Нижегородский государственный университет им. Н.И.Лобачевского

Факультет Вычислительной математики и кибернетики

Образовательный комплекс

Введение в методы параллельного программирования

Раздел 9.

Параллельные методы решения систем линейных уравнений



Гергель В.П., профессор, д.т.н. Кафедра математического обеспечения ЭВМ

Содержание

- □ Постановка задачи
- □ Метод Гаусса
 - Последовательный алгоритм
 - Параллельный алгоритм
- □ Метод сопряженных градиентов
 - Последовательный алгоритм
 - Параллельный алгоритм
- □ Заключение



Постановка задачи

Линейное уравнение с *п* неизвестными

$$a_0 x_0 + a_1 x_1 + \dots + a_{n-1} x_{n-1} = b$$

Множество *п* линейных уравнений называется *системой линейных уравнений* или *линейной системой*

В матричной форме:

$$Ax = b$$



Постановка задачи

□ Под задачей решения системы линейных уравнений для заданных матрицы A и вектора b понимается нахождение значения вектора неизвестных x, при котором выполняются все уравнения системы.



- □ Основная идея метода приведение матрицы А посредством эквивалентных преобразований к треугольному виду, после чего значения искомых неизвестных могут быть получены непосредственно в явном виде
- □ Эквивалентные преобразования:
 - Умножение любого из уравнений на ненулевую константу,
 - Перестановка уравнений,
 - Прибавление к уравнению любого другого уравнения системы.



На первом этапе – *прямой ход* метода Гаусса – исходная система линейный уравнений при помощи последовательного исключения неизвестных приводится к верхнему треугольному виду

$$Ux = c, \qquad U = \begin{pmatrix} u_{0,0} & u_{0,1} & \dots & u_{0,n-1} \\ 0 & u_{1,1} & \dots & u_{1,n-1} \\ & & & \dots \\ 0 & 0 & \dots & u_{n-1,n-1} \end{pmatrix}$$

На *обратном ходе* метода Гаусса (второй этап алгоритма) осуществляется определение значений неизвестных



□ Прямой ход

На итерации i, $0 \le i < n-1$, метода производится исключение неизвестной i для всех уравнений с номерами k, больших i (т.е. $i < k \le n-1$,). Для этого из этих уравнений осуществляется вычитание строки i, умноженной на константу (a_{ki}/a_{ii}) с тем, чтобы результирующий коэффициент при неизвестной x_i в строках оказался нулевым.

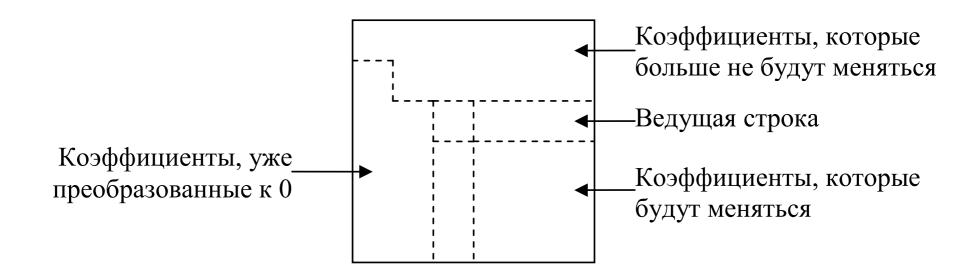
Все необходимые вычисления определяются при помощи соотношений:

$$a'_{kj} = a_{kj} - (a_{ki} / a_{ii}) \cdot a_{ij},$$

 $b'_{k} = b_{k} - (a_{ki} / a_{ii}) \cdot b_{i},$ $i \le j \le n - 1, i < k \le n - 1, 0 \le i < n - 1$



□ Общая схема состояния данных на *i*-ой итерации прямого хода алгоритма Гаусса





□ Обратный ход

После приведения матрицы коэффициентов к верхнему треугольному виду становится возможным определение значений неизвестных:

- Из последнего уравнения преобразованной системы может быть вычислено значение переменной x_{n-1} ,
- Из предпоследнего уравнения становится возможным определение переменной x_{n-2} и т.д.

