Trabalho 2: Programação Paralela para Processador Many-core (GPU) Usando CUDA

- **Cálculo da distância de edição entre 2 sequências**:
  - Sequências de DNA: cadeias de bases nitrogenadas (A, C, G e T)
  - **Entradas**:
    - Sequência s, $n = |s|$
    - Sequência r, $m = |r|$
    - Obs.:
      - Supor que: $n \leq m$
      - Elementos da sequência indexados a partir de 1
  - **Saída**:
    - Distância de edição entre s e r :

      nº **mínimo** de operações de edição necessárias para transformar s em r
  - **Operações de edição permitidas**:
    - Inserção de um símbolo na sequência
    - Remoção de um símbolo da sequência
    - Substituição de um símbolo da sequência por outro

Cálculo da Distância de Edição entre 2 Sequências

- **Exemplo**:
  - **Entradas**:

$$s = \begin{array}{|c|c|c|c|} \hline A & C & T & G \\ \hline \end{array} \quad n = 4$$
$$\begin{array}{cccc} 1 & 2 & 3 & 4 \end{array}$$

$$r = \begin{array}{|c|c|c|c|c|c|} \hline A & G & C & A & G & T \\ \hline \end{array} \quad m = 6$$
$$\begin{array}{cccccc} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 \end{array}$$

  - **Saída**:
    - Distância de edição entre s e $r = 3$
  - **Operações de edição**:
    - Inserção de G após $s_1 = A$
    - Substituição de $s_3 = T$ por A
    - Inserção de T após $s_4 = G$

$$\begin{array}{cccccc} A & & C & T & G & \\ | & | & | & | & | & | \\ A & G & C & A & G & T \end{array}$$

Algoritmo para Cálculo da Distância de Edição

- Usa técnica de programação dinâmica
- **Entradas**: Sequências s e r, $n = |s|$ e $m = |r|$, $n \leq m$
- **Calcula matriz** d: de tamanho $(n+1) \times (m+1)$
  - $d[i,j]$ = distância de edição entre prefixo $s_{1..i}$ e prefixo $r_{1..j}$
- **Saída**: Distância de edição entre s e $r = d[n,m]$
- **Inicialização da matriz** d:

$$d[i,0] = i, \quad \text{para } 0 \leq i \leq n$$

$$d[0,j] = j, \quad \text{para } 1 \leq j \leq m$$

	0	1	2	...	j	...	m
0	0	1	2	...	j	...	m
1	1						
2	2						
:	:						
i	i						
:	:						
n	n						

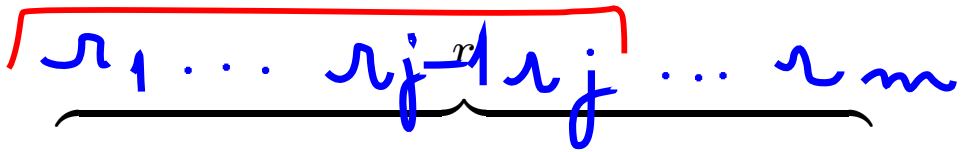
- **Ideia da inicialização**:
  - Para transformar $s_{1..i}$ em uma sequência vazia : faz i remoções
  - Para transformar uma sequência vazia em $r_{1..j}$: faz j inserções

Algoritmo para Cálculo da Distância de Edição

- **Cálculo de** $d[i,j]$: para $1 \leq i \leq n$ e $1 \leq j \leq m$

$$d[i,j] = \min \begin{cases} d[i,j-1]+1 & \text{(inserção de } r_j \text{ na posição } i+1 \text{ de } s) \\ d[i-1,j]+1 & \text{(remoção de } s_i) \\ d[i-1,j-1]+t(s_i,r_j) & \text{(substituição ou correspondência)} \end{cases}$$

$$t(s_i,r_j) = \begin{cases} 1 \quad \text{se} \quad s_i \neq r_j & \text{(substituição de } s_i \text{ por } r_j) \\ 0 \quad \text{se} \quad s_i = r_j & \text{(correspondência entre } s_i \text{ e } r_j) \end{cases}$$



