольких десятков раз

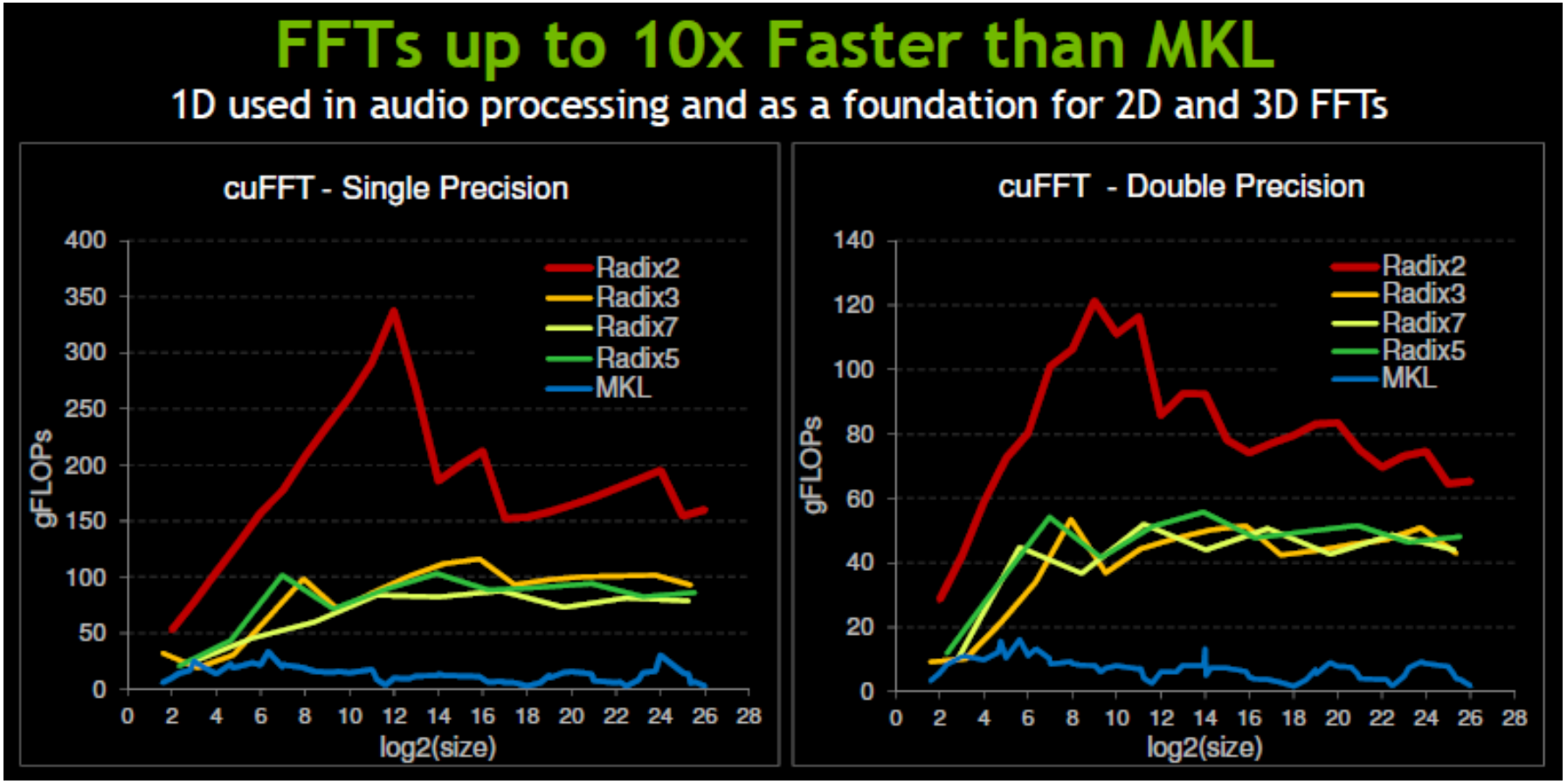
Максимум производительности

Библиотеки

* cuBLAS — Базовые функции линейной алгебры
* cuSPARSE - BLAS для разреженных векторов и матриц
* cuFFT — преобразование Фурье
* cuRAND — генерация псевдо\квази-случайных чисел
* NPP – NVidia Performance primitives
* CUDA Video Decode — работа с потоковым видео
* Thrust – Шаблоны параллельных алгоритмов
* math.h - C99 floating-point Library

