

Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова



Введение в методы параллельных вычислений



Разработчик:
А.В. Старченко, д.ф.-м.н., профессор
E-mail: starch@math.tsu.ru
Томский государственный университет

Направление 010300.68
«Фундаментальная информатика и информационные технологии»

Проект комиссии Президента по модернизации и техническому развитию экономики России
«Создание системы подготовки высококвалифицированных кадров в области суперкомпьютерных технологий и специализированного программного обеспечения»

Суперкомпьютерный консорциум университетов России



Разработка курса выполнена в рамках Проекта комиссии Президента РФ по модернизации и техническому развитию экономики России «Создание системы подготовки высококвалифицированных кадров в области суперкомпьютерных технологий и специализированного программного обеспечения»

Применение потенциала суперкомпьютерных технологий (СКТ) как значимой составляющей инновационного развития страны является задачей государственной важности, относится к приоритетному направлению и находится под постоянным контролем Президента и Правительства России. Одним из сдерживающих факторов развития страны в этом направлении является острая нехватка высококвалифицированных кадров в области СКТ, поскольку подготовка таких специалистов сейчас отсутствует как элемент системы высшего профессионального образования.

Стратегической целью проекта является создание национальной системы подготовки высококвалифицированных кадров в области суперкомпьютерных технологий и специализированного программного обеспечения.

[http://hpc-education.ru.](http://hpc-education.ru)

© Московский государственный университет © Томский государственный университет Старченко А.В.

Суперкомпьютерный консорциум университетов России



Содержание курса

- Введение
- Рекуррентные формулы
- Параллельные вычисления определенных и кратных интегралов
- Умножение матрицы на вектор. Умножение матриц
- Прямые методы решения систем линейных уравнений на многопроцессорных системах Организация межпроцессорных обменов
- Трехдиагональные системы. Параллельная реализация прямых методов решения систем линейных уравнений
- **Параллельная реализация итерационных методов решения СЛАУ**
- Параллельная реализация быстрого преобразования Фурье

© Московский государственный университет © Томский государственный университет Старченко А.В.

3

Суперкомпьютерный консорциум университетов России



Содержание лекции

- Итерационные методы решения системы линейных уравнений с плотно заполненной матрицей
- Метод Якоби
 - Условия сходимости и критерии завершения итерационного процесса
 - Построение параллельной версии алгоритма на основе декомпозиции данных
 - Оценка ускорения и эффективности параллельного метода Якоби
- Метод Метод Зейделя и метод SOR
 - Покомпонентная и матрично-векторная формы записи
 - Построение параллельной версии алгоритмов на основе асинхронной или хаотической релаксации
- Метод сопряженных градиентов

© Московский государственный университет © Томский государственный университет Старченко А.В.

4

Суперкомпьютерный консорциум университетов России



Итерационные методы решения СЛАУ с плотно заполненной матрицей

- Итерационные методы для решения линейных систем вида $Ax=b$ с невырожденной квадратной матрицей начинают расчет с заданного начального приближения x_0 и выполняют его последовательное улучшение до тех пор, пока приближенное решение не будет найдено с требуемой точностью.
- По теории возможно бесконечное число итераций для достижения точного решения. На практике итерации заканчиваются, когда норма невязки $r_k = b - Ax_k$ или другая мера ошибки не станет малой.

© Московский государственный университет © Томский государственный университет Старченко А.В.

5

Суперкомпьютерный консорциум университетов России



Итерационные методы решения СЛАУ с плотно заполненной матрицей

- Итерационные методы обычно используются для решения систем уравнений, количество которых слишком велико, чтобы их можно было обработать на современном компьютере прямыми методами.
- Кроме того, эти методы практически незаменимы при решении больших и плохоусловленных систем, поскольку строятся таким образом, чтобы погрешность метода во время поиска решения не накапливалась.
- Последовательные приближения к решению в таких методах обычно генерируются выполнением умножений матрицы на вектор.
- Итерационные методы не гарантируют получения решения для любой системы уравнений. Однако, когда они дают решение, то оно получается с меньшими затратами, чем прямыми методами.

© Московский государственный университет © Томский государственный университет Старченко А.В.