	0	1	...	$j-1$	j	...	m
0	0	1	...	$j-1$	j	...	m
1	1						
:	:						
$i-1$	$i-1$						
i	i						
:	:						
n	n						

Exemplo

- **Entradas**:

$s =$ | A | C | T | G | (1 2 3 4) $\quad n = 4$

$r =$ | A | G | C | A | G | T | (1 2 3 4 5 6) $\quad m = 6$

- **Matriz** d:

			r					
			A	G	C	A	G	T
		0	1	2	3	4	5	6
	0	0	1	2	3	4	5	6
s A	1	1	0	1	2	3	4	5
C	2	2	1	1	1	2	3	4
T	3	3	2	2	2	2	3	3
G	4	4	3	2	3	3	2	3

- **Saída**:
  - Distância de edição entre s e $r = d[4, 6] =$ 3

Exemplo (continuação)

- **Entradas**:

$s =$ | A | C | T | G | $\quad n = 4$

1 2 3 4

$r =$ | A | G | C | A | G | T | $\quad m = 6$

1 2 3 4 5 6

- **Matriz** d:

			r						
				A	G	C	A	G	T
			0	1	2	3	4	5	6
		0	0	1	2	3	4	5	6
s	A	1	1	0	1	2	3	4	5
	C	2	2	1	1	1	2	3	4
	T	3	3	2	2	2	2	3	3
	G	4	4	3	2	3	3	2	3