В общем виде, выполняемые вычисления при обратном ходе метода Гаусса могут быть представлены при помощи соотношений:

$$x_{n-1} = b_{n-1} / a_{n-1,n-1},$$

 $x_i = (b_i - \sum_{i=1}^{n-1} a_{ij} x_j) / a_{ii}, i = n-2, n-3,...,0$



□ Определение подзадач

- Все вычисления сводятся к однотипным вычислительным операциям над строками матрицы коэффициентов системы линейных уравнений,
- Следовательно, в основу параллельной реализации алгоритма Гаусса может быть положен принцип распараллеливания по данным,
- В качестве базовой подзадачи примем все вычисления, связанные с обработкой одной строки матрицы А и соответствующего элемента вектора b.



□ Выделение информационных зависимостей...

- Каждая итерация *і* выполнения **прямого хода** алгоритма Гаусса включает:
 - Выбор ведущей строки, для выполнения которого подзадачи с номерами k, k>i, должны обменяться своими элементами при исключаемой переменной x_i для нахождения максимального по абсолютной величине значения. Строка, которой принадлежит выбранное значение, выбирается в качестве ведущей строки для выполняемой итерации метода,
 - **Рассылку** выбранной ведущей строки матрицы *A* и соответствующего элемента вектора *b* всем подзадачам с номерами *k*, *k*>*i*,
 - **Вычитание** строк для всех подзадачи *k* (*k*>*i*), обеспечивая тем самым исключение соответствующей неизвестной *x*_{*i*}.



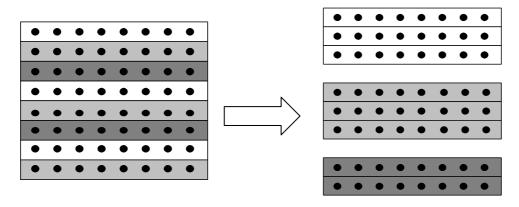
□ Выделение информационных зависимостей

- При выполнении обратного хода метода Гаусса подзадачи выполняют необходимые вычисления для нахождения значения неизвестных:
 - Как только какая-либо подзадача *i,* 0≤*i*<*n*-1, определяет значение своей переменной *x_i*, это значение должно быть разослано всем подзадачам с номерами *k*, *k*<*i*,
 - Далее подзадачи подставляют полученное значение новой неизвестной в линейное уравнение, представленное строкой матрицы *A*, расположенной в данной подзадаче, и выполняют корректировку значений для элементов вектора *b*.



□ Масштабирование и распределение подзадач по процессорам...

– В случае, когда размер матрицы, описывающей систему линейных уравнений, оказывается большим, чем число доступных процессоров (т.е., *n*>*p*), базовые подзадачи можно укрупнить, объединив в рамках одной подзадачи несколько строк матрицы.



Использование **циклического способа** формирования полос позволяет обеспечить лучшую балансировку вычислительной нагрузки между подзадачами



□ Масштабирование и распределение подзадач по процессорам

- Основным видом информационного взаимодействия подзадач является операция передачи данных от одного процессора всем процессорам вычислительной системы,
- Как результат, для эффективной реализации требуемых информационных взаимодействий между базовыми подзадачами, топология сети передачи данных должны иметь структуру гиперкуба или полного графа.



□ Анализ эффективности

– Общая оценка показателей ускорения и эффективности

$$S_{p} = \frac{(2n^{3}/3 + n^{2})}{\frac{1}{p} \sum_{i=2}^{n} (3i + 2i^{2})}, \quad E_{p} = \frac{(2n^{3}/3 + n^{2})}{\sum_{i=2}^{n} (3i + 2i^{2})}$$

Балансировка вычислительной нагрузки между процессорами, в целом, является достаточно равномерной



□ Анализ эффективности (уточненные оценки)...

