

Основные алгоритмы и решение СЛАУ на CUDA.

Лектор:

[Боресков А.В. \(ВМК МГУ\)](mailto:steps3d@narod.ru), steps3d@narod.ru

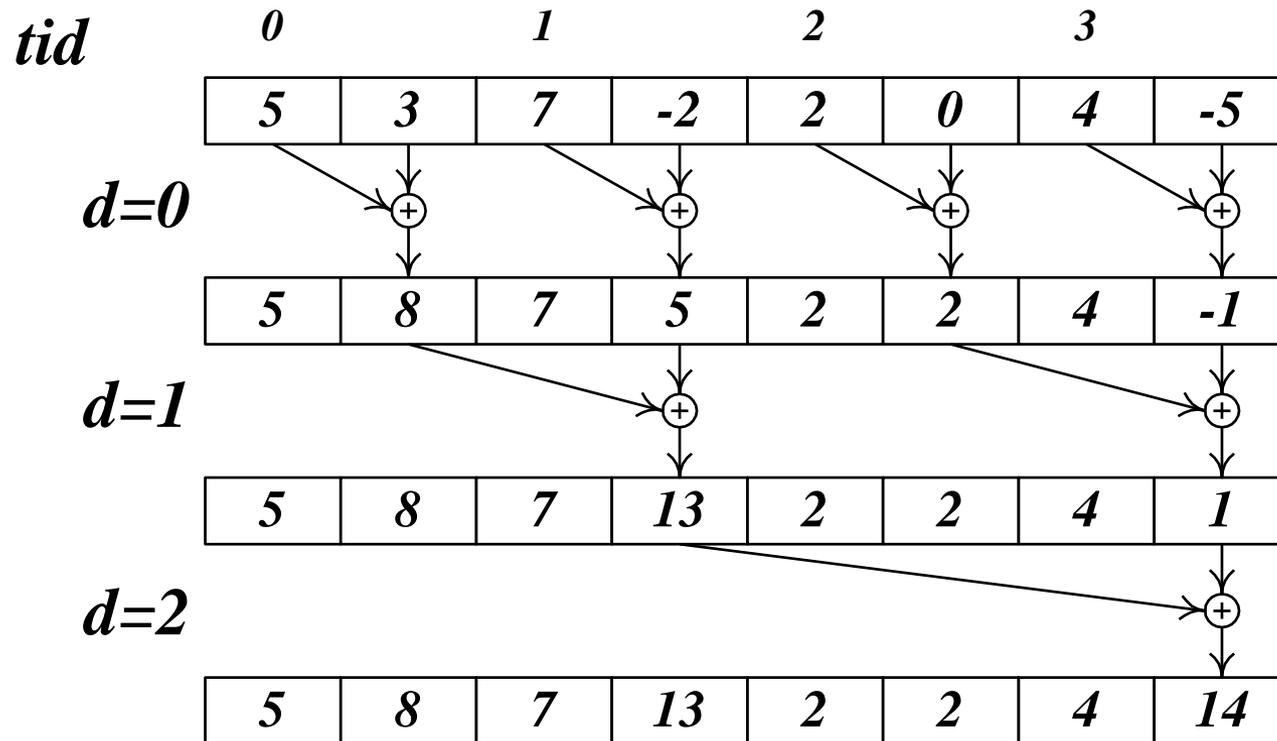
Parallel Prefix Sum (Scan)

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

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

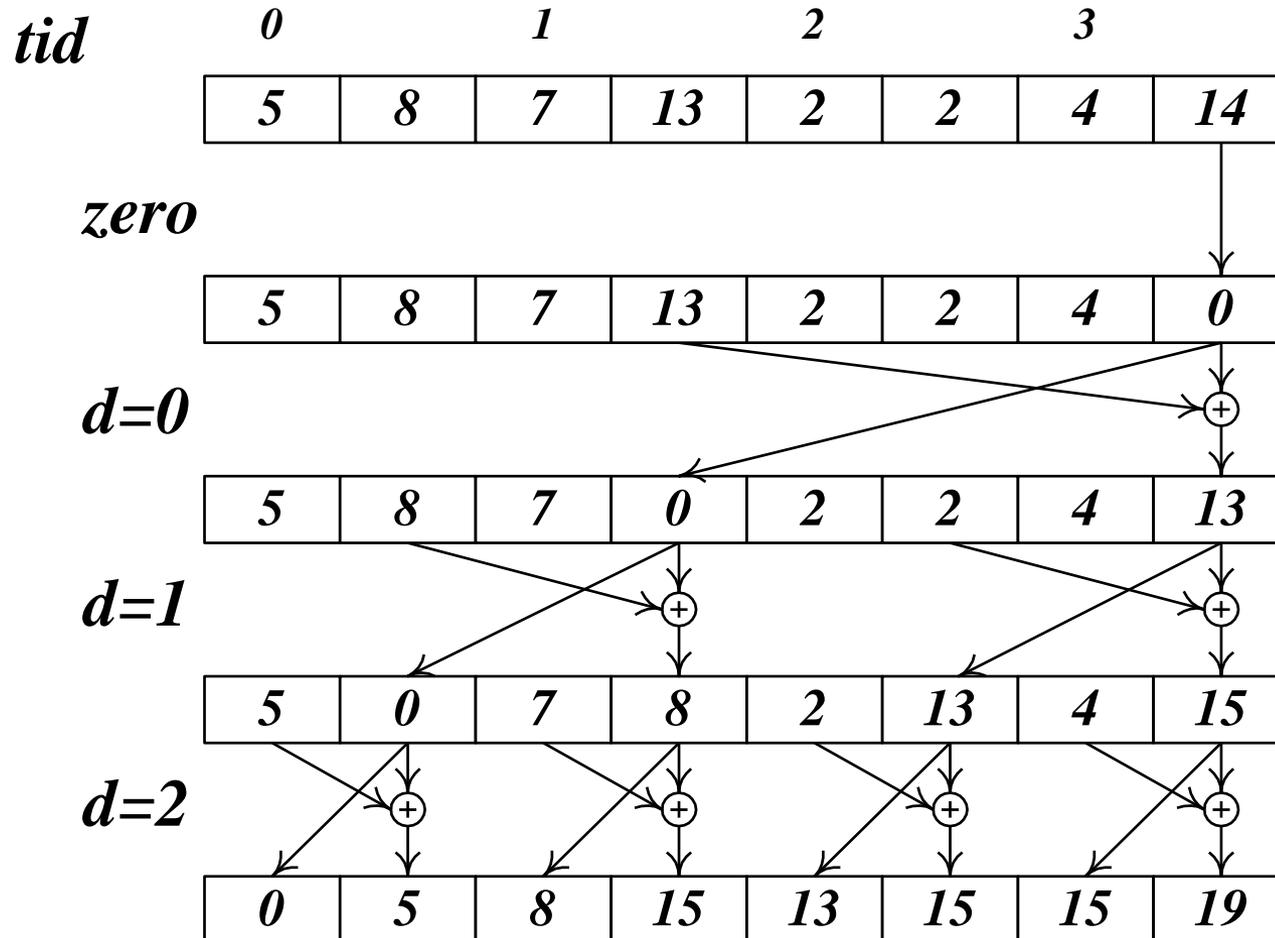
Построение sum tree

```
#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 CONFLICT_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

- 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'a*
 - 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

