Основные алгоритмы и решение СЛАУ на CUDA.

Лекторы:

Боресков А.В. (ВМиК МГУ)

Харламов А.А. (NVidia)

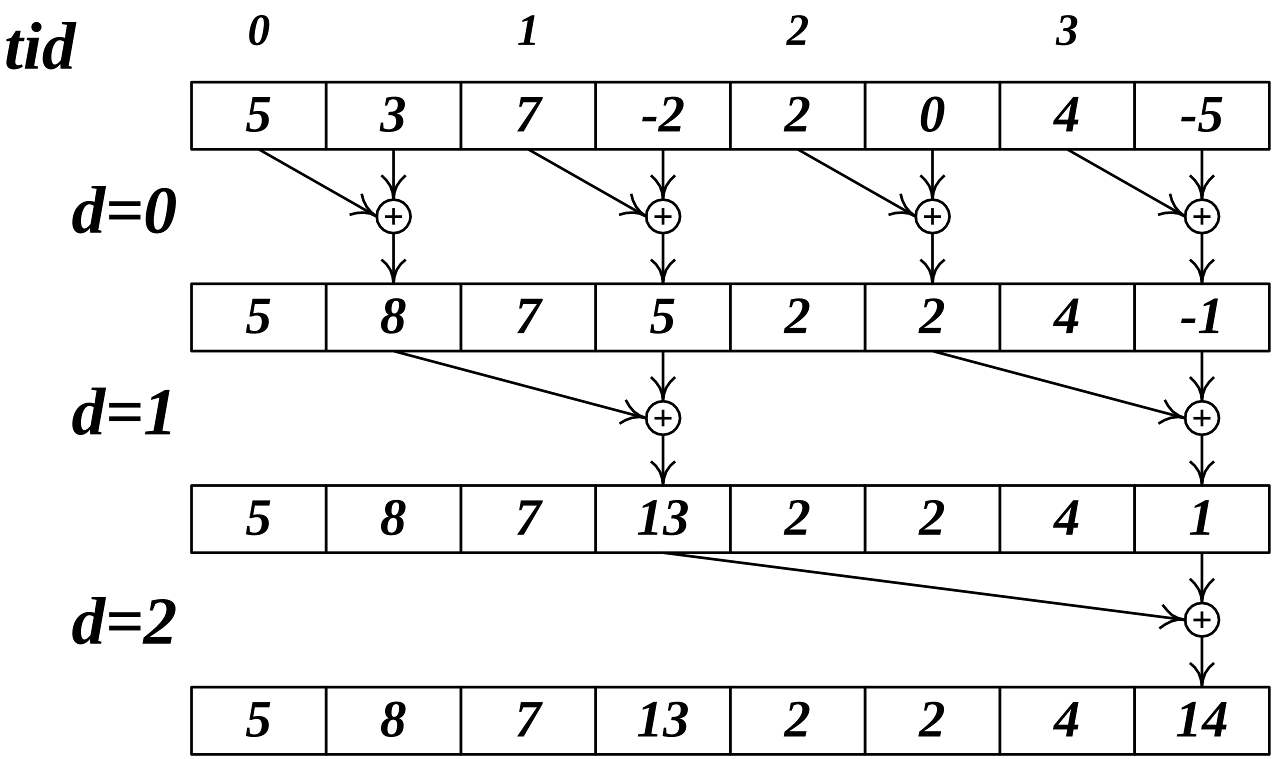
Parallel Prefix Sum (Scan)

- Имеется входной массив и бинарная операция $\{a_0, a_1, \ldots, a_{n-1}\}$
- По нему строится массив следующего вида $\{I, a_0, a_0 \oplus a_1, a_0 \oplus a_1 \oplus a_2, \ldots, a_0 \oplus \ldots \oplus a_{n-2}\}$

Parallel Prefix Sum (Scan)

- Очень легко делается последовательно
- Для распараллеливания используем *sum tree*
- Выполняется в два этапа
  - Строим *sum tree*
  - По *sum tree* получаем результат