Производительность

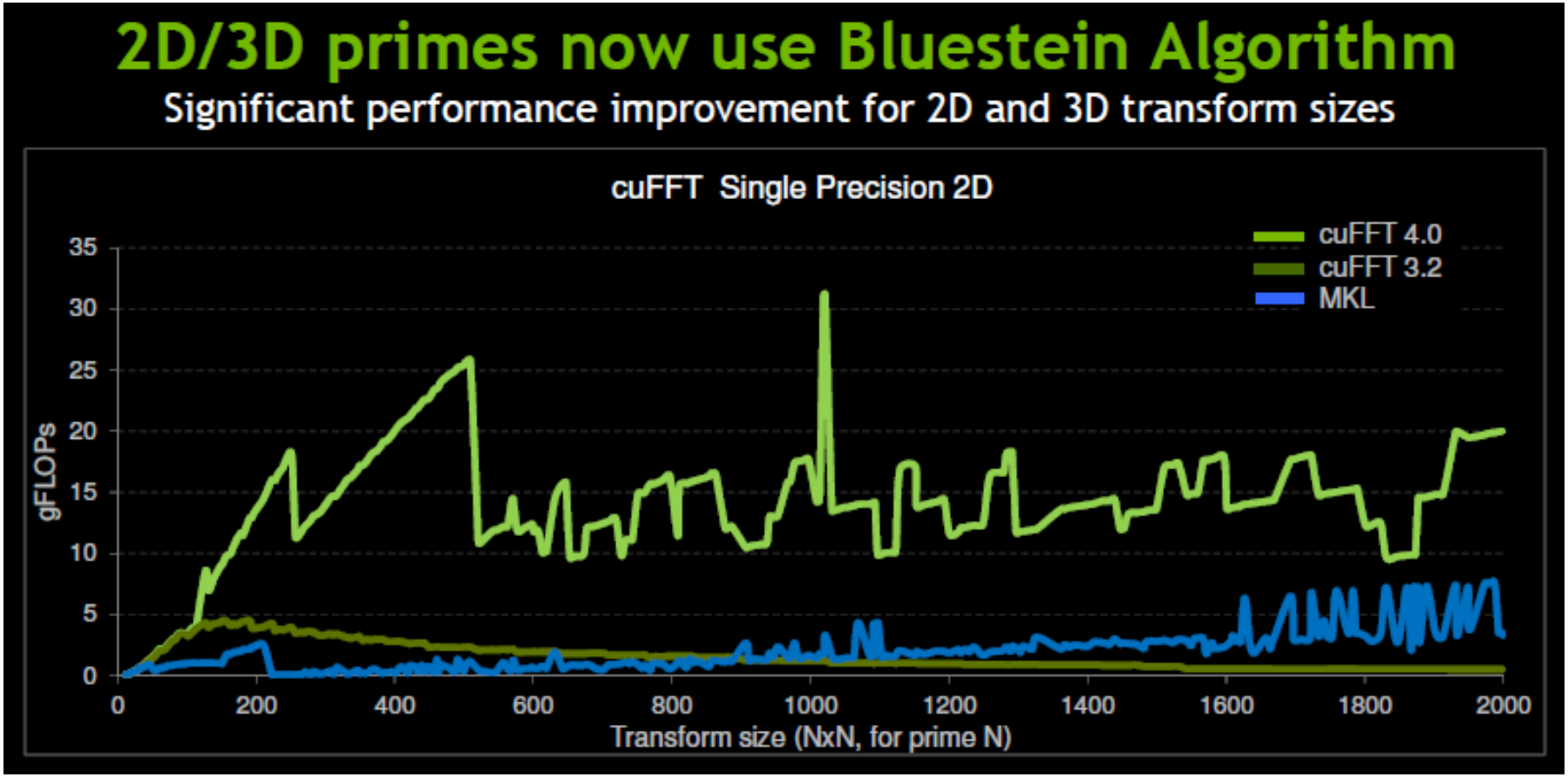
* http://developer.nvidia.com/content/cuda-40-math-libraries-performance-boost



