Ciencia y Tecnología

Secretaría de Ciencia, Humanidades, Tecnología e Innovación

CIMAT
UNIDAD MÉRIDA

CUDA EN PYTHON (CUPY)

Dr. Francisco J. Hernández López
SECIHTI – CIMAT-Mérida
fcoj23@cimat.mx, www.cimat.mx/~fcoj23

https://cupy.dev/

- Librería de código abierto para cómputo paralelo usando GPU con Python
- Compatible con NumPy/Scipy
- Utiliza las librerías:
  - CUDA Toolkit
  - cuBLAS
  - cuRAND
  - cuSOLVER
  - cusparse
  - cuFFT
  - cuDNN
  - NCCL

INSTALACIÓN

https://docs.cupy.dev/en/stable/install.html

- Requerimientos:

- NVIDIA CUDA GPU with the Compute Capability 3.0 or larger.
- CUDA Toolkit: v10.2 / v11.0 / v11.1 / v11.2 / v11.3 / v11.4 / v11.5 / v11.6 / v11.7 / v11.8 / v12.0

  > - If you have multiple versions of CUDA Toolkit installed, CuPy will automatically choose one of the CUDA installations. See Working with Custom CUDA Installation for details.
  > - This requirement is optional if you install CuPy from `conda-forge`. However, you still need to have a compatible driver installed for your GPU. See Installing CuPy from Conda-Forge for details.

- Python: v3.7.0+ / v3.8.0+ / v3.9.0+ / v3.10.0+ / v3.11.0+

INSTALANDO CUPY EN CONDA

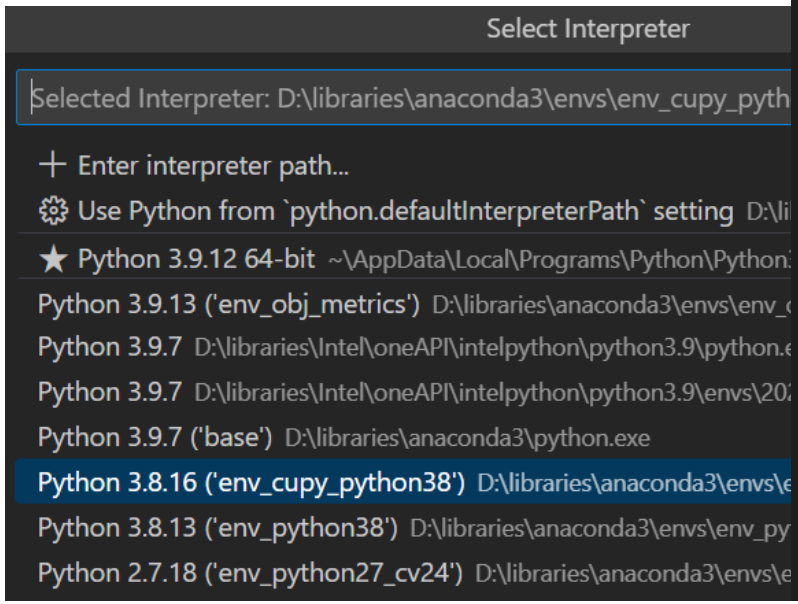
- Creamos un ambiente en conda:
  - conda create -n env_cupy_python38 python=3.8
- Entramos al ambiente:
  - conda activate env_cupy_python38
- Instalamos Numpy:
  - conda install -c anaconda numpy
- Instalamos Scipy:
  - conda install -c anaconda scipy
- Instalamos cupy con cudatoolkit=11.2
  - conda install -c conda-forge cupy cudatoolkit=11.2

De esta forma queda instalado cupy-11.5.0 y cudatoolkit-11.2.2

EJEMPLO-1

- Abrir VStudio Code
  - Abrir Carpeta
  - Crear archivo .py

Antes de ejecutar el programa hay que seleccionar el ambiente que creamos



Example-1.py

```python
import numpy as np
import cupy as cp

#Declaramos un arreglo en la CPU
x_cpu=np.array([1,2,3])

#Declaramos un arreglo en la GPU
x_gpu=cp.array([1,2,3])

#Calculamos la norma L2 en la CPU
norm_L2_x_cpu=np.linalg.norm(x_cpu)

#Calculamos la norma L2 en la GPU
norm_L2_x_GPU=cp.linalg.norm(x_gpu)

#Mostrar resultados
print(norm_L2_x_cpu)
print(norm_L2_x_GPU)
```

https://docs.cupy.dev/en/stable/user_guide/basic.html

ELEGIR GPU PARA EL PROCESAMIENTO

- CuPy ejecuta el código en la GPU que se encuentre activa, la cual es generalmente la GPU con índice cero
- Si contamos con dos GPUs, entonces es posible enviar procesamiento a la otra GPU de la siguiente manera:

```
>>> with cp.cuda.Device(1):
...     x_on_gpu1 = cp.array([1, 2, 3, 4, 5])
>>> x_on_gpu0 = cp.array([1, 2, 3, 4, 5])
```

https://docs.cupy.dev/en/stable/user_guide/basic.html

```
20  with cp.cuda.Device(0):
21      y_gpu = cp.array([1, 2, 3, 4, 5])
22  print(y_gpu.device)
23
24  with cp.cuda.Device(1):
25      z_gpu = cp.array([1, 2, 3, 4, 5])
26  print(z_gpu.device)
```