Построение sum tree



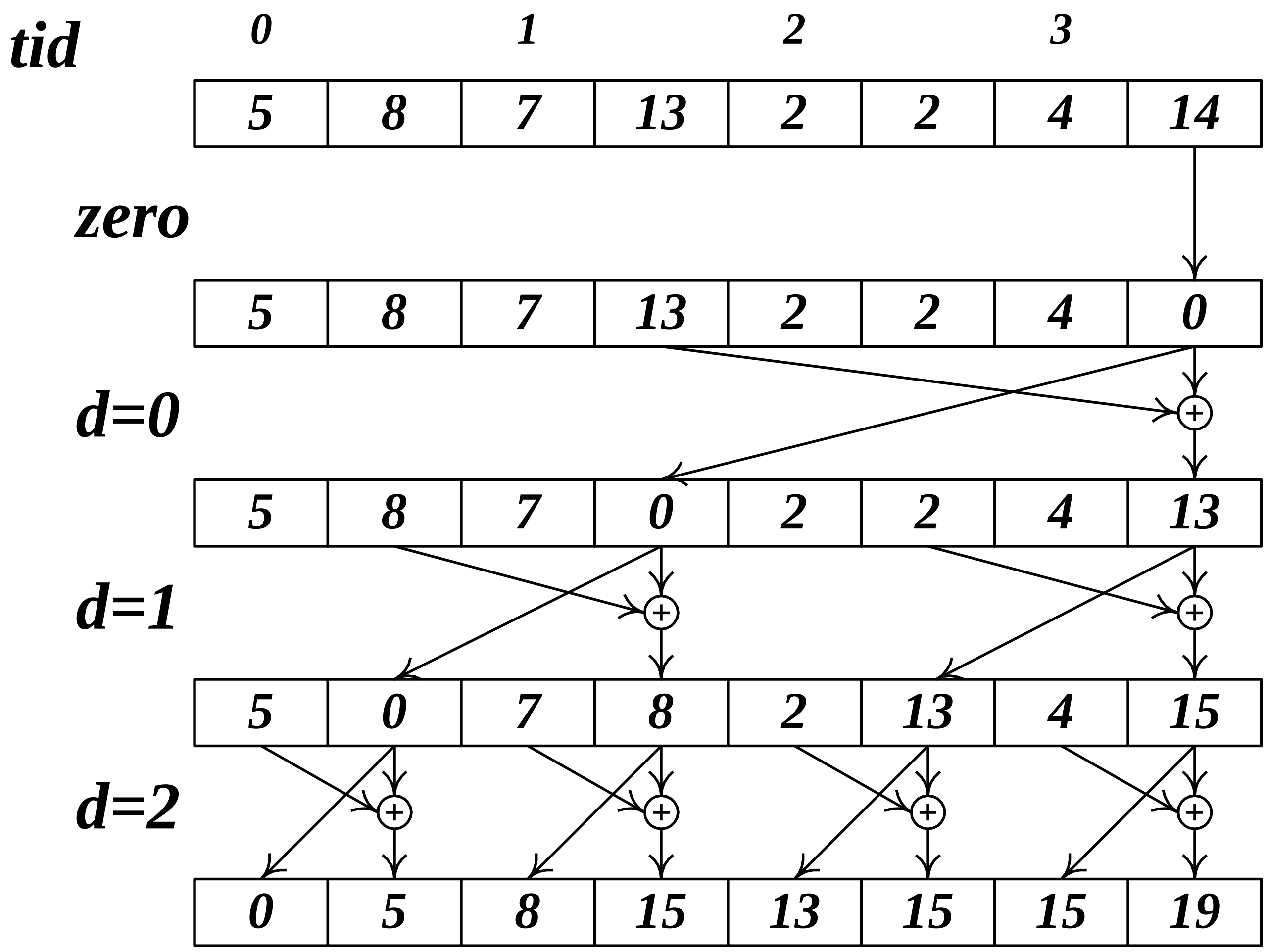
Построение sum tree

- Используем одну нить на 2 элемента массива
- Загружаем данные
- __syncthreads ()
- Выполняем *log(n)* проходов для построения дерева