6



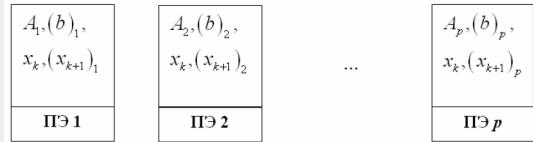
Построение параллельного алгоритма на основе декомпозиции данных

- На этапе декомпозиции в качестве фундаментальной мелкозернистой подзадачи выберем задачу расчета одной компоненты вектора x_{k+1} .
- При проектировании коммуникаций между подзадачами становится очевидным, что они не требуются, поскольку расчеты каждой компоненты $x_i^{(k+1)}$ на одной итерации ведутся независимо и одновременно. Однако необходимо контролировать выполнение условия завершения итераций, для чего нужно располагать всеми компонентами x_{k+1}, A, b, x_k .
- Таким образом, потребуются сборка x_{k+1} либо на одном или на всех процессорных элементах и принятие решения о продолжении или завершении итерационного процесса.



Параллельная реализация метода Якоби

- Рассмотрим схему укрупнения мелкозернистых фундаментальных подзадач, при которой каждый укрупненный блок содержит по n/p таких подзадач.



- Распределение исходных данных по процессорным элементам



Параллельная реализация метода Якоби

- Оценка временных затрат разработанного параллельного алгоритма на одной итерации без учета этапа инициализации:

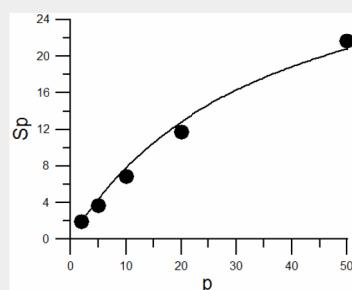
$$T_p \approx 2 \frac{n^2}{p} t_a + 4 \frac{n}{p} t_a + (p-1) \left(\frac{n}{p} + 2 \right) t_{comm};$$

{1} {2} {3}

$$\left(\frac{n}{p} \gg 1 \right) \Rightarrow T_p \approx 2 \frac{n^2}{p} t_a + (p-1) \frac{n}{p} t_{comm}.$$



Оценка ускорения и эффективности параллельного метода Якоби



- Ускорение параллельного метода Якоби при решении СЛАУ с плотно заполненной матрицей ($n=5000$).
- Линия – оценка S_p по формуле при $\kappaappa=140$.
- Значки – расчет на кластере ТГУ СКИФ Cyberia.



Метод Зейделя

- Покомпонентная форма записи метода Зейделя имеет вид ($a_{ii} \neq 0, i = 1, 2, \dots, n$):

$$x_i^{(k+1)} = \frac{b_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} x_j^{(k+1)} - \sum_{j=i+1}^n a_{ij} x_j^{(k)}}{a_{ii}}, i = 1, 2, \dots, n;$$

- или

$$x_i^{(k+1)} = \frac{b_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} x_j^{(k)} - \sum_{j=i+1}^n a_{ij} x_j^{(k+1)}}{a_{ii}}, i = n, n-1, \dots, 1.$$



Метод Зейделя

- Матрично-векторная форма записи имеет вид:

$$\begin{aligned} x_{k+1} &= (D + L)^{-1}(b - Ux_k), k = 0, 1, 2, \dots; \\ x_{k+1} &= (D + U)^{-1}(b - Lx_k), k = 0, 1, 2, \dots \end{aligned}$$

- Метод Зейделя сходится при любом начальном приближении и любой правой части СЛАУ b , если матрица A имеет строгое диагональное преобладание или линейный оператор, которому соответствует матрица, самосопряжен и положителен ($A=A^*, A>0$).



Метод Зейделя. Асинхронный подход

- Рассмотренные формулы метода Зейделя являются рекуррентными, т.е. для расчета $x_i^{(k+1)}$ нужно сначала рассчитать, скажем, компоненты $x_1^{(k+1)}, x_2^{(k+1)}, \dots, x_{i-1}^{(k+1)}$.
- Для преодоления этой ситуации в практике параллельных вычислений часто используют так называемую **асинхронную** или **хаотическую релаксацию**, когда при получении компонент вектора приближенного решения x_{k+1} используют последние значения компонент вектора x , имеющиеся на каждом процессорном элементе.



