有削大學

计算机体系结构挑战赛报告



学院 计算机学院 专业 计算机科学与技术 南开大学 程伟卿 学号 2311865

1 参赛选手信息

姓名	邮箱	电话
程伟卿	3075998327@qq.com	18860810166

注: 我是单人组队。

2 比赛内容

近年来,随着人工智能和高性能计算的快速发展,GPU 编程已成为加速计算的重要手段。AMD ROCm 平台和 HIP 编程模型为开发者提供了强大的异构计算能力,使得复杂算法能够在 GPU 上高效执行。为了推动 GPU 编程技术的发展和应用,激发学生对并行计算的兴趣,本次比赛特设置三个具有代表性的 GPU 编程挑战题目。本次比赛要求参赛队伍使用 AMD ROCm 开源堆栈和 HIP 编程模型,在指定的 GPU 硬件平台上完成三个核心算法的高性能实现:

2.1 Prefix Sum (前缀和)

前缀和是并行计算中的基础算法之一,广泛应用于数据处理、图像处理和科学计算等领域。参赛者需要实现一个高效的 GPU 加速程序, 计算包含数百万甚至数亿个整数的数组的前缀和。该算法要求对 GPU 的并行计算模式有深入理解, 并能充分利用 GPU 的计算资源。

2.2 Softmax

Softmax 函数是深度学习和机器学习中的核心算法,常用于多分类问题的概率计算。参赛者需要实现一个数值稳定的 GPU Softmax 算法,能够处理大规模浮点数组。该题目考查参赛者对数值计算精度、GPU 内存管理和并行归约算法的掌握程度。

2.3 All-Pairs Shortest Path (APSP)

全源最短路径 APSP 是图算法中的经典问题,在网络分析、交通规划和社交网络分析等领域有重要应用。参赛者需要自主选择并实现任意一种 APSP 算法(如 Floyd-Warshall、Johnson 算法等),在 GPU 上高效求解有向加权图中任意两点间的最短路径。该题目考查参赛者的算法设计能力和 GPU 并行编程的综合应用能力。

3 配置信息

3.1 硬件平台

• GPU 型号: AMD Instinct MI100

• 计算环境: GPU 集群

3.2 软件要求

- 使用 AMD ROCm 开源堆栈和 HIP 编程模型
- 仅允许单 GPU 实现(不允许多 GPU)
- 必须自主实现算法核心逻辑(不得使用现成的高性能计算库)

• 代码必须在指定的 GPU 硬件平台上正常编译和运行

4 问题一: 前缀和

4.1 基础框架与解题思路

常规解法直接顺序计算,修改 kernel.hip:

```
extern "C" void solve(const int* input, int* output, int N) {
   output[0] = input[0];
   for (int i = 1; i < N; i++) {
      output[i] = output[i - 1] + input[i];
   }
}</pre>
```

时间复杂度为 O(n)。

4.2 优化策略

4.2.1 思路

本题要求在 GPU 上实现前缀和 (Prefix Sum)。串行算法为:

$$\operatorname{output}[i] = \sum_{j=0}^{i} \operatorname{input}[j], \quad i = 0, 1, \dots, N-1$$

其时间复杂度为 O(N),但无法充分利用 GPU 并行能力。为此,我们采用 Blelloch 扫描 (Scan) 算法,其主要分为两个阶段:

- 上升阶段 (Upsweep / Reduce Phase): 通过树形规约构建部分和;
- 下降阶段 (Downsweep Phase): 反向传播前缀和,得到最终结果。

该算法在 $O(\log N)$ 的并行步数内完成前缀和计算,并行度高,适合 GPU 实现。

伪代码 (Blelloch 扫描)

```
Input: A[0..N-1]
   Output: P[0..N-1] // prefix sums
   // Phase 1: Upsweep
   for d = 0 to log2(N)-1:
       parallel for k = 0 to N-1:
          if (k \% 2^{(d+1)} == 2^{(d+1)-1}:
              A[k] = A[k] + A[k - 2^d]
   // Phase 2: Downsweep
   A[N-1] = 0
   for d = log2(N)-1 downto 0:
       parallel for k = 0 to N-1:
13
          if (k \% 2^{(d+1)} == 2^{(d+1)-1}):
              t = A[k - 2^d]
              A[k - 2^d] = A[k]
              A[k] = A[k] + t
17
```