- Время выполнения параллельного алгоритма, связанное непосредственно с вычислениями, состоит из:
 - Времени выполнения прямого хода алгоритма Гаусса (n-1 итерация).
 - выбор максимального значения в столбце с исключаемой неизвестной,
 - вычитание ведущей строки из каждой строки оставшейся части полосы матрицы *A*

$$T_{p}^{1} = \sum_{i=0}^{n-2} \left[\frac{(n-i)}{p} + \frac{(n-i)}{p} \cdot 2(n-i) \right] = \frac{1}{p} \sum_{i=0}^{n-2} \left[(n-i) \cdot + 2(n-i)^{2} \right]$$

- Времени выполнения обратного хода алгоритма Гаусса (*n-1* итерация).
 - обновление значения правых частей после рассылки вычисленного значения очередной неизвестной

$$T_p^2 = \sum_{i=0}^{n-2} 2 \cdot (n-i)/p$$



□ Анализ эффективности (уточненные оценки)...

- Оценка затрат на выполнение операций передачи данных между процессорами:
 - При выполнении прямого хода алгоритма Гаусса
 - для определения ведущей строки процессоры обмениваются локально найденными максимальными значениями в столбце с исключаемой переменной (MPI_Allreduce)

$$T_p^1(comm) = (n-1) \cdot \log_2 p \cdot (\alpha + w/\beta)$$

• рассылка выбранной ведущей строки

$$T_p^2(comm) = (n-1) \cdot \log_2 p \cdot (\alpha + wn/\beta)$$

- При выполнении обратного хода алгоритма Гаусса
 - на каждой итерации осуществляется рассылка между всеми процессорами вычисленного значения очередной неизвестной

$$T_p^3(comm) = (n-1) \cdot \log_2 p \cdot (\alpha + w/\beta)$$



Анализ эффективности (уточненные оценки)

Общее время выполнения параллельного алгоритма:

$$T_p = \frac{1}{p} \sum_{i=2}^{n} (3i + 2i^2) \tau + (n-1) \cdot \log_2 p \cdot (3\alpha + w(n+2)/\beta)$$



Программная реализация...

- **Главная функция программы** *main*. Реализует логику работы алгоритма, последовательно вызывает необходимые подпрограммы:
 - **ProcessInitialization** определяет исходные данные решаемой задачи,
 - GaussianElimination выполняет прямой ход метода Гаусса,
 - BackSubstitution реализует обратный ход метода Гаусса,
 - **ResultCollection** осуществляет сбор со всех процессов отдельных частей вычисленного вектора неизвестных,
 - *ProcessTermination* выполняет необходимый вывод результатов решения задачи и освобождает всю ранее выделенную память для хранения данных.



Программная реализация...

- Главная функция. Реализует логику работы алгоритма, последовательно вызывает необходимые процедуры:
 - ProcessInitialization определяет исходные данные задачи,
 - ParallelResultCalculation выполняет параллельный алгоритм Гаусса,
 - **ResultCollection** собирает блоки результирующего вектора со всех процессоров вычислительной системы,
 - *ProcessTermination* освобождает память, которая была выделена динамически во время выполнения программы.



Программная реализация...

- **Главная функция программы** *main*. Использует массивы:
 - pParallelPivotPos определяют номера строк матрицы, выбираемых в качестве ведущих, по итерациям прямого хода метода Гаусса определяет далее порядок выполнения итераций для обратного хода (массив является глобальным и любое его изменение требует выполнения операции рассылки измененных данных),
 - *pProcPivotIter* определяют номера итераций прямого хода метода Гаусса, на которых строки процесса использовались в качестве ведущих нулевое значение элемента означает, что соответствующая строка должна обрабатываться при исключении неизвестных (массив является локальным для каждого процесса).

Программа



□ Программная реализация...