Построение sum tree

```
#define BLOCK_SIZE 256
__global__ void scan1 ( float * inData, float * outData, int n )
{
    __shared__ float temp [2*BLOCK_SIZE];
    int   tid    = threadIdx.x;
    int   offset = 1;
    temp [tid]             = inData [tid];    // load into shared memory
    temp [tid+BLOCK_SIZE] = inData [tid+BLOCK_SIZE];
    for ( int d = n >> 1; d > 0; d >>= 1 ){
        __syncthreads ();
        if ( tid < d )
        {
            int ai = offset * (2 * tid + 1) - 1;
            int bi = offset * (2 * tid + 2) - 1;
            temp [bi] += temp [ai];
        }
        offset <<= 1;
    }
```

Получение результата по sum tree



Получение результата по sum tree

- Одна нить на 2 элемента массива
- Обнуляем последний элемент
- Copy and increment
- Выполняем *log(n)* проходов для получения результата

Получение результата по sum tree

```
if ( tid == 0 )  temp [n-1] = 0;            // clear the last element
   for ( int d = 1; d < n; d <<= 1 )
   {
       offset >>= 1;
       __syncthreads ();
       if ( tid < d )
       {
           int   ai = offset * (2 * tid + 1) - 1;
           int   bi = offset * (2 * tid + 2) - 1;
           float t  = temp [ai];
           temp [ai]  = temp [bi];
           temp [bi] += t;
       }
   }
   __syncthreads ();
   outData [2*tid]   = temp [2*tid];   // write results
   outData [2*tid+1] = temp [2*tid+1];
```

Scan - Оптимизация

- Возможные проблемы:
  - Доступ к глобальной памяти -> coalesced
  - Branching -> small
  - Конфликты банков -> конфликты до 16 порядка !

Scan - Оптимизация

- Добавим по одному «выравнивающему» элементу на каждые 16 элементов в *shared*-памяти
- К каждому индексу добавим соответствующее смещение

```
#define LOG_NUM_BANKS          4
#define CONLICT_FREE_OFFS(i) ((i) >> LOG_NUM_BANKS)
```

Scan - Оптимизация

```
__shared__ float temp [2*BLOCK_SIZE+CONFLICT_FREE_OFFS(2*BLOCK_SIZE)];

int tid    = threadIdx.x;
int offset = 1;
int ai     = tid
int bi     = tid + (n / 2);
int offsA  = CONFLICT_FREE_OFFS(ai);
int offsB  = CONFLICT_FREE_OFFS(bi);
temp [ai + offsA] = inData [ai + 2*BLOCK_SIZE*blockIdx.x];
temp [bi + offsB] = inData [bi + 2*BLOCK_SIZE*blockIdx.x];
for ( int d = n>>1; d > 0; d >>= 1, offset <<= 1 ) {
  __syncthreads ();
  if ( tid < d ) {
    int ai = offset * (2 * tid + 1) - 1;
    int bi = offset * (2 * tid + 2) - 1;
    ai        += CONFLICT_FREE_OFFS(ai);
    bi        += CONFLICT_FREE_OFFS(bi);
    temp [bi] += temp [ai];
  }
}
```

Scan - Оптимизация

```
if ( tid == 0 ){
  int    i = n - 1 + CONFLICT_FREE_OFFS(n-1);
  sums [blockIdx.x] = temp [i];    // save the sum
  temp [i]          = 0;       // clear the last element
}
for ( int d = 1; d < n; d <<= 1 ) {
  offset >>= 1;
  __syncthreads ();
  if ( tid < d ){
    int ai = offset * (2 * tid + 1) - 1;
    int bi = offset * (2 * tid + 2) - 1;
    float   t;
    ai        += CONFLICT_FREE_OFFS(ai);
    bi        += CONFLICT_FREE_OFFS(bi);
    t          = temp [ai];
    temp [ai]  = temp [bi];
    temp [bi] += t;
  }
}
__syncthreads ();
outData [ai + 2*BLOCK_SIZE*blockIdx.x] = temp [ai + offsA];
outData [bi + 2*BLOCK_SIZE*blockIdx.x] = temp [bi + offsB];
```