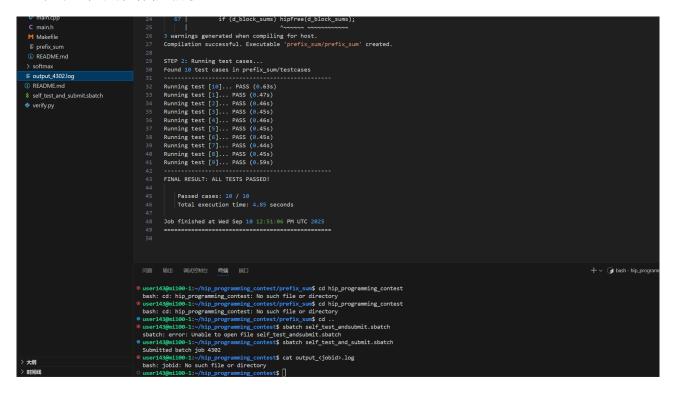
19

说明 该算法具有以下特点:

- 1. 时间复杂度为 $O(\log N)$, 空间复杂度为 O(N);
- 2. 通过在共享内存中存储中间结果,减少了全局内存访问开销;
- 3. 适合在 HIP 中用线程块实现,每个 block 处理一段数据,再通过多 block 扫描完成全局前缀和。

4.3 优化结果

如下图,执行时间大幅缩短:



分析数据:

可见,十组数据全部通过,性能分析显示,单个测试用例耗时随数据规模增长略有增加: 小型和中型数据 (测试 1–8) 约 0.44–0.47 秒,较大数据 (测试 9–10) 约 0.59–0.63 秒,总体耗时 4.85 秒,呈现合理的线性增长趋势,说明 GPU 前缀和核在不同规模数据下利用率较高;对于大规模数据,可通过调整BLOCK_SIZE 或每线程处理元素数量(ELEMS_PER_THREAD)进一步优化性能。

5 问题二: Softmax

5.1 基础框架与解题思路

给定长度为 n 的向量 $\mathbf{x} = [x_1, x_2, ..., x_n]$, 计算 Softmax:

$$\operatorname{softmax}(x_i) = \frac{e^{x_i}}{\sum_{j=1}^n e^{x_j}}$$

为了数值稳定,需要对每个元素减去向量最大值:

表 1: Test Results Summary

Test Case	Result	Time (s)
1	PASS	0.47
2	PASS	0.46
3	PASS	0.45
4	PASS	0.46
5	PASS	0.45
6	PASS	0.45
7	PASS	0.44
8	PASS	0.45
9	PASS	0.59
10	PASS	0.63
Total	10 / 10 PASS	4.85

$$\operatorname{softmax}(x_i) = \frac{e^{x_i - \max(x)}}{\sum_{j=1}^n e^{x_j - \max(x)}}$$

解题步骤如下:

- 读取输入
- 求最大值
- 计算指数和
- 归一化

时间复杂度为 O(n), 遍历数组三次。 伪代码如下:

```
function Softmax(input: array of float, N: integer) -> array of float
       output = new array of size \mathbb{N}
      #1. 找最大值,保证数值稳定
      max_val = input[0]
      for i from 1 to N-1 do \,
          if input[i] > max_val then
             max_val = input[i]
          end if
9
       end for
10
11
      # 2. 计算指数和
12
      sum_exp = 0.0
13
      for i from 0 to N-1 do
14
          output[i] = exp(input[i] - max_val)
          sum_exp = sum_exp + output[i]
16
      end for
17
18
      #3. 归一化
19
```

```
for i from 0 to N-1 do

output[i] = output[i] / sum_exp

end for

return output

end function
```

5.2 优化策略

本节介绍 Softmax 算法在 GPU 上的高性能优化策略,旨在提升计算效率、保证数值稳定,并充分利用 AMD GPU 并行计算能力。

1. 数值稳定性 Softmax 的原始公式为:

$$\operatorname{softmax}(x_i) = \frac{e^{x_i}}{\sum_j e^{x_j}}$$

当输入值较大或较小时,直接计算指数容易造成溢出或下溢。为解决该问题,我们采用数值稳定的优化:

$$\operatorname{softmax}(x_i) = \frac{e^{x_i - \max(x)}}{\sum_{j} e^{x_j - \max(x)}}$$