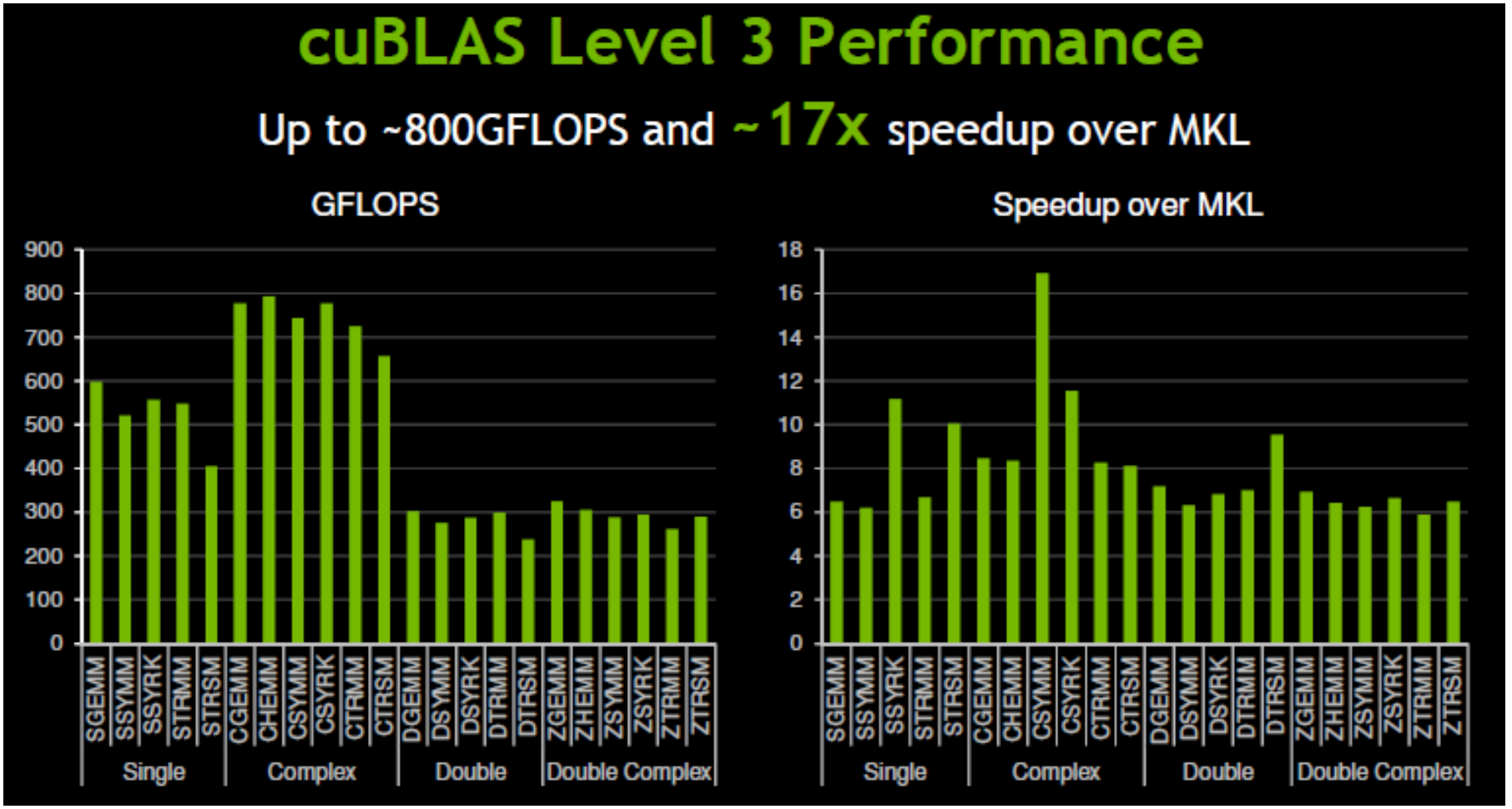
- MKL 10.1r1 on Intel Quad Core i7-940 1333, 2.93Ghz
- cuFFT 4.0 on Tesla C2070, ECC on
- Performance measured for ~16M total elements, split into batches of transforms of the size on the x-axis

2D/3D primes now use Bluestein Algorithm

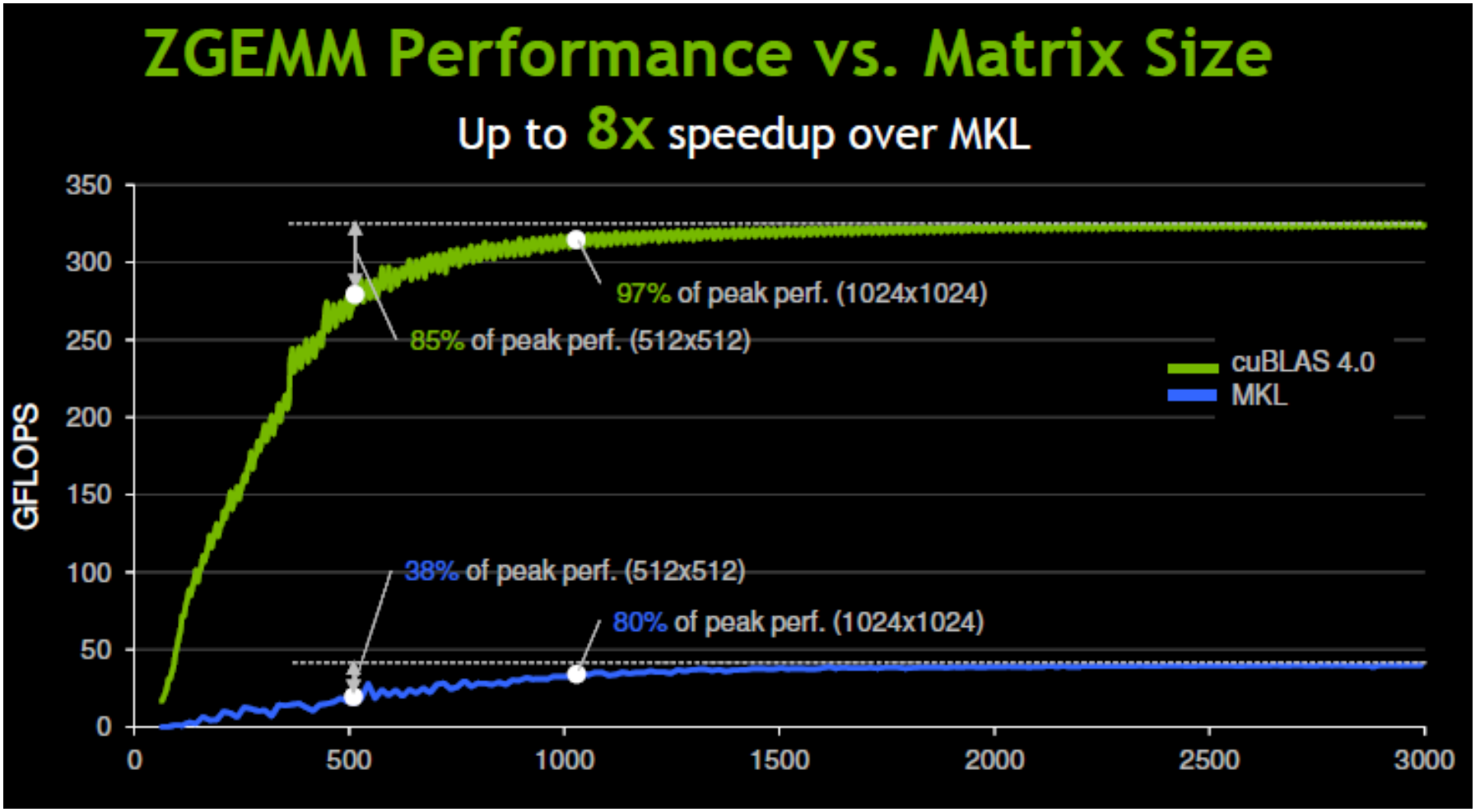
Significant performance improvement for 2D and 3D transform sizes