 Функция ParallelGaussianElimination выполняет параллельный вариант прямого хода алгоритма Гаусса

Программа

• Функция *ParallelEliminateColumns* проводит вычитание ведущей строки из строк процесса, которые еще не использовались в качестве ведущих (т.е. для которых элементы массива *pProcPivotIter* равны нулю)



- □ Программная реализация...
 - Функция *ParallelBackSubstitution* реализует параллельный вариант обратного хода Гаусса.

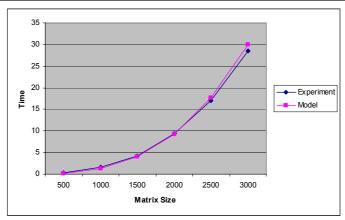
Программа



□ Результаты вычислительных экспериментов

Сравнение теоретических оценок и экспериментальных данных

	2 процессора		4 проце	ессора	8 процессоров		
Размер матрицы	Модель	Эксперимент	Модель	Эксперимент	Модель	Эксперимент	
500	0,2393	0,3302	0,2819	0,5170	0,3573	0,7504	
1000	1,3373	1,5950	1,1066	1,6152	1,1372	1,8715	
1500	4,0750	4,1788	2,8643	3,8802	2,5345	3,7567	
2000	9,2336	9,3432	5,9457	7,2590	4,7447	7,3713	
2500	17,5941	16,9860	10,7412	11,9957	7,9628	11,6530	
3000	29,9377	28,4948	17,6415	19,1255	12,3843	17,6864	

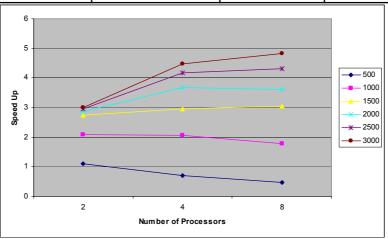




□ Результаты вычислительных экспериментов

– Ускорение вычислений

		Параллельный алгоритм					
Размер	Последовательный	2 процессора		4 процессора		8 процессоров	
матрицы	алгоритм	Время	Ускорение	Время	Ускорение	Время	Ускорение
500	0,36	0,3302	1,0901	0,5170	0,6963	0,7504	0,4796
1000	3,313	1,5950	2,0770	1,6152	2,0511	1,8715	1,7701
1500	11,437	4,1788	2,7368	3,8802	2,9474	3,7567	3,0443
2000	26,688	9,3432	2,8563	7,2590	3,6765	7,3713	3,6204
2500	50,125	16,9860	2,9509	11,9957	4,1785	11,6530	4,3014
3000	85,485	28,4948	3,0000	19,1255	4,4696	17,6864	4,8333





Метод сопряженных градиентов...

□ Итерационные методы решения систем линейных уравнений

- к искомому точному решению x^* системы Ax=b строится последовательность приближенных решений $X_0, X_1, \ldots, X_k, \ldots$
- каждое очередное приближение дает оценку точного решения со все уменьшающейся погрешностью,
- оценка точного решения может быть получена с любой требуемой точностью

Метод сопряженных градиентов — один из наиболее известных итерационных методов решения систем линейных уравнений



Метод сопряженных градиентов...

- Метод сопряженных градиентов может быть применен для решения системы линейных уравнений с симметричной, положительно определенной матрицей
 - Матрица A является симметричной, если она совпадает со своей транспонированной матрицей, т.е. A=A^T,
 - Матрица А называется положительно определенной, если для любого вектора х справедливо: х^тАх>0.
- □ После выполнения *п* итераций метода сопряженных градиентов (*п* есть порядок решаемой системы линейных уравнений), очередное приближение *x*^{*n*} совпадает с точным решением.



□ Если матрица *A* симметричная и положительно определенная, то функция

$$q(x) = \frac{1}{2}x^T \cdot A \cdot x - x^T b + c$$

имеет единственный минимум, который достигается в точке x^* , совпадающей с решением системы линейных уравнений.