Scan больших массивов

- Рассмотренный код хорошо работает для небольших массивов, целиком, помещающихся в *shared*-память
- В общем случае:
  - Выполняем отдельный *scan* для каждого блока
  - Для каждого блока запоминаем сумму элементов (перед обнулением)
  - Применяем scan к массиву сумм
  - К каждому элементу, кроме элементов 1-го блока добавляем значение, соответствующее данному блоку

Scan больших массивов

```
void    scan ( float * inData, float * outData, int n )
{
    int     numBlocks = n / (2*BLOCK_SIZE);
    float * sums, * sums2;

    if ( numBlocks < 1 ) numBlocks = 1;
                                            // allocate sums array
    cudaMalloc ( (void**)&sums,  numBlocks * sizeof ( float ) );
    cudaMalloc ( (void**)&sums2, numBlocks * sizeof ( float ) );

    dim3 threads ( BLOCK_SIZE, 1, 1 ), blocks  ( numBlocks, 1, 1 );
    scan3<<<blocks, threads>>> ( inData, outData, sums, 2*BLOCK_SIZE );

    if ( n >= 2*BLOCK_SIZE )
        scan ( sums, sums2, numBlocks );
    else
        cudaMemcpy ( sums2, sums, numBlocks*sizeof(float),
                     cudaMemcpyDeviceToDevice );

   threads = dim3 ( 2*BLOCK_SIZE, 1, 1 );
   blocks  = dim3 ( numBlocks - 1, 1, 1 );
   scanDistribute<<<blocks,threads>>> ( outData + 2*BLOCK_SIZE, sums2 + 1 );
   cudaFree  ( sums  );
   cudaFree  ( sums2 );
}
```

Построение гистограммы

- Дан массив элементов и способ классификации элементов: каждому элементу сопоставляется один из *k* классов.
- Задача – по массиву получить для каждого класса число элементов, попадающих в него.
- Полученная таблица частот для классов и является гистограммой
- Для Tesla 10

Построение гистограммы

- Очень легко реализуется последовательным кодом
- Если мы выделяем по одной нити на каждый входной элемент, то нужна операция *atomicIncr*
- Очень частые обращения к счетчикам, лучше всего их разместить в *shared*-памяти
- Идеальный случай – у каждой нити своя таблица счетчиков в *shared*-памяти

Построение гистограммы для 64 классов (bins)

- На каждый счетчик отводим 1 байт
- Всего гистограмма – 64 байта (на одну нить)
- Всего в разделяемой памяти SM можно разместить 256 таких гистограмм
- Размер блока – 64 нити, максимум 4 блока на SM
- Каждая нить может обработать не более 255 байт

Построение гистограммы для 64 классов (bins)

- Посмотрим на конфликты банков:
- 64*tid+value
  - bank = ((64*tid+value)/4) & 0xF=(value>>2) & 0xF
  - Номер банка полностью определяется входными данными, если есть много повторений, то будет много конфликтов по банкам
- 64*value+tid
  - bank = ((64*value+tid)/4) & 0xF=(tid>>2) & 0xF
  - Номер банка определяется номером нити

Построение гистограммы для 64 классов (bins)

- В первом случае все определяется входными данными, очень высока вероятность конфликта банков вплоть до 16-го порядка.
- Во втором случае номер банка определяется старшими битами номера нити и мы получаем постоянный конфликт четвертого порядка
- Но зачем в качестве *tid* использовать именно номер нити в блоке – подойдет любое значение, получаемое из номера нити путем фиксированной перестановки битов

Построение гистограммы для 64 классов (bins)

- Номер банка определяется битами 2..5 величины *tid*.
- Построим *tid* как следующую перестановку битов номера нити в блоке:

```
tid=(threadIdx.x>>4) | ((threadIdx.x & 0xF)<<2)
```

