

利用 CUDA 实现大规模图的单源最短路径并行算法

背景

大规模图是数据驱动类应用中的基本数据模型，其单源最短路径算法用途非常广泛。图算法的典型领域有社会网络分析、互联网分析、大规模集成电路布局、交通分析、生物计算等。随着基于 GPU 协处理器的异构计算体系结构成为高性能计算的主流，基于 CUDA 的大规模图的单源最短路径并行算法的成为重要研究课题。

中科院软件所并行软件与计算科学实验室针对基于 GPU 的大规模图并行算法展开了深入研究。课题组面向 CUDA 编程特性，研究了图的规则化表示、计算访问局部性、宽松同步策略等。每项技术在 NVIDIA GTX480、C1060、K20x 等不同型号的设备上都取得了不同程度的加速比。该研究内容获得 2014 年启动的国家自然科学基金项目资助。

挑战

最为人熟知的单源最短路径串行算法是处理非负权值图的 Dijkstra 算法。该算法高效的重要原因是每一次松弛操作都为必要，没有冗余。直观地，Dijkstra 算法并行度依赖于图顶点的度分布。针对并行求解单源最短路径 (SSSP) 问题，U. Meyer 和 P. Sanders 为不确定权值的有向图提出了 Delta-stepping 算法。该算法通过选择距离在限定区间内的顶点集合，并行松弛该顶点集合的全部出边，有效提高了并行度。Delta-stepping 算法采用的 Label-correcting 方法通过多次迭代的冗余计算换取更大的并行度，从而缩短计算时间。

针对特定的体系结构，以上算法还需要继续探究其性能潜力。比如，GPU 卡未支持设备上的全部活跃 CUDA (Warp) 块之间的同步操作，因此现有算法普遍采用了基于 CPU 协助的同步方法。或者，借用针对 Global 存储中的信号量实现，但需要使用原子操作，众多线程的开销难以忍受。GPU 算法还需要充分挖掘 CUDA (Warp) 块操作的凝聚性潜在的效率。

解决方案

NVIDIA 的 GPU CUDA 编程框架为计算提供了众多线程的计

算能力，得到广泛应用。针对大规模图的单源最短路径问题，中科院软件所并行软件实验室研究团队设计了一套适应 GPU 深层存储和众多线程计算的算法方案，取得令人满意的加速比。该计算方案在 NVIDIA K20x GPU 设备上实现，探索了面向 GPU 非规则存储访问的数据驱动型应用的计算加速解决方案，有广泛的可推广性。

- 图的规则化表示。根据图节点度数的分布特性，图被分为几种特殊结构，如平均图、随机图、幂律图等。课题组研究了在保持图的最短路径查询性质不变的前提下，将图的节点度规则化为特定值。规则化为 CUDA 要求的凝聚读取准备了条件，计算速度提高近三分之一。
- 计算访问的局部性。如果以节点编号为线索映射到众多线程，根据局部性要求，节点重编号的功能是图数据划分。在图规则化操作中，新分裂的子节点紧邻母节点编号方案提高了访问局部性。
- 宽松同步策略。每一次最短路径计算更新都需要线程全局同步，但 GPU 卡不能支持线程块间同步。课题组设计了多重信号量的非准确同步方法，避免了借助 CPU 实现全局精准同步的巨大代价。实验证明，在一定规模和特性的图中，其路径计算错误率可以接受。

影响

课题组针对纽约地图，实现了面向 GPU K20x 的单源最短路径算法的众核并行优化。实验表明，对于纽约地图数据，图顶点的度规则化为 4 时效果最好。节点度规则化后的转置操作，保证了数据读取的凝聚性，使算法效率提高 1 倍。合适的节点重编号策略，进一步提高了计算过程中数据访问的局部性，对于节点分裂概率高的情况，算法的加速比接近 3 倍。宽松同步策略与基于原子操作的同步策略相比，单源最短路径的计算时间从 467s 降低到 27s，加速比超过 17x。

对于许多应用，需推荐多条最短路径。第一位要求是快速，精度要求不严格。该类应用适合采用 CUDA 卡上的宽松同步策略。针对该类图数据特性和路径精度要求，设计计算参数，尽最大努力提高计算性能。该方法对非严格最短路径的推荐应用，有普适的应用需求。