Метод Зейделя. Асинхронный подход

- Асинхронная релаксация может быть эффективной, однако порядок выполнения вычислительной работы в ней отличается от организации расчетов в последовательном методе Зейделя, что существенно усложняет анализ сходимости полученного параллельного метода решения систем линейных алгебраических уравнений.
- При решении СЛАУ с плотно заполненной матрицей можно воспользоваться матрично-векторной формой записи метода Зейделя, согласно которой расчет компонент вектора x_{k+1} может вестись на каждой итерации при решении системы с верхне- или нижнетреугольной матрицей. В предыдущей главе было отмечено, что для таких систем параллельные методы оказываются лишь умеренно эффективными.



Метод SOR

- Метод релаксации (метод SOR (*successive over relaxation*)) имеет вид: $a_{ii} \neq 0, i = 1, 2, \dots, n$

$$x_i^{(k+1)} = (1 - \omega)x_i^{(k)} + \frac{\omega}{a_{ii}} \left[b_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} x_j^{(k+1)} - \sum_{j=i+1}^n a_{ij} x_j^{(k)} \right];$$

- Матрично-векторный вид:

$$x_{k+1} = (D + \omega L)^{-1} [(1 - \omega)D - \omega U] x_k + \omega (D + \omega L)^{-1} b;$$

- Итерации метода SOR сходятся при любом начальном приближении, если A - симметричная положительно определенная матрица и параметр релаксации $\omega \in (0, 2)$.



Метод SOR

- Параллельная реализация метода SOR для линейных систем с плотно заполненной матрицей осуществляется аналогично распараллеливанию метода Зейделя, т.е. на каждой итерации решаются параллельным методом треугольные системы вида

$$(D + \omega L) x_{k+1} = [(1 - \omega)D - \omega U] x_k + \omega b, \quad k = 0, 1, 2, \dots$$

- или используются асинхронные или хаотические релаксации.



Метод SOR

- Применение асинхронного подхода в качестве способа распараллеливания метода Зейделя или метода SOR ведет, как правило, к увеличению общего числа итераций при заданной точности вычислений по сравнению с соответствующими последовательными алгоритмами, причем при увеличении степени декомпозиции исходных данных (с ростом числа используемых процессорных элементов) количество итераций повышается.
- Теоретические оценки ускорения и эффективности параллельных алгоритмов методов Зейделя и метода SOR, базирующихся на асинхронном подходе, провести намного сложнее, чем для метода Якоби, для которого общее число итераций в последовательной и параллельной версиях алгоритма совпадают.



Метод сопряженных градиентов

- Если матрица $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ является симметричной и положительно определенной, то решение СЛАУ $Ax = b$ можно найти используя метод сопряженных градиентов.
- Теорема.** Если матрица A удовлетворяет указанным выше свойствам, а p_0, p_1, \dots, p_{n-1} - ненулевые линейно независимые векторы, удовлетворяющие условию $(p_i, Ap_j) = 0, i \neq j$,
- то при любом начальном приближении x_0 итерационные приближения $x_{k+1} = x_k - \alpha_k p_k$, $\alpha_k = -(p_k, r_k) / (p_k, Ap_k)$, $r_k = b - Ax_k$
- сходятся к точному решению не более чем за n шагов.



Метод сопряженных градиентов

- выбрать x_0 , вычислить $r_0 = b - Ax_0$, положить $p_0 = r_0$,
 - рассчитать (r_0, r_0) ,
 - для $k = 0, 1, 2, \dots$
- $$\alpha_k = -(r_k, r_k) / (p_k, Ap_k), \quad (1)$$
- $$x_{k+1} = x_k - \alpha_k p_k, \quad (2)$$
- $$r_{k+1} = r_k + \alpha_k Ap_k, \quad (3)$$
- рассчитать (r_{k+1}, r_{k+1}) и если $\sqrt{(r_{k+1}, r_{k+1})} \geq \varepsilon$, продолжать
- $$\beta_k = (r_{k+1}, r_{k+1}) / (r_k, r_k), \quad (4)$$
- $$p_{k+1} = r_{k+1} + \beta_k p_k. \quad (5)$$