- Легко убедиться, что в этом случае конфликта банков не будет вообще

Построение гистограммы для 64 классов (bins)

```
inline __device__ void addByte( uchar * base, uint data )
{
          base[64*data]++;
}
inline __device__ void addWord( uchar * base, uint data )
{
    addByte ( base, (data >>  2) & 0x3FU );
    addByte ( base, (data >> 10) & 0x3FU );
    addByte ( base, (data >> 18) & 0x3FU );
    addByte ( base, (data >> 26) & 0x3FU );
}
__global__ void histogram64Kernel( uint * partialHist, uint * data, uint dataCount )
{
    __shared__ uchar hist [64*64];
    int     tid  = (threadIdx.x >> 4) | ((threadIdx.x & 0x0F) << 2);
    uchar * base = hist + tid;

    for ( int i = 0; i < 64 / 4; i++ )
        ((uint *)hist)[threadIdx.x + i * 64] = 0;

    __syncthreads ();

    for ( uint pos = blockIdx.x*blockDim.x + threadIdx.x; pos < dataCount;
           pos += blockDim.x*gridDim.x )
          addWord ( base, data [pos] );
```

Построение гистограммы

- Более общий случай:
  - Просто не хватит *shared*-памяти давать каждой нити по своей гистограмме
  - Давайте выделять по своей таблице счетчиков на определенный набор нитей

  (+) Уменьшаются затраты на *shared*-память

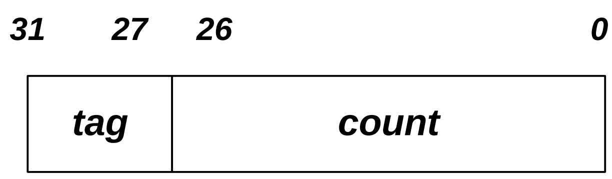
  (–) Появляется проблема синхронизации с записью нитей этого набора

Построение гистограммы

- Когда проще всего обеспечивать атомарность записи:
  - Когда каждый такой набор нитей всегда лежит в пределах одного *warp*'а
  - По-прежнему сохраняется риск нескольких нитей, одновременно увеличивающих один и тот же элемент гистограммы, но с этим можно бороться
  - Если несколько нитей одновременно делают запись по одному адресу, то только одна из этих записей проходит

Построение гистограммы

- Пусть каждый warp нитей имеет свою таблицу счетчиков
  - 192 нити в блоке дают 6 *warp*'ов, т.е. 6*256*4=6Кб *shared*-памяти на блок
  - 5 старших битов каждого счетчика будут хранить номер нити (внутри *warp*'а), сделавшей последнюю запись



Построение гистограммы

```
__device__ inline void addData256 ( volatile unsigned * warpHist, unsigned data,
                                    unsigned threadTag )
{
    unsigned count;

    do
    {
        count = warpHist [data] & 0x07FFFFFFU;    // mask thread tag bits
        count = threadTag | (count + 1);          // increment count and tag it
        warpHist [data] = count;
    }
    while ( warpHist [data] != count );       // check whether we've modified value
}
```

- Каждая нить строит новое значение
  - Увеличить на единицу
  - Выставить старшие биты в номер нити в *warp*'е
- Как минимум одна запись пройдет и соответствующая нить выйдет из цикла

Построение гистограммы

- Каждая нить меняет свой элемент таблицы
  – Сразу же выходим, никаких расходов
- Две нити пытаются увеличить один и тот же счетчик
  – Одной это получится (запишется ее значение)
  – Другой нет – ее значение будет отброшено
- Та нить, которая записала выходит из цикла и оставшаяся нить со делает запись (со второй попытки)