PROBLEMS OUTPUT DEBUG CONSOLE TERMINAL Python

```
3.7416573867739413
3.7416573867739413
<CUDA Device 0>
Traceback (most recent call last):
  File "d:/fcoj23/CIMAT_MERIDA/Docencia/cimat/ComputoParalelo/ejemplos/cupy/basicExamples/Example-1.py",
 line 24, in <module>
    with cp.cuda.Device(1):
  File "cupy\cuda\device.pyx", line 184, in cupy.cuda.device.Device.__enter__
  File "cupy_backends\cuda\api\runtime.pyx", line 374, in cupy_backends.cuda.api.runtime.setDevice
  File "cupy_backends\cuda\api\runtime.pyx", line 143, in cupy_backends.cuda.api.runtime.check_status
cupy_backends.cuda.api.runtime.CUDARuntimeError: cudaErrorInvalidDevice: invalid device ordinal
```

Nota: Cuando solo tenemos disponible una GPU, no es necesario indicar el .Device(), por default realizará las operaciones en el device con ID=0

TRANSFERENCIA DE DATOS

- Mover arreglos de la CPU a la GPU y viceversa

```python
import numpy as np
import cupy as cp

x_cpu = np.array([1, 2, 3])

#Copiar datos desde la CPU a la GPU
x_gpu = cp.asarray(x_cpu)

#Copiar datos desde la GPU a la CPU
y_cpu = cp.asnumpy(x_gpu)
#y_cpu = x_gpu.get() #También se puede
                     #usar el atributo get()
#Mostrar resultados
print(x_cpu)
print(x_gpu)
print(y_cpu)
```

TRANSFERENCIA DE DATOS

```
18  #cp.asarray y cp.asnumpy aceptan cualquier entrada (CPU/GPU)
19  #cp.asarray devuelve un arreglo CuPy en el device
20  #cp.asnumpy devuelve un arreglo Numpy en el host
21  z_cpu=x_cpu+y_cpu
22  #z_aux=x_gpu+y_cpu #No es posible
23  #Podemos hacer lo siguiente
24  z2_cpu=cp.asnumpy(x_gpu)+y_cpu
25  #o esto
26  z3_gpu=x_gpu+cp.asarray(y_cpu)
27
28  print(z_cpu)
29  print(z2_cpu)
30  print(z3_gpu)
```

FUNCIONES CUDA-KERNEL DEFINIDAS POR EL USUARIO

- Hay tres formas de definir CUDA-Kernels en CuPy:
  - CUDA-Kernel **elemental** (ElementwiseKernel)
  - CUDA-Kernel de **reducción** (ReductionKernel)
  - CUDA-Kernel **crudo** (RawKernel)

CUDA-KERNEL ELEMENTAL

- Se define con la clase ***ElementwiseKernel***
- La instancia de esta clase define un CUDA-Kernel, el cual puede ser invocado por el método __call__
- Consiste en cuatro partes:
  - Lista de argumentos de **entrada**
  - Lista de argumentos de **salida**
  - Código del **cuerpo** del ciclo
  - **Nombre** del CUDA-Kernel

EJEMPLO DE CUDA-KERNEL ELEMENTAL

```python
import numpy as np
import cupy as cp

#Creando una función CUDA-Kernel para evaluar las diferencias al cuadrado
squared_diff = cp.ElementwiseKernel('float32 x, float32 y',
                                    'float32 z',
                                    'z = (x - y) * (x - y)',
                                    'squared_diff')

x = cp.arange(10, dtype=np.float32).reshape(2, 5)
y = cp.arange(5, dtype=np.float32)

#z=squared_diff(x, y)
#También se puede hacer esto
z = cp.empty((2, 5), dtype=np.float32)
squared_diff(x, y,z)

print(x)
print(y)
print(z)
```

```
[[0. 1. 2. 3. 4.]
 [5. 6. 7. 8. 9.]]
[0. 1. 2. 3. 4.]
[[ 0.  0.  0.  0.  0.]
 [25. 25. 25. 25. 25.]]
```

Nota: las variables n, i y nombres comenzando con _ son reservados para uso interno

EJEMPLO – TIPO DE DATO GENÉRICO

```
10  squared_diff_generic = cp.ElementwiseKernel('T x, T y',
11                                               'T z',
12                                               '''
13                                               T diff = x - y;
14                                               z = diff * diff;
15                                               ''',
16                                               'squared_diff_generic')
```

Note que se puede poner más de una línea de código en el cuerpo del ciclo.

```
18  squared_diff_super_generic = cp.ElementwiseKernel('X x, Y y',
19                                                     'Z z',
20                                                     'z = (x - y) * (x - y)',
21                                                     'squared_diff_super_generic')
```