- **Saída**:
  - Distância de edição entre s e $r = d[4, 6] = 3$

Algoritmo Sequencial para Cálculo da Distância de Edição

Input: Sequências s e r, com $n = |s|$ e $m = |r|$, $n \leq m$

Output: Distância de edição entre s e r

begin

for $i := 0$ **to** n **do**
$d[i, 0] := i$

for $j := 1$ **to** m **do**
$d[0, j] := j$

for $i := 1$ **to** n **do**

for $j := 1$ **to** m **do**

if $s_i \neq r_j$ **then**
$t := 1$

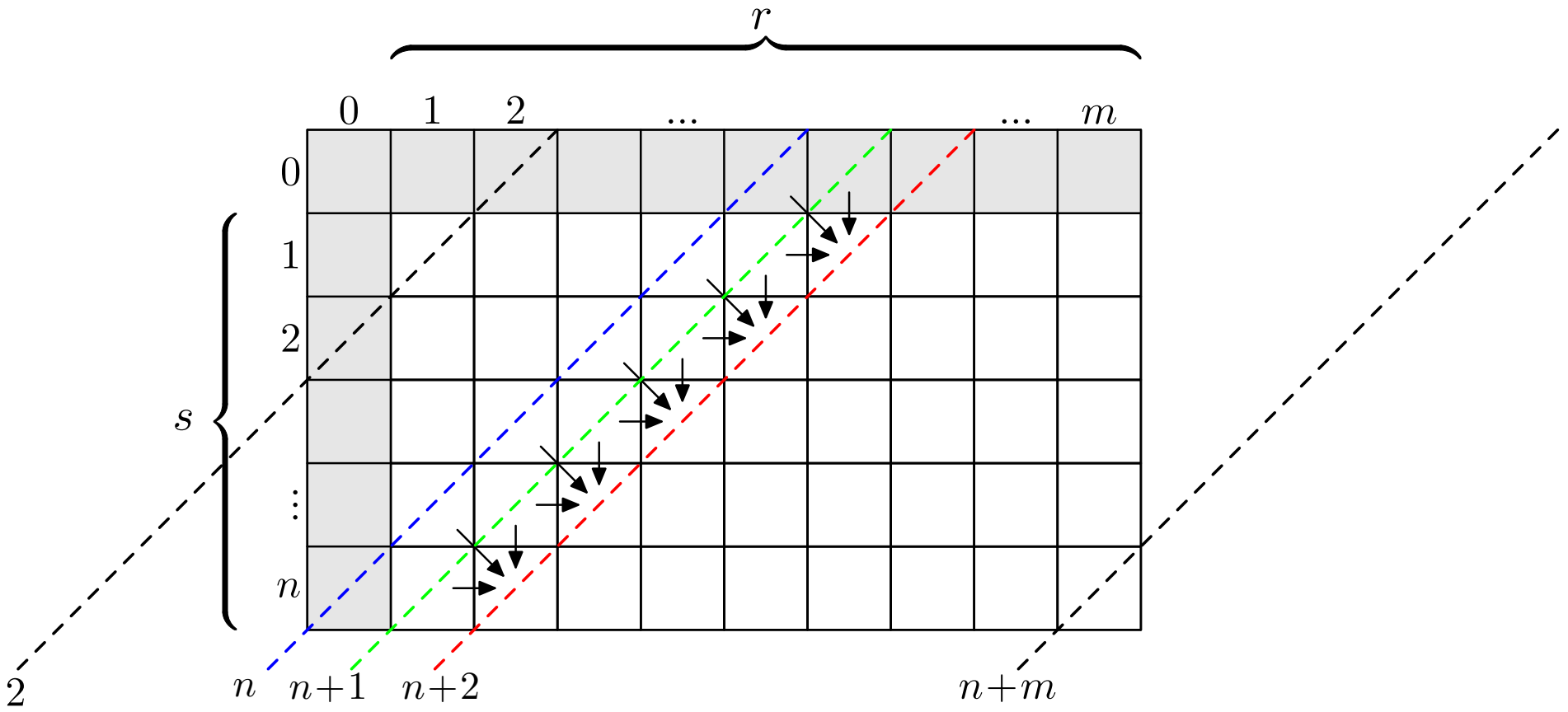
else
$t := 0$

$d[i, j] := \min(d[i, j-1] + 1, d[i-1, j] + 1, d[i-1, j-1] + t)$

return $d[n, m]$

Ideia da Paralelização do Cálculo da Matriz d

- **Células de uma mesma anti-diagonal**: Podem ser calculadas em paralelo
- **Sucessivas anti-diagonais**: Devem ser calculadas sequencialmente
- **Supor que**: $n \leq m$