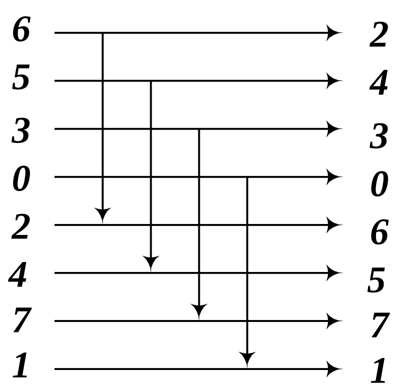
Построение гистограммы

```
#define WARP_LOG2SIZE   5                                   // bits to identify warp
#define WARP_N          6                                   // warps per block
__global__ void histogramKernel ( unsigned * result, unsigned * data, int n )
{
    int      globalTid  = blockIdx.x *  blockDim.x + threadIdx.x;
    int      numThreads = blockDim.x * gridDim.x;
    int      warpBase   = (threadIdx.x >> WARP_LOG2SIZE) * BIN_COUNT;
    unsigned threadTag  = threadIdx.x << (32 - WARP_LOG2SIZE);

    volatile __shared__ unsigned hist [BLOCK_MEMORY];

    for ( int i = threadIdx.x; i < BLOCK_MEMORY; i += blockDim.x )
       hist [i] = 0;

    __syncthreads ();
    for ( int i = globalTid; i < n; i += numThreads ) {
        unsigned data4 = data [i];

        addData256 ( hist + warpBase, (data4 >>  0) & 0xFFU, threadTag );
        addData256 ( hist + warpBase, (data4 >>  8) & 0xFFU, threadTag );
        addData256 ( hist + warpBase, (data4 >> 16) & 0xFFU, threadTag );
        addData256 ( hist + warpBase, (data4 >> 24) & 0xFFU, threadTag );
    }
    __syncthreads();

    for ( int i = threadIdx.x; i < BIN_COUNT; i += blockDim.x ){
        unsigned sum = 0;

        for ( int base = 0; base < BLOCK_MEMORY; base += BIN_COUNT )
            sum += hist [base + i] & 0x07FFFFFFU;

        result[blockIdx.x * BIN_COUNT + i] = sum;
    }
}
```

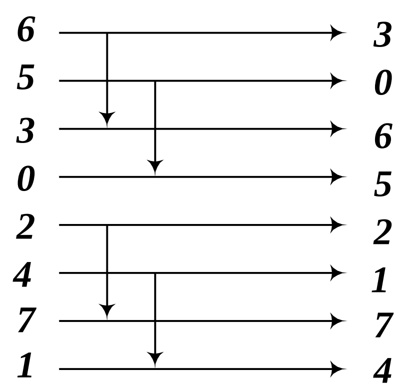
Сортировка. Битоническая сортировка

- Базовая операция – полуочиститель, упорядочивающий пары элементов на заданном расстоянии:

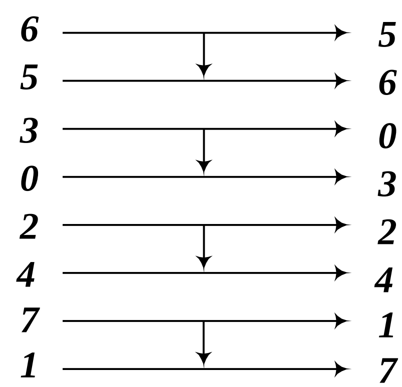
$$B_n : \left(x_k, x_{k+n/2}\right) \to \left(\min, \max\right)$$



B_8



B_4



B_2

Битоническая сортировка

- Последовательность называется битонической, если она
  - Состоит из двух монотонных частей
  - Получается из двух монотонных частей циклическим сдвигом
- Примеры:
  - 1,3,4,7,6,5,2
  - 5,7,6,4,2,1,3 (получена сдвигом 1,3,5,7,6,4,2)

Битоническая сортировка

- Если к битонической последовательности из *n* элементов применить полуочиститель *Bn*, то в результате у полеченной последовательности
  - Обе половины будут битоническими
  - Любой элемент первой половины будет не больше любого элемента второй половины
  - Хотя бы одна из половин будет монотонной

Битоническая сортировка

Если к битонической последовательности длины *n* применить получистители $B_n, B_{n/2}, \ldots, B_8, B_4, B_2$

то в результате мы получим отсортированную последовательность (битоническое слияние)!

Если у нас произвольная последовательность:

- Применим B2 с чередующимся порядком, в результате каждые 4 подряд идущих элемента будут образовывать битоническую последовательность
- При помощи битонического слияния отсортируем каждую пару последовательностей из 4-элементов, но с чередующимся порядком упорядочивания.
- При помощи битонического слияния отсортируем каждую пару из 8 элементов

Битоническая сортировка

Пусть есть произвольная последовательность длины n . Применим к каждой паре элементов полуочиститель B_2 с чередующимся порядком сортировки.

Тогда каждая четверка элементов будет образовывать битоническую последовательность.

$$a_0 \quad a_1 \quad a_2 \quad a_3 \quad a_4 \quad a_5 \quad a_6 \quad a_7$$

Битоническая сортировка

Применим к каждой такой четверке элементов полуочиститель B_4 с чередующимся порядком сортировки.