Además se pueden poner más tipos de datos genéricos. Solo hay que tener cuidado al momento de usarlos

```
34  #g=squared_diff_super_generic(x, y) #Esto puede causar un problema...
35                                      #Ya que no se conoce el tipo de dato de g
36
37  g = cp.empty((2, 5), dtype=np.float32) #De esta otra forma se puede saber
38  squared_diff_super_generic(x, y,g)     #el tipo de dato de g
```

CUDA-KERNEL DE REDUCCIÓN

- Se define con la clase ***ReductionKernel***
- Consiste en cuatro partes:
  - Expresión de **mapeo**: Utilizado para el pre-procesamiento de cada elemento a reducir
  - Expresión de la **reducción**: Operador para reducir los múltiples valores mapeados. Las variables especiales a y b se usan como operandos
  - **Mapeo posterior** a la reducción: Se utiliza para transformar los valores reducidos resultantes. La variable especial a se utiliza como entrada. La salida debe escribirse en el parámetro de salida.
  - **Valor de indentidad**: Es el valor inicial de la reducción

EJEMPLO: NORMA L2 DE UN ARREGLO A LO LARGO DE UN EJE

```python
import numpy as np
import cupy as cp

l2norm_kernel = cp.ReductionKernel('T x', # Entrada
                                   'T y', # Salida
                                   'x * x', # 1- Mapeo
                                   'a + b', # 2- Reducción
                                   'y = sqrt(a)', # 3- Mapeo posterior
                                   '0', # 4- Valor inicial
                                   'l2norm' # Nombre del Kernel
                                   )

x = cp.arange(10, dtype=np.float32).reshape(2, 5)
y=l2norm_kernel(x, axis=0)

print(x)
print(y)
```

CUDA-KERNEL CRUDO

- Se define con la clase ***RawKernel***
- Con esta clase se puede definir una función Kernel de CUDA desde su código crudo en C
- De esta forma se tiene el control del tamaño de la malla, del bloque, la memoria compartida y el stream

EJEMPLO: SUMA DE VECTORES USANDO CUDA-KERNEL CRUDO

```python
import numpy as np
import cupy as cp

VectorAdd_kernel_cp = cp.RawKernel(r'''
    extern "C" __global__
    void VectorAdd_kernel(const float* x1_d, const float* x2_d, float* y_d) {
        int tid = blockDim.x * blockIdx.x + threadIdx.x;
        y_d[tid] = x1_d[tid] + x2_d[tid];
    }
    ''', 'VectorAdd_kernel')
x1_d = cp.arange(25, dtype=cp.float32).reshape(5, 5)
x2_d = cp.arange(25, dtype=cp.float32).reshape(5, 5)
y_d = cp.zeros((5, 5), dtype=cp.float32)
VectorAdd_kernel_cp((5,), (5,), (x1_d, x2_d, y_d)) # grid, block and arguments
                                                   # Notar que tanto el grid como el block son 1D
print(y_d)
```

CORRESPONDENCIA DE TIPOS DE DATOS

CuPy/NumPy type	Corresponding kernel types	itemsize (bytes)
bool	bool	1
int8	char, signed char	1
int16	short, signed short	2
int32	int, signed int	4
int64	long long, signed long long	8
uint8	unsigned char	1
uint16	unsigned short	2
uint32	unsigned int	4
uint64	unsigned long long	8
float16	half	2
float32	float	4
float64	double	8
complex64	float2, cuFloatComplex, complex<float>	8
complex128	double2, cuDoubleComplex, complex<double>	16

EJEMPO: SUMA Y MULTIPLICACIÓN USANDO UN MODULO

```
1   import numpy as np
2   import cupy as cp
3
4   loaded_from_source = r'''
5   extern "C"{
6       __global__ void test_sum(const float* x1_d, const float* x2_d, float* y_d,unsigned int N){
7           unsigned int tid = blockDim.x * blockIdx.x + threadIdx.x;
8           if (tid < N){
9               y_d[tid] = x1_d[tid] + x2_d[tid];
10          }
11      }
12      __global__ void test_mult(const float* x1_d, const float* x2_d, float* y_d,unsigned int N){
13          unsigned int tid = blockDim.x * blockIdx.x + threadIdx.x;
14          if (tid < N){
15              y_d[tid] = x1_d[tid] * x2_d[tid];
16          }
17      }
18  }'''
```

EJEMPO: SUMA Y MULTIPLICACIÓN USANDO UN MODULO

```
19    module = cp.RawModule(code=loaded_from_source)
20    ker_sum = module.get_function('test_sum')
21    ker_mult = module.get_function('test_mult')
22    N = 10
23    x1_d = cp.arange(N**2, dtype=cp.float32).reshape(N, N)
24    x2_d = cp.ones((N, N), dtype=cp.float32)
25    y_d  = cp.zeros((N, N), dtype=cp.float32)
26    z_d  = cp.zeros((N, N), dtype=cp.float32)
27    ker_sum((N,), (N,), (x1_d, x2_d, y_d, N**2))
28    ker_mult((N,), (N,), (x1_d, x2_d, z_d, N**2))
29    print(y_d)
30    print(z_d)
```

GRACIAS POR SU ATENCIÓN

Francisco J. Hernandez-Lopez

fcoj23@cimat.mx

WebPage:

www.cimat.mx/~fcoj23