Algoritmo Sequencial para Cálculo da Distância de Edição

- **Percurso por anti-diagonal**: supondo que $n \leq m$

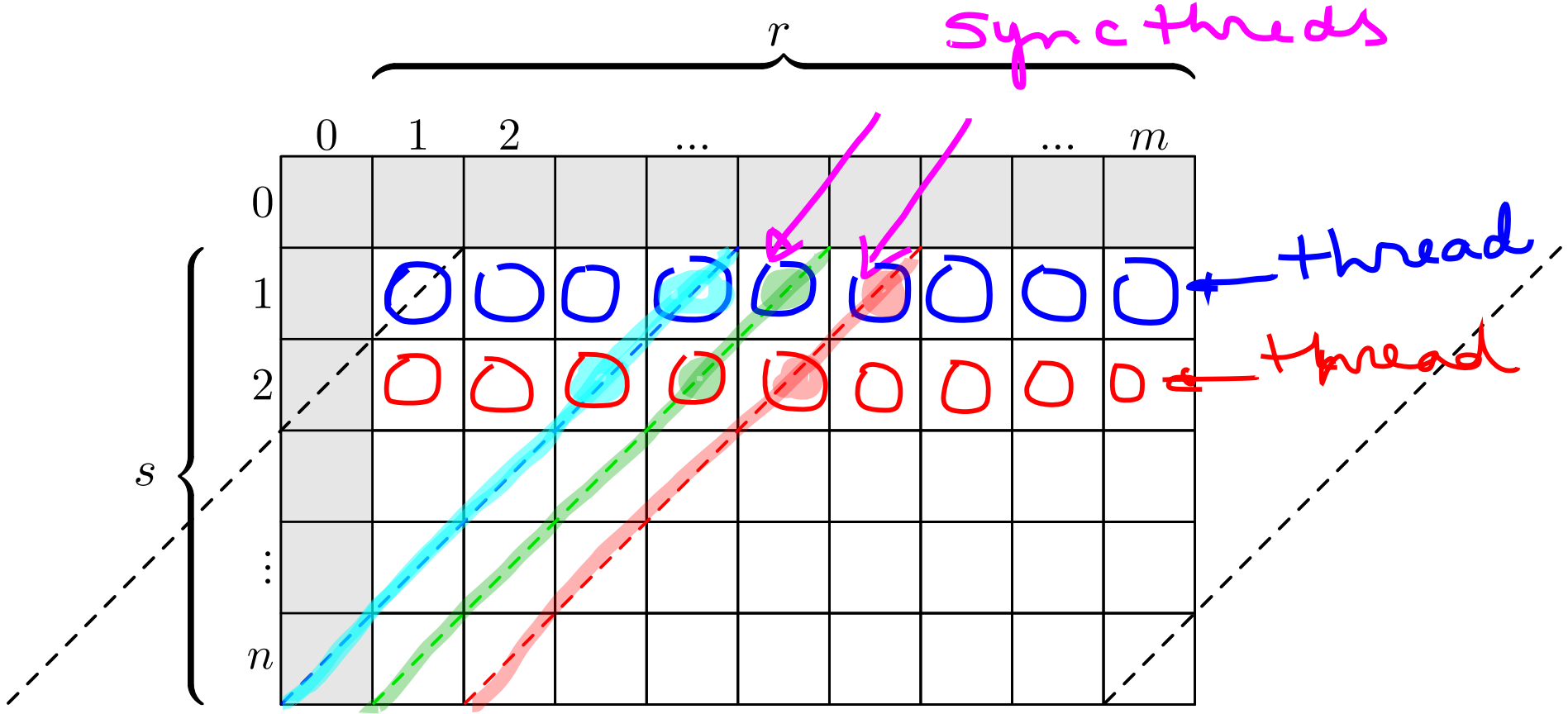
```
nADiag = n + m - 1;  // Número de anti-diagonais
tamMaxADiag = n;  // Tamanho máximo (número máximo de células) da anti-diagonal
// Para cada anti-diagonal (anti-diagonais numeradas de 2 a nADiag + 1)
for (aD = 2; aD <= nADiag + 1; aD++)
{
    // Para cada célula da anti-diagonal aD
    for (k = 0; k < tamMaxADiag; k++)
    {
        i = n - k;  // Calcula índices i e j da célula (linha e coluna)
        j = aD - i;
        if (j > 0 && j <= m)  // Se é uma célula válida
        {
            t = (s[i] != r[j] ? 1 : 0);
            a = d[i][j-1] + 1;
            b = d[i-1][j] + 1;
            c = d[i-1][j-1] + t;
            // Calcula d[i][j] = min(a, b, c)
            d[i][j] = ...
        }
    }
}
```

Sugestões para o Desenvolvimento do Programa Paralelo

- **Inicialmente: entender solução sequencial**
  - Percurso por linhas
  - Percurso por anti-diagonais
- **Desenvolver solução CUDA inicial**: após entender programa sequencial
- **Desenvolver solução CUDA completa**: após solução inicial estar correta
- **Em ambas as soluções**:
  - Usar apenas memória global da GPU
  - **Transferências entre host e GPU**:
    - **Entradas**: Host $\Rightarrow$ GPU
      - Vetores das sequências s e r
      - Matriz d: precisa ser transferida ? Inteira ?
    - **Saída**: GPU $\Rightarrow$ Host
      - Apenas $d[n, m]$
  - **Manipulação de matriz**:
    - Linearizada como vetor: `d[i][j]` equivale a `d[i*numColunas + j]`
  - **Sincronização entre threads do bloco**: `__syncthreads()`