Тогда каждые восемь элементов будет образовывать битоническую последовательность.

Применим к каждым 8 элементам полуочиститель B_4 с чередующимся порядком сортировки и так далее.

Всего потребуется $log(n)*log(n)$

Битоническая сортировка

- Очень хорошо работает для сортировки через шейдеры
- Плохо использует возможности CUDA, поэтому обычно не используется для сортировки больших массивов

Поразрядная сортировка (radix sort)

Пусть задан массив из 32-битовых целых чисел: $\{a_0, a_1, \ldots, a_{n-1}\}$

Отсортируем этот массив по старшему (31-му) биту, затем по 30-му биту и т.д.

После того, как мы дойдем до 0-го бита и отсортируем по нему, последовательность будет отсортирована

Поразрядная сортировка

- Поскольку бит может принимать только два значения, то сортировка по одному биту заключается в разделении всех элементов на два набора где
- Соответствующий бит равен нулю
- Соответствующий бит равен единице

Поразрядная сортировка

Пусть нам надо отсортировать массив по *k*-му биту.

Тогда рассмотрим массив, где из каждого элемента взят данный бит (*b[i]=(a[i] >> k) & 1*).

Каждый элемент этого массива равен или нулю или единице. Применим к нему операцию *scan*, сохранив при этом общую сумму элементов

b:	0	1	1	0	1	0	0	1	1	0	1	
s:	0	0	1	2	2	3	3	3	4	5	5	,6

Поразрядная сортировка

- В результате мы получим сумму всех выбранных бит (т.е.число элементов исходного массива, где в рассматриваемой позиции стоит единичный бит) и массив частичных сумм битов s_n
- Отсюда легко находится количество элементов исходного массива, где в рассматриваемой позиции стоит ноль (*Nz*).
- По этим данным легко посчитать новые позиции для элементов массива:

Поразрядная сортировка

- По этим данным легко посчитать новые позиции для элементов массива:

$$a_i \,\&\, bit = 0 \Rightarrow a_i \to i - s_i$$

$$a_i \,\&\, bit \neq 0 \Rightarrow a_i \to N_z + s_i$$

$$bit = 1 << k$$

Поразрядная сортировка - float

Поразрядная сортировка легко адаптируется для *floating point*-величин.

Положительные значения можно непосредственно сортировать

Отрицательные значения при поразрядной сортировке будут отсортированы в обратном порядке

31	30 … 23	22 … 0
S	exp	mantissa

$$f = (-1)^S \cdot 2^{\exp - 127} \cdot 1.mantissa$$

Поразрядная сортировка - float

Чтобы сортировать значения разных знаков достаточно произвести небольшое преобразование их тип *uint*, приводимое ниже

```
uint flipFloat ( uint f )
{
    uint mask = -int(f >> 31) | 0x80000000;

    return f ^ mask;
}

uint unflipFloat ( uint f )
{
    uint mask = ((f >> 31) - 1) | 0x80000000;

    return f ^ mask;
}
```

Распараллеливание прогонки

- Типичная последовательно-решаемая задача
- Сперва обнуляем нижнюю диагональ, потом – верхнюю
- Всего *2*n* шагов

Распараллеливание прогонки

$$A=\begin{pmatrix} b_1 & c_1 & 0 & \dots & \dots & \dots & 0 \\ a_2 & b_2 & c_2 & 0 & \dots & \dots & 0 \\ 0 & a_3 & b_3 & c_3 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & a_4 & b_4 & c_4 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & 0 & a_{n-1} & b_{n-1} & c_{n-1} \\ 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & a_n & b_n \end{pmatrix}$$

Распараллеливание прогонки

- Возьмем первые два уравнения

$$b_0 x_0 + c_0 x_1 = f_0$$

$$a_1 x_0 + b_1 x_1 + c_1 x_2 = f_2$$

- Из первого вычтем второе с коэффициентом k_0

$$k_0 = \frac{c_0}{b_1}$$

- Получили уравнение, где участвуют только четные *x*

$$b_0' x_0 + c_0' x_2 = f_0'$$

Распараллеливание прогонки

Возьмем три подряд идущих уравнения с номерами *i-1*, *i*, *i+1* (считаем, что *i* - четное)