- MKL 10.1r1 on Intel Quad Core i7-940 1333, 2.93Ghz
- cuFFT4.0 on C2070, ECC on



- 4Kx4K matrix size
- cuBLAS 4.0, Tesla C2050 (Fermi), ECC on
- MKL 10.2.3, 4-core Corei7 @ 2.66Ghz



- cuBLAS 4.0, Tesla C2050 (Fermi), ECC on
- MKL 10.2.3, 4-core Corei7 @ 2.66Ghz

BLAS

* BLAS - Basic Linear Algebra Subprograms
* Стандарт API для библиотек, реализующих основные операции линейной алгебры
* http://www.netlib.org/blas/

BLAS. Функциональность

* Уровень 1: Векторные операции
  * y = ax + y
  * a = x'y
* Уровень 2: Векторно-матричные операции
  * y = aAx + by
  * A = axy' + A
* Уровень 3: Матричные операции
  * C = aAB + C

BLAS. Реализации

* refblas – C/Fortran77, netlib
* ATLAS – C/Fortran77, netlib
* uBLAS – C++, Boost
* cuBLAS – C, NVIDIA
* ACML – C/Fortran77, AMD
* MKL – C/Fortran77, Intel
* MAGMA

Именование функций (1)

* <character> <name> <mod> ( )
* character
  * s - real, single precision (вещественные данные одинарной точности)
  * c - complex, single precision (комплексные данные одинарной точности)
  * d - real, double precision (вещественные данные двойной точности)
  * z - complex, double precision (комплексные данные двойной точности)

Именование функций (2)

* BLAS Level 1
  * ?dot - скалярное произведение векторов
  * ?rot — повернуть вектор
  * ?swap — обменять содержимое векторов
* <mod>
  * c - conjugated vector (сопряжённый вектор)
  * u - unconjugated vector (исходный (несопряжённый) вектор)
  * g - Givens rotation (вращение Гивенса)

Именование способов хранения матриц (3)

* BLAS level 2,3 <name>
  * ge - general matrix (обычная матрица)
  * gb - general band matrix (ленточная матрица)
  * sy - symmetric matrix (симметричная матрица)
  * sp - symmetric matrix (packed storage) (симметричная упакованная матрица)
  * sb - symmetric band matrix (симметричная ленточная упакованная матрица)
  * he - Hermitian matrix (эрмитова матрица)
  * hp - Hermitian matrix (packed storage) (эрмитова упакованная матрица)
  * hb - Hermitian band matrix (эрмитова ленточная матрица)
  * tr - triangular matrix (треугольная матрица)
  * tp - triangular matrix (packed storage) (треугольная упакованная матрица)
  * tb - triangular band matrix (треугольная ленточная матрица)

Именование функций (4)

* BLAS level 2 <mod>
  * mv - matrix-vector product (матрично-векторное умножение)
  * sv - solving a system of linear equations with matrix-vector operations (решение системы линейных алгебраических уравнений с одной правой частью)
  * r - rank-1 update of a matrix (добавление матрицы «ранга 1»)
  * r2 - rank-2 update of a matrix (добавление двух матриц «ранга 1»)
* BLAS level 3 <mod>
  * mm - matrix-matrix product (произведение матриц)
  * sm - solving a system of linear equations with matrix-matrix operations (решение системы линейных алгебраических уравнений со многими правыми частями)
  * rk - rank-k update of a matrix (добавление матрицы «полного» ранга)
  * r2k - rank-2k update of a matrix (добавление двух матриц «полного» ранга)

cuBLAS. Особенности

* Библиотека ориентирован на Фортран. Поэтому в целях совместимости с существующими версиями в матрицах последовательно лежат элементы в столбцах (column-major storage format)
* Нумерация элементов начинается с единицы.
* Для C\C++ надо использовать макросы:
  * `#define IDX2F(i,j,ld) ((((j)-1)*(ld))+((i)-1))`
  * `#define IDX2C(i,j,ld) (((j)*(ld))+(i))`
* Проверка ошибок отдельными функциями.