Ideia da Solução CUDA Inicial

- **Supor que**: $n \leq m$ e $n \leq$ maxThreadsBloco
- **Programa CUDA**: com **um único bloco, com n threads**
  - Threads do bloco calculam "em paralelo" células da mesma anti-diagonal
- **Idealmente**: **uma única invocação do kernel**
  (**NÃO** ter uma invocação para cada anti-diagonal)
- **Sincronização entre threads do bloco**: entre 2 anti-diagonais sucessivas

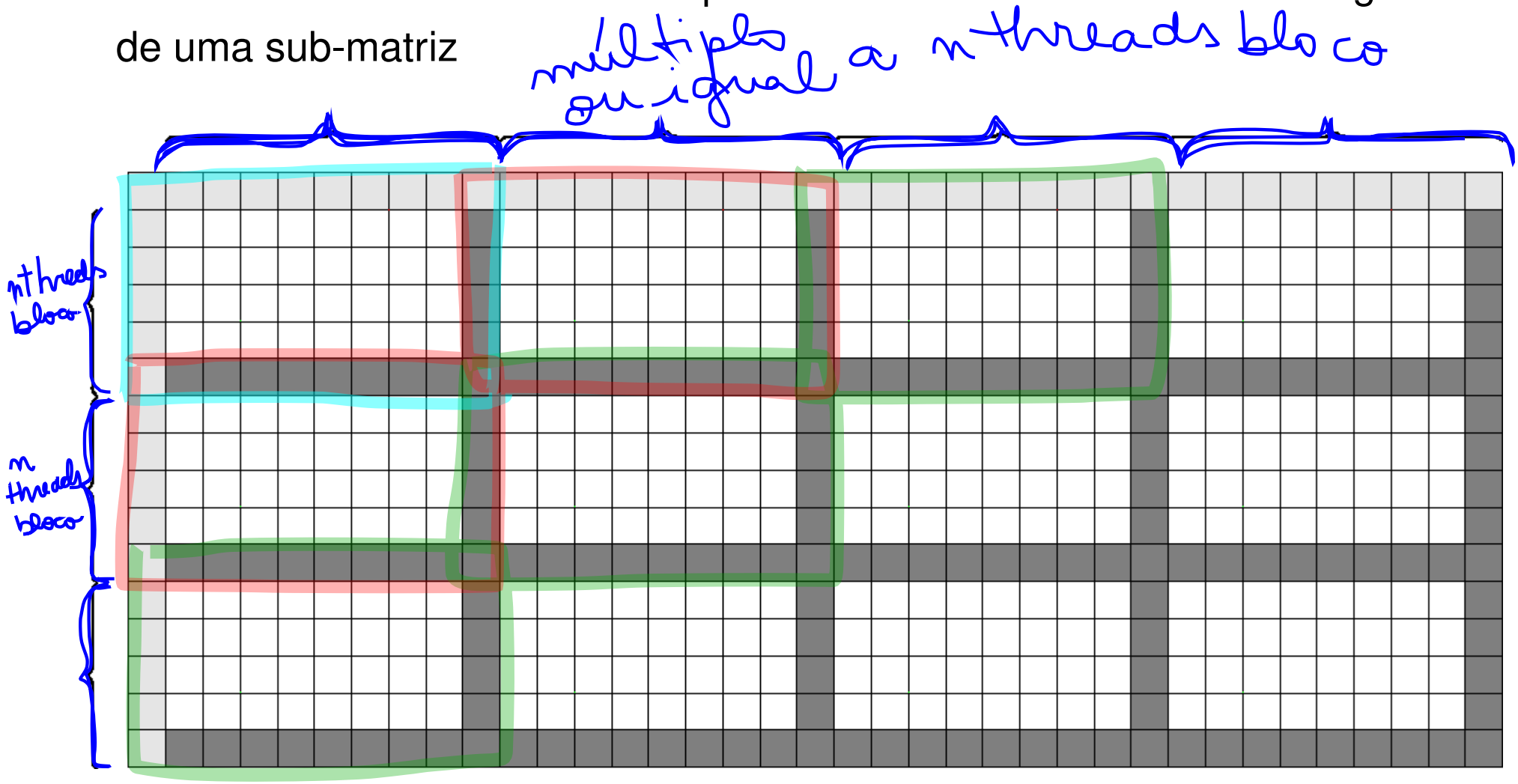


Ideia da Solução CUDA Completa

- **Supor que**: $n \leq m$
- **Permitir sequências maiores**:
  - Eliminar restrição $n \leq$ maxThreadsBloco
- **Generalizar programa CUDA**: **vários blocos de threads**
- **Ter várias invocações do kernel**
- **Idealmente**: **NÃO** ter uma invocação para cada anti-diagonal
- **Sincronização**:
  - **Entre threads do bloco**: `__syncthreads()`
  - **Entre blocos**: encerra execução do kernel e `cudaDeviceSynchronize()`
- **Transferências entre host e GPU**:
  - Igual solução inicial
  - Entre uma invocação do kernel e outra invocação:
    - Não é necessária nenhuma transferência
      (matriz `d` permanece na memória global da GPU)

Ideia da Solução CUDA Completa (continuação)

- **Laço sequencial no host**: sucessivas anti-diagonais de sub-matrizes
- **Invoca kernel c/ vários blocos de threads**: p/ cada antidiagonal de submatrizes
  - **Cada bloco**: calcula uma sub-matriz
  - Threads do bloco calculam “em paralelo” células da mesma anti-diagonal de uma sub-matriz



Trabalho 2

- **Programa sequencial fornecido**:
  - Cálculo de d com percurso por linhas