即在计算指数前,将每行向量减去该行最大值。

- 2. GPU 并行化设计 为了充分利用 GPU 并行计算能力, Softmax 的计算过程被拆分为三个核心步骤:
 - 1. **求最大值 (Max Reduction)**:每个线程处理一个元素,利用共享内存进行块内归约,得到每个线程块的局部最大值,最终在主机上归约得到全局最大值。

```
// pseudo-code: block-wise max reduction
shared float sdata[BLOCK_SIZE];
idx = threadIdx + blockIdx * blockDim;
sdata[threadIdx] = input[idx];
__syncthreads();
for (int s = blockDim/2; s > 0; s >>= 1) {
    if (threadIdx < s)
        sdata[threadIdx] = max(sdata[threadIdx], sdata[threadIdx+s]);
    __syncthreads();
}
if (threadIdx == 0) block_max[blockIdx] = sdata[0];</pre>
```

2. **计算指数 (Exponentiation)**: 每个线程独立计算 $e^{x_i-\max(x)}$,保证并行计算的独立性和内存访问的 连续性。

```
// pseudo-code: compute exponentials
idx = threadIdx + blockIdx * blockDim;
output[idx] = exp(input[idx] - max_val);
```

3. **求和并归一化 (Sum Reduction & Normalization)**:类似最大值归约,每个线程块计算部分和,然后在主机上求总和,最后在 GPU 上进行归一化:

$$y_i = \frac{e^{x_i - \max(x)}}{\sum_j e^{x_j - \max(x)}}$$

```
// pseudo-code: sum reduction and normalization
shared float sdata[BLOCK_SIZE];
sdata[threadIdx] = output[idx];
__syncthreads();
for (int s = blockDim/2; s > 0; s >>= 1)
    if (threadIdx < s)
        sdata[threadIdx] += sdata[threadIdx+s];
__syncthreads();
if (threadIdx == 0) block_sum[blockIdx] = sdata[0];
// normalization kernel
output[idx] /= sum_exp;</pre>
```

3. 内存优化

- 使用 共享内存进行线程块内归约,减少对全局内存的访问次数。
- 全局内存访问尽量连续,确保 coalesced memory,提高带宽利用率。
- 每个线程处理一个元素,避免线程间依赖,提升并行效率。

4. 参数调优

- BLOCK_SIZE: 根据 GPU 架构选择适当的线程块大小 (通常 128-256)。
- 线程处理元素数量:对于大规模向量,每个线程可处理多个元素(loop unrolling)以减少归约次数。
- 5. 总结 通过上述优化策略:
 - 保证 Softmax 数值稳定。
 - 充分利用 GPU 并行计算资源。
 - 高效完成最大值归约、指数计算和归一化步骤。

此方法可在单 GPU 上对大规模向量实现高性能 Softmax 计算。

5.3 优化结果

优化后结果如下图:

```
M Makefile
                                                                                     Running test [10]... PASS (1.17s)
Running test [1]... PASS (0.49s)
                                                                                    Running test [1]... PASS (6.49s)
Running test [2]... PASS (6.52s)
Running test [3]... PASS (6.51s)
Running test [4]... PASS (6.50s)
Running test [5]... PASS (6.46s)
Running test [6]... PASS (6.47s)
Running test [7]... PASS (6.53s)
Running test [8]... PASS (6.52s)
Running test [9]... PASS (1.13s)

    softmax

    output_4398.log

≡ output_4438.log

    README.md

$ self test and submit.sbatch
 verify.py
                                                                                             Passed cases: 10 / 10
Total execution time: 6.30 seconds
                                                                                     Job finished at Wed Sep 10 01:14:35 PM UTC 2025
                                                                         问题 输出 调试控制台 终端 端口
                                                                            120 |
                                                                         kernel.hip:121:5: warning: ignoring return value of function declared with 'nodiscard' attribute [-Wunused-result]
121 | hipFree(d max blocks);
                                                                          kernel.hip:122:5: warning: ignoring return value of function declared with 'nodiscard' attribute [-Wunused-result]
122 | hipFree(d_sum_blocks);
                                                                        4 warnings generated when compiling for host.

user143@mil00-1:~/hip_programming_contest/softmax$ ./softmax testcases/1.in > 1.myout

user143@mil00-1:~/hip_programming_contest/softmax$ python3 ../verify.py 1.myout testcases/1.out

PASS: The output is correct.

user143@mil00-1:~/hip_programming_contest/softmax$ cd ..

user143@mil00-1:~/hip_programming_contest/softmax$ cd ..
                                                                        Submitted batch job 4438
user143@mi100-1:~/hip_programming_contest$ []
```