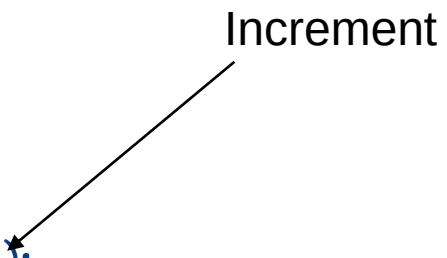
Сборка программы

* Файл заголовка — cublas.h
* Библиотеки
  * cublas.so (Linux),
  * cublas.dll (Windows),
  * cublas.dylib (Mac OS X)
* Makefile
  * USECUBLAS :=1

Пример

```
#include "cublas.h"
float* h_A; float* h_B; float* h_C;
float* d_A = 0; float* d_B = 0; float* d_C = 0;
int n2 = N * N;
cublasStatus status;

status = cublasInit(); // check status
status = cublasAlloc(n2, sizeof(d_A[0]), (void**)&d_A);
status = cublasAlloc(n2, sizeof(d_B[0]), (void**)&d_B);
status = cublasAlloc(n2, sizeof(d_C[0]), (void**)&d_C);
status = cublasSetVector(n2, sizeof(h_A[0]), h_A, 1, d_A, 1);
status = cublasSetVector(n2, sizeof(h_B[0]), h_B, 1, d_B, 1);
status = cublasSetVector(n2, sizeof(h_C[0]), h_C, 1, d_C, 1);
cublasSgemm('n', 'n', N, N, N, alpha, d_A, N, d_B, N, beta, d_C, N);
status = cublasGetError();
status = cublasGetVector(n2, sizeof(h_C[0]), d_C, 1, h_C, 1);
status = cublasFree(d_A);
status = cublasFree(d_B);
status = cublasFree(d_C);
status = cublasShutdown();
```



cuSPARSE

* Категории функций
  * Level 1 — операции между разреженными и «плотными» векторами
  * Level 2 — операции между разреженными матрицами и «плотными» векторами
  * Level 3 — операции над разреженными матрицами и множеством «плотных» векторов
  * Вспомогательные функции и функции преобразования типов