Видно, что можно из i-го уравнения убрать x_{i-1} и x_{i+1}, но при в нем этом появятся x_{i-2} и x_{i+2}

$$a_{i-1}x_{i-2} + b_{i-1}x_{x-1} + c_{i-1}x_i = f_{i-1}$$

$$a_i x_{i-1} + b_i x_i + c_i x_{i+1} = f_i$$

$$a_{i+1}x_i + b_{i+1}x_{i+1} + c_{i+1}x_{i+2} = f_{i+1}$$

Распараллеливание прогонки

- Тем самым можно так преобразовать систему, что в уравнения с четными номерами будут входить неизвестные тоже только с четными номерами
- Тем самым можно выделить подсистему размером $n/2$ с $n/2$ неизвестными

Cyclic Reduction (CR)

- Решив полученную систему меньшего размера можно легко восстановить неизвестные с нечетными номерами
- Сперва на каждом шаге выделяем систему вдвое меньшего размера, пока не придем к легко решаемой системе (2*2)
- Затем идем обратно и восстанавливаем оставшиеся неизвестные

Cyclic Reduction (CR)

- Всего потребуется $2\log_2 n-1$ шагов
- Общее число операций *17n* (в классической прогонке *8n*)
- Однако нагрузка неравномерно распределена между шагами – на каждом шаге уменьшения размера системы количество работающих нитей уменьшается вдвое

Parallel Cyclic Reduction (PCR)

- Легко можно заметить, что из исходной системы можно также получить систему для неизвестных с нечетными номерами
- Сведем исходную систему к двум системам половинного размера
- Всего потребуется $log_2 n$ шагов
- Общее число операций $12n\ log_2 n$

Решение системы линейных алгебраических уравнений

- Традиционные методы ориентированы на последовательное вычисление элементов и нам не подходят
- Есть еще итеративные методы

$Ax=f$,

A – матрица размера N*N,

f – вектор размера N

Итеративные методы

$$x^{k+1} - x^k = \alpha \cdot \left(A \cdot x^k - f \right)$$

- Эффективны когда
  - Матрица *A* сильна разрежена
  - Параллельные вычисления
- В обоих случаях цена (по времени) одной итерации *O(N)*

Сходимость

$$Ax^* = f,$$

$$d^{k+1} = x^{k+1} - x^*,$$

$$d^{k+1} = (E + \alpha A)d^k,$$

$$\left\|d^{k+1}\right\| \le \left\|E + \alpha A\right\| \cdot \left\|d^k\right\|,$$

$$\left\|E + \alpha A\right\| < 1$$

- **Если есть сходимость, то только к решению системы**
- **Записав уравнения для погрешности получаем достаточное условие сходимости**
- **За счет выбора достаточно малого значения параметра получаем сходимость**

Код на CUDA

```
//
// one iteration
//
__global__ void kernel ( float * a, float * f, float alpha,
                         float * x0, float * x1, int n )
{
  int   idx = blockIdx.x * blockDim.x + threadId.x;
  int   ia  = n * idx;
  float sum = 0.0f;

  for ( int i = 0; i < n; i++ )
    sum += a [ia + i] * x0 [i];

  x1 [idx] = x0 [idx] + alpha * (sum - f [idx] );
}
```

Метод Якоби

Сведем систему к следующему виду: $x = Bx + g$

- Введем матрицу *D*, построенную из диагональных элементов матрицы *A*
- По ней построим матрицу *B* и вектор *g*

$$B = E - D^{-1}A = D^{-1}(D - A)$$

$$g = D^{-1}f$$

Метод Якоби

Итерационная формула имеет следующий вид:

$$x^{k+1} = Bx^k + g$$

Ресурсы нашего курса

- Steps3d.Narod.Ru
- Google Site CUDA.CS.MSU.SU
- Google Group CUDA.CS.MSU.SU
- Google Mail CS.MSU.SU
- Google SVN
- Tesla.Parallel.Ru
- Twirpx.Com
- Nvidia.Ru