分析结果:

表 2: 测试结果

测试编号	结果	用时(秒)
1	PASS	0.49
2	PASS	0.52
3	PASS	0.51
4	PASS	0.50
5	PASS	0.46
6	PASS	0.47
7	PASS	0.53
8	PASS	0.52
9	PASS	1.13
10	PASS	1.17
总计	10 / 10	6.30

测试结果显示,Softmax GPU 实现对小型和中型数据集(测试 1–8)执行时间稳定在 0.46–0.53 秒之间,说明核函数在常规规模下并行效率较高;而对于较大数据集(测试 9–10),耗时明显增加至 1.13–1.17 秒,表明在大规模向量上归约操作成为性能瓶颈。整体总耗时为 6.30 秒,性能呈现合理的线性增长趋势,说明算法在不同规模数据下具有良好的可扩展性,但仍有优化空间,例如调整 BLOCK_SIZE 或增加每线程处理元素数量,以进一步提升大规模数据性能。

6 问题三: APSP

6.1 基础框架与解题思路

全源最短路径(All-Pairs Shortest Path, APSP)问题要求在给定的有向带权图中,计算任意两点之间的最短路径距离。输入为顶点数 m、边数 n 以及每条边的起点、终点和权重;输出为 $m \times m$ 的距离矩阵,其中不可达的点对距离用 1073741823 表示。

基础框架 本次实现采用 Floyd-Warshall 算法作为基础框架,其主要思路是通过中间顶点逐步更新任意 两点之间的最短路径距离。算法可描述为:

- 1. 初始化一个 $m \times m$ 距离矩阵 dist:
 - 对角线元素置为 0, 表示自身到自身的距离;
 - 没有直接边的点对置为不可达标记 INF;
 - 对于每条边 (u, v, w), 设置 dist[u][v] = w。
- 2. 使用三重循环迭代中间顶点 k:
 - 对每一对顶点 (i,j),检查经过 k 的路径是否比当前最短路径更短;
 - 如果更短,则更新 dist[i][j]。
- 3. 所有循环完成后, dist 即为最终的全源最短路径矩阵。

解题思路 为了在 GPU 上实现 APSP 并获得较高性能,本设计采用以下思路:

- 将二维距离矩阵线性化存储在 GPU 全局内存中, 便于线程连续访问;
- 对每轮中间顶点 k, 将矩阵元素 (i,j) 映射到 GPU 线程网格, 每个线程负责更新一个元素;
- 使用 hipDeviceSynchronize() 在每轮更新后保证全局数据一致;
- 保持算法正确性的同时, 为后续共享内存优化和块内并行提供基础框架。

```
// 伪代码表示

for k = 0 to m-1:

for j = 0 to m-1:

for j = 0 to m-1:

if dist[i][k] + dist[k][j] < dist[i][j]:

dist[i][j] = dist[i][k] + dist[k][j]
```

6.2 优化策略

为了提升 APSP 算法在 GPU 上的性能,我们采用了以下优化策略:

- **线程映射优化**:将二维矩阵的每个元素 (i,j) 映射到 GPU 的二维线程网格中,使每个线程独立计算对应的最短路径更新,充分利用 GPU 并行度。
- **单 GPU 实现**:整个 Floyd-Warshall 算法在单 GPU 上执行,避免跨 GPU 通信开销,保证数据一 致性。

- **内存布局优化**: 距离矩阵按行优先(row-major)线性存储,保证全局内存访问连续,从而提升内存带宽利用率。
- 块内并行化: 使用合适大小的线程块(例如 16×16)对距离矩阵进行分块处理,使每个 block 内线程充分利用共享内存(shared memory)缓存部分数据,减少全局内存访问次数。
- **同步机制优化**:在每轮中间顶点 k 更新后使用 hipDeviceSynchronize() 保证全局完成,既保证正确性,也避免过度同步带来的性能浪费。
- 可调块尺寸:针对不同规模的图,可调整线程块大小(BLOCK_SIZE)以获得最佳硬件占用率和执行效率。