  - Cálculo de d com percurso por anti-diagonais
- **Grupos**: de 2 alunos
- **Desenvolver programa paralelo**:
  - Programa em CUDA C ou CUDA C++
  - Explorar paralelismo no cálculo da matriz d
  - Programa deve ter nome `dist_par.cu`
- **Comando de compilação usado**:

```
nvcc dist_par.cu -o dist_par
```

- **Interface de execução do programa**:
  - Por linha de comando com argumento:

```
dist_seq entrada.txt
dist_par entrada.txt
```

Entradas e Saídas do Programa

- **Entrada**: em um único arquivo texto
  - $n \quad m$
  - Sequência s
  - Sequência r
- **Saída**: na tela
  - Distância de edição
  - Tempo de execução (em ms)
- **NÃO ter outras impressões na tela**
- **Arquivos de entrada fornecidos**:
  - Entradas 1 a 4: Muito pequenas $\Rightarrow$ Apenas para teste e depuração
  - Entrada 3: Duas sequências iguais

Arquivo	n	m	Distância
entrada1.txt	4	6	3
entrada2.txt	20	30	14
entrada3.txt	32	32	0
entrada4.txt	250	500	280
entrada5.txt	500	1000	578
entrada6.txt	512	1024	597
entrada7.txt	8000	10000	4953
entrada8.txt	16384	16384	8468
entrada9.txt	30000	35000	17313

Submissão do Trabalho

- **Submeter**:
  - Um único arquivo `trab2.zip` com:
    - Arquivos do programa fonte paralelo
  - **Programa deve informar no cabeçalho**:
    - Nome dos alunos do grupo
    - Se o programa implementa:
      - Apenas solução inicial (com grid de um único bloco); ou
      - Solução completa (com grid de vários blocos)
    - Outras informações importantes, se necessário
- **NÃO submeter**:
  - Programa executável, programa sequencial, arquivos de entrada
- **Prazo**: 30 out, dom.