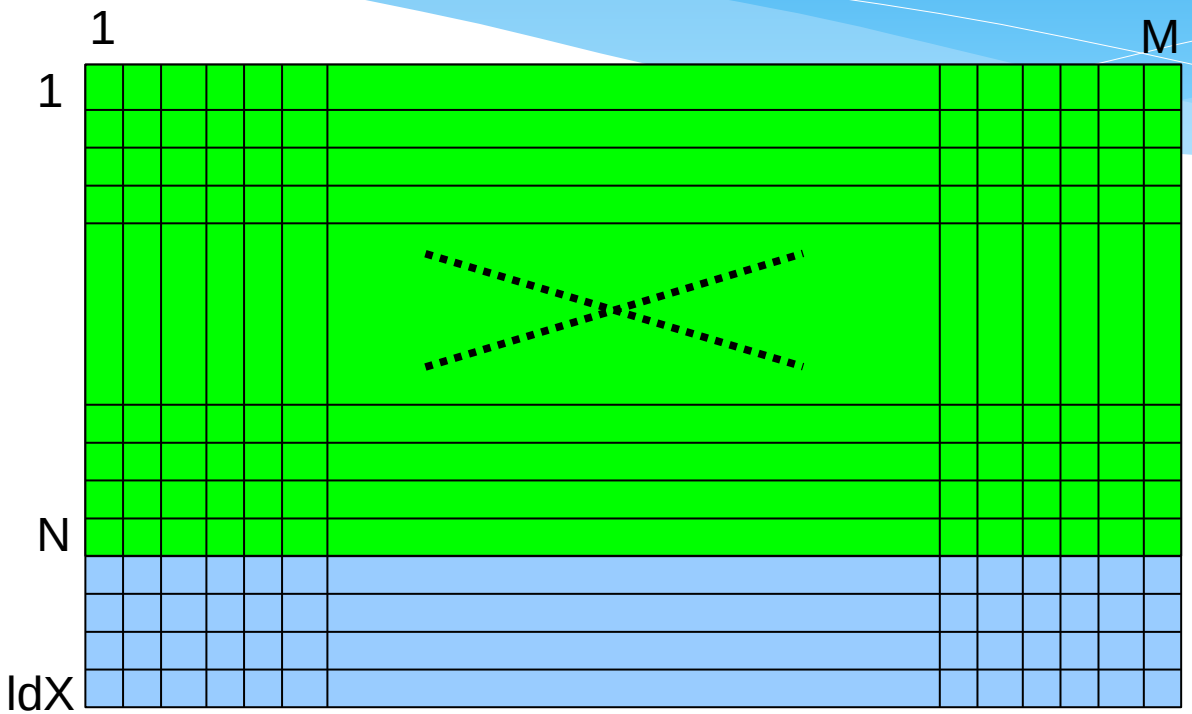
Формат разреженных векторов

* Индексный формат
  * V = [1.0, 0.0, 0.0, 2.0, 3.0, 0.0, 4.0]
    Val = [1.0, 2.0, 3.0, 4.0]
    Idx = [1, 4, 5, 7] // one-base index
    Idx = [0, 3, 4, 6] // zero-base index
* Значение индекса может только увеличиваться
* Индекс встречается только 1 раз

Форматы разреженных матриц

* Плотный (полный) формат
* Координатный формат
* Сжатый по строкам
* Сжатый по колонкам

Полный (плотный) формат



* M — количество столбцов
* N — количество рядов в матрице
* ldX — количество рядов в полной матрице. ldX>=N
* V — элементы матрицы

Координатный формат

* Матрица MxN
* nnz — количество ненулевых элементов
* cooValA — массив значений ненулевых элементов матрицы в порядке приоритета по рядам
* cooRowIndA — массив индексов рядов соответствующих ненулевых элементов матрицы
* cooColIndA — массив индексов столбцов соответствующих ненулевых элементов матрицы

Координатный формат (пример)

$$A = \begin{pmatrix} 1.0 & 4.0 & 0.0 & 0.0 & 0.0 \\ 0.0 & 2.0 & 3.0 & 0.0 & 0.0 \\ 5.0 & 0.0 & 0.0 & 7.0 & 8.0 \\ 0.0 & 0.0 & 9.0 & 0.0 & 6.0 \end{pmatrix}$$

```
cooValA     = [1.0, 4.0, 2.0, 3.0, 5.0, 7.0, 8.0, 9.0, 6.0]
cooRowIndxA = [  0,   0,   1,   1,   2,   2,   2,   3,   3]
CooColIndxA = [  0,   1,   1,   2,   0,   3,   4,   2,   4]

cooValA     = [1.0, 4.0, 2.0, 3.0, 5.0, 7.0, 8.0, 9.0, 6.0]
cooRowIndxA = [  1,   1,   2,   2,   3,   3,   3,   4,   4]
CooColIndxA = [  1,   2,   2,   3,   1,   4,   5,   3,   5]
```

Сжатый по строкам

* Аналогичен координатному формату, но массив индексов строк сжимается.
* nnz — количество ненулевых элементов
* csrValA — массив значений ненулевых элементов матрицы в порядке приоритета по рядам
* csrRowPtrA — массив длинны N+1. Первые N — индекс в csrValA первого элемента в i-той строке, Последний равен nnz+(0 или 1).
* csrColIndA — массив индексов столбцов соответствующих ненулевых элементов матрицы

Формат сжатия по строкам (пример)

$$A = \begin{pmatrix} 1.0 & 4.0 & 0.0 & 0.0 & 0.0 \\ 0.0 & 2.0 & 3.0 & 0.0 & 0.0 \\ 5.0 & 0.0 & 0.0 & 7.0 & 8.0 \\ 0.0 & 0.0 & 9.0 & 0.0 & 6.0 \end{pmatrix}$$

```
csrValA = [1.0 4.0 2.0 3.0 5.0 7.0 8.0 9.0 6.0]
csrRowPtrA = [0 2 4 7 9]
csrColIndA = [0 1 1 2 0 3 4 2 4]

csrValA = [1.0 4.0 2.0 3.0 5.0 7.0 8.0 9.0 6.0]
csrRowPtrA = [1 3 5 8 10]
csrColIndA = [1 2 2 3 1 4 5 3 5]
```

Сжатый по столбцам

* Аналогичен координатному формату, но массив индексов столбцов сжимается.
* nnz — количество ненулевых элементов
* cscValA — массив значений ненулевых элементов матрицы в порядке приоритета по столюцам
* cscColPtrA — массив длинны M+1. Первые M — индекс в csrValA первого элемента в i-том столбце, Последний равен nnz+(0 или 1).
* cscRowIndA — массив индексов строк соответствующих ненулевых элементов матрицы

Формат сжатия по столбцам (пример)

$$A = \begin{pmatrix} 1.0 & 4.0 & 0.0 & 0.0 & 0.0 \\ 0.0 & 2.0 & 3.0 & 0.0 & 0.0 \\ 5.0 & 0.0 & 0.0 & 7.0 & 8.0 \\ 0.0 & 0.0 & 9.0 & 0.0 & 6.0 \end{pmatrix}$$

```
cscValA = [1.0 4.0 2.0 3.0 5.0 7.0 8.0 9.0 6.0]
cscColPtrA = [0 2 4 6 7 9]
cscRowIndA = [0 2 0 1 1 3 2 2 3]

cscValA = [1.0 4.0 2.0 3.0 5.0 7.0 8.0 9.0 6.0]
cscColPtrA = [1 3 5 7 8 10]
cscRowIndA = [1 3 1 2 2 4 3 3 4]
```