Метод сопряженных градиентов является одним из широкого класса итерационных алгоритмов, которые позволяют найти решение путем минимизации функции q(x)



□ Итерация метода сопряженных градиентов состоит в вычислении очередного приближения к точному решению

$$x^k = x^{k-1} + s^k d^k$$

эбѕ

 x^{k} — очередное приближение,

 x^{k-1} – приближение, построенное на предыдущем шаге,

 s^k – скалярный шаг,

 d^k – вектор направления



Перед выполнением первой итерации вектора x_0 и d_0 полагаются равными нулю, а для вектора g_0 устанавливается значение равное -b.

Шаг 1: Вычисление градиента

$$g^k = A \cdot x^{k-1} - b$$

Шаг 2: Вычисление вектора направления

$$d^{k} = -g^{k} + \frac{\left((g^{k})^{T}, g^{k} \right)}{\left((g^{k-1})^{T}, g^{k-1} \right)} d^{k-1}$$

Шаг 3: Вычисление величины смещения по выбранному направлению

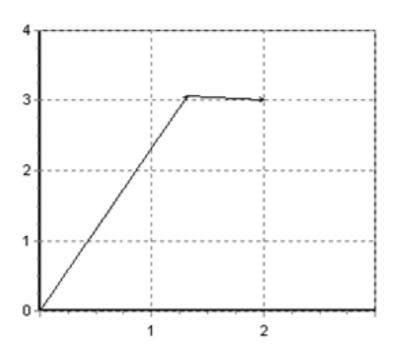
$$s^{k} = \frac{\left(d^{k}, g^{k}\right)}{\left(d^{k}\right)^{T} \cdot A \cdot d^{k}}$$

Шаг 4: Вычисление нового приближения

$$x^k = x^{k-1} + s^k d^k$$

Вычислительная сложность алгоритма $T_1 = 2n^3 + 13n^2$





Итерации метода сопряженных градиентов при решении системы

линейных уравнений второго порядка:

$$\begin{cases} 3x_0 - x_1 = 3 \\ -x_0 + 3x_1 = 7 \end{cases}$$



□ Организация параллельных вычислений

- Выполнение итераций метода осуществляется последовательно, следовательно наиболее целесообразный подход состоит в распараллеливании вычислений, реализуемых в ходе выполнения отдельных итераций,
- Основные вычисления, выполняемые в соответствии с методом, состоят в умножении матрицы A на вектора x и d,
- Дополнительные вычисления, имеющие меньший порядок сложности, представляют собой различные операции обработки векторов (скалярное произведение, сложение и вычитание, умножение на скаляр).

При организации параллельных вычислений может быть полностью использован материал, изложенный в разделе "Параллельные методы умножения матрицы на вектор"

□ Анализ эффективности...

(при использовании параллельного алгоритма умножения матрицы на вектор при ленточном горизонтальном разделении матрицы и при полном дублировании всех обрабатываемых векторов)

Вычислительная сложность параллельных операций умножения матрицы на вектор при использовании схемы ленточного горизонтального разделения матрицы

$$T_p(calc) = 2n \lceil n/p \rceil \cdot (2n-1)$$

 Как результат, при условии дублирования всех вычислений над векторами общая вычислительная сложность параллельного варианта метода сопряженных градиентов является равной

$$T_p = n \left(2 \lceil n/p \rceil \cdot (2n-1) + 13n \right)$$



□ Анализ эффективности...