```
__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 *warpId*
- 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;

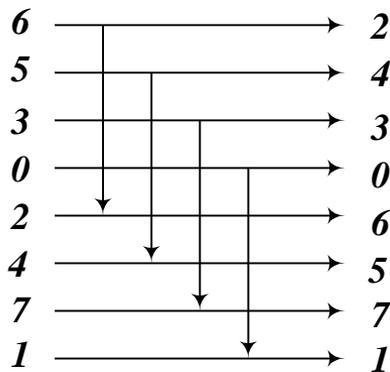
        for ( int base = 0; base < BLOCK_MEMORY; base += BIN_COUNT )
            sum += hist [base + i] & 0x07FFFFFFU;

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

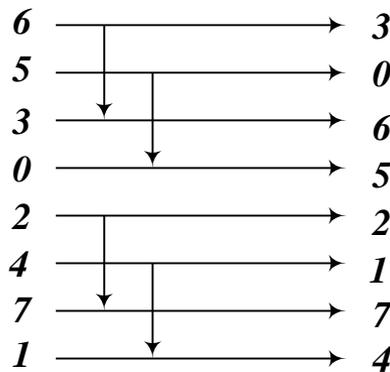
Сортировка. Битоническая сортировка

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

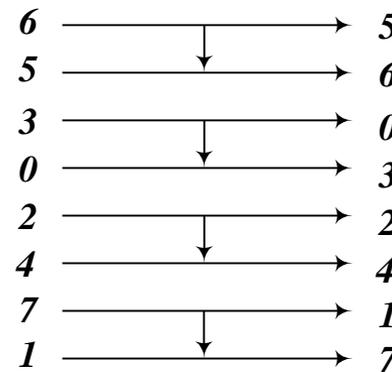
$$B_n : (x_k, x_{k+n/2}) \rightarrow (\min, \max)$$



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 полученной 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 $B_n, B_{n/2}, \dots, B_8, B_4, B_2$

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

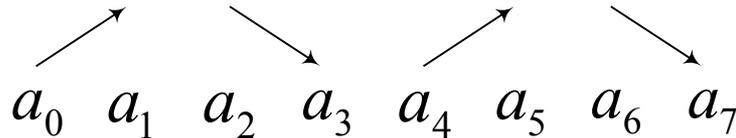
Если у нас произвольная последовательность:

- ⌘ Применим B_2 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.



Битоническая сортировка

Применим к каждой такой четверке элементов полуочиститель $B4$ с чередующимся порядком сортировки.

Тогда каждые восемь элементов будет образовывать битоническую последовательность.

Применим к каждому 8 элементам полуочиститель $B4$ с чередующимся порядком сортировки и так далее.

Всего потребуется $\log(n)*\log(n)$ проходов для полной сортировки массива

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:

$$\{a_0, a_1, \dots, a_{n-1}\}$$

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 ($b[i] = (a[i] \gg k) \& 1$).

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:

$$a_i \& bit = 0 \Rightarrow a_i \rightarrow i - s_i$$

$$a_i \& bit \neq 0 \Rightarrow a_i \rightarrow N_z + s_i$$

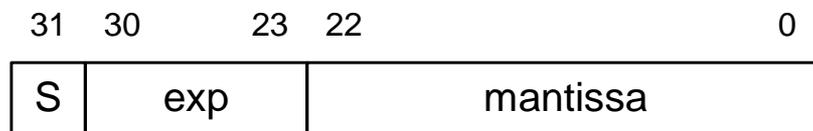
$$bit = 1 \ll k$$

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



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

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
- Из первого вычтем второе с коэффициентом k_0
- Получили уравнение, где участвуют только четные x

$$b_0x_0 + c_0x_1 = f_0$$

$$a_1x_0 + b_1x_1 + c_1x_2 = f_2$$

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

$$b'_0x_0 + c'_0x_2 = f'_0$$

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 этом в нем появятся x_{i-2} и x_{i+2}

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

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

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

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

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

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

Сходимость

$$Ax^* = f,$$

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

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

$$\|d^{k+1}\| \leq \|E + \alpha A\| \cdot \|d^k\|,$$

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

- **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 + threadIdx.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](#)