Функции

* Level 1, 2, 3 — cusparse{S,D,C,Z}<имя функции>
* Вспомогательные функции
  * Инициализация библиотеки, установка типов и параметр матриц и пр.
* Конвертирование типов
  * Преобразование матриц из одного сжатого формата в другой. Например, cusparse{S,D,C,Z}csc2dense cusparse{S,D,C,Z}csr2csc

cuFFT

$$X_k = \sum_{n=0}^{N-1} x_n e^{-\frac{2\pi i}{N} kn} \qquad k = 0, \ldots, N-1$$

$$x_n = \frac{1}{N} \sum_{k=0}^{N-1} X_k e^{\frac{2\pi i}{N} kn} \qquad n = 0, \ldots, N-1.$$

* Дискретное преобразование Фурье
* Комплексные и вещественные числа
* Одномерное, двумерное, трехмерное

Типы данных

* cufftHandle - дескриптор\план
  * typedef unsigned int cufftHandle;
* cufftResult
  * typedef enum cufftResult_t cufftResult;
* cufftReal
* cufftDoubleReal
* cufftComplex
* cufftDoubleComplex

Константы

* Типы преобразования
  * CUFFT_R2C
  * CUFFT_C2R
  * CUFFT_C2C
  * CUFFT_Z2D
  * CUFFT_D2Z
  * CUFFT_Z2Z
* Направление преобразования
  * CUFFT_FORWARD
  * CUFFT_INVERSE

Функции

- Создание плана вычислений
  - cufftPlan1d, cufftPlan2d, cufftPlan3d
- Освобождение плана
  - cufftDestroy
- Выполнение
  - cufftExecC2C, cufftExecR2C, cufftExecC2R, cufftExecZ2D, cufftExecD2Z, cufftExecZ2Z

Пример

```
#define  NX  256
#define  NY  128
cufftHandle  plan;
cufftComplex  *idata,  *odata;
cudaMalloc((void**)&idata,  sizeof(cufftComplex)*NX*NY);
cudaMalloc((void**)&odata,  sizeof(cufftComplex)*NX*NY);
/*  Create  a  2D  FFT  plan  */
cufftPlan2d(&plan,  NX,  NY,  CUFFT_C2C);
/*  Transform  the  signal  out  of  place  */
cufftExecC2C(plan,  idata,  odata,  CUFFT_FORWARD);
/*  Inverse  transform  the  signal  in  place  */
cufftExecC2C(plan,  odata,  odata,  CUFFT_INVERSE);
/*  Destroy  the  CUFFT  plan  */
cufftDestroy(plan);
cudaFree(idata);  cudaFree(odata);
```

Сборка программ

* Исходный код
  * #include <cufft.h>
* Makefile
  * USECUFFT := 1
* Библиотеки
  * libcufft.a

cuRAND

* Библиотека для генерации псевдослучайных и квазислучайных чисел.
* Работает как на стороне GPU так и на стороне центрального процессора
* При одних и тех же начальных условиях (тип генератра, seed и пр.) последовательности чисел будут одинаковые. Как на GPU так и на CPU.

Последовательность работы

1. Создать генератор
   curandCreateGenerator(), curandCreateGeneratorHost()
2. Установить параметры
3. Выделить память под результат
   cudaMalloc(), cudaMallocHost()
4. Сгенерировать последовательность
5. Использовать результат
6. При необходимости вернуться к пункту 4
7. Освободить память
8. Удалить генератор
   curandDestroyGenerator()

Параметры

* Тип
  * CURAND_RNG_PSEUDO_DEFAULT
  * CURAND_RNG_PSEUDO_XORWOW
  * CURAND_RNG_QUASI_DEFAULT
  * CURAND_RNG_QUASI_SOBOL32
  * И пр.
* Опции
  * Seed (инициализация, начальное значение)
  * Offset (смещение от начала исходной последовательности)
  * Ordering (расположение чисел в памяти)
    * CURAND_ORDERING_PSEUDO_DEFAULT
    * CURAND_ORDERING_PSEUDO_BEST
    * CURAND_ORDERING_QUASI_DEFAULT

Функции генерации

* curandGenerate — 32-bit unsigned int
* curandGenerateUniform — равномерное распределение float (0.0, 1.0]
* curandGenerateNormal — нормальное распределение с заданными средним значением и стандартным отклонением float
* curandGenerateUniformDouble - равномерное распределение double (0.0, 1.0]
* curandGenerateNormalDouble— нормальное распределение с заданными средним значением и стандартным отклонением double