- Общая оценка показателей ускорения и эффективности

$$S_{p} = \frac{2n^{3} + 13n^{2}}{n(2\lceil n/p \rceil \cdot (2n-1) + 13n)}, \quad E_{p} = \frac{2n^{3} + 13n^{2}}{p \cdot n(2\lceil n/p \rceil \cdot (2n-1) + 13n)}$$

Балансировка вычислительной нагрузки между процессорами является достаточно равномерной



- □ Анализ эффективности (уточненные оценки)
 - Коммуникационная сложность рассматриваемых параллельных вычислений (см. раздел 7)

$$T_p(comm) = 2n(\alpha \cdot \lceil \log p \rceil + w(n/p)(p-1)/\beta)$$

 Общее время выполнения параллельного варианта метода сопряженных градиентов для решения систем линейных уравнений

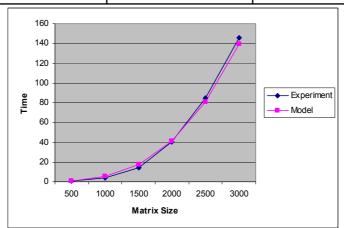
$$T_p = n \cdot \left[\left(2 \left\lceil n/p \right\rceil \cdot \left(2n - 1 \right) + 13n \right) \cdot \tau + 2 \left(\alpha \cdot \left\lceil \log p \right\rceil + w(n/p)(p-1)/\beta \right) \right]$$



□ Результаты вычислительных экспериментов

Сравнение теоретических оценок и экспериментальных данных

	2 процессора		4 проце	ессора	8 процессоров		
Размер матрицы	атрицы Модель Эксперимент		Модель	Эксперимент	Модель	Эксперимент	
500	1,3042	0,4634	0,6607	0,4706	0,3390	1,3020	
1000	10,3713	3,9207	5,2194	3,6354	2,6435	3,5092	
1500	34,9333	17,9505	17,5424	14,4102	8,8470	20,2001	
2000	82,7220	51,3204	41,4954	40,7451	20,8822	37,9319	
2500	161,4695	125,3005	80,9446	85,0761	40,6823	87,2626	
3000	278,9077	223,3364	139,7560	146,1308	70,1801	134,1359	

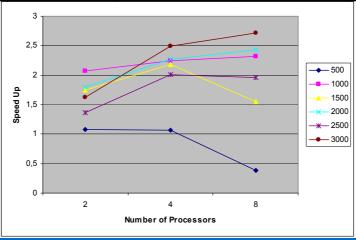




□ Результаты вычислительных экспериментов

- Ускорение вычислений

Размер матрицы	Последовательный алгоритм	Параллельный алгоритм						
		2 процессора		4 процессора		8 процессоров		
		Время	Ускорение	Время	Ускорение	Время	Ускорение	
500	0,5	0,4634	1,0787	0,4706	1,0623	1,3020	0,3840	
1000	8,14	3,9207	2,0761	3,6354	2,2390	3,5092	2,3195	
1500	31,391	17,9505	1,7487	14,4102	2,1783	20,2001	1,5539	
2000	92,36	51,3204	1,7996	40,7451	2,2667	37,9319	2,4348	
2500	170,549	125,3005	1,3611	85,0761	2,0046	87,2626	1,9544	
3000	363,476	223,3364	1,6274	146,1308	2,4873	134,1359	2,7097	





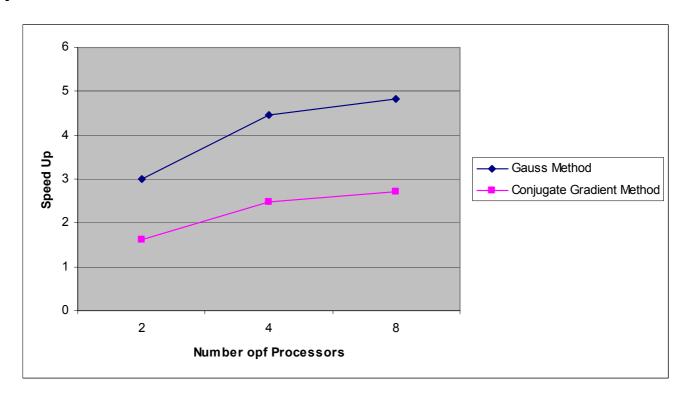
Заключение

- □ Рассмотрены два параллельных алгоритма решения систем линейных уравнений:
 - Метод Гаусса,
 - Метод сопряженных градиентов
- Представлена программная реализация метода Гаусса
- □ Теоретические оценки и результаты экспериментов показывают большую эффективность метода сопряженных градиентов