Метод сопряженных градиентов

- Из формул (1)-(6) видно, что на каждой итерации метода производится **одно** умножение матрицы на вектор в (1), **два** скалярных произведения в (1) и (4), **три** линейных комбинации векторов сахру ((2), (3), (6)), а также несколько скалярных операций.
- При $n > 1$ временные затраты на проведение одной итерации метода сопряженных градиентов можно оценить как
$$T_1 \approx (2 \cdot n^2 + 2 \cdot (2 \cdot n) + 3 \cdot (2 \cdot n)) \cdot t_a \approx 2 \cdot n^2 \cdot t_a.$$
- Таким образом, по вычислительной трудоемкости выполнение одной итерации метода сопряженных градиентов аналогично выполнению итерации метода Якоби.



Параллельная реализация CG

- В параллельной реализации как данные (векторы b, r_k, p_k, x_k и матрица A), так и основные операции (скалярные произведения, линейные комбинации векторов сахру, умножение матрицы на вектор) разделяются на p используемых укрупненных подзадач.
- В дополнение к коммуникациям (межпроцессорным обменам данных), требуемым для осуществления этих основных операций, необходимы также дополнительные коммуникации для проверки сходимости вычислительного процесса (выполнение редукции sum или max при вычислении норм $\|r_k\|$ и $\|x_{k+1} - x_k\|$).



Параллельная реализация CG

- Декомпозиция векторов обычно осуществляется равномерно между p подзадачами (процессорными элементами), причем каждая подзадача содержит компоненты векторов с одним и тем же множеством индексов, например на ПЭМ ($\mu=1, \dots, p$) распределяются компоненты векторов b, r_k, p_k, x_k с номерами индексов $i=1+(μ-1)·n/p, \dots, μ·n/p$ ($μ=1, \dots, p$).
- Поэтому при выполнении операции линейной комбинации векторов сахру не требуются коммуникации (межпроцессорная передача данных), в то время как при вычислении скалярных произведений они просто необходимы.



Параллельная реализация CG

- Декомпозиция матрицы A может осуществляться по строкам, по столбцам или на блоки.
- Для плотно заполненной матрицы декомпозиция на строчные блоки A_p ($p=1,\dots,p$) обеспечивает вычисление произведения $A_p \cdot p_k$ без межпроцессорных коммуникаций.
- В то же время, коммуникации потребуются на следующем этапе, когда необходимо получить остальные компоненты произведения $A_p \cdot p_k$ для вычисления скалярного произведения $(p_k, A_p \cdot p_k)$.



Параллельная реализация CG

- При распределении строчных блоков из n/p строк матрицы A и по n/p компонентов векторов по подзадачам коммуникации требуются для операций (1) и (4)

- выбрать x_0 , вычислить $r_0 = b - Ax_0$, положить $p_0 = r_0$,

- рассчитать (r_0, r_0) ,

- для $k = 0, 1, 2, \dots$

$$\alpha_k = -(r_k, r_k) / (p_k, A p_k), \quad (1)$$

$$x_{k+1} = x_k - \alpha_k p_k, \quad (2)$$

$$r_{k+1} = r_k + \alpha_k A p_k, \quad (3)$$

рас也算计 (r_{k+1}, r_{k+1}) и если $\sqrt{(r_{k+1}, r_{k+1})} \geq \varepsilon$, продолжать (4)

$$\beta_k = (r_{k+1}, r_{k+1}) / (r_k, r_k), \quad (5)$$

$$p_{k+1} = r_{k+1} + \beta_k p_k. \quad (6)$$



Параллельная реализация CG

- При проведении оценки ускорения и эффективности построенного параллельного алгоритма нужно иметь в виду, что объем вычислительной работы, выполняемой всеми подзадачами, в сумме совпадает с объемом вычислений в последовательном алгоритме метода сопряженных градиентов.
- На (1) и (4) шагах параллельного алгоритма требуется сборка векторов $p_k, A p_k$ и r_{k+1} на каждом ПЭ (пересыпка каждым ПЭ остальным по n/p чисел) с последующим вычислением скалярных произведений.
- И хотя в этом случае производится дублирование вычислений скалярных произведений, однако не требуется пересылки полученных результатов операции dot.