Пример

```
int main(int argc, char *argv[]){
    size_t n = 100;
    curandGenerator_t gen;
    float *devData, *hostData;
    hostData = (float *)calloc(n, sizeof(float));
    cudaMalloc((void **)&devData, n * sizeof(float));
    /* Create pseudo-random number generator */
    curandCreateGenerator(&gen,CURAND_RNG_PSEUDO_DEFAULT);
    curandSetPseudoRandomGeneratorSeed(gen, 1234ULL); /* Set seed */

    curandGenerateUniform(gen, devData, n);
    cudaMemcpy(hostData, devData, n * sizeof(float),
                                        cudaMemcpyDeviceToHost));

    for(int i = 0; i < n; i++) { printf("%1.4f ", hostData[i]); }
    printf("\n");
    curandDestroyGenerator(gen); /* Cleanup */
    cudaFree(devData);
    free(hostData);
    return EXIT_SUCCESS;
}
```

Device API

* __device__ void curand_init(...)
  * Требует много ресурсов. Рекомендуется проводить инициализацию отдельным ядром
* __device__ unsigned int curand(curandState *state)
* __device__ float curand_uniform(curandState *state)
* __device__ float curand_normal (curandState *state)
* __device__ double curand_uniform_double (…)
* __device__ double curand_normal_double(...)
* __device__ float2 curand_normal2(...)
* __device__ double2 curand_normal2_double(...)

Пример

```
__global__ void setup_kernel(curandState *state) {
    int id = threadIdx.x + blockIdx.x * 64;
    /* Each thread gets same seed, a different
       sequence number, no offset */
    curand_init(1234, id, 0, &state[id]);
}
__global__ void generate(curandState *state, int *result) {
    int id = threadIdx.x + blockDim.x * blockIdx.x;
    int count = 0;
    unsigned int x;
    /* Copy state to local memory for efficiency */
    curandState localState = state[id];
    /* Generate pseudo-random unsigned ints */
    for(int n = 0; n < 100000; n++) {
        x = curand(&localState);
        ...
    }
    /* Copy state back to global memory */
    state[id] = localState;
}
```

Сборка программ

* Исходный код
  * #include <curand.h> // host API
  * #include <curand_kernel.h> // device API
* Makefile
  * USECURAND := 1
* Библиотеки
  * libcurand.a

NPP

* Аналог IPP (Intel Performance primitives)
* Арифметические, логические, преобразования, фильтрации, статистические и пр.
  * ~420 функций обработки изображений (+70 в 4.0)
  * ~500 функций обработки сигналов (+400 в 4.0)

CUDA Video Decode

* Декодирование видеопотоков на GPU в видеопамять
* Пост-обработка несжатого видео на CUDA
* Форматы
  * MPEG-2, VC-1, H.264 (AVCHD)
* Состав библиотеки
  * cuviddec.h
  * nvcuvid.h
  * nvcuvid.lib
  * nvcuvid.dll (Windows)
  * libnvcuvid.so (Linux)

Функции

* **cuvidCreateDecoder**(CUvideodecoder *phDecoder, CUVIDDECODECREATEINFO *pdci);
* **cuvidDestroyDecoder**(CUvideodecoder hDecoder);
* **cuvidDecodePicture**(CUvideodecoder hDecoder, CUVIDPICPARAMS *pPicParams);
* **cuvidMapVideoFrame**(CUvideodecoder hDecoder, int nPicIdx, CUdeviceptr * pDevPtr, unsigned int * pPitch, CUVIDPROCPARAMS *pVPP);
* **cuvidUnmapVideoFrame**(CUvideodecoder hDecoder, CUdeviceptr DevPtr);

Thrust

* Библиотека шаблонов C++ для CUDA
* Аналоги
  * C++ STL
  * Intel TBB (Thread building blocks)
* Появилась в CUDA 4.0
* Позволяет быстро создавать приложения и прототипы.
* Документация
  * http://wiki.thrust.googlecode.com/hg/html/index.html

Thrust. Пример

```
# include <thrust/device_vector.h>
# include <thrust/transform.h>
# include <thrust/sequence.h>
# include <thrust/copy.h>
# include <thrust/fill.h>
# include <thrust/replace.h>
# include <thrust/functional.h>
# include <iostream>
int main ( void ){
    thrust::device_vector <int>X(10); // allocate three device_vectors with 10 elements
    thrust::device_vector <int>Y(10); thrust::device_vector <int>Z(10);
    thrust::sequence(X.begin(), X.end()); // initialize X to 0,1,2,3, ....
    // compute Y = -X
    thrust::transform(X.begin(), X.end(), Y.begin(), thrust::negate<int>());
    thrust::fill(Z.begin(), Z.end(), 2); // fill Z with twos
    // compute Y = X mod 2
    thrust::transform(X.begin(), X.end(), Z.begin(), Y.begin(), thrust::modulus<int>());
    thrust::replace(Y.begin(), Y.end(), 1, 10); // replace all the ones in Y with tens
    // print Y
    thrust::copy(Y.begin(), Y.end(), std::ostream_iterator<int>(std::cout, "\n"));
    return 0;
}
```