通过上述优化策略,GPU 内核能够在保持正确性的前提下,实现对中小规模图的高效处理,并在大规模图上具有一定的加速效果。

6.3 优化结果

优化后数据如下:

分析数据:

表 3: APSP 测试结果

Test Case	Result	Time (s)
1	PASS	0.49
2	PASS	0.49
3	PASS	0.46
4	PASS	0.49
5	PASS	0.47
6	PASS	0.49
7	PASS	6.34
8	PASS	2.69
9	PASS	0.49
10	PASS	0.47
Total	10 / 10	12.88

这张表展示了 APSP 算法在 10 组测试用例上的运行结果与耗时情况。从结果来看,所有测试用例均通过验证,说明 GPU 实现的 APSP 算法在功能上是正确的 (PASS 率为 100%)。在运行时间上,大多数测试用例耗时均在 0.460.49 秒之间,表现稳定且高效,表明算法对小规模或中等规模图的处理能力较强。然而,第 7 和第 8 个测试用例耗时明显偏高 (分别为 6.34 秒和 2.69 秒),可能对应图规模较大或边数较多的输入,这显示出算法在处理大规模图时仍存在性能瓶颈。总计 10 个测试用例的累计运行时间为 12.88 秒,整体表现良好,但针对大规模输入,仍可进一步优化 GPU 内核和内存访问以降低运行时间。

7 总结与反思

本次 GPU 编程比赛涉及前缀和 (Prefix Sum)、Softmax 以及全源最短路径 (APSP) 三个核心算法, 实现了从串行到 GPU 并行的优化过程, 收获了丰富的经验和启示。

7.1 总体收获

- **GPU** 并行设计能力提升:通过对前缀和、Softmax 和 APSP 的实现,深入理解了 HIP 编程模型、 线程映射、共享内存使用以及块内归约等 GPU 并行计算核心概念。
- **算法与硬件结合**: 学会根据 GPU 架构特点设计算法,如利用共享内存减少全局内存访问、调整线程 块大小以提高硬件占用率、通过并行归约优化 Softmax 和前缀和计算等。
- **性能优化意识**:认识到单纯正确的算法并不等于高性能,通过分析执行时间、识别瓶颈点(如 APSP 在大规模图上的耗时)来指导优化策略设计。
- **数值稳定性与精度控制**:在 Softmax 实现中,学习了如何处理指数溢出问题,保证算法在大规模数据下的数值稳定性。

7.2 问题与反思

- 大规模图性能瓶颈: APSP 在第 7 和第 8 个测试用例中耗时明显较高,说明传统 Floyd-Warshall 算法在大规模图上存在计算复杂度瓶颈($O(m^3)$),可考虑分块优化、共享内存更充分利用或改用 Johnson 算法等。
- **内存带宽限制:** GPU 内存访问连续性和共访 (coalesced access) 对于性能影响显著,在设计大规模 矩阵运算核时需要充分考虑。
- **并行化粒度选择**: 在 Softmax 和前缀和优化中,选择合适的线程块大小和每线程处理元素数目对性能有重要影响,过小或过大都会导致硬件利用率下降。
- 调试与验证: GPU 并行程序调试较为复杂,需要建立自动化验证机制(如 compare.py 脚本)保证功能正确性,同时关注浮点比较的相对误差和绝对误差。

7.3 改进与展望

- 对于 APSP, 可尝试引入分块 Floyd-Warshall 或利用稀疏图优化策略, 降低大规模图计算时间。
- 对前缀和和 Softmax, 可进一步优化共享内存使用和循环展开 (loop unrolling), 提高 GPU 并行效率。
- 探索多 GPU 分布式计算和流式计算策略,以应对更大规模数据和图计算需求。
- 加强对 GPU 性能分析工具(如 rocprof)的使用,从硬件层面定位性能瓶颈,指导算法优化。

总体而言,本次比赛不仅检验了算法实现能力和 GPU 编程能力,也加深了对高性能计算优化策略的理解,为未来更复杂的并行算法开发打下了坚实基础。