Параллельная реализация CG

- Другая стратегия организации межпроцессорных коммуникаций для выполнения параллельного алгоритма заключается в следующем.
- Для осуществления операции $A p_k$ на шаге (1) производится сборка вектора p_k на каждом ПЭ.
- В вычислении скалярного произведения участвуют все ПЭ. Рассчитав $[(p_k, A p_k)]_p$, полученное значение передается остальным ПЭ для проведения операции редукции sum.
- В итоге, в первом варианте межпроцессорной передачи данных на каждой итерации требуется каждому ПЭ пересыпать по $3n/p$ чисел остальным, то во втором – по $n/p+2$, причем нет дублирования при вычислении dot.



Параллельная реализация CG

- Оценим временные затраты параллельного алгоритма на каждой итерации
- $$T_p \approx 2 \frac{n^2}{p} t_a + (p-1) \left(\frac{n}{p} + 2 \right) t_{comm};$$
- Тогда при $n/p \gg 1$
- $$S_p = \frac{T_1}{T_p} \approx \frac{p}{1 + \frac{(p-1)\kappa}{2n}}; \quad \kappa = \frac{t_{comm}}{t_a} \gg 1.$$
- Ускорение параллельного метода сопряженных градиентов совпадает с ускорением метода Якоби.



Предобусловленный метод сопряженных градиентов

- Скорость сходимости метода сопряженных градиентов на каждой итерации можно оценить по следующей формуле:
- $$\|x_k - x^*\|_2 \leq 2\sqrt{\nu} a^k \|x_0 - x^*\|_2, \quad a = (\sqrt{\nu} - 1) / (\sqrt{\nu} + 1),$$
- x^* - точное решение; $\nu = cond(A) = \|A\| \cdot \|A^{-1}\|$
 - Если $\nu \sim 1, a \ll 1$ сходимость быстрая.
 - Если $\nu \gg 1, a \sim 1$ сходимость медленная.
 - Это наблюдение приводит к общему понятию предобуславливания матрицы A посредством преобразования конгруэнтности $\tilde{A} = SAS'$, где S - невырожденная матрица, выбранная так, чтобы $cond(\tilde{A}) < cond(A)$.



Предобусловленный метод сопряженных градиентов

- Тогда систему, которую нужно решать, запишется в виде
 $\tilde{A}\tilde{x} = \tilde{b}; \quad \tilde{A} = SAS'; \quad \tilde{x} = (S')^{-1}x; \quad \tilde{b} = Sb.$
- Рассмотрим подход предобуславливания, основанный на использовании симметричной положительно определенной матрицы M , аппроксимирующей матрицу A , и $(S'S)^{-1} = M$.
- Обычно в качестве матрицы M для предобуславливания СЛАУ используется либо диагональная либо треугольная матрица. Основными требованиями выбора матрицы M является простота решения системы и чтобы матрица M хорошо аппроксимировала матрицу A .



Предобусловленный метод сопряженных градиентов

- выбрать x_0 , вычислить $r_0 = b - Ax_0$, решить систему $M\tilde{r}_0 = r_0$, положить $p_0 = \tilde{r}_0$,
 - рассчитать (\tilde{r}_0, r_0) ,
 - для $k = 0, 1, 2, \dots$
- $$\alpha_k = -(\tilde{r}_k, r_k) / (p_k, Ap_k), \quad (1)$$
- $$x_{k+1} = x_k - \alpha_k p_k, \quad (2)$$
- $$r_{k+1} = r_k + \alpha_k Ap_k, \quad (3)$$
- рассчитать (r_{k+1}, r_{k+1}) и если $\sqrt{(r_{k+1}, r_{k+1})} \geq \varepsilon$, продолжать
- $$\text{решить систему } M\tilde{r}_{k+1} = r_{k+1}, \quad (4)$$
- $$\beta_k = (\tilde{r}_{k+1}, r_{k+1}) / (\tilde{r}_k, r_k), \quad (5)$$
- $$p_{k+1} = \tilde{r}_{k+1} + \beta_k p_k. \quad (6)$$