Заключение

 □ Ускорение параллельных алгоритмов решения системы линейных уравнений с размером матрицы 3000×3000





Вопросы для обсуждения

- Оцените, на каком этапе метода Гаусса (прямой и обратный ход) происходит большее снижение показателей эффективности.
- В чем причина столь низких показателей ускорения и эффективности параллельного алгоритма Гаусса?
- Существуют ли способ улучшения этих показателей?
- Какой из рассмотренных алгоритмов обладает большей вычислительной сложностью?
- □ В чем состоит основное преимущество итерационных методов решения систем линейных уравнений?



Темы заданий для самостоятельной работы

- Выполните разработку параллельного варианта метода Гаусса при вертикальном разбиении матрицы по столбцам
- □ Выполните разработку параллельных вариантов методов Якоби и Зейделя решения систем линейных уравнений
- □ Постройте теоретические оценки времени работы этих алгоритмов с учетом параметров используемой вычислительной системы. Проведите вычислительные эксперименты и сравните полученные результаты с ранее полученными теоретическими оценками

Литература

- Bertsekas, D.P., Tsitsiklis, J.N. (1989). Parallel and distributed Computation. Numerical Methods. - Prentice Hall, Englewood Cliffs, New Jersey.
- □ Kumar V., Grama, A., Gupta, A., Karypis, G. (1994). Introduction to Parallel Computing. - The Benjamin/Cummings Publishing Company, Inc. (2nd edn., 2003)
- □ Quinn, M. J. (2004). Parallel Programming in C with MPI and OpenMP. New York, NY: McGraw-Hill.
- □ Бахвалов Н.С., Жидков Н.П., Кобельков Г.М (1987) Численные методы. М.: Наука.
- □ Самарский А.А., Гулин А.В. (1989). Численные методы М.: Наука.



Следующая тема

□ Параллельные методы сортировки



Авторский коллектив

Гергель В.П., профессор, д.т.н., руководитель

Гришагин В.А., доцент, к.ф.м.н.

Абросимова О.Н., ассистент (раздел 10)

Лабутин Д.Ю., ассистент (система ПараЛаб)

Курылев А.Л., ассистент (лабораторные работы 4, 5)

Сысоев А.В., ассистент (раздел 1)

Гергель А.В., аспирант (раздел 12, лабораторная работа 6)

Лабутина А.А., аспирант (разделы 7,8,9, лабораторные работы 1, 2, 3, система ПараЛаб)

Сенин А.В., аспирант (раздел 11, лабораторные работы по Microsoft Compute Cluster)

Ливерко С.В. (система ПараЛаб)



О проекте



Целью образовательного проекта является создание комплекса "Многопроцессорные вычислительные системы и параллельное программирование", обеспечивающий рассмотрение вопросов параллельных вычислений, предусматриваемых рекомендациями Computing Curricula 2001 Международных организаций IEEE-CS и ACM. Данный образовательный комплекс может быть использован для обучения на начальном этапе подготовки специалистов в области информатики, вычислительной техники и информационных технологий.

Образовательный комплекс включает учебный курс "Введение в методы параллельного программирования" и лабораторный практикум "Методы и технологии разработки параллельных программ", что позволяет органично сочетать фундаментальное образование в области программирования и практическое обучение методам разработки масштабного программного обеспечения для решения сложных вычислительно-трудоемких задач на высокопроизводительных вычислительных системах.

Проект выполнялся в Нижегородском государственном университете им. Н.И. Лобачевского на кафедре математического обеспечения ЭВМ факультета вычислительной математики и кибернетики (http://www.software.unn.ac.ru). Выполнение проекта осуществлялось при поддержке компании Microsoft.