Предобусловленный метод сопряженных градиентов

- Для предобуславливания систем часто используют:
 - Диагональные или блочно диагональные матрицы
 - Метод последовательной релаксации SSOR
 - Неполную факторизацию
 - Полиномиальные предобуславливатели.
- Поскольку при построении параллельных версий предобусловленного метода сопряженных градиентов не все предобуславливатели эффективно распараллеливаются, необходимо специальное внимание уделять их выбору.



Заключение

- Рассмотрены параллельные алгоритмы итерационных методов решения систем линейных уравнений с плотно заполненной матрицей: метода Якоби, Зейделя, верхней релаксации SOR, метода сопряженных градиентов CG.
- Алгоритмы основываются на декомпозиции данных и базовых операций линейной алгебры – dot, saxpy, gaxpy.
- Для алгоритмов, включающих расчеты по рекуррентным формулам (методы Зейделя, SOR, предобусловленный метод CG), предлагается использовать асинхронный подход.



Вопросы для обсуждения

- В чем заключается идея итерационных методов решения СЛАУ и преимущество их применения перед прямыми методами?
- Какие базовые операции линейной алгебры обычно включают итерационные методы и какими способами они распараллеливаются?
- Оцените временные затраты на выполнение одной итерации в методе Якоби.
- Дайте словесное описание параллельного алгоритма метода Якоби.
- Как следует организовать проверку условия завершения итерационного процесса в параллельном алгоритме метода Якоби?
- Нарисуйте схему распределения данных по процессорным элементам в параллельном алгоритме метода Якоби.
- Выполните оценку временных затрат в параллельном алгоритме метода Якоби. Оцените ускорение параллельного алгоритма метода Якоби.



Вопросы для обсуждения

- В чем заключается проблема распараллеливания метода Зейделя? Прокомментируйте с использованием формул метода.
- Что собой представляет асинхронная или хаотическая релаксация?
- В чем заключается проблема применения асинхронной релаксации?
- Опишите основные этапы метода сопряженных градиентов и оцените временные затраты на проведение одной итерации последовательного алгоритма.
- Каким образом осуществляется построение параллельной версии метода CG?
- Дайте оценку временных затрат одной итерации параллельного алгоритма метода CG.



Темы заданий для самостоятельной работы

- Оцените ускорение и эффективность асинхронного параллельного алгоритма метода Зейделя.
- Оцените ускорение и эффективность асинхронного параллельного алгоритма метода верхней релаксации.
- Написать MPI-программу параллельного алгоритма метода Якоби. Исследовать ее ускорение при решении систем с плотно заполненной матрицей.
- Написать MPI-программу параллельного алгоритма метода Зейделя. Исследовать ее ускорение при решении систем с плотно заполненной матрицей.



Основная литература

1. Высокопроизводительные вычисления на кластерах. – Томск: Изд-во Том. ун-та, 2008.
2. Хокни Р., Джессхоуп К. Параллельные ЭВМ. Архитектура, программирование и алгоритмы. М: Радио и связь, 1986.
3. Ортега Дж. Введение в параллельные и векторные методы решения линейных систем. М.: Мир, 1991.
4. <http://www.cse.illinois.edu/courses/cs554/notes/>
5. Гергель В.П. Теория и практика параллельных вычислений. – М.: Интернет-Университет Информационных технологий; БИНОМ. Лаборатория знаний, 2007.
6. Деммель Дж. Вычислительная линейная алгебра. – М.:Мир, 2001.



Следующая тема

- Введение
- Рекуррентные формулы
- Параллельные вычисления определенных и кратных интегралов
- Умножение матрицы на вектор. Умножение матриц
- Прямые методы решения систем линейных уравнений на многопроцессорных системах. Организация межпроцессорных обменов
- Трехдиагональные системы. Параллельная реализация прямых методов решения систем линейных уравнений
- Параллельная реализация итерационных методов решения СЛАУ
- Параллельная реализация быстрого